

Zur Geometrie von Phasonen und Versetzungen in Quasikristallen und ihren Approximanten

Diplomarbeit von
Michael Engel

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

Mitberichter: apl. Prof. Dr. W. Kimmerle
Institut für Geometrie und Topologie
Universität Stuttgart

April 2004

Ich erkläre, dass ich die Arbeit selbständig und nur mit den angegebenen Hilfsmitteln angefertigt habe und dass alle Stellen, die dem Wortlaut oder dem Sinne nach anderen Werken entnommen sind, durch Angabe der Quellen als Entlehnungen kenntlich gemacht worden sind.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Kristallographie	5
1.1 Kristalle und ihre Symmetrien	5
1.2 Die kristallographische Einschränkung	8
1.3 Beugungsbilder	9
1.4 Definition von Quasikristallen	12
2 Konstruktion von Quasikristallen	17
2.1 Atomflächen und Streifenprojektionen	17
2.2 Gridformalismus	21
2.3 Die Fibonacci-Kette	22
2.4 Zweidimensionale Quasikristalle	24
2.5 Dreidimensionale Quasikristalle	25
2.6 Selbstähnlichkeit	27
3 Phasonen und Approximanten	31
3.1 Lokale Ununterscheidbarkeit	31
3.2 Freiheitsgrade	34
3.3 Theorie der Approximanten	34
3.4 Atombereiche	36
3.5 Approximanten ikosaedrischer Quasikristalle	38
3.5.1 Approximanten (i)-ter Art	40
3.5.2 Approximanten (ii)-ter Art	42
3.5.3 Zehnzählige Symmetrie und Summengitter	43
4 Al-Pd-Mn-Quasikristalle und deren Approximanten	45
4.1 Phasendiagramm	45
4.2 Die ikosaedrische Phase	46
4.3 Dekagonale Phasen	51

4.3.1	Die 1.6 nm dekagonale Phase	51
4.3.2	Die 1.2 nm dekagonale Phase	53
4.3.3	Quasiperiodische Phasen der binären Systeme	54
4.4	Periodische Phasen	54
4.4.1	Approximanten des 1.6 nm dekagonalen Quasikristalls	57
4.4.2	Approximanten des 1.2 nm dekagonalen Quasikristalls	58
5	Elastizitätstheorie und Versetzungen	65
5.1	Klassische Elastizitätstheorie	66
5.2	Erweiterung für Quasikristalle	67
5.3	Topologische Defekte	69
5.4	Versetzungen in Kristallen	70
5.5	Versetzungen in Quasikristallen/Approximanten	73
5.6	Versetzungsbewegung, Plastizität	75
5.7	Versetzungsreaktionen	77
6	Die ξ-, ξ'- und ξ'_n-Phasen	79
6.1	Phasendefekte	80
6.2	Modellierung der ξ -, ξ' - und ξ'_n -Phasen	80
6.3	Phasengrenzen	85
6.4	Phasonische Freiheitsgrade	87
6.5	Symmetrieäquivalente Schnittebenen	92
7	Metaversetzungen	93
7.1	Metaversetzungen im 3D-Modellsystem	93
7.1.1	Metaversetzungen in den ξ'_n -Phasen	93
7.1.2	Metaversetzungen in der ξ - und der ξ' -Phase	97
7.2	Bewegung der Metaversetzungen	101
7.3	Versetzungsreaktionen	101
7.4	Metaversetzungen im 5D-Modellsystem	103
7.5	Andere Versetzungen	106
7.6	Interpretation der Ergebnisse	109
	Zusammenfassung und Ausblick	111
A	Beispiele für ortsabhängige Verschiebungsfelder	113
B	Darstellungen der Ikosaedergruppe	119
C	Approximierende Brüche von τ	121

D	Berechnung von Tilings mit Versetzungen	123
D.1	Erweiterter Gridformalismus	123
D.2	Iterative Berechnung	125
E	Mathematische Ergänzungen zur Ikosaedergruppe	127
E.1	Operation einer Gruppe auf einer Menge	128
E.2	Endliche Untergruppen von $SO(3)$	130
E.3	Darstellungen der Ikosaedergruppe	135
E.4	Die Zassenhausvermutungen	140
E.5	Zassenhausvermutungen für die Ikosaedergruppe	142
F	Symbolverzeichnis	145
	Literaturverzeichnis	147

Einleitung

Seit der ersten experimentell beobachteten Beugung von Röntgenstrahlen durch Max von Laue im Jahre 1912 [34] ist bekannt, dass Kristalle aus der periodischen Anordnung identischer Bausteine, Elementarzellen genannt, aufgebaut sind. Die Elementarzellen der zu Beginn des 20. Jahrhunderts untersuchten Kristalle bestanden meist aus wenigen Atomen. Aber schon 1923 berichtete Pauling von der Entdeckung einer NaCd_2 -Legierung, deren Beugungsbild so kompliziert war, dass es für ihn damals unmöglich war, den zugrundeliegenden Aufbau zu bestimmen [69]. Dies gelang erst dreißig Jahre später, als er nachwies, dass die Elementarzelle 1152 Atome enthält [70].

Nachdem der Aufbau einiger weiterer komplexer Legierungen gelöst worden war, zeigte sich überraschenderweise, dass viele davon ähnliche lokale Atomanordnungen aufweisen. Frank und Kasper argumentierten, dass komplexe Legierungen als Anordnung von dicht gepackten polyedrischen Atomclustern aufgefasst werden können [33]. Bei den Clustern besonders häufig vertreten und energetisch günstig sind demnach lokale ikosaedrische Ordnungen. Den Autoren war allerdings bewusst, dass die globale ikosaedrische Ordnung mit einem periodischen Aufbau nicht vereinbart werden kann.

Im Laufe der Jahre nahm das Interesse an komplexen Legierungen ab, da es noch genügend offene Fragen bei einfacheren Materialien gab. Erst durch die Entdeckung einer neuartigen Al-Mn-Legierung durch Shechtman und seine Mitarbeiter im Jahre 1982 [78] angespornt, begann erneut eine große Zahl Wissenschaftler sich mit komplexen Legierungen zu beschäftigen. Shechtman konnte beobachten, dass die Al-Mn-Legierung ein diskretes Beugungsbild mit ikosaedrischer Symmetrie besitzt (Abbildung 1). Aufgrund der Diskretheit des Beugungsbildes muss sie langreichweitig geordnet sein, wie sich auch durch die äußere Gestalt ihrer gezüchteten Einkristalle zeigt (Abbildung 2). Wegen der Ikosaedersymmetrie konnte es sich aber nicht um einen Kristall handeln. Die neue Legierung wurde Quasikristall genannt. Quasikristalle besitzen die von Frank und Kasper beschriebene ikosaedrische Ordnung, allerdings auf Kosten der Periodizität.

In der Mathematik war schon vorher bekannt, dass auch nichtperiodische Atomanordnungen oder Tilings zu diskreten Beugungsbildern führen können. Penrose hatte 1974 ein einfaches solches quasiperiodisches Tiling beschrieben. Allerdings wurde zu dieser Zeit nicht vermutet, quasiperiodische Ordnungen in realen Materialien vorzufinden. Aufgrund der

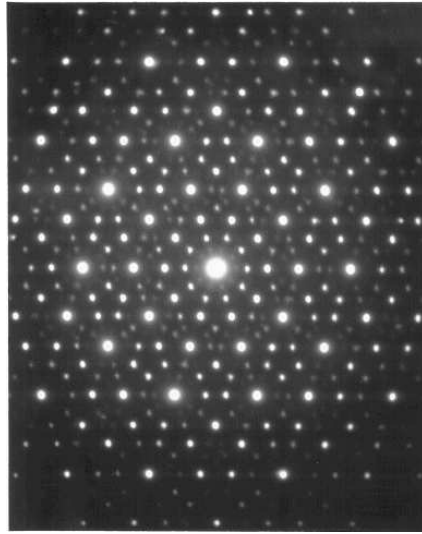


Abbildung 1: Beugungsbild eines ikosaedrischen Quasikristalls entlang einer fünfzähligen Achse [46]. Fünfzählige Symmetrieelemente kann es in Kristallen nicht geben.

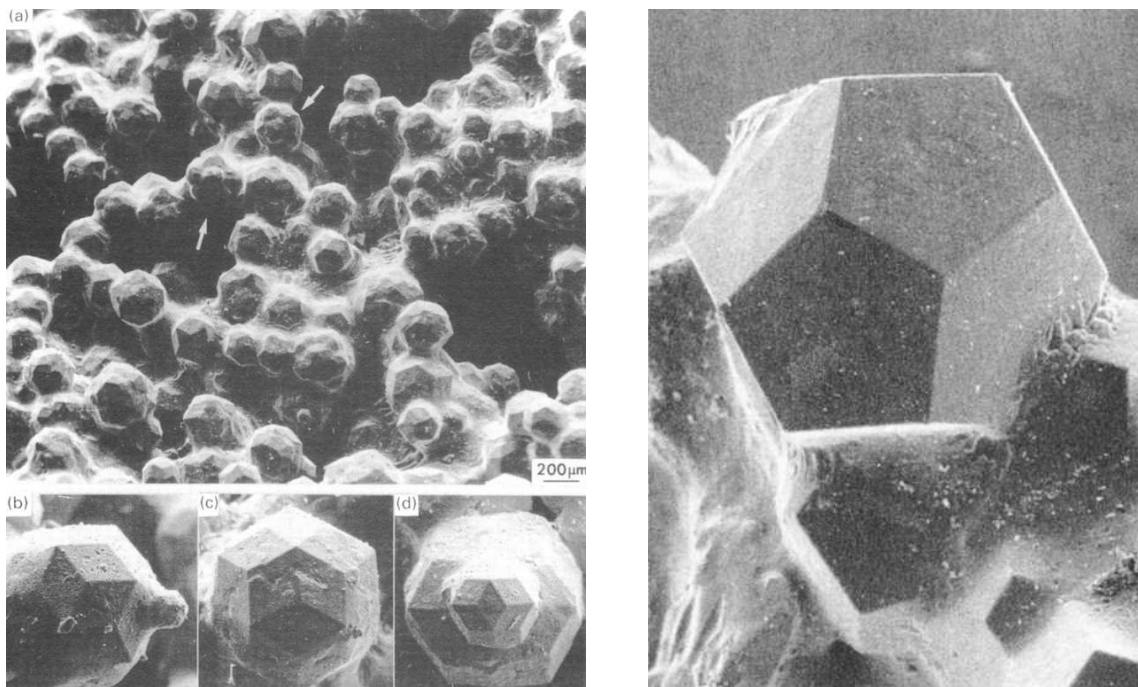


Abbildung 2: Gezüchtete kleine triakontaedrische AlLiCu-Einkristalle (links). Größerer AlCuFe-Kristall mit der Form eines Dodekaeders (rechts) [46]. Beide besitzen Ikosaedersymmetrie.

mathematischen Vorarbeit war es recht schnell möglich eine theoretische Beschreibung von Quasikristallen aufzustellen. Dabei wird der Quasikristall als Schnitt durch einen höherdimensionalen ($d > 3$) Kristall angesehen und die Quasiperiodizität als eine Verallgemeinerung der Periodizität. Folglich besitzen Quasikristalle zusätzliche, bei Kristallen nicht vorhandenen Eigenschaften.

So haben Quasikristalle phasonische Freiheitsgrade, deren elementare Anregungen als Phasonen bezeichnet werden, in Analogie zu den Phononen, die Anregungen der phononischen Freiheitsgrade entsprechen. Phasonische Freiheitsgrade sind Konfigurationsfreiheitsgrade, bei deren Anregung Umordnungen der Atome durch ihren Wechsel auf alternative Positionen stattfinden. Der phasonische Freiheitsgrad hat auch Auswirkungen auf die mechanischen Eigenschaften von Quasikristallen. Wie in Kristallen erfolgt plastische Verformung durch die Bewegung von linienförmigen Kristalldefekten, den Versetzungen, die in Quasikristallen jedoch zusätzlich eine phasonische Komponente haben.

Durch spezielle Anregungen der phasonischen Freiheitsgrade kann die Atomordnung quasiperiodisch mit anderer Symmetrie oder periodisch werden. Solche neuen Quasikristallen oder Kristalle werden Approximanten (des ursprünglichen Quasikristalls) genannt. Es stellte sich heraus, dass einige der zuvor entdeckten komplexen Legierungen periodische Approximanten von damals noch nicht entdeckten Quasikristallen waren. Die strukturelle Verwandtschaft zwischen beiden überträgt sich auf ihre physikalischen Eigenschaften.

Diese Arbeit zeigt, dass auch in periodischen Approximanten unter bestimmten Umständen phasonische Freiheitsgrade anregbar sein können und Versetzungen mit phasonischen Komponenten existieren. Am Beispiel einiger Approximanten des Al-Pd-Mn-Systems wird der phasonische Freiheitsgrad und seine Auswirkung auf Versetzungen untersucht. Das Ziel ist eine theoretische, mathematisch orientierte Beschreibung. Besonderer Wert wird dabei in den Kapiteln 1, 2, 3 und 5 auf eine ausführliche und in sich konsistente Darstellung des theoretischen Hintergrunds gelegt. Die experimentellen Grundlagen der Arbeit bilden hochaufgelöste Elektronenmikroskopaufnahmen. Die Gliederung erfolgt in sieben Kapitel:

- (i) Im ersten Kapitel werden Begriffe der klassischen Kristallographie eingeführt, und es wird gezeigt, wie sich diese auf Quasikristalle anwenden lassen. Eine mögliche Definition des Begriffs Quasikristall mit Hilfe des Beugungsbildes wird vorgestellt. Zur Beschreibung werden höherdimensionale Hyperräume verwendet.
- (ii) Das zweite Kapitel behandelt Konstruktionsverfahren von Quasikristallen im Hyperraum. Verschiedene Formalismen werden beschrieben und auf einfache ein-, zwei- und dreidimensionale Quasikristalle angewandt.
- (iii) Welche Folgerungen sich aus den phasonischen Freiheitsgraden ergeben, wird in Kapitel drei dargestellt. Durch spezielle Anregungen können aus Quasikristallen Approximanten entstehen.

- (iv) In Kapitel vier wird ein Überblick über das Al-Pd-Mn-System gegeben, in dem verschiedene Quasikristalle und eine Vielzahl von Approximanten vorkommen. Auf einfache Strukturmodelle aus der Literatur und ihre Beschreibung im Hyperraum wird eingegangen.
- (v) Die klassische Elastizitätstheorie und ihre Anwendung auf Quasikristalle ermöglicht es in Kapitel fünf, den Begriff der Versetzung zu übertragen. Versetzungseigenschaften in Quasikristallen und Kristallen werden aufgeführt und verglichen. Versetzungen können im Rahmen einer topologischen Defektklassifikation verstanden werden.
- (vi) Die entwickelte Theorie wird in Kapitel sechs auf einige periodische Approximanten des Al-Pd-Mn-Systems angewendet. Aufgrund ihrer guten Beobachtbarkeit unter dem Elektronenmikroskop eignen sich die ξ -, ξ' - und ξ'_n -Phasen zur Untersuchung des phasonischen Freiheitsgrades. Ein besonderes Merkmal der Phasen ist das Auftreten von Phasondefekten.
- (vii) Wie in Kapitel sieben gezeigt wird, verhalten sich die ξ -, ξ' - und ξ'_n -Phasen besonders interessant in Bezug auf Versetzungen. Bei speziellen Versetzungen, den Metaversetzungen treten neue Phänomene auf, die in drei- oder fünfdimensionalen Modell-Hyperräumen erklärt werden.

Kapitel 1

Kristallographie

Kristalle besitzen Symmetrien wie Translationen, Rotationen und Spiegelungen. Durch diese wird ihr physikalisches (mechanisches und elektronisches) Verhalten maßgeblich beeinflusst. Die Kristallographie beschäftigt sich mit der Untersuchung und Klassifikation von Symmetrien. Da viele wichtige Begriffe und Vorstellungen bei der Untersuchung der Struktur und des Aufbaus von Quasikristallen aus der Kristallographie übernommen werden können, bietet das Kapitel einen kurzen Überblick über dieses Gebiet. Zum Abschluss wird mit Hilfe der eingeführten Begriffe eine mögliche Definition von Quasikristallen gegeben, die in dieser Arbeit verwendet wird.

Eine ausführliche mathematische Behandlung kristallographischer Symmetriegruppen und eine tabellarische Auflistung findet sich in [47]. Einen Überblick über die Gruppentheorie, insbesondere die Darstellungstheorie bietet [82]. In [74] werden Charaktertafeln aufgeführt. [77] und [26] behandeln Themen dieses Kapitels im Zusammenhang mit Quasikristallen.

1.1 Kristalle und ihre Symmetrien

Ein Festkörper besteht aus Atomen eines oder mehrerer Elemente, die auf atomaren Zeitskalen relativ zu ihren Nachbaratomen in Ruhe sind (abgesehen von kleinen Schwingungen um die Ruhelage). Im Gegensatz zu Flüssigkeiten und Gasen, in denen sich die Atome frei bewegen können, ändert sich die Struktur eines Festkörpers zeitlich nicht.

Definition 1.1. *Ein Festkörper der Dimension d wird beschrieben durch eine Dichtefunktion $\rho : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$. Die Dichte kann eine Elektronen-, Massen- oder Atomzahldichte sein. Ein (periodischer) Kristall ist ein Festkörper mit periodischer Dichtefunktion.*

In der Literatur gibt es verschiedene Definitionen des Begriffs Kristall. Um Verwirrung zu vermeiden, wird im folgenden unter einem Kristall ein periodischer Kristall verstanden, im Gegensatz zu aperiodischen Kristallen, zu denen komplexere Strukturen wie Quasikristalle

gehören. Die obige Verallgemeinerung auf beliebige Dimensionen d vereinfacht es, später die hier eingeführten Begriffe für komplexe Strukturen zu verwenden.

Aufgrund der Periodizität gibt es Translationen $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^d$, die den Kristall invariant lassen: $\rho(\mathbf{x} + \mathbf{t}) = \rho(\mathbf{x})$. Jede Translation kann als ganzzahlige Linearkombination von Basistranslationen $\mathbf{t}_1, \dots, \mathbf{t}_d$ geschrieben werden. Die Menge aller Translationen $M_T = \{\sum_{n=1}^d \lambda_n \mathbf{t}_n \mid \lambda_n \in \mathbb{Z}\}$ bildet mit der Vektoraddition eine abelsche Gruppe, die Translationsgruppe $T = (M_T, +)$, mit zusätzlich der Skalarmultiplikation einen \mathbb{Z} -Modul, das Gitter $\Gamma = (M_T, +, \cdot)$, als Teilmodul des Vektorraums \mathbb{R}^d .

Definition 1.2. Ein Gitter Γ im \mathbb{R}^d ist ein \mathbb{Z} -Modul, der von d linear unabhängigen Vektoren $\mathbf{t}_1, \dots, \mathbf{t}_d$ erzeugt wird. Die Matrix $B = (\mathbf{t}_1, \dots, \mathbf{t}_d)$, in deren Spalten die Basistranslationen stehen, heißt *Generatormatrix* von Γ .

Der Kristall baut sich aus der periodischen Wiederholung einer Struktureinheit, der Elementarzelle Z auf. In einfachen Kristallen befindet sich in der Elementarzelle nur ein einzelnes Atom, meist sind es jedoch mehrere. Jedes $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ lässt sich eindeutig schreiben als $\mathbf{x} = \mathbf{x}_Z + \mathbf{t}$ mit $\mathbf{x}_Z \in Z$ und $\mathbf{t} \in \Gamma$, und die Dichtefunktion ρ ist eindeutig bestimmt durch die Einschränkung $\rho|_Z$, die Dekoration der Elementarzelle.

Definition 1.3. Ein Polytop Z , dessen um $\mathbf{t} \in T$ verschobene Kopien den ganzen Raum disjunkt überdecken, heißt *Elementarzelle*.

Alle Elementarzellen haben gleiches Volumen. Folgende zwei besitzen besondere Bedeutung:

- (i) Das Parallelepipед, das durch die Basistranslationen aufgespannt wird, heißt primitive Elementarzelle:

$$Z_P = \left\{ \sum_{n=1}^d \lambda_n \mathbf{t}_n \mid 0 \leq \lambda_n < 1 \right\}. \quad (1.1)$$

Diese hängt von der Wahl der Basistranslationen ab.

- (ii) Unabhängig von der Wahl der Basistranslationen ist die Wigner-Seitz- oder Voronoi-Zelle, die gebildet wird von der Menge aller Punkte, die näher an einem ausgezeichneten Gitterpunkt \mathbf{t} liegen als an allen anderen:

$$Z_V(\mathbf{t}) = \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d \mid \forall \mathbf{t}' \in \Gamma \setminus \{\mathbf{t}\} : \|\mathbf{x} - \mathbf{t}\| \underset{(\text{=})}{<} \|\mathbf{x} - \mathbf{t}'\| \right\}. \quad (1.2)$$

Damit Kopien von Z_V den Raum disjunkt überdecken, muss von zwei gegenüberliegenden Randflächen genau eine zur Voronoi-Zelle gehören.

Operationen, die das Gitter oder den Kristall invariant lassen, heißen Symmetrioperationen und die zugehörigen Gruppen Symmetriegruppen. Die vollständige Symmetriegruppe des Gitters beziehungsweise des Kristalls heißt Raumgruppe. Punktgruppen bestehen

aus Symmetrieoperationen, die den Ursprung invariant lassen (Drehungen, Spiegelungen, Inversion und Kombinationen davon). Die Elemente einer Punktgruppe müssen längenerhaltend sein, sind also Isometrien, und können durch orthogonale Matrizen beschrieben werden. Punktgruppen sind endliche Untergruppen der orthogonalen Gruppe $O(d)$. Die Ordnung eines Elements $S \neq 1$ einer Punktgruppe heißt seine Zähligkeit.

Eine beliebige Symmetrieoperation kann zerlegt werden in einen Anteil, der den Ursprung fest lässt, und eine Verschiebung. Sie ist daher zusammengesetzt aus einer orthogonalen Matrix S und einer Translation \mathbf{t} aus $T(d) \cong \mathbb{R}^d$, der Gruppe aller Translationen. Schreibweise: $\{S, \mathbf{t}\}$. Die Wirkung auf einen Vektor \mathbf{x} und die Dichtefunktion ρ ist definiert über:

$$\begin{aligned} \{S, \mathbf{t}\}\mathbf{x} &= S\mathbf{x} + \mathbf{t}, \\ \{S, \mathbf{t}\}\rho(\mathbf{x}) &= \rho(\{S, \mathbf{t}\}\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (1.3)$$

Das Produkt zweier Symmetrieoperationen $\{S_1, \mathbf{t}_1\}$ und $\{S_2, \mathbf{t}_2\}$ ist gegeben durch die Hintereinanderausführung $(\{S_1, \mathbf{t}_1\}\{S_2, \mathbf{t}_2\})\mathbf{x} = \{S_1, \mathbf{t}_1\}(\{S_2, \mathbf{t}_2\}\mathbf{x}) = S_1S_2\mathbf{x} + S_1\mathbf{t}_2 + \mathbf{t}_1$. Es gilt:

$$\begin{aligned} \{S_1, \mathbf{t}_1\}\{S_2, \mathbf{t}_2\} &= \{S_1S_2, S_1\mathbf{t}_2 + \mathbf{t}_1\}, \\ \{S, \mathbf{t}\}\{1, \mathbf{0}\} &= \{S, \mathbf{t}\}, \\ \{S, \mathbf{t}\}^{-1} &= \{S^{-1}, -S^{-1}\mathbf{t}\}. \end{aligned} \quad (1.4)$$

Dieses Produkt ist ein semi-direktes Produkt (\rtimes) im Gegensatz zum direkten Produkt, das komponentenweise definiert ist. Symmetrieoperationen sind somit Elemente der euklidischen Gruppe $E(d) = T(d) \rtimes O(d) = \{\{S, \mathbf{t}\} \mid S \in T(d) \wedge \mathbf{t} \in O(d)\}$. Raumgruppen sind Untergruppen der euklidischen Gruppe.

Die Translationsgruppe ist eine Symmetriegruppe sowohl des Gitters, als auch des Kristalls. Die Punktgruppe des Gitters besteht aus denjenigen Symmetrieoperationen, die sowohl das Gitter als auch den Ursprung invariant lassen, und wird mit P_Γ bezeichnet. Im Fall des Gitters hat die Raumgruppe eine einfache Gestalt:

Satz 1.4. *Die Raumgruppe des Gitters R_Γ ist das semi-direkte Produkt der Translationsgruppe mit der Punktgruppe $R_\Gamma = T \rtimes P_\Gamma$.*

Die Symmetrie des Gitters ist vollständig durch die Gestalt der Elementarzelle bestimmt, diejenige des Kristalls allerdings zusätzlich durch ihre Dekoration $\rho|_Z$. Durch die Dekoration können bestehende Symmetrieoperationen verloren gehen. Die Raumgruppe des Kristalls R_ρ hat im Allgemeinen keine so einfache Gestalt wie diejenige des Gitters. Sie kann nur in speziellen Fällen als semi-direktes Produkt geschrieben werden und heißt dann symmorph. So ist es möglich, dass $\{S, \mathbf{t}\}$ zwar in R_ρ enthalten ist, aber weder $\{1, \mathbf{t}\}$ noch $\{S, \mathbf{0}\}$. Die Gruppe $P_\rho = \{S \mid \{S, \mathbf{t}\} \in R_\rho\}$ bezeichnet man als Punktgruppe des Kristalls. Sie ist allerdings nur bei symmorphen Raumgruppen eine Symmetriegruppe des Kristalls.

Es kann gezeigt werden [64], dass eine Operation $S \in P_\rho$, die den Kristall invariant lässt, auch das Gitter invariant lässt und daher in P_Γ liegt. Daraus folgt $P_\rho \leq P_\Gamma$.

1.2 Die kristallographische Einschränkung

Verwendet man als Basis des \mathbb{R}^d die Basistranslationen, so ist $S \in P_\rho$ eine $d \times d$ -Matrix mit Einträgen aus \mathbb{Z} , da durch S Vektoren in \mathbb{Z}^d auf ebensolche abgebildet werden. Die Punktgruppe P_ρ ist daher eine d -dimensionale \mathbb{Z} -Darstellung einer abstrakten Gruppe. Diese kann so gewählt werden, dass die Darstellung treu ist. Umgekehrt kann jede \mathbb{Z} -Darstellung als Punktgruppe eines Kristalls auftauchen. Die möglichen Punktgruppen kann man durch die Bestimmung aller treuen \mathbb{Z} -Darstellungen klassifizieren.

Definition 1.5. *Punktgruppen, Kristalle und Raumgruppen werden in unterschiedliche Äquivalenzklassen eingeteilt:*

- (i) *Zwei Punktgruppen gehören zur selben geometrischen Kristallklasse, wenn sie in $GL(d, \mathbb{R})$ konjugiert sind, und zur selben arithmetischen Kristallklasse, wenn sie in $GL(d, \mathbb{Z})$ konjugiert sind.*
- (ii) *Zwei Kristalle gehören zum selben Kristallsystem, wenn ihre Punktgruppen in $O(d)$ konjugiert sind. Sie gehören zur selben Bravais-Klasse, wenn ein $g \in GL(d, \mathbb{R})$ existiert, so dass für ihre Gitter Γ_1, Γ_2 und ihre Punktgruppen $P_{\Gamma_1}, P_{\Gamma_2}$ gilt: $\Gamma_2 = g\Gamma_1$ und $P_{\Gamma_2} = gP_{\Gamma_1}g^{-1}$.*
- (iii) *Zwei Raumgruppen sind äquivalent, wenn sie in $AGL(d, \mathbb{R})$ konjugiert sind, und orientierungserhaltend äquivalent, wenn sie in $ASL(d, \mathbb{R})$ konjugiert sind.*

Wie in [47] gezeigt, gibt es für die Dimension $d = 3$ genau 73 arithmetische Kristallklassen, 32 geometrische Kristallklassen, 14 Bravais-Klassen und 7 Kristallsystemen. Die Zahl der nichtäquivalenten Raumgruppen ist 219, nicht orientierungserhaltend äquivalent sind 230 Raumgruppen. In Tabelle 1.1 sind die geometrische Kristallklassen aufgelistet. Die Bezeichnung der Punktgruppen erfolgt nach der Notation von Schönflies oder der Notation von Hermann-Mauguin für deren Beschreibung auf die Literatur in der Einleitung verwiesen sei.

Nicht alle Untergruppen der $O(3)$ tauchen in der Klassifikation auf, sondern nur diejenigen, die mit periodischen Strukturen verträglich sind. Diese heißen kristallographisch. Die möglichen Isomorphie-Klassen von Untergruppen der $O(3)$ sind C_n, D_n, O, T, Y für $n \in \mathbb{N}$ und die direkten Produkte mit C_2 . Die Gruppen C_n, D_n, Y für $n = 5$ und $n \geq 7$, inklusive direkter Produkte mit C_2 , tauchen nicht in der Klassifikation auf. Dies bestätigt folgende Aussage, die als kristallographische Einschränkung bekannt ist:

Satz 1.6. *Eine dreidimensionale kristallographische Gruppe enthält nur zwei-, drei-, vier- und sechszählige Symmetrien.*

Beweis. Sei $S \in P_\rho$ eine dreidimensionale orthogonale Matrix. Sie ist konjugiert zu einer Drehmatrix, die um den Winkel θ dreht und hat Spur $1 + 2 \cos(\theta)$, da Konjugation die Spur nicht ändert. Damit die Matrix mit einer Translationsgruppe verträglich ist, besitzt sie bei geeigneter Basiswahl Matrix Einträge aus \mathbb{Z} (P_ρ ist eine \mathbb{Z} -Darstellung). Es muss gelten: $2 \cos(\theta) \in \mathbb{Z}$ oder $\cos(\theta) \in \{0, \pm \frac{1}{2}, \pm 1\}$. Das ist im Intervall $0 \leq \theta < 2\pi$ nur möglich für $\theta \in \{0, \frac{1}{6}\pi, \frac{1}{4}\pi, \frac{1}{3}\pi, \frac{1}{2}\pi, \frac{2}{3}\pi, \frac{3}{4}\pi, \frac{5}{6}\pi\}$. \square

Zur Verallgemeinerung der Aussage auf höherdimensionale Punktgruppen ($d > 3$) benötigt man die Eulersche ϕ -Funktion $\phi(n) = |\{k \mid 1 \leq k < n, \text{ggT}(k, n) = 1\}|$.

Satz 1.7. *Die minimale Dimension, für die $GL(d, \mathbb{Z})$ ein Element der Ordnung n mit Primfaktorzerlegung $n = p_1^{\alpha_1} \cdots p_r^{\alpha_r}$ enthält (minimale Einbettungsdimension), ist gleich der additiven Eulerschen Funktion (Tabelle 1.2):*

$$\Phi(n) = \sum_{p_i^{\alpha_i} \neq 2} \phi(p_i^{\alpha_i}). \quad (1.5)$$

Der Satz wird in [39] und [76] bewiesen. Eine direkte Folgerung daraus ist: Sei n die Ordnung eines Elements der Punktgruppen eines d -dimensionalen Kristalls, dann ist $d \geq \Phi(n)$. Zwei- und dreidimensionale Punktgruppen können nur zwei-, drei-, vier- oder sechszählige Symmetrien aufweisen. Für fünf-, acht-, zehn- und zwölfzählige Symmetrien benötigt man $d \geq 4$. Achtzählige Symmetrie weist das hyperkubische Gitter \mathbb{Z}^4 auf. Die anderen Symmetrien können durch Wurzelgitter realisiert werden. Das Wurzelgitter A_4 hat zehnzählige Symmetrie, das Wurzelgitter D_4 zwölfzählige. Falls man bereit ist, auf die minimale Dimension zu verzichten, kann man eines der hyperkubischen Gitter \mathbb{Z}^5 oder \mathbb{Z}^6 verwenden. Wurzelgitter treten unter anderem bei der Klassifikation halbeinfacher Lie-Algebren auf. Sie sind gewissermaßen die einfachste Verallgemeinerung von hyperkubischen Gittern: Als Winkel zwischen den Gitterbasisvektoren treten nur Vielfache von 60° und 90° auf. Alle Wurzelgitter lassen sich als direkte Summe der folgenden, elementaren Wurzelgitter darstellen: A_n ($n \geq 1$), $B_n = \mathbb{Z}^n$ ($n \geq 2$), D_n ($n \geq 4$) sowie E_6 , E_7 und E_8 [19], [43].

1.3 Beugungsbilder

Zu den wichtigsten Methoden zur Strukturbestimmung von Festkörpern gehören Beugungsexperimente. Dabei wird der Festkörper im Ortsraum \mathbb{R}^d mit Röntgenstrahlen oder Elektronen bestrahlt, deren Wellenlängen im Bereich atomarer Abstände (ca. 1 \AA) liegen. Eine einlaufende Welle ist eine ebene Welle mit Wellenvektor \mathbf{k}_1 . Sie wird am Festkörper gestreut, von jedem Punkt \mathbf{x} gehen Elementarwellen (Kugelwellen) mit Wellenvektor \mathbf{k}_2 aus,

Kristallsystem	Hermann-Maugin	Schönflies	Isomorphie-Klasse
triklin	1	C_1	$\{1\}$
	$\bar{1}$	$C_i = S_2$	C_2
monoklin	2	C_2	C_2
	m	$C_s = C_{1h}$	C_2
	$2/m$	C_{2h}	D_2
rhombisch	222	$D_2 = V$	D_2
	$mm2$	C_{2v}	D_2
	mmm	$D_{2h} = V_h$	$D_2 \times C_2$
trigonal	3	C_3	C_3
	$\bar{3}$	$C_{3i} = S_6$	C_6
	32	D_3	D_3
	$3m$	C_{3v}	D_3
	$\bar{3}m$	D_{3d}	D_6
hexagonal	6	C_6	C_6
	$\bar{6}$	C_{3h}	C_6
	$6/m$	C_{6h}	$C_6 \times C_2$
	62	D_6	D_6
	$6mm$	C_{6v}	D_6
	$\bar{6}m2$	D_{3h}	D_6
	$6/mmm$	D_{6h}	$D_6 \times C_2$
tetragonal	4	C_4	C_4
	$\bar{4}$	S_4	C_4
	$4/m$	C_{4h}	$C_4 \times C_2$
	42	D_4	D_4
	$4mm$	C_{4v}	D_4
	$\bar{4}2m$	$D_{2d} = V_d$	D_4
	$4/mmm$	D_{4h}	$D_4 \times C_2$
kubisch	23	T	T
	$m\bar{3}$	T_h	$T \times C_2$
	$\bar{4}3m$	T_d	O
	432	O	O
	$m\bar{3}m$	O_h	$O \times C_2$

Tabelle 1.1: Die 32 dreidimensionalen geometrischen Kristallklassen, eingeordnet in 7 Kristallsysteme. Die Punktgruppen sind isomorph zu einer der Gruppen C_n , D_n , T , O mit $n \in \{1, 2, 3, 4, 6\}$ oder dem direkten Produkt einer der Gruppen mit C_2 .

n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
$\phi(n)$	0	1	2	2	4	2	6	4	6	4	10	4	12	6	8	8	16	6	18	8
$\Phi(n)$	0	1	2	2	4	2	6	4	6	4	10	4	12	6	6	8	16	6	18	6

Tabelle 1.2: Wertetabelle der Eulerschen ϕ -Funktion und der minimalen Einbettungsdimension $\Phi(n)$. Für $n = 15$ ist zum ersten Mal $\phi(n) \neq \Phi(n)$.

die sich in einer Beobachtungsrichtung überlagern. Die Beobachtungsrichtung ist bestimmt durch die Wellenvektordifferenz $\mathbf{k} = \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1$. Die Phase der auslaufenden Welle ist $e^{-i\langle \mathbf{k}, \mathbf{x} \rangle}$ und ihre Amplitude $\rho(\mathbf{x})$.

Definition 1.8. Bei Beugungsexperimenten wird die Streuintensität $I(\mathbf{k}) = |F(\mathbf{k})|^2$ in Abhängigkeit des Wellenvektors \mathbf{k} gemessen. $I(\mathbf{k})$ wird auch als Beugungsbild bezeichnet. Die Streuamplitude $F(\mathbf{k})$ ist gleich der Fouriertransformierten \mathcal{F} der Dichtefunktion $\rho(\mathbf{x})$:

$$F(\mathbf{k}) = \mathcal{F}\rho(\mathbf{k}) = \int_{\mathbb{R}^d} e^{-2\pi i\langle \mathbf{k}, \mathbf{x} \rangle} \rho(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (1.6)$$

Das Integral konvergiert in der angegebenen Form nicht. Dennoch macht die Definition wie auch die folgenden Sinn, wenn man im Hinterkopf behält, dass weder reale Kristalle noch Röntgen- oder Elektronenwellen unendlich ausgedehnt sind (abgesehen von der Existenz von Kristalldefekten und endlichen Kohärenzlängen). In kritischen Fällen kann man sich die Dichtefunktion auf einem beschränkten Gebiet definiert vorstellen: Es gibt ein $R \subset \mathbb{R}^d$ mit $\rho(\mathbf{x}) = 0$ für $\mathbf{x} > R$. Auftretende Summen und Integrale werden dann bei R abgeschnitten. Eine mathematisch exakte Behandlung ist mit Hilfe von Distributionen und sogenannter Dirac-Kämme möglich (siehe Anhang in [77]).

Die Dichtefunktion erhält man aus der Streuamplitude $\rho(\mathbf{x}) = \mathcal{F}^{-1}F(\mathbf{x})$ durch Rücktransformation. Der Dualraum, der von den Wellenvektoren \mathbf{k} aufgespannt wird, heißt reziproker Raum und hat die gleiche Dimension wie der Ortsraum. Eine Basis $\{\mathbf{t}_1^*, \dots, \mathbf{t}_d^*\}$ kann so gewählt werden, dass gilt $\langle \mathbf{t}_i, \mathbf{t}_j^* \rangle = \delta_{ij}$. Zu einem Gitter im Ortsraum lässt sich ein reziprokes Gitter bilden:

Definition 1.9. Das reziproke Gitter Γ^* von Γ ist der von $\mathbf{t}_1^*, \dots, \mathbf{t}_d^*$ erzeugte \mathbb{Z} -Modul. Ist B die Generatormatrix von Γ , so ist $B^* = (B^{-1})^t$ die Generatormatrix von Γ^* . Es gilt:

$$\Gamma^* = \{\mathbf{t}^* \in \mathbb{R}^d \mid \forall \mathbf{t} \in \Gamma : \langle \mathbf{t}^*, \mathbf{t} \rangle \in \mathbb{Z}\}. \quad (1.7)$$

In einem Kristall kann gemäß Definition 1.3 jedes \mathbf{x} zerlegt werden in einen Gittervektor und einen Vektor der Elementarzelle:

$$F(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{t} \in \Gamma} \int_Z e^{-2\pi i\langle \mathbf{k}, \mathbf{x} + \mathbf{t} \rangle} \rho(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \sum_{\mathbf{t} \in \Gamma} e^{-2\pi i\langle \mathbf{k}, \mathbf{t} \rangle} \int_Z e^{-2\pi i\langle \mathbf{k}, \mathbf{x} \rangle} \rho(\mathbf{x}) d\mathbf{x}. \quad (1.8)$$

Die Summe über die Exponentialfunktionen approximiert die Delta-Funktion. Sie strebt gegen unendlich für $\mathbf{k} \in \Gamma^*$ und ist sonst Null. In realen Kristalle verhält sich die Summe proportional zur Anzahl der Elementarzellen im Kristall. Aus der Translationssymmetrie folgt somit:

Satz 1.10. *Das Beugungsbild eines Kristalls ist diskret. Die Streuamplitude ist nur für Vektoren des reziproken Gitters ungleich Null:*

$$F(\mathbf{k}) \sim \begin{cases} \int_Z e^{-2\pi i \langle \mathbf{k}, \mathbf{x} \rangle} \rho(\mathbf{x}) d\mathbf{x} & \text{für } \mathbf{k} \in \Gamma^*, \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases} \quad (1.9)$$

und der Träger ist $\text{supp}(F) \subseteq \Gamma^*$. Umgekehrt gilt: Ist das Beugungsbild eines Festkörpers nur auf einem Gitter ungleich Null, so handelt es sich bei diesem Festkörper um einen Kristall.

Als nächstes soll die Punktgruppe P_L des Beugungsbilds, die sogenannten Lauegruppe, untersucht werden. Da die Fouriertransformation mit einer orthogonalen Matrix S vertauscht (beachte $S^t = S^{-1}$, also $\langle \mathbf{k}, S\mathbf{x} \rangle = \langle S^{-1}\mathbf{k}, \mathbf{x} \rangle$):

$$\begin{aligned} (S \circ \mathcal{F})F(\mathbf{x}) &= \int_{\mathbb{R}^d} e^{-2\pi i \langle \mathbf{k}, S\mathbf{x} \rangle} F(\mathbf{k}) d\mathbf{k} \\ &= \int_{S^{-1}\mathbb{R}^d} e^{-2\pi i \langle \mathbf{k}, \mathbf{x} \rangle} F(S\mathbf{k}) d\mathbf{k} = (\mathcal{F} \circ S)F(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (1.10)$$

ist eine Punktsymmetrieoperation von F ebenso eine von ρ und umgekehrt. Das bedeutet ρ und F haben dieselbe Punktgruppe P_ρ . Das Beugungsbild $I(\mathbf{k}) = |F(\mathbf{k})|^2 = \mathcal{F}(\rho(\mathbf{k}) * \rho(-\mathbf{k}))$ ist jedoch immer (zusätzlich) invariant unter der Inversion.

Satz 1.11. *Enthält P_ρ die Inversion, so ist die Lauegruppe gleich der Punktgruppe des Kristalls, $P_L = P_\rho$. Sonst ist sie gleich dem direkten Produkt der Punktgruppe mit der zweielementigen Inversionsgruppe C_i , also $P_L = P_\rho \times C_i$. Es gilt folgende Untergruppenrelation:*

$$P_\rho \leq P_L \leq P_\Gamma. \quad (1.11)$$

Aus dem experimentell zugänglichen Beugungsbild lässt sich so über das reziproke Gitter das Gitter im Ortsraum und die Symmetrie des Kristalls (bis auf Inversion) bestimmen. Als Beispiel ist ein zweidimensionaler Kristall in Abbildung 1.1 dargestellt.

1.4 Definition von Quasikristallen

Die Definition von nichtperiodischen Festkörperstrukturen, speziell von Quasikristallen, wird leider in der Literatur nicht einheitlich gehandhabt. Diese Arbeit orientiert sich hierbei an den Vorschlägen in [63] und [48]. Die Idee ist, eine Verallgemeinerung des Begriffs

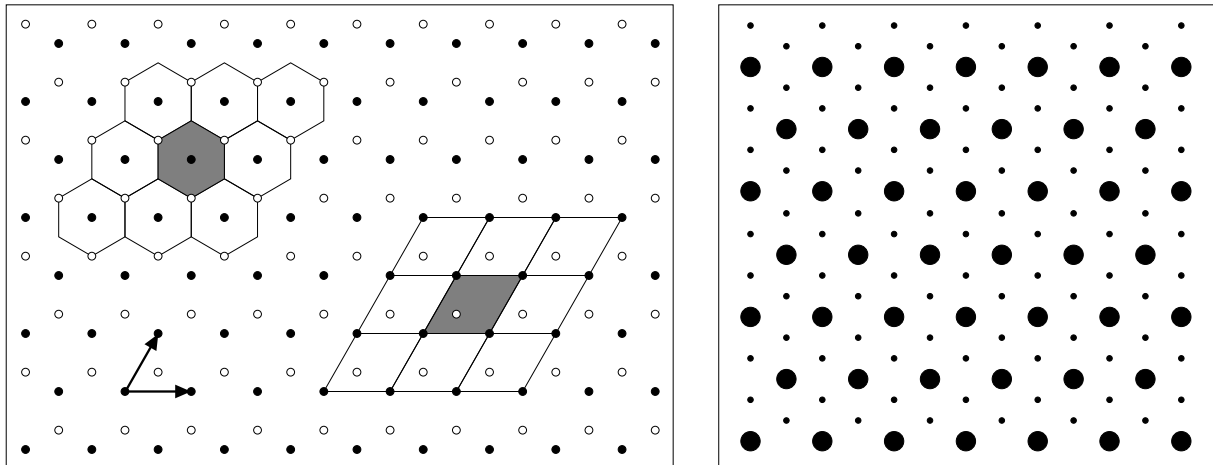


Abbildung 1.1: Zweidimensionaler Kristall mit zwei Atomsorten (links). Eingezeichnet sind die Basistranslationen \mathbf{t}_1 und \mathbf{t}_2 und zwei Elementarzellen: die Wigner-Seitz-Zelle, sowie die primitive Elementarzelle. Das Gitter hat die Symmetrie D_{6h} , der Kristall nur D_{3h} , da die Dekoration der Elementarzelle die Symmetrie bricht. Das Beugungsbild (rechts) hat dieselbe Symmetrie wie das Gitter. Der Radius des Beugungsscheiben entspricht ihrer Intensität.

periodisch mit Hilfe der Beugungsfunktion vorzunehmen. Wie im vorherigen Abschnitt gezeigt, besitzen periodische Kristalle ein Beugungsbild, das aus räumlich klar getrennten Peaks, den Bragg-Peaks, besteht. Dagegen haben amorphe Festkörper ein stetiges Beugungsbild. Das Beugungsbild eines Quasikristalls liegt zwischen demjenigen des Kristalls und dem des amorphen Festkörpers: Das Beugungsbild besteht aus Peaks, die allerdings dicht liegen. Allgemein kann man eine Dichtefunktion anhand ihrer Fouriertransformierten charakterisieren:

Definition 1.12. Sei $\rho : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ eine Dichtefunktion und $\text{supp}(\mathcal{F}\rho)$ abzählbar. Das \mathbb{Z} -Erzeugnis von $\text{supp}(\mathcal{F}\rho)$ ist der Fouriermodul von ρ . Dieser enthalte eine \mathbb{R} -Basis von \mathbb{R}^d . Dann heißt ρ fast-periodisch. Weiterhin gilt:

- (i) Hat der Fouriermodul die Dimension d , so heißt ρ periodisch, ansonsten aperiodisch.
- (ii) Hat der Fouriermodul eine endliche Dimension größer d , so heißt ρ quasiperiodisch.

Die Abzählbarkeit des Fouriermoduls garantiert scharfe Peaks im Beugungsbild. Das \mathbb{Z} -Erzeugnis wird benötigt, da sich einzelne Reflexe auslöschen können. Das ist zum Beispiel bei Kristallen der Fall, wenn $\int_{\mathbb{Z}} e^{-2\pi i \langle \mathbf{k}, \mathbf{x} \rangle} \rho(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 0$ für $\mathbf{k} \in \Gamma^*$. Enthält der Fouriermodul keine \mathbb{R} -Basis, so liegen die Peaks im Beugungsbild in einem Unterraum, und ρ ist in der Richtung senkrecht zum Unterraum konstant. Solche Fälle werden ausgeschlossen.

Definition 1.13. Ein Festkörper mit Dichtefunktion ρ ist ein (periodischer) Kristall, wenn ρ periodisch ist, und ein Quasikristall, wenn ρ quasiperiodisch ist.

Will man Quasikristalle im Ortsraum konstruieren, dann ist die Beschreibung über den Fouriermodul ungeschickt. Viel wichtiger ist es zu wissen, wie Dichtefunktionen von Quasikristallen konkret aussehen. Dazu wird nun gezeigt, dass eine quasiperiodische Dichtefunktion als ein Schnitt einer höherdimensionalen periodischen Dichtefunktion angesehen werden kann. Zuerst benötigt man:

Satz 1.14. Betrachte eine Funktion $\rho : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$. Zerlege $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ in $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ mit $\mathbf{x}_1 \in \mathbb{R}^{d_1}$ und $\mathbf{x}_2 \in \mathbb{R}^{d_2}$, $d = d_1 + d_2$. Der Projektionsoperator \mathcal{P} und der Schnittoperator \mathcal{C} sind definiert als

$$\begin{aligned} \mathcal{P} & : (\mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}) \rightarrow (\mathbb{R}^{d_1} \rightarrow \mathbb{R}) : \rho(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \mapsto \int_{\mathbb{R}^{d_2}} \rho(\mathbf{x}_1, \boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi}, \\ \mathcal{C} & : (\mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}) \rightarrow (\mathbb{R}^{d_1} \rightarrow \mathbb{R}) : \rho(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \mapsto \rho(\mathbf{x}_1, \mathbf{0}). \end{aligned} \quad (1.12)$$

Es gilt $\mathcal{F} \circ \mathcal{P} = \mathcal{C} \circ \mathcal{F}$ und $\mathcal{P} \circ \mathcal{F} = \mathcal{F} \circ \mathcal{C}$. Beachte: Die Fouriertransformation wird in unterschiedlichen Räumen vorgenommen.

Beweis. Direktes Nachrechnen:

$$\begin{aligned} (\mathcal{F} \circ \mathcal{P})\rho(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) & = \int_{\mathbb{R}^{d_1}} e^{-2\pi i \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{k}_1 \rangle} \mathcal{P}\rho(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) d\mathbf{k}_1 \\ & = \int_{\mathbb{R}^d} e^{-2\pi i \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{k}_1 \rangle} \rho(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) d\mathbf{k}_2 d\mathbf{k}_1 = (\mathcal{C} \circ \mathcal{F})\rho(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2). \end{aligned} \quad (1.13)$$

Ersetzt man $-2\pi i$ durch $2\pi i$, dann folgt $\mathcal{F}^{-1} \circ \mathcal{P} = \mathcal{C} \circ \mathcal{F}^{-1}$. Die Anwendung von \mathcal{F} von links und rechts ergibt die zweite Behauptung. \square

Satz 1.15. Sei ρ eine d -dimensionale quasiperiodische Dichtefunktion. Der Fouriermodul habe die Dimension \tilde{d} . Dann gibt es eine \tilde{d} -dimensionale periodische Dichtefunktion $\tilde{\rho}$, so dass ρ ein Schnitt durch $\tilde{\rho}$ ist: $\rho(\mathbf{x}) = \tilde{\rho}(\mathbf{x}, \mathbf{0})$. Der Schnitt ist irrational, mindestens eine Translation des Gitters von $\tilde{\rho}$ hat bezüglich der Schnittebene $\{(\mathbf{x}, \mathbf{0}) \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d\}$ eine irrationale Steigung. Umgekehrt erzeugt jeder irrationale Schnitt eine quasiperiodische Dichtefunktion.

Beweis. Die Menge $\{\mathbf{m}_1, \dots, \mathbf{m}_{\tilde{d}}\}$ bilde eine Basis des Fouriermoduls. Wähle die $(\tilde{d} - d)$ -dimensionalen Vektoren \mathbf{m}'_i so, dass die Vektoren $\tilde{\mathbf{m}}_i = (\mathbf{m}_i, \mathbf{m}'_i)$ ein \tilde{d} -dimensionales Gitter $\tilde{\Gamma}^*$ aufspannen. Jedes $\tilde{\mathbf{k}} \in \mathbb{R}^{\tilde{d}}$ kann in $(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ mit $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^d$ und $\mathbf{k}' \in \mathbb{R}^{\tilde{d}-d}$ zerlegt werden. Übertrage die Streuamplitude $F = \mathcal{F}\rho$ auf $\mathbb{R}^{\tilde{d}}$, definiere dazu $\tilde{F}(\tilde{\mathbf{k}}) = F(\mathbf{k})$ für $\tilde{\mathbf{k}} \in \tilde{\Gamma}^*$ und 0 sonst. Da durch $\sigma : \mathbf{m}_i \mapsto \tilde{\mathbf{m}}_i$ ein Modul-Isomorphismus bestimmt ist,

besteht für $\mathbf{k} \in M$ die Menge $\{(\mathbf{k}, \boldsymbol{\kappa}) \mid \boldsymbol{\kappa} \in \mathbb{R}^{\tilde{d}-d}\} \cap \tilde{\Gamma}^*$ aus genau einem Punkt, ansonsten ist der Schnitt leer. Somit ist

$$F(\mathbf{k}) = \int_{\mathbb{R}^{\tilde{d}-d}} \tilde{F}(\mathbf{k}, \boldsymbol{\kappa}) d\boldsymbol{\kappa} = \mathcal{P}\tilde{F}(\mathbf{k}). \quad (1.14)$$

Da $\tilde{\Gamma}^*$ ein Gitter ist, muss nach Satz 1.10 $\tilde{\rho} = \mathcal{F}^{-1}\tilde{F}$ periodisch sein. Insgesamt erhält man mit Satz 1.14: $\rho = \mathcal{F}^{-1}F = (\mathcal{F}^{-1} \circ \mathcal{P})\tilde{F} = (\mathcal{C} \circ \mathcal{F}^{-1})\tilde{F} = \mathcal{C}\tilde{\rho}$. Nun zur zweiten Behauptung: Rationale Schnitte periodischer Funktionen sind periodisch. Ist ρ periodisch, dann ist die Dimension des Fouriermoduls gleich d , im Widerspruch zur Voraussetzung. Die Umkehrung erhält man, indem man die Beweiskette rückwärts durchgeht. Die Irrationalität des Schnitts sorgt dafür, dass die Dimension des Fouriermoduls größer d ist. \square

Definition 1.16. *Eine Sammlung nützlicher Begriffe:*

- (i) Die Schnittebene $\{(\mathbf{x}, \mathbf{0}) \mid \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d\}$ wird auch als Parallelraum oder physikalischer Raum E^{\parallel} bezeichnet. Er hat die Dimension $d^{\parallel} = d$.
- (ii) Das Komplement mit Dimension $d^{\perp} = \tilde{d} - d$ heißt Orthogonalraum E^{\perp} .
- (iii) Der Gesamtraum $\mathbb{R}^{\tilde{d}} \cong E^{\parallel} \oplus E^{\perp}$ wird Hyperraum genannt. Vektoren aus dem Hyperraum sind durch eine Tilde gekennzeichnet.
- (iv) Das Gitter der Translationen, die $\tilde{\rho}$ invariant lassen, ist das Hypergitter $\tilde{\Gamma}$.
- (v) $\pi^{\parallel} : E^{\parallel} \oplus E^{\perp} \rightarrow E^{\parallel}$ und $\pi^{\perp} : E^{\parallel} \oplus E^{\perp} \rightarrow E^{\perp}$ seien die Orthogonalprojektion auf den Parallel- beziehungsweise Orthogonalraum.

Ein Quasikristall besitzt aufgrund seiner Nicht-Periodizität im Allgemeinen keine Symmetrien (außer der Identität). Sein Beugungsbild ist dagegen hochsymmetrisch (siehe Abbildung 1 der Einleitung). Sei S ein Element der Punktgruppe des Beugungsbildes (Lauegruppe) P_L . Die Tatsache, dass S keine Symmetrieoperation des Quasikristalls ist, widerspricht nicht Gleichung (1.10). Die unterschiedlichen Quasikristalle $\tilde{\rho}$ und $S\tilde{\rho}$ können dasselbe Beugungsbild besitzen. (Das gilt nicht für Kristalle.) P_L kann jedoch auch bei Quasikristallen aus $P_{\tilde{\rho}}$ berechnet werden. Die Symmetrieoperationen, die die Schnittebene E^{\parallel} invariant lassen, bilden eine Untergruppe. Bezeichne für eine solche Symmetrieoperation die Einschränkung auf E^{\parallel} mit $S_{\parallel} = S|_{E^{\parallel}}$. Die Menge dieser Elemente bildet die (verallgemeinerte) Punktsymmetriegruppe des Quasikristalls: $P_{\tilde{\rho}}^{\parallel} = \{S_{\parallel} \mid S \in P_{\tilde{\rho}} \text{ und } SE^{\parallel} = E^{\parallel}\}$.

Satz 1.17. *Enthält $P_{\tilde{\rho}}^{\parallel}$ die Inversion, so ist $P_L = P_{\tilde{\rho}}^{\parallel}$, sonst ist $P_L = P_{\tilde{\rho}}^{\parallel} \times C_i$. Die Symmetrie wird durch den Schnitt gebrochen.*

Beweis. Nach Voraussetzung gilt $S\tilde{\rho} = \tilde{\rho}$ und $S_{\parallel} \circ C = C \circ S$. Nun ist mit (1.10):

$$\begin{aligned} S_{\parallel}F &= (S_{\parallel} \circ \mathcal{F})\rho = (S_{\parallel} \circ \mathcal{F} \circ C)\tilde{\rho} = (\mathcal{F} \circ S_{\parallel} \circ C)\tilde{\rho} \\ &= (\mathcal{F} \circ C \circ S)\tilde{\rho} = (\mathcal{F} \circ C)\tilde{\rho} = \mathcal{F}\rho = F. \end{aligned} \tag{1.15}$$

Beim Übergang von der Punktgruppe des Fouriermoduls zu P_L kommt die Inversion ins Spiel, vergleiche Satz 1.11. \square

Kapitel 2

Konstruktion von Quasikristallen

Im ersten Kapitel wurde gezeigt, wie Festkörper durch eine Dichtefunktion ρ beschrieben werden können. Diese ist bei Kristallen periodisch, bei Quasikristallen quasiperiodisch und kann außerdem gewisse Punktsymmetrien aufweisen. Darüber hinaus wurde keine Aussage über die Gestalt der Dichtefunktion gemacht. Wird der Festkörper als Ansammlung von idealisierten punktförmigen Atomen an den Positionen \mathbf{x}_i und ρ als Atomzahldichte betrachtet, so kann man schreiben:

$$\rho(\mathbf{x}) = \sum_n \delta(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}). \quad (2.1)$$

Bei Kristallen wiederholt sich eine vorgegebene Anordnung der Atome in der Elementarzelle. Bei Quasikristallen dagegen ist der Aufbau komplizierter. Unter der Konstruktion eines Quasikristalls versteht man die Bestimmung seiner Atompositionen, beschrieben durch die Menge $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$. In diesem Kapitel werden verschiedene Konstruktionsmethoden beschrieben und am Ende einige Beispielstrukturen vorgestellt.

Der Formalismus der atomaren Hyperflächen geht auf Bak [6] zurück, der Streifenprojektionsformalismus wurde erstmalig von Duneau und Katz [28] beschrieben. Vor der Entdeckung der Quasikristalle verwendete de Bruijn [22] die Gridmethode zur Konstruktion quasiperiodischer Muster.

2.1 Atomflächen und Streifenprojektionen

Betrachte nun einen Quasikristall mit Dichtefunktion ρ von der Gestalt (2.1). Wie in Satz 1.15 gezeigt, kann man sich ρ als einen irrationalen Schnitt durch eine höherdimensionale periodischen Dichtefunktion $\tilde{\rho}$ im Hyperraum vorstellen. $\tilde{\rho}$ kann allerdings nicht beliebig gewählt werden, sondern es ergeben sich aus der Physik Einschränkungen. Die Verschiebungen der Schnittebene E^\parallel parallel zu E^\parallel oder parallel zu E^\perp sind physikalische Freiheitsgrade (vergleiche Abschnitt 3.2). Daher wird gefordert:

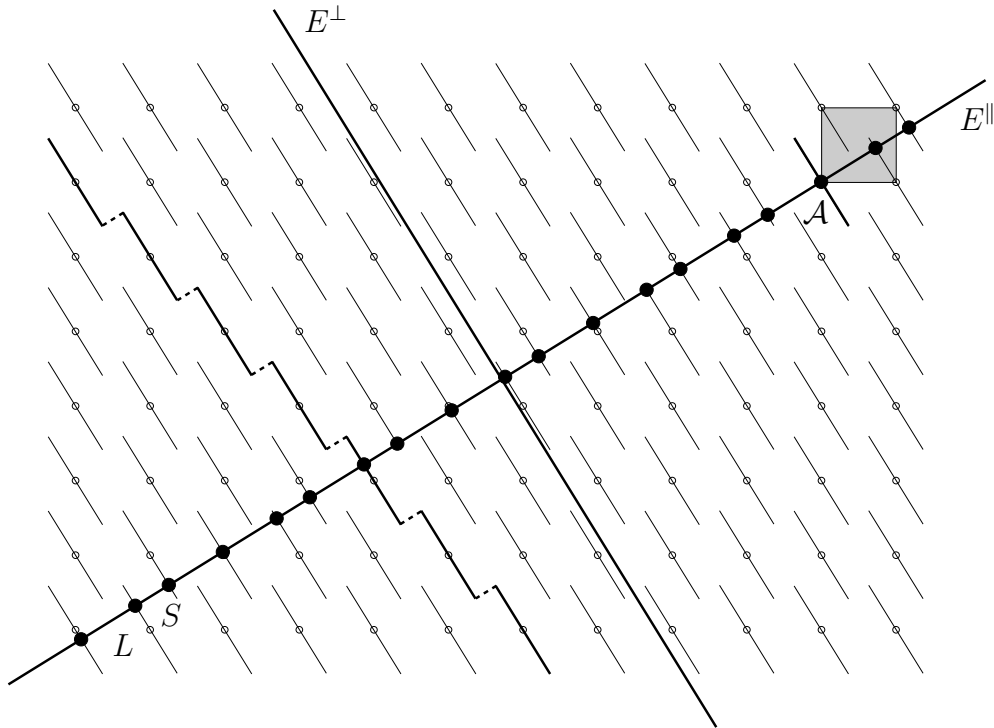


Abbildung 2.1: Methode der Atomflächen im Fall $d^\perp = d^\parallel = 1$. Üblicherweise zeichnet man E^\parallel und E^\perp gedreht ein. Zu jeder primitiven Elementarzelle des Hypergitters (grau) gehört eine Atomfläche \mathcal{A} , die gleich ihrer Projektion auf E^\perp ist. Im Quasikristall treten große (L) und kleine (S) Atomabstände auf.

Annahme 1. Die Atomzahl ändert sich bei einer Verschiebung von E^\parallel lokal nicht.

Sind verschiedene Atomsorten (Atome verschiedener Elemente) vorhanden, gilt dies für jede Atomsorte einzeln. Um die Annahme zu erfüllen, werden aus den Atomen im Hyperraum d^\perp -dimensionale Atomflächen (auch atomare Hyperflächen genannt) $\mathcal{A}_n \subset E^\parallel \oplus E^\perp$, die mit E^\parallel punktförmigen Schnitt (das sind die \mathbf{x}_n aus (2.1)) besitzen. In dieser Arbeit sind die Atomflächen Polytope. Es ist aber auch möglich Quasikristalle mit fraktalen Atomflächen zu konstruieren [4].

Nach Satz 1.17 muss $\tilde{\rho}$ invariant unter der Symmetriegruppe $P_{\tilde{\rho}}^\parallel$ sein. Enthält diese außer der Identität und der Inversion weitere Symmetrieeoperationen, dann stehen die Atomflächen senkrecht auf E^\parallel . Da experimentell gefundene Quasikristalle hohe Symmetrie besitzen, ist folgende Annahme sinnvoll:

Annahme 2. Die Atomflächen stehen senkrecht auf E^\parallel .

Die Konstruktion eines Quasikristalls im einfachsten Fall $d^\parallel = d^\perp = 1$ ist in Abbildung 2.1 gezeigt. Die Atomflächen sind Strecken. Entsprechend der Translationssymmetrie des

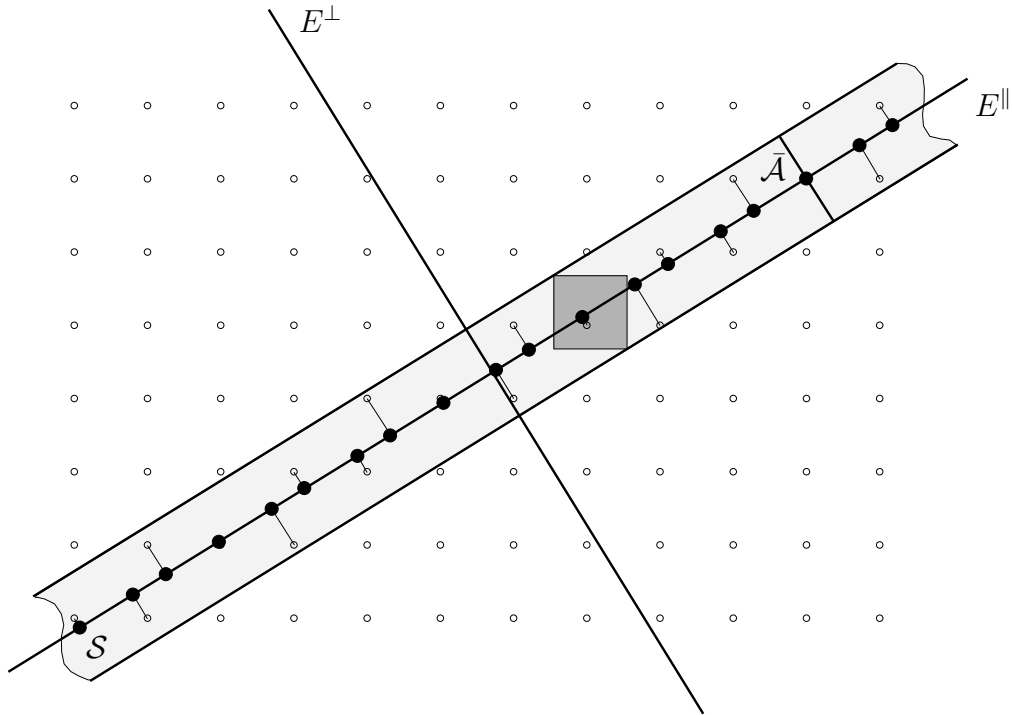


Abbildung 2.2: Streifenprojektionsformalismus im Fall $d^\perp = d^\parallel = 1$. Der Streifen entsteht durch Verschieben des Akzeptanzbereichs $\bar{\mathcal{A}}$. Dieser ist die Inversion einer Atomfläche \mathcal{A} .

Hypergitters $\tilde{\Gamma} = \mathbb{Z}^2$ sind die Atomflächen periodisch angeordnet. Pro Elementarzelle des Hypergitters gibt es genau eine Atomfläche. Im allgemeinen Fall können dies auch mehrere pro Elementarzelle sein, die zu einer oder mehreren Atomsorten gehören, jeweils unter Umständen mit unterschiedlicher Form, allerdings:

Annahme 3. *Pro Elementarzelle gibt es nur endlich viele Atomflächen.*

In der Abbildung erkennt man eine charakteristische Eigenschaft von Quasikristallen: Bei der Verschiebung von E^\parallel kann es passieren, dass die Schnittebene über das Ende einer Atomfläche \mathcal{A}_1 hinausläuft und das Atom verschwindet. Nach Annahme 1 muss dann E^\parallel eine alternative Atomfläche \mathcal{A}_2 schneiden und das Atom springt von \mathcal{A}_1 auf \mathcal{A}_2 . Die Atompositionen sind in diesem Sinne metastabil hinsichtlich kleiner Sprünge auf alternative Plätze, genannt Flips. Bei einer Verschiebung von E^\parallel treten die Flips korreliert auf, die globale Ordnung bleibt erhalten, auch wenn die lokale Ordnung zerstört wird.

Eine andere Methode zur Konstruktion von Quasikristallen ist der Streifenprojektionsformalismus (siehe Abbildung 2.2), der zur oben beschriebenen Methode der Atomflächen gleichwertig ist. Dazu bildet man zu einer Atomfläche \mathcal{A} einer fest gewählten Elementarzelle das Inverse, den Akzeptanzbereich $\bar{\mathcal{A}} = -\mathcal{A}$, und verschiebt ihn entlang E^\parallel , so dass

ein Streifen, der Auswahlstreifen $\mathcal{S} = \bar{\mathcal{A}} \oplus E^\parallel$, entsteht. Anstelle der Atomflächen werden nun Atompunkte verwendet. Diejenigen Atompunkte, die in \mathcal{S} fallen, werden mit π^\parallel auf E^\parallel projiziert und entsprechen den Atompositionen. Nacheinander verfährt man so mit allen Atomflächen der Elementarzelle. Die Methoden sind äquivalent, da sich innerhalb des Auswahlstreifens genau die Atompunkte befinden, deren dazugehörige Atomfläche E^\parallel schneidet.

Damit Annahme 1 erfüllt wird, müssen die Projektionen $\pi^\perp \mathcal{A}_1$ und $\pi^\perp \mathcal{A}_2$ zweier Atomflächen, die an einem Flip beteiligt sind, disjunkt und lückenlos aufeinanderpassen, was ihre möglichen Größen und Formen einschränkt. Im Spezialfall einer Atomfläche pro Elementarzelle lassen sich die Formen leicht angeben:

Satz 2.1. *Sei $\tilde{\Gamma}_U$ ein Untergitter der Dimension d^\perp des Hypergitters $\tilde{\Gamma}$, so dass kein Gittervektor aus $\tilde{\Gamma}_U$ parallel zu E^\parallel verläuft, und $Z_{\tilde{\Gamma}_U}$ eine Elementarzelle des Untergitters. Verwendet man als Atomflächen verschobene Kopien von $\pi^\perp Z_{\tilde{\Gamma}_U}$, also $\pi^\perp \tilde{\Gamma} Z_{\tilde{\Gamma}_U}$, so ist Annahme 1 erfüllt. Andere Möglichkeiten für die Wahl einer Atomfläche pro Elementarzelle gibt es nicht.*

Beweis. Sei $\tilde{\Gamma}_U \subset \tilde{\Gamma}$ wie im Satz. Wenn kein Vektor aus $\tilde{\Gamma}_U$ parallel zu E^\parallel verläuft, dann besitzt auch das projizierte Gitter $\pi^\perp \tilde{\Gamma}_U$ die Dimension d^\perp und die Projektionen $\pi^\perp \tilde{\Gamma}_U Z_{\tilde{\Gamma}_U}$ der Atomflächen passen disjunkt und lückenlos aufeinander, erfüllen also Annahme 1. Durch Verschiebung von $\tilde{\Gamma}_U$ kann man erreichen, dass jeder Hypergitterpunkt in einem solchen Untergitter liegt.

Umgekehrt seien als Atomflächen die um Vektoren aus $\tilde{\Gamma}$ verschobenen Kopien einer Atomfläche \mathcal{A} gegeben. Wenn sie Annahme 1 erfüllen, dann wird das Hypergitter durch sie in d^\perp -dimensionale parallele Untergitter zerlegt. Die Untergitter sind dabei so gewählt, dass die Projektionen π^\perp der Atomflächen eine disjunkte Zerlegung von E^\perp bilden. (In Abbildung 2.1 besitzt die Reihe der dicker gezeichneten Atomflächen diese Eigenschaft.) $\pi^\perp Z_{\tilde{\Gamma}_U}$ bildet eine Elementarzelle von $\pi^\perp \tilde{\Gamma}_U$. Das so konstruierte Untergitter erfüllt die Voraussetzungen des Satzes. \square

Bei Quasikristall-Modellsystemen wird in der Literatur häufig die Projektion $\pi^\perp Z_P$ der primitiven Elementarzelle Z_P von $\tilde{\Gamma}$ verwendet. Diese ist auch die Projektion einer d^\perp -dimensionalen Diagonalebene und somit ein Spezialfall des Satzes. Die bisherigen Überlegungen werden nun zusammengefasst:

Definition 2.2. *Ein physikalischer Quasikristall ist ein Quasikristall, der mit Hilfe der Methode der Atomflächen oder dem Streifenprojektionsformalismus erzeugt werden kann und den den Annahmen 1 bis 3 genügt. Atome werden dabei im Hyperraum $E^\parallel \oplus E^\perp$ durch d^\perp -dimensionale Atomflächen \mathcal{A}_n beziehungsweise Atompunkte plus Akzeptanzbereiche beschrieben.*

Im Folgenden kommen nur physikalische Quasikristalle vor. Diese werden kurz als Quasikristalle bezeichnet. Nach Satz 1.15 ist jede unter den Annahmen 1 bis 3 mit der Methode der Atomflächen oder dem Streifenprojektionsformalismus erzeugte Struktur genau dann ein (physikalischer) Quasikristall, wenn die Schnittebene das Hypergitter irrational schneidet.

2.2 Gridformalismus

Für die Konstruktion eines Quasikristalls mit dem Computer verwendet man meist den Gridformalismus. Er ist ebenfalls äquivalent zu den obigen Methoden. Der Gridformalismus wird hier ausgehend vom Streifenprojektionsformalismus am einfachen Beispiel des hyperkubischen Gitters $\tilde{\Gamma} = \mathbb{Z}^{\tilde{d}}$ mit dem Akzeptanzbereich $A = \pi^\perp W^{\tilde{d}}$ als Projektion des Einheitswürfels $W^{\tilde{d}} = [0, 1]^{\tilde{d}}$ vorgestellt. Der Auswahlstreifen \mathcal{S} entsteht durch Verschieben des Akzeptanzbereichs, aber auch durch Verschieben von $W^{\tilde{d}}$ (vergleiche Abbildung 2.2): $\mathcal{S} = W^{\tilde{d}} + E^\parallel$. Ist $\tilde{\mathbf{x}} = (x_1, \dots, x_{\tilde{d}}) \in E^\parallel$, so liegt $\lfloor \tilde{\mathbf{x}} \rfloor = (\lfloor x_1 \rfloor, \dots, \lfloor x_{\tilde{d}} \rfloor) \in \tilde{\Gamma}$ in \mathcal{S} . ($\lfloor x \rfloor$ ist die größte ganze Zahl kleiner gleich x .) Auf diese Art und Weise erhält man sogar alle Hypergitterpunkte, die in \mathcal{S} liegen:

$$\tilde{\Gamma} \cap \mathcal{S} = \{\lfloor \tilde{\mathbf{x}} \rfloor \mid \tilde{\mathbf{x}} \in E^\parallel\}. \quad (2.2)$$

Für jeden nichtleeren Schnitt $W_{\tilde{\mathbf{t}}} = W^{\tilde{d}} + \tilde{\mathbf{t}} \cap E^\parallel$ des um $\tilde{\mathbf{t}} \in \tilde{\Gamma}$ verschobenen Würfels liegt der Hypergitterpunkt $\tilde{\mathbf{t}}$ in \mathcal{S} . Diese Aussage gilt auch umgekehrt. Insgesamt:

$$\exists \tilde{\mathbf{x}} \in E^\parallel : \lfloor \tilde{\mathbf{x}} \rfloor = \tilde{\mathbf{t}} \quad \Leftrightarrow \quad \tilde{\mathbf{t}} \in \mathcal{S} \quad \Leftrightarrow \quad W_{\tilde{\mathbf{t}}} \neq \emptyset. \quad (2.3)$$

Die $W_{\tilde{\mathbf{t}}}$ überdecken E^\parallel disjunkt und lückenlos und werden gegeneinander durch die Schnitte der Koordinatenhyperebenen $E_i^z = \{\tilde{\mathbf{x}} \mid x_i = z, z \in \mathbb{Z}\} \cap E^\parallel$ getrennt. Diese bilden zusammen ein \tilde{d}^\parallel -dimensionales \tilde{d} -Grid auf E^\parallel mit Gridvektoren $\tilde{\mathbf{g}}_i = \pi^\parallel(0, \dots, 1, \dots, 0)$ (Eins an i -ter Stelle) und $\gamma_i = 0$, siehe Abbildung 2.3. Eine Änderung von γ_i entspricht einer Verschiebung von E^\parallel .

Definition 2.3. *Ein Grid ist eine Schar von äquidistanten Hyperebenen. Der Normalenvektor \mathbf{g} , dessen Länge gleich dem Hyperebenenabstand ist, heißt Gridvektor. Der Abstand der ersten Gridgeraden vom Ursprung wird mit γ bezeichnet. Ein n -Grid ist eine Überlagerung von n nichtparallelen Grids.*

Zur Konstruktion des Quasikristalls müssen also die verschiedenen Polytope $W_{\tilde{\mathbf{t}}}$, in die das \tilde{d} -Grid die Schnittebene zerlegt, bestimmt werden. Hierzu schneidet man jeweils \tilde{d}^\parallel Hyperebenen des Grids und berechnet für die $2^{\tilde{d}^\parallel}$ umliegenden Polytope die dazugehörigen Quasikristallatome. Diese liegen auf einem Parallelepiped, dessen Seiten Gridvektoren sind. Siehe dazu Abbildung 2.4 und beachte: π^\parallel ist linear. Man nennt die Erzeugung des

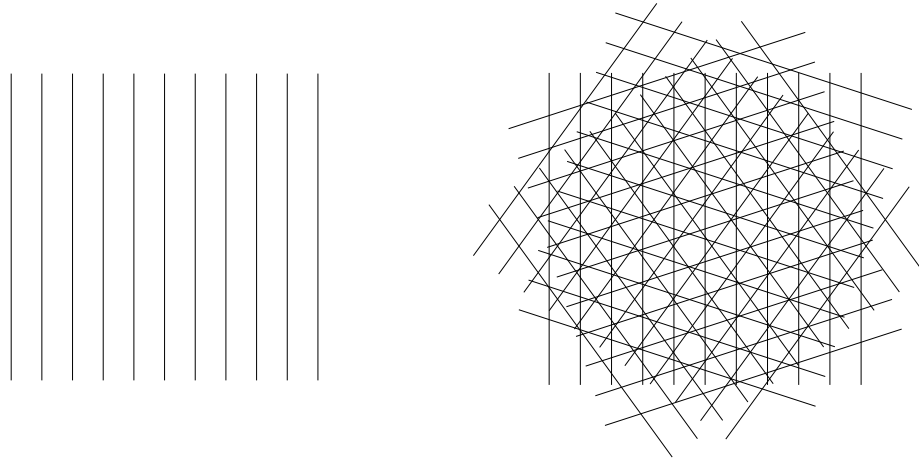


Abbildung 2.3: Zweidimensionales Grid (links). Zweidimensionales 5-Grid (rechts). Die Winkel zwischen den Gridvektoren sind Vielfache von 72° .

Parallelepipeds aus dem Schnittpunkt Dualisierung. Bildet man für alle Kombinationen von d^{\parallel} Hyperebenen die Schnittpunkte und bestimmt die dazugehörigen Parallelelogramme und Atome, so erhält man den gesamten Quasikristall. In diesem Spezialfall besteht der Quasikristall also aus Parallelepipeden, an deren Eckpunkten Atome sitzen. Die Parallelepipede treten dabei in $\binom{\tilde{d}}{d^{\parallel}}$ verschiedenen Formen beziehungsweise Orientierungen auf, da es genau so viele Kombinationen von Gridvektoren für die Seitenflächen gibt.

Sind mehr als eine Atomfläche in jeder Elementarzelle, dann werden die Parallelepipede mit zusätzlichen Atomen dekoriert. In diesem Fall ist der Gridformalismus aber komplizierter. Darauf wird hier nicht eingegangen. Erwähnt sei nur, dass die Einheitswürfel Atombereiche im Sinne von Kapitel 3.4 sind. Im allgemeinen Fall müssen stattdessen die jeweiligen Atombereiche verwendet werden.

Satz 2.4. *Ein Quasikristall ist aufgebaut aus einer endlichen Anzahl von unterschiedlichen Parallelepipeden.*

Dabei heißen zwei Parallelepipede gleich, wenn sie dieselbe Form, Orientierung und Atomdekoration besitzen. Die Zerlegung des physikalischen Raums in Parallelepipede (oder auch in allgemeine Polytope, genannt Tiles) wird Tiling oder Parkettierung genannt.

2.3 Die Fibonacci-Kette

In diesem und dem folgenden Abschnitt werden Beispielstrukturen behandelt. Die verwendeten Gitter sind hyperkubische Gitter $\mathbb{Z}^{\tilde{d}}$. Es tritt nur eine Atomfläche pro Elementarzelle auf, diese ist die Projektion der primitiven Elementarzelle. Der einzige noch unbestimmte

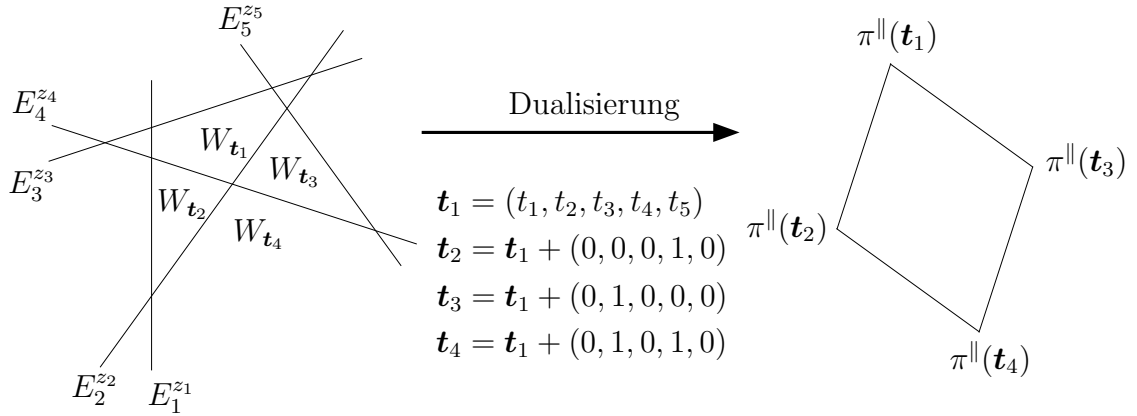


Abbildung 2.4: Dualisierungsschritt in der Ebene, $d = 2$ und $\tilde{d} = 5$. Um den Schnittpunkt zweier Gridlinien finden sich vier Polygone W_{t_i} . Diese erzeugen im Quasikristall ein Parallelogramm.

Parameter ist die Orientierung der Schnittebene E^{\parallel} . Sie kann durch die Projektionsmatrix π^{\parallel} angegeben werden, $E^{\parallel} = \pi^{\parallel}(\mathbb{R}^{d^{\parallel}})$. Verwendet man im Fall $d^{\parallel} = 1$ und $\tilde{d} = 2$ als Projektionsmatrix

$$\pi_{\text{fib}}^{\parallel} = \frac{1}{\sqrt{\tau + 2}} \begin{pmatrix} \tau & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.4)$$

so erhält man den Quasikristall aus den Abbildungen 2.1 und 2.2. (In den Abbildungen ist die Schnittgerade allerdings verschoben.) Der Quasikristall wird als Fibonacci-Kette bezeichnet und ist eng verbunden mit den Fibonacci-Zahlen F_n :

$$1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55, 89, \dots,$$

definiert durch die Rekursion $F_{n+1} = F_n + F_{n-1}$ mit den Anfangsbedingungen $F_0 = 0$ und $F_1 = 1$. Eine wichtige Rolle spielt hier, wie auch in den folgenden Beispielstrukturen, die goldene Zahl (oder Zahl des goldenen Schnitts) τ :

Satz 2.5. Die Zahl $\tau = \frac{1}{2}(\sqrt{5} + 1)$ besitzt folgende Eigenschaften:

- (i) $\tau^2 = \tau + 1$,
- (ii) $\tau^n = F_n \tau + F_{n-1}$,
- (iii) $(-\tau)^{-n} = F_{n+1} - F_n \tau$,
- (iv) $F_n = \frac{1}{2\tau-1}(\tau^n - (-\tau)^{-n}) = \frac{1}{5}\sqrt{5}(\tau^n - (-\tau)^{-n})$,
- (v) $\frac{a\tau + b}{c\tau + d} = \frac{ac - bc - bd + \tau(bc - ad)}{c^2 - cd - d^2}$,

$$(vi) \quad \begin{aligned} \cos\left(\frac{\pi}{5}\right) &= \frac{1}{2}\tau, & \sin\left(\frac{\pi}{5}\right) &= \frac{1}{2}\tau^{-1}\sqrt{\tau+2}. \\ \cos\left(\frac{2\pi}{5}\right) &= \frac{1}{2}\tau^{-1}, & \sin\left(\frac{2\pi}{5}\right) &= \frac{1}{2}\sqrt{\tau+2}, \end{aligned}$$

In der Fibonacci-Kette kommen große (L) und kleine (S) Abstände vor. Man erhält sie durch folgende Regel: Ersetze rekursiv L durch LS und S durch L . Beginnt man mit L , dann erhält man sukzessive:

L
 LS
 LSL
 $LSLLS$
 $LSLLSLSL$
 $LSLLSLSLLSLLS$
 $LSLLSLSLLSLLSLSLLSLSL$
 \vdots

Dies ist genau die Fibonacci-Kette, die mit einer unverschobenen Schnittgeraden entsteht. Die Verschiebung der Schnittgeraden führt zu einem anderen Ausschnitt aus der Fibonacci-Kette.

2.4 Zweidimensionale Quasikristalle

Zweidimensionale Quasikristalle mit nicht-kristallographischen diedrischen Punktgruppen D_{nh} , $n = 5$ oder $n > 7$ können erzeugt werden mit den Projektionsmatrizen

$$\pi_{\text{diedr},n}^{\parallel} = \sqrt{\frac{2}{n}} \begin{pmatrix} \cos(2\pi\frac{0}{n}) & \cos(2\pi\frac{1}{n}) & \cos(2\pi\frac{2}{n}) & \cdots & \cos(2\pi\frac{n-1}{n}) \\ \sin(2\pi\frac{0}{n}) & \sin(2\pi\frac{1}{n}) & \sin(2\pi\frac{2}{n}) & \cdots & \sin(2\pi\frac{n-1}{n}) \end{pmatrix}, \quad (2.5)$$

wenn n ungerade ist, und sonst mit den Projektionsmatrizen

$$\pi_{\text{diedr},n}^{\parallel} = \sqrt{\frac{1}{n}} \begin{pmatrix} \cos(2\pi\frac{0}{n}) & \cos(2\pi\frac{1}{n}) & \cos(2\pi\frac{2}{n}) & \cdots & \cos(2\pi\frac{n/2-1}{n}) \\ \sin(2\pi\frac{0}{n}) & \sin(2\pi\frac{1}{n}) & \sin(2\pi\frac{2}{n}) & \cdots & \sin(2\pi\frac{n/2-1}{n}) \end{pmatrix}. \quad (2.6)$$

Die Normierung ist so gewählt, dass die Zeilen die Länge 1 haben. Die entstehenden Parkettierungen für $n = 5, 7, 8, 9, 11, 12$ finden sich in Abbildung 2.5. Im Fall $n = 5$ erhält man das Penrose-Tiling, benannt nach der von Penrose 1974 aus rein ästhetischen Gesichtspunkten gefundenen Parkettierung [71]. Es ist aufgebaut aus zwei verschiedenen Rauten, der großen und der kleinen Penroseraute, die in jeweils 5 verschiedenen Orientierungen vorkommen. Das Tiling im Fall $n = 8$ wurde zuerst von Ammann beschrieben und besteht aus Quadraten und 45° -Rauten. Die Atomflächen als Projektion von 4-dimensionalen Einheitswürfeln sind regelmäßige 8-Ecke.

Ausser für $n = 8$ liegt nicht die minimale Einbettungsdimension vor. So hat zum Beispiel der Fouriermodul für n ungerade höchstens die Dimension $n - 1$ (beachte: $\sum_{i=0}^{n-1} \cos(2\pi \frac{i}{n}) = \sum_{i=0}^{n-1} \sin(2\pi \frac{i}{n}) = 0$). Das obige Vorgehen hat allerdings den Vorteil, hyperkubische Gitter zu verwenden. Genau genommen sollten Wurzelgitter verwendet werden. Hyperkubische Gitter sind jedoch einfacher und das Vorgehen ist in der Literatur üblich. Im Fall $n = 5$ entsteht das Wurzelgitter durch Projektion von \mathbb{Z}^5 auf die Hyperebene mit Normalenvektor $(1, 1, 1, 1, 1)$. Die Atomflächen sind dann regelmäßige 10-Ecke [60].

2.5 Dreidimensionale Quasikristalle

Ein dreidimensionaler Quasikristall mit nicht-kristallographischer ikosaedrischer Punktgruppe Y_h kann erzeugt werden mit der Projektionsmatrix (siehe auch Abschnitt 3.5)

$$\pi_{\text{iko}}^{\parallel} = \frac{1}{\sqrt{2\tau + 4}} \begin{pmatrix} 1 & \tau & 0 & -1 & \tau & 0 \\ \tau & 0 & 1 & \tau & 0 & -1 \\ 0 & 1 & \tau & 0 & -1 & \tau \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

Die Spaltenvektoren der Projektionsmatrix liegen auf den Eckpunkten eines Ikosaeders (Abbildung 2.6). Das Ikosaeder besteht aus 12 Ecken, 30 Kanten und 20 Flächen (Dreiecken). Es besitzt 12 fünfzählige, 20 dreizählige und 30 zweizählige Richtungen. Das Koordinatensystem für die obige Projektionsmatrix ist so gewählt, dass die Koordinatenachsen in zweizählige Richtungen zeigen. Dies hat den Vorteil, dass alle Achsen die gleiche Symmetrie besitzen [17]. Alternativ kann durch Drehung um den Winkel $\arccos \sqrt{\frac{2+\tau}{5}} \approx 31.72^\circ$ um die z -Achse und dann 36° um die y -Achse die y -Achse in fünfzählige Richtung gelegt werden. Die Projektionsmatrix hat dann die Gestalt

$$\pi_{\text{iko}}^{\parallel} = \sqrt{\frac{2}{5}} \begin{pmatrix} 0 & \cos(2\pi \frac{0}{5}) & \cos(2\pi \frac{1}{5}) & \sin(2\pi \frac{2}{5}) & \cos(2\pi \frac{4}{5}) & -\cos(2\pi \frac{3}{5}) \\ \frac{1}{2}\sqrt{5} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & \sin(2\pi \frac{0}{5}) & \sin(2\pi \frac{1}{5}) & \sin(2\pi \frac{2}{5}) & \sin(2\pi \frac{4}{5}) & -\sin(2\pi \frac{3}{5}) \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

Die Atomflächen als Projektion des sechsdimensionalen Einheitswürfels sind Triakontaeder, siehe Abbildung 2.7. Die Parkettierung heißt Ammann-Kramer-Penrose-Tiling und besteht aus zwei verschiedenen Parallelepipeden, einem prolaten Rhomboeder, dessen drei Basisvektoren gegenseitig einen spitzen Winkel von $\arccos(\frac{1}{5}\sqrt{5}) \approx 63.43^\circ$ einschließen, und einem oblaten Rhomboeder mit Winkel $\arccos(-\frac{1}{5}\sqrt{5}) \approx 126.57^\circ$. Sie kommen jeweils in 10 verschiedenen Orientierungen vor.

Vom dreidimensionalen Quasikristall können nur noch Projektionen dargestellt werden. In Abbildung 2.8 befinden sich Projektionen des Quasikristalls in zwei-, drei- und fünfzählige Richtungen, wobei die Eckpunkte der Rhomboeder als Kreise gezeichnet sind. Man erkennt lokal die jeweilige Symmetrie. Global ist keine Symmetrie vorhanden.

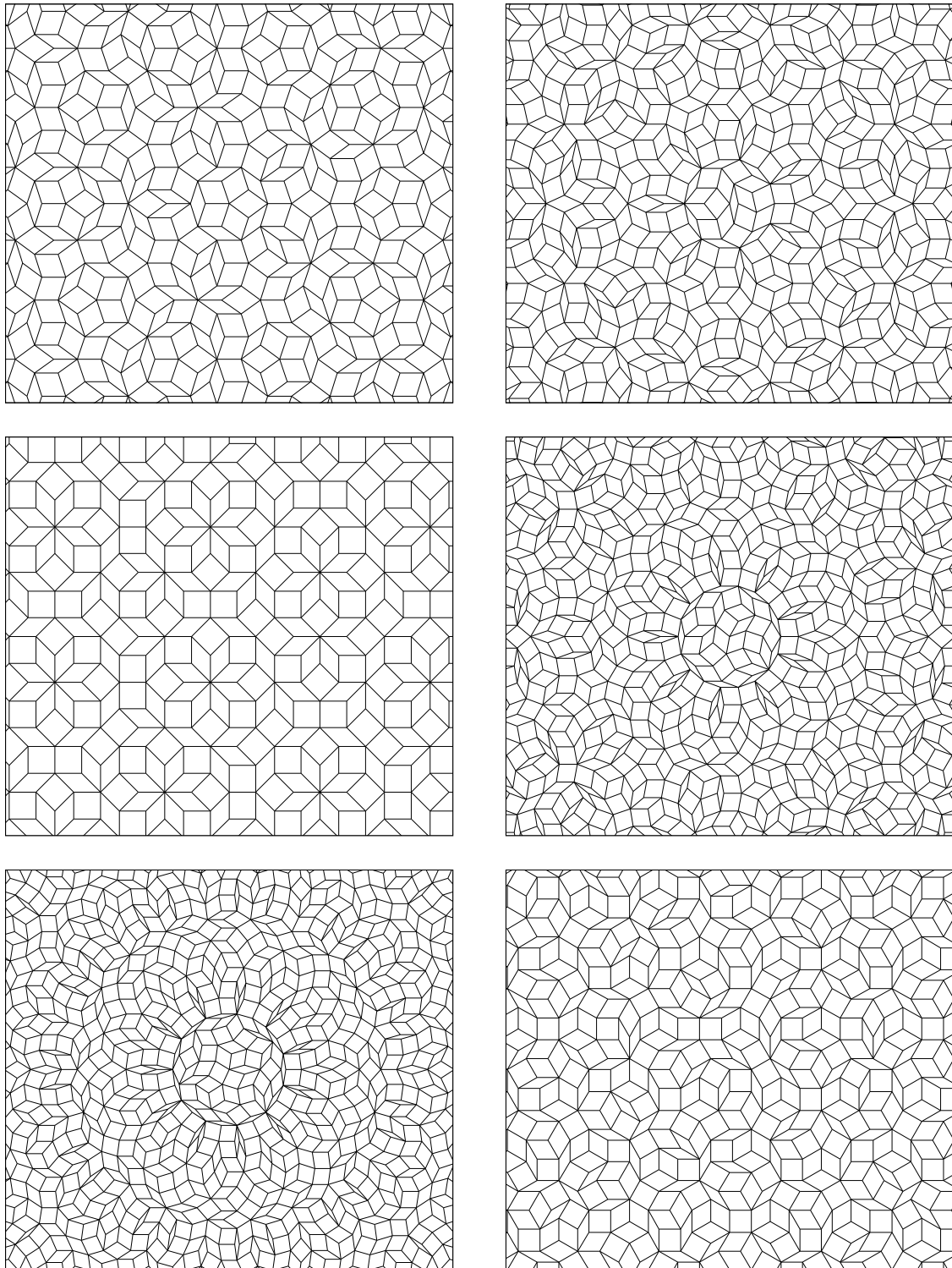


Abbildung 2.5: Zweidimensionale Parkettierungen mit verschiedenen Punktsymmetrien. Dekagonal, $n = 5$ (oben links). 14-zählig, $n = 7$ (oben rechts). Oktagonale $n = 8$ (mitte links). 18-zählig $n = 9$ (mitte rechts). 22-zählig $n = 11$ (unten links). 12-zählig $n = 12$ (unten rechts).

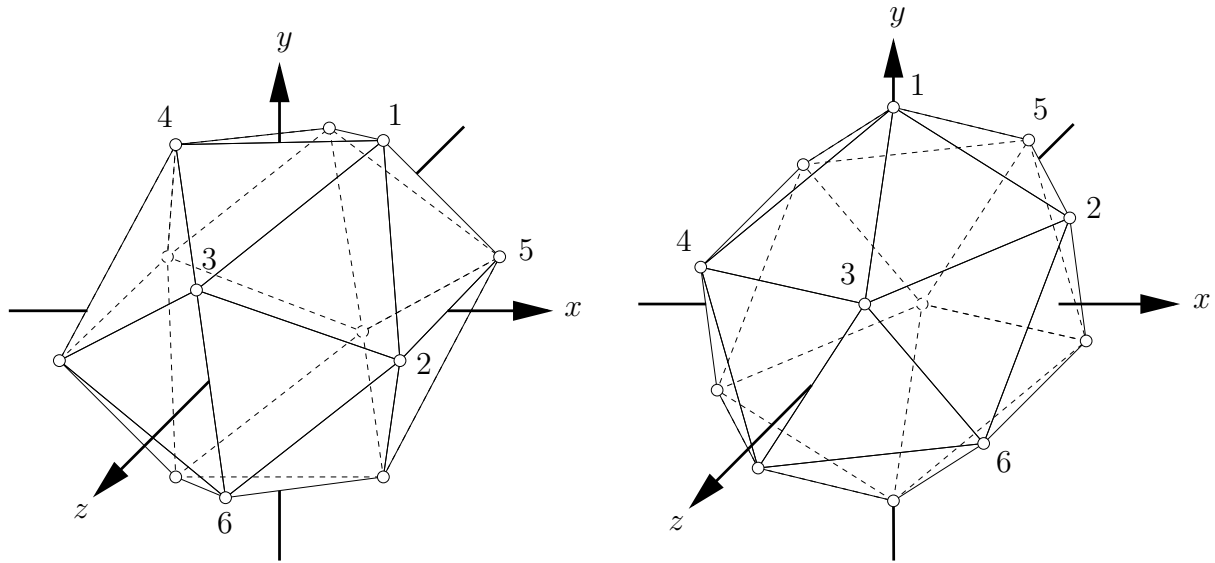


Abbildung 2.6: Icosaeder. Die Koordinatenachsen liegen in zweizähligen Richtungen (links). Die y -Achse zeigt in fünfzählige Richtung (rechts). Die Zahlen beziehen sich auf die Spalten der Projektionsmatrix.

Es gibt drei verschiedene sechsdimensionale Bravais-Gitter mit ikosaedrischer Symmetrie [26]:

- (i) das einfach kubische Gitter $P_6 = \{(n_1, \dots, n_6) \mid n_i \in \mathbb{Z}\} = \mathbb{Z}^6$,
- (ii) das kubisch flächenzentrierte Gitter $F_6 = \{(n_1, \dots, n_6) \mid \sum_i n_i = 0 \pmod{2}\}$,
- (iii) das kubisch raumzentrierte Gitter $B_6 = \{(n_1, \dots, n_6) \mid n_i = n_j \pmod{2}\}$.

F_6 und B_6 sind Untergitter von P_6 mit Index $P_6 : F_6 = 2$ beziehungsweise $P_6 : B_6 = 32$. In physikalischen Strukturen wurden bisher Quasikristalle mit den Gitter P_6 und F_6 gefunden. Quasikristalle mit verschiedenen Bravais-Gittern können anhand ihrer Beugungsbilder unterschieden werden.

2.6 Selbstähnlichkeit

Eine wichtige Eigenschaft von vielen Quasikristallen ist ihre Selbstähnlichkeit. Ein Teil der Atome des Penrose-Tilings bildet ein um den Faktor $\lambda = \tau$ vergrößertes Penrose-Tiling. Dabei sind die Tiles des großen Penrose-Tilings (Supertiles) einheitlich dekoriert, wie in Abbildung 2.9 gezeigt. Die Selbstähnlichkeit der Fibonacci-Kette steckt in ihrer Bildungsregel $S \rightarrow L, L \rightarrow LS$. Eine Selbstähnlichkeit wird beschrieben durch eine lineare Transformation M , welche das Hypergitter erhält und zusätzlich den Orthogonalraum und den

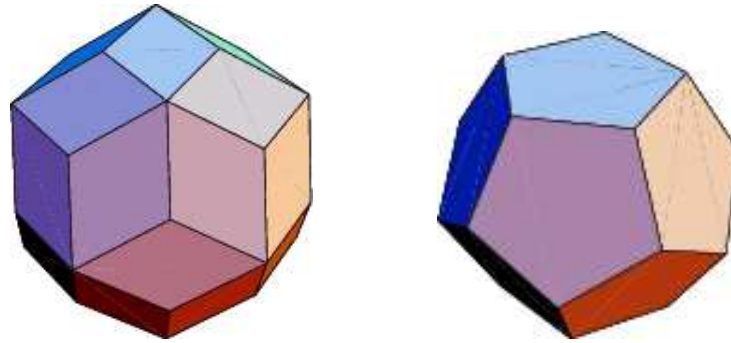


Abbildung 2.7: Triakontaeder (links). Dodekaeder (rechts).

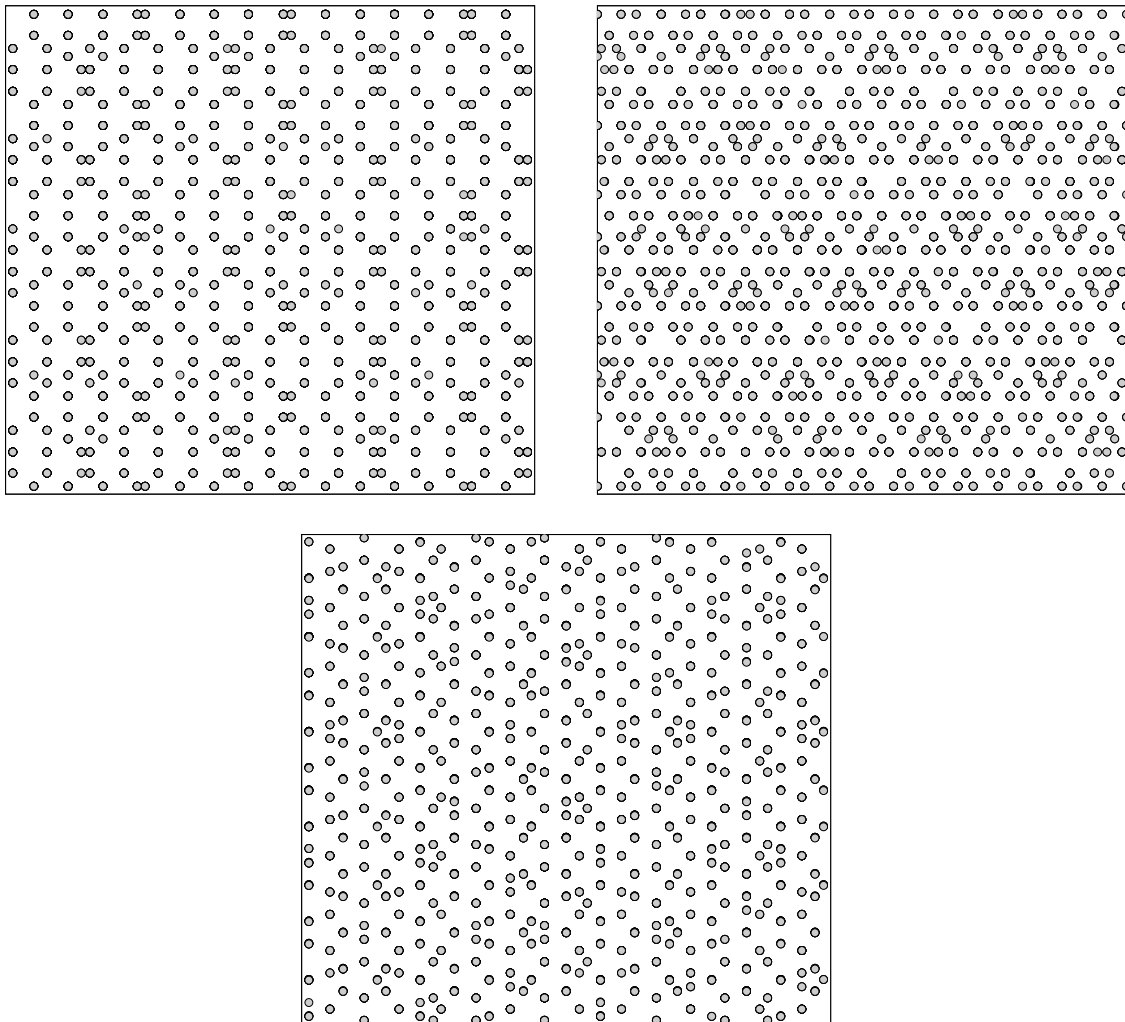


Abbildung 2.8: Projektionen des ikosaedrigen Quasikristalls (P_6 -Gitter) in zwei-, drei- und fünfzähliger Richtung.

Parallelraum als Eigenräume besitzt. Eine Selbstabbildung ändert die Länge von Vektoren aus E^{\parallel} um λ und diejenige von Vektoren aus E^{\perp} um μ . Somit hat man:

Satz 2.6. *Eine Selbstähnlichkeit eines Quasikristalls ist gegeben durch eine lineare Transformation der Form*

$$M = \lambda(\pi^{\parallel})^t \pi^{\parallel} + \mu(\pi^{\perp})^t \pi^{\perp} \in \mathbb{R}^{\tilde{d} \times \tilde{d}} \quad \text{mit} \quad \lambda, \mu \in \mathbb{R}. \quad (2.9)$$

Der Faktor λ heißt Inflations- beziehungsweise Deflationsfaktor. Mit λ sind auch λ^z , $z \in \mathbb{Z}$ Inflations-/Deflationsfaktoren.

Dabei sind $(\pi^{\parallel})^t \pi^{\parallel}$ und $(\pi^{\perp})^t \pi^{\perp}$ die Projektionen in $\mathbb{R}^{\tilde{d}}$. Im Spezialfall des ikosaedrischen Quasikristalls ist $\|\lambda\mu\| = 1$, das heißt $\mu = \pm 1/\lambda$, damit M das Hypergitter bijektiv auf sich selbst abbildet, und man kann die möglichen linearen Transformationen ausrechnen. Eine wichtige Rolle spielt die Matrix

$$M_{\text{iko}} = \tau(\pi^{\parallel})^t \pi^{\parallel} - \tau^{-1}(\pi^{\perp})^t \pi^{\perp} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

und ihre dritte Potenz

$$M_{\text{iko}}^3 = \tau^3(\pi^{\parallel})^t \pi^{\parallel} - \tau^{-3}(\pi^{\perp})^t \pi^{\perp} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 2 & 1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 2 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 2 & -1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 2 \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

denn es gilt $M_{\text{iko}}^3 P_6 = P_6$, $M_{\text{iko}} F_6 = F_6$ und $M_{\text{iko}} B_6 = B_6$. Somit besitzt das sechsdimensionale einfach kubische Gitter den kleinsten Inflationsfaktor $\lambda_{P_6} = \tau^3$, wohingegen der kleinste Inflationsfaktor des flächenzentrierten und des raumzentrierten Gitters $\lambda_{F_6} = \lambda_{B_6} = \tau$ ist.

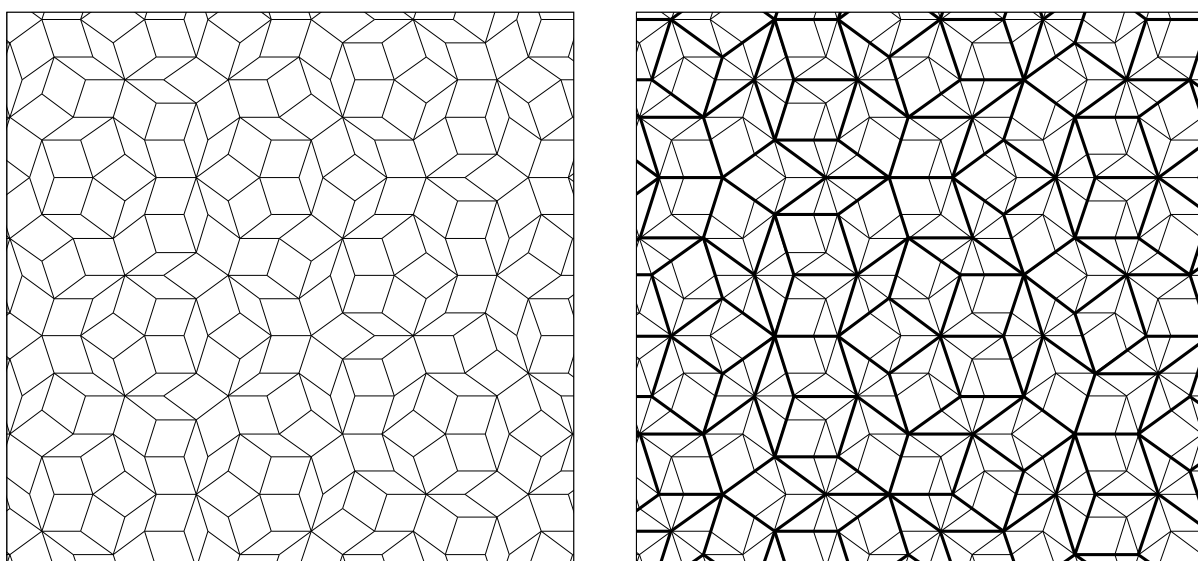


Abbildung 2.9: Ein Ausschnitt aus dem Penrose-Tiling (links). Derselbe Ausschnitt mit eingezeichneten Supertiles (rechts). Diese sind um den Faktor $\lambda = \tau$ größer.

Kapitel 3

Phasonen und Approximanten

Ein Quasikristall entsteht als Schnitt durch einen periodischen mit Atomflächen dekorierten Kristall. Seine Struktur ist bestimmt durch Position und Orientierung der Schnittebene. In diesem Kapitel wird untersucht, wie sich eine Positionsänderung der Schnittebene auf den Quasikristall auswirkt. Es zeigt sich, dass dabei zwar mikroskopische Änderungen der Atomordnung auftreten: Die Atome flippen auf andere Plätze. Solange die Verschiebung aber zu einer lokal ununterscheidbaren Struktur führt, bleiben die makroskopischen Eigenschaften erhalten. Verschiebungen der Schnittebene sind dann physikalische Freiheitsgrade und können als solche angeregt werden. Lokale Anregungen breiten sich in Form von Phasonen aus. Eine Orientierungsänderung der Schnittebene führt zu Strukturen, die auch makroskopisch andere, aber ähnliche Eigenschaften besitzen. Diese Strukturen können periodisch oder quasiperiodisch sein und heißen Approximanten. Für diese Arbeit sind Approximanten des dreidimensionalen ikosaedrischen Quasikristalls wichtig, auf die am Ende des Kapitels näher eingegangen wird.

Die Verschiebung der Schnittebene und Phasonen werden in [3] behandelt. [27] ist ein einführender Artikel über die Theorie der Approximanten. Er enthält auch experimentelle Beispiele, die Thema des nächsten Kapitels sind.

3.1 Lokale Ununterscheidbarkeit

Stimmen zwei periodische Kristalle nach einer Translation auf einem Raumbereich, der eine Elementarzelle enthält, überein, so überträgt sich dies auf die gesamten Kristalle, und beide besitzen gleiche physikalische Eigenschaften. Bei Quasikristallen dagegen kann man aus lokaler Übereinstimmung nicht auf globale schließen, da die globale Struktur nicht eindeutig durch die Vorgabe eines endlichen Ausschnitts bestimmt ist. Vielmehr lässt sich der Ausschnitt immer auf unendlich viele Arten fortsetzen wie in Satz 3.2 gezeigt wird. Zuerst werden einige Begriffe eingeführt:

Definition 3.1. Sei $\tilde{\rho}$ eine \tilde{d} -dimensionale periodische Dichtefunktion und E^\parallel eine d^\parallel -dimensionale Schnittebene, so dass der Schnitt quasiperiodisch ist. Sei Ω_r eine Teilmenge von \mathbb{R}^d , die vollständig in einer Kugel mit Radius r enthalten ist.

- (i) Das Paar $Q = (\tilde{\rho}, E^\parallel)$ wird als Quasikristall-Modellsystem bezeichnet.
- (ii) Eine Quasikristall mit Dichtefunktion ρ ist ein Q -Quasikristall, wenn ρ durch einen Schnitt mit der um $\tilde{\mathbf{u}} \in \mathbb{R}^{\tilde{d}}$ verschobenen Schnittebene E^\parallel entsteht. Schreibweise: $\rho = \rho_{\tilde{\mathbf{u}}}$. Die Dichtefunktion $\rho_{\tilde{\mathbf{u}}}$ heißt dann Q -erzeugt.
- (iii) Die Funktion $\mu : \Omega_r \rightarrow \mathbb{R}$ wird als Q -erzeugter Ausschnitt einer Dichtefunktion bezeichnet, wenn sie zu einer Q -erzeugten Dichtefunktion fortgesetzt werden kann, wenn es also ein $\tilde{\mathbf{u}} \in \mathbb{R}^{\tilde{d}}$ gibt, so dass $\rho_{\tilde{\mathbf{u}}}|_{\Omega_r} = \mu$.

Verschiebt man E^\parallel um einen Hypergittervektor $\tilde{\mathbf{u}} \in \tilde{\Gamma}$, so ändert das den Quasikristall nicht. Ist \tilde{Z} eine Elementarzelle von $\tilde{\Gamma}$, so können alle Q -Quasikristalle durch Vektoren aus \tilde{Z} parametrisiert werden. Umgekehrt sind zwei Q -Quasikristalle mit den Verschiebungsvektoren $\tilde{\mathbf{u}}_1, \tilde{\mathbf{u}}_2 \in \tilde{Z}$ mit $\tilde{\mathbf{u}}_1 \neq \tilde{\mathbf{u}}_2$ nicht identisch, das heißt $\rho_{\tilde{\mathbf{u}}_1} \neq \rho_{\tilde{\mathbf{u}}_2}$, da \tilde{Z} eine Elementarzelle ist. Werden gegenüberliegende Flächen von \tilde{Z} identifiziert, so entsteht ein Torus. Man nennt die Parametrisierung daher die Torusparametrisierung der Q -Quasikristalle. Mit dieser Notation lässt sich nun die angekündigte Aussage formulieren [49]:

Satz 3.2. Sei $\mu : \Omega_r \rightarrow \mathbb{R}$ ein Q -erzeugter Ausschnitt einer Dichtefunktion. Dann gibt es unendlich viele verschiedene Q -erzeugte Dichtefunktionen, die μ fortsetzen. In jeder Fortsetzung gibt es unendlich viele Ausschnitte, die nach Translation mit μ übereinstimmen.

Beweis. Die Menge $\mu^* = \{\tilde{\mathbf{u}} \in \tilde{Z} \mid \rho_{\tilde{\mathbf{u}}}|_{\Omega_r} = \mu\}$ heißt Polare von μ . Sie ist nach Voraussetzung nicht leer. Wegen der Annahme 3 aus Kapitel 2 gibt es einen Bereich kleiner zusätzlicher Verschiebungen $\Delta\tilde{\mathbf{u}} \in E^\perp$, bei denen auf Ω_r keine Flips auftreten. (Die Zahl der Flips in Ω_r ist endlich für endliche Verschiebungen.) Für jede Verschiebung erhält man aber global eine andere quasiperiodische Dichtefunktion. Der zweite Teil wird für den Spezialfall des hyperkubischen Gitters in [73] bewiesen. Die Idee ist einfach: Im Bild des Streifenprojektionsformalismus wird der Ausschnitt μ durch die Atome, die im Bereich Ω_r im Auswahlfensters liegen, bestimmt, also durch die Position der Schnittebene E^\parallel relativ zu diesen Atomen. Kleine Verschiebungen von E^\parallel führen innerhalb von Ω_r zu keinen Flips. Dieselbe Konfiguration von Atomen/Schnittebene und somit auch der Ausschnitt μ wiederholt sich jedoch unendlich oft, da der Schnitt irrational ist. \square

Es ist sogar möglich eine Abschätzung für die Häufigkeit p_μ des Auftretens eines Ausschnitts anzugeben. Beachte dazu, dass die Differenz zweier Vektoren aus μ^* in E^\perp liegt, da Verschiebungen parallel zu E^\parallel den Ausschnitt $\rho_{\tilde{\mathbf{u}}}$ verändern. p_μ ist proportional zum Volumen von μ^* (siehe [73]): $p_\mu \propto \text{Vol}(\mu^*)$.

Um zwei Quasikristalle zu vergleichen, erweist sich das Konzept der lokalen Ununterscheidbarkeit (local indistinguishability (LI)) als besonders hilfreich [3]. In der älteren Literatur wird meist die Bezeichnung lokale Isomorphie verwendet, allerdings besitzt der Begriff Isomorphie in der Mathematik eine andere Bedeutung.

Definition 3.3. *Seien ρ_1 und ρ_2 die Dichtefunktion zweier Quasikristalle. Die Quasikristalle heißen lokal ununterscheidbar, wenn jeder Ausschnitt von ρ_1 nach einer Translation ein Ausschnitt von ρ_2 ist und umgekehrt.*

Diese Relation ist eine Äquivalenzrelation, bezüglich derer die Menge der Quasikristalle in Äquivalenzklassen, genannt LI-Klassen, eingeteilt werden. Sind zwei Quasikristalle in derselben LI-Klasse, dann gibt es ein Quasikristall-Modellsystem Q , so dass ihre Dichtefunktionen Q -erzeugt sind. Die Umkehrung gilt im Allgemeinen nicht. So können zum Beispiel bei Verwendung des \mathbb{Z}^5 -Gitters zur Konstruktion des Penroseusters durch Verschiebung der Schnittebene in Richtung $(1, 1, 1, 1, 1)$ lokal unterscheidbare Muster erzeugt werden, während Verschiebungen in Richtungen senkrecht dazu zu lokal ununterscheidbaren Mustern führen. Dies hat seine Ursache in der Verwendung eines Gitters mit einer Dimension, die größer als die minimale Einbettungsdimension ist. Verwendet man das Wurzelgitter der Dimension 4 zur Konstruktion des Penroseusters, so sind alle erzeugten Muster lokal ununterscheidbar. Nach Satz 1.15 kann aber zur Konstruktion des Quasikristalls immer ein Gitter mit der minimalen Einbettungsdimension verwendet werden. Dann gilt [49]:

Satz 3.4. *Ist die Dimension des Hyperraums gleich der minimalen Einbettungsdimension (Dimension des Fouriermoduls eines Q -Quasikristalls), dann gilt:*

$$\rho_1 \text{ und } \rho_2 \text{ sind } Q\text{-erzeugt} \iff \rho_1 \text{ und } \rho_2 \text{ sind lokal ununterscheidbar.}$$

Quasikristalle sind normalerweise unter keiner Punktsymmetrieoperation im herkömmlichen Sinne invariant. Sie besitzen allerdings verallgemeinerte Punktsymmetrien.

Definition 3.5. *Verallgemeinerte Symmetrien sind genau diejenigen linearen Isometrien S , für die ρ und $S\rho$ in derselben LI-Klasse liegen.*

Die Punktgruppe der verallgemeinerten Symmetrien ist identisch mit $P_{\tilde{\rho}}^{\parallel}$ aus Satz 1.17. Verallgemeinerte Symmetrien sind Symmetrien von $\tilde{\rho}$, die E^{\parallel} invariant lassen, und besitzen für Quasikristalle dieselbe Bedeutung wie die herkömmlichen Punktsymmetrien für periodische Kristalle [3]. Insbesondere haben Quasikristalle aus derselben LI-Klasse das gleiche Beugungsbild. Bei der Umkehrung der Aussage spielt im allgemeinen Fall die Inversion eine Rolle. Mit der bisher geleisteten Vorarbeit erhält man folgende Aussage (dies ist eine Verallgemeinerung von IV.A in [61]):

Satz 3.6. *Zwei Quasikristalle haben genau dann dasselbe Beugungsbild, wenn sie bis auf Inversion in derselben LI-Klasse liegen. Dabei bedeutet "bis auf Inversion" die Anwendung der Inversion auf die Dichtefunktionen der Quasikristalle.*

3.2 Freiheitsgrade

Bei Quasikristallen in einer LI-Klasse treten dieselben Ausschnitte beliebiger Größe mit gleicher Häufigkeit auf. Art und Anzahl der Atomumgebungen stimmen überein. Daher können sie auf makroskopischer Ebene nicht unterschieden werden:

Satz 3.7. *Quasikristalle einer LI-Klasse haben identische physikalische Eigenschaften. Insbesondere haben sie die gleiche freie Energie und dieselben mechanischen und elektronischen Eigenschaften.*

Durch die Verschiebung der Schnittebene innerhalb einer LI-Klasse liegt ein kontinuierlicher physikalischer Freiheitsgrad vor. Eine Verschiebung $\tilde{\mathbf{u}}$ kann zerlegt werden in einen phononischen Anteil $\tilde{\mathbf{u}}^\perp = \pi^\parallel(\tilde{\mathbf{u}}) \in E^\parallel$ und einen phasonischen Anteil $\tilde{\mathbf{u}}^\parallel = \pi^\perp(\tilde{\mathbf{u}}) \in E^\perp$. Bei Verwendung eines Quasikristall-Modellsystems mit minimaler Einbettungsdimension erhält man d^\parallel phononische und d^\perp phasonische Freiheitsgrade. Diese können durch angelegte Kraftfelder oder Kristallfehler angeregt werden, wodurch ortsabhängige Verschiebungsfelder $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x})$ für $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{d^\parallel}$ auftreten. E^\parallel ist dann nicht mehr eben, sondern gekrümmt und wird als Schnittfläche bezeichnet. Beispiele für ortsabhängige Verschiebungsfelder mit rein phononischen oder rein phasonischen Anteil befinden sich in Anhang A. Die phononische Verschiebung führt zu einer Verzerrung der Quasikristallstruktur, die phasonischen Verschiebung zu Flips im Tiling [81].

Eine wesentliche Voraussetzung für die Stabilität von Quasikristallen ist, dass Atomanordnungen mit einer ebenen Schnittfläche eine geringere Energie besitzen, als Anordnungen mit gekrümmter Schnittfläche. Andernfalls wäre der Quasikristall instabil und würde sich thermodynamisch umordnen. Eine lokale ortsabhängige Verschiebung $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x})$ führt daher zu Spannungen und einer rücktreibenden Kraft, die für kleine Variationen im Gradienten der Verschiebung $\nabla \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x})$ linearisiert werden kann (vergleiche Kapitel 5 zur Elastizitätstheorie). Anregungen der Freiheitsgrade breiten sich im Kristall aus. Im Rahmen der Quantenmechanik kann man den Anregungen Teilchencharakter zuschreiben. Elementaranregungen des phononischen Freiheitsgrades werden wie in periodischen Kristallen Phononen genannt, die der phasonischen Freiheitsgrade heißen Phasonen in Anlehnung an den Begriff der Phase, der in älteren Arbeiten für die Orthogonalraumkomponente $\tilde{\mathbf{u}}^\perp(\mathbf{x})$ verwendet wurde.

3.3 Theorie der Approximanten

Experimentell gefundene Quasikristalle existieren häufig in Koexistenz mit anderen komplexen Strukturen, genannt Approximanten, die selbst quasiperiodisch oder periodisch sind. Approximanten sind lokal identisch aufgebaut wie der dazugehörige Quasikristall, und haben ähnliche chemische Zusammensetzung. Sie können je nach Herstellungsbedingung in vielen Formen auftreten. Periodische Approximanten enthalten in einer Elementarzelle in

der Regel mehrere hundert oder tausend Atome. Außerdem sind ihr mechanisches Verhalten (Plastizität, Härte) und ihre Transporteigenschaften (elektrische und thermische Leitfähigkeit) vergleichbar mit denen des Quasikristalls. Daher hilft die Untersuchung von Approximanten zum Verständnis des entsprechenden Quasikristalls. Insbesondere für periodische Approximanten können herkömmliche Methoden aus der Kristallographie angewendet werden. Allgemein sind sie für experimentelle Untersuchungen einfacher zugänglich als die Quasikristalle.

Approximanten entstehen aus Quasikristallen durch eine Scherung von E^\parallel in Richtung E^\perp , da dadurch lokale Atomumgebungen beibehalten werden. (Beachte allerdings: Dabei ändert sich die Metrik auf der Schnittebene.) Die Scherung entspricht einer rein phasonischen linearen Verschiebung: $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) = \eta\mathbf{x}$, wobei $\eta \in \mathbb{R}^{\tilde{d} \times d^\parallel}$ Verzerrungsmatrix heißt. Bezeichne nun die gescherte Schnittebene mit \mathcal{E}^\parallel . Eine Parametrisierung von \mathcal{E}^\parallel ist gegeben durch

$$E^\parallel \rightarrow \mathcal{E}^\parallel : \mathbf{x} \oplus \mathbf{0} \mapsto \mathbf{x} \oplus \mathbf{0} + \eta\mathbf{x}. \quad (3.1)$$

Die Verzerrungsmatrix hat in einer der Zerlegung $\mathbb{R}^{\tilde{d}} = E^\parallel \oplus E^\perp$ angepassten Basis in den ersten d^\parallel Spalten verschwindende Einträge:

$$\eta = \begin{pmatrix} 0 \\ \chi \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \chi \in \mathbb{R}^{d^\perp \times d^\parallel}. \quad (3.2)$$

Die Matrix χ ist charakteristisch für den Approximanten und heißt Schermatrix. Seine Dichtefunktion ist $\rho(\mathbf{x}) = \tilde{\rho}(\mathbf{x}, \chi\mathbf{x})$. Die nicht notwendigerweise orthogonale Projektion auf E^\perp entlang \mathcal{E}^\parallel ist gegeben durch (Abbildung 3.1)

$$\pi_{\text{approx}}^\perp = \pi^\perp - \chi\pi^\parallel. \quad (3.3)$$

Meist verwendet man jedoch eine dem Hypergitter angepasste Basis des Hyperraums, deren Elemente Basistranslationen sind (wie in den Beispielen von Kapitel 2). Sei in dieser Basis $\{\tilde{\mathbf{a}}_1, \dots, \tilde{\mathbf{a}}_{d^\parallel}\}$ eine Basis der Schnittebene des Approximanten. Es gilt $\pi_{\text{approx}}^\perp \tilde{\mathbf{a}}_i = \mathbf{0}$ und somit zwischen Parallel- und Orthogonalkomponente der Basisvektoren die Beziehung $\pi^\perp \tilde{\mathbf{a}}_i = \chi\pi^\parallel \tilde{\mathbf{a}}_i$. Diese kann man invertieren:

$$\chi = \underbrace{\begin{pmatrix} \pi^\perp \tilde{\mathbf{a}}_1 & \dots & \pi^\perp \tilde{\mathbf{a}}_{d^\parallel} \end{pmatrix}}_{\pi^\perp A \in \mathbb{R}^{d^\perp \times d^\parallel}} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} \pi^\parallel \tilde{\mathbf{a}}_1 & \dots & \pi^\parallel \tilde{\mathbf{a}}_{d^\parallel} \end{pmatrix}^{-1}}_{\pi^\parallel A \in \mathbb{R}^{d^\parallel \times d^\parallel}} = \pi^\perp A (\pi^\parallel A)^{-1} \in \mathbb{R}^{d^\perp \times d^\parallel}, \quad (3.4)$$

wobei in den Spalten der Basismatrix A die Vektoren $\tilde{\mathbf{a}}_i$ stehen. Die Wahl der $\tilde{\mathbf{a}}_i$ beeinflusst χ nicht: Zwei Basen 1 und 2 der Schnittebene seien über die Transformationsmatrix T verknüpft, dann ist $A_1 = A_2 T$, also $\chi_1 = \pi^\perp A_1 (\pi^\parallel A_1)^{-1} = \pi^\perp A_2 T T^{-1} (\pi^\parallel A_2)^{-1} = \chi_2$. Die Verwendung einer anderen Basis des Hyperraums oder anderer Projektionsmatrizen π^\parallel und π^\perp verändert jedoch χ , selbst die Eigenwerte bleiben bei orthogonalen Basiswechseln

nicht erhalten. Bei der Angabe der Schermatrix müssen daher die dazugehörige Basis des Hyperraums und die Projektionsmatrizen beachtet werden. Durch geschickte Wahl von π^{\parallel} und π^{\perp} kann χ stets diagonalisiert werden.

Wie gesehen werden Approximanten mathematisch analog den Quasikristallen beschrieben:

Definition 3.8. *Sei $Q = (\bar{\rho}, E^{\parallel})$ ein Quasikristall-Modellsystem. Eine lineare rein phasonische Verschiebung sei gegeben durch die Schermatrix χ . Der Kristall oder Quasikristall, der mit der gescherten Schnittebene und neuen, der Geometrie angepassten Atomflächen (siehe Abschnitt 3.4), erzeugt wird, heißt ein Approximant von Q .*

Für ein Beispiel hierzu siehe Abbildung 3.2 im Fall eines Approximanten der Fibonacci-Kette. In der Abbildung wird die quasiperiodische Fibonacci-Sequenz

$$\dots LSLLSLSLLSLLSLSLLS \dots$$

durch die periodische Sequenz

$$\dots SLLLSLLLSLLLSLL \dots$$

approximiert. Für periodische Approximanten schneidet \mathcal{E}^{\parallel} das Hypergitter rational. Zur Verdeutlichung ist in der Abbildung eine sehr große Scherung gewählt. Die Einträge von χ sind in der Regel allerdings klein, wobei nicht festgelegt werden kann wie klein, damit Approximanten die Struktur des Quasikristalls auch wirklich “approximiert”. Allgemein gilt: Je kleiner die Verschiebung, desto ähnlicher ist die Struktur des Approximanten der des Quasikristalls.

3.4 Atombereiche

Bei den bisherigen Überlegungen wurden die d^{\perp} -dimensionalen Atomflächen \mathcal{A} immer unverändert gelassen. Beim Konstruktionsprozess von Approximanten würden dadurch allerdings einzelne Atome verloren gehen, während andere hinzu kommen, wie in Abbildung 3.3 gezeigt. Zur Beschreibung von ortsabhängigen phasonischen Verschiebungen werden also neue Atomflächen benötigt, die so gewählt sein müssen, dass sie bei der Projektion $\pi_{\text{approx}}^{\perp}$ aufeinanderpassen. Im Spezialfall eines hyperkubischen Gitters mit Atomflächen der Gestalt $\mathcal{A} = \pi^{\perp} W^{\tilde{d}}$ als Projektion des Einheitswürfels, sind die neuen Atomflächen von der Form $\pi_{\text{approx}}^{\perp} W^{\tilde{d}}$.

Dieses Vorgehen lässt sich verallgemeinern: Verwende statt der Atomflächen \tilde{d} -dimensionale Atombereiche $\mathcal{B} \subset E^{\parallel} \oplus E^{\perp}$, für die die Bedingung $\mathcal{A} = \pi^{\perp} \mathcal{B}$ erfüllt ist, und fixiere die Atombereiche an je einem Hyperraumpunkt, dem Fixierpunkt des Atombereichs. Als Fixierpunkt kann zum Beispiel der Mittelpunkt oder ein Eckpunkt des Atombereichs verwendet werden. Die Menge aller Atombereiche und Fixierpunkte besitzt die Translations-symmetrie des Hypergitters $\tilde{\Gamma}$. Die Konstruktion eines Quasikristalls oder Approximanten mit der gescherten Schnittebene \mathcal{E}^{\parallel} erfolgt nun folgendermaßen:

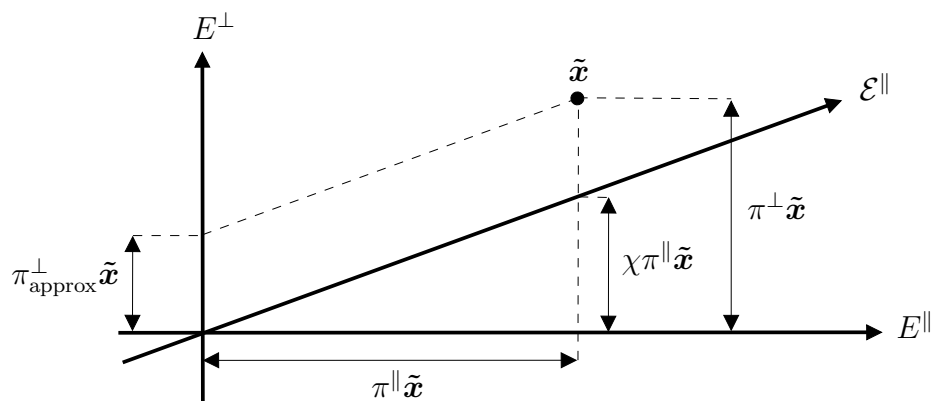


Abbildung 3.1: Die Wirkung der Projektionen π^\parallel , π^\perp und $\pi_{\text{approx}}^\perp$ und der Schermatrix χ auf einen beliebigen Punkt \mathbf{x} .

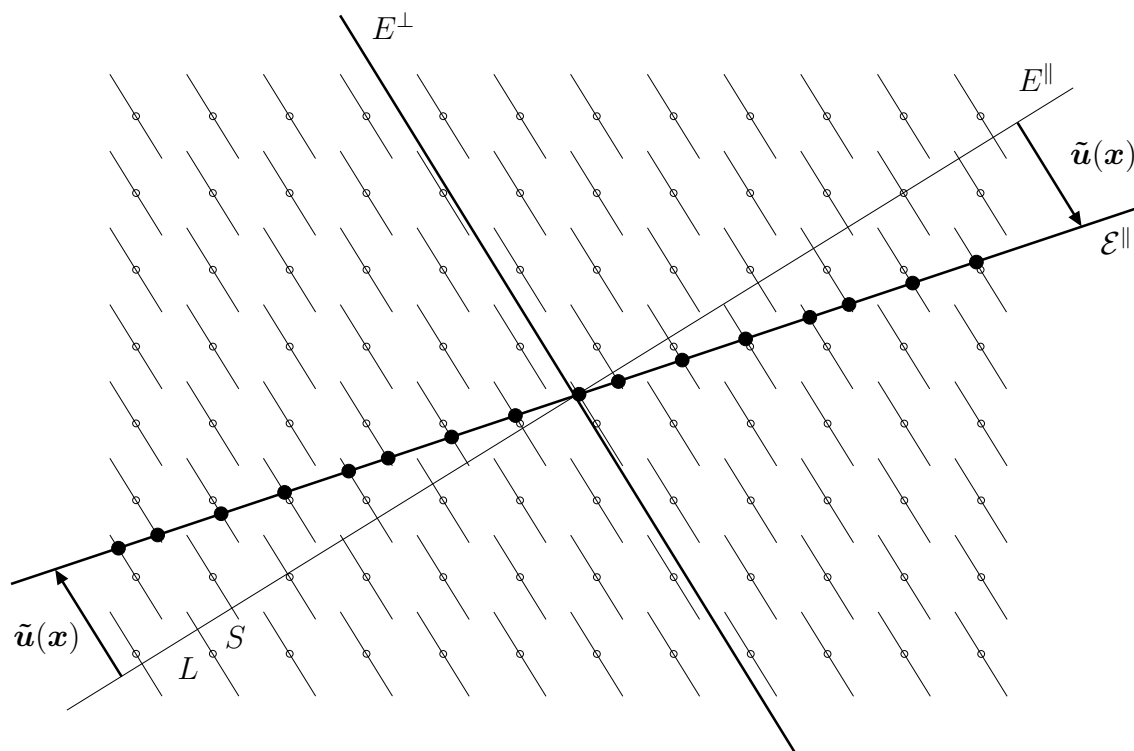


Abbildung 3.2: Die Schritzebene von Approximanten entsteht aus E^\parallel durch die lineare Verschiebung $\tilde{u}(\mathbf{x})$. Die Abbildung zeigt einen Approximanten der Fibonacci-Kette. Die neuen Atomflächen entstehen als Projektion des Einheitsquadrats mit $\pi_{\text{approx}}^\perp$. Sie sind etwas kleiner als die alten.

- (i) Bestimme diejenigen Atombereiche, die von \mathcal{E}^\parallel geschnitten werden.
- (ii) Projiziere für diese Atombereiche die Fixierpunkte mit π^\parallel auf die ungescherte Schnittebene E^\parallel des dazugehörigen Quasikristalls.

Analog wie beim Formalismus der atomaren Hyperflächen kann pro Elementarzelle des Quasikristalls eine feste Anzahl $\mathcal{B}_1, \dots, \mathcal{B}_n$ von Atombereichen pro Elementarzelle auftreten. Die Menge aller Atombereiche entspricht dann den Translaten $\{\tilde{\Gamma}\mathcal{B}_1, \dots, \tilde{\Gamma}\mathcal{B}_n\}$. Im einfachsten Fall wählt man als Atombereiche Elementarzellen $Z_{\tilde{\Gamma}}$ des Hypergitters, im Fall des hyperkubischen Gitters $\mathbb{Z}^{\tilde{d}}$ ist das der \tilde{d} -dimensionale Einheitswürfel $W^{\tilde{d}} = [0, 1)^{\tilde{d}}$, siehe Abbildung 3.4. Es ist möglich, für ein gegebenes Quasikristall-Modellsystem aus den Atomflächen die passenden Atombereiche und Fixierpunkte zu berechnen.

3.5 Approximanten ikosaedrischer Quasikristalle

Echt dreidimensionale Quasikristalle besitzen als verallgemeinerte Punktgruppe $P_{\tilde{\rho}}^\parallel$ eine der Ikosaedergruppen Y und Y_h . Die Punktsymmetriegruppe $P_{\tilde{\Gamma}}$ des Hypergitters enthält daher eine \mathbb{Z} -Darstellung einer Ikosaedergruppe, in deren Zerlegung eine dreidimensionale irreduzible \mathbb{R} -Darstellung vorkommen muss. Darstellungen, die diese Eigenschaften erfüllen, sind sechsdimensional. (Für nähere Erläuterungen zu den Ikosaedergruppen siehe Anhang B.) Das hyperkubische Gitter $P_6 = \mathbb{Z}^6$ enthält als Untergruppe die Darstellung $D_{2u}^{(3)} \oplus D_{3u}^{(3)}$ von Y_h . Durch den Projektions- oder Schnittformalismus wird $P_{\tilde{\Gamma}}$ je nach Wahl der Schnittebene auf $P_{\tilde{\rho}}^\parallel = D_{2u}^{(3)} \cong Y_h$ beziehungsweise $P_{\tilde{\rho}}^\parallel = D_{3u}^{(3)} \cong Y_h$ eingeschränkt. Legt man die Schnittebene wie in Abschnitt 2.5, so liegt die Darstellung $D_{2u}^{(3)}$ vor, und die verallgemeinerte Punktgruppe wird erzeugt von den Matrizen

$$\begin{aligned}
 a &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, & b &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \\
 c &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, & & (3.5)
 \end{aligned}$$

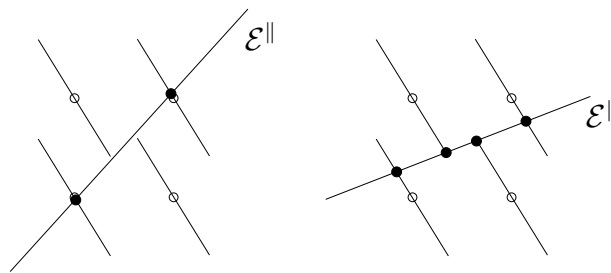


Abbildung 3.3: Verwendet man bei Orientierungsänderung der Schnittfläche dieselben Atomflächen, so kann es passieren, dass in der Nähe eines Flips Atome verloren gehen, da die \mathcal{E}^{\parallel} zwischen zwei Atomflächen hindurchläuft (links), oder Atome hinzukommen, da \mathcal{E}^{\parallel} beide benachbarten Atomflächen schneidet (rechts).

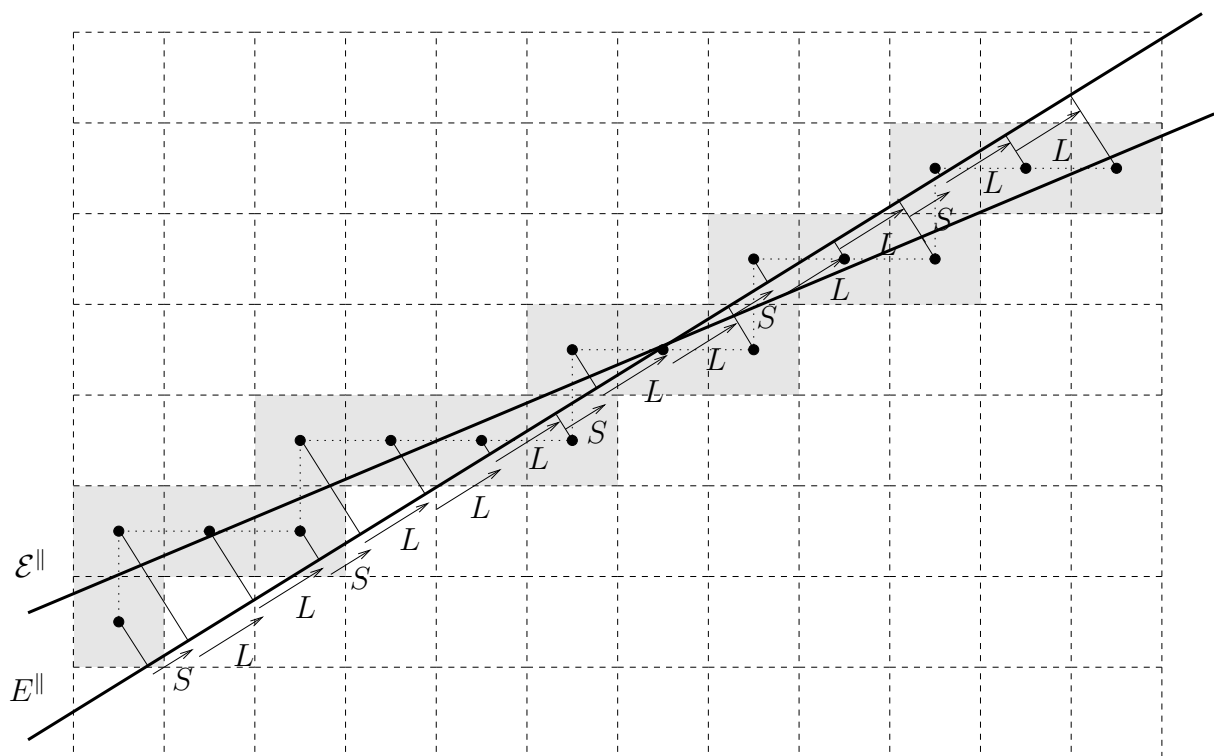


Abbildung 3.4: Erzeugung eines Approximanten der Fibonacci-Kette mit den Atombereichen W^2 und ihren Mittelpunkten als Fixierpunkten.

die E^{\parallel} invariant lassen und die allgemeinen Relationen $a^5 = b^2 = (ab)^3 = c^2 = 1$, $ac = ca$ und $bc = cb$ erfüllen. Die Operation der Matrizen im physikalischen Raum kann man sich auch anhand von Abbildung 2.6 auf Seite 27 klar machen: Die Matrix a ist eine 72° -Drehung um die Achse, die durch 1 verläuft, b eine 180° -Drehung um die Achse, die durch den Mittelpunkt der Strecke 12 verläuft und c die Inversion. Als Projektionsmatrizen werden wie in (2.8) die der fünfzähligen Drehung a angepaßten Matrizen verwendet:

$$\begin{aligned} \pi^{\parallel} &= \sqrt{\frac{2}{5}} \begin{pmatrix} 0 & \cos(2\pi\frac{0}{5}) & \cos(2\pi\frac{1}{5}) & \sin(2\pi\frac{2}{5}) & \cos(2\pi\frac{4}{5}) & -\cos(2\pi\frac{3}{5}) \\ \frac{1}{2}\sqrt{5} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & \sin(2\pi\frac{0}{5}) & \sin(2\pi\frac{1}{5}) & \sin(2\pi\frac{2}{5}) & \sin(2\pi\frac{4}{5}) & -\sin(2\pi\frac{3}{5}) \end{pmatrix}, \\ \pi^{\perp} &= \sqrt{\frac{2}{5}} \begin{pmatrix} 0 & \cos(2\pi\frac{0}{5}) & \cos(2\pi\frac{2}{5}) & \sin(2\pi\frac{4}{5}) & \cos(2\pi\frac{3}{5}) & -\cos(2\pi\frac{1}{5}) \\ -\frac{1}{2}\sqrt{5} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & \sin(2\pi\frac{0}{5}) & \sin(2\pi\frac{2}{5}) & \sin(2\pi\frac{8}{5}) & \sin(2\pi\frac{3}{5}) & -\sin(2\pi\frac{1}{5}) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Zur Konstruktion von Approximanten des ikosaedrischen Quasikristalls sind generell beliebige Scherungen möglich. Experimentell stellt man aber fest, dass sie meist so erfolgen, dass Teile der verallgemeinerten Punktgruppe erhalten bleiben. Im folgenden spielen zwei Arten von Approximanten eine Rolle:

- (i) Zweidimensional quasiperiodische Approximanten, die in einer Ebene quasiperiodisch mit verallgemeinerter fünfzähliger Symmetrie sind und in der Richtung senkrecht dazu periodisch.
- (ii) Periodische Approximanten, die sich von den quasiperiodischen Approximanten nur in der Ebene, in der die Quasiperiodizität auftritt, unterscheiden und in dieser Ebene eine verallgemeinerte Spiegelsymmetrie aus der Ikosaedergruppe erhalten.

Ein Approximant (ii)-ter Art approximiert einen Approximanten (i)-ter Art. Eine Approximant (i)-ter Art kann als Zwischenform beim Übergang von einer ikosaedrischen zu einer periodischen Struktur angesehen werden.

3.5.1 Approximanten (i)-ter Art

Bei der Scherung der Schnittebene zur Konstruktion von Approximanten (i)-ter Art muss eine verallgemeinerte fünfzählige Symmetrie erhalten bleiben. Dies sei die Symmetrie, die durch die Matrix a bestimmt ist.

Satz 3.9. *Die Schermatrix eines Approximanten (i)-ter Art, der die verallgemeinerte fünfzählige Symmetrie a besitzt, hat bei Verwendung der Projektionsmatrizen (3.6) mit*

den Scherparametern p_y und q_y folgende Gestalt:

$$\chi = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\tau \frac{p_y - 2\tau q_y}{\tau p_y + 2q_y} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{mit } p_y, q_y \in \mathbb{Z} \text{ teilerfremd.} \quad (3.7)$$

Beweis. Die Matrix a hat zwei rational invariante Unterräume U_1 und U_2 . Der Unterraum U_1 ist erzeugt von $(1, 0, 0, 0, 0, 0)$ und $(0, 1, 1, 1, 1, -1)$. Beide Unterräume zerfallen weiter in je zwei reell invariante Unterräume. Der zweidimensionale Raum U_1 ist die direkte Summe der beiden orthogonalen Geraden $U_1^{\parallel} = U_1 \cap E^{\parallel}$ und $U_1^{\perp} = U_1 \cap E^{\perp}$. Der vierdimensionale Raum U_2 ist die direkte Summe der beiden orthogonalen Ebenen $U_2^{\parallel} = U_2 \cap E^{\parallel}$ und $U_2^{\perp} = U_2 \cap E^{\perp}$. In den Ebenen operiert a als Drehung, in den Geraden als Identität. Um die Fünfzähligkeit beizubehalten, muss a auch die gescherte Schnittebene \mathcal{E}^{\parallel} invariant lassen. Diese besteht daher aus U_2^{\parallel} und einem eindimensionalen Unterraum aus U_1 , erzeugt von einem Vektor der Form $(p_y - q_y, q_y, q_y, q_y, q_y, -q_y)$ mit den Koeffizienten $p_y - q_y$ und q_y in der oben angegebenen Basis. Die Scherung spielt sich also vollständig im Raum U_1 ab. Die Projektionsmatrizen in (3.6) sind so gewählt, dass der Vektor in der zweiten Zeile (y -Richtung im Parallelraum) jeweils U_1^{\parallel} beziehungsweise U_1^{\perp} erzeugt und die Vektoren der ersten und dritten Zeile U_2^{\parallel} beziehungsweise U_2^{\perp} . Geschert wird also der Vektor in der mittleren Zeile von E^{\parallel} in Richtung des Vektors in der mittleren Zeile von E^{\perp} . Somit hat χ nur an der mittleren Position einen Eintrag ungleich Null. Eine Basis von \mathcal{E}^{\parallel} ist gegeben durch die Basismatrix

$$A = \begin{pmatrix} 0 & p_y - q_y & 0 \\ \cos(2\pi \frac{0}{5}) & q_y & \sin(2\pi \frac{0}{5}) \\ \cos(2\pi \frac{1}{5}) & q_y & \sin(2\pi \frac{1}{5}) \\ \cos(2\pi \frac{2}{5}) & q_y & \sin(2\pi \frac{2}{5}) \\ \cos(2\pi \frac{4}{5}) & q_y & \sin(2\pi \frac{4}{5}) \\ -\cos(2\pi \frac{3}{5}) & -q_y & -\sin(2\pi \frac{3}{5}) \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Damit der Approximant senkrecht zur fünfzähligen Achse periodisch ist, müssen die Scherparameter p_y und q_y ganzzahlig sein. Mit Gleichung (3.4) erhält man das obige Ergebnis. \square

Damit die Scherung klein bleibt, müssen die Einträge von χ klein sein: $\frac{p_y}{q_y} \approx 2\tau$. Die Folgen $\frac{F_{n+1}}{F_n}$ und $\frac{3F_n + F_{n-1}}{3F_{n-1} + F_{n-2}} = \frac{F_{n+1} + 2F_n}{2F_{n+1} - F_n}$ konvergieren gegen τ und bilden die besten approximierenden Brüche (Anhang C) und mögliche Werte für $\frac{1}{2} \frac{p_y}{q_y}$. Beachtet man Satz 2.5, so wird im ersten Fall

$$\chi_{22} = -\tau \frac{p_y - 2\tau q_y}{\tau p_y + 2q_y} = -\tau \frac{F_{n+1} - \tau F_n}{\tau F_{n+1} + F_n} = -(-1)^n \tau^{-2n} \quad (3.9)$$

und analog im zweiten Fall $\chi_{22} = (-1)^n \tau^{-2n}$. Mögliche Einträge in der Schermatrix sind also $\chi_{22} = \pm \tau^{-2n}$, $n \in \mathbb{Z}$. Die Periodenlänge senkrecht zur fünfzähligen Achse ist

$$\begin{aligned} a_y = \|\pi^\parallel(p_y - q_y, q_y, q_y, q_y, q_y, -q_y)\|_{d^\parallel} &= \left| \sqrt{2} \left(\frac{1}{2} p_y + \frac{1}{\tau} q_y \right) \right| \\ &= \begin{cases} \sqrt{2} \tau^n & \text{im ersten Fall,} \\ \sqrt{2} \sqrt{5} \tau^n & \text{im zweiten Fall.} \end{cases} \end{aligned} \quad (3.10)$$

3.5.2 Approximanten (ii)-ter Art

Beim Übergang vom ikosaedrischen Quaskristall zum fünfzähligen Approximanten (i)-ter Art spielt sich die Umordnung im physikalischen Raum parallel zur y -Achse ab, beim weiteren Übergang zum Approximanten (ii)-ter Art senkrecht dazu. Dabei wird eine verallgemeinerte Spiegelsymmetrie parallel zur y -Achse beibehalten. Dies ist die Spiegelung an der Ebene senkrecht zur z -Achse, gegeben im Hyperraum durch (zur Veranschaulichung siehe Abbildung 2.6 rechts):

$$S_z = a^3 b a^2 b a^3 b c = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Satz 3.10. *Die Schermatrix eines Approximanten (ii)-ter Art, der die verallgemeinerte Spiegelsymmetrie S_z besitzt und aus einem Approximanten (i)-ter Art durch Umordnung in der Ebene senkrecht zur y -Achse entsteht, hat bei Verwendung der Projektionsmatrizen (3.6) mit den Scherparametern p_i und q_i folgende Gestalt:*

$$\chi = \begin{pmatrix} -\tau \frac{p_x - \tau q_x}{p_x \tau + q_x} & 0 & 0 \\ 0 & -\tau \frac{p_y - 2\tau q_y}{p_y \tau + 2q_y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{p_z - \tau q_z}{p_z \tau + q_z} \end{pmatrix} \quad \text{mit } p_i, q_i \in \mathbb{Z} \text{ teilerfremd.} \quad (3.12)$$

Beweis. Nach Voraussetzung liegt $(p_y - q_y, q_y, q_y, q_y, q_y, -q_y)$ in der Schnittebene. Auf diesem Vektor stehen die unter S_z invarianten Unterräume U_1 und U_2 senkrecht, wobei U_1 erzeugt wird von $(0, 2, 0, -1, 0, 1)$ und $(0, 2, -1, 0, -1, 0)$ und U_2 von $(0, 0, 1, 0, -1, 0)$ und $(0, 0, 0, 1, 0, 1)$. Auf U_2 operiert s als Spiegelung, auf U_1 als Identität. Damit die Schnittebene invariant unter s ist, muss je ein Vektor aus U_1 und aus U_2 in ihr liegen. Die Basismatrix

von \mathcal{E}^{\parallel} ist

$$A = \begin{pmatrix} 0 & p_y - q_y & 0 \\ 2q_x & q_y & 0 \\ p_x - q_x & q_y & p_z \\ -p_x & q_y & q_z \\ p_x - q_x & q_y & -p_z \\ p_x & -q_y & q_z \end{pmatrix}. \quad (3.13)$$

Wegen der Periodizität müssen die Scherparameter p_i und q_i ganzzahlig sein. Mit Gleichung (3.4) folgt das obige Ergebnis. \square

Gute approximierende Brüche für τ sind gegeben durch die Folgen $\frac{F_{n+1}}{F_n}$ und $\frac{F_{n+1}+2F_n}{2F_{n+1}-F_n}$. Wie im vorherigen Abschnitt erhält man dann die spezielle Form der Schermatrix:

$$\chi = \begin{pmatrix} \mp(-1)^{n_x} \tau^{-2n_x} & 0 & 0 \\ 0 & \mp(-1)^{n_y} \tau^{-2n_y} & 0 \\ 0 & 0 & \mp(-\tau)(-1)^{n_z} \tau^{-2n_z} \end{pmatrix} \quad \text{mit } n_i \in \mathbb{Z}. \quad (3.14)$$

Das Pluszeichen gilt für Approximanten der ersten Folge, das Minuszeichen für Approximanten der zweiten Folge. Die Gitterkonstanten (Periodenlängen in Richtung der Koordinatenachsen) sind in der allgemeinen Form

$$a_i = \sqrt{2} \begin{pmatrix} |p_x + \frac{1}{\tau} q_x| \\ |\frac{1}{2} p_y + \frac{1}{\tau} q_y| \\ \sqrt{\frac{1}{5}(\tau + 2)} |p_z + \frac{1}{\tau} q_z| \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

und speziell für die beiden obigen Folgen

$$a_i = \sqrt{2} \begin{pmatrix} \tau^{n_x} \\ \tau^{n_y} \\ \sqrt{\frac{1}{5}(\tau + 2)} \tau^{n_z} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad a_i = \sqrt{2} \sqrt{5} \begin{pmatrix} \tau^{n_x} \\ \tau^{n_y} \\ \sqrt{\frac{1}{5}(\tau + 2)} \tau^{n_z} \end{pmatrix}. \quad (3.16)$$

3.5.3 Zehnzählige Symmetrie und Summengitter

Die experimentell gefundenen Approximanten ikosaedrischer Quasikristalle, speziell die Gitterkonstanten und die Position und Anordnung größerer Atomcluster lassen sich mit dem sechsdimensionalen kubischen Hypergitter nicht exakt erklären, wie im folgenden Kapitel gezeigt wird. Zudem stimmen die verallgemeinerten Punktgruppen realer Strukturen nicht mit der aus dem Modell bestimmten Gruppe überein:

- (i) Die Approximanten (i)-ter Art besitzen eine verallgemeinerte fünfzählige Symmetrie. Die experimentell gefundenen zweidimensional quasiperiodischen Strukturen besitzen jedoch eine verallgemeinerte zehnzählige Symmetrie. Aus diesem Grund werden diese auch dekadonale Quasikristalle genannt.
- (ii) Die Approximanten (ii)-ter Art besitzen eine verallgemeinerte Spiegelsymmetrie senkrecht zur z -Achse. Die experimentell gefundenen periodischen Approximanten besitzen allerdings drei senkrecht aufeinander stehende verallgemeinerte Spiegelsymmetrien.

Die Spiegelungen senkrecht zu den Koordinatenachsen in E^{\parallel} sind im Hyperraum gegeben durch die Matrizen

$$S_x = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -3 & 2 & 2 & 2 & -2 \\ 0 & 2 & 2 & 2 & -3 & -2 \\ 0 & 2 & 2 & 2 & 2 & 3 \\ 0 & 2 & -3 & 2 & 2 & -2 \\ 0 & -2 & -2 & 3 & -2 & 2 \end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & -2 & -2 & -2 & 2 \\ 0 & -2 & 3 & -2 & -2 & 2 \\ 0 & -2 & -2 & 3 & -2 & 2 \\ 0 & -2 & -2 & -2 & 3 & 2 \\ 0 & 2 & 2 & 2 & 2 & 3 \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

und die Matrix S_z aus (3.11), für die gilt: $S_x S_y = -S_z$. Es bietet sich daher an, statt dem Hypergitter $\tilde{\Gamma}$, das Summengitter oder DSC-Gitter [13] $\tilde{\Gamma}_S = \tilde{\Gamma} \cup S_y \tilde{\Gamma}$ zu verwenden. Das Summengitter ist invariant unter einer Ikosaedergruppe und zusätzlich unter den Spiegelungen S_x und S_y . Es besitzt die zehnzählige Symmetrie

$$D = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 2 & 2 & 2 & 3 \\ 0 & 2 & 2 & 2 & -3 & -2 \\ 0 & -3 & 2 & 2 & 2 & -2 \\ 0 & 2 & 2 & -3 & 2 & -2 \\ 0 & -2 & 3 & -2 & -2 & 2 \end{pmatrix}, \quad \text{mit } D^2 = a. \quad (3.18)$$

Das Untergitter, das auf dem invarianten Unterraum U der Drehung D liegt, wird aufgespannt von den beiden Vektoren $\tilde{u}_1 = (1, 0, 0, 0, 0, 0)$ und $\tilde{u}_2 = \frac{1}{5}(0, 1, 1, 1, 1, -1)$. Letzterer ist ein Vektor des Summengitters, da $(\mathbb{1} - S_y)(0, 1, 0, 0, 0, 0) = 2\tilde{u}_2$. Die Matrix S_y operiert auf U als Spiegelung. Liegt ein beliebiger Vektor $(p_y, q_y/5, q_y/5, q_y/5, q_y/5, -q_y/5)$ von U in \mathcal{E}^{\parallel} , so kann wie in Satz 3.9 die Schermatrix und daraus die Periodenlänge in y -Richtung berechnet werden. Für die Periodenlänge erhält man

$$a_y = \frac{1}{2}\sqrt{2} \left(p_y + \frac{1}{5}\sqrt{5}q_y \right). \quad (3.19)$$

Die Periodenlängen in den anderen Richtungen bleiben durch die Verwendung des Summengitters unverändert.

Kapitel 4

Al-Pd-Mn-Quasikristalle und deren Approximanten

Nachdem in den letzten Kapiteln die theoretischen Grundlagen zur Beschreibung der Struktur von Quasikristallen und Approximanten erläutert wurden, sollen diese nun am Beispiel verschiedener Phasen des Aluminium-Palladium-Mangan-Systems angewendet werden. Das Al-Pd-Mn-System zeichnet sich dadurch aus, dass es eine ikosaedrische Phase, zwei zwei-dimensional quasiperiodische dekagonale Phasen und eine Vielzahl periodischer Approximanten aufweist, was zu einem recht komplexen Phasendiagramm führt.

Um die Atompositionen in der ikosaedrischen Phase zu erklären, wurde von Boudard mit experimentellen Methoden ein Modell für die Atomflächen aufgestellt, das von Katz und Gratias theoretisch weiterentwickelt wurde. Im Modell ist der Quasikristall aufgebaut aus einem Gerüst aus ikosaedrischen Clustern, die allein einen Großteil der auftretenden Atome ausmachen. Unter Beschränkung auf die Anordnung der Atomcluster wurden Approximanten (i)-ter und (ii)-ter Art der ikosaedrischen Phase konstruiert und mit den experimentell gefundenen Strukturen verglichen. Dabei zeigt sich, dass sich mit der Theorie der Approximanten die experimentellen Phasen senkrecht zur verallgemeinerten zehnzähligen Achse sehr gut beschreiben lassen. Parallel zu dieser Achse unterscheiden sich jedoch Theorie und Experiment, hier scheint zusätzlich zur Scherung der Schnittebene ein weiterer Effekt eine Rolle zu spielen.

4.1 Phasendiagramm

In einem thermodynamischen System, das aus mehreren Elementen (den Komponenten) besteht, die nicht miteinander chemisch reagieren, können sich je nach Temperatur, Druck und Zusammensetzung unterschiedliche Phasen bilden. Hierbei versteht man unter einer Phase einen Bereich mit gleichen chemischen und physikalischen Eigenschaften und glei-

chem Gehalt der Komponenten. Feste Phasen sind zum Beispiel kristallin oder quasikristallin. Durch die Bestimmung der Phasengrenzen erhält man das Phasendiagramm des Systems.

Ein ternäres System, wie Al-Pd-Mn, besitzt bei konstantem Druck drei thermodynamische Variablen: die Temperatur und die Konzentrationen zweier Komponenten (die dritte ist dadurch festgelegt). Wird das Phasendiagramm dreidimensional dargestellt, dann sind Gebiete gleicher Phase durch Phasenflächen getrennt. Die Phasenfläche unterhalb der Phase, in der das System noch vollständig flüssig ist, wird Liquidusfläche genannt. Je Phase, die unterhalb der Liquidusfläche entsteht, wird diese in Phasenbereiche eingeteilt, die durch Linien getrennt sind. Die Linien heißen entsprechend der dabei auftretenden Phasenübergänge eutektisch oder peritektisch. Die Projektion der Liquidusfläche und ihrer eutektischen/peritektischen Linien in Richtung der Temperaturachse eignet sich zu Veranschaulichung des Erstarrungsvorgangs (zu weiteren Details siehe Abschnitt 5.7 in [37]).

Die in der Literatur vorhandenen Phasendiagramme des Al-Pd-Mn-Systems [2, 35, 36, 55] unterscheiden sich in Details voneinander, was an der Vielzahl der teilweise sehr ähnlichen Phasen liegt. Es sind nicht alle auftretenden Phasen identifiziert und die Umwandlungsprozesse zwischen ihnen sind nicht gut bekannt. Abbildung 4.1 zeigt die Projektion der Liquidusfläche von Al-Pd-Mn im Bereich hoher Al Konzentration, in dem quasiperiodische Phasen auftreten. Eingezeichnet sind die ikosaedrische Phase, die periodischen Approximanten T, R, ξ , ξ' und einige meist binären Phasen. Die Phasen sind voneinander getrennt durch Linien mit Pfeilen, die in Richtung fallender Temperatur zeigen. Ein einzelner Pfeil markiert eine eutektische Linie, ein Doppelpfeil eine peritektische Linie.

4.2 Die ikosaedrische Phase

Das Al-Pd-Mn-System ist das erste ternäre System, in dem sowohl eine thermodynamisch stabile ikosaedrische Phase, als auch eine stabile dekagonale Phase entdeckt wurde. Die ikosaedrische Phase wurde erstmals in [89] beschrieben. Wie Abbildung 4.1 zeigt, entsteht sie beim Abkühlen aus der Schmelze mit Konzentration $\text{Al}_{68-69.5}\text{Pd}_{20.3-23.2}\text{Mn}_{8-10.2}$. Zur Beschreibung der Struktur mit Hilfe der Konstruktionsverfahren aus Kapitel 2 müssen die Atomflächen der Elemente angegeben werden. Aus Daten von Röntgen- und Neutronenstreuexperimenten kann geschlossen werden, dass das Hypergitter kubisch flächenzentriert (F_6) ist mit Gitterkonstante $a = 0.645$ nm. Die Atomflächen sitzen auf:

- (i) geraden Gitterpunkten $\{(z_1, \dots, z_6) \mid \sum_i z_i = 0 \pmod{2}\}$, bezeichnet mit n_0 ,
- (ii) ungeraden Gitterpunkten $\{(z_1, \dots, z_6) \mid \sum_i z_i = 1 \pmod{2}\}$, bezeichnet mit n_1 ,
- (iii) geraden raumzentrierten Punkten $\{(\frac{1}{2} + z_1, \dots, \frac{1}{2} + z_6) \mid \sum_i z_i = 0 \pmod{2}\}$, bezeichnet mit bc_0 ,

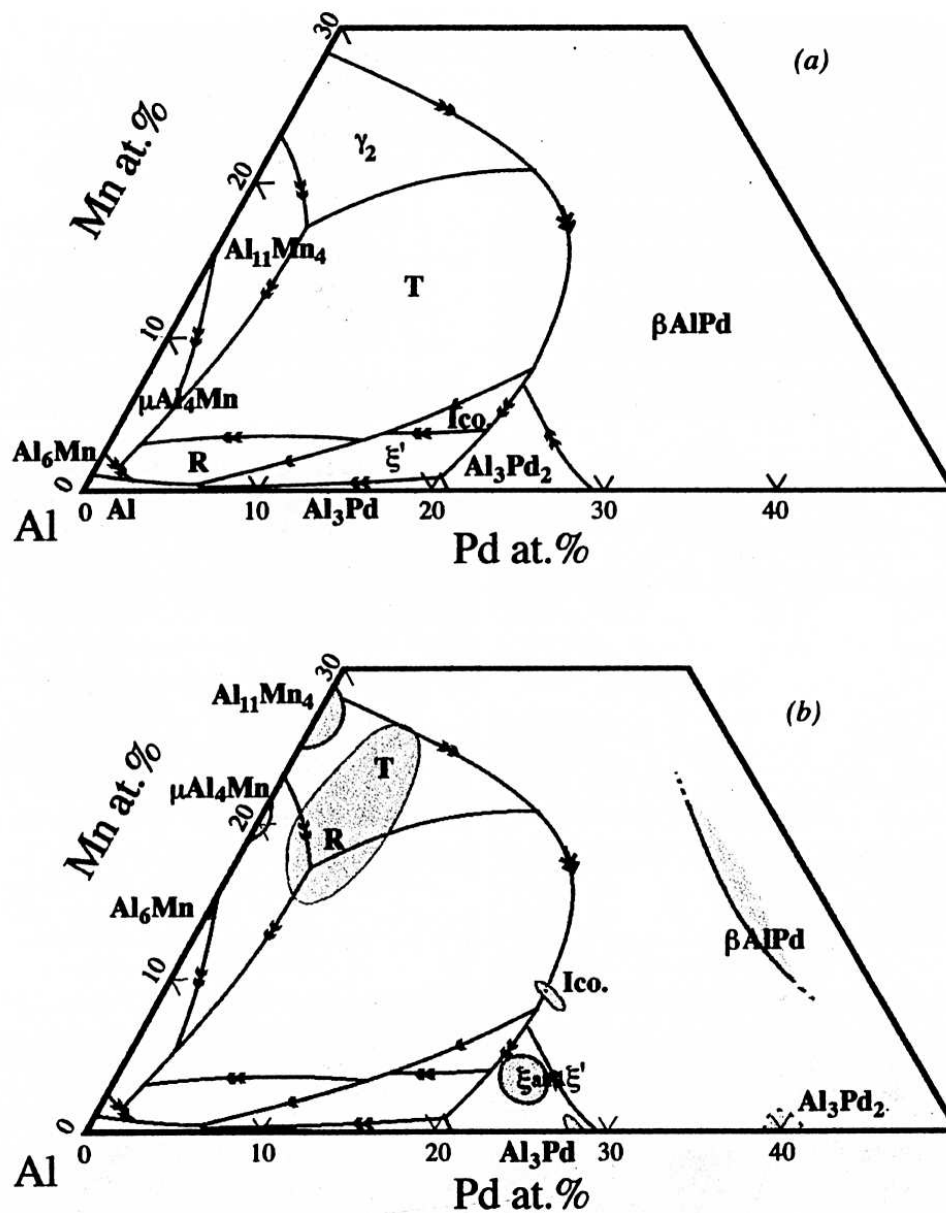


Abbildung 4.1: Projektion der Liquidusfläche im Al-reichen Bereich des Al-Pd-Mn-Systems (oben). Die markierten Bereiche begrenzen die Projektionen der Phasenbereiche der festen Phasen im Gleichgewicht (unten). [55]

- (iv) ungeraden raumzentrierten Punkten $\{(\frac{1}{2} + z_1, \dots, \frac{1}{2} + z_6) \mid \sum_i z_i = 1 \pmod{2}\}$, bezeichnet mit bc_1 .

Trotz großer Anstrengungen ist es aber noch nicht gelungen, ein Modell zu entwickeln, das mehr als 90% der Atome korrekt erklärt, da es keine einfache Methode gibt, die Form der Atomflächen aus dem Beugungsbild zu bestimmen, und andere experimentelle Untersuchungen aufgrund fehlender Translationssymmetrie schwierig sind. In erster Näherung können die Atomflächen durch Kugeln in E^\perp angenähert werden [14]. Zur vollständigen Beschreibung werden Bereiche der Atomflächen entsprechend der chemischen Zusammensetzung des Quasikristalls Elementen zugeordnet:

- (i) ein Mn-Kern (äußerer Radius $0.52a$, wobei a die Gitterkonstante des sechsdimensionalen Gitters ist) und eine Al-Schale (Radius $1.64a$) auf n_0 ,
- (ii) ein Mn-Kern (Radius $0.83a$), eine Pd-Zwischenschale (Radius $1.26a$) und eine äußere Al-Schale (Radius $1.55a$) auf n_1 ,
- (iii) eine Pd-Vollkugel (Radius $0.71a$) auf bc_0 ,
- (iv) eine kleine (Radius $0.3a$) oder nicht vorhandene Al-Vollkugel auf bc_1 .

Dieses Modell erzeugt allerdings keine physikalischen Quasikristalle im Sinne von Definition 2.2, da die Atomflächen im Hyperraum nicht aufeinanderpassen. Ein anderes Modell, das zu einem physikalischen Quasikristall führt, stammt von Katz und Gratias [49]. Hierbei werden Variationen des Triakontaeders, der als Projektion des sechsdimensionalen Einheitswürfels entsteht, als Atomflächen verwendet:

- (i) ein um den Faktor τ vergrößertes Triakontaeder zentriert auf n_0 ,
- (ii) ein um den Faktor τ vergrößertes Triakontaeder mit abgeschnittenen Ecken zentriert auf n_1 ,
- (iii) ein um den Faktor τ verkleinertes Triakontaeder zentriert auf bc_0 ,
- (iv) keine Atomfläche auf bc_1 .

Dabei sind beim zweiten Triakontaeder die Ecken abgeschnitten, um unphysikalisch kurze Atomabstände zu vermeiden. Beachte, dass eine Vergrößerung oder Verkleinerung der Atomflächen um den Faktor τ aufgrund der Selbstähnlichkeit des kubisch flächenzentrierten Hypergitters (Abschnitt 2.6) möglich ist. Die Atomflächen sind Projektionen des mit M_{iko} beziehungsweise M_{iko}^{-1} transformierten Einheitswürfels.

Wird ein Atom durch eine kleine Atomfläche auf bc_0 ausgewählt, so werden auch einige der umliegenden Atome mit größeren Atomflächen auf n_0 und n_1 mit ausgewählt, da

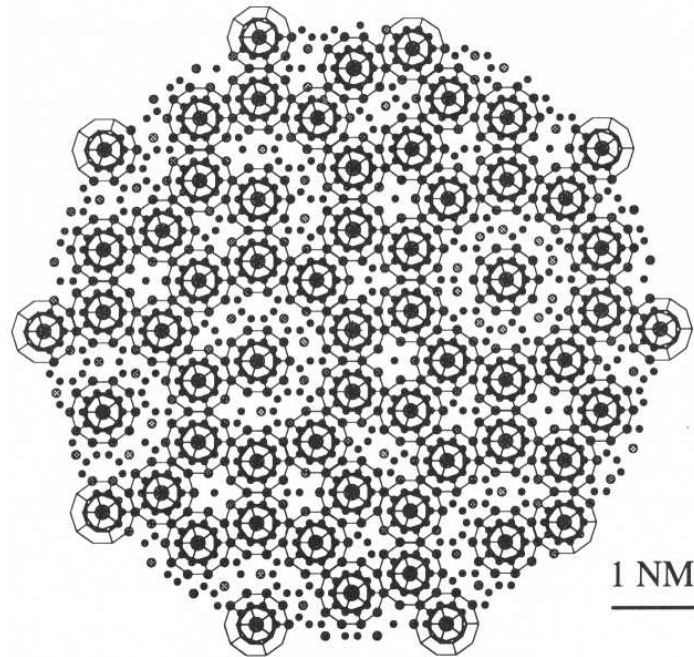


Abbildung 4.2: Ein Schnitt durch den ikosaedrischen Quasikristall, erzeugt mit den Atomflächen von Katz. Gezeigt ist eine vollbesetzte Ebene. Die Struktur kann grob beschrieben werden als ein Gerüst von bc_0 -Clustern, bestehend aus zwei Atomshalen. Die Cluster sind entweder isoliert, oder berühren sich auf einer Fläche ihrer äußeren Schalen. [49]

die Projektion π^\perp der kleinen Atomfläche vollständig in der Projektion einiger der großen Atomflächen liegt. bc_0 -Atome bilden daher die Mittelpunkte von ikosaedrischen Atomclustern und der Quasikristall kann als Anordnung dieser Cluster plus der Zwischenatome angesehen werden. Die Cluster liegen auf Ebenen parallel zur y -Achse. Die Ebenen haben als Grundstruktur alle dasselbe Tiling aus Clustern. Es ist jedoch unterschiedlich stark besetzt. Eine maximal besetzte Ebene ist in Abbildung 4.2 gezeigt. Sie wird im folgenden als vollbesetzte Ebene bezeichnet. Die Grundstruktur ist aufgebaut aus fünf verschiedenen Tiles: einem Pentagon (P), einem Nonagon (N), einem Dekagon (D) und einem U-Tile (U), siehe Abbildung 4.4. Da durch die Cluster allein ungefähr 80% aller Atome abgedeckt werden, reicht es für eine grobe Beschreibung der Struktur, die Positionen der Cluster zu bestimmen.

In Abbildung 4.3 sind die Clusterpositionen in fünf aufeinanderfolgenden Ebenen angeordnet. Der minimale Abstand zweier benachbarter Cluster entlang der eingezeichneten Linien beträgt $l_{1.6} = \frac{1}{5}\sqrt{10}\sqrt{\tau+2}a = 0.78$ nm. Außer der ersten Ebene rechts oben tauchen teilbesetzte Ebenen auf. Auch Approximanten sind aus voll- oder teilbesetzten Ebenen aufgebaut.

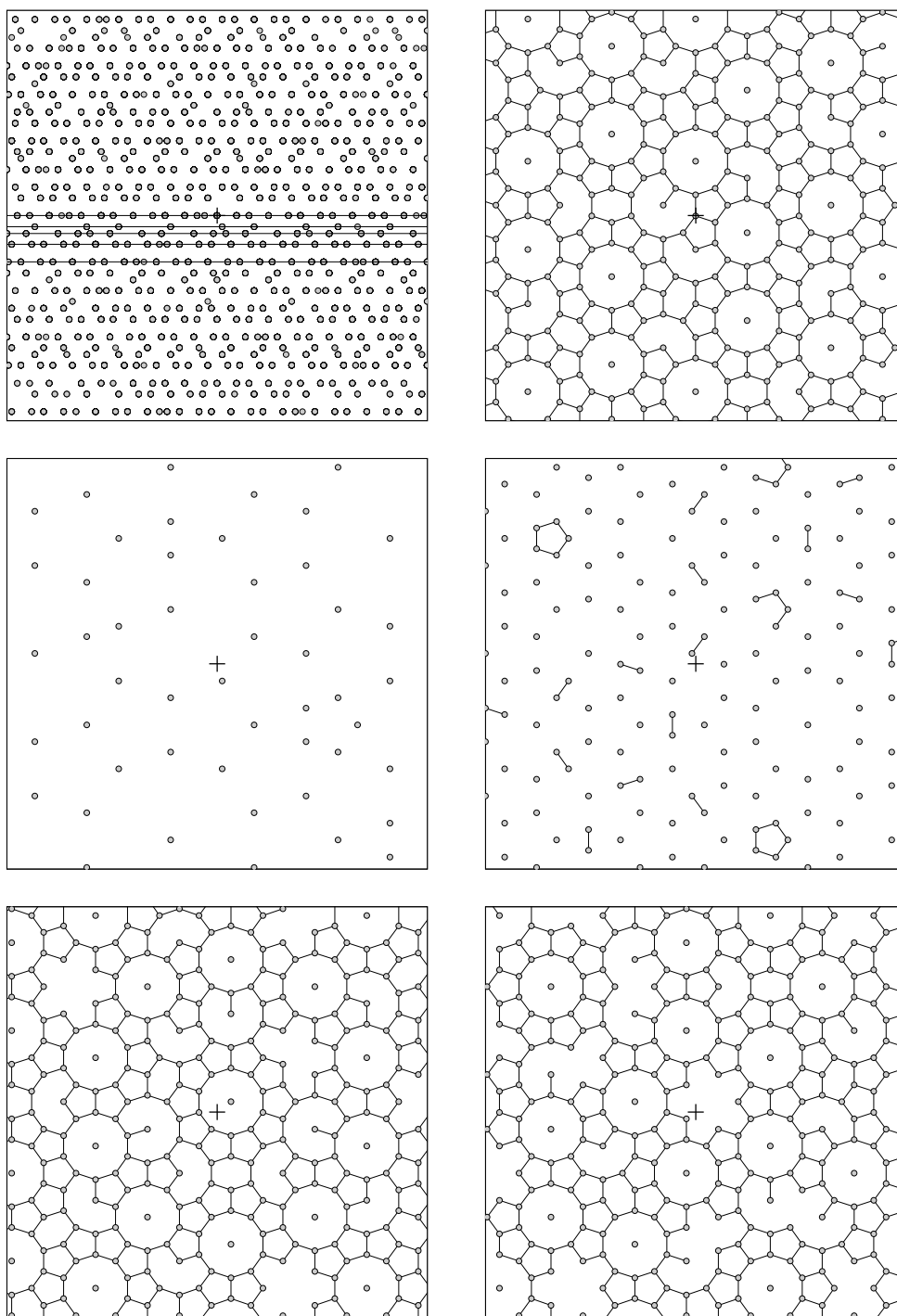


Abbildung 4.3: Clusterpositionen in fünf aufeinanderfolgenden Ebenen in der quasiperiodischen Phase. Sich berührende Cluster sind mit Linien verbunden. Das erste Bild zeigt die Lage der Ebenen senkrecht zur zweizähligen Achsen. Die Ebenen liegen bei: $y = 0.0$ nm, $y = -0.41$ nm, $y = -1.07$ nm und $y = -1.73$ nm.

Außer der hier behandelten ikosaedrischen Phase treten sogenannte modulierte Phasen auf. Dabei wird die ikosaedrische Phase, das heißt die Schnittfläche im Hyperraum, moduliert. Die Überstrukturen F2 [44] und F2_M [1] haben Modulationslängen von bis zu 29.5 nm.

4.3 Dekagonale Phasen

Dekagonale Phasen sind in einer Ebene quasiperiodisch mit verallgemeinerter zehnzähliger Symmetrie und periodisch senkrecht dazu. Sie können als Approximanten (i)-ter Art angesehen werden. Ihnen kann ein Scherparameter χ_{22} , wie in Abschnitt 3.5.1 gezeigt, zugeordnet werden. Sie sind ebenso wie die ikosaedrische Phase zu einem großen Teil aus bc₀-Clustern aufgebaut. Die theoretische Beschreibung beschränkt sich auf die Bestimmung der Clusterpositionen.

Dazu verwendet man ein F_6 -Gitter und als Atombereiche (siehe Abschnitt 3.4) sechsdimensionale um τ deflationierte Einheitswürfel $M_{\text{iko}}[0, 1]^6$. Diese sind mit den Atomflächen der bc₀-Cluster von Katz und Gratias verträglich. Für den Gridformalismus wären jedoch die Verwendung von nicht-deflationierten Einheitswürfeln einfacher. Hierzu kann man sich eines Tricks bedienen: Erzeugt man statt mit χ_{22} einen Approximanten mit $-\tau^2\chi_{22}$, dann vergrößert sich die Periodizität in y -Richtung von a_y auf τa_y . Werden gleichzeitig die Atombereiche um τ inflationiert, so erhält man wieder den ursprünglichen Approximanten.

Die Clusteranordnung in dekagonalen Phasen wird somit erzeugt mit dem F_6 -Gitter, den verschobenen Einheitswürfeln $[0, 1]^6$ als Atombereiche und dem Scherparameter $-\tau^2\chi_{22}$.

4.3.1 Die 1.6 nm dekagonale Phase

Eine dekagonale Phase mit einer Periodizität von $a_y \approx 1.6$ nm und der chemischen Zusammensetzung Al₇₅Pd₂₀Mn₅ wurde erstmals von Tsai [90] gefunden. Sie ist thermodynamisch nicht stabil und entsteht bei Abschreckung der Schmelze. Diese wird dazu auf einen schnell rotierenden kalten Zylinder gespritzt, wo sie mit Raten um 10^6 Ks⁻¹ abkühlt. Aufgrund der Herstellungsbedingungen ist die Qualität der so erhaltenen Quasikristalle allerdings nicht sehr gut.

Ein atomares Modell wurde entwickelt von Sun und Hiraga [86]. In diesem ist der dekagonale Quasikristall aufgebaut aus identischen 1.6 nm hohen Atomsäulen (Abbildung 4.5). Ihre Anordnung in der quasiperiodischen Ebene entspricht der Clusteranordnung in einer vollbesetzten Ebene der ikosaedrischen Phase. Dekagonale Quasikristalle können als Approximanten (i)-ter Art der ikosaedrischen Phase angesehen werden. Die Periodizität wird approximiert durch $\chi_{22} = -\tau^2$ in (3.9): $a_y = \sqrt{10}\tau a = 3.30$ nm, wobei sie durch Umordnung in y -Richtung auf 1.65 nm halbiert wird. Berechnet man damit die Clusteranordnung, so erhält man wie im Experiment die vollbesetzten Ebenen senkrecht zur y -Achse. Übereinanderliegende Ebenen sind gegeneinander verschoben, wohingegen sie im Experiment

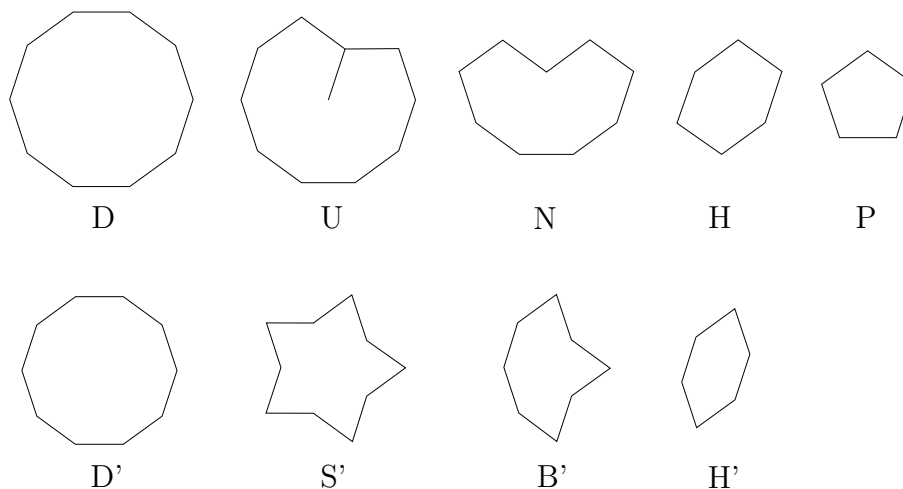


Abbildung 4.4: Bausteine der dekagonalen Tilings sind: Dekagon, U-Tile, Nonagon, Hexagon und Pentagon mit 0.78 nm Kantenlänge (oben), Dekagon, Stern, Boot und Hexagon mit 0.66 nm Kantenlänge (unten).

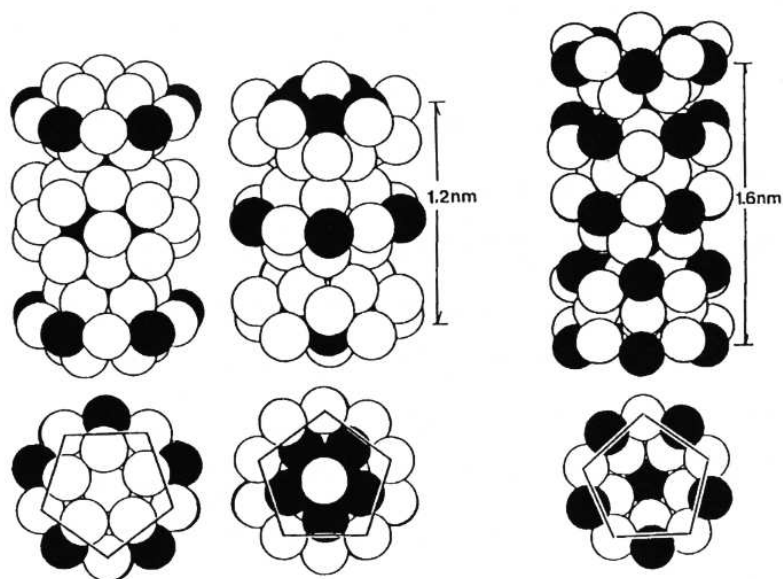


Abbildung 4.5: Schematische Darstellung der Atomsäulen mit 1.2 nm und 1.6 nm Periodizität. Diese bilden ein Grundgerüst der beiden dekagonalen Phasen. Die ausgefüllten Kreise entsprechen Pd oder Mn, die leeren Kreise Al. Darunter sind die Projektionen entlang der Symmetrieachse gezeigt. [86]

exakt identisch aufeinanderliegen. Die Anordnung der Ebenen in y -Richtung wird somit nicht korrekt wiedergegeben.

Alternativ kann das Summengitter aus Abschnitt 3.5.3 verwendet werden [53]. Mit den Scherparametern $p_y = 0$ und $q_y = 8$ ergibt sich aus (3.19) eine Periodizität von $a_y = \frac{4}{5}\sqrt{10}a = 1.63$ nm. Die Beschreibung mit Hilfe des Summengitters erklärt auch das Aufeinanderfolgen der Atomschichten besser: Im Experiment werden acht äquidistante Schichten gefunden.

4.3.2 Die 1.2 nm dekagonale Phase

Eine dekagonale Phase mit Periodizität $a_y \approx 1.2$ nm wurde von Beeli gefunden [7]. Sie ist bei 800°C thermodynamisch stabil und kann durch Aufheizen der ikosaedrischen Phase entstehen. Ein atomares Modell wurde entwickelt von Hiraga und Sun [41]. Analog zum 1.6 nm dekalagonalen Quaskristall ist sie aufgebaut aus identischen 1.2 nm hohen Atomsäulen.

Die Anordnung der Atomsäulen kann mit Hilfe der hochauflösenden Elektronenmikroskopie (HREM) beobachtet werden. Hierbei werden Elektronenwellen an dünnen Kristallfolien gestreut, wodurch ein Beugungsbild entsteht. Dieses wird über eine Elektronenlinse zu einem Strukturbild transformiert. Das Strukturbild entspricht der stark vergrößerten Streuamplitude des Quaskristalls. Bereiche mit identischer atomarer Umgebung werden im Strukturbild gleich dargestellt (Weitere Informationen zu HREM auch in Bezug auf Quaskristalle gibt es in [79].) In Abbildung 4.6 befinden sich helle Punkte an den Positionen der Atomsäulen. Diese sind meist in Dekagonen angeordnet. Die Anordnung der Dekagone wiederum hängt von der chemischen Zusammensetzung des Quaskristalls ab, die in einem weiten Bereich $\text{Al}_{68-70}\text{Pd}_{10-16}\text{Mn}_{16-20}$ variieren kann. Bei niedrigem Pd-Anteil und hohem Mn-Anteil treten weniger Dekagone auf.

Die Periodizität wird approximiert durch $\chi_{22} = -\tau^4$ in (3.9): $a_y = \sqrt{2}\tau^2 a = 2.39$ nm, wobei sie durch Umordnung in y -Richtung auf 1.19 nm halbiert wird. Damit lässt sich allerdings die Anordnung der Atomsäulen nicht gut erklären. Besser eignet sich $\chi_{22} = \tau^{-2}$. Berechnet man damit die Clusteranordnung, so erhält man eine kompliziertere Struktur wie beim 1.6 nm dekalagonalen Quaskristall, es tauchen teilbesetzte Ebenen auf. Zwei der teilbesetzten Ebenen bilden zusammen eine Doppelebene im Abstand $\frac{1}{5}\sqrt{10}a = 0.41$ nm, wie in Abbildung 4.7 oben links in Projektion gezeigt. Die großen Kreise und dicken Verbindungslinien gehören zur einen Ebene, die kleinen Kreise und dünnen Linien zur anderen. Die Kantenlänge der Linien beträgt wie beim ikosaedrischen Quaskristall 0.78 nm. Verbindet man die Cluster, die in der Projektion den kleinsten Abstand haben, so erhält man das Tiling oben rechts. Die eingezeichneten Verbindungen zwischen den Clustern besitzen ebenfalls eine Länge von 0.78 nm, verlaufen allerdings nicht senkrecht zur Beobachtungsrichtung. Ihre projizierte Länge beträgt nur $l_{1,2} = \frac{1}{5}\sqrt{10}\tau a = 0.66$ nm. Das entstehende Tiling ist aufgebaut aus achtzähligen Booten (B'), zehnzähligen Sternen (S') und sechszähligen

langgestreckten Hexagonen (H'). Ein Boot und zwei Hexagone bilden zusammen ein Dekagon (D'). In der Abbildung Mitte links ist das Innere der Dekagone entfernt. Das Tiling hat sehr starke Ähnlichkeit mit der HREM-Aufnahme des Quasikristalls bei hohem Pd-Anteil (Abbildung 4.6 unten). Bei niedrigerem Pd-Anteil scheinen überlappende Dekagone nicht stabil zu sein, denn sie werden wie in der Mitte rechts gezeigt in Boote und Hexagone zerlegt. Dabei können die Dekagone so zerlegt werden, dass die Überstruktur, die entsteht, wenn man die Mittelpunkte der Dekagone verbindet, einer um τ^3 inflationierten Version einer vollbesetzten Ebene entspricht (unten links). Die im Experiment beobachteten Quasikristalle besitzen allerdings eine zufällige Anordnung der Dekagone (unten rechts). Dieses Tiling beschreibt den Quasikristall bei niedrigem Pd-Anteil gut (Abbildung 4.6 oben). Die Anordnung der Dekagone ist auf eine langwellige Variation der phasonischen Verschiebung zurückzuführen, welche zu einer Umordnung der Dekagone führt.

Bei Verwendung des Summengitters mit den Scherparametern $p_y = 0$ und $q_y = 6$ ergibt (3.19) eine Periodizität von $a_y = \frac{3}{5}\sqrt{10}a = 1.22$ nm. Im Experiment werden sechs äquidistante Schichten beobachtet.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass die Clusteranordnung in den dekadagonalen Quasikristallen in Ebenen senkrecht zur y -Achse mit der Theorie der Approximanten gut erklärt werden kann, wenn man sie als Approximanten der ikosaedrischen Phase annimmt. Die korrekte Anordnung der Ebenen entlang der y -Achse erhält man jedoch damit nicht. Eine Möglichkeit zur Erklärung wäre die Verwendung des Summengitters. Es ist nicht klar, wie und mit welchen Atomflächen das Summengitter dekoriert werden muss. Eine exakte Theorie für den Aufbau senkrecht zur y -Achse gibt es bisher nicht.

4.3.3 Quasiperiodische Phasen der binären Systeme

In den binären Systemen Al-Mn und Al-Pd wurden ebenfalls quasiperiodische Phasen gefunden, die allerdings thermodynamisch metastabil sind und nur durch Abschrecken aus der Schmelze entstehen. Sie gehören zu den ersten experimentell gefundenen Quasikristallen überhaupt. Entdeckt wurde ein ikosaedrischer Al-Mn-Quasikristall [78], ein 1.2 nm dekadogonaler Al-Mn-Quasikristall [8], ein 1.6 nm dekadogonaler Al-Pd-Quasikristall [66] sowie ein eindimensionaler Al-Pd-Quasikristall [18], vergleichbar der Fibonacci-Kette. Die Strukturen der dekadagonalen binären Quasikristalle sind dabei ähnlich zu der des ternären Systems.

4.4 Periodische Phasen

Für die beiden dekadagonalen Quasikristalle wurde eine Vielzahl von stabilen oder metastabilen Approximanten entdeckt. Einige davon sind in Tabelle 4.1 zusammengefasst.

Von Sun und Hiraga wurden experimentelle Beobachtungen zur strukturellen Umordnung von dekadagonalen zu periodischen Phasen und umgekehrt durchgeführt [84,85]. Dabei wurde

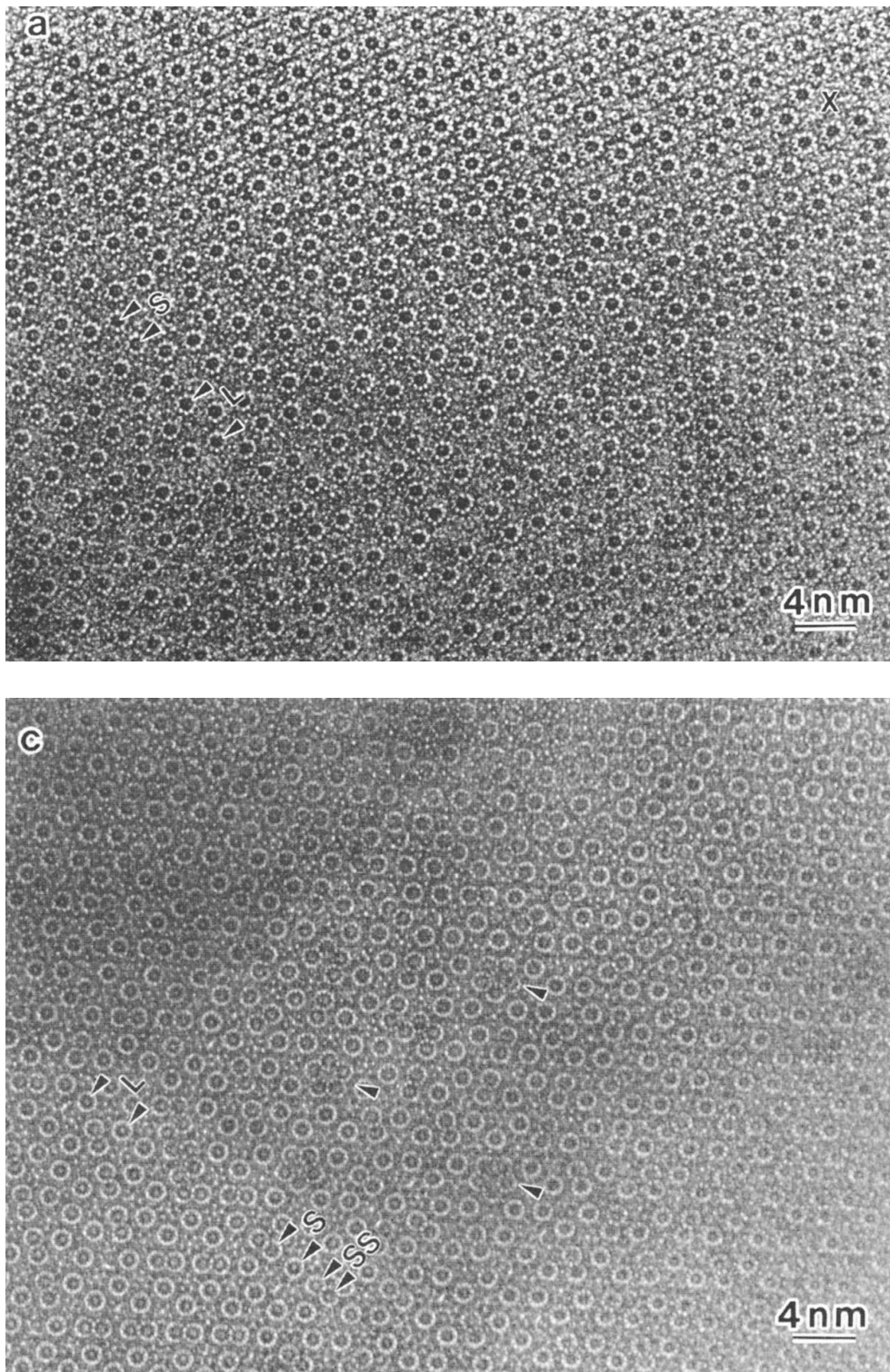


Abbildung 4.6: HREM-Aufnahmen der 1.2 nm dekalen Phase mit Zusammensetzung $\text{Al}_{70}\text{Pd}_{10}\text{Mn}_{20}$ (oben) und $\text{Al}_{68}\text{Pd}_{16}\text{Mn}_{16}$ (unten). Die hellen Ringe entsprechen den Dekagonalen aus Abbildung 4.7. [87]

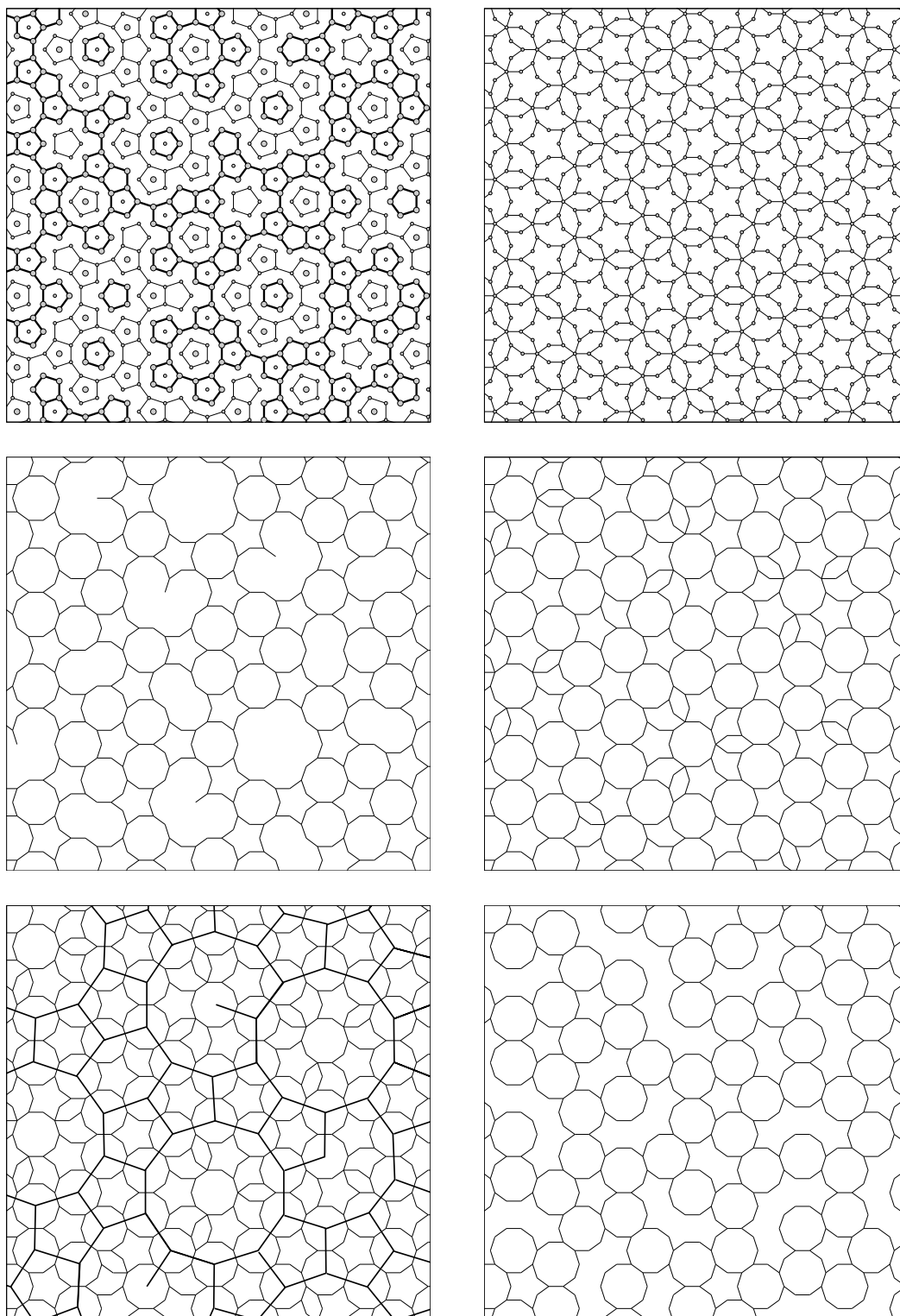


Abbildung 4.7: Positionen der Atomsäulen in der 1.2 nm dekadagonalen Phase. Erläuterungen siehe Text.

festgestellt, dass die Umordnung senkrecht zur verallgemeinerten zehnzähligen Achse des dekadagonalen Quasikristalls (y -Achse) stattfindet und die Atomsäulen auf andere Positionen verschoben werden. Die periodischen Approximanten können daher als Approximanten (ii)-ter Art angesehen werden, und ihnen kann eine Schermatrix und Scherparameter wie in Satz 3.10 zugeordnet werden. In der Tabelle sind diese Werte, sowie die Gitterparameter und die chemischen Zusammensetzungen angegeben, wobei letztere nur ungenau bestimmt sind und auch die Gitterkonstanten je nach Quelle etwas schwanken. Die mit (3.15) berechneten Gitterkonstanten stimmen gut mit den gemessenen überein.

Die aufgeführten Approximanten sind ternäre Approximanten der dekadagonalen Quasikristalle. Zusätzlich sind eine Vielzahl binärer Approximanten des Al-Mn- und Al-Pd-Systems bekannt, auf die hier allerdings nicht eingegangen wird. Erwähnt seien nur die Al_3Pd -Phase [67] und die Al_3Mn -Phase [40], die strukturell mit der ξ' -Phase beziehungsweise der T -Phase verwandt sind. Weitere sind in [55] tabelliert.

Die Clusteranordnung in den periodischen Phasen wird analog wie diejenige in den dekadagonalen Phasen erzeugt mit dem F_6 -Gitter, den verschobenen Einheitswürfeln $[0, 1]^6$ als Atombereiche und den Scherparametern $-\tau^2\chi_{11}$, $-\tau^2\chi_{22}$ und $-\tau^2\chi_{33}$.

4.4.1 Approximanten des 1.6 nm dekadagonalen Quasikristalls

Die Anordnung der Atomsäulen senkrecht zur y -Achse kann mit Hilfe der Theorie der Approximanten erklärt werden. Für die fünf Approximanten mit $a_y = 1.6$ nm sind die berechneten Tilings in Abbildung 4.8 dargestellt. Die entsprechenden Strukturen auf den HREM-Bildern zeigt Abbildung 4.9.

Thermodynamisch stabil sind nur die ξ - und die ξ' -Phase. Die Struktur dieser beiden Phasen wurde auf atomarer Basis mit kristallographischen Methoden bestimmt [15]. Es stellt sich heraus, dass entlang der Atomsäulen zwei sogenannte Pseudo-Mackay-Cluster angeordnet sind. Dies sind hochsymmetrische ikosaedrische Cluster mit erhöhter Stabilität. Eine Umwandlung der beiden Phasen ineinander kann thermodynamisch oder unter mechanischer Belastung [53] erfolgen. Eine ausführliche Untersuchung dieses Phänomens wurde von Beraha [9, 10] durchgeführt. Dabei kann die Umwandlung vollständig im Hyperraum erklärt werden. Sie entspricht einer Scherung der Schnittebene.

Weiterhin für die folgende Arbeit von Bedeutung sind die ξ'_n -Phasen. Diese bestehen aus Reihen, in denen abwechselnd Nonagone und Pentagone vorkommen. Dazwischen befindet sich Hexagonereihen, angeordnet wie in der ξ' -Phase. Die Zahl der Hexagon-Reihen beträgt $n - 1$. Die am häufigsten beobachtete Phase ist diejenige mit $n = 2$, für die in der Literatur auch die Bezeichnung Ψ verwendet wird [52], gefolgt von derjenigen mit $n = 3$. Phasen mit $n \geq 4$ wurden bisher nicht entdeckt. Es ist möglich, dass sie sich durch Bewegung der Pentagone/Nonagone zu Phasen mit $n \leq 3$ umordnen. Hierfür könnte eine attraktive Wechselwirkung der Nonagon/Pentagon-Reihen verantwortlich sein.

Das Dekagon und das U-Tile werden in Approximanten nicht beobachtet. Es ist daher wahrscheinlich, dass sie energetisch ungünstig sind. Dies würde die Instabilität der 1.6 nm dekadagonalen Phase erklären.

4.4.2 Approximanten des 1.2 nm dekadagonalen Quasikristalls

Die Anordnung der Atomsäulen mit $a_y = 1.2$ nm kann wiederum mit der Theorie der Approximanten erklärt werden. Die entsprechenden Tilings zeigt Abbildung 4.10, für einige HREM-Bilder siehe Abbildung 4.9. Ein wichtiges Merkmal der Mikroskopbilder sind zehnzählige Ringkontraste. Diese entsprechen den kleinen Dekagonen (D').

Thermodynamisch stabil sind nur die T- und die R-Phase. Die Atompositionen dieser beiden Phasen wurden mit kristallographischen Mitteln bestimmt [54]. Die Atomsäulen sind nun aus anderen (unbenannten) ikosaedrischen Clustern aufgebaut. Eine thermodynamische Umwandlung der beiden Phasen ineinander ist ebenfalls möglich und mit Hilfe des Hyperraums erklärbar [9, 11].

Höhere Approximanten zeichnen sich durch die Anordnung der kleinen Dekagone aus. Sie sind in Reihen oder schlangenförmig (S-Phase) angeordnet. Die R'-Phase ist aufgebaut aus Reihen von Dekagonen, die nicht mit Hilfe des Tilings erklärt werden können. Zwischen den Dekagonen tauchen unvollständige Tiles auf. Zwischen den Dekagon-Reihen befinden sich drei Reihen der R-Phase. Sterne und Boote werden nur zusammen mit Dekagonen beobachtet. In Abbildung 4.11 befindet sich ein großer Ausschnitt der dekadagonalen Phase. An deren Ränder geht sie in die Approximanten T und R über, wobei nach außen hin die Dichte der Dekagone abnimmt. Als Zwischenphase können höhere Approximanten wie die τ^2 -R-Phase beobachtet werden. T- und R-Phase treten in fünf verschiedenen Orientierungen auf.

Bez.	Gitterkonstante			Schermatrix			Scherparameter	Zusammensetzung			Ref.
	a_x [nm]	a_y [nm]	a_z [nm]	χ_{11}	χ_{22}	χ_{33}	$(p_x/q_x, \frac{1}{2}p_y/q_y, p_z/q_z)$	Al [%]	Pd [%]	Mn [%]	
I								68-69.5	20.3-23.2	8-10.2	[89]
D _{1.6}		1.6 (1.65)			$-\tau^{-2}$		(3/1)	75	20	5	[86]
ξ	1.48 (1.48)	1.66 (1.65)	2.03 (2.03)	τ^{-2}	$-\tau^{-2}$	τ^{-5}	(1/1, 3/1, 2/1)	73-74	21.6-23	4-4.4	[2]
ξ'	2.35 (2.39)	1.66 (1.65)	1.23 (1.26)	$-\tau^{-4}$	$-\tau^{-2}$	$-\tau^{-3}$	(2/1, 3/1, 1/1)	73.5	22.4	4.1	[2, 15]
ξ''	2.35 (2.39)	1.66 (1.65)	4.47 (4.54)	$-\tau^{-4}$	$-\tau^{-2}$	$-\tau^{-5}$	(2/1, 3/1, 4/3)	75	20	5	[80, 86]
ξ'_2	2.35 (2.39)	1.66 (1.65)	5.7 (5.80)	$-\tau^{-4}$	$-\tau^{-2}$	$\frac{5-4\tau}{5\tau+4}$	(2/1, 3/1, 5/4)	72.6	22.9	4.5	[57, 80]
ξ'_3	2.35 (2.39)	1.66 (1.65)	8.2 (8.31)	$-\tau^{-4}$	$-\tau^{-2}$	$\frac{7-6\tau}{7\tau+6}$	(2/1, 3/1, 7/6)	72.6	22.9	4.5	[80]
ξ'_n	(2.39)	(1.65)	(0.78+2.51n)	$-\tau^{-4}$	$-\tau^{-2}$	$\frac{(2n+1)-2n\tau}{(2n+1)\tau+2n}$	(2/1, 3/1, 2n+1/2n)				
D _{1.2}		1.2 (1.19)			$-\tau^{-4}$		(2/1)	68-70	10-16	16-20	[7]
T	1.47 (1.48)	1.25 (1.19)	1.26 (1.26)	τ^{-2}	$-\tau^{-4}$	$-\tau^{-3}$	(1/1, 2/1, 1/1)	72.3	6	21.7	[2, 54]
R	2.39 (2.39)	1.24 (1.19)	0.78 (0.78)	$-\tau^{-4}$	$-\tau^{-4}$	τ^{-1}	(2/1, 2/1, 1/0)	78.6	5.7	15.6	[2]
τ^2 -R	6.25 (6.25)	1.24 (1.19)	2.03 (2.03)	$-\tau^{-8}$	$-\tau^{-4}$	τ^{-5}	(5/3, 2/1, 2/1)				[27, 97]
R'	2.37 (2.39)	1.24 (1.19)	2.80 (2.81)	$-\tau^{-4}$	$-\tau^{-4}$	τ^{-3}	(2/1, 2/1, 3/1)				[27]
S	3.78 (3.86)	1.24 (1.19)	5.1 (5.32)	τ^{-6}	$-\tau^{-4}$	τ^{-9}	(3/2, 2/1, 5/3)				[62]

Tabelle 4.1: Einige der bisher beobachteten periodischen Approximanten des ternären Al-Pd-Mn-Systems. In Klammer stehen die berechneten Gitterkonstanten. Statt p_y ist $\frac{1}{2}p_y$ eingetragen, da die Brüche $\frac{p_x}{q_x}$, $\frac{p_y}{2q_y}$ und $\frac{p_z}{q_z}$ die Zahl τ approximieren. Zum Vergleich sind die ikosaedrische Phase I und die dekadagonalen Phasen D_{1.6} und D_{1.2} eingetragen.

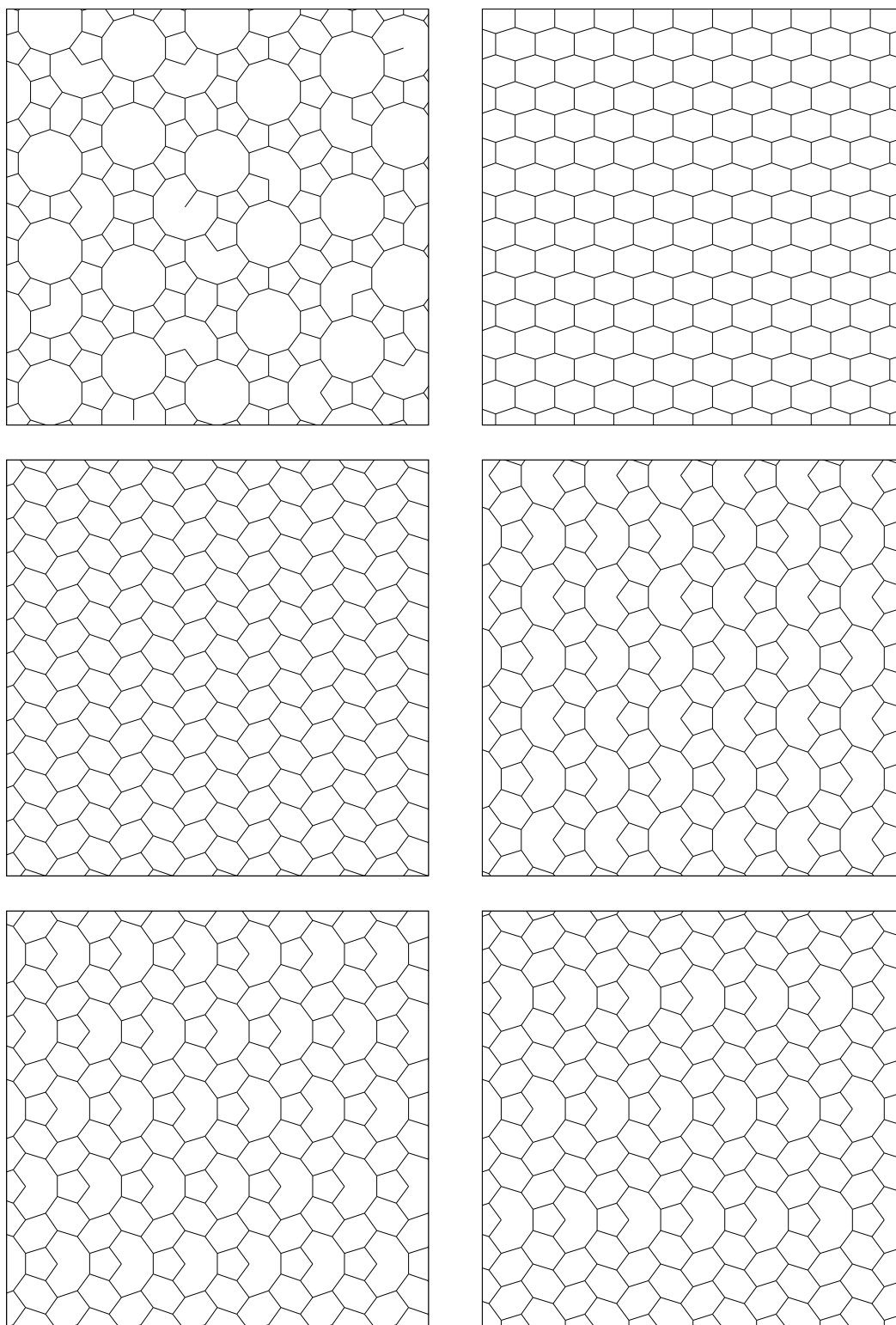


Abbildung 4.8: Approximanten der 1.6 nm dekadagonalen Phase. Von links oben nach rechts unten: $D_{1.6}$, ξ , ξ' , ξ'' , ξ'_2 und ξ'_3 .

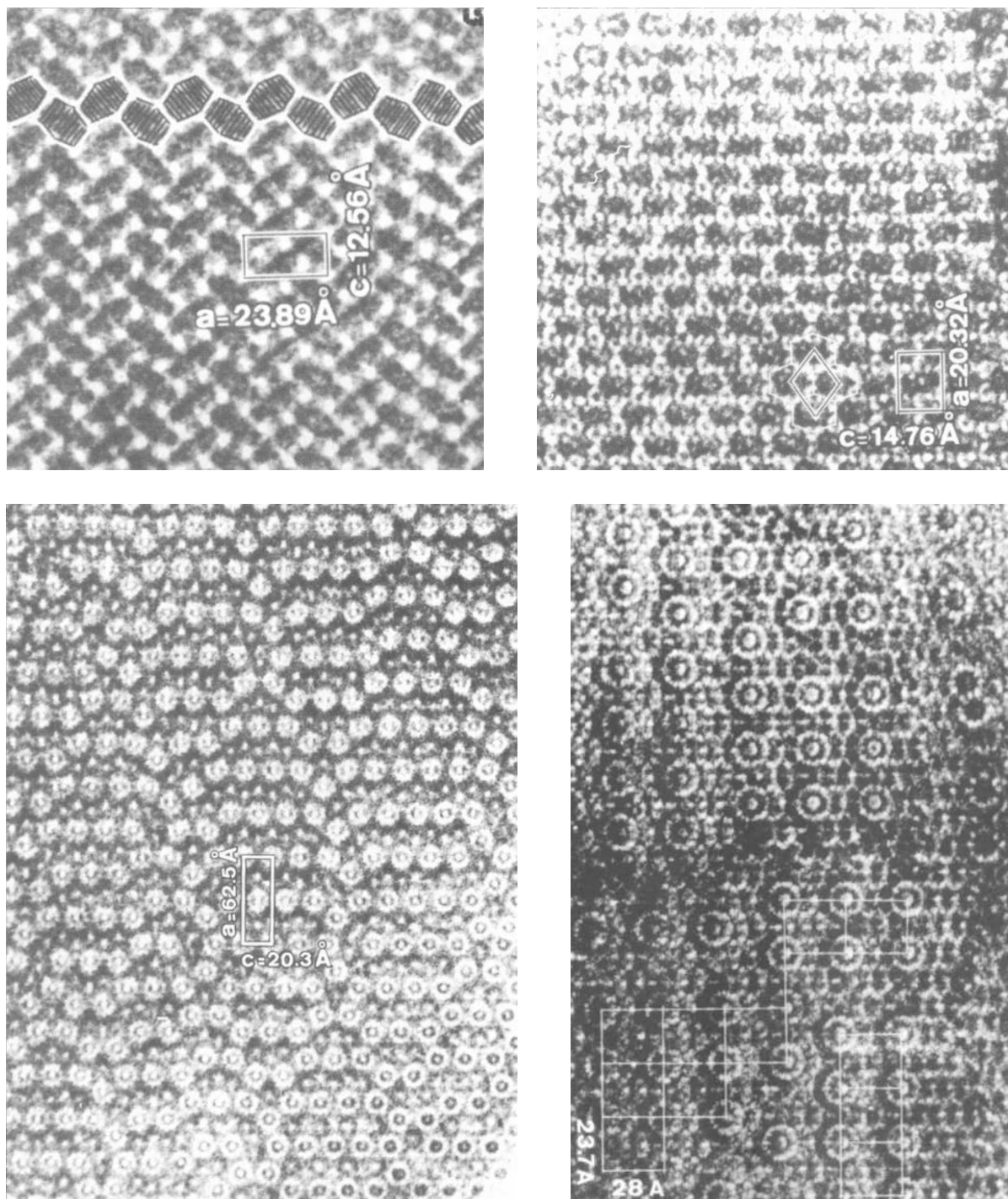


Abbildung 4.9: HREM-Bilder einiger Approximanten. Von links oben nach rechts unten: ξ' , ξ , τ^2 -R und R' [27].

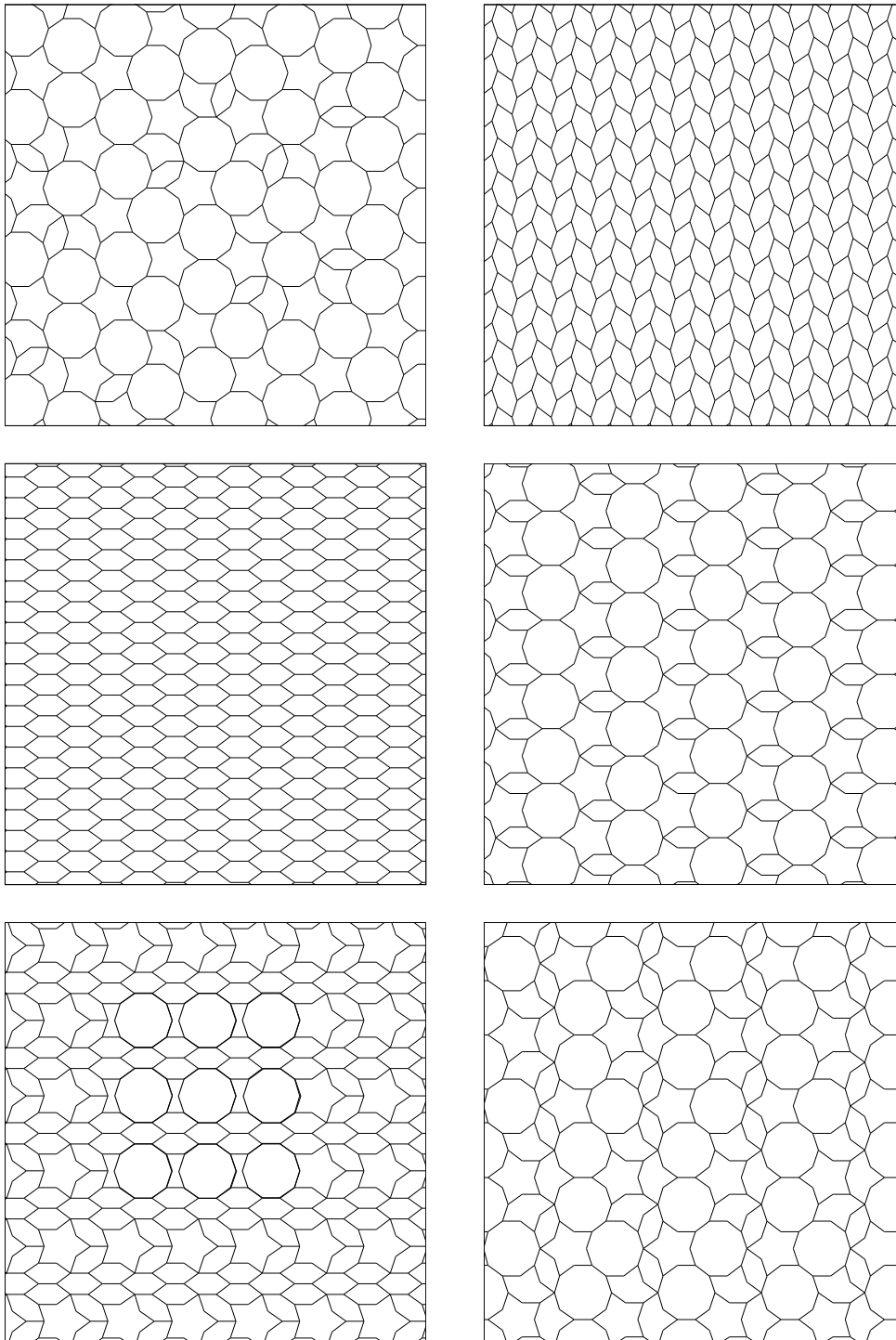


Abbildung 4.10: Approximanten der 1.2 nm dekadagonalen Phase. Von links oben nach rechts unten: $D_{1,2}$, T, R, τ^2 -R, R' und S. In der R'-Phase werden experimentell Dekagone beobachtet. Diese Anordnung ist nicht mit Hilfe des Tilings möglich. In der Mitte eingezeichnet sind die beobachteten Dekagone.

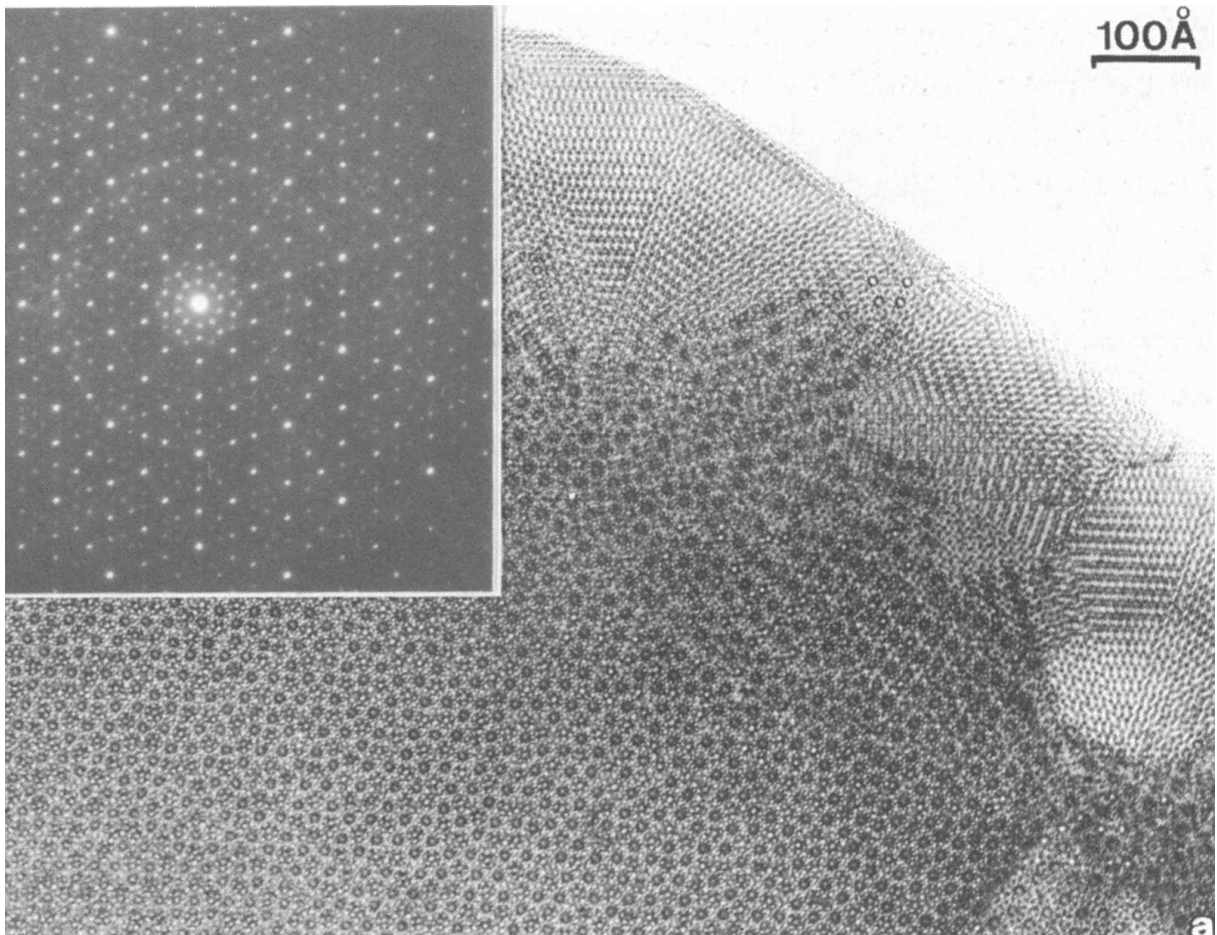


Abbildung 4.11: HREM-Aufnahme der dekadagonalen 1.2 nm Phase entlang der zehnzähligen Achse. Am Rand haben sich periodische Phasen gebildet. Rechts oben können die T- und die R-Phase, sowie höhere Approximanten beobachtet werden. Das Beugungsbild der dekadagonalen Phase ist ebenfalls gezeigt [27].

Kapitel 5

Elastizitätstheorie und Versetzungen

Mechanische Eigenschaften von Kristallen können im Kontinuumsbild mit der Elastizitätstheorie unter Verwendung von Vektorfeldern beschrieben werden. Kräfte führen zu Variationen in den phononischen Verschiebungsfeldern. Eine Erweiterung der elementaren Elastizitätstheorie auf Quasikristalle ist mit Hilfe der phasonischen Freiheitsgrade ohne weiteres möglich. Es wird in Abschnitt 5.2 gezeigt, welchen Einfluss die Punktsymmetrie des Kristalls, beziehungsweise die verallgemeinerte Punktsymmetrie des Quasikristalls, auf die auftretenden Vektorfelder hat. Durch Zerlegung der auftretenden Darstellungen der Punktgruppe nach irreduziblen Darstellungen lässt sich auf einfache Weise die Zahl der unabhängigen elastischen Konstanten bestimmen.

Unstetigkeitsstellen in den Vektorfeldern, die Symmetrien der Festkörper brechen, werden als mechanische Defekte bezeichnet. Zur mathematischen Klassifikation von Defekten erweist sich der Begriff der Homotopie aus der Topologie als geeignet, mit dessen Hilfe auch eine Untersuchung von Defekten in einer Vielzahl von andersartigen physikalischen Situationen möglich ist. Eine kurze Einführung in die topologische Defektklassifikation wird in Abschnitt 5.3 gegeben. Dabei wird allerdings vorausgesetzt, dass der mathematischen Formalismus der Topologie bekannt ist. Eine gute Überblick über die Topologie bietet das Lehrbuch von Jänich [45], zu topologischen Defekten siehe [82, 88].

Mechanische topologische Defekte, welche die Translationssymmetrie des Kristall brechen, werden Versetzungen genannt. Im zweiten Teil dieses Kapitels wird gezeigt, dass sich der Begriff der Versetzungen auch auf Quasikristalle verallgemeinern lässt [81]. Versetzungsbewegungen und Versetzungsreaktionen beeinflussen die mechanischen Eigenschaften von Quasikristallen entscheidend, und die phasonischen Freiheitsgrade führen zu einem neuartigen, charakteristischen plastischen Verhalten mit einem spröde-duktil-Übergang bei deutlich höheren Temperaturen als dies bei kristallinen Legierungen der Fall ist [91].

Zur Erzeugung von quasiperiodischen Tilings mit (und ohne) Versetzungen wurde ein eigenes Programm entwickelt. Zur Funktionsweise des Programms siehe Anhang D.

5.1 Klassische Elastizitätstheorie

Die Untersuchung von elastischen Materialverformungen ist meist nicht mehr auf atomarer Ebene möglich. Statt dessen bedient man sich kontinuierlicher Vektorfelder und betrachtet die Materie als Kontinuum. Das ist eine gute Näherung, wenn die zu untersuchenden Effekte sich auf Längenskalen abspielen, die groß gegenüber den mittleren Atomabstände sind, was in der Regel der Fall ist. Plastische Verformungen, welche die innere Struktur eines Körpers so umwandeln, dass er nach Wegnahme der Kräfte nicht mehr in den Ursprungszustand zurückkehrt, und Effekte wie Risse oder Diffusion können nicht beschrieben werden.

In der Eulerschen Betrachtungsweise heftet man an einen d -dimensionalen Körper ein Koordinatensystem an, das bei einer elastischen Verformung eine in der Zeit stetigen Transformation, beschrieben durch das zeitabhängige Vektorfeld $\boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}, t) : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d$, erfährt. Zu einem fest gewählten Zeitpunkt $t = t_0$ wirken keine äußeren Kräfte auf den Körper ein, und er sei mechanisch im Gleichgewicht. Es bietet sich dann an, die Verformungen durch die Koordinaten relativ zur Gleichgewichtskonfiguration mit dem Verschiebungsfeld

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}, t) - \boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}, t_0) \quad (5.1)$$

zu beschreiben. Das Verschiebungsfeld kann in eine Taylorreihe entwickelt werden, wobei bei kleinen Verformungen höhere Terme vernachlässigt werden können. In der linearen Näherung spielt nur der Gradient $\nabla \mathbf{u} = \nabla \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ eine Rolle. Er kann zerlegt werden in einen symmetrischen und einen antisymmetrischen Anteil:

$$\begin{aligned} (\nabla \mathbf{u})_{ij}^S &= \frac{1}{2}(\partial_j u_i + \partial_i u_j) = \epsilon_{ij}, \\ (\nabla \mathbf{u})_{ij}^A &= \frac{1}{2}(\partial_j u_i - \partial_i u_j). \end{aligned} \quad (5.2)$$

Im folgenden wird bei Tensoren höherer Stufe die Indexschreibweise unter Ausnutzung der Einsteinschen Summenkonvention verwendet. Die freie elastische Energiedichte F ist eine Funktion des Verschiebungsfeldes, hängt aber nicht von homogenen Verschiebungen ab. In linearer Näherung ist sie nur vom Gradienten $\nabla \mathbf{u}$ abhängig. Die symmetrischen Komponenten ϵ_{ij} beschreiben Form- und Volumenänderungen, während die antisymmetrischen Komponenten Rotationen beschreiben, welche die elastische Energie nicht ändern. Sie ist daher gegeben durch

$$F = F(\epsilon) = \frac{1}{2} C_{ijkl} \epsilon_{ij} \epsilon_{kl}. \quad (5.3)$$

Der Hookesche Tensor C_{ijkl} enthält Materialkonstanten, von denen aufgrund von Symmetriebedingungen im allgemeinsten Fall 21 physikalisch unabhängig sind. Besitzt der Körper Punktsymmetrien, so erniedrigt sich diese Zahl. Im Spezialfall eines vollständig isotropen Körpers hat man die minimale Anzahl von zwei unabhängigen elastischen Konstanten, den Lamé-Konstanten. ϵ_{ij} heißt Greenscher Verzerrungstensor. In differenzieller Schreibweise

ist die Energiedichte $dF = \sigma_{ij} d\epsilon_{ij}$, wenn man als thermodynamisch konjugierte Größe den Spannungstensor

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial F}{\partial \epsilon_{kl}} = C_{ijkl} \epsilon_{ij} \quad (5.4)$$

einführt. Diese Beziehung, die Spannung und Verzerrung miteinander verknüpft, heißt Hookesches Gesetz.

5.2 Erweiterung für Quasikristalle

Wie in Abschnitt 3.1 erläutert, ist die Verschiebung bei Quasikristallen ein Hyperraumvektor, der zerlegt werden kann in einen phasonischen Anteil im physikalischen Raum E^{\parallel} und einen Anteil im Orthogonalraum E^{\perp} :

$$\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}^{\parallel}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{u}^{\perp}(\mathbf{x}, t). \quad (5.5)$$

Die freie elastische Energiedichte F ist nun eine Funktion der phononischen Verzerrungen $\epsilon_{ij} \in \mathbb{R}^{d^{\parallel} \times d^{\parallel}}$ und der phasonischen Verzerrungen $\chi_{ij} \in \mathbb{R}^{d^{\perp} \times d^{\parallel}}$ mit

$$\begin{aligned} \epsilon_{ij} &= \frac{1}{2}(\partial_i u_j^{\parallel} + \partial_j u_i^{\parallel}), \\ \chi_{ij} &= \partial_i u_j^{\perp}, \\ \eta &= \begin{pmatrix} \epsilon \\ \chi \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Da einerseits homogene Verschiebungen die Energiedichte invariant lassen (Satz 3.7), andererseits Rotationen in E^{\perp} aber nicht, hängt F auch vom antisymmetrischen Anteil der phasonischen Verzerrung ab. Die beiden Anteile der Verzerrungen werden im verallgemeinerten Greenschen Verzerrungstensor $\eta_{\alpha j} \in \mathbb{R}^{\tilde{d} \times d^{\parallel}}$ zusammengefasst. Als Konvention seien griechische Indizes für Koordinaten im Hyperraum gewählt. (Die Notation für Verzerrungen bei der Konstruktion von Approximanten in Kapitel 3 stimmt mit der hier verwendeten überein.) Es tauchen nun auch phasonische Materialkonstanten, sowie Kopplungskonstanten zwischen phasonischer und phononischer Verzerrung auf. Alle Materialkonstanten stehen im Hookeschen Tensor $C_{\alpha j \gamma l}$, womit die elastische Energiedichte in quadratischer Näherung die Form

$$F = F(\eta) = \frac{1}{2} C_{\alpha j \gamma l} \eta_{\alpha j} \eta_{\gamma l} \quad (5.7)$$

besitzt. Durch Ableitung erhält man den verallgemeinerten Spannungstensor $\sigma_{\alpha j}$ und das Hookesche Gesetz

$$\sigma_{\alpha j} = \frac{\partial F}{\partial \eta_{\gamma l}} = C_{\alpha j \gamma l} \eta_{\alpha j}. \quad (5.8)$$

Die Zahl der unabhängigen Komponenten des Hookeschen Tensors lässt sich im klassischen Fall, wie auch bei Quasikristallen mit Hilfe der Darstellungstheorie [82, 88] bestimmen. Hierzu betrachtet man das Transformationsverhalten der elastischen Tensoren unter der verallgemeinerten Punktsymmetriegruppe P_{ρ}^{\parallel} des Quasikristalls. Sie müssen sich nach einer irreduziblen Darstellung oder einer direkten Summe mehrerer irreduzibler Darstellungen transformieren.

Die Berechnung der unabhängigen Komponenten des Hookeschen Tensors soll am Beispiel des ikosaedrigen Quasikristalls mit Punktsymmetriegruppe Y_h exemplarisch durchgeführt werden. Zuerst wird das Transformationsverhalten der Verschiebungsvektoren \mathbf{u}^{\parallel} und \mathbf{u}^{\perp} bestimmt. Wie in Abschnitt 3.5 behandelt, transformiert sich \mathbf{u}^{\parallel} und auch ∇ nach der Darstellung $D_{2u}^{(3)}$ und \mathbf{u}^{\perp} nach der Darstellung $D_{3u}^{(3)}$. Damit ergibt sich mit der Clebsch-Gordon-Zerlegung für die Transformation der Verzerrungstensoren:

$$\begin{aligned}
\epsilon = (\nabla \mathbf{u}^{\parallel})^S & \quad \text{transformiert sich nach} & \quad \left[D_{2u}^{(3)} \otimes D_{2u}^{(3)} \right]^S = D_{1g}^{(1)} \oplus D_{5g}^{(5)}, \\
\chi = \nabla \mathbf{u}^{\perp} & \quad \text{transformiert sich nach} & \quad D_{2u}^{(3)} \otimes D_{3u}^{(3)} = D_{4g}^{(4)} \oplus D_{5g}^{(5)}, \\
\eta = \epsilon \oplus \chi & \quad \text{transformiert sich nach} & \quad D_{1g}^{(1)} \oplus D_{4g}^{(4)} \oplus D_{5g}^{(5),1} \oplus D_{5g}^{(5),2}.
\end{aligned} \tag{5.9}$$

Die Energiedichte transformiert sich als Skalar nach der Eins-Darstellung $D_{1g}^{(1)}$. Da die vollständige Kontraktion zweier Tensoren nur dann einen Skalar ergibt, wenn sich beide nach derselben Darstellung transformieren, folgt aus (5.7), dass sich der Hookesche Tensor C gleich transformiert wie $\eta \otimes \eta$. Unter Verwendung der symmetrieangepassten Tensorbasis für den Verzerrungstensor hat der Hookesche Tensor C eine besonders einfache Gestalt, da Elemente der Tensorbasen zu unterschiedlichen Darstellungen nicht vermischt werden dürfen:

$$\begin{aligned}
\underline{\eta} & = \left(\epsilon^{(1g)}, \epsilon_1^{(5g)}, \dots, \epsilon_5^{(5g)}, \chi_1^{(4g)}, \dots, \chi_4^{(4g)}, \chi_1^{(5g)}, \dots, \chi_5^{(5g)} \right)^t, \\
F & = \frac{1}{2} \underline{\eta}^t \underline{C} \underline{\eta}, \\
\underline{C}^{(15 \times 15)} & = \begin{pmatrix} \lambda_1 \mathbb{1}^{(1 \times 1)} & 0^{(1 \times 4)} & 0^{(1 \times 5)} & 0^{(1 \times 5)} \\ 0^{(4 \times 1)} & \lambda_2 \mathbb{1}^{(4 \times 4)} & 0^{(4 \times 5)} & 0^{(4 \times 5)} \\ 0^{(5 \times 1)} & 0^{(5 \times 4)} & \lambda_3 \mathbb{1}^{(5 \times 5)} & \lambda_5 \mathbb{1}^{(5 \times 5)} \\ 0^{(5 \times 1)} & 0^{(5 \times 4)} & \lambda_5 \mathbb{1}^{(5 \times 5)} & \lambda_4 \mathbb{1}^{(5 \times 5)} \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{5.10}$$

Der Hookesche Tensor besitzt für ikosaedrische Quasikristalls fünf unabhängige Komponenten: zwei phononische (λ_1, λ_2) , zwei phasonische (λ_3, λ_4) und eine Kopplungskonstante

(λ_5). Die elastische Energie lässt sich zerlegen in $F = F_{\text{phon}} + F_{\text{phas}} + F_{\text{koppl}}$ mit

$$\begin{aligned} F_{\text{phon}} &= \frac{1}{2}\lambda_1 (\epsilon^{(1g)})^2 + \frac{1}{2}\lambda_2 \sum_i (\epsilon_i^{(5g)})^2, \\ F_{\text{phas}} &= \frac{1}{2}\lambda_3 \sum_i (\chi^{(4g)})^2 + \frac{1}{2}\lambda_4 \sum_i (\chi_i^{(5g)})^2, \\ F_{\text{koppl}} &= \frac{1}{2}\lambda_5 \sum_i (\epsilon_i^{(5g)} \chi_i^{(5g)}). \end{aligned} \quad (5.11)$$

Für dekadonale Quasikristalle verläuft die Rechnung analog. Auch hier treten fünf unabhängige elastische Konstanten auf: zwei phononische, zwei phasonische und eine Kopplungskonstante.

5.3 Topologische Defekte

Ein struktureller Defekt in einem geordneten Medium ist eine elementare Störung der Ordnung, die sich nicht lokal beheben lässt und physikalisch nicht weiter in Teilstörungen zerlegt werden kann. Viele strukturelle Defekte in geordneten Medien lassen sich mit Methoden der algebraischen Topologie [45, 83] behandeln und klassifizieren und werden dann topologische Defekte genannt. Hierzu müssen Medium und Defekte folgende Bedingungen erfüllen:

- (i) Für das Medium muss ein Ordnungsparameterraum V existieren, so dass jedem Punkt $\mathbf{x} \in \Omega^M \subset \mathbb{R}^d$ des Mediums je nach physikalischem Zustand des Mediums an diesem Punkt ein Element des Ordnungsparameterraums zugeordnet werden kann. Ausnahmen bilden die Defekte selbst, die die Defektmenge $\Omega^D \subset \Omega^M$ bilden. Die Zuordnung $f : \Omega^M \setminus \Omega^D \rightarrow V$ wird Ordnungsparameter genannt.
- (ii) Der Ordnungsparameterraum muss eine topologische Struktur besitzen, so dass f stetig ist. Er ist dann ein topologischer Raum. Auf Ω^D muss f unstetig sein.
- (iii) Physikalische Prozesse, die bei der Bildung der Defekte eine Rolle spielen, müssen zu stetigen Deformationen im Ordnungsparameter führen.
- (iv) Umgekehrt muss es zu jeder stetigen Deformation einen solchen Prozess geben.

Sind die obigen Bedingungen erfüllt, so ist eine vollständige topologische Klassifikation der Defekte möglich:

Definition 5.1. *Betrachte in einem Medium, das den Raum Ω_M einnimmt und mit Ordnungsparametern aus dem Ordnungsparameterraum V beschrieben wird, zwei topologische*

Defekte mit den Ordnungsparametern $f_1 : \Omega^M \setminus \Omega_1^D \rightarrow V$ und $f_2 : \Omega^M \setminus \Omega_2^D \rightarrow V$. Es sei $\Omega_1^D \subset \Omega_2^D$. Die Defekte heißen topologisch äquivalent, wenn es eine stetige Abbildung $h : \Omega^M \setminus \Omega_2^D \times [0, 1] \rightarrow V$ gibt mit $h(\mathbf{x}, 0) = f_1(\mathbf{x})$ und $h(\mathbf{x}, 1) = f_2(\mathbf{x})$ für alle $\mathbf{x} \in \Omega^M \setminus \Omega_2^D$.

Die Bedingung $\Omega_1^D \subset \Omega_2^D$ stellt dabei keine Einschränkung an die Defekte, da sie durch stetige Verformung einer Defektmenge und Verschiebung eines Defekts stets erfüllt werden kann. Anders formuliert sagt die Definition aus: Zwei Defekte sind topologisch äquivalent, wenn der Ordnungsparameter des einen stetig in den Ordnungsparameter des anderen deformiert werden kann. In der Sprache der Topologie ausgedrückt: $f_1|_{\Omega_2}$ und f_2 sind homotop. Die Abbildung h heißt Homotopie und die Äquivalenzklassen der Defekte entsprechend Homotopieklassen. Eine Defektklassifikation entspricht der Bestimmung der Homotopieklassen.

Sei nun Ω_M einfach zusammenhängend, das heißt stetig zu \mathbb{R}^d verformbar. Man sagt dann: Ω_M und \mathbb{R}^d sind homöomorph. Außerdem sei Ω^D homöomorph zu \mathbb{R}^n . Es liegen also im einfachsten Fall Punktdefekte ($n = 0$) oder Liniendefekte ($n = 1$) vor. Beide Annahmen sind für Defekte in physikalischen Strukturen erfüllt, wenn nur ein Teilstück einer Versetzung und ein Teilmenge der Materie um dieses Teilstück betrachtet wird. Dadurch wird die Bestimmung der Homotopieklassen enorm vereinfacht, da $\mathbb{R}^d \setminus \mathbb{R}^n$ homöomorph zur $(d - n - 1)$ -dimensionalen Einheitssphäre $S^{d-n-1} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{d-n} \mid \|\mathbf{x}\| = 1\}$ ist und die Homotopieklassen mit $\mathbb{R}^d \setminus \mathbb{R}^n$ als Startraum von f identisch sind mit den Homotopieklassen mit S^{d-n-1} als Startraum. Letztere sind in der Topologie besonders gut untersucht. Ohne weiter auf die Mathematik einzugehen sei noch erwähnt, dass auf ihnen sogar in kanonischer Weise eine Gruppenoperation definiert werden kann. Die Menge der Homotopieklassen zum Startraum S^r und Zielraum V mit dieser Gruppenoperation wird als Homotopiegruppe $\pi_r(V)$ bezeichnet. Zusammenfassend gilt:

Satz 5.2. *n -dimensionale topologische Defekte in einem d -dimensionalen Medium mit Ordnungsparameterraum V werden klassifiziert durch die Elemente der r -ten Homotopiegruppe $\pi_r(V)$ mit $r = d - n - 1$. Zwei Defekte sind genau dann topologisch äquivalent, wenn sie in derselben Homotopieklasse liegen.*

5.4 Versetzungen in Kristallen

Von außen an einen Körper angelegte Kräfte führen zu Verzerrungen, die sich durch Verformungen bemerkbar machen. Wird die Kraft entfernt, so sagt die Elastizitätstheorie voraus, dass die Verzerrungen verschwinden und der Körper seine Ausgangsgestalt wieder einnimmt. Dieses Verhalten ist für Festkörper bei kleinen angelegten Kräften typisch. Häufig ist ein Verformungsvorgang jedoch nicht vollständig reversibel und es bleibt eine plastische Verformung zurück. Dieser Effekt kann nicht mit der Elastizitätstheorie erklärt

werden, sondern nur mit der Erzeugung und Bewegung von Defekten. Speziell in periodischen Kristallen heißen die für die Plastizität verantwortlichen Defekte Versetzungen. Andere Defekte, die bei plastischen Verformungen nur eine kleine Rolle spielen sind Zwischengitteratome oder Gitterleerstellen.

Versetzungen sind Unstetigkeitsstellen im Verschiebungsfeld $\mathbf{u}(\mathbf{x})$, die die Translationssymmetrie des Kristalls brechen und durch stetige Manipulation in \mathbf{u} nicht behoben werden können. Sie sind im Sinne des letzten Abschnitts topologische Defekte mit dem Verschiebungsfeld als Ordnungsparameter. Der Ordnungsparameterraum ist der Definitionsbereich des Verschiebungsfelds. Aufgrund der Translationssymmetrie ist bei Kristallen eine Verschiebung um $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ jedoch nicht zu unterscheiden von einer Verschiebung um $\mathbf{u}(\mathbf{x}) + \mathbf{t}$ für einen Gittervektor $\mathbf{t} \in \Gamma$. Verschiebungsvektoren können daher nur einer Elementarzelle Z gewählt werden, wobei Verschiebungsvektoren auf gegenüberliegenden Seitenflächen von Z miteinander identifiziert sind. Durch die Identifikation entsteht ein Torus, oder topologisch ausgedrückt, der Quotientenraum \mathbb{R}^d/Γ mit der dazugehörigen Quotiententopologie. Dieser Quotientenraum \mathbb{R}^d/Γ ist der Ordnungsparameterraum. Nach Satz 5.2 werden Versetzungen klassifiziert durch die Homotopiegruppen $\pi_{d-n-1}(\mathbb{R}^d/\Gamma)$. Nun gilt:

$$\pi_r(\mathbb{R}^d/\Gamma) = \begin{cases} \Gamma & \text{für } r = 1, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (5.12)$$

Versetzungen in dreidimensionalen Kristallen sind also Liniendefekte und in zweidimensionalen Kristallen Punktdefekte. Eine Versetzung kann topologisch klassifiziert werden durch einen Gittervektor, den Burgersvektor \mathbf{b} der Versetzung. Die Zuordnung erhält man folgendermaßen: Die Homotopieklasse und damit die Defektklasse sind eindeutig bestimmt durch die Werte des Ordnungsparameters auf einem geschlossenen Kreis S^1 der die Versetzungslinie einmal umrundet. Die Umlaufrichtung ist Konventionssache und spielt für die Theorie keine Rolle, solange man sich an eine einheitliche Konvention hält. Der Burgersvektor lässt sich berechnen mit Hilfe des Umlaufintegrals (Burgersumlauf):

$$\mathbf{b} = \oint_{S^1} d\mathbf{u}. \quad (5.13)$$

Er ist in dreidimensionalen Kristallen entlang der Defektlinie konstant. Zwei Spezialfälle von Versetzungen zeigt Abbildung 5.1. Weitere wichtige Eigenschaften von Versetzungen, die unmittelbar aus den obigen Überlegungen folgen, seien hier nur in Stichpunkten erwähnt:

- (i) Werden bei einem Burgersumlauf mehrere Versetzungen umschlossen, so addieren sich die Burgersvektoren auf.
- (ii) Als Liniendefekte können Versetzungen in dreidimensionalen Kristallen nur an Oberflächen enden oder alternativ ringförmig geschlossen sein.

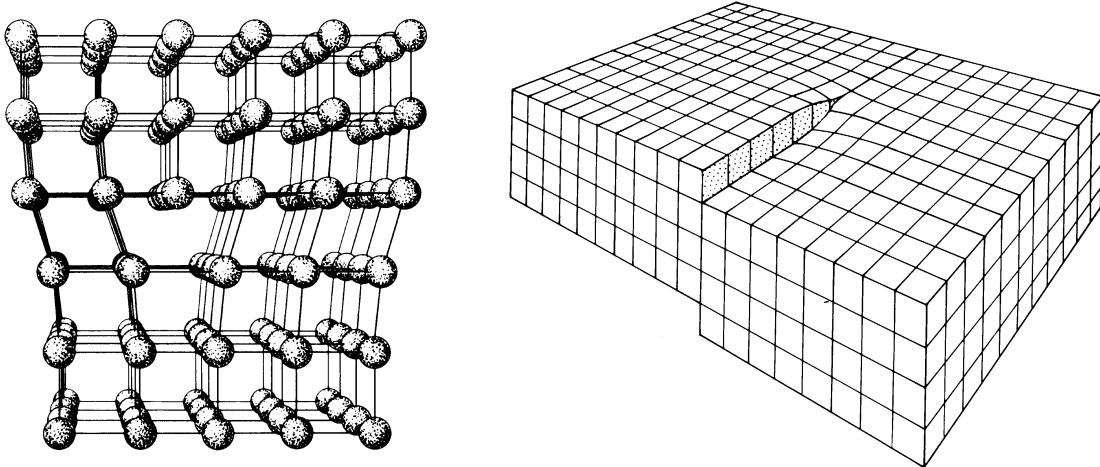


Abbildung 5.1: Spezielle Versetzungen in dreidimensionalen kubischen Kristallen: Bei einer Stufenversetzung stehen Burgersvektor und Versetzungslinie senkrecht aufeinander (links, [51]). Bei einer Schraubenversetzung sind sie parallel (rechts, [42]).

- (iii) Eine Versetzung kann sich in zwei oder mehrere Versetzungen aufspalten. Bei solchen Versetzungsreaktionen muss der Summe der Burgersvektoren konstant bleiben.

Wie alle Defekte führen Versetzungen zu inneren Spannungen. Innerhalb einer Zylinders mit Radius r_0 um die Versetzung, dem Versetzungskern, muss die atomare Struktur des Kristalls berücksichtigt werden, und Rechnungen können oft nur noch numerisch durchgeführt werden. Außerhalb des Zylinders sind die Spannungen klein genug und die Versetzung kann mit der linearen Elastizitätstheorie beschrieben werden. Die Berechnung des Verschiebungsfelds geschieht am besten in Zylinderkoordinaten, wobei die z -Achse in Richtung der Versetzungslinie gelegt ist. Im einfachsten Fall eines isotropen Körpers und einer geraden Versetzung ist aufgrund der Symmetrie

$$\mathbf{u}(r, \theta, z) = \mathbf{b} \frac{\theta}{2\pi}. \quad (5.14)$$

Daraus lassen sich mit den Gleichungen (5.2) und (5.4) die Spannungen ausrechnen, wenn der Hookesche Tensor bekannt ist. Wie die Verschiebungen sind auch Spannungen proportional zum Betrag des Burgersvektors. Für die mit der Versetzung verbundene elastische Linienenergiedichte gilt dann: $F = c \|\mathbf{b}\|^2$ mit einer Konstanten c . Ist der Körper nicht isotrop, hängt die Verschiebung nichtlinear von θ und die Konstante c zusätzlich von der Richtung des Burgersvektors ab.

5.5 Versetzungen in Quasikristallen/Approximanten

Als Ordnungsparameter in Quasikristallen dient das Verschiebungsfeld $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x})$ im Hyperraum. Der Ordnungsparametererraum ist $\mathbb{R}^{\tilde{d}}/\tilde{\Gamma}$. Die damit erhaltenen topologischen Defekte sind verallgemeinerte Versetzungen, charakterisiert durch einen Burgersvektor $\tilde{\mathbf{b}} \in \tilde{\Gamma}$ im Hyperraum. Er lässt sich in eine phononische $\mathbf{b}^{\parallel} = \pi^{\parallel}\tilde{\mathbf{b}} \in E^{\parallel}$ und eine phasonische Komponente $\mathbf{b}^{\perp} = \pi^{\perp}\tilde{\mathbf{b}} \in E^{\perp}$ zerlegen:

$$\tilde{\mathbf{b}} = \mathbf{b}^{\parallel} + \mathbf{b}^{\perp} = \oint_{S^1} d(\pi^{\parallel}\tilde{\mathbf{u}}) + \oint_{S^1} d(\pi^{\perp}\tilde{\mathbf{u}}). \quad (5.15)$$

Die Felder der Elastizitätstheorie werden durch die Symmetrie des Quasikristalls beeinflusst. Für die Anwendung kann der Quasikristall aber im Fall der Ikosaedersymmetrie näherungsweise als isotrop angesehen werden, zumal der rein phononische Teil des Hookeschen Tensors dann dieselbe Gestalt wie derjenige eines isotropen Körpers hat [5]. Die Isotropie wird durch den phasonischen Anteil gebrochen. Das Verschiebungsfeld einer geraden Versetzung hat die Form $\tilde{\mathbf{u}}(r, \theta) = \tilde{\mathbf{b}}\theta/2\pi$. Die Linienenergiedichte setzt sich zusammen aus einem phononischen, einem phasonischen und einem Kopplungsteil mit Konstanten c_1 , c_2 und c_3 . Berücksichtigt man die Symmetrie, dann hängen die Konstanten von der Richtung des Burgersvektors ab [24]. Die Linienenergiedichte ist:

$$F = c_1\|\mathbf{b}^{\parallel}\|^2 + c_2\|\mathbf{b}^{\perp}\|^2 + c_3\|\mathbf{b}^{\parallel}\| \cdot \|\mathbf{b}^{\perp}\|. \quad (5.16)$$

Eine Versetzung in einem zweidimensionalen Quasikristall mit Burgersvektor in senkrechter Richtung ist in Abbildung 5.2 gezeigt. Der Versetzungskern sitzt in der Bildmitte. Durch den phasonischen Anteil $\pi^{\perp}\tilde{\mathbf{u}}(r, \theta) = \mathbf{b}^{\perp}\theta/2\pi$ der Verschiebung treten Flips und Umordnungen im perfekten Tiling auf. Da \mathbf{b}^{\perp} kein Vektor des Hypergitters ist, passt das entstehende Tiling bei $\theta = 0$ nicht aufeinander. Es entstehen zwei parallele Tilinglippen, die durch den phononischen Anteil \mathbf{b}^{\parallel} des Burgersvektors getrennt sind. In der Abbildung links verlaufen sie vom Versetzungskern aus gesehen nach links. Durch die Verschiebung $\pi^{\parallel}\tilde{\mathbf{u}}(r, \theta) = \mathbf{b}^{\parallel}\theta/2\pi$ werden die Lippen zusammengeführt (in der Abbildung rechts). Der Versetzungskern ist nun umgeben von einem isotropen Verzerrungsfeld mit phononischen und phasonischen Komponenten (Vergleiche auch Anhang A.) Insbesondere ist das Tiling unabhängig von der Wahl der Richtung für $\theta = 0$. In Abbildung 5.3 ist eine Versetzung in der 1.6 nm dekadagonalen Phase gezeigt. Der Burgersvektor liegt in der zehnzähligen Ebene und verläuft von links unten nach rechts oben.

In Approximanten wird $\tilde{\mathbf{b}}$ zerlegt in einen phononischen Anteil $\mathbf{b}^{\parallel} = \pi^{\parallel}\tilde{\mathbf{b}} \in E^{\parallel}$ und einen phasonischen Anteil $\mathbf{b}_{\text{approx}}^{\perp} = \pi_{\text{approx}}^{\perp}\tilde{\mathbf{b}} \perp \mathcal{E}^{\parallel}$ senkrecht zur Schnittebene des Approximanten. Nur die Anteile senkrecht zu \mathcal{E}^{\parallel} führen im Tiling zu Flips. Im Gegensatz zu Quasikristallen ist $\tilde{\mathbf{b}} \neq \mathbf{b}^{\parallel} + \mathbf{b}_{\text{approx}}^{\perp}$. In Approximanten sind nicht alle Burgersvektoren mit der Tilingstruktur verträglich, vergleiche hierzu Abbildung 5.4 und Abschnitt 6.4. Zur Verträglichkeit von Burgersvektoren in Approximanten mit der Tilingstruktur gibt es bisher

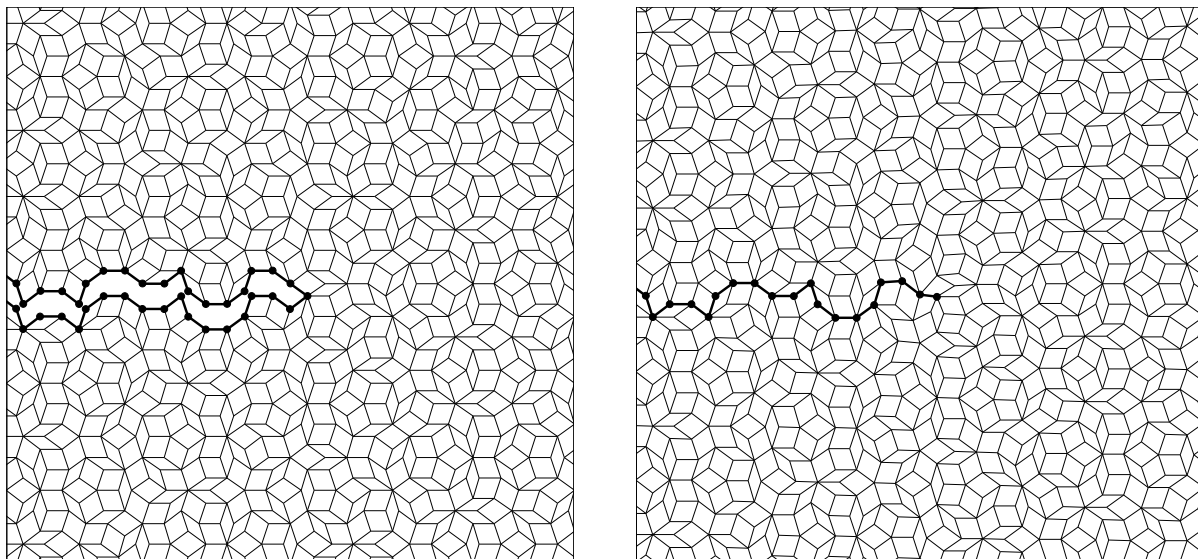


Abbildung 5.2: Eine Versetzung im Penrose-Tiling. Die phasonische Verschiebung erzeugt durch Umordnung der Tiles einen Schnitt im Tiling (links), der durch die phononische Verschiebung geschlossen wird (rechts).

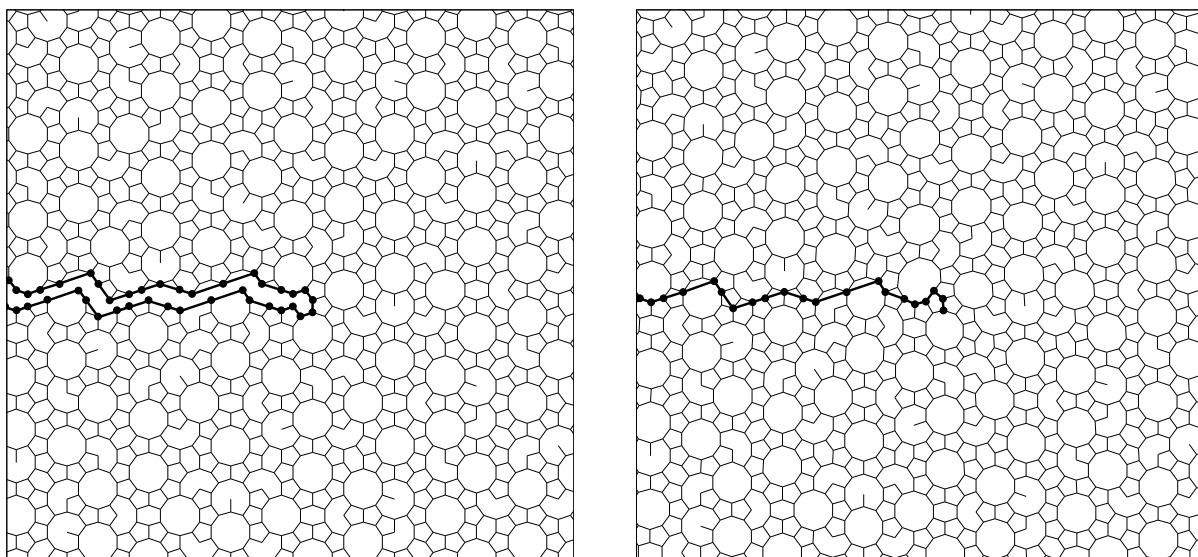


Abbildung 5.3: Eine Versetzung im Tiling der 1.6 nm dekadagonalen Phase. Die Umordnung der Tiles (links) wird durch die phononische Verschiebung geschlossen (rechts).

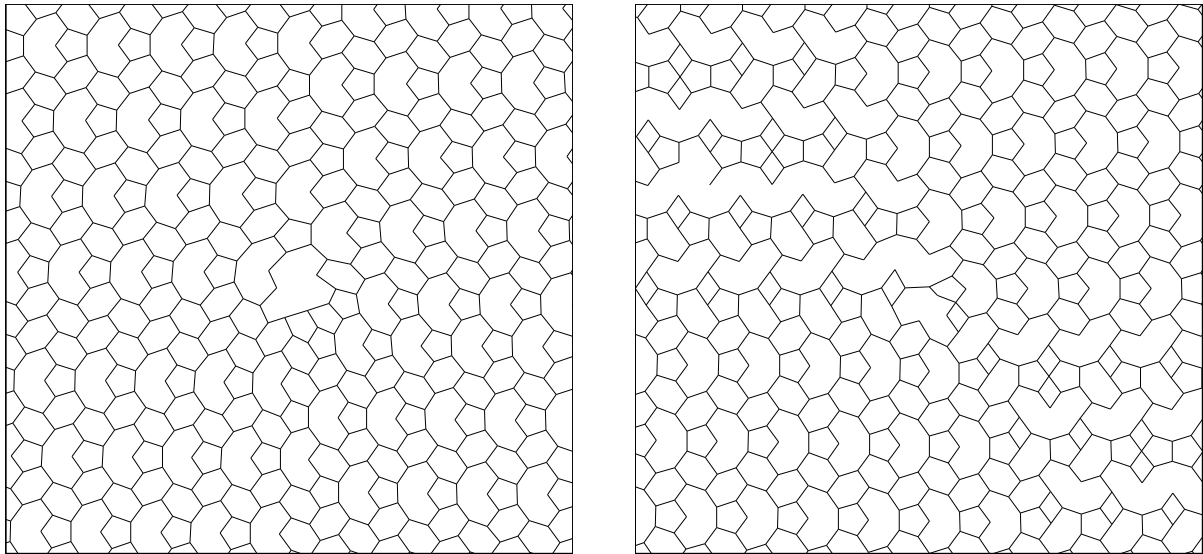


Abbildung 5.4: Versetzungen in der ξ_2 -Phase mit Burgersvektor $(0, 2, 0, -2, 0, 0)$, links und $(0, 2, -2, 0, 0, 0)$, rechts. Im linken Bild ist die Versetzung mit dem Tiling verträglich, im rechten ist sie dies nicht.

keine Untersuchungen. Sie wird beeinflusst von der Orientierung der Schnittebene \mathcal{E}^{\parallel} und der Form der Atomflächen und kann nur für rationale Steigungen von \mathcal{E}^{\parallel} gegenüber den Koordinatenhyperflächen auftreten. Es ist wahrscheinlich, dass Burgersvektoren, die mit dem Tiling verträglich sind, auch energetisch günstiger sind.

Zur Erzeugung von Quasikristallen und Approximanten mit Versetzungen kann eine erweiterte Version des Gridformalismus eingesetzt werden. Da dieser jedoch bei großen Burgersvektoren numerisch nicht mehr gut handhabbar ist, wurde auch ein neues iteratives Verfahren entwickelt. Beide sind in Anhang D erläutert.

5.6 Versetzungsbewegung, Plastizität

Plastische Verformungen entstehen in Kristallen durch die Bewegung von Versetzungen. Beim Anlegen von Spannungen an den Oberflächen wirkt auf die Versetzung eine Kraft, die die Wanderung der Versetzungen durch den Kristall erzwingt, wie in Abbildung 5.5 dargestellt. Verlässt die Versetzung den Kristall, dann wurde der Kristall um den Burgersvektor plastisch verformt.

Die durch den Burgersvektor und die Versetzungslinie (betrachte gerade Versetzungen) aufgespannte Ebene wird Gleitebene genannt. Es wird unterschieden zwischen der Bewegung innerhalb der Gleitebene, dem Gleiten, und der Bewegung aus der Gleitebene heraus, dem Klettern. Gleitbewegungen sind ohne Hinzufügen oder Entfernen von Atomen möglich,

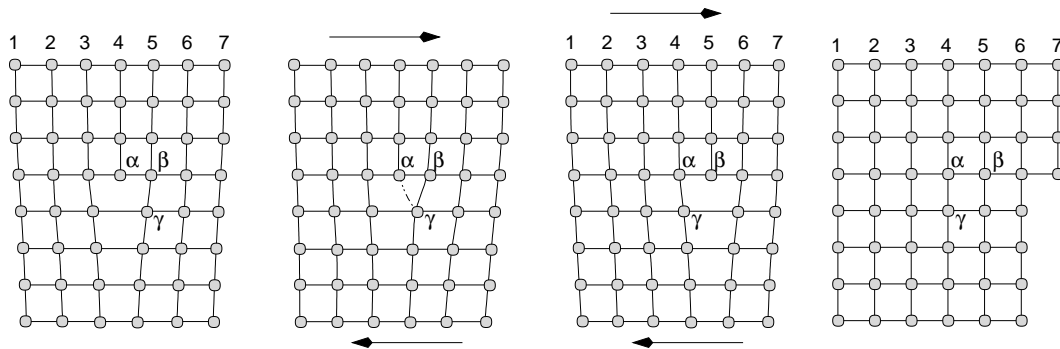


Abbildung 5.5: Gleitbewegung einer Stufenversetzung im einfach kubischen Gitter. Im rechten Bild ist sie vollständig durch den Kristall hindurchgewandert [23].

wohingegen Kletterbewegungen lokal am Ort der Versetzungslinie eine Änderung des Kristallvolumens zur Folge haben. Um Klettern zu ermöglichen, müssen zusätzliche Atome oder Leerstellen zur Versetzung wandern. Da die hierzu erforderlichen Diffusionsprozesse verhältnismäßig langsam ablaufen, stellt auch die Kletterbewegung einen relativ langsamen Prozess dar, der aufgrund der Vergrößerung der Diffusionskonstante mit steigender Temperatur ebenfalls temperaturabhängig ist. Die primäre Bewegungsart von Versetzungen ist das Gleiten. Solange diese möglich ist, lässt sich der Kristall plastisch verformen. Ist keine Versetzungsbewegung möglich – was auch bei sehr großer plastischer Verformung auftritt, da sich dann die Versetzungen gegenseitig blockieren – dann bricht der Kristall.

In Quasikristallen wird die Gleitebene aufgespannt durch den phononischen Anteil \mathbf{b}^{\parallel} des Burgersvektors und die Versetzungslinie. Gleit- und Kletterbewegung können ebenfalls unterschieden werden. Experimentell werden bei Quasikristallen jedoch auch Kletterbewegungen von Versetzungen beobachtet [68] (vergleiche auch Abschnitt 7.2). Die Versetzung eines Quasikristalls ist zusätzlich von einem phasonischen Verschiebungsfeld umgeben, das bei der Versetzungsbewegung mitgeführt werden muss. Die Mitführung bewirkt Flips, also Umordnungen im Tiling des Quasikristalls, die lokal mit der Bewegung von größeren Atomclustern verbunden sind. Da die Umordnung verhältnismäßig langsam sind, läuft die phasonische Verschiebung der Versetzungslinie hinterher. Es entsteht eine sogenannte Phasonwand. Nach kurzer Zeit heilt diese jedoch diffusiv wieder aus (ähnlich dem Kondensstreifen eines Flugzeugs). Die Halbwertszeit t_h der Ausheilung, und somit die Diffusionskonstante der Phasonen, ist stark temperaturabhängig und folgt dem Arrhenius-Gesetz

$$t_h^{-1}(T) = t_{h,0}^{-1} \exp\left(\frac{-\Delta H}{k_B T}\right) \quad (5.17)$$

mit einer Zeitkonstanten $t_{h,0}$ und der Aktivierungsenthalpie ΔH , die ein Maß für die Energie eines Phasonflips darstellt. k_B ist die Boltzmannkonstante. Zahlenwerte für ikosaedri-

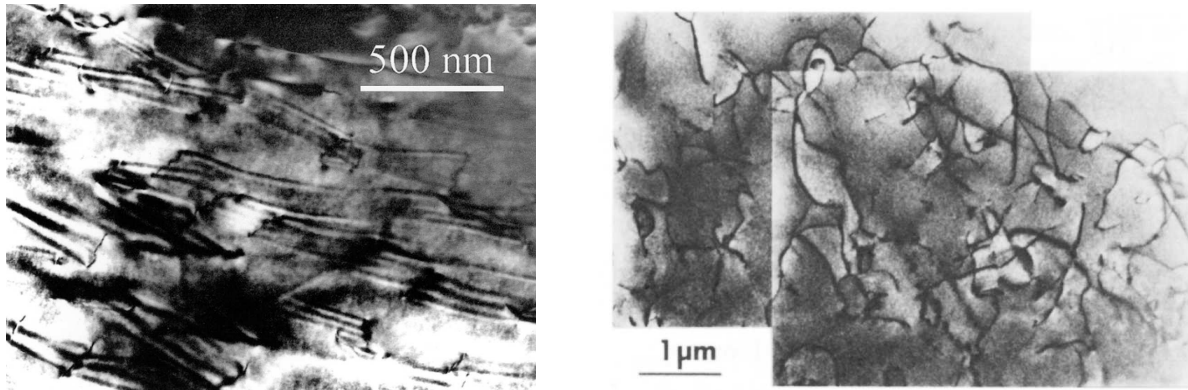


Abbildung 5.6: Versetzungen in mit hohen Spannungen verformten ikosaedrischen Al-Pd-Mn-Einkristallen bei ca. 750°C. Während der Bewegung hinterlassen die Versetzungen Phasonwände (links, [91]). Wartet man einige Zeit, dann verschwinden diese. Man erhält Versetzungen ohne Phasonwände (rechts, [92]).

ches Al-Pd-Mn wurden bestimmt von Feuerbacher [32]: $t_h = 2.6 \cdot 10^{20}$ s und $\Delta H = 4.3$ eV. Wenn die Phasonwände zu langsam ausheilen, wird die Bewegung der Versetzung behindert. Dies führt dazu, dass sich Quasikristalle bei niedrigen Temperaturen (bei ikosaedrischem Al-Pd-Mn unter 650°C) spröde verhalten und bei Belastung brechen, da Versetzungsbewegungen nur eingeschränkt möglich sind, bei hohen Temperaturen (bei ikosaedrischem Al-Pd-Mn über 650°C) aber duktil sind und plastisch verformt werden können [91, 96]. Allgemein findet der spröde-duktil-Übergang in einem scharfen Temperaturbereich zwischen ca. 75% und 90% der Schmelztemperatur statt [16].

Abbildung 5.6 zeigt Versetzungen und Phasonwände in einem Elektronenmikroskopbild, die durch ein spezielles Kontrastverfahren sichtbar gemacht werden können [94]. Die Helligkeit wird dabei lokal entsprechend der Intensität eines ausgewählten Bragg-Peaks gewählt. An den Versetzungen (und den Phasonwänden) sind die Bragg-Peaks verschoben. Sie erscheinen daher als dunkle Linien.

Durch Verwendung des rein phononischen Verschiebungsfeldes $u = \pi \parallel \tilde{u}$ kann eine Phasonwand auch im Tiling konstruiert werden (Abbildung 5.7). Grau hervorgehoben sind Tiles, die im ursprünglichen Tiling nicht vorkommen. Sie befinden sich entlang der Bewegungsebene der Versetzung.

5.7 Versetzungsreaktionen

Der Burgersvektor ist in Kristallen entlang der Versetzungslinie eine topologische Invariante. Er kann sich nur bei Versetzungsreaktionen ändern. Dabei spaltet sich eine Ver-

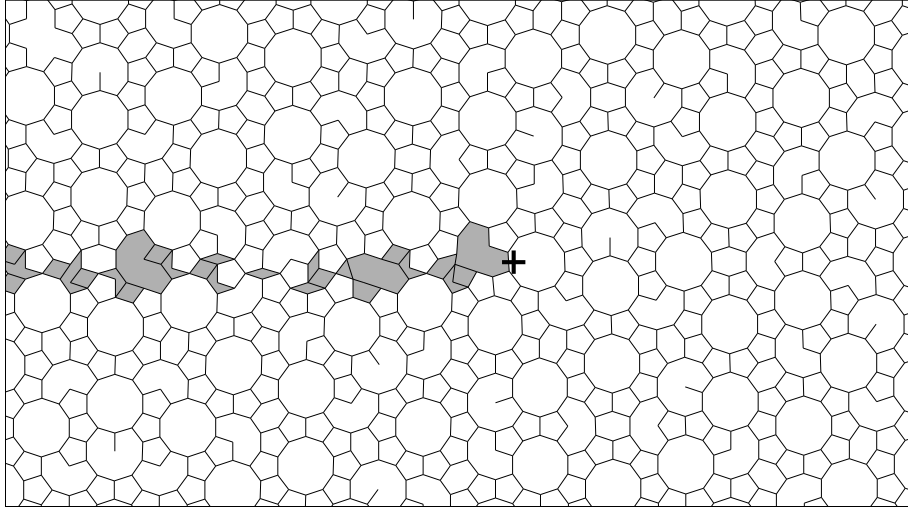


Abbildung 5.7: Eine Phasonwand im Tiling der 1.6 nm dekadagonalen Phase. Die Versetzung senkrecht zur zehnzähligen Achse (Kreuz) ist von links nach rechts gewandert.

setzung mit Burgersvektor \mathbf{b} in zwei oder mehrere Versetzungen mit Burgersvektoren \mathbf{b}_i , $i = 1, \dots, n$ auf. Alternativ kann auch eine Vereinigung von Versetzungen auftreten. Bei Aufspaltung oder Vereinigung von Versetzungen folgt aus der topologischen Beschreibung, dass der Burgersvektor erhalten bleiben muss:

$$\mathbf{b} = \sum_{i=1}^n \mathbf{b}_i. \quad (5.18)$$

Eine Versetzungsvereinigung findet nur dann statt, wenn sie energetisch günstig ist, das heißt, wenn die Energie der entstehenden Versetzung kleiner als die Energie der ursprünglichen Versetzungen ist: $E < \sum_{i=1}^n E_i$. In der isotropen Näherung bedeutet das

$$\|\mathbf{b}\|^2 < \sum_{i=1}^n \|\mathbf{b}_i\|^2. \quad (5.19)$$

Umgekehrt wird sich eine Versetzung aufspalten, wenn dabei ein energetisch günstiger Zustand erreicht werden kann. Die Ungleichung (5.19) wird auch als Franksche Regel bezeichnet. Aus ihr folgt, dass in isotropen Körpern als Burgersvektoren im Gleichgewicht nur die kleinsten Gittervektoren auftreten.

In Quasikristallen kann eine verallgemeinerte Version der Frankschen Regel aufgestellt werden [93, 95]. Es sind damit allerdings keine einfachen Aussagen über energetisch günstige Burgersvektoren möglich, da sich in Gleichung (5.16), die phononische und die phasonische Konstante unterscheiden, zusätzlich Kopplung auftritt und die Ikosaedersymmetrie beachtet werden muss. Die phasonischen elastischen Konstanten und die Kopplungskonstante sind experimentell ungenau bekannt, da sie nur schwer gemessen werden können.

Kapitel 6

Die ξ -, ξ' - und ξ'_n -Phasen

Die periodischen Approximanten der 1.6 nm dekalagonalen Phase des Al-Pd-Mn-Systems sind die ξ -, die ξ' - und die ξ'_n -Phasen, die sich durch unterschiedliche Anordnungen von Atomclustern senkrecht zur verallgemeinerten zehnzähligen Achse der dekalagonalen Phase unterscheiden (siehe Abschnitt 4.3.1). In diesem Kapitel wird die Struktur dieser Phasen im Tilingbild näher untersucht. Dabei zeigt sich, dass der Aufbau mit zwei verschiedenen Arten von Clusteranordnungen möglich ist. Die ξ - und die ξ' -Phasen werden vollständig beschrieben durch hexagonale Clusteranordnungen, während für die ξ'_n -Phasen zusätzlich sogenannte Phasondefekte eine Rolle spielen. Sie entsprechen im Tiling einer Pentagon/Nonagon-Kombination.

Obwohl diese Approximanten periodisch sind, macht sich die Verwandtschaft zu Quasikristallen in ihren physikalischen Eigenschaften bemerkbar. So können zum Beispiel durch mechanische Belastung phasonische Freiheitsgrade angeregt werden und Phasen sich durch Variationen in der phasonischen Verschiebung ineinander umwandeln. Die besondere Bedeutung des 1.6 nm-Approximantensystems liegt darin, dass es möglich ist, alle auftretenden Phasen in einem einfachen niedrigdimensionalen Unterraum des sechsdimensionalen Hyperraums zu beschreiben. Speziell für die Tilings senkrecht zur 1.6 nm-Periodizität wurde für diese Arbeit ein dreidimensionales Modellsystem entwickelt. Mit Hilfe des Modellsystems können die Phasen durch breite und schmale Rauten aus dem Penrose-Tiling aufgebaut werden. Zwar wurden die breiten Rauten als Einheitszellen der ξ' -Phase in einem Artikel von Klein [53] erwähnt, die Idee, ein dreidimensionales Modellsystem zur Beschreibung zu verwenden, ist jedoch in der Literatur nicht vorhanden.

Im Rahmen des Modells werden im folgenden Phasengrenzen zwischen verschiedenen Approximanten untersucht. Die dabei auftretende Anordnung der Phasondefekte bestätigt, dass auch in Approximanten phasonische Freiheitsgrade kontinuierliche Ordnungsparameter sind. Des Weiteren lassen sich Aussagen über die Anregbarkeit von phasonischen Freiheitsgraden machen.

6.1 Phasondefekte

Die ξ' -Phase zeichnet sich im Tilingbild durch eine alternierende Anordnung von Hexagonreihen aus. Wie in Kapitel 4 beschrieben, sitzen an den Eckpunkten der Hexagone Atomsäulen, aufgebaut aus übereinander angeordneten ikosaedrischen Atomclustern, sogenannten Pseudo-Mackay-Clustern (Abbildung 6.1 links). Bei mechanischer Belastung können sich die Atome so umordnen, dass im perfekten Hexagongitter ein struktureller Defekt (bezeichnet mit A in Abbildung 6.1 rechts), bestehend aus einem Nonagon und einem Pentagon, bildet. Der Defekt hat Auswirkung auf die Anordnung der Hexagonlinien, da sich ihre Orientierungen am Defekt ändern. Aufgrund der Struktur des Tilings tauchen Nonagon und Pentagon immer zusammen auf.

Der Defekt ist ein Liniendefekt, die Defektlinie verläuft parallel zur periodischen Achse der dazugehörigen 1.6 nm dekadagonalen Phase, das heißt senkrecht zur Zeichenebene. Ist die Defektlinie dagegen leicht geknickt, so erscheint derselbe Defekt auf HREM-Aufnahmen in Richtung der Hexagonlinien etwas in die Länge gezogen (siehe Abbildung 6.2 links und die Defekte B und C in Abbildung 6.1 rechts).

In den ξ'_n -Phasen sind die Defekte periodisch in Reihen angeordnet (Abbildung 6.2 rechts), wobei sich Phasen mit verschiedenem n , wie schon in Abschnitt 4.4.1 bemerkt, durch den Abstand der Defekte und damit durch ihre Gitterkonstante senkrecht zu den Defektreihen unterscheiden. Diese ist gleich dem doppelten Abstand der Defektreihen, da aufeinanderfolgende Defektreihen versetzt angeordnet sind. Die Defekte bilden somit ein zentriertes orthorhombisches Gitter. Im Hyperraumformalismus zeichnen sich die ξ'_n -Phasen durch verschieden große phasonische Verschiebungen aus, das bedeutet, dass ihre Schnittebenen unterschiedlich orientiert sind. Die phasonischen Verschiebungen führen wiederum zu Umordnungen im Tiling und den beobachteten strukturellen Defekten, welche daher auch Phasondefekte genannt werden [53]. Phasondefekte sind jedoch keine topologischen Defekte im Sinne von Abschnitt 5.3.

6.2 Modellierung der ξ -, ξ' - und ξ'_n -Phasen

Um die ξ -, ξ' - und ξ'_n -Phasen einfacher beschreiben zu können, kann man sich eines niedrigdimensionalen Modells für die Konstruktion der Tilings senkrecht zur verallgemeinerten zehnzähligen Achse der verwandten dekadagonalen Phase bedienen. Die Schnittebenen \mathcal{E}^{\parallel} dieser Phasen werden aufgespannt von:

- (i) $\mathcal{E}_{\xi}^{\parallel}$ von $(0, 0, 1, 1, -1, 1)$, $(5, 1, 1, 1, 1, -1)$ und $(0, 1, 1, -1, 0, 1)$,
- (ii) $\mathcal{E}_{\xi'}^{\parallel}$ von $(0, 0, 1, 1, -1, 1)$, $(5, 1, 1, 1, 1, -1)$ und $(0, 2, 1, -2, 1, 2)$,
- (iii) $\mathcal{E}_{\xi'_n}^{\parallel}$ von $(0, 0, 2n + 1, 2n, -2n - 1, 2n)$, $(5, 1, 1, 1, 1, -1)$ und $(0, 2, 1, -2, 1, 2)$.

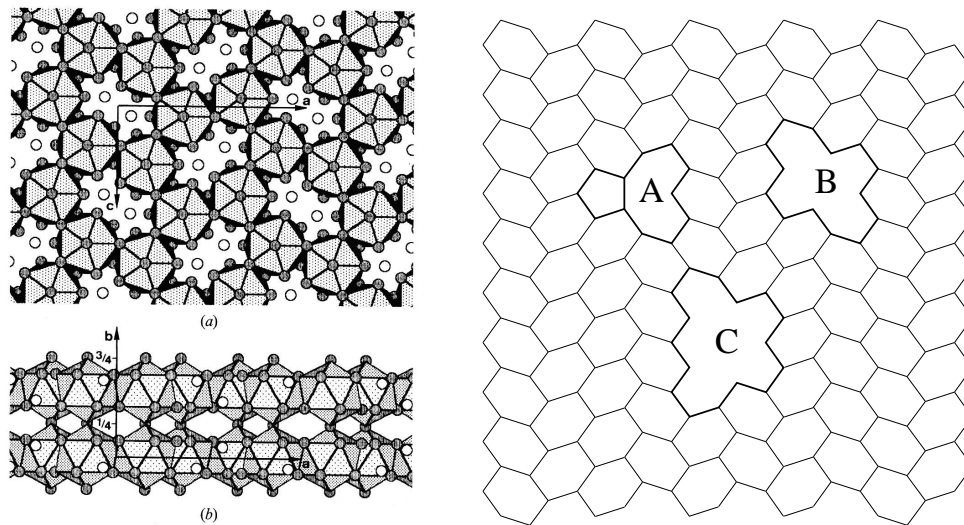


Abbildung 6.1: Links: Aufbau der ξ' -Phase mit ikosaedrischen Atomclustern bestehend aus Pd-Atomen (grau) und Mn-Atomen (weiß). Die Al-Atome sind nicht eingezeichnet, sie sitzen in den Lücken. Die Atomcluster liegen auf alternierenden Hexagonreihen [53]. Rechts: Tiling der ξ' -Phase mit strukturellen Defekten A, B und C.

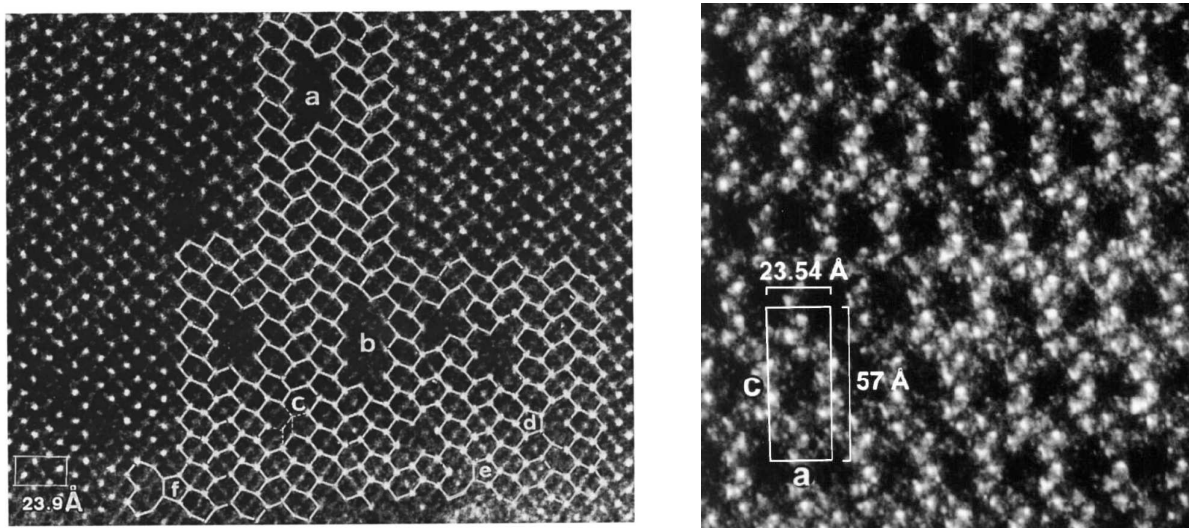


Abbildung 6.2: Links: HREM-Bild mit strukturellen Defekten in der ξ' -Phase. Im dünnen Teil der Probe erscheinen die Defekte als Pentagon und Nonagon (d, e und f), während sie sonst aufgrund der Probendicke in die Länge gezogen erscheinen (a, b und c) [53]. Rechts: HREM-Bild der ξ'_2 -Phase. Die hellen Punkte entsprechen den Atomsäulen, die dunkeln Stellen den Defekten. Letztere sind periodisch angeordnet [57].

Diese neun Vektoren liegen in einem vierdimensionalen Unterraum U . Betrachtet man nur Tilingebenen senkrecht zur verallgemeinerten fünfzähligen Achse des dazugehörigen ikosaedrischen Quasikristalls (aufgespannt von $(5, 1, 1, 1, 1, -1)$), dann wird die Dimension auf drei reduziert. Daher ist es möglich, die zweidimensionalen Tilingebenen der Approximanten mit einem dreidimensionalen Hyperraum zu konstruieren. Das entsprechende dreidimensionale Hypergitter und die Atomflächen können aus denjenigen des sechsdimensionalen Hyperraums berechnet werden.

Ein dreidimensionales Modell kann jedoch auch direkt erhalten werden durch die folgende Beobachtung: Wie in Abbildung 6.3 gezeigt, können die Phasen alternativ durch Rauten des Penrose-Tilings mit Kantenlänge $l_{\text{Raute}} = \frac{1}{5}\sqrt{2}(\tau + 2)^{3/2}a = 1.26 \text{ nm}$ aufgebaut werden. Anstelle der Phasendefektlinien mit Nonagonen/Pentagonen treten nun Reihen mit schmalen Rauten auf. Dazwischen befinden sich Reihen mit alternierenden breiten Rauten, für die Phase ξ'_n genau n Stück. Im Modell geht zwar die Orientierung der Nonagone/Pentagone verloren, was aber nicht weiter stört, da sie alle in dieselbe Richtung orientiert sind. Um ihre Orientierung festzulegen, ist im dreidimensionalen Modellhyperraum somit nur eine globale Orientierung zu bestimmen. Bei Symmetrieüberlegungen muss die Orientierung allerdings berücksichtigt werden.

Projiziert man die Einheitsvektoren $\tilde{\mathbf{e}}_i$ des \mathbb{Z}^5 -Gitters mit der Projektionsmatrix $\pi_{\text{pen}}^{\parallel}$ des Penrose-Tilings auf die Schnittebene, dann erhält man ein regelmäßiges Fünfeck (Abbildung 6.4). Von diesen Vektoren werden für die Modellkonstruktion nur die Vektoren $\pi_{\text{pen}}^{\parallel}\tilde{\mathbf{e}}_1$, $\pi_{\text{pen}}^{\parallel}\tilde{\mathbf{e}}_2$ und $\pi_{\text{pen}}^{\parallel}\tilde{\mathbf{e}}_5$ benötigt. Die Konstruktion der Tilings kann daher in einem dreidimensionalen Hyperraum mit dem kubischen Gitter \mathbb{Z}^3 und dem dreidimensionalen Einheitswürfel $W^3 = [0, 1]^3$ als Atombereich (Abschnitt 3.4) erfolgen. Die Projektionsmatrix auf den Parallelraum besteht aus der ersten, zweiten und fünften Spalte der Projektionsmatrix (2.5) des Penrosetilings:

$$\pi_{\text{model}}^{\parallel} = \begin{pmatrix} \cos(2\pi\frac{0}{5}) & \cos(2\pi\frac{1}{5}) & \cos(2\pi\frac{4}{5}) \\ \sin(2\pi\frac{0}{5}) & \sin(2\pi\frac{1}{5}) & \sin(2\pi\frac{4}{5}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2}\tau^{-1} & \frac{1}{2}\tau^{-1} \\ 0 & \frac{1}{2}\sqrt{2+\tau} & -\frac{1}{2}\sqrt{2+\tau} \end{pmatrix}. \quad (6.1)$$

Die Projektionsmatrix auf den eindimensionalen Orthogonalraum entspricht bis auf die Länge dem Kreuzprodukt der beiden Zeilen. Die Länge kann beliebig gewählt werden und wird daher so festgelegt, dass die folgenden Rechnungen möglichst einfach werden:

$$\pi_{\text{model}}^{\perp} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -\tau & -\tau \end{pmatrix}. \quad (6.2)$$

Die ξ -Phase entsteht durch periodische Anordnung der von $\pi^{\parallel}\tilde{\mathbf{e}}_1$ und $\pi^{\parallel}\tilde{\mathbf{e}}_5$ aufgespannten Raute. Basisvektoren der Schnittebene von ξ' sind $\pi^{\parallel}\tilde{\mathbf{e}}_1$ und $\pi^{\parallel}\tilde{\mathbf{e}}_5 - \pi^{\parallel}\tilde{\mathbf{e}}_2$. Analog verfährt man für die ξ'_n -Phasen. Schreibt man die noch nicht projizierten Basisvektoren in die Spalten einer Matrix A , dann erhält man die Basismatrizen der Schnittebenen $\mathcal{E}_{\xi}^{\parallel}$, $\mathcal{E}_{\xi'}^{\parallel}$ und

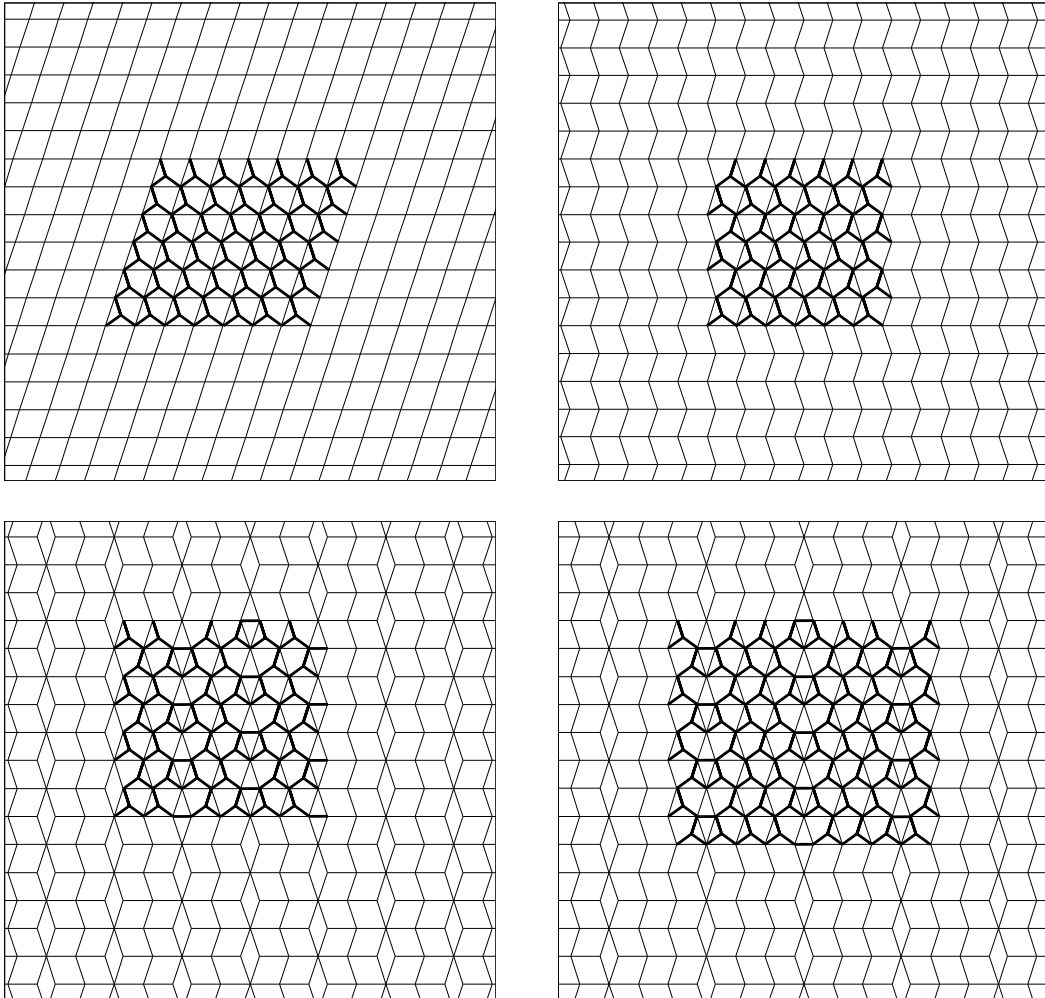


Abbildung 6.3: Die Tilings der ξ -, ξ' - und ξ'_n -Phasen können alternativ mit Rauten des Penrose-Tilings aufgebaut werden. Anordnungen von breite Rauten entsprechen Hexagonreihen, und schmale Rauten treten anstelle der Pentagon/Nonagon-Phasondefekte auf. Gezeigt sind die ξ -, ξ' -, ξ'_2 - und ξ'_3 -Phase.

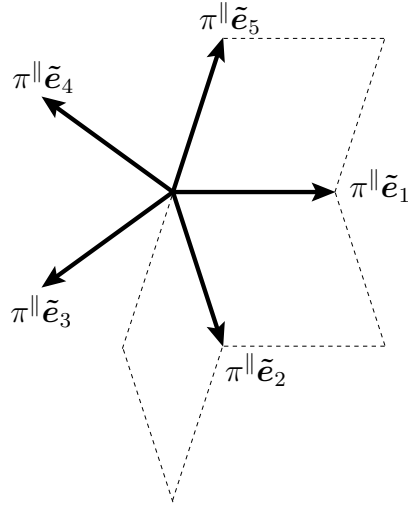


Abbildung 6.4: Projektion der Einheitsvektoren auf die Schnittebene beim Penrose-Tiling. Für die Konstruktion der Tilings in Abbildung 6.3 werden nur die Vektoren $\pi^{\parallel} \tilde{e}_1$, $\pi^{\parallel} \tilde{e}_2$ und $\pi^{\parallel} \tilde{e}_5$ benötigt.

$\mathcal{E}_{\xi'_n}^{\parallel}$ der Approximanten:

$$A_{\xi} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad A_{\xi'} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad A_{\xi'_n} = \begin{pmatrix} 2n & 0 \\ 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (6.3)$$

Umgekehrt erhält man aus diesen Basismatrizen wieder die zu Beginn angegebenen sechsdimensionalen Basen, wenn man berücksichtigt, dass $\pi^{\parallel} \tilde{e}_1$ dem Vektor $(0, 0, 1, 1, -1, 1)$ entspricht, $\pi^{\parallel} \tilde{e}_2$ dem Vektor $(0, -1, 0, 1, -1, -1)$ und $\pi^{\parallel} \tilde{e}_3$ dem Vektor $(0, 1, 1, -1, 0, 1)$. Das heißt, der Übergang vom dreidimensionalen Modellraum in den sechsdimensionalen Hyperraum geschieht über die Abbildungsmatrix

$$\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^6 : \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (6.4)$$

Die Schermatrizen lassen sich mit den Projektionsmatrizen formal bestimmen. Sie bestehen nur aus einer Zeile. Mit $\chi = \pi_{\text{approx}}^{\perp} A (\pi_{\text{approx}}^{\parallel} A)^{-1}$ aus (3.4) erhält man:

$$\chi_{\xi} = \left(1 \quad \frac{3\tau - 1}{\sqrt{2 + \tau}} \right), \quad \chi_{\xi'} = \left(1 \quad 0 \right), \quad \chi_{\xi'_n} = \left(2\tau \frac{n - \tau}{2n\tau + 1} \quad 0 \right). \quad (6.5)$$

Je größer n ist, desto weiter sind die Phasendefektreihen voneinander entfernt. Im Grenzfall unendlich großer Abstände, gehen die ξ'_n -Phasen in die ξ' -Phase über: $\lim_{n \rightarrow \infty} \chi_{\xi'_n} = \chi_{\xi'}$. Die Schermatrizen geben die phasonische Verschiebung gegenüber einer Phase mit Basis-matrix $A = (\pi_{\text{model}}^{\parallel})^t$ an. Diese tritt in der Physik allerdings nicht auf. Von Interesse ist die Länge der Differenz der Schermatrizen $\|\chi_1 - \chi_2\|$, da sie ein Maß für den Unterschied der phasonischen Verschiebungen zwischen den Phasen ist.

6.3 Phasengrenzen

Verschiedene Phasen besitzen unterschiedliche Orientierungen der Schnittebene \mathcal{E}^{\parallel} , die sich an Phasengrenzen ändern muss. Im Fall eines zweidimensionalen Quasikristalls in einem \tilde{d} -dimensionalen Hyperraum kann man \mathcal{E}^{\parallel} folgendermaßen erhalten: Betrachte zwei verschiedene Phasen mit den Schnittebenen $\mathcal{E}_1^{\parallel}$ und $\mathcal{E}_2^{\parallel}$ mit dazugehörigen Parametrisierungen $F_{1,2} : \mathbb{R}^{\tilde{d}} \rightarrow \mathcal{E}_{1,2}^{\parallel}$. Sie schneiden sich in der Schnittgeraden g . Die Parametrisierungen seien nun so gewählt, dass $F_1|_g = F_2|_g$, das heißt sie stimmen auf der Schnittgeraden überein. Sei $g^{2D} = \{(x, y) \mid F_1(x, y) \in g\}$ die auf den zweidimensionalen Parameterraum übertragenen Schnittgerade und $\hat{\mathbf{n}}^{2D} \in \mathbb{R}^2$ der Normalenvektor an g^{2D} . Beim kontinuierlichen Übergang der einen Phase in die andere muss sich die Orientierung anpassen. Die Anpassung wird parallel zu g^{2D} mit der Funktion $f(x, y) = \frac{1}{\pi} \arctan(\lambda \langle (x, y), \hat{\mathbf{n}}^{2D} \rangle) + \frac{1}{2}$ durchgeführt. Die Faktoren $\frac{1}{\pi}$ und $\frac{1}{2}$ sind so gewählt, dass $f(x, y) \rightarrow 1$ für $x \rightarrow \infty$ und $f(x, y) \rightarrow 0$ für $x \rightarrow -\infty$, und die Konstante λ entspricht der Breite der Phasengrenze. Die Parametrisierung der entstehenden Schnittfläche ist von der Form

$$\begin{aligned} F(x, y) &= f(x, y)F_1(x, y) + (1 - f(x, y))F_2(x, y) \\ &= F_2(x, y) + \left(\frac{1}{\pi} \arctan(\lambda \langle (x, y), \hat{\mathbf{n}}^{2D} \rangle) + \frac{1}{2} \right) (F_1(x, y) - F_2(x, y)). \end{aligned} \quad (6.6)$$

Im Beispiel $F_1(x, y) = (x, y, -x)$ und $F_2(x, y) = (x, y, x + y)$ (Abbildung 6.5 oben) erhält man $\hat{\mathbf{n}}^{2D} = (2, 1)$ und somit (Abbildung 6.5 unten):

$$\mathcal{E}^{\parallel} : z = x + y - \left(\frac{1}{\pi} \arctan \left(\frac{2x + y}{\lambda} \right) + \frac{1}{2} \right) (2x + y). \quad (6.7)$$

Betrachte nun die Phasengrenze zwischen der Phase ξ'_n und der Phase $\xi(\alpha)$ mit den Basis-matrizen

$$A_{\xi'_n} = \begin{pmatrix} 2n & 0 \\ 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad A_{\xi(\alpha)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -\alpha \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (6.8)$$

Die Phase $\xi(\alpha)$ ist eine Mischung der ξ -Phase ($\alpha = 0$, alle Hexagonreihen sind parallel ausgerichtet) mit der ξ' -Phase ($\alpha = 1$, aufeinanderfolgende Hexagonreihen sind immer al-

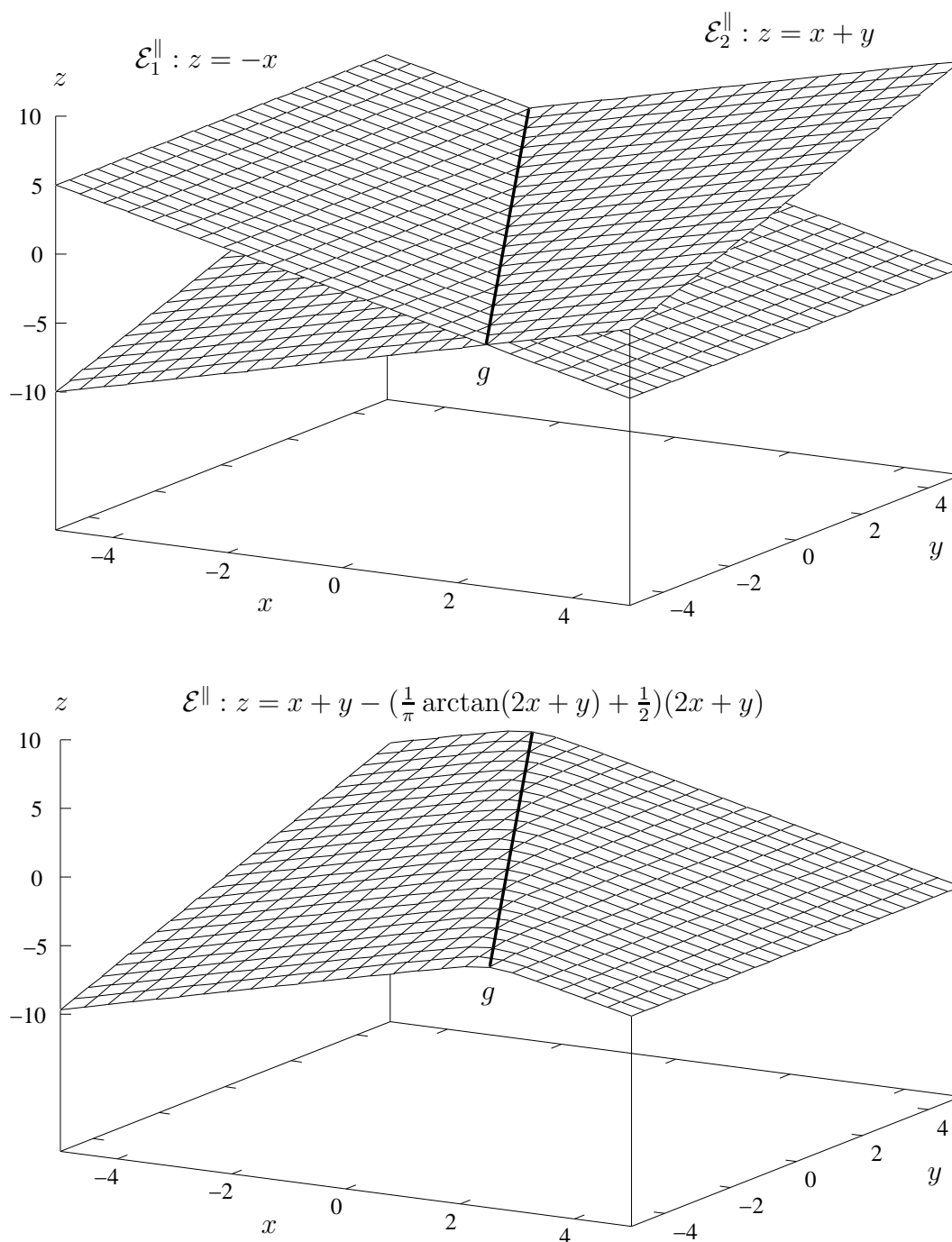


Abbildung 6.5: Oben: Schnittebenen $\mathcal{E}_1^{\parallel}$ und $\mathcal{E}_2^{\parallel}$ zweier Phasen im dreidimensionalen Modell. Sie schneiden sich in der Gerade g . Unten: An einer Phasengrenze muss sich für die Schnittfläche \mathcal{E}^{\parallel} die Orientierung der einen Schnittebene entlang g auf die Orientierung der anderen ändern. Die Richtung der Phasengrenze ist durch die Richtung von g vorgegeben.

ternierend). Für $0 < \alpha < 1$ ist nur der Bruchteil α von aufeinanderfolgenden Hexagonreihen alternierend. Der Richtungsvektor der Schnittgeraden ist $(n(1 - \alpha), -\alpha, 1)$.

Berechnet man das Tiling der Phasengrenze für $n = 2$, $\alpha = 0.8$ und $\lambda = 5$, so erhält man die Abbildung 6.6 links. Die ξ'_2 -Phase am rechten Rand geht kontinuierlich in die $\xi(0.8)$ -Phase am linken Rand über. Im Grenzbereich sind die Phasondefektreihen nach oben aufgebogen. Auf dem HREM-Bild in Abbildung 6.6 rechts ist ein ähnliches Verhalten der Phasondefekte beim Übergang von der ξ'_2 -Phase zur $\xi(\alpha)$ -Phase zu erkennen. Aus dem angegebenen Winkel von $\approx 5.5^\circ$ errechnet sich $\alpha \approx 0.55$. Die Phasengrenzen zwischen den ξ'_n -Phasen und der ξ -Phase beziehungsweise der ξ' -Phase sind in Abbildung 6.7 gezeigt. Es tritt keine Krümmung der Phasondefektreihen auf. In der oberen Abbildung gleichen die Phasondefektreihen die alternierende Anordnung der breiten Rauten in der ξ'_2 -Phase gegenüber der parallelen Anordnung in der ξ -Phase aus. In der unteren Abbildung muss kein solcher Ausgleich stattfinden. Die Phasonlinien verlaufen parallel. An der Phasengrenze erhöht sich ihr Abstand.

Die gute Übereinstimmung der beobachteten Phasengrenzen mit der entwickelten Theorie zeigt, dass der phasonische Freiheitsgrad auch für Approximanten von Quasikristallen ein kontinuierlicher Ordnungsparameter ist, sich also räumlich stetig verändert. Eine vollständige Beschreibung der Approximanten ist daher nur unter Einschluss der phasonischen Freiheitsgrade im Hyperraum möglich. Wie allerdings im nächsten Abschnitt erläutert wird, können diese in Approximanten auch eingefroren sein, das heißt nicht oder nur vergleichsweise schwerer anregbar. Die anregbaren phasonischen Freiheitsgrade müssen bei der Beschreibung von mechanischen, elektronischen oder anderen physikalischen Eigenschaften von Approximanten berücksichtigt werden.

6.4 Phasonische Freiheitsgrade

Approximanten mit einem intakten Tiling (in dem Sinne, dass das Tiling des Approximanten aus denselben Tiles wie das Tiling des dazugehörigen Quasikristalls aufgebaut ist) können nicht mit beliebigen Schnittebenen \mathcal{E}^\parallel erzeugt werden. Dies kann man sich am Beispiel der Fibonacci-Kette klarmachen (Abbildung 6.8 oben). Gezeigt ist die Schnittebene E^\parallel des Quasikristalls und die Schnittebene \mathcal{E}^\parallel eines Approximanten. Durch Projektion derjenigen \mathbb{Z}^2 -Elementarzellen, die von E^\parallel geschnitten werden, wird der Quasikristall erhalten. Die Projektion der horizontalen und vertikalen Seitenflächen der Zellen führt zu kurzen (S) und langen (L) Atomabständen.

Bei großen Orientierungsänderungen von \mathcal{E}^\parallel gegen E^\parallel kann es passieren, dass sich die projizierten Seitenflächen überlappen. In der Abbildung treten ein negativer \bar{S} -Atomabstand und zwei L -Atomabstände übereinander auf. Dabei bezieht sich die Bezeichnung negativ auf die Ausrichtung der projizierten Seitenflächen beim Durchlaufen von \mathcal{E}^\parallel . Ob \mathcal{E}^\parallel

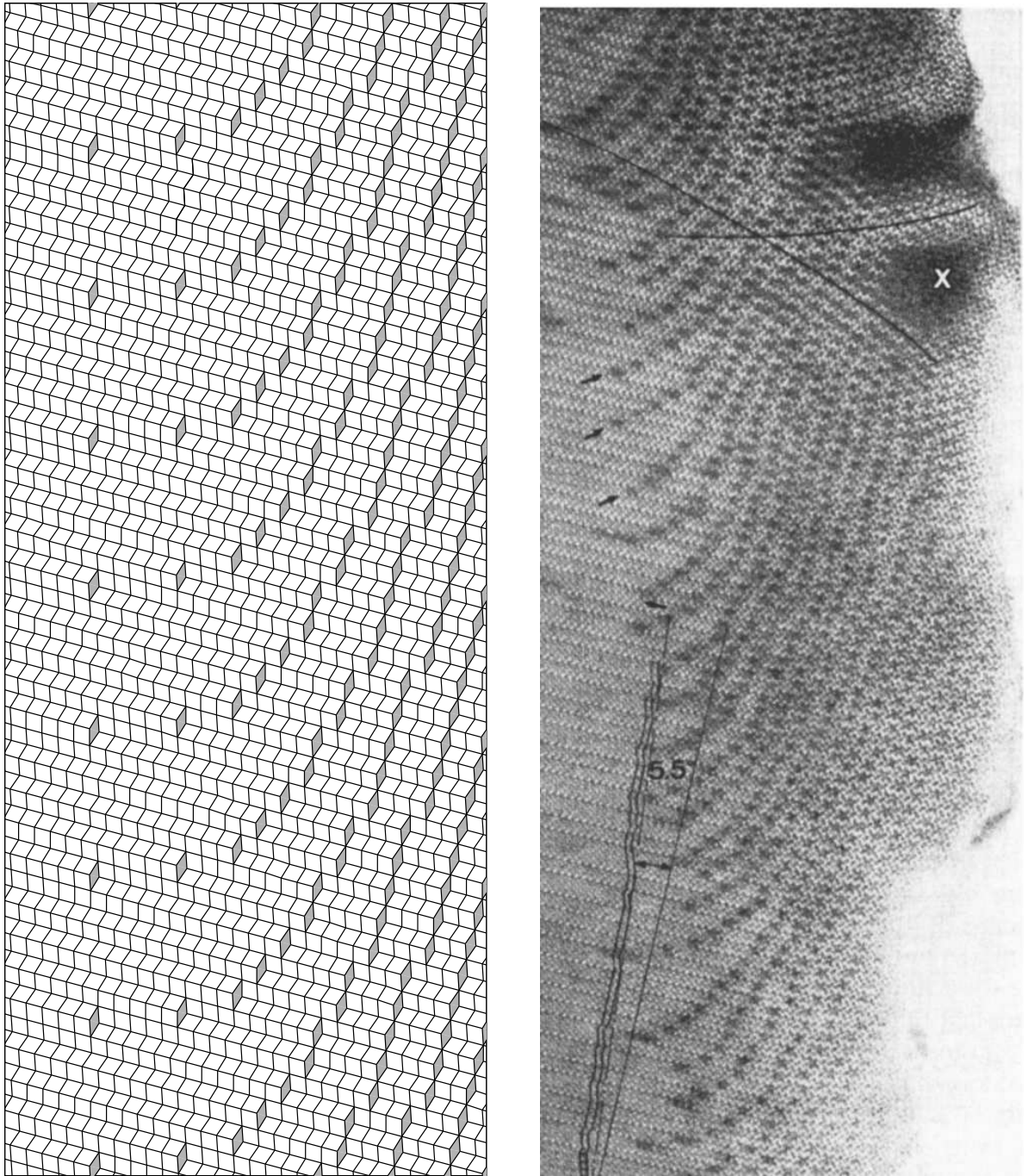


Abbildung 6.6: Links: Berechnete Phasengrenze zwischen der ξ'_2 -Phase (rechts) und der $\xi(0.8)$ -Phase (links) mit $\lambda = 5$. Rechts: Ein HREM-Bild einer Phasengrenze mit Übereinstimmung zum berechneten Tiling [53].

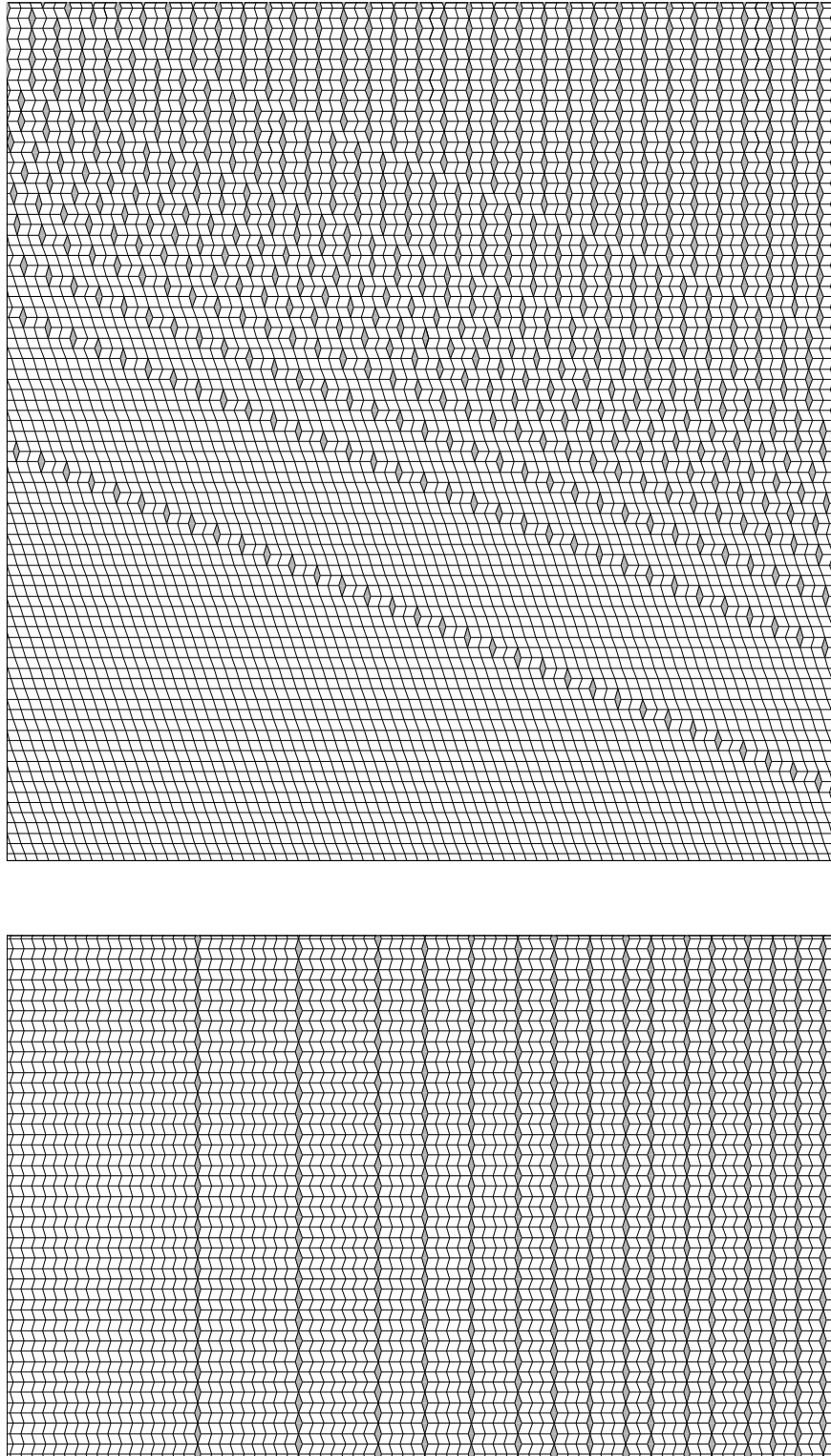


Abbildung 6.7: Phasengrenze zwischen der ξ'_2 -Phase und der ξ -Phase (oben) beziehungsweise der ξ' -Phase (unten).

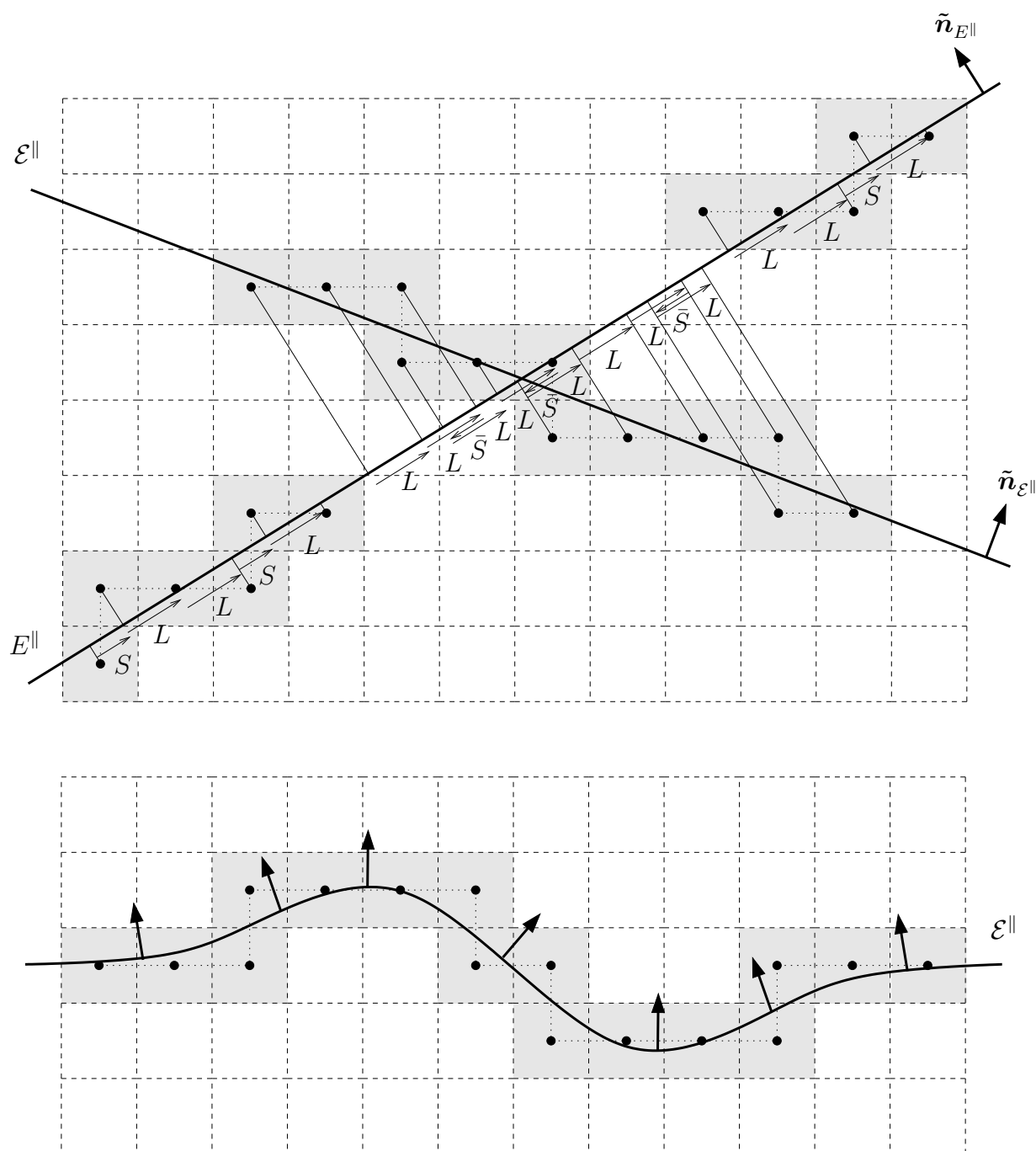


Abbildung 6.8: Oben: Die Fibonacci-Kette wird erzeugt mit dem \mathbb{Z}^2 -Gitter und den quadratischen Elementarzellen als Atombereiche. Es treten L - und S -Tiles auf. Zeigen die Normalen $\tilde{n}_{E^{\parallel}}$ und $\tilde{n}_{\varepsilon^{\parallel}}$ in unterschiedliche Quadranten, dann überlappen sich die Tiles. Unten: Lokale phasonische Verschiebungen führen zu einer ortsabhängigen Orientierung der Normalen. An der Grenze des Quadranten treten dann zwangsläufig Bereiche mit nicht intakter Tilingstruktur auf.

mit einem intakten Tiling vereinbar ist, lässt sich im Fall $d^\perp = 1$ anhand der Orientierung der Normalen $\tilde{\mathbf{n}}_{\mathcal{E}\parallel}$ der Schnittebene des Approximanten entscheiden. Die Normale $\tilde{\mathbf{n}}_{E\parallel}$ der Schnittebene des Quasikristalls zeigt in den linken oberen Quadranten $(-\infty, 0] \times [0, \infty)$. Zeigt $\tilde{\mathbf{n}}_{\mathcal{E}\parallel}$ ebenfalls in diesen oder in den am Ursprung gespiegelten Quadranten, so ist das entstehende Tiling intakt, andernfalls nicht. Dies kann auf das dreidimensionale Modellsystem aus Abschnitt 6.2 übertragen werden. $\tilde{\mathbf{n}}_{E\parallel}$ zeigt dort in den Quadranten $[0, \infty) \times (-\infty, 0] \times (-\infty, 0]$. Die Normalen $\tilde{\mathbf{n}}_\xi$, $\tilde{\mathbf{n}}_{\xi'}$ und $\tilde{\mathbf{n}}_{\xi'_n}$ zeigen ebenfalls in diesen Quadranten.

Bei lokalen phasonischen Verschiebungen wird die Orientierung der Normalen ortsabhängig. Probleme gibt es, wenn $\tilde{\mathbf{n}}_{\mathcal{E}\parallel}$ auf den Grenzen des Quadranten von $\tilde{\mathbf{n}}_{E\parallel}$ liegt. Dann führen infinitesimale phasonische Verschiebungen zwangsläufig zu Bereichen im Tiling, in denen die Normale aus dem gewünschten Quadranten herauszeigt (Abbildung 6.8 unten). In diesen Bereichen ist das Tiling dann nicht mehr intakt. Die Annahme, dass intakte Tilings energetisch sehr viel günstiger sind, impliziert dann, dass die phasonischen Freiheitsgrade in solchen Approximanten stetig nicht (beziehungsweise nur schwerer) anregbar sind. Versetzungen, die zu unstetigen Anregungen führen, können jedoch unter Umständen trotzdem existieren.

Alle beobachteten Approximanten des 1.6 nm dekadagonalen Quasikristalls, ebenso wie ihre Phasengrenzen, lassen sich mit dem dreidimensionalen Modell konstruieren. Auf den sechsdimensionalen Hyperraum übertragen heißt das, es treten nur phasonische Verschiebungen innerhalb des vierdimensionalen Unterraums U aus Abschnitt 6.2 auf. Die phasonischen Verschiebungen senkrecht zu U spielen eine untergeordnete Rolle, die dazugehörigen beiden Freiheitsgrade sind nicht anregbar. Die Normalen der Schnittebenen der ξ - und der ξ' -Phase, das sind $\tilde{\mathbf{n}}_\xi = (0, 1, 0)$ und $\tilde{\mathbf{n}}_{\xi'} = (0, 1, 1)$, liegen im Modellsystem auf den Grenzen des Quadranten $[0, \infty) \times (-\infty, 0] \times (-\infty, 0]$. Daher ist in diesen Phasen auch der dritte phasonische Freiheitsgrad nicht anregbar. Zusammenfassend bedeutet das:

- (i) In der ξ - und der ξ' -Phase sind phasonische Freiheitsgrade (stetig) nicht anregbar. Diese Phasen verhalten sich daher (zum Beispiel bezüglich der Elastizitätstheorie) wie periodische Kristalle im klassischen Sinne.
- (ii) In den ξ'_n -Phasen ist nur ein phasonischer Freiheitsgrad anregbar. Phasonische Verschiebungen zeigen sich in Bewegungen der Phasondefektreihen, welche klassisch nicht erklärbar sind.

Durch stetige Variation der phasonischen Verschiebung und damit durch Wanderungen der Phasondefektreihen kann sich aus einer ξ'_n -Phase eine beliebige ξ'_m -Phase mit $m \neq n$ bilden. Phasenänderungen von der ξ - oder der ξ' -Phase ineinander oder zu ξ'_n -Phasen sind dagegen kontinuierlich nicht möglich. Sie sind zwangsläufig mit der Wanderung von Versetzungen verbunden.

6.5 Symmetrieäquivalente Schnittebenen

Approximanten können in unterschiedlichen Orientierungen vorkommen, je nach Ausrichtung der Schnittebene im Hyperraum. Dabei sind die Basen verschiedener Schnittebenen durch Elemente der verallgemeinerten Symmetriegruppen des dazugehörigen Quasikristalls verknüpft. Schnittebenen die (bis auf Rotation im physikalischen Raum) dieselben Approximanten erzeugen, werden daher auch symmetrieäquivalent genannt.

Betrachte als Beispiel die ξ -Phase. Als sechsdimensionale Basisvektoren der Schnittebene wurden in Abschnitt 6.2 die Vektoren $\tilde{\mathbf{e}}_{\xi,x} = (0, 0, 1, 1, -1, 1)$, $\tilde{\mathbf{e}}_{\xi,y} = (5, 1, 1, 1, 1, -1)$ und $\tilde{\mathbf{e}}_{\xi,z} = (0, 1, 1, -1, 0, 1)$ verwendet. Beschränkt man sich auf diejenigen Orientierungen, die zur selben Periodizität in Richtung der verallgemeinerten zehnzähligen Achse der dazugehörigen dekagonalen Phase führen, das heißt $\tilde{\mathbf{e}}_{\xi,y}$ fest lassen, so existieren fünf verschiedene symmetrieäquivalente Schnittebenen, die sukzessive durch die vorzeichenbehaftete Permutation $(234\bar{6}5) = (1 \mapsto 1, 2 \mapsto 3, 3 \mapsto 4, 4 \mapsto -6, 6 \mapsto -5, 5 \mapsto 2)$ der Positionen der Vektoreinträge hervorgehen. Die Permutation entspricht der Anwendung der Matrix a aus (3.5) auf die Basisvektoren, was im physikalischen Raum einer 72° -Rotation um $\tilde{\mathbf{e}}_{\xi,y}$ entspricht. Außerdem führt die Spiegelung $(1 \mapsto 1, 2 \mapsto -2, 3 \mapsto -3, 4 \mapsto -4, 5 \mapsto -5, 6 \mapsto -6)$ der letzten fünf Positionen der Vektoreinträge, die einer Drehung der Phasendefektlinien um 180° entspricht, zu fünf weiteren symmetrieäquivalenten Schnittebenen. Im dreidimensionalen Modellsystem können die Approximanten ξ' und ξ'_n nur in jeweils einer und der Approximant ξ in zwei Orientierungen beschrieben werden. Die restlichen symmetrieäquivalenten Schnittebenen liegen außerhalb des niedrigdimensionalen Hyperraums. Für ein erweitertes Modell, das gleichzeitig alle symmetrieäquivalenten Schnittebenen beschreibt kann der Hyperraum des Penrosetilings mit dem \mathbb{Z}^5 -Gitter und der Projektionsmatrix $\pi_{\text{pen}}^{\parallel} = \pi_{\text{diedr},5}^{\parallel}$ aus (2.5) verwendet werden. In der Orientierung aus Abschnitt 3.5 sind die Basismatrizen der Schnittebenen

$$A_{\xi} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad A_{\xi'} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad A_{\xi'_n} = \begin{pmatrix} 2n & 0 \\ 1 & -1 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (6.9)$$

Symmetrieäquivalente Schnittebenen werden im fünfdimensionalen Modell durch die Permutation (12345) der Zeilen in den Basismatrizen erhalten. Wie zu erwarten war, werden die dritten und vierten Komponenten für die Beschreibung der Approximanten nicht benötigt. Sie müssen allerdings bei der Beschreibung von Versetzungen oder Phasengrenzen berücksichtigt werden, wenn der Burgersvektor der Versetzung beziehungsweise eine der Schnittflächen der aneinandergrenzenden Phasen außerhalb des dreidimensionalen Modellsystems liegen.

Kapitel 7

Metaversetzungen

Wie im letzten Kapitel gezeigt wurde, sind auch in Approximanten phasonische Freiheitsgrade vorhanden. Diese können entweder anregbar sein, wie der phasonische Freiheitsgrad in den ξ'_n -Phasen, oder eingefroren, wie diejenigen in der ξ - und der ξ' -Phase. Unabhängig davon können sie sich durch das Auftreten von Versetzungen mit phasonischen Komponenten bemerkbar machen. Die gute Beobachtbarkeit der Atomsäulen, die die Eckpunkte des Tilings markieren, machen eine direkte Untersuchung solcher Versetzungen mit dem Elektronenmikroskop möglich. In diesem Kapitel werden die Metaversetzungen mit Hilfe der entwickelten Modellsysteme beschrieben und die auftretenden Burgersvektoren erklärt. Anschließend wird auf die Dynamik der Metaversetzungen eingegangen. Die existierenden experimentellen Ergebnisse, die auf den Veröffentlichungen von Feuerbacher und Klein basieren, lassen eine vorläufige theoretische Interpretation zu.

7.1 Metaversetzungen im 3D-Modellsystem

Herkömmliche Versetzungen sind gekennzeichnet durch einen Burgersvektor in der Schnittebene \mathcal{E}^{\parallel} und haben daher eine phasonische Komponente $\mathbf{b}_{\text{approx}}^{\perp} = 0$. Diese Versetzungen führen allerdings aufgrund der großen Gitterkonstanten zu hohen phononischen Verzerrungsfeldern und damit zu hohen elastischen Energien und wurden experimentell bisher nicht beobachtet. Andere Versetzungen mit $\mathbf{b}_{\text{approx}}^{\perp} \neq 0$ führen zu sogenannten Metaversetzungen, von denen in diesem Abschnitt diejenigen untersucht werden, die sich im dreidimensionalen Modellsystem beschreiben lassen. Abbildung 7.1 zeigt, wie sich \mathcal{E}^{\parallel} im Dreidimensionalen bei Anwesenheit einer Versetzung mit $\mathbf{b}_{\text{approx}}^{\parallel} = 0$ verändert.

7.1.1 Metaversetzungen in den ξ'_n -Phasen

Aufgrund der phasonischen Freiheitsgrade treten in den ξ'_n -Phasen Versetzungen auf, deren Burgersvektoren aus \mathcal{E}^{\parallel} heraus zeigen. Im Tiling macht sich eine solche Versetzung in

der Anordnung der Phasondefektreihen bemerkbar. Je nach Burgersvektor sind am Versetzungskern eine unterschiedliche Zahl von Phasondefekt-Halbreihen eingeschoben. Ein Burgersumlauf um einen Versetzungskern ist in Abbildung 7.2 gezeigt. Die Wege A und C beziehungsweise B und D heben sich gegenseitig auf. Es bleibt nur der Weg E übrig, der zum Burgersvektor $(2, -1, 3)$ gehört. Der Burgersvektor $\tilde{\mathbf{b}}_1 = (1, 0, 0)$ führt zum Einschub einer Halbreihe breiter Rauten unterhalb des Versetzungskerns, der Burgersvektor $\tilde{\mathbf{b}}_2 = (0, 1, -1)$ zum Einschub zweier Halbreihen breiter Rauten links des Versetzungskerns und der Burgersvektor $\tilde{\mathbf{b}}_3 = (0, 1, 0)$ zum Einschub einer Halbreihe von Phasondefekten unterhalb, sowie einer Halbreihe von breiten Rauten links des Versetzungskerns. Diese drei Vektoren bilden eine \mathbb{Z} -Basis des \mathbb{Z}^3 -Gitters, und ein beliebiger Burgersvektor $\tilde{\mathbf{b}} = (b_1, b_2, b_3)$ mit $b_i \in \mathbb{Z}$ kann in ihr zerlegt werden:

$$\tilde{\mathbf{b}} = b_1 \tilde{\mathbf{b}}_1 - b_3 \tilde{\mathbf{b}}_2 + (b_2 + b_3) \tilde{\mathbf{b}}_3. \quad (7.1)$$

Die Zahl der eingeschobenen Phasondefekt-Halbreihen ist gegeben durch $b_2 + b_3$. Im Fall des Burgersvektors $(2, -1, 3)$ sind dies zwei Stück.

Wie sich herausstellt, werden in den ξ'_n -Phasen genau diejenigen Versetzungen mit kleinen phononischen Komponenten \mathbf{b}^{\parallel} beobachtet. Sei $\tilde{\mathbf{b}} = (b_1, b_2, b_3)$ wieder ein beliebiger Burgersvektor einer Versetzung mit phasonischer Komponente. Dann ist mit (6.1):

$$\mathbf{b}^{\parallel} = \pi_{\text{model}}^{\parallel} \tilde{\mathbf{b}} = \begin{pmatrix} b_1 + \frac{1}{2}\tau^{-1}(b_2 + b_3) \\ \frac{1}{2}\sqrt{2 + \tau}(b_2 - b_3) \end{pmatrix}. \quad (7.2)$$

Die phononische Komponente wird klein, wenn gilt: $b_2 = b_3$ und $\frac{b_2}{b_1} \approx -\tau$. In diesem Fall ist $\|\mathbf{b}^{\parallel}\| = |b_1 + \tau^{-1}b_2|$. Die besten approximierenden Brüche für τ sind nach Anhang C gegeben durch $\frac{F_m}{F_{m-1}}$ mit $m \in \mathbb{N}$, also

$$\tilde{\mathbf{b}} = \begin{pmatrix} F_{m-1} \\ -F_m \\ -F_m \end{pmatrix}. \quad (7.3)$$

Der sechsdimensionale Burgersvektor berechnet sich mit Hilfe von Gleichung (6.4) zu $\tilde{\mathbf{b}}_{6D} = (0, 0, -F_{m-2}, F_{m-1}, F_{m-2}, F_{m-1})$. Für die dazugehörigen Versetzungen ist mit Satz 2.5 auf Seite 23:

$$\mathbf{b}^{\parallel} = \begin{pmatrix} F_{m-1} - \tau^{-1}F_m \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (-\tau)^{-m} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (7.4)$$

Am Versetzungskern enden von einer Seite her $2F_m$ Phasondefekt-Halbreihen, das heißt Reihen mit schmalen Rauten, und von der anderen Seite her F_{m-1} Reihen mit breiten

$$\mathcal{E}^{\parallel} : z = \frac{1}{\pi} \arctan\left(\frac{x}{y}\right) + \frac{1}{2}\left(\frac{|y|}{y} + 1\right)$$

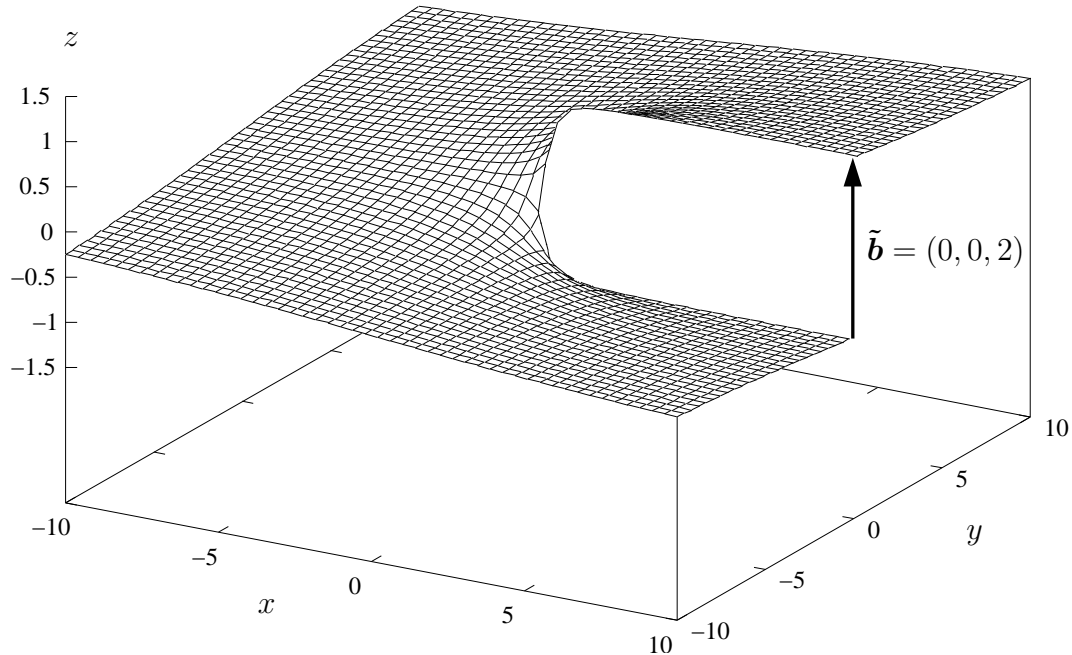


Abbildung 7.1: Schnittfläche \mathcal{E}^{\parallel} mit eingebauter Versetzung bei $(0,0)$ mit Burgersvektor $\tilde{\mathbf{b}} = (0,0,2)$ im dreidimensionalen Modellsystem. Die versetzungsfreie Schnittebene ist parallel zur xy -Ebene. Der Versetzung führt in der isotropen Näherung zu einer linear winkelabhängigen Verschiebung.

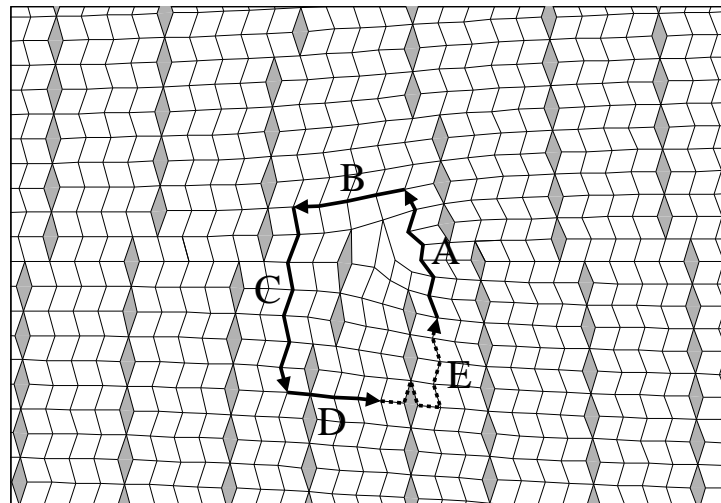


Abbildung 7.2: Burgersumlauf ABCDE um eine Versetzung in der ξ_4' -Phase. Der Burgersvektor ist $(2, -1, 3)$. Am Versetzungskern sind von unten zwei Phasendefekt-Halbreihen eingeschoben.

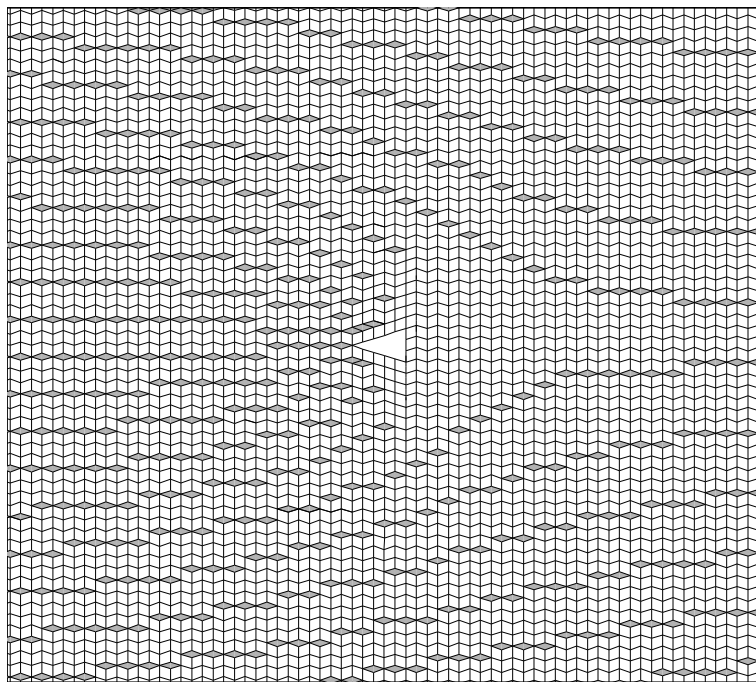
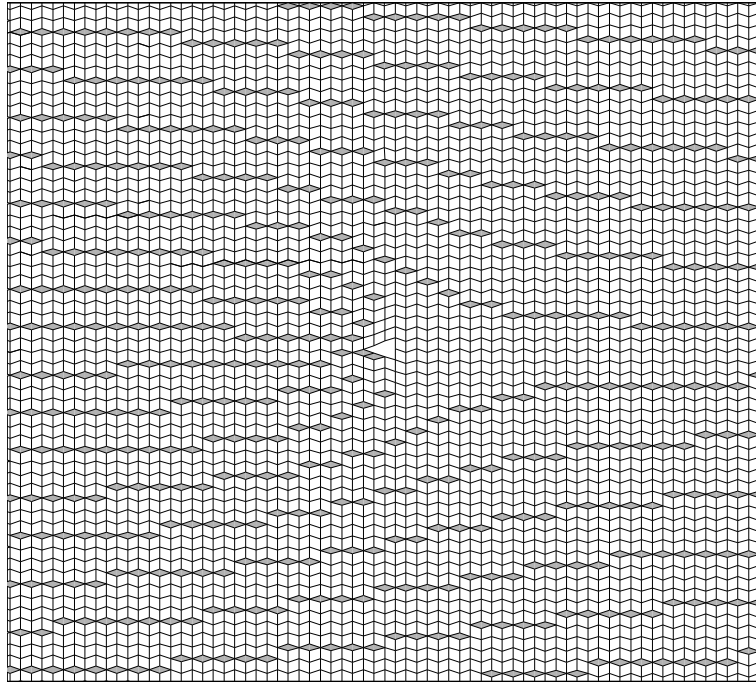


Abbildung 7.3: Versetzungen in der ξ'_3 -Phase mit Burgersvektoren $\tilde{\mathbf{b}} = (F_{m-1}, -F_m, -F_m)$. Im Fall $m = 4$ (oben) und $m = 5$ (unten). Es sind von links 6 beziehungsweise 10 Halbreihen mit schmalen Rauten eingeschoben und von rechts 2 beziehungsweise 3 Halbreihen mit breiten Rauten.

Rauten (Abbildung 7.3). Die Phasondefektreihen sind versetzt angeordnet und treten paarweise auf. Die Zahl und Art der eingeschobenen Halbebenen erkennt man an der Zerlegung (7.1). Diese ist: $\tilde{\mathbf{b}} = F_{m-1}\tilde{\mathbf{b}}_1 + F_m\tilde{\mathbf{b}}_2 - 2F_m\tilde{\mathbf{b}}_3$.

Die Anordnung der Phasondefekte im zentrierten rhombischen Gitter unter Vernachlässigung der breiten Rauten wird als Metastruktur bezeichnet und die Versetzung in dieser Überstruktur als Metaversetzung, im Gegensatz zur (Mikro-)Versetzung im Tiling. Die Metaversetzung ist eine Versetzung im klassischen Sinne, da zu ihrer Beschreibung keine phasonischen Komponenten benötigt werden, und sie ist durch einen größeren Burgersvektor $\mathbf{b}_{\text{meta}}^{\parallel}$ charakterisiert. Dieser ist gegeben durch das Produkt des Gittervektors senkrecht zu den Phasondefektreihen mit der Zahl der eingeschobenen Doppel-Halbreihen mit Phasondefekten, da pro Gitterperiode der ξ'_n -Phasen eine solche Doppelreihe auftritt. Das sind im obigen Fall F_m Stück. Mit Gleichung (6.3) ist:

$$\mathbf{b}_{\text{meta}}^{\parallel} = F_m \pi_{\text{model}}^{\parallel} \begin{pmatrix} 2n \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_m(2n + \tau^{-1}) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (7.5)$$

Mit der Gitterkonstante $a = 0.645$ nm des sechsdimensionalen Hypergitters und der Kantenlänge $l_{\text{Raute}} = \frac{1}{5}\sqrt{2}(\tau + 2)^{3/2}a = 1.26$ nm der Rauten erhält man zusammenfassend für die Versetzungen in der ξ'_n -Phase mit geringen phononischen Verzerrungen und $2F_m$ eingeschobenen Phasondefekt-Halbreihen:

$$\begin{aligned} b^{\parallel} &= \|\mathbf{b}^{\parallel}\| l_{\text{Raute}} = \tau^{-m} l_{\text{Raute}}, \\ b_{\text{meta}}^{\parallel} &= \|\mathbf{b}_{\text{meta}}^{\parallel}\| l_{\text{Raute}} = F_m(2n + \tau^{-1}) l_{\text{Raute}}. \end{aligned} \quad (7.6)$$

HREM-Aufnahmen sind in Abbildung 7.4 rechts gezeigt. Links sind aus dem sechsdimensionalen Hyperraum berechnete Tilings dargestellt. Die experimentell am häufigsten beobachtete Versetzung ist diejenige mit $m = 4$ in der ξ'_2 -Phase. Desweiteren wurden Versetzungen mit $2 \leq m \leq 6$ beobachtet [31]. Die berechneten Burgersvektoren für $m = 4$ sind: $b^{\parallel} = 0.183$ nm und $b_{\text{meta}}^{\parallel} = 17.4$ nm. Der von Klein und Feuerbacher [57] gemessene Burgersvektor der Metaversetzung ist: $b_{\text{meta}}^{\parallel} = 17.1$ nm.

7.1.2 Metaversetzungen in der ξ - und der ξ' -Phase

Obwohl in der ξ' -Phase phasonische Freiheitsgrade nicht anregbar sind, können in ihr Versetzungen mit phasonischen Komponenten existieren. Sie werden ebenfalls Metaversetzungen genannt und sind von Phasondefekt-Halbreihen begleitet, die nun allerdings isoliert auftreten. Die physikalisch relevanten Burgersvektoren sind mit denjenigen der ξ'_n -Phasen identisch, um auch hier die phononischen Verzerrungen zu minimieren. Eine Metaversetzung mit $2F_m$ eingeschobenen Phasondefekt-Halbreihen im Fall $m = 4$ ist in Abbildung

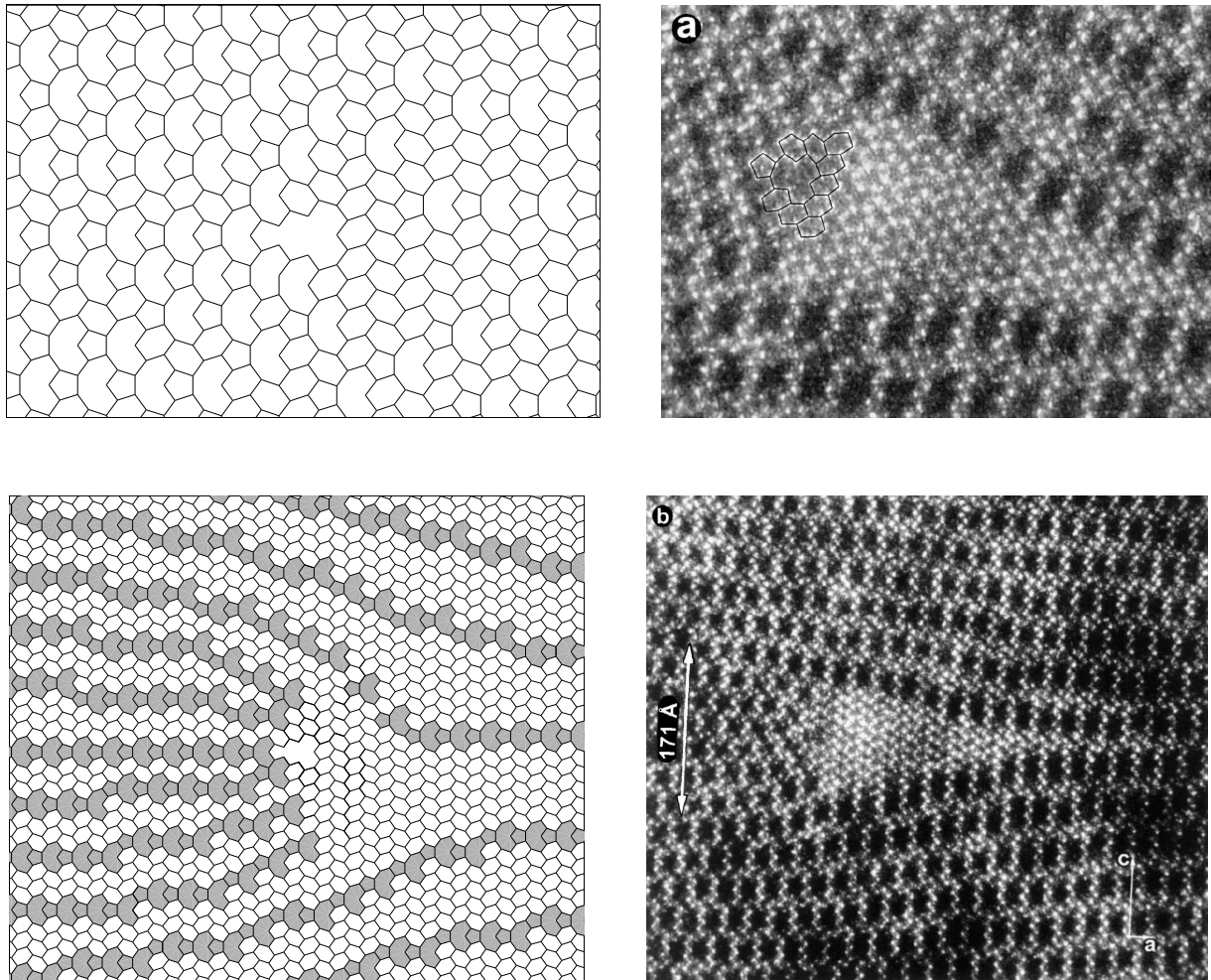


Abbildung 7.4: Metaversetzungen mit $m = 4$. Links oben: Berechnetes Tiling um den Versetzungskern in der ξ_2' -Phase. Rechts oben: HREM-Bild des Versetzungskerns in der ξ_2' -Phase [57]. Links unten: Tiling in der Umgebung des Versetzungskerns. Um die Phasondefektreihen besser sichtbar zu machen, wurde die Versetzung in die ξ_4' -Phase eingebaut. Rechts unten: HREM-Bild der Versetzungsumgebung in der ξ_2' -Phase [57].

7.5 gezeigt. Die Phasondefekt-Halbreihen verlaufen vom Versetzungskern aus zuerst nach außen hin und dann parallel in vertikaler Richtung. Der Bereich, in dem sie gekrümmt nach außen laufen, wird als Versetzungskopf bezeichnet, der Bereich, in dem sie parallel verlaufen, als Versetzungsschwanz.

Das phasonische Verschiebungsfeld ist im Gegensatz zu einer Metaversetzung in den ξ'_n -Phasen nicht isotrop relaxiert. Eine solche Relaxation würde zu einem nicht intakten Tiling führen, da die Normale der Schnittfläche zwangsläufig aus dem gewünschten Quadranten herauszeigen würde (Abschnitt 6.4). Dies kann man sich anhand der Schnittfläche \mathcal{E}^{\parallel} in Abbildung 7.6, die zur Berechnung von Abbildung 7.5 verwendet wurde, verdeutlichen. In der Abbildung zeigt die Normale stets in den Quadranten $[0, \infty) \times (-\infty, 0] \times [0, \infty)$. Bei isotroper Relaxation wie in Abbildung 7.1 würde sie in alle Quadranten mit $z \geq 0$ zeigen. In den ξ'_n -Phasen ist ein solcher Quadrantenwechsel kein Problem, da die Normale der ξ'_n -Phase nicht auf der Grenze eines Quadranten liegt.

Um \mathcal{E}^{\parallel} zu berechnen, wird die Koordinatenbasis aus den Vektoren $\tilde{\mathbf{e}}_x = (0, -1, 1)$, $\tilde{\mathbf{e}}_y = (1, 0, 0)$ und $\tilde{\mathbf{e}}_z = (0, 1, 1)$ verwendet. In dieser Basis sind die Schnittebenen der ξ' und der ξ'_n -Phasen gegeben durch $F_{\xi'}(x, y) = (x, y, 0)$ beziehungsweise $F_{\xi'_n}(x, y) = (x, y, \frac{1}{2n}x)$. Im Bereich der ξ' -Phase ist die Schnittfläche parallel zur xy -Ebene. Ihre Orientierung ändert sich beim Übergang in den Versetzungsschwanz, in dem eine ξ'_n -Phase vorliegt. Dort verlaufen die Phasondefekt-Halbreihen in positiver y -Richtung. Der Versetzungskern sei in den Koordinatenursprung gelegt und der die Versetzung begleitende Phasensprung um den Burgersvektor $\tilde{\mathbf{b}}$ ebenfalls auf den positiven Teil der y -Achse. Für die Parametrisierung der Schnittfläche im Versetzungsschwanz $y \gg 0$ lautet der einfachste Ansatz:

$$F(x, y) = F_{\xi'(x,y)} + \frac{x}{2} \left(\frac{1}{|x|} - \frac{1}{\lambda_1} \right) \tilde{\mathbf{b}} \quad \text{für } |x| < \lambda_1 \text{ und } y \gg 0. \quad (7.7)$$

Der Parameter λ_1 kontrolliert den Abstand der Phasondefektreihen, also die Größe n . Im Bereich des Versetzungskopfes nimmt dieser Abstand in y -Richtung kontinuierlich zu. Dies kann modelliert werden mit der Arkustangens-Funktion: $\lambda_1(y) = \lambda_1 \frac{2}{\pi} \arctan(\frac{y}{\lambda_2})$, die noch den Parameter λ_2 enthält, welcher ein Maß für die Länge des Versetzungskopfes ist. Die Form der Schnittfläche im Fall $\tilde{\mathbf{b}} = (0, 0, 1)$ ist in Abbildung 7.6 gezeigt. Es ist:

$$F(x, y) = F_{\xi'(x,y)} + \begin{cases} \frac{x}{2} \left(\frac{1}{|x|} - \frac{\pi}{2\lambda_1} / \arctan(\frac{y}{\lambda_2}) \right) \tilde{\mathbf{b}} & \text{für } y > 0 \text{ und } |x| < \frac{2\lambda_1}{\pi} \arctan(\frac{y}{\lambda_2}), \\ \tilde{\mathbf{0}} & \text{sonst.} \end{cases} \quad (7.8)$$

In der ξ -Phase sind dagegen keine Metaversetzungen möglich, da für die Phasondefekte alternierende breite Rauten benötigt werden, die es in dieser Phase nicht gibt. Metaversetzungen in der ξ' -Phase wurden experimentell von Klein [56] beobachtet, siehe auch die Abbildungen 7.8 und 7.9.

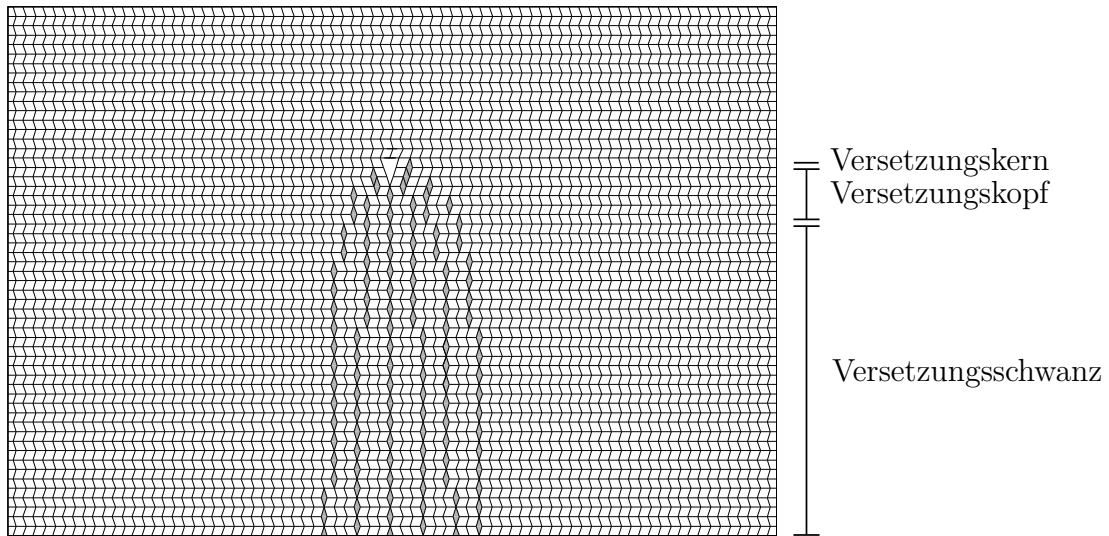


Abbildung 7.5: Metaversetzung mit sechs eingeschobenen Phasondefekt-Halbreihen in der ξ' -Phase.

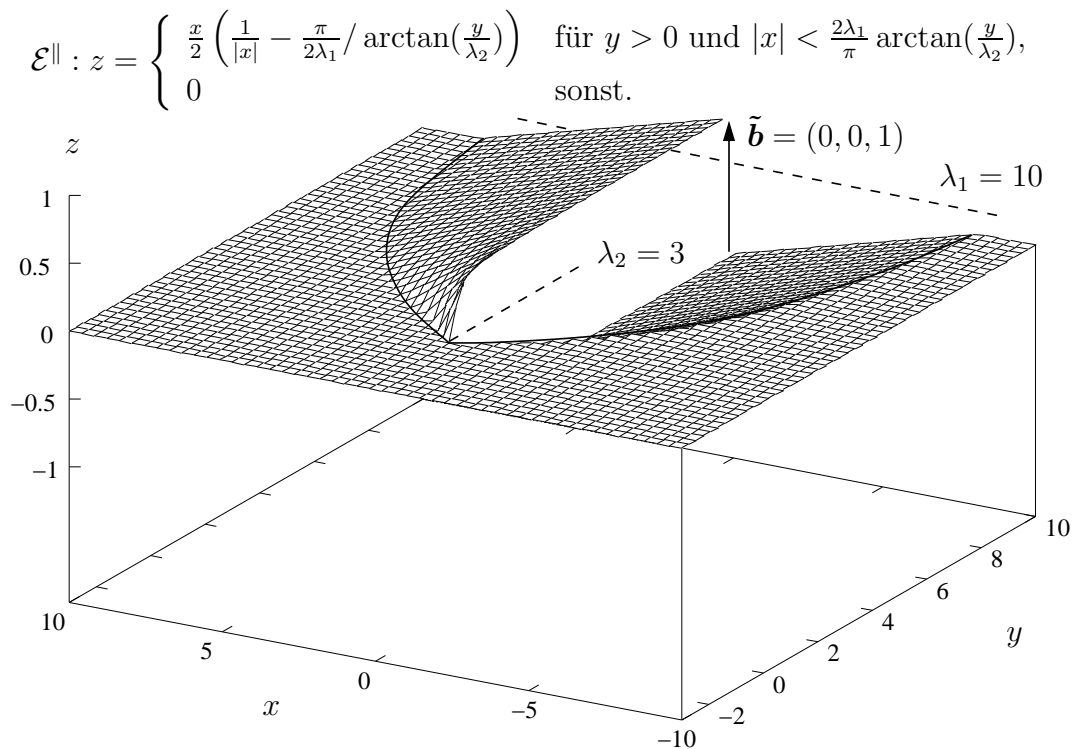


Abbildung 7.6: Schnittfläche \mathcal{E}^{\parallel} mit eingebauter Metaversetzung in der ξ' -Phase (in geeigneten Koordinaten). Das phasonische Verschiebungsfeld ist aufgrund der Wechselwirkung der Phasondefektreihen nicht relaxiert, und somit nicht isotrop. Die Parameter λ_1 und λ_2 entsprechen der Breite des Versetzungsschwanzes und der Länge des Versetzungskopfes.

7.2 Bewegung der Metaversetzungen

Da sich Versetzungen nur am Rand eines Festkörpers oder an einer punktförmigen Versetzungsquelle bilden können, müssen sich Metaversetzungen bei ihrer Entstehung notwendigerweise bewegt haben, obwohl bisher noch keine experimentelle Beobachtung einer solchen Bewegung erfolgen konnte. In diesem Abschnitt werden mögliche Bewegungsarten der Metaversetzung im Hochtemperaturfall diskutiert, wobei bei hoher Temperatur Variationen in den phasonischen Verschiebungen instantan relaxieren.

Betrachte nun exemplarisch eine Metaversetzung in einer ξ'_n -Phase. Die Überlegungen verlaufen für andere Metaversetzungen ähnlich. Die Normale der Gleitebene der Metaversetzung verläuft parallel zu den Phasondefektreihen. Eine Gleitbewegung ist in Abbildung 7.7 dargestellt. Die Bewegung des Versetzungskerns verläuft hier in horizontaler Richtung nach rechts. Während der Bewegung springen die oberen Hälften der vom Versetzungskern überquerten Phasondefektreihen von einer Seite auf die andere, wobei der Sprungprozess selbst in relativ kurzer Zeit statt findet (Abbildung 7.7, mitte). Betrachtet man nur die Anordnung der Phasondefekte, so entspricht die Versetzung der Gleitbewegung einer herkömmlichen Versetzung in einem zweidimensionalen flächenzentrierten Gitter. Die Bewegungsgeschwindigkeit der Phasondefekte nimmt antiproportional mit dem Abstand ab.

Alternativ kann die Versetzungsbewegung durch Klettern erfolgen. Verläuft die Bewegung parallel zu den Phasondefektreihen, dann werden entweder Phasondefektreihen zusätzlich eingeschoben oder herausgezogen. Im ersten Fall schiebt sich die Versetzung zwischen vorhandene Phasondefektreihen und drückt diese zur Seite. Im zweiten Fall entsteht hinter der Versetzung eine Lücke von Phasondefektreihen, die durch Verschiebung der in der Umgebung befindlichen Phasondefektreihen ausgeglichen wird. Beim kompletten Durchwandern der Metaversetzung mit $2F_m$ eingeschobenen Phasondefektreihen durch den Festkörper werden so $2F_m$ neue Phasondefektreihen erzeugt beziehungsweise vernichtet.

Wie schon in Abschnitt 5.6 erwähnt, sind Kletterbewegungen in Kristallen nur zusammen mit diffusiven Prozessen möglich und werden daher selten beobachtet. Da aber Versetzungsbewegungen in Quasikristallen und in Approximanten, wenn phasonische Freiheitsgrade beteiligt sind, sowieso mit Umordnungen der Atome verbunden sind, sollten die bei Kletterbewegungen zusätzlich auftretenden Prozesse eine geringere Rolle spielen. Welche Bewegungsform bei Metaversetzungen bevorzugt auftritt, muss letztlich durch das Experiment untersucht werden. Neuere Elektronenmikroskopbilder [56] lieferten Hinweise für das Auftreten beider Bewegungsmöglichkeiten.

7.3 Versetzungsreaktionen

Metaversetzungen können ebenso wie herkömmliche Versetzungen Versetzungsreaktionen durchführen. Dabei bleibt die Summe der Burgersvektoren im Hyperraum erhalten. Ei-

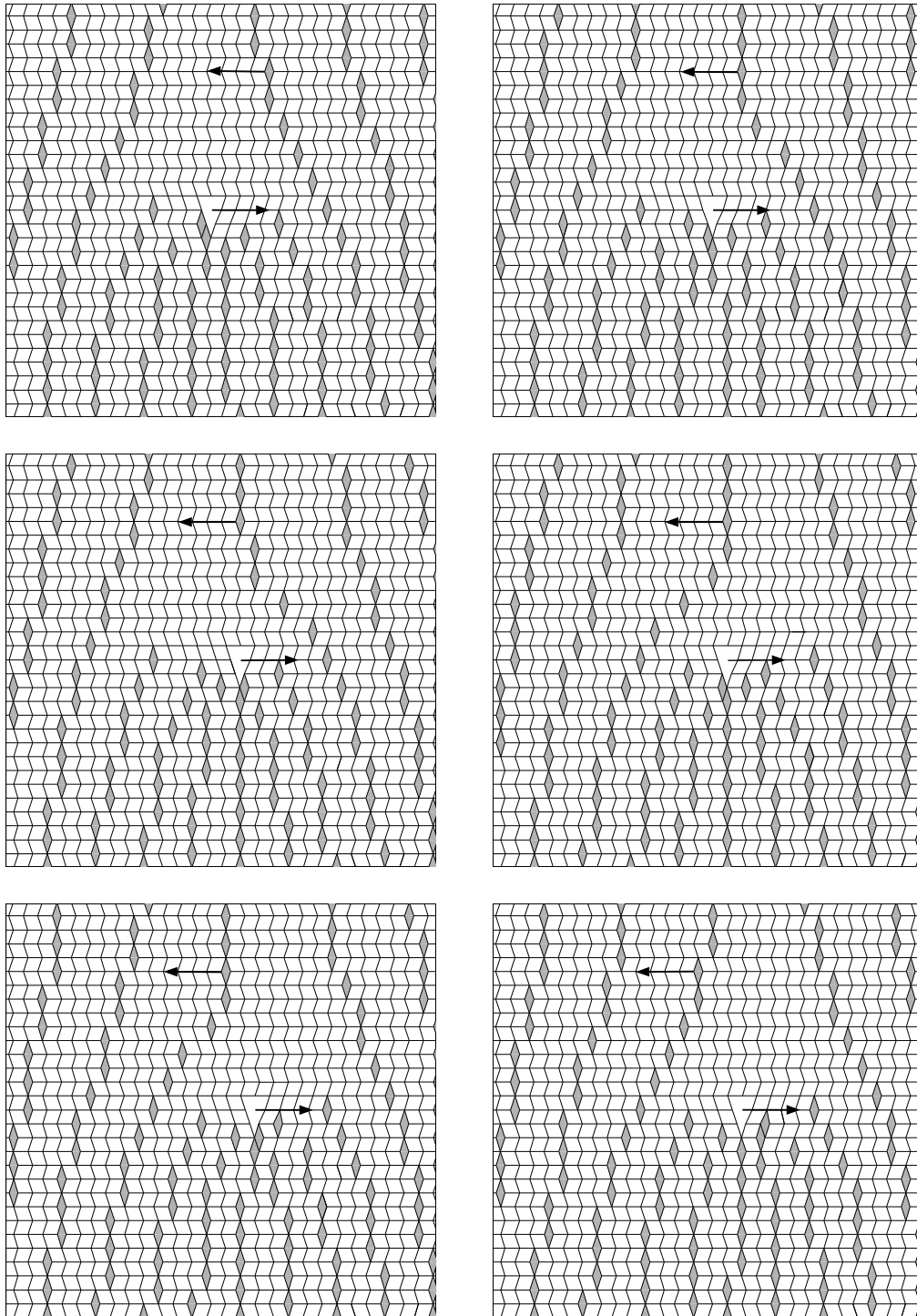


Abbildung 7.7: Wanderung der Phasendefektlinien bei horizontaler Gleitbewegung der Metaversetzung nach rechts. Während dem Bewegungsprozess springen die oberen Hälften der Phasendefektlinien in die entgegengesetzte Richtung.

nerseits kann ein Metaversetzungspaar mit entgegengesetzten Burgersvektoren, ein Versetzungsdipol, entstehen (Abbildung 7.8 links), andererseits können sich Metaversetzungen vereinigen oder aufspalten (Abbildung 7.8 rechts). Die Einträge des Burgersvektors von Metaversetzungen im dreidimensionalen Modellsystem sind nach Gleichung (7.3) Fibonacci-Zahlen. Aufgrund der definierenden Eigenschaft $F_{m+1} = F_m + F_{m-1}$ sind folgende Versetzungsreaktionen möglich:

$$\begin{aligned} B_m &\Leftrightarrow B_{m-1} + B_{m-2}, \\ B_m &\Leftrightarrow B_{m+1} - B_{m-1}, \\ B_m &\Leftrightarrow B_{m+2} - B_{m+1}. \end{aligned} \quad (7.9)$$

In Abbildung 7.9 sind drei Metaversetzungen mit sechs Phasondefekt-Halbreihen in der ξ' -Phase gezeigt. Zwei der Metaversetzungen sind über eine Phasondefektreihe verbunden. Vermutlich sind die oberen beiden Metaversetzungen als Versetzungsdipol entstanden. Bei der Gleitbewegung des Versetzungsdipols senkrecht zu den Phasondefektreihen, kann eine der Phasondefektreihen von einer Seite des Versetzungskerns auf die andere gelangen, wie schematisch in Abbildung 7.10 gezeigt, und die Versetzungen verbinden. Nach dem Auseinanderlaufen der Versetzungen verhindert die Verbindung das Auflösen des Versetzungsdipols. Durch weitere Versetzungsbewegungen kann so nach und nach ein komplexes, weit verzweigtes Versetzungsnetzwerk aufgebaut werden. Solche Versetzungsnetzwerke wurden experimentell von Feuerbacher beobachtet [29]. Ähnliche Reaktionen kann es auch für die im folgenden Abschnitt behandelten Metaversetzungen geben.

7.4 Metaversetzungen im 5D-Modellsystem

Außer den in Abschnitt 7.1 behandelten Metaversetzungen werden in den Approximanten experimentell auch andere Arten von Metaversetzungen beobachtet, deren Burgersvektor allerdings nicht mehr im dreidimensionalen Modellsystem liegt. Sie machen sich ebenfalls in der Anordnung der Phasondefektreihen bemerkbar und können im fünfdimensionalen Hyperraum aus Abschnitt 6.5 beschrieben werden. Es wurden folgende Versetzungstypen gefunden:

- (i) Metaversetzungen mit Burgersvektoren der Form $\tilde{\mathbf{b}} = (F_m, -F_{m-1}, F_m, 0, 0)$: Die phononische Komponente erhält man durch Anwenden der Projektionsmatrix des Penrosetilings und mit Satz 2.5 zu

$$\mathbf{b}^{\parallel} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\tau^{-2}F_m - \frac{1}{2}\tau^{-1}F_{m-1} \\ \frac{1}{2}\tau^{-1}\sqrt{\tau + 2}F_m - \frac{1}{2}\sqrt{\tau + 2}F_{m-1} \end{pmatrix} = (-\tau)^{-m} \begin{pmatrix} \cos(72^\circ) \\ \sin(72^\circ) \end{pmatrix}. \quad (7.10)$$

Sie besitzt die Länge $b^{\parallel} = \tau^{-m}l_{\text{Raute}}$. Der Burgersvektor ist gegenüber demjenigen aus (7.4) um 72° gedreht. Im Gegensatz zu den zuvor behandelten Metaversetzungen

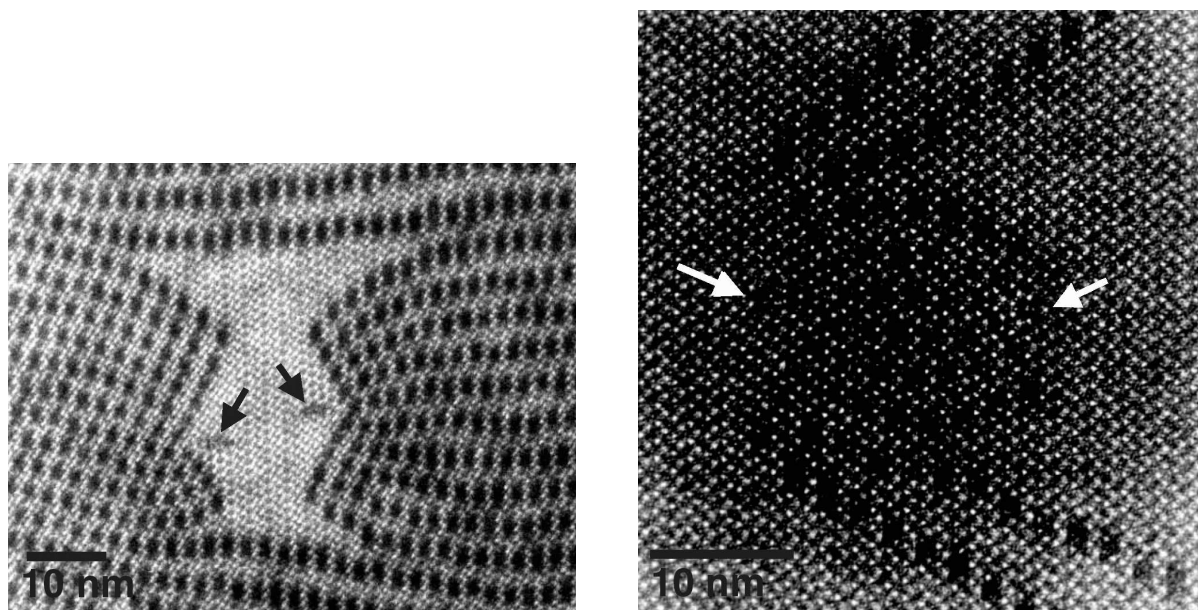


Abbildung 7.8: Links: Ein Versetzungsdipol der ξ'_2 -Phase. Jede Metaversetzung besteht aus zehn eingeschobenen Phasondefekt-Halbreihen. Rechts: Die Versetzungsreaktion $B_3 \rightleftharpoons B_5 - B_4$ in der ξ' -Phase. Die Versetzungskerne, markiert durch weiße Pfeile, teilen sich sechs der Phasondefekt-Halbreihen. Die vier übrigen laufen nach außen. [56]

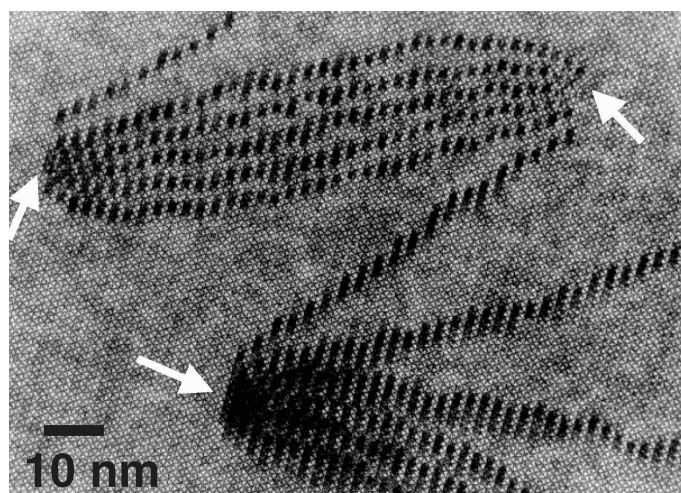


Abbildung 7.9: Ansammlung dreier Metaversetzungen in der ξ' -Phase. Zwei der Metaversetzungen teilen sich eine Phasondefektreihe. [56]

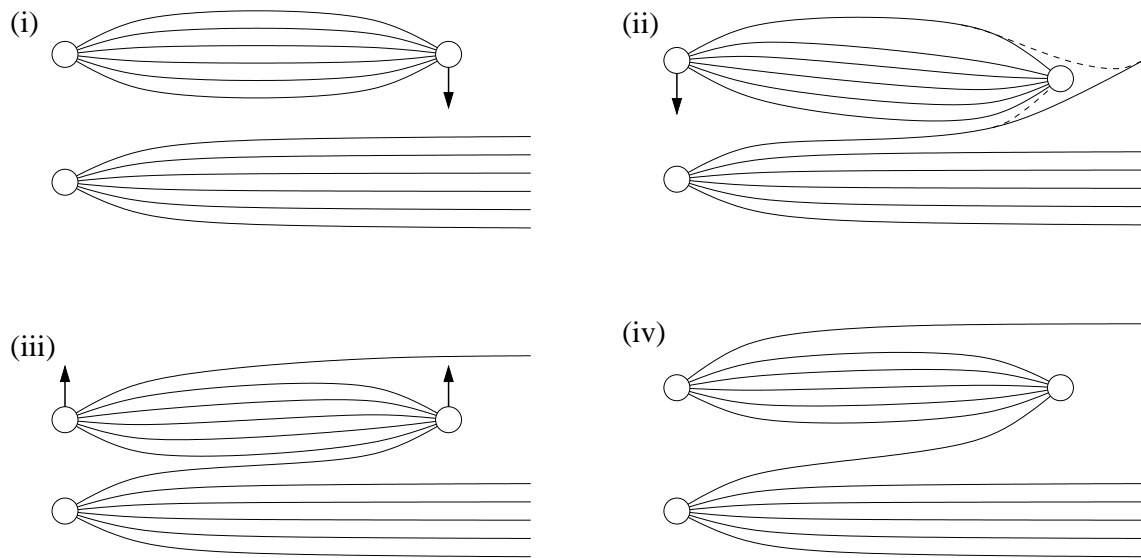


Abbildung 7.10: Schematische Darstellung dreier Metaversetzungen: ein Versetzungsdipol und eine isolierte Metaversetzung. Die Versetzungskerne sind als Kreise dargestellt und die Phasendefektreihen als Linien. Bewegt sich der Versetzungsdipol nach unten (i), so kann eine Phasendefektreihe über den rechten Versetzungskern hinwegspringen (ii). Dadurch wird die isolierte Versetzung mit dem Versetzungsdipol verbunden (iii). Bewegt sich der Versetzungsdipol wieder nach oben, dann kann er sich nicht mehr auflösen (iv).

kommen die Phasonddefekte nun in zwei unterschiedlichen Orientierungen vor, die gegeneinander wieder um 72° gedreht sind. Insbesondere sind am Versetzungskern F_m Halbreihen von gedrehten Phasonddefekt-Halbreihen eingeschoben, die mit dem dreidimensionalen Modellsystem nicht erklärt werden können. Sie sind gegenüber den restlichen Phasonddefektreihen um 54° gedreht. Abbildung 7.11 oben zeigt die idealisierte Versetzungsumgebung im Tilingbild des fünfdimensionalen Modellsystems im Fall $m = 3$. Hierfür ist $b^\parallel = 0.297$ nm.

- (ii) Metaversetzungen mit Burgersvektoren der Form $\tilde{\mathbf{b}} = (0, F_{m-1}, F_{m-1}, 0, F_m)$: Die phononische Komponente ist

$$\mathbf{b}^\parallel = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\tau^{-1}F_m - \frac{1}{2}F_{m-1} \\ \frac{1}{2}\tau^{-1}\sqrt{\tau+2}F_m - \frac{1}{2}\sqrt{\tau+2}F_{m-1} \end{pmatrix} = (-\tau)^{-m+1} \begin{pmatrix} \cos(72^\circ) \\ -\sin(72^\circ) \end{pmatrix}. \quad (7.11)$$

Sie besitzt die Länge $b^\parallel = \tau^{-m+1}l_{\text{Raute}}$. Der Burgersvektor ist im Vergleich zu den vorherigen Versetzungen um τ verlängert. Die Versetzung ist also mit einer größeren phononischen Verzerrung verbunden. Am Versetzungskern sind nun F_{m-1} Halbreihen von gedrehten Phasonddefektreihen eingeschoben. Links vom Versetzungskern ist eine Lücke in den Phasonddefektreihen. Abbildung 7.11 unten zeigt die idealisierte Versetzungsumgebung im Tilingbild des fünfdimensionalen Modellsystems im Fall $m = 5$. Hierfür ist $b^\parallel = 0.184$ nm.

In Abbildung 7.12 sind HREM-Aufnahmen der beiden Metaversetzungen aus Abbildung 7.11 gezeigt. In der oberen Abbildung hat sich die Lücke in den Phasonddefektreihen links des Versetzungskerns durch Relaxation der phasonischen Verschiebung, das heißt durch deren Bewegung geschlossen. In der unteren Abbildung scheint sich die Metaversetzung vertikal nach oben bewegt zu haben. Aufgrund der mit ihr verbundenen Phasonddefektreihen ist eine weitere Bewegung in dieser Richtung erschwert.

7.5 Andere Versetzungen

Feuerbacher und Klein berichten noch von weiteren Versetzung in der ξ' -Phase mit Burgersvektoren parallel zur verallgemeinerten zehnzähligen Achse des dazugehörigen dekaagonalen Quasikristalls. Das entspricht der Richtung senkrecht zur Zeichenebene in den zweidimensionalen Tilingbildern. Aufgrund der Geometrie ist es zur Beschreibung solcher Versetzungen zwangsläufig notwendig, ein Modell zu verwenden, das im physikalischen Raum dreidimensional ist. Ihre Untersuchung ist aus zwei Gründen interessant: Bei den Metaversetzungen spielt sich die Umordnung in einer festen Ebene ab, wohingegen bei diesen Versetzung Clusterbewegungen senkrecht dazu auftreten sollten. Hierüber gibt es

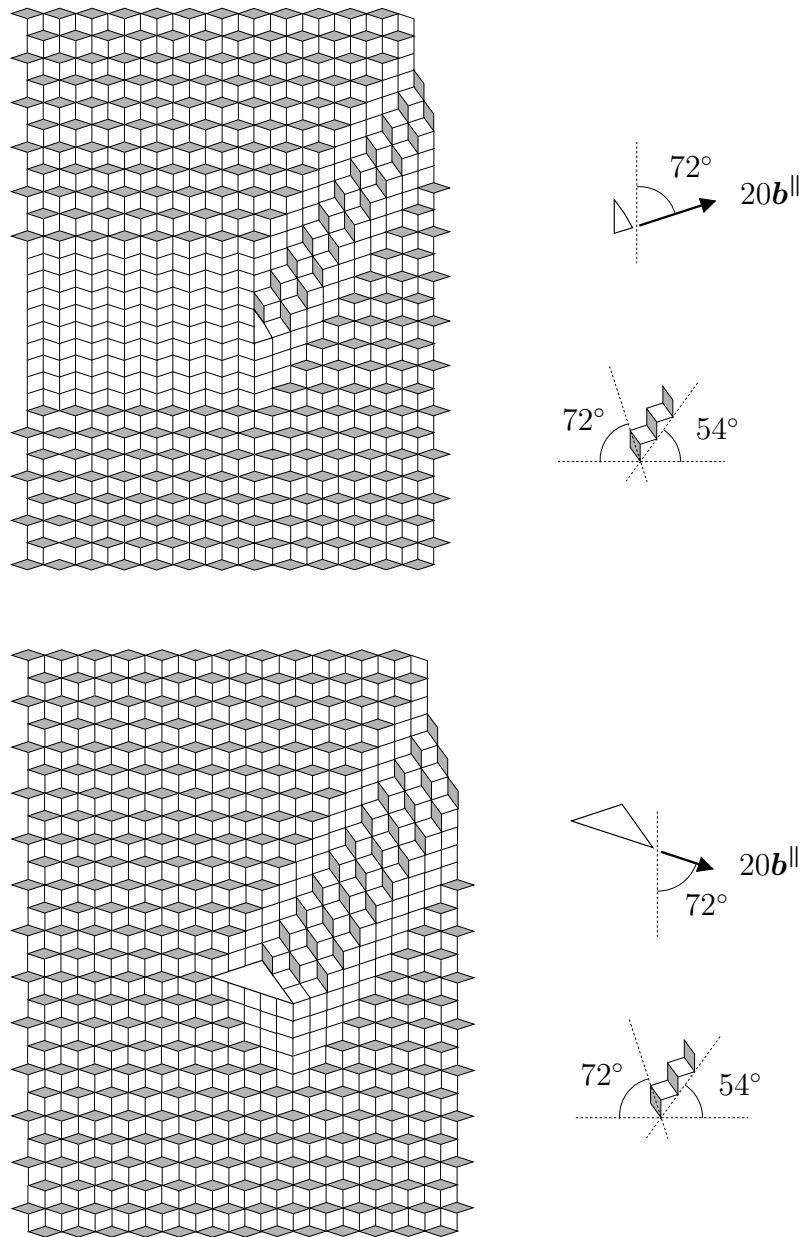


Abbildung 7.11: Idealisierte Tilings um die Kerne von Metaversetzungen mit den Burgersvektoren $\tilde{\mathbf{b}} = (2, -1, 2, 0, 0)$ (oben) und $\tilde{\mathbf{b}} = (0, 3, 3, 0, 5)$ (unten) in der ξ'_1 -Phase. Es sind zwei beziehungsweise drei gedrehten Phasondefekt-Halbreihen eingeschoben. Am Rand sind die auftretenden Winkel gezeigt. Die phononische Komponente des Burgersvektor ist aus Darstellungsgründen um den Faktor 20 vergrößert.

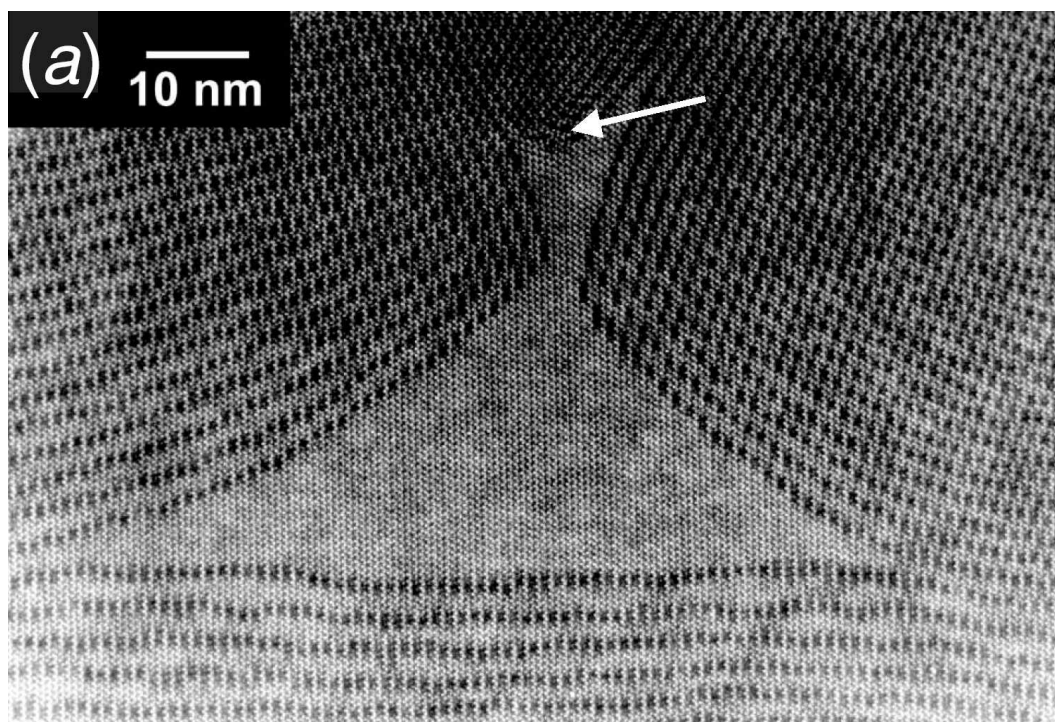
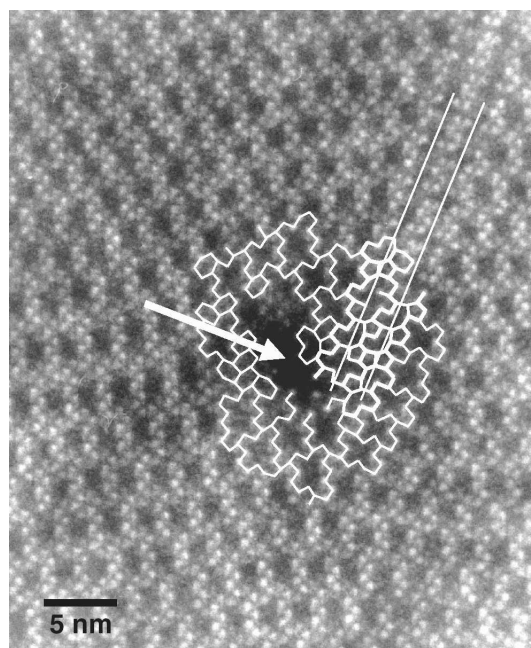


Abbildung 7.12: HREM-Aufnahmen von Metaversetzungen in der ξ_2' -Phase im Fall $\tilde{\mathbf{b}} = (2, -1, 2, 0, 0)$ mit zwei eingeschobenen gedrehten Phasondefekt-Halbreihen (oben) und $\tilde{\mathbf{b}} = (0, 3, 3, 0, 5)$ mit drei solchen Reihen (unten). Im unteren Fall hat sich unter der Metaversetzung ein großer keilförmiger Bereich mit ξ' -Phase gebildet. [56]

in der Literatur bisher keine Überlegungen. Außerdem wurde die Bewegung dieser Versetzungen unter dem Elektronenmikroskop direkt beobachtet. Die beobachtete Bewegung ist eine reine Kletterbewegung [30].

7.6 Interpretation der Ergebnisse

Über Metaversetzungen, speziell über ihre Bewegung, ist bisher wenig bekannt. Folgende Interpretation der experimentellen Ergebnisse ist jedoch möglich:

- (i) Bei der Kristallisation im spannungsfreien Zustand wird von den Approximanten der 1.6 nm dekagonalen Phase meist die ξ' -Phase erhalten. Im Bereich hoher Temperatur größer als ca. 70% der Schmelztemperatur ist die ξ' -Phase plastisch verformbar. Gewöhnliche Versetzungen mit Gittervektoren als Burgersvektoren sind aufgrund der Größe der Gitterkonstanten nicht möglich.
- (ii) Durch Ausnutzung der phasonischen Freiheitsgrade bilden sich unter Spannungen daher Metaversetzungen. Diese haben den Vorteil, zu kleineren Gitterverzerrungen zu führen. Aufgrund der phasonischen Flips treten Phasondefekte auf, die zu Reihen angeordnet sind.
- (iii) Zu Beginn eines Verformungsprozesses werden Metaversetzungen mit kleinerer phasonischer Komponente bevorzugt, da dabei weniger Phasondefekte erzeugt werden müssen. Durch Versetzungsreaktionen gehen diese in Metaversetzungen mit einer größeren Zahl an angehefteten Phasondefekt-Halbreihen über, wobei sich die phasonische Komponente des Burgersvektors vergrößert und die phasonische sich verkleinert. Ein solches Verhalten wird durch Arbeiten von Rosenfeld [72] gestützt. In dieser Arbeit wird beobachtet, dass in der quasiperiodischen Al-Pd-Mn-Phase mit größer werdender Verformungen die phasonische Komponente von Versetzungen in der Regel zunimmt.
- (iv) Bei der Bewegung von Metaversetzungen können Phasondefektreihen hinterlassen werden. Bewegt sich eine große Zahl an Metaversetzungen durch die ξ' -Phase, so ist eine Umwandlung in eine ξ'_n -Phase möglich. Dabei versuchen die Phasondefektreihen beieinander zu bleiben. Zu große Abstände der Phasondefektreihen scheinen energetisch ungünstig zu sein. Am häufigsten wird die ξ'_2 -Phase beobachtet.

Zusammenfassung und Ausblick

Wie zu Beginn der Arbeit gezeigt, können Quasikristalle als irrationale Schnitte durch höherdimensionale Kristalle angesehen und erzeugt werden. Neben den phononischen Freiheitsgraden, deren Anregung zu Schwingungen der Atome führen, sind in Quasikristallen Verformungen der Schnittebene zusätzliche Freiheitsgrade. Die Anregung dieser phasonischen Freiheitsgrade bewirkt atomare Umordnungen. Durch Scherung der Schnittebene entstehen mit dem Quasikristall verwandte Strukturen, die Approximanten.

Für Approximanten eines dreidimensionalen ikosaedrischen Quasikristalls konnten mögliche Schermatrizen bestimmt werden. Dabei wurde unterschieden zwischen dekadagonalen Quasikristallen als Approximanten (i)-ter Art, die nur parallel zu einer verallgemeinerten fünfzähligen Richtung gesichert sind, und Kristallen als Approximanten (ii)-ter Art, die zusätzlich in der Ebene senkrecht zu dieser Richtung gesichert sind. Die berechneten Schermatrizen wurden auf ein Modell angewendet, das die Clusterpositionen der ikosaedrischen Al-Pd-Mn-Phase beschreibt. Der Vergleich der so erhaltenen Tilings mit den experimentell beobachteten Clusteranordnungen in einer Ebene senkrecht zur verallgemeinerten fünfzähligen Achse erbrachte eine gute Übereinstimmung. Dies zeigt, dass die Bewegung der Cluster in dieser Ebene durch eine Scherung der Schnittebene gut beschrieben wird. Die Bewegungen senkrecht dazu können jedoch nicht mit einer Scherung einer Schnittebene erklärt werden.

Auf die Approximanten ξ -, ξ' - und ξ'_n -Phasen der 1.6 nm dekadagonalen Phase wurde gesondert eingegangen. Sie können durch ein Tiling bestehend aus Hexagonen, Pentagonen und Nonagonen aufgebaut werden und sind charakterisiert durch das Auftreten sogenannter Phasondefekte, die in Reihen angeordnet sind. Es wurde gezeigt, dass die Beschreibung der Phasen in einem dreidimensionalen Modellsystem und einem Tiling bestehend aus breiten und schmalen Rauten möglich ist. Hierdurch können Vorgänge im Hyperraum anschaulich dargestellt werden. Es stellte sich heraus, dass auch in periodischen Approximanten phasonische Freiheitsgrade vorhanden und anregbar sind. Im Fall der ξ'_n -Phasen machen sie sich durch die Bewegung der Phasondefektreihen bemerkbar.

Die mechanischen Eigenschaften von Quasikristallen werden maßgeblich beeinflusst durch die Bewegung von Versetzungen mit phasonischen Komponenten. Die Erweiterung der Elastizitätstheorie ermöglicht es, die versetzungsbegleitenden phononischen und phasoni-

schen Verschiebungsfelder zu beschreiben. Auch in Approximanten gibt es Versetzungen mit phasonischen Komponenten. In den ξ' - und ξ'_n -Phasen sind dies die Metaversetzungen. Einige der Metaversetzungen konnten im dreidimensionalen Modellsystem konstruiert und beschrieben werden. Damit war die Bestimmung und Erklärung der experimentell beobachteten Burgersvektoren und Tilings möglich. Es werden experimentell genau diejenigen Metaversetzungen beobachtet, die eine kleine phasonische Komponente besitzen. Andere Metaversetzungen können in einem fünfdimensionalen Modellsystem konstruiert werden. Versetzungsreaktionen und Versetzungsbewegungen wurden in den Modellräumen beschrieben.

Folgende Punkte sind noch ungeklärt und bieten Anknüpfungspunkte für weiterführende Untersuchungen:

- (i) Wie ist die Clusterbewegung senkrecht zur verallgemeinerten fünfzähligen Achse bei der Konstruktion von Approximanten zu verstehen? Was genau geschieht beim Übergang eines ikosaedrischen Quasikristalls zu einem dekadagonalen Quasikristall?
- (ii) Welche Konsequenzen hat die Existenz von Metaversetzungen und phasonischen Freiheitsgraden im Rahmen einer erweiterten Elastizitätstheorie für die mechanischen Eigenschaften der Approximanten? Experimentelle Beobachtungen lassen vermuten, dass es eine Wechselwirkung zwischen den Phasonddefektreihen gibt.
- (iii) In anderen Approximanten sind phasonische Freiheitsgrade ebenfalls anregbar. Es ist davon auszugehen, dass auch dort Metaversetzungen existieren. Diese sind unter Umständen nicht so einfach unter dem Elektronenmikroskop beobachtbar, wie es bei den Metaversetzungen in den ξ'_n -Phasen der Fall ist.
- (iv) Die Klärung dieses Punktes liegt zur Zeit noch in weiter Ferne: Welche genaue Ursache haben die phasonischen Freiheitsgrade in Approximaten und Quasikristallen? Aufgrund ihres einfacheren Aufbaus bieten sich hier Approximanten für erste Untersuchungen an.

Anhang A

Beispiele für ortsabhängige Verschiebungsfelder

Ortsabhängige Verschiebungsfelder werden am Beispiel des Penrose-Tilings näher erläutert. Die Parallelogramme des Tilings entstehen durch Dualisierung der Schnittpunkte eines 5-Grids (vergleiche Abschnitt 2.2). Die Teilmenge der Schnittpunkte, die auf einer parallelen Geradenschar (einem 1-Grid) liegen, bilden nach der Dualisierung Reihen aus Parallelogrammen, sogenannte Würmer. Die Seiten der Parallelogramme sind nach Konstruktion Gridvektoren und stehen somit senkrecht auf den sich schneidenden Geraden. In Abbildung A.1 findet sich das Penrose-Tiling mit den Würmern des vertikalen 1-Grids. Das Verschiebungsfeld wird gewählt als

$$\tilde{\mathbf{u}}(x, y) = \tilde{\mathbf{u}}_0 \arctan(\lambda y) \quad \text{mit} \quad \tilde{\mathbf{u}}_0 = (0, 0, 3, 3, 0) \parallel \mathbf{e}_x \quad (\text{A.1})$$

und einer Konstanten λ . Die größten Verschiebungen treten im Bereich um $-\lambda < y < \lambda$ auf. Der phononische Anteil $\mathbf{u}^{\parallel}(x, y) = \pi^{\parallel} \tilde{\mathbf{u}}(x, y)$ führt zu einer Verzerrung des Tilings und der Würmer (Abbildung A.2). Der phasonische Anteil $\mathbf{u}^{\perp}(x, y) = \pi^{\perp} \tilde{\mathbf{u}}(x, y)$ zeigt sich durch Flips, die eine Wanderung der Würmer zur Folge haben (Abbildung A.3). Die Auswirkung des gesamten Verschiebungsfeldes $\tilde{\mathbf{u}}(x, y)$ findet sich in Abbildung A.4. Flips und Verzerrung treten gleichzeitig auf. Ihr Einfluss auf die Würmer kompensiert sich gegenseitig. Beachte: Da $\tilde{\mathbf{u}}_0$ im Hypergitter liegt, stimmt das Tiling A.1 mit dem Tiling A.4 für $y \gg 0$ und $y \ll 0$ überein. Schon allein aus Symmetriegründen müssen daher die Würmer in der letzten Abbildung gerade verlaufen.

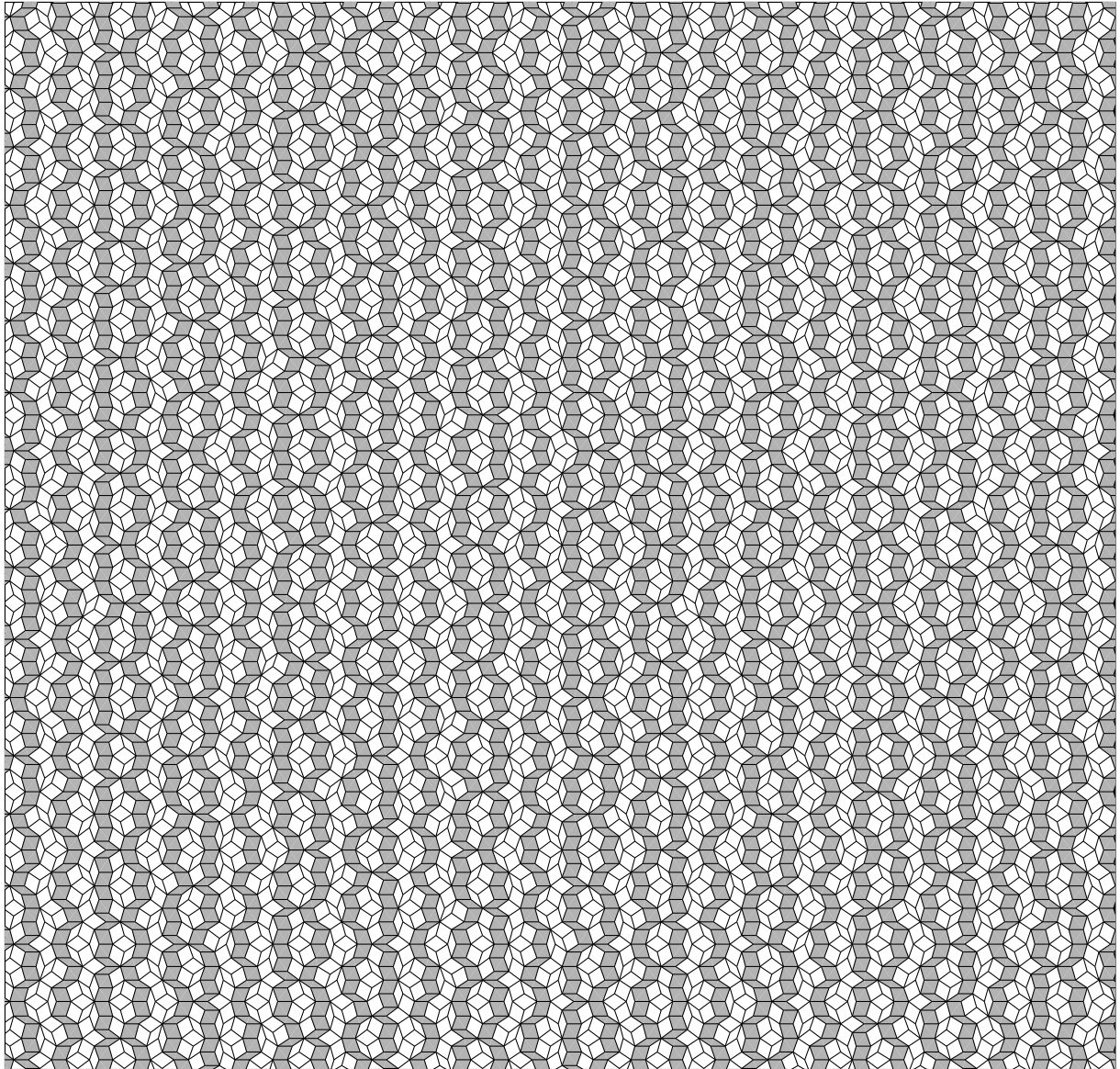


Abbildung A.1: Perfektes Penrose-Tiling. Parallelelogramme mit horizontalen Seiten sind grau hervorgehoben. Sie sind reihenförmig in Wümmern angeordnet (vergleiche Text).

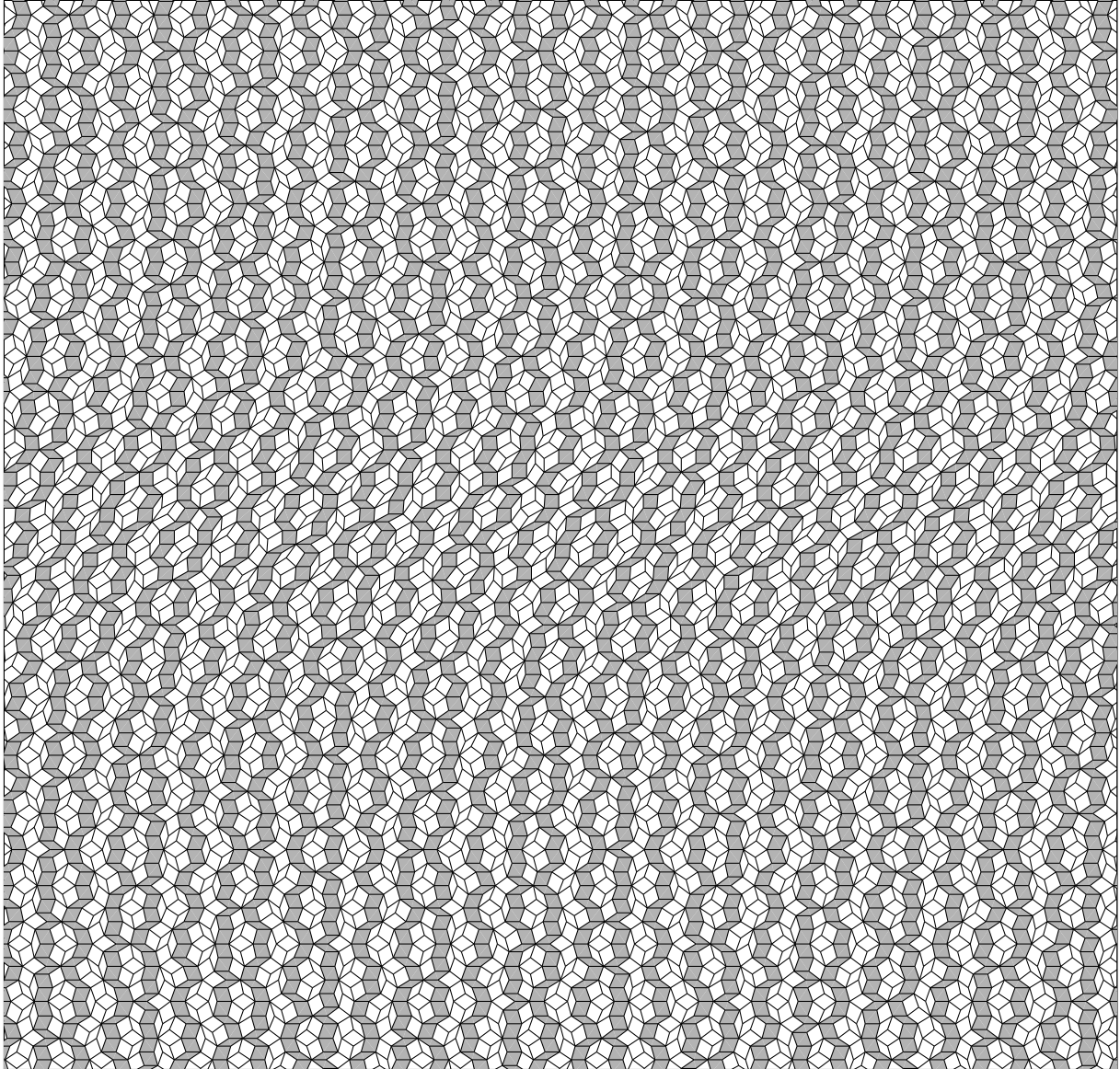


Abbildung A.2: Penrose-Tiling mit einem ortsabhängigen rein phononischen Verschiebungsfeld $\mathbf{u}^{\parallel}(x, y)$. Die Verzerrung des Tilings wirkt sich auch auf die Würmer aus.

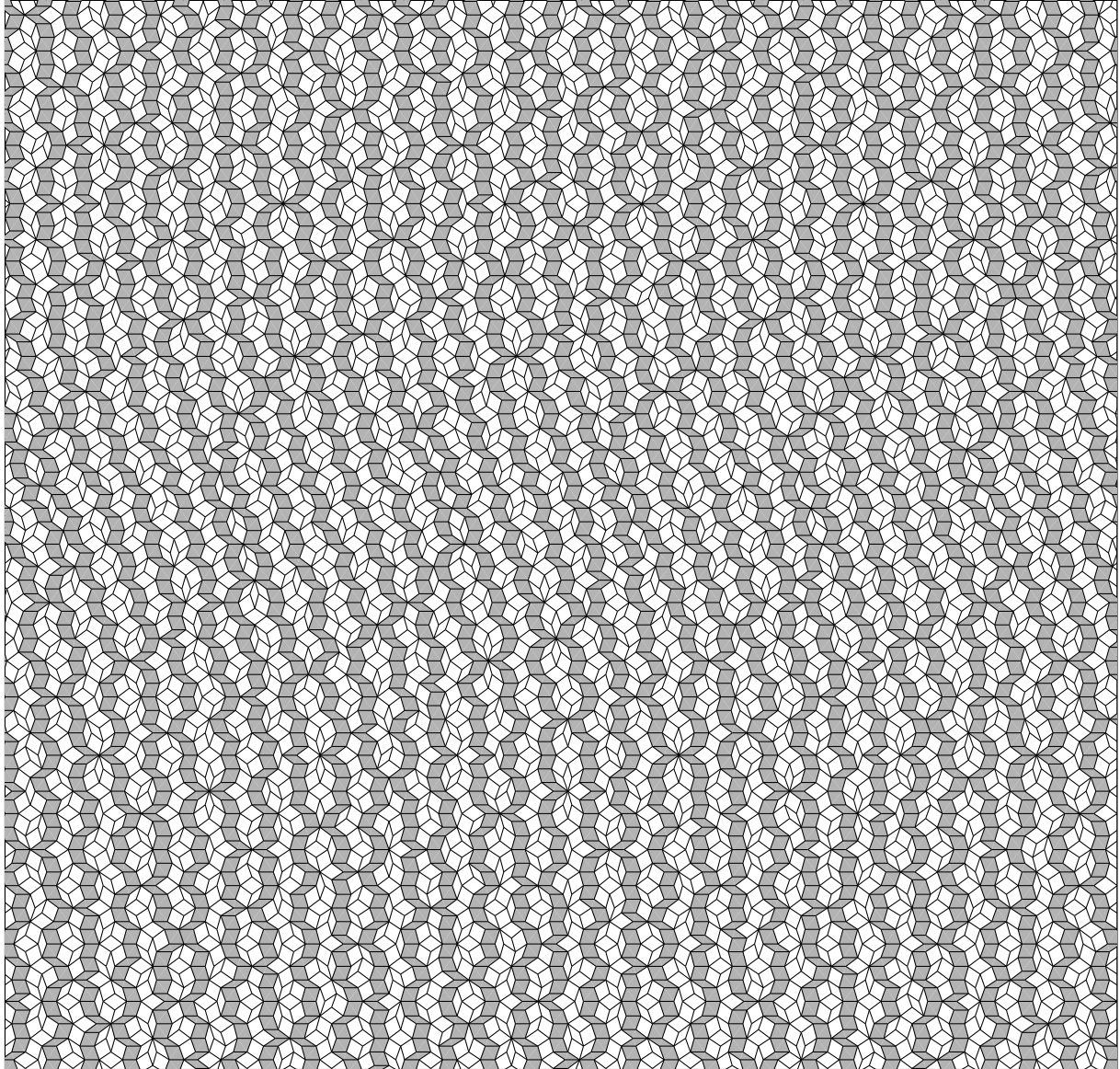


Abbildung A.3: Penrose-Tiling mit einem ortsabhängigen rein phasonischen Verschiebungsfeld $\mathbf{u}^\perp(x, y)$. Im Tiling treten Flips auf, die zu einer Wanderung der Würmer führt.

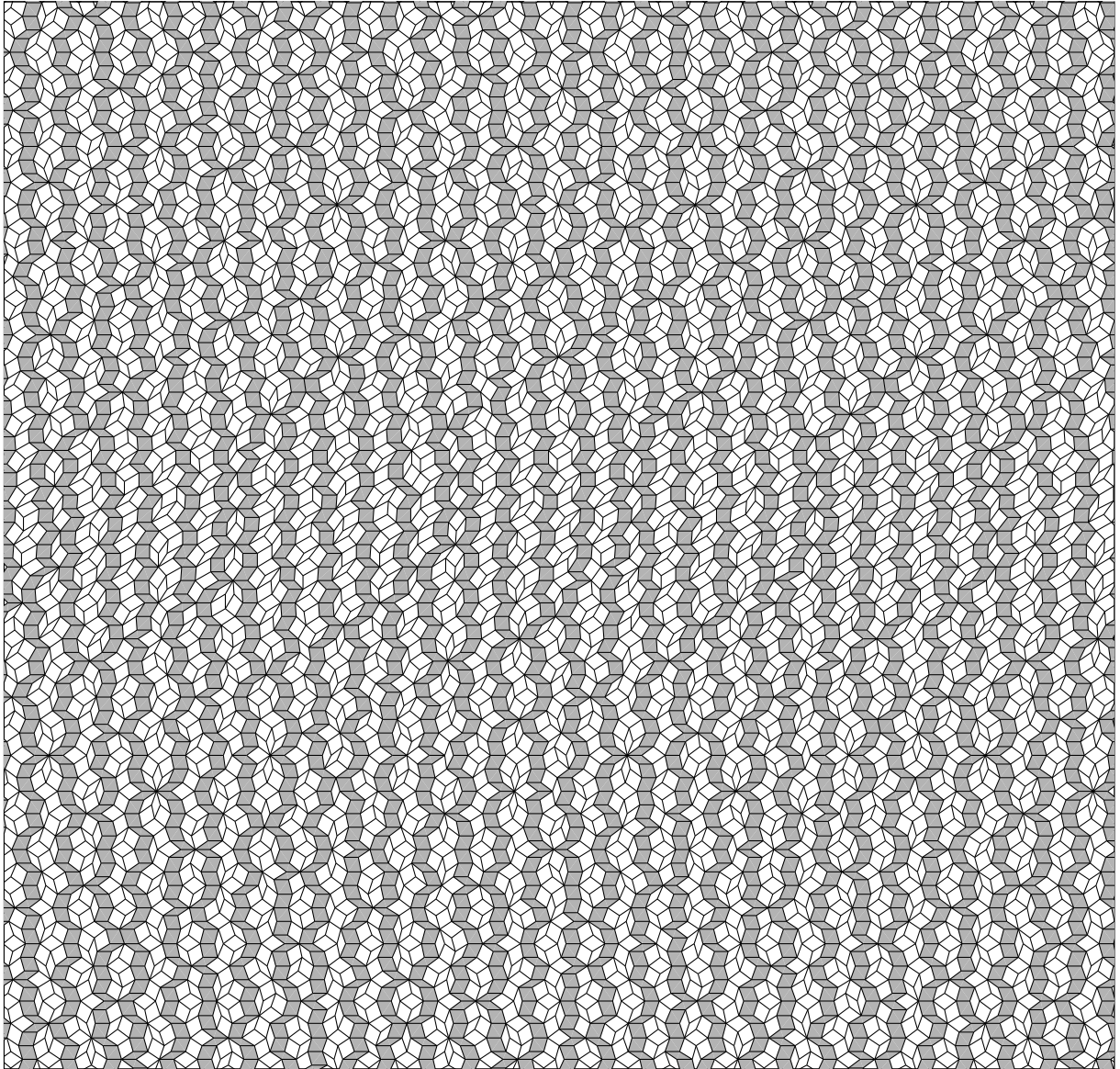


Abbildung A.4: Penrose Tiling mit einem ortsabhängigem Verschiebungsfeld $\tilde{\mathbf{u}}(x, y)$, das phononischen und phasonischen Anteil besitzt. Flips und Verzerrung treten im Tiling gleichzeitig auf. Die Würmer verlaufen gerade.

Anhang B

Darstellungen der Ikosaedergruppe

Die Ikosaedergruppe Y und ihr direktes Produkt mit der Inversionsgruppe $Y_h = Y \times C_i$ spielen in dieser Arbeit und bei der Untersuchung von Quasikristallen allgemein eine wichtige Rolle, da sie, wie in Abschnitt 1.2 gezeigt, die einzigen nichtkristallographischen Untergruppen der $O(3)$ sind, die dreidimensionale irreduzible Darstellungen besitzen. Dreidimensionale Quasikristalle, die in keiner Raumrichtung periodisch sind, müssen daher eine dieser beiden Gruppen als verallgemeinerte Symmetriegruppe besitzen (siehe Abschnitt 3.1). Für eine ausführlichere Untersuchung der Ikosaedergruppe im Hinblick auf Quasikristalle sei auf [26] verwiesen.

Y kann abstrakt definiert werden als eine Gruppe, die von zwei Generatoren a und b mit $a^5 = 1$, $b^2 = 1$ und $(ab)^3 = 1$ erzeugt wird. Man schreibt:

$$Y = \langle a, b \mid a^5 = b^2 = (ab)^3 = 1 \rangle, \quad |Y| = 60. \quad (\text{B.1})$$

Sie ist isomorph zur alternierenden Gruppe A_5 , die alle ungeraden Permutationen einer Menge von fünf Elementen enthält. Als erzeugende Elemente können zum Beispiel die Permutationen $a = (12345)$ und $b = (12)(34)$ gewählt werden. Um die gewöhnliche Charaktertafel der Ikosaedergruppe anzugeben, werden ihre Konjugiertenklassen bestimmt: Y besitzt 15 Elemente der Ordnung 2, die in der Konjugiertenklasse $[b]$ liegen, 20 Elemente der Ordnung 3 in der Konjugiertenklasse $[ab]$ und 24 Elemente der Ordnung 5, die sich auf zwei Konjugiertenklassen aufteilen: $[a]$ und $[a^2]$. Damit kann die Charaktertafel berechnet werden (Tabelle B.1). Y_h wird von drei Elementen a , b und c erzeugt:

$$Y_h = \langle a, b, c \mid a^5 = b^2 = (ab)^3 = c^2 = 1, ac = ca, bc = cb \rangle, \quad |Y_h| = 120. \quad (\text{B.2})$$

Die Charaktertafel von Y_h baut sich blockweise aus derjenigen von Y auf. Das Ergebnis ist in Tabelle B.2 aufgelistet. Für die Konstruktion von Quasikristallen werden ganzzahlige Darstellungen mit Charakterwerten aus \mathbb{Z} benötigt, die eine dreidimensionale irreduzible Darstellung enthalten. Im Fall der Gruppe Y ist dies die Darstellung $D_2^{(3)} \oplus D_3^{(3)}$, im Fall Y_h eine der Darstellungen $D_{2u}^{(3)} \oplus D_{3u}^{(3)}$ und $D_{2g}^{(3)} \oplus D_{3g}^{(3)}$.

	[1]	[b]	[ab]	[a]	[a ²]
$D_1^{(1)}$	1	1	1	1	1
$D_2^{(3)}$	3	-1	0	τ	$1 - \tau$
$D_3^{(3)}$	3	-1	0	$1 - \tau$	τ
$D_4^{(4)}$	4	0	1	-1	-1
$D_5^{(5)}$	5	1	-1	0	0
$D_2^{(3)} \oplus D_3^{(3)}$	6	-2	0	1	1

Tabelle B.1: Charaktertafel von Y .

	[1]	[b]	[ab]	[a]	[a ²]	[c]	[bc]	[abc]	[ac]	[a ² c]
$D_{1g}^{(1)}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$D_{2g}^{(3)}$	3	-1	0	τ	$1 - \tau$	3	-1	0	τ	$1 - \tau$
$D_{3g}^{(3)}$	3	-1	0	$1 - \tau$	τ	3	-1	0	$1 - \tau$	τ
$D_{4g}^{(4)}$	4	0	1	-1	-1	4	0	1	-1	-1
$D_{5g}^{(5)}$	5	1	-1	0	0	5	1	-1	0	0
$D_{1u}^{(1)}$	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
$D_{2u}^{(3)}$	3	-1	0	τ	$1 - \tau$	-3	1	0	$-\tau$	$\tau - 1$
$D_{3u}^{(3)}$	3	-1	0	$1 - \tau$	τ	-3	1	0	$\tau - 1$	$-\tau$
$D_{4u}^{(4)}$	4	0	1	-1	-1	-4	-0	-1	1	1
$D_{5u}^{(5)}$	5	1	-1	0	0	-5	-1	1	0	0
$D_{2g}^{(3)} \oplus D_{3g}^{(3)}$	6	-2	0	1	1	6	-2	0	1	1
$D_{2u}^{(3)} \oplus D_{3u}^{(3)}$	6	-2	0	1	1	-6	2	0	-1	-1

Tabelle B.2: Charaktertafel von Y_h .

Die Gruppe Y besitzt Untergruppen isomorph zu: C_2 , C_3 , C_5 , T , O . Als Untergruppen der Y_h tauchen zusätzlich die direkten Produkte dieser fünf Gruppen mit C_2 auf: C_{2h} , $C_{3h} \cong C_6$, $C_{5h} \cong C_{10}$, T_h , O_h .

Anhang C

Approximierende Brüche von τ

Bei der Konstruktion von Approximanten werden Brüche der Form $\frac{p_1}{p_0}$ mit $p_0, p_1 \in \mathbb{N}$, $p_1 \geq p_0$ benötigt, die die goldene Zahl τ (siehe Satz 2.5) approximieren, das heißt $\frac{p_1}{p_0} \approx \tau$. Eine gute Approximation liegt vor, wenn die Differenz $|\frac{p_1}{p_0} - \tau|$ klein ist und gleichzeitig p_0 und p_1 ebenfalls klein sind. Als Maß für die Güte der Approximation erweist sich

$$\gamma_1 = \sqrt{5} \left| \left(\frac{p_1}{p_0} - \tau \right) p_0^2 \right| = \sqrt{5} |(p_1 - \tau p_0) p_0| \quad (\text{C.1})$$

als geschickt. Ist $\frac{p_1}{p_0}$ ein approximierender Bruch von τ , dann ist auch $\frac{p_0+p_1}{p_1} = \left(\frac{p_1}{p_0} \right)^{-1} + 1$ ein approximierender Bruch von $\tau = \tau^{-1} + 1$. Definiere nun die Folge $(p_n)_{n \in \mathbb{N}}$ rekursiv durch $p_{n+2} = p_n + p_{n+1}$. Diese Folgen sind verwandt mit der Fibonacci-Kette F_n . Die Ähnlichkeit zeigt sich, wenn man Elemente der Folgen explizit mit Induktion berechnet:

$$p_n = F_{n-1} p_0 + F_n p_1. \quad (\text{C.2})$$

Die Brüche $\frac{p_{n+1}}{p_n}$ approximieren die Zahl τ . Verschiedener Brüche aus einer Folge p_n haben vergleichbare Güte. Es gilt (Vereinfachungen mit Satz 2.5):

$$\begin{aligned} \gamma_n &= \sqrt{5} |(p_n - \tau p_{n-1}) p_{n-1}| \\ &= \sqrt{5} |(p_0(F_{n-1} - \tau F_{n-2}) + p_1(F_n - \tau F_{n-1}))(F_{n-2} p_0 + F_{n-1} p_1)| \\ &= \sqrt{5} |-(p_1(-\tau)^{-n+1} + p_0(-\tau)^{-n+2})(F_{n-2} p_0 + F_{n-1} p_1)| \\ &= \sqrt{5} \left| p_1^2 \frac{F_{n-1}}{\tau^{n-1}} - p_0^2 \frac{F_{n-2}}{\tau^{n-2}} - p_0 p_1 \frac{\tau F_{n-1} - F_{n-2}}{\tau^{n-1}} \right| \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

und wegen $\lim_{n \rightarrow \infty} \tau F_{n-1} - F_{n-2} = F_{n-1}$ und $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{F_n}{\tau^n} = \frac{1}{\sqrt{5}}$ schließlich

$$\gamma = \lim_{n \rightarrow \infty} \gamma_n = p_1^2 - p_0^2 - p_0 p_1. \quad (\text{C.4})$$

In Tabelle C.1 sind die verallgemeinerten Fibonacci-Folgen p_n, n aufgeführt, die zu approximierenden Brüche mit dem kleinsten Gütefaktor γ gehören. Folgen, die ganzzahlige Vielfache von kleineren Folgen sind, wurden weggelassen.

Folge	p_0	p_1	Gütefaktor γ
1, 1, 2, 3, 5, ...	1	1	1
1, 3, 4, 7, 10, ...	1	3	5
1, 4, 5, 9, 14, ...	1	4	11
2, 5, 7, 12, 19, ...	2	5	11
1, 5, 6, 11, 17, ...	1	5	19
3, 7, 10, 17, 27, ...	3	7	19

Tabelle C.1: Verallgemeinerte Fibonacci-Folgen mit kleinem Gütefaktor.

Anhang D

Berechnung von Tilings mit Versetzungen

Die Berechnung von Tilings mit Versetzungen in Quasikristallen und ihren Approximanten ist mit Hilfe eines erweiterten Gridformalismus möglich. Dieser wurde auch schon in Vorgängerarbeiten [12, 23] verwendet und erläutert. Als Beschränkung sei ein hyperkubische Gitter $\tilde{\Gamma} = \mathbb{Z}^{\tilde{d}} = Z_{\tilde{d}}$ mit einem Atombereich pro Elementarzelle von der Form des Einheitswürfels $W^{\tilde{d}} = [0, 1)^{\tilde{d}}$ gewählt. Der zweite Teil dieses Anhang führt eine neues iteratives Verfahren ein.

D.1 Erweiterter Gridformalismus

Betrachte einen dreidimensionalen physikalischen Raum. Zur Berechnung von Tilings mit Versetzungen werden folgende Parameter benötigt (vergleiche Abschnitt 3.3):

- (i) die Projektionsmatrix $\pi^{\parallel} \in \mathbb{R}^{3 \times \tilde{d}}$ der Projektion auf den physikalischen Raum E^{\parallel} .
- (ii) eine Basismatrix $A \in \mathbb{R}^{\tilde{d} \times 3}$ der gescherten Schnittebene \mathcal{E}^{\parallel} , in den Spalten steht eine Orthonormalbasis,
- (iii) der Burgersvektor $\tilde{\mathbf{b}} \in \mathbb{R}^{\tilde{d}}$,
- (iv) ein Verschiebungsvektor $\tilde{\gamma} \in \mathbb{R}^{\tilde{d}}$, der E^{\parallel} und \mathcal{E}^{\parallel} global verschiebt,

wobei bei Quasikristallen $E^{\parallel} = \mathcal{E}^{\parallel}$ ist. Durch A sei eine Basis $\tilde{\mathbf{a}}_x, \tilde{\mathbf{a}}_y, \tilde{\mathbf{a}}_z$ von E^{\parallel} so gewählt, dass die Versetzung in Richtung $\tilde{\mathbf{a}}_z$ verläuft, und $\tilde{\gamma}$ sei so gewählt, dass die Versetzungslinie den Ursprung enthält. Durch die Versetzung erhält die gescherte Schnittebene das zusätzliche Verschiebungsfeld

$$\tilde{\mathbf{u}}(x, y, z) = \arccos \left(\frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} \right) \frac{\tilde{\mathbf{b}}}{2\pi} \quad (\text{D.1})$$

und es ergibt sich die Parametrisierung F der Schnittebene mit Versetzung:

$$F : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathcal{E}^\parallel : \mathbf{x} = (x, y, z) \mapsto A\mathbf{x} + \arccos\left(\frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}}\right) \frac{\tilde{\mathbf{b}}}{2\pi} + \tilde{\gamma}. \quad (\text{D.2})$$

Betrachte nun den Schnitt $W_{\tilde{\mathbf{t}}} = (W^{\tilde{d}} + \tilde{\mathbf{t}}) \cap \mathcal{E}^\parallel$ des um einen Hypergittervektor $\tilde{\mathbf{t}} \in \mathbb{Z}^{\tilde{d}}$ verschobenen Einheitswürfels $W^{\tilde{d}}$ mit \mathcal{E}^\parallel . Wie in Abschnitt 2.2 erläutert, müssen zur Berechnung des Tilings diejenigen $\tilde{\mathbf{t}}$ bestimmt werden, für die $W_{\tilde{\mathbf{t}}} \neq \emptyset$. Die Menge aller dieser $\tilde{\mathbf{t}}$ entspricht der Wertemenge von $\lfloor F(\mathbf{x}) \rfloor : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{Z}^{\tilde{d}}$:

$$\{\tilde{\mathbf{t}} \mid W_{\tilde{\mathbf{t}}} \neq \emptyset\} = \lfloor F(\mathbb{R}^3) \rfloor. \quad (\text{D.3})$$

Die Polytope $W_{\tilde{\mathbf{t}}}$ überdecken \mathcal{E}^\parallel disjunkt und lückenlos und werden gegeneinander durch die Schnitte der Koordinatenhyperebenen $E_i^z = \{\tilde{\mathbf{x}} \mid x_i = z, z \in \mathbb{Z}\} \cap \mathcal{E}^\parallel$ getrennt. Die E_i^z sind gekrümmte Flächen in \mathcal{E}^\parallel . Im Gridformalismus müssen nun jeweils drei dieser Flächen mit verschiedenen i -Werten i_1, i_2 und i_3 und ganzzahligen z -Werten z_1, z_2 und z_3 geschnitten werden. Die Schnittpunkte entsprechen den Ecken der $W_{\tilde{\mathbf{t}}}$. Zu bestimmen ist dann \mathbf{x} aus dem nichtlinearen Gleichungssystem:

$$\lfloor F(\mathbf{x}) \rfloor_{i_k} = z_{i_k} \quad \text{für } k = 1, 2 \text{ und } 3, \quad (\text{D.4})$$

wobei $\lfloor \cdot \rfloor_i$ die i -te Komponente bezeichnet. Durch Einsetzen erhält man die restlichen z_i für $i \neq i_1, i_2, i_3$: Der Schnittpunkt besitzt die Hyperraumkoordinaten $F(\mathbf{x})$. Die $\tilde{\mathbf{t}}$ -Werte der um den Schnittpunkt liegenden $2^3 = 8$ Polytope sind

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{t}}_1 &= \lfloor F(\mathbf{x}) \rfloor, & \tilde{\mathbf{t}}_2 &= \tilde{\mathbf{t}}_1 + \tilde{\mathbf{e}}_{i_1}, \\ \tilde{\mathbf{t}}_3 &= \tilde{\mathbf{t}}_1 + \tilde{\mathbf{e}}_{i_2}, & \tilde{\mathbf{t}}_4 &= \tilde{\mathbf{t}}_1 + \tilde{\mathbf{e}}_{i_3}, \\ \tilde{\mathbf{t}}_5 &= \tilde{\mathbf{t}}_1 + \tilde{\mathbf{e}}_{i_1} + \tilde{\mathbf{e}}_{i_2}, & \tilde{\mathbf{t}}_6 &= \tilde{\mathbf{t}}_1 + \tilde{\mathbf{e}}_{i_1} + \tilde{\mathbf{e}}_{i_3}, \\ \tilde{\mathbf{t}}_7 &= \tilde{\mathbf{t}}_1 + \tilde{\mathbf{e}}_{i_2} + \tilde{\mathbf{e}}_{i_3}, & \tilde{\mathbf{t}}_8 &= \tilde{\mathbf{t}}_1 + \tilde{\mathbf{e}}_{i_1} + \tilde{\mathbf{e}}_{i_2} + \tilde{\mathbf{e}}_{i_3}, \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

wenn $\tilde{\mathbf{e}}_i$ den i -ten Basisvektor des Hyperraums bezeichnet. Die gesamte Menge der Hypergitterpunkte $\tilde{\mathbf{t}}$, die für beliebige i_k - und z_k -Werte erhalten werden, muss nun noch entlang E^\perp auf \mathcal{E}^\parallel projiziert werden, denn projiziert man statt dessen auf E^\parallel , so besitzt das entstehende Tiling wie in Abbildung 5.3 links zwei um \mathbf{b}^\parallel gegeneinander verschobene Tilinglippen. Durch die Auswahl der Hypergitterpunkte ist bisher nur der phasonische Anteil \mathbf{b}^\perp des Burgersvektors berücksichtigt. Verwendet man zur Projektion \mathcal{E}^\parallel , so sind die Tilinglippen wie in Abbildung 5.3 rechts geschlossen. Die Projektion \mathbf{x} , das heißt die physikalischen Koordinaten, werden erhalten durch Lösung des folgenden nichtlinearen Gleichungssystems:

$$\pi^\parallel F(\mathbf{x}) = \pi^\parallel \tilde{\mathbf{t}}. \quad (\text{D.6})$$

Die Lösung der nichtlinearen Gleichungssysteme ist numerisch zum Beispiel mit dem Newtonverfahren möglich. Bei größeren Burgersvektoren, wie sie bei Metaversetzungen benötigt werden, sind aber die E_i^z in der Nähe des Versetzungskerns stark gekrümmt, und es auch passieren, dass das Gleichungssystem (D.4) nicht mehr eindeutig lösbar ist. Dies erschwert die numerische Behandlung. Ist keine Versetzung vorhanden, so ist $\vec{\mathbf{b}} = \mathbf{0}$ und die Gleichungssysteme werden linear, können also exakt gelöst werden.

D.2 Iterative Berechnung

Wie oben gezeigt, muss zur Bestimmung der Hypergitterpunkte, die bei der Konstruktion des Tilings verwendet werden, die Wertemenge der Funktion $[F(\mathbf{x})] : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{Z}^{\tilde{d}}$ bestimmt werden. Dazu kann man die Funktionswerte auf einem kubischen Gitter $\lambda\mathbb{Z}^3$ berechnen. Wenn die Kantenlänge λ klein genug ist, wird so die gesamte Wertemenge erhalten. Die Funktionswerte auf dem Gitter können iterativ bestimmt werden:

- (i) Wähle einen Quader Q , bestehend aus acht Eckpunkten $\{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_8\}$.
- (ii) Bestimme die Funktionswerte auf den Eckpunkten.
- (iii) Zerlege den Quader durch Halbierung der Kanten in acht kleinere Quader Q_1, \dots, Q_8 .
- (iv) Wenn die Abbruchbedingung nicht erfüllt ist, verfare mit den kleinen Quadern wie mit dem großen.

Wählt man im einfachsten Fall als Abbruchbedingung eine maximale Zahl n der Iterationsschritte, dann hat sich die Kantenlänge um den Faktor 2^{-n} verkleinert. Dies ist jedoch ungeeignet, da einerseits nicht klar ist, wie groß n sein muss, und andererseits zu viele Gitterpunkte bestimmt werden. Es wäre besser, die Kantenlänge des Gitters lokal genau so klein zu wählen, dass gerade die gesamte Wertemenge erfasst wird. Definiere s als Summe über die Differenzen zwischen maximalen und minimalen Komponenten der Eckpunkte:

$$s = \sum_{i=1}^8 \max\{[\mathbf{q}_1]_i, \dots, [\mathbf{q}_8]_i\} - \min\{[\mathbf{q}_1]_i, \dots, [\mathbf{q}_8]_i\}. \quad (\text{D.7})$$

Im Fall $s \leq 3$ (beziehungsweise im allgemeinen Fall $s \leq d^{\parallel}$) liegt maximal ein Eckpunkt der Polytope $W_{\vec{\mathbf{t}}}$ innerhalb des Quaders. Diese Bedingung eignet sich als Abbruchbedingung für die Iteration. Durch Wahl besserer Abbruchbedingungen und die Zerlegung von Q nur in wahlweise zwei oder vier Quader, je nach Differenz der \mathbf{q}_i , kann die Berechnung weiter verbessert werden.

Anhang E

Mathematische Ergänzungen zur Ikosaedergruppe

Die Ikosaedergruppe nimmt in der Theorie der Quasikristalle eine besondere Rolle ein, da sie die einzig mögliche Symmetriegruppe einer echt dreidimensional quasiperiodischen Struktur ist. Für die Mathematik ist die Ikosaedergruppe als kleinste der einfachen Gruppen wichtig. (Die einfachen Gruppen können als Bausteine aller endlichen Gruppen angesehen werden, siehe Lehrbücher der Gruppentheorie zu Kompositionsreihen.)

Die ersten beiden Abschnitte bieten erweiternd zu Kapitel 1 eine Einführung in klassische Methoden, wie sie unter anderem zur Untersuchung und Klassifikation von dreidimensionalen kristallographischen Gruppen verwendet wurden. Von zentraler Bedeutung ist der Begriff der Operation einer Gruppe auf einer Menge, sowie der Darstellung einer Gruppe. Mit Hilfe von Auswahlkriterien werden in Satz E.7 die endlichen Untergruppen von $SO(3)$ berechnet. Die einzigen dreidimensional irreduziblen Untergruppen sind dabei die Tetraedergruppe T , die Oktaedergruppe O und die Ikosaedergruppe Y .

Für die Physik von Interesse sind einerseits dreidimensionale Darstellungen von Y und andererseits höherdimensionale ganzzahlige Darstellungen, die Punktgruppen von periodischen Strukturen sein können. Darstellungen von Y werden in Abschnitt E.3 näher untersucht.

Die eleganteste Formulierung der Darstellungstheorie erfolgt in der Sprache der Gruppenringe. Dabei führen Gruppenringe über dem Grundkörper \mathbb{C} zur gewöhnlichen Darstellungstheorie, die ausführlich untersucht ist. Die ganzzahlige Darstellungstheorie und Gruppenringe über dem Grundring \mathbb{Z} sind dagegen weniger gut erforscht, da sie komplizierter sind. Schwerpunkte herein sind unter anderen das Isomorphieproblem und die Zassenhausvermutungen. Nach einer kurzen Einführung in die Problematik folgt ein Abschnitt zu den Zassenhausvermutungen für die Ikosaedergruppe.

E.1 Operation einer Gruppe auf einer Menge

Zunächst einige Definitionen:

Definition E.1. Sei G eine Gruppe und M eine Menge. Eine (Links-)Operation von G auf M ist eine Abbildung $\rho : G \times M \rightarrow M : (g, m) \mapsto gm$, die folgende Bedingungen erfüllt:

- (i) $em = m \quad \forall m \in M$ (Operation des Einselements e),
- (ii) $g(hm) = (gh)m \quad \forall g, h \in G \quad \forall m \in M$ (Assoziativgesetz).

Man sagt dann G operiert auf M .

Aufgrund der Bedingungen kann die Operation auch als Homomorphismus von G in die Gruppe der bijektiven Abbildungen $M \rightarrow M$ aufgefasst werden. Ist speziell M ein Vektorraum, so entspricht eine Operation von G auf M einer Darstellung:

Definition E.2. Sei K ein Körper (geht allgemeiner auch für $K = R = \text{Ring}$, in dieser Arbeit $K \in \{\mathbb{Q}, \mathbb{R}, \mathbb{C}\}$ oder $R = \mathbb{Z}$) und G eine Gruppe. Eine n -dimensionale (K -)Darstellung von G im Vektorraum $V = K^n$ ist ein Homomorphismus $\phi : G \rightarrow GL(n, K)$.

- ϕ ist treu, wenn ϕ ein Isomorphismus ist.
- Zwei Darstellungen ϕ und ψ heißen (K -)äquivalent, wenn es ein $A \in GL(n, K)$ gibt, so dass für alle $g \in G$: $\psi(g) = A^{-1}\phi(g)A$.
- Ein Untervektorraum V' von V ist invariant unter ϕ , wenn $\phi(g)V' \subset V'$ für alle $g \in G$.
- ϕ heißt irreduzibel, wenn V und $\{0\}$ die einzigen invarianten Untervektorräume sind. Ansonsten wird ϕ reduzibel genannt. Die Gruppe $\phi(G)$ heißt (ir-)reduzibel, wenn ϕ (ir-)reduzibel ist.
- Die Abbildung $\chi_\phi : G \rightarrow K : g \mapsto \text{Spur}(\phi(g))$ nennt man den zu ϕ gehörigen K -Charakter.

Definition E.3. G operiere auf M .

- $Gm = \{gm \mid g \in G\}$ wird als Bahn durch $m \in M$ bezeichnet.
- $G_m = \{g \in G \mid gm = m\}$ heißt Stabilisator von $m \in M$.
- $M_g = \{m \in M \mid gm = m\}$ ist die Fixpunktmenge von $g \in G$.

Die Operation heißt transitiv, wenn sie nur eine Bahn besitzt.

Zwei Elemente aus M sind genau dann in derselben Bahn, wenn sie durch ein $g \in G$ aufeinander abgebildet werden. Diese Eigenschaft ist eine Äquivalenzrelation und die Bahnen sind die dazugehörigen Äquivalenzklassen. Sei $m \in M$. Stabilisatoren haben die folgenden Eigenschaften:

- Stabilisatoren sind Untergruppen von G . Denn seien $g, h \in G_m$, dann gilt einerseits $(gh)m = gm = m$, also $gh \in G_m$ und andererseits $m = em = (h^{-1}h)m = h^{-1}m$, also $h^{-1} \in G_m$.
- Stabilisatoren einer Bahn sind konjugiert zueinander. Denn sei $n \in G_m$, dann existiert ein $g \in G$, so dass $gm = n$. Für $h \in G_n$ gilt dann aber $(g^{-1}hg)m = g^{-1}hn = g^{-1}n = m$ und somit $g^{-1}G_n g \subseteq G_m$. Analog erhält man $G_n \supseteq gG_m g^{-1}$ und daher $g^{-1}G_n g = G_m$.
- Betrachte die Abbildung $\alpha : G/G_m \rightarrow Gm : gG_m \mapsto gm$. Sie ist wohldefiniert, denn falls $g_1G_m = g_2G_m$, dann existiert ein $h \in G_m$ mit $g_1h = g_2$. Daraus folgt $g_2m = g_1hm = g_1m$. Sie ist injektiv, denn aus $gm = \alpha(gG_m) = \alpha(hG_m) = hm$ folgt $m = g^{-1}hm$, also $g^{-1}h \in G_m$ und $gG_m = g(g^{-1}h)G_m = hG_m$. Da sie außerdem nach Definition surjektiv ist, ist sie bijektiv. Für eine endliche Gruppe G und eine endliche Menge M gilt speziell:

$$|G : G_m| = \frac{|G|}{|G_m|} = |Gm|. \quad (\text{E.1})$$

Lemma E.4. Sei G eine endliche Gruppe, die auf der endlichen Menge M operiert. Sei Gm_1, \dots, Gm_s ein Vertretersystem der Bahnen der Operation. Dann gilt:

$$\sum_{g \in G \setminus \{e\}} |M_g| = |G| \sum_{i=1}^s \left(1 - \frac{1}{|G_{m_i}|}\right). \quad (\text{E.2})$$

Beweis. Der Beweis erfolgt durch unterschiedliches Auszählen der Elemente in der Menge $X = \{(g, m) \mid gm = m, g \neq e\}$. Einerseits gilt:

$$|X| = \sum_{g \in G \setminus \{e\}} |M_g|$$

und andererseits mit Gleichung (E.1) und den obigen Bemerkungen:

$$|X| = \sum_{m \in M} |G_m \setminus \{e\}| = \sum_{i=1}^s |G_{m_i}|(|G_{m_i}| - 1) = |G| \sum_{i=1}^s \left(1 - \frac{1}{|G_{m_i}|}\right).$$

□

E.2 Endliche Untergruppen von $SO(3)$

In diesem Abschnitt sollen die endlichen Untergruppen $G < SO(3)$ berechnet werden. G operiert durch Matrixmultiplikation auf den Vektoren aus \mathbb{R}^3 .

Definition E.5. *Bezeichne einen Vektor $m \in \mathbb{R}^3$ mit $\|m\| = 1$ als Pol von G , wenn er Fixpunkt eines $g \in G \setminus \{e\}$ ist. Die Menge aller Pole bildet die Polmenge M . Die Ordnung $|G_m|$ des Stabilisators heißt Zähligkeit des Pols.*

Mit Hilfe von Lemma E.4 können nun mögliche endliche Untergruppen von $SO(3)$ charakterisiert werden:

Satz E.6. *Sei $G < SO(3)$ mit $2 \leq |G| < \infty$ und M die Polmenge von G . Dann operiert G in natürlicher Weise auf M . Bezeichne mit Gm_1, \dots, Gm_s ein Vertretersystem der Bahnen der Operation. Die Zähligkeiten $n_i = |G_{m_i}|$, $n_1 \leq \dots \leq n_s$ sind ungleich eins und teilen die Gruppenordnung $|G|$. Es gilt:*

$$2(|G| - 1) = |G| \sum_{i=1}^s \left(1 - \frac{1}{n_i}\right) \quad (\text{E.3})$$

Sämtliche Lösungen dieser Gleichung sind:

- (i) $s = 2$, $n_1 = n_2 = |G|$, $|G|$ beliebig;
- (ii) $s = 3$, $n_1 = n_2 = 2$, $n_3 = |G|/2$, $|G|$ gerade und ≥ 4 ;
- (iii) $s = 3$, $n_1 = 2$, $n_2 = n_3 = 3$, $|G| = 12$;
- (iv) $s = 3$, $n_1 = 2$, $n_2 = 3$, $n_3 = 4$, $|G| = 24$;
- (v) $s = 3$, $n_1 = 2$, $n_2 = 3$, $n_3 = 5$, $|G| = 60$.

Beweis. Die Pole von G sind genau diejenigen Einheitsvektoren m , die einen nicht-trivialen Stabilisator besitzen: $|G_m| > 1$. Da die Stabilisatoren von Elementen einer Bahn gleich groß sind (sie sind konjugiert), werden Pole durch $g \in G$ wieder auf Pole abgebildet. Insbesondere besitzen Pole, die aufeinander abgebildet werden, dieselbe Zähligkeit $|G_m| = n_i$. Jedes Element aus $G \setminus \{1\}$ ist eine Drehung und besitzt daher genau zwei Pole, nämlich m_g und $-m_g$. Das bedeutet aber $|M_g| = 2$ für $g \neq 1$. Aus (E.2) erhält man Gleichung (E.3). Umgeformt lautet sie

$$\sum_{i=1}^s \frac{1}{n_i} = s - 2 + \frac{2}{|G|}.$$

Wegen $n_i \geq 2$ ist $s/2 \geq s - 2 + 2|G|^{-1} > s - 2$ und somit $s < 4$. Wenn $s = 1$, dann wäre $n_1^{-1} = 1 - 2 + 2|G|^{-1}$, was wegen $|G| \geq 2$ nicht geht. Nun sei $s = 2$. Dann ist $n_1^{-1} + n_2^{-1} = 2|G|^{-1}$, also $n_1 = n_2 = |G|$ (Fall (i)). Zu untersuchen bleibt nur noch $s = 3$:

$$\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2} + \frac{1}{n_3} = 1 + \frac{2}{|G|} > 1.$$

Wäre $n_1 \geq 3$, so folgt der Widerspruch $1 \geq \sum_{i=1}^3 n_i^{-1} = 1 - 2|G|^{-1} > 1$. Also ist $n_1 = 2$ und daher

$$\frac{1}{n_2} + \frac{1}{n_3} = \frac{1}{2} + \frac{2}{|G|} > \frac{1}{2}.$$

Ist $n_2 = 2$, dann ist $n_3 = |G|/2$, $|G| = 2n_3 \geq 4$ (Fall (ii)). Wäre $n_i \geq 4$, so folgt der Widerspruch $\frac{1}{2} < n_2^{-1} + n_3^{-1} \leq \frac{1}{2}$. Es sei also $n_2 = 3$. Somit bleibt

$$\frac{1}{n_3} = \frac{1}{6} + \frac{2}{|G|} > \frac{1}{6},$$

also $3 \leq n_3 \leq 5$ und $|G| = 2(\frac{1}{n_3} - \frac{1}{6})^{-1}$. Für $n_3 = 3, 4, 5$ ergibt sich $|G| = 12, 24, 60$. \square

Zu den verschiedenen Fällen von Satz E.6 wird nun eine Untergruppe von $SO(3)$ angegeben. Außerdem wird für jeden der fünf Fälle gezeigt, dass die Untergruppen bis auf Konjugation in $SO(3)$, das heißt Drehung im Raum, jeweils eindeutig sind:

- (i) Bezeichne mit $R_{z,n}$ die Drehung um die z -Achse um den Winkel $2\pi/n$. Die Gruppe $C_n = \langle R_{z,n} \rangle$, $n \in \mathbb{N}$ besitzt zwei Pole auf der z -Achse mit Zähligkeit $|C_n| = n$.

Da die Wahl der Richtung der Pole die Drehung $R_{z,n}$ festlegt, ist C_n bis auf Konjugation eindeutig bestimmt.

- (ii) Bezeichne mit $R_{x,2}$ die Drehung um die x -Achse um den Winkel π . Die Diedergruppe $D_n = \langle R_{z,n}, R_{x,2} \rangle$, $n > 2$ ist die disjunkte Vereinigung der Untergruppe C_n und der Menge $R_{x,2}C_n$, da $R_{x,2}$ die beiden Pole auf der z -Achse vertauscht, also: $|D_n| = 2n$. Die Pole auf der z -Achse besitzen weiterhin die Zähligkeit n . In der xy -Ebene liegen n zweizählige Pole auf einem regelmässigen n -Eck. Sie werden durch C_n aufeinander abgebildet.

Betrachte eine beliebige Gruppe, die die Bedingungen aus Satz E.6 (ii) erfüllt. Der Stabilisator der beiden n -zähligen Pole bildet die n zweizähligen Pole transitiv aufeinander ab. (Die Bahn eines Vektors unter der Operation einer zu C_n konjugierten Drehgruppe besitzt entweder die Länge n oder 1.) Daher müssen die zweizähligen Pole in einer Ebene senkrecht zu den n -zähligen Polen liegen. Da die Ebene mit dem Pol m auch den Pol $-m$ enthält, verläuft sie durch den Ursprung. Durch Wahl der Richtung eines n -zähligen Pols und eines zweizähligen Pols senkrecht dazu wird D_n bis auf Konjugation eindeutig festgelegt.

- (iii) Die Drehgruppe T des Tetraeders hat in Richtung der Kantenmitten 6 zweizählige Pole. Die 8 dreizähligen Pole liegen in zwei Bahnen. 4 dreizählige Pole der einen Bahn liegen in Richtung der Flächenmitten und 4 weitere der anderen Bahn gegenüberliegend in Richtung der Ecken. Die Tetraedergruppe hat $6/2 \cdot (2 - 1) = 3$ Elemente der Ordnung zwei und $8/2 \cdot (3 - 1) = 8$ Elemente der Ordnung drei. (Je zwei der n -zähligen Pole besitzen denselben Stabilisator. Der Stabilisator enthält n -Elemente, davon ist eines die Identität.) Es ist $|T| = 1 + 3 + 8 = 12$.

Nun wird gezeigt, dass T bis auf Konjugation eindeutig bestimmt ist. Sei G eine beliebige Untergruppe von $SO(3)$, die die Bedingungen aus Satz E.6 (iii) erfüllt und M_3 die Menge der 4 dreizähligen Pole einer Bahn. Einer der Pole sei durch Drehung des Koordinatensystems in die positive z -Richtung gelegt: m_z . Sein Stabilisator ist $G_{m_z} = C_3$. Durch die Operation von C_3 wird M_3 in zwei Bahnen zerlegt: $\{m_z\}$ und $\{m_1, m_2, m_3\}$ (siehe Abbildung E.1). Somit müssen $m_{1,2,3}$ in einer Ebene senkrecht zur z -Achse liegen. Die Lage der Ebenen wird charakterisiert durch den Winkel $\alpha = \angle(m_i, m_z) \in (0, \pi)$, $i = 1, 2, 3$ zwischen m_i und m_z . Durch Rotation um die z -Achse kann m_3 in die xz -Ebene mit positiver x -Komponente gedreht werden. In Kugelkoordinaten haben die Pole dann die Koordinaten:

$$m_z = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad m_i = \begin{pmatrix} \sin(\alpha) \cos(n\theta) \\ \sin(\alpha) \sin(n\theta) \\ \cos(\alpha) \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \theta = \frac{2\pi}{3}.$$

Die Menge der möglichen Winkel zwischen einem Element aus M_3 und m_z ist $W = \{\angle(m, m_z) \mid m \in M_3\} = \{0, \alpha\}$. Da die Auswahl des Polpaares, das in die z -Richtung gelegt wird, beliebig ist, gilt sogar $W = \{\angle(m, m') \mid m, m' \in M_3\}$. Insbesondere:

$$\begin{aligned} \cos(\angle(m_1, m_3)) &= \left\langle \begin{pmatrix} \sin(\alpha) \cos(\theta) \\ \sin(\alpha) \sin(\theta) \\ \cos(\alpha) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \sin(\alpha) \\ 0 \\ \cos(\alpha) \end{pmatrix} \right\rangle \\ &= \cos(\theta) + \cos^2(\alpha)(1 - \cos(\theta)) \in \cos(W). \end{aligned} \quad (\text{E.4})$$

Für $\angle(m_1, m_3)$ kann der Wert 0 sofort ausgeschlossen werden. Die Auflösung der Gleichung $\angle(m_1, m_3) = \alpha$ ergibt $\cos(\alpha) = \frac{\cos(\theta)}{1 - \cos(\theta)}$, also $\alpha \approx 109.5^\circ$. Dieser Winkel und damit die Menge M_3 ist bis auf Drehung des Koordinatensystems eindeutig bestimmt. Die Vektoren aus M_3 müssen ein Tetraeder bilden. Wegen (i) ist dann auch die von den Stabilisatoren der Pole aus M_3 erzeugte Gruppe $H = \langle G_m \mid m \in M_3 \rangle \leq T$ eindeutig festgelegt.

Die Bahn von m_z unter der Operation von H ist $Hm_z = \{m_z, m_{1,2,3}\}$ (eine Drehung um m_i bildet Elemente der Mengen $\{m_z\}$ und $\{m_{1,2,3}\}$ aufeinander ab), das heißt H

operiert transitiv auf M_3 . Daher wird mit (E.1): $|H| = |H_{m_z}| \cdot |Hm_z| = 3 \cdot 4 = 12$, also $H = T$. Da außerdem $H \leq G$ mit $|G| = 12$, wurde gezeigt: Nach geeigneter Drehung des Koordinatensystems sind G und T gleich. Die Tetraedergruppe ist bis auf Konjugation eindeutig.

- (iv) Die Drehgruppe O des Oktaeders besitzt in Richtung der Kantenmitten, der Flächenmitten und der Ecken 12 zweizählige, 8 dreizählige und 6 vierzählige Pole. Die Oktaedergruppe hat $12/2 \cdot (2-1) + 6/2 \cdot 1 = 9$ Elemente der Ordnung 2 (das Quadrat eines Elementes der Ordnung 4 hat die Ordnung 2), $8/2 \cdot (3-1) = 8$ Elemente der Ordnung 3 und $6/2 \cdot (4-2) = 6$ Elemente der Ordnung 4. Es ist $|O| = 1 + 9 + 8 + 6 = 24$.

Sei G eine beliebige Gruppe, die die Bedingungen aus Satz E.6 (iv) erfüllt. Analog wie bei der Tetraedergruppe kann die Anordnung der vierzähligen Pole M_4 untersucht werden. Nach geeigneter Wahl des Koordinatensystems bilden sie drei Bahnen unter der Operation des Stabilisators $G_{\pm m_z} = C_4$ der beiden Pole in z -Richtung: $\{m_z\}$, $\{m_1, m_2, m_3, m_4\}$ und $\{-m_z\}$. Der Winkel $\alpha = \angle(m_i, m_z)$ berechnet sich mit $\theta = \pi$ aus $\cos(\alpha) = \frac{\cos(\theta)}{1-\cos(\theta)}$ zu $\alpha = 90^\circ$, und somit liegen die Pole m_i senkrecht zu $\pm m_z$. Es gilt: $-m_i = m_{(i+2) \bmod 4}$. Die Menge M_4 bildet zwangsläufig ein Oktaeder.

Da die von ihren Stabilisatoren erzeugte Gruppe $H = \langle G_m \mid m \in M_4 \rangle$ transitiv auf M_4 operiert, also $|H| = |H_{m_z}| \cdot |Hm_z| = 4 \cdot 6 = 24$, ist $O = H = G$. Die Oktaedergruppe ist bis auf Konjugation eindeutig.

- (v) Die Drehgruppe Y des Ikosaeders besitzt 30 zwei-, 20 drei- und 12 fünfzählige Pole in Richtung der Kantenmitten, Flächenmitten und Ecken. Die Ikosaedergruppe hat $30/2 \cdot (2-1) = 15$ Elemente der Ordnung zwei, $20/2 \cdot (3-1) = 20$ Elemente der Ordnung drei und $12/2 \cdot (5-1) = 24$ Elemente der Ordnung fünf. Damit ist $|Y| = 1 + 15 + 20 + 24 = 60$.

Sei G eine beliebige Gruppe, die die Bedingungen aus Satz E.6 (v) erfüllt. Analog wie bei der Tetraedergruppe wird die Anordnung der fünfzähligen Pole M_5 untersucht. Nach geeigneter Wahl des Koordinatensystems bilden sie unter der Operation des Stabilisators $G_{\pm m_z} = C_5$ der beiden Pole in z -Richtung vier Bahnen: $\{m_z\}$, $\{m_1, m_2, m_3, m_4, m_5\}$, $\{-m_1, -m_2, -m_3, -m_4, -m_5\}$ und $\{-m_z\}$. Die Menge der Winkel zwischen zwei fünfzähligen Polen ist $W = \{\angle(m, m') \mid m, m' \in M_5\} = \{0, \alpha, \pi - \alpha, \pi\}$, wobei die m_i so gewählt seien, dass $\alpha = \angle(m_i, m_z) \in (0, \frac{\pi}{2}]$. Die Auflösung der Bedingung $\cos(\theta) + \cos^2(\alpha)(1 - \cos(\theta)) \in \{\alpha, \pi - \alpha\}$ (vergleiche (E.4)) ergibt $\cos(\alpha_1) = \pm \frac{\cos(\theta)}{1-\cos(\theta)}$. Wegen $\alpha \in (0, \frac{\pi}{2}]$ entfällt die negative Lösung. Mit $\theta = \frac{2\pi}{5}$ ist $\alpha \approx 63.4^\circ$, und die Menge M_5 bildet zwangsläufig ein Ikosaeder.

Da die von ihren Stabilisatoren erzeugte Gruppe $H = \langle G_m \mid m \in M_5 \rangle$ transitiv auf M_5 operiert, ist $|H| = |H_{m_z}| \cdot |Hm_z| = 5 \cdot 12 = 60$ und $Y = H = G$. Die Ikosaedergruppe ist bis auf Konjugation eindeutig.

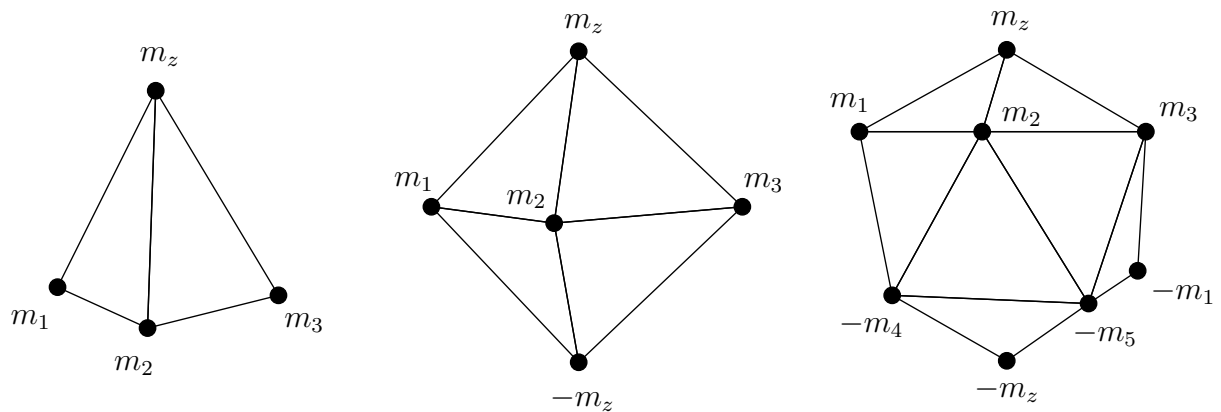


Abbildung E.1: Links: Tetraeder aus vier gleichseitigen Dreiecken, aufgespannt von den dreizähligen Polen $m_z, m_{1,2,3}$. Die Pole $-m_z, -m_{1,2,3}$ liegen in einer weiteren Bahn. Sie verlaufen in Richtung der Seitenmitten. Mitte: Oktaeder aus acht gleichseitigen Dreiecken, aufgespannt von den vierzähligen Polen $\pm m_z, m_{1,2,3,4} = -m_{3,4,1,2}$. Rechts: Ikosaeder aus zwölf gleichseitigen Fünfecken, aufgespannt von den fünfzähligen Polen $\pm m_z, \pm m_{1,2,3,4,5}$. Die Pole m_i und die Pole $-m_i$ liegen jeweils in Ebenen senkrecht zu $\pm m_z$.

Satz E.7. *Bis auf Konjugation in $SO(3)$ gibt es genau die folgenden endlichen Untergruppen von $SO(3)$:*

- die Zyklischen Gruppen $C_n, n = 1, 2, 3, \dots,$
- die Diedergruppen $D_n, n = 2, 3, 4, \dots,$
- die Tetraedergruppe T , die Oktaedergruppe O und die Ikosaedergruppe Y .

Die Gruppen C_n und D_n sind reduzibel und die Gruppen T, O und Y irreduzibel.

Beweis. Die Existenz und Eindeutigkeit der angegebenen Gruppen wurde in den obigen Bemerkungen gezeigt. Bleibt die Untersuchung der (Ir-)Reduzibilität. Die z -Achse ist unter der Operation der Gruppen C_n und D_n invariant. Diese sind daher reduzibel. Die Gruppen T, O und Y besitzen keinen eindimensionalen invarianten Unterraum, da für sie kein invariantes Polpaar $\pm m$ existiert. Damit gibt es auch keinen zweidimensionalen invarianten Unterraum, denn sei V' ein solcher, dann ist auch das eindimensionale Komplement V'' in $\mathbb{R}^3 = V' \oplus V''$ invariant. \square

Aufgrund der kristallographischen Einschränkung (Satz 1.6) treten die Gruppen C_n, D_n mit $n = 5$ oder $n > 7$ sowie die Ikosaedergruppe Y nicht als Punktgruppen von Kristallen auf.

Für eine Erweiterung der Ergebnisse auf endliche Untergruppen von $O(3)$ und damit Angabe aller möglichen dreidimensionalen Punktgruppen sei auf [58] verwiesen. Ist man an

einer Untersuchung endlicher Untergruppen der $GL(n, \mathbb{R})$ oder $SL(n, \mathbb{R})$ interessiert, so genügt aufgrund des nächsten Lemmas die Betrachtung von $O(n)$ beziehungsweise $SO(n)$:

Lemma E.8. *Sei $G < GL(n, \mathbb{R})$ eine endliche Untergruppe. Dann ist G in $GL(n, \mathbb{R})$ konjugiert zu einer endlichen Untergruppe von $O(n)$.*

Beweis. Sei \langle, \rangle das kanonische Skalarprodukt auf \mathbb{R}^n . Setze

$$(x, y) = \sum_{h \in G} \langle hx, hy \rangle \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^n.$$

Dies ist wieder ein Skalarprodukt und zusätzlich G -invariant. Denn ist $g \in G$, so ist $(gx, gy) = \sum_{h \in G} \langle hgx, hgy \rangle = \sum_{h \in G} \langle hx, hy \rangle = (x, y)$. Seien $B_{\langle, \rangle}$ und $B_{(\cdot, \cdot)}$ Orthonormalbasen bezüglich der beiden Skalarprodukte und $T : B_{\langle, \rangle} \rightarrow B_{(\cdot, \cdot)} \in GL(n, \mathbb{R})$ die Matrix des Basiswechsels. Dann ist $TGT^{-1} < O(n)$. \square

E.3 Darstellungen der Ikosaedergruppe

Lemma E.9. *Sei ϕ eine n -dimensionale Darstellung von Y . Dann ist $\phi(Y)$ eine Untergruppe von $SL(n, \mathbb{R})$.*

Beweis. Elemente aus $\phi(Y)$ mit ungerader Ordnung liegen in $SL(n, \mathbb{R})$. Also hat $\phi(Y)$ mindestens $20 + 24 + 1 = 45$ Elemente in $SL(n, \mathbb{R})$. Annahme: $\phi(Y)$ enthalte ein Element, das nicht in $SL(n, \mathbb{R})$ liegt. Durch Multiplikation mit diesem Element werden Elemente aus $SL(n, \mathbb{R})$ auf Elemente aus $GL(n, \mathbb{R}) \setminus SL(n, \mathbb{R})$ abgebildet und umgekehrt. Das bedeutet, dass genau $60/2 = 30$ Elemente von $\phi(Y)$ in $SL(n, \mathbb{R})$ liegen. Widerspruch! \square

Mit der geleisteten Vorarbeit kann für die Ikosaedergruppe gezeigt werden:

Satz E.10. *Sei ϕ eine nicht-triviale dreidimensionale Darstellung von Y . Dann ist ϕ treu und irreduzibel. Außerdem ist $\phi(Y)$ konjugiert zu Y .*

Beweis. Sei ϕ eine treue dreidimensionale Darstellung von Y und $G = \phi(Y)$. Die Darstellung sei nicht-trivial ($\phi(G) \neq \{\mathbb{1}\}$). Nach Lemma E.8 gibt es eine Gruppe $H < O(3)$, die zu G konjugiert ist. Sie liegt wegen Lemma E.9 sogar in $SO(3)$. Dann ist H bis auf Konjugation eindeutig, denn in $SO(3)$ gibt es nach Satz E.7 bis auf Konjugation genau eine endliche Untergruppe, die isomorph zu Y ist. Sie ist irreduzibel.

Zeige jetzt noch: Jede nicht-triviale Darstellung von Y ist treu. Sei $K = \text{Kern}(\phi)$ der Kern der Darstellung. Dann gilt $gKg^{-1} \subseteq K$ für alle $g \in G$, da

$$\phi(gKg^{-1}) = \phi(g)\phi(K)\phi(g^{-1}) = \phi(g)\phi(g^{-1}) = \phi(gg^{-1}) = \phi(e) = \mathbb{1} = \phi(K).$$

(Untergruppen mit der Eigenschaft $gKg^{-1} \subseteq K$ heißen normal.) Enthält K ein Element $f \in Y$ der Ordnung fünf mit dazugehörigem Polpaar $\pm m$, dann enthält K wegen $\phi(f^n) =$

$\phi(f)^n = \mathbb{1}^n = \mathbb{1}$ den Stabilisator des Polpaares $\pm m$. Da Stabilisatoren zweier beliebiger Elemente $f, f' \in Y$ der Ordnung fünf zueinander konjugiert sind (vergleiche Abschnitt E.1), enthält K mit einem Element der Ordnung fünf schließlich alle 24 Elemente der Ordnung fünf. Analog sieht man: K enthält alle 15 Elemente der Ordnung zwei und alle 20 Elemente der Ordnung drei. Da das Einselement immer in K enthalten ist, setzt sich $|K| - 1$ additiv zusammen aus den Zahlen 15, 20 und 24, das heißt: $|K| \in \{1, 16, 21, 25, 36, 40, 45, 60\}$. Außerdem ist bekannt, dass die Ordnung einer Untergruppe die Gruppenordnung teilt. Daher bleibt: $|K| \in \{1, 60\}$. Die Ikosaedergruppe Y hat außer der trivialen Darstellung nur treue Darstellungen. \square

Der Satz E.10 wurde vollständig ohne Verwendung der Charaktertafel der Ikosaedergruppe bewiesen. Die Charaktertafel in Tabelle E.2 zeigt, dass es genau zwei nicht \mathbb{R} -äquivalente dreidimensionale Darstellungen der Ikosaedergruppe gibt. Äquivalenz zweier Darstellungen bedeutet jedoch, dass die Darstellungen elementweise zueinander konjugiert sind, während in den vorangegangenen Abschnitten, sowie in Satz E.10, nur von einer Konjugation der Darstellungen als ganzes ausgegangen wurde (aus Äquivalenz folgt Konjugiertheit). Durch Vertauschung der Konjugationsklassen $(12345)_{12}$ und $(13524)_{12}$ in Tabelle E.2 gehen die beiden Darstellungen ineinander über.

Es ist bekannt, dass die Ikosaedergruppe Y isomorph zur A_5 ist, der alternierenden Gruppe vom Grad 5. Diese ist die kleinste einfache nicht kommutative Gruppe. (Eine Gruppe G heißt einfach, wenn $\{1\}$ und G die einzigen normalen Untergruppen sind.) Die Isomorphie sieht man auch folgendermaßen: Nach Gleichung (B.1) ist Y erzeugt von einer fünfzähligen Drehung a und einer zweizähligen Drehung b mit $Y = \langle a, b \mid a^5 = b^2 = (ab)^3 = 1 \rangle$. Gleichzeitig gilt aber in A_5 : $(12345)^5 = (12)(34)^2 = [(12345)(12)(34)]^3 = \text{id}$. Wegen $|A_5| = |Y| = 60$ ist $A_5 \cong Y$. Betrachte für den Rest dieses Kapitels die Ikosaedergruppe als alternierende Gruppe vom Grad 5, also als A_5 . (Umgekehrt ist Y eine dreidimensionale Darstellung von A_5 .) Als nächstes werden die Untergruppen von A_5 untersucht.

Lemma E.11. *Die nicht-trivialen Untergruppen von A_5 sind bis auf Isomorphie: $C_2, C_3, C_5, D_2, D_3, D_5, A_4$.*

Beweis. Sei H eine Untergruppe von A_5 . Dann ist $|H|$ ein Teiler von 60. Außerdem ist H auch isomorph zu einer Untergruppe von Y und damit von $SO(3)$, kommt also in der Klassifikation von Satz E.7 vor. Da A_5 und somit H nur Elemente der Ordnungen 2, 3 und 5 enthalten, kann es keine Untergruppen von A_5 geben, die nicht zu den im Satz angegebenen isomorph sind. Dass diese auch wirklich vorkommen, zeigt: $C_2 = \langle (12)(34) \rangle$, $C_3 = \langle (123) \rangle$, $C_5 = \langle (12345) \rangle$, $D_2 = \langle (12)(34), (13)(24) \rangle$, $D_3 = \langle (123), (12)(45) \rangle$, $D_5 = \langle (12345), (14)(23) \rangle$, $A_4 = \langle (123), (12)(34) \rangle$. Die alternierende Gruppe A_4 und die Tetraedergruppe sind isomorph. \square

Aus Lemma E.8 und Satz E.7 folgt sofort:

C_2	id ₁	(12)(34) ₁	
$\chi_{C_2}^1$	1	1	\mathbb{Q}
$\chi_{C_2}^2$	1	-1	\mathbb{Q} , treu

C_3	id ₁	(123) ₁	(132) ₁	
$\chi_{C_3}^1$	1	1	1	\mathbb{Q}
$\chi_{C_3}^2$	1	ϵ_3	ϵ_3^*	\mathbb{C} , treu
$\chi_{C_3}^3$	1	ϵ_3^*	ϵ_3	\mathbb{C} , treu
$\chi_{C_3}^4 = \chi_{C_3}^2 + \chi_{C_3}^3$	2	-1	-1	\mathbb{Q} , treu

C_5	id ₁	(12345) ₁	(13524) ₁	(14253) ₁	(15432) ₁	
$\chi_{C_5}^1$	1	1	1	1	1	\mathbb{Q}
$\chi_{C_5}^2$	1	ϵ_5	ϵ_5^2	$(\epsilon_5^2)^*$	ϵ_5^*	\mathbb{C} , treu
$\chi_{C_5}^3$	1	ϵ_5^*	$(\epsilon_5^2)^*$	ϵ_5^2	ϵ_5	\mathbb{C} , treu
$\chi_{C_5}^4$	1	ϵ_5^2	ϵ_5^*	ϵ_5	$(\epsilon_5^2)^*$	\mathbb{C} , treu
$\chi_{C_5}^5$	1	$(\epsilon_5^2)^*$	ϵ_5	ϵ_5^*	ϵ_5^2	\mathbb{C} , treu
$\chi_{C_5}^6 = \chi_{C_5}^2 + \chi_{C_5}^3$	2	$\tau - 1$	$-\tau$	$-\tau$	$\tau - 1$	\mathbb{R} , treu
$\chi_{C_5}^7 = \chi_{C_5}^4 + \chi_{C_5}^5$	2	$-\tau$	$\tau - 1$	$\tau - 1$	$-\tau$	\mathbb{R} , treu
$\chi_{C_5}^8 = \chi_{C_5}^6 + \chi_{C_5}^7$	4	-1	-1	-1	-1	\mathbb{Q} , treu

D_2	id ₁	(12)(34) ₁	(13)(24) ₁	(14)(23) ₁	
$\chi_{D_2}^1$	1	1	1	1	\mathbb{Q}
$\chi_{D_2}^2$	1	1	-1	-1	\mathbb{Q}
$\chi_{D_2}^3$	1	-1	1	-1	\mathbb{Q}
$\chi_{D_2}^4$	1	-1	-1	1	\mathbb{Q}

D_3	id ₁	(123) ₂	(12)(45) ₃	
$\chi_{D_3}^1$	1	1	1	\mathbb{Q}
$\chi_{D_3}^2$	1	1	-1	\mathbb{Q}
$\chi_{D_3}^3$	2	-1	0	\mathbb{Q} , treu

Tabelle E.1: Charaktertafeln der Gruppen C_2 , C_3 , C_5 , D_2 und D_3 . Es ist: $\epsilon_n = \exp(\frac{2\pi i}{n})$ und $\tau = \frac{1}{2}(\sqrt{5} + 1)$. In der oberen Zeile bezeichnet x_n die Konjugiertenklasse, die x enthält und aus n Elementen besteht. Die letzte Spalte listet einen Körper auf, in dem eine Darstellung mit dem jeweiligen Charakter möglich ist. Außerdem ist angegeben, ob die Darstellung treu ist.

D_5	id ₁	(12345) ₂	(13524) ₂	(14)(23) ₅	
$\chi_{D_5}^1$	1	1	1	1	\mathbb{Q}
$\chi_{D_5}^2$	1	1	1	-1	\mathbb{Q}
$\chi_{D_5}^3$	2	$\tau - 1$	$-\tau$	0	\mathbb{R} , treu
$\chi_{D_5}^4$	2	$-\tau$	$\tau - 1$	0	\mathbb{R} , treu
$\chi_{D_5}^5 = \chi_{D_5}^3 + \chi_{D_5}^4$	4	-1	-1	0	\mathbb{Q} , treu

A_4	id ₁	(123) ₄	(132) ₄	(12)(34) ₃	
$\chi_{A_4}^1$	1	1	1	1	\mathbb{Q}
$\chi_{A_4}^2$	1	ϵ_3	ϵ_3^*	1	\mathbb{C}
$\chi_{A_4}^3$	1	ϵ_3^*	ϵ_3	1	\mathbb{C}
$\chi_{A_4}^4$	3	0	0	-1	\mathbb{Q} , treu
$\chi_{A_4}^5 = \chi_{A_4}^2 + \chi_{A_4}^3$	2	-1	-1	2	\mathbb{Q}

A_5	id ₁	(12345) ₁₂	(13524) ₁₂	(123) ₂₀	(12)(34) ₁₅	
$\chi_{A_5}^1$	1	1	1	1	1	\mathbb{Q}
$\chi_{A_5}^2$	3	τ	$1 - \tau$	0	-1	\mathbb{R} , treu
$\chi_{A_5}^3$	3	$1 - \tau$	τ	0	-1	\mathbb{R} , treu
$\chi_{A_5}^4$	4	-1	-1	1	0	\mathbb{Q} , treu
$\chi_{A_5}^5$	5	0	0	-1	1	\mathbb{Q} , treu
$\chi_{A_5}^6 = \chi_{A_5}^2 + \chi_{A_5}^3$	6	1	1	0	-2	\mathbb{Q} , treu

Tabelle E.2: (Fortsetzung von Tabelle E.1) Charaktertafeln der Gruppen D_5 , A_4 und A_5 .

Korollar E.12. *Jede endliche Untergruppe von $SL(3, \mathbb{R})$, die isomorph ist zu einer Untergruppe H von Y , ist konjugiert zu H .*

Dies kann man sich auch an den Charaktertafeln der Untergruppen veranschaulichen. Reelle und rationale Darstellungen sind durch ihre Charaktere bis auf Äquivalenz eindeutig bestimmt:

Satz E.13 (Theorem 30.12 und Korollar 30.14 in [20]). *Sei K ein Körper der Charakteristik 0. Dann sind die irreduziblen K -Charaktere einer Gruppe G linear unabhängig. Insbesondere sind zwei K -Darstellungen genau dann K -äquivalent, wenn ihre Charaktere gleich sind.*

Bezeichne mit ϕ_G^i eine (komplexe, reelle oder rationale) irreduzible Darstellung der Gruppe G mit Charakter χ_G^i . Der Charakter einer nicht-trivialen endlichen Untergruppe von $SL(3, \mathbb{R})$, die isomorph ist zu einer Untergruppe von Y , ist aufgebaut aus irreduziblen Charakteren aus den Charaktertafeln in den Tabellen E.1 und E.2). Folgende Kombinationen sind bis auf Konjugation möglich:

$$\begin{aligned} &\phi_{C_2}^1 \oplus \phi_{C_2}^2 \oplus \phi_{C_2}^2, & \phi_{C_3}^1 \oplus \phi_{C_3}^4, & \phi_{C_5}^1 \oplus \phi_{C_5}^6, \\ &\phi_{D_2}^2 \oplus \phi_{D_2}^3 \oplus \phi_{D_2}^4, & \phi_{D_3}^2 \oplus \phi_{D_3}^3, & \phi_{D_5}^2 \oplus \phi_{D_5}^3, & \phi_{A_4}^4. \end{aligned}$$

Andere Kombinationen von irreduziblen Darstellungen führen entweder auf nicht treue Darstellungen (also Darstellungen von kleineren Untergruppen) oder Darstellung außerhalb von $SL(3, \mathbb{R})$.

Korollar E.12 lässt sich nicht auf höhere Dimensionen verallgemeinern, denn schon im einfachsten Fall der Gruppe C_2 in $SL(4, \mathbb{R})$ sind $\phi_{C_2}^1 \oplus \phi_{C_2}^1 \oplus \phi_{C_2}^2 \oplus \phi_{C_2}^2$ und $\phi_{C_2}^2 \oplus \phi_{C_2}^2 \oplus \phi_{C_2}^2 \oplus \phi_{C_2}^2$ nicht konjugiert zueinander.

Für $\phi_{A_5}^6$ ist eine \mathbb{Z} -Darstellung in Abschnitt 3.5 angegeben. \mathbb{Z} -Darstellungen zu den Charakteren $\chi_{A_5}^4$ und $\chi_{A_5}^5$ sind:

$$\begin{aligned} \phi_{A_5}^4((12345)) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}, & \phi_{A_5}^4((12)(45)) &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ \phi_{A_5}^5((12345)) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, & \phi_{A_5}^5((12)(45)) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Die Darstellungen liegen in $SL(4, \mathbb{Z})$ beziehungsweise in $SL(5, \mathbb{Z})$.

E.4 Die Zassenhausvermutungen

Ergebnisse der Darstellungstheorie von endlichen Gruppen lassen sich in der Sprache der Gruppenringe formulieren. Im Folgenden sei immer G eine endliche Gruppe.

Definition E.14. Sei R ein Ring mit Einselement. Definiere den Gruppenring RG als Menge aller Linearkombinationen der Form

$$a = \sum_{g \in G} a_g g \quad \text{mit } a_g \in R.$$

RG ist ein Ring, wobei die Summe und das Produkt zweier Elementen $a = \sum_{g \in G} a_g g$, $b = \sum_{g \in G} b_g g$ definiert sind durch $a+b = \sum_{g \in G} (a_g + b_g) g$ und $ab = \sum_{g \in G} \left(\sum_{xy=g} a_x b_y \right) g$. Unter der Skalarmultiplikation mit $r \in R$: $ra = \sum_{g \in G} (ra_g) (g)$ wird RG zu einem R -Modul. Die Abbildung

$$\epsilon : RG \rightarrow R; a \mapsto \sum_{g \in G} a_g$$

ist ein Ring-Homomorphismus und heißt *Augmentationsabbildung* von RG . Ist $\theta : RG \rightarrow RH$ ein Ring-Isomorphismus, dann definiere

$$\theta^* : RG \rightarrow RH; \sum_{g \in G} a_g g \mapsto \sum_{g \in G} a_g [\epsilon(\theta(g))]^{-1} \theta(g).$$

θ^* ist wieder ein Ring-Isomorphismus und erhält die Augmentation, das heißt $\epsilon(\theta^*(g)) = 1$ für alle $g \in G$. Ein Isomorphismus mit dieser Eigenschaft wird als *normiert* bezeichnet. $\text{Aut}^*(RG) \leq \text{Aut}(RG)$ ist die Gruppe aller normierten Automorphismen.

In der Definition sind zwei Elemente $a, b \in RG$ genau dann gleich, wenn $a_g = b_g$ für alle $g \in G$. Die Gruppe G , identifiziert mit einer Teilmenge von RG , bildet eine Basis von RG . Ist $R = K$ ein Körper, dann ist jeder KG -Modul M ein K^n -Vektorraum und kann nach Auswahl einer K -Basis als K -Darstellung $\phi_M : g \rightarrow GL(n, K); g \mapsto \phi_M(g)$ aufgefasst werden, da die Multiplikation $\phi_M(g)(a) = ga$ K -linear ist. Umgekehrt wird jede K -Darstellung ϕ durch Abschluss von $\phi(G)$ unter der Matrixmultiplikation auf K^n und der Skalarmultiplikation zu einem KG -Modul M_ϕ . Bei dieser Konstruktion stimmt die Augmentationsabbildung eines KG -Moduls mit dem Charakter der dazugehörigen K -Darstellung überein. Für eine ausführlichere Einführung in die Theorie der Gruppenringe sei auf [20] verwiesen.

Die Darstellungstheorie ist somit ein Teil der Theorie der Ringe mit endlicher Basis. Es liegt nahe zu untersuchen, in welchem Maße die Gruppe G durch ihren Gruppenring schon vollständig bestimmt ist. Das dabei auftretende Isomorphieproblem wird seit circa 1940 untersucht und ist auch heute noch Gegenstand aktueller Forschung:

(Isomorphismieproblem) Betrachte zwei Gruppen G, H und einen Ring R . Stimmt es, dass aus der Existenz eines Ring-Isomorphismus $RG \cong RH$ folgt, dass $G \cong H$?

Im Fall $R = \mathbb{C}$ ist es einfach zu sehen, dass das Isomorphieproblem nicht erfüllt ist. Betrachte die Gruppen D_4 und Q_8 (Quaternionengruppe der Ordnung 8):

$$\mathbb{C}D_4 \cong \mathbb{C}^{2 \times 2} \times \mathbb{C} \times \mathbb{C} \times \mathbb{C} \times \mathbb{C} \cong \mathbb{C}Q_8.$$

E.C. Dade konnte 1972 sogar zeigen, dass das Isomorphismieproblem für $R = \text{Körper}$ eine negative Antwort besitzt, indem er zwei Gruppen anführte, deren Gruppenringe über allen Körpern isomorph sind [21]. Lange Zeit wurde vermutet, dass das Isomorphieproblem für ganzzahlige Gruppenringe

$$\text{(ISO)} \quad \mathbb{Z}G \cong \mathbb{Z}H \implies G \cong H.$$

eine positive Antwort besitzt. Für spezielle Gruppen, wie nilpotente Gruppen oder metabelsche Gruppen, konnte dies zwar auch gezeigt werden, aber M. Hertweck fand 1998 in seiner Doktorarbeit (an der Universität Stuttgart, [38]) ein Gegenbeispiel zu (ISO).

In ganzzahligen Gruppenringen spielt die Einheitengruppe

$$\mathcal{U}(\mathbb{Z}G) = \{a \in \mathbb{Z}G \mid a \text{ ist invertierbar}\}$$

eine besondere Rolle. Da für $u \in \mathcal{U}(\mathbb{Z}G)$ die Augmentation $\epsilon(u) = \pm 1$ ist, zerlegt man die Einheitengruppe in $\mathcal{U}(\mathbb{Z}G) = \pm \mathcal{V}(\mathbb{Z}G)$, wobei $\mathcal{V}(\mathbb{Z}G)$ Einheiten mit Augmentation eins enthält. Jedes Element $g \in G$ liegt in $\mathcal{V}(\mathbb{Z}G)$ und wird als triviale Einheit bezeichnet. Für die meisten Gruppen gibt es jedoch noch weitere Einheiten. Die Struktur von $\mathcal{V}(\mathbb{Z}G)$ ist in der Regel kompliziert und eine explizite Berechnung sehr aufwendig, da keine allgemeine Vorgehensweise bekannt ist. Die Monographie [75] befasst sich mit der Untersuchung der Einheitengruppen. Ein Ergebnis hieraus ist:

Satz E.15 (Lemma 37.4 in [75]). *Sei $H \leq \mathcal{V}(\mathbb{Z}G)$ eine endliche Untergruppe. Dann ist $|H|$ ein Teiler von $|G|$.*

Da man durch Konjugation einer Einheit $v \in \mathcal{V}(\mathbb{Z}G)$ in $\mathbb{Q}G$ (beachte dazu Satz E.21) wieder eine Einheit erhält, ist eine Klassifikation aller Einheiten v bis auf Konjugation interessant. Wichtig bei der Untersuchung von (ISO) sind folgende Vermutungen von H. Zassenhaus über Elemente $v \in \mathcal{V}(\mathbb{Z}G)$ endlicher Ordnung ($o(v) < \infty$) und endliche Untergruppen von $\mathcal{V}(\mathbb{Z}G)$, sowie das Automorphieproblem:

$$\text{(ZC1)} \quad v \in \mathcal{V}(\mathbb{Z}G), o(v) < \infty \implies \exists a \in \mathbb{Q}G, \text{ so dass } a^{-1}ua \in G,$$

$$\text{(ZC2)} \quad H \leq \mathcal{V}(\mathbb{Z}G), |H| = |G| \implies \exists a \in \mathbb{Q}G, \text{ so dass } a^{-1}Ha = G,$$

(ZC3) $H \leq \mathcal{V}(\mathbb{Z}G)$, $|H| < \infty \implies \exists a \in \mathbb{Q}G$, so dass $a^{-1}Ha \subseteq G$,

(AUT) $\theta \in \text{Aut}^*(\mathbb{Z}G) \implies \exists a \in \mathbb{Q}G$, $\tau \in \text{Aut}(G)$, so dass $\theta(\cdot) = a^{-1}\tau(\cdot)a$.

Satz E.16 (§37 in [75]). *Es gelten die Implikationen:*

- $(ZC3) \implies (ZC2) + (ZC1)$,
- $(AUT) + (ISO) \iff (ZC2)$.

(ZC2), (ZC3) und (AUT) gelten im Allgemeinen nicht. Ein Gegenbeispiel zu (ZC2) wurde 1987 von K.W. Roggenkamp und L. Scott gefunden und in [59] veröffentlicht. (Für einen Überblick über (ZC2) siehe auch [50].) (ZC1) ist bisher noch offen. Eine gewisse Verknüpfung von (ZC1) und (ZC3) für Untergruppen H , die zu Untergruppen von G isomorph sind, ist folgender

Satz E.17 (Korollar 2.5 in [25]). *Sei H eine endliche Untergruppe von $\mathcal{V}(\mathbb{Z}G)$ und $\theta : H \rightarrow G_0 \leq G$ ein Isomorphismus, so dass für jedes $h \in H$ ein $a_h \in \mathbb{Q}G$ existiert mit $a_h^{-1}ha_h = \theta(h)$. Dann existiert ein $a \in \mathbb{Q}G$, so dass $a^{-1}ha = \theta(h)$ für alle $h \in H$.*

Bei der Untersuchung von (AUT) ist der nächste Satz hilfreich:

Satz E.18 (Theorem 36.5 und Proposition 43.1 in [75]). *Seien C_i , $1 \leq i \leq h$ die Konjugationsklassen einer Gruppe G und $C_i = \sum_{x \in C_i} x \in \mathbb{Z}G$ die dazugehörigen Klassensummen. Sei $\theta \in \text{Aut}^*(\mathbb{Z}G)$. Dann existiert eine Permutation $\sigma \in S(h)$, so dass $\theta(C_i) = C_{\sigma(i)}$ für alle i . Außerdem gilt:*

$$\exists \tau \in \text{Aut}(G), \tau(C_i) = C_{\sigma(i)} \text{ für alle } i \implies \exists a \in \mathbb{Q}G, \text{ so dass } \theta(\cdot) = a^{-1}\tau(\cdot)a.$$

E.5 Zassenhausvermutungen für die Ikosaedergruppe

Satz E.19. *Sei H eine endliche Untergruppe von $\mathcal{V}(\mathbb{R}A_5)$. Jedes Element von H sei konjugiert zu einem Element von A_5 . Dann ist H in $\mathbb{R}A_5$ konjugiert zu einer Untergruppe \tilde{H} von A_5 .*

Beweis. $\mathbb{R}A_5$ wird entsprechend den reellen irreduziblen Darstellungen in Blöcke zerlegt: $\mathbb{R}A_5 \cong \mathbb{R} \times \mathbb{R}^{3 \times 3} \times \mathbb{R}^{3 \times 3} \times \mathbb{R}^{4 \times 4} \times \mathbb{R}^{5 \times 5}$. Bezeichne mit π_1^3 , π_2^3 , π^4 , π^5 die Projektionen auf die nicht-trivialen Blöcke. Da Konjugation die Blöcke festlässt, genügt es für jede der Projektionen π zu zeigen, dass $\pi(H)$ konjugiert zu $\pi(\tilde{H})$ ist, wobei \tilde{H} eine (von der Wahl der Projektion π unabhängige) Untergruppe von A_5 ist.

- (i) Zeige: $H \cong \pi(H) < SL(n, \mathbb{R})$. Sei $h \in H$, $h \neq e$ konjugiert zu $\tilde{h} \in A_5$ und π eine der Projektionen zum Block $\mathbb{R}^{n \times n}$. Dann ist $\pi(h)$ konjugiert zu $\pi(\tilde{h})$, also $\pi(h) \in SL(n, \mathbb{R})$ nach Lemma E.9. Weil die nicht-trivialen Darstellungen von A_5 treu sind, ist $\pi(h) \neq \mathbb{1}$ (Einheitsmatrix) und somit folgt die Behauptung.

- (ii) Zeige: $H \cong \tilde{H} \leq A_5$. Nach Voraussetzung besitzen nicht-triviale Elemente von $\pi_1^3(H)$ die Ordnungen 2, 3 oder 5 und liegen wegen (i) in $SL(3, \mathbb{R})$. Nach Abschnitt E.2 und Lemma E.11 ist $\pi_1^3(H)$ isomorph zu einer Untergruppe von $Y \cong A_5$.

Sei zuerst $\pi = \pi_1^3$ oder $\pi = \pi_2^3$. Aus Korollar E.12 folgt mit (ii), dass $\pi(H)$ und $\pi(\tilde{H}) \leq Y$ konjugiert sind. Bleiben die Fälle π^4 und π^5 zu untersuchen. Die Matixgruppen $\pi^4(H)$ und $\pi^4(\tilde{H})$ sind die Bilder von vierdimensionale Darstellungen ϕ_H^4 und $\phi_{\tilde{H}}^4$ von H . Sei $h \in H$. Da der Charakter $\chi_{A_5}^4$ konstant ist für Elemente gleicher Ordnung, ist $\text{Spur}(\phi_H^4(h)) = \text{Spur}(\phi_{\tilde{H}}^4(h))$. Wegen Satz E.13 sind dann jedoch ϕ_H^4 und $\phi_{\tilde{H}}^4$ äquivalent und somit $\pi^4(H)$ und $\pi^4(\tilde{H})$ konjugiert zueinander. Analoges gilt für die Projektion π^5 . \square

Die folgende Sätze verknüpfen reelle, rationale und ganzzahlige Darstellungen:

Satz E.20 (Theorem 29.5 in [20]). *Sei L ein Körper und K ein Teilkörper von L . Zwei K -Darstellungen sind genau dann K -äquivalent, wenn sie L -äquivalent sind.*

Satz E.21 (Theorem 73.5 in [20]). *Jede \mathbb{Q} -Darstellung einer Gruppe G ist \mathbb{Q} -äquivalent zu einer \mathbb{Z} -Darstellung von G .*

Für endliche Untergruppen H von $\mathcal{V}(\mathbb{Z}A_5)$ sind die Voraussetzungen von Satz E.19 äquivalent zur Aussage von (ZC1). Für die Gruppe A_5 wurde (ZC1) von Luthar und Passi bewiesen [65]. Daher ist H in $\mathbb{R}A_5$ konjugiert zu einer Untergruppe \tilde{H} von $A_5 \leq \mathcal{V}(\mathbb{Z}A_5)$. Aus Satz E.20 folgt zusätzlich, dass dann H auch in $\mathbb{Q}A_5$ zu \tilde{H} konjugiert ist und somit:

Satz E.22. *Für die Gruppe A_5 sind die drei Zassenhausvermutung richtig. Das Automorphieproblem und das Isomorphieproblem besitzen eine positive Antwort.*

Dieser Satz wurde ohne charaktertheoretische Hilfsmittel schon in [25] bewiesen. Der hier dargestellte Beweis stützt sich auf die Klassifikation der endlichen Untergruppen von $SO(3, \mathbb{R})$ sowie die Charaktertafel von A_5 und ist etwas kürzer.

Anhang F

Symbolverzeichnis

In der folgenden Tabelle sind die wichtigen und häufig verwendeten Symbole, geordnet nach ihrem Auftreten, aufgeführt:

Kapitel 1:

d	Dimension des physikalischen Raums
$\rho(\mathbf{x})$	Dichtefunktion eines d -dimensionalen Festkörpers
Γ	Gitter im \mathbb{R}^d
Γ^*	reziprokes Gitter
Z	Elementarzelle eines Gitters
$\{S, \mathbf{t}\}$	Symmetrieoperation bestehend aus Drehung S und Translation \mathbf{t}
$O(d)$	Menge der orthogonalen Matrizen in $\mathbb{R}^{d \times d}$
$SO(d)$	Menge der orthogonalen Matrizen aus $O(d)$ mit Determinante 1
$GL(d, K)$	Menge der invertierbaren Matrizen in $K^{d \times d}$, $K = \mathbb{Z}, \mathbb{R}$
\mathcal{F}	Operator der Fouriertransformation
\mathcal{P}	Projektionsoperator
\mathcal{C}	Schnittoperator
\tilde{d}	Dimension des Hyperraums
$\tilde{\rho}(\tilde{\mathbf{x}})$	Dichtefunktion im Hyperraum
$\tilde{\Gamma}$	Hypergitter im $\mathbb{R}^{\tilde{d}}$
E^{\parallel}	Schnittebene eines Quasikristalls, physikalischer Raum
E^{\perp}	Orthogonalraum
d^{\parallel}, d^{\perp}	Dimensionen von E^{\parallel} und E^{\perp}
$\pi^{\parallel}, \pi^{\perp}$	Orthogonalprojektionen auf E^{\parallel} und E^{\perp}
$P_{\tilde{\rho}}^{\parallel}$	verallgemeinerte Punktsymmetriegruppe des Quasikristalls

Kapitel 2:

\mathcal{A}	d^\perp -dimensionale Atomfläche
$\bar{\mathcal{A}} = -\mathcal{A}$	Akzeptanzbereich
$\mathcal{S} = \bar{\mathcal{A}} \oplus E^\parallel$	Auswahlstreifen
$W^n = [0, 1]^n$	Einheitswürfel der Dimension n
$\tau = \frac{1}{2}(\sqrt{5} + 1)$	goldene Zahl
F_n	Fibonacci-Zahlen
S, L	kurze und lange Abstände in der Fibonacci-Kette
P_6, F_6, B_6	kubische sechsdimensionale Bravais-Gitter

Kapitel 3:

$Q = (\tilde{\rho}, E^\parallel)$	Quasikristall-Modellsystem
\mathcal{E}^\parallel	(gescherte) Schnittebene eines Approximanten
$\pi_{\text{approx}}^\perp$	Projektion entlang E^\perp auf \mathcal{E}^\parallel
A	Basismatrix von \mathcal{E}^\parallel
η	Verzerrungsmatrix
χ	Schermatrix
\mathcal{B}	\tilde{d} -dimensionaler Atombereich
D	Darstellung einer der Ikosaedergruppen Y, Y_h
a_x, a_y, a_z	Gitterkonstanten eines Kristalls

Kapitel 5:

$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$	zeitabhängiges Verschiebungsfeld im physikalischen Raum
C_{ijkl}	Hookescher Tensor der elastischen Materialkonstanten
ϵ_{ij}	Greenscher Verzerrungstensor
σ_{ij}	Spannungstensor
$\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t)$	zeitabhängiges Verschiebungsfeld im Hyperraum
$C_{\alpha j \gamma l}$	verallgemeinerter Hookescher Tensor
$\eta_{\alpha j}$	verallgemeinerter Greenscher Verzerrungstensor
$\sigma_{\alpha j}$	verallgemeinerter Spannungstensor
$\pi_r(V)$	r -ter Homotopie-Gruppe eines topologischen Raums V
\mathbf{b}	Burgersvektor im physikalischen Raum
$\tilde{\mathbf{b}}$	Burgersvektor im Hyperraum
$\mathbf{b}^\parallel = \pi^\parallel \tilde{\mathbf{b}}$	phononische Komponente des Burgersvektors
$\mathbf{b}^\perp = \pi^\perp \tilde{\mathbf{b}}$	phasonische Komponente des Burgersvektors

Literaturverzeichnis

- [1] Audier, M., M. Duneau, M. de Boissieu, M. Boudard und A. Letoublon. Superlattice ordering of cubic symmetry in an icosahedral Al-Pd-Mn phase. *Phil. Mag. A*, **79**(2):255–270, 1999.
- [2] Audier, M., M. Durand-Charre und M. de Boissieu. AlPdMn phase diagram in the region of quasicrystalline phases. *Phil. Mag. A*, **68**(5):607–618, 1993.
- [3] Baake, M. A Guide to Mathematical Quasicrystals. In J.-B. Suck, M. Schreiber und P. Hussler (Herausgeber), *Quasicrystals: An Introduction to Structure, Physical Properties, and Applications*, Band 55 von *Materials Science*, Seiten 17–48. Springer-Verlag, 2002.
- [4] Baake, M., R. Klitzing und M. Schlottmann. Fractally shaped acceptance domains of quasiperiodic square-triangle tilings with dodecagonal symmetry. *Physica A*, **191**:554–558, 1992.
- [5] Bachteler, J. *Kontinuumstheorie der Versetzungen in ikosaedrischen Quasikristallen*. Doktorarbeit, Universität Stuttgart, 1999.
- [6] Bak, P. Icosahedral crystals from cuts in six-dimensional space. *Scr. Metall.*, **20**:1199, 1986.
- [7] Beeli, C., H. U. Nissen und J. Robadey. Stable Al-Mn-Pd quasicrystals. *Phil. Mag. Lett.*, **63**:87–95, 1991.
- [8] Bendersky, L. Quasicrystal with One-Dimensional Translational Symmetry and a Tenfold Rotation Axis. *Phys. Rev. Lett.*, **55**(14):1461–1463, 1985.
- [9] Beraha, L. *Modélisation des approximants de la phase icosaédrique Al-Pd-Mn et étude de leurs transformation structurales*. Doktorarbeit, École Polytechnique, Paris, 1997.

- [10] Beraha, L., M. Duneau, H. Klein und M. Audier. Correlated phason jumps involved in plastic deformation of Al-Pd-Mn approximant phases. *Phil. Mag. A*, **76**(3):587–613, 1997.
- [11] Beraha, L., M. Duneau, H. Klein und M. Audier. Phason defects in Al-Pd-Mn approximant phases: another example. *Phil. Mag. A*, **78**(2):345–372, 1998.
- [12] Bohsung, J. *Defekte in Quasikristallen*. Diplomarbeit, Universität Stuttgart, 1987.
- [13] Bollmann, W. *Crystal defects and crystalline interfaces*. Springer-Verlag, 1970.
- [14] Boudard, M. und et.al. Neutron and x-ray single-crystal study of the AlPdMn icosahedral phase. *J. Phys. Cond. Mat.*, **4**:10149–10168, 1992.
- [15] Boudard, M., H. Klein, M. de Boissieu, M. Audier und H. Vincent. Structure of quasicrystalline approximant phase in the Al-Pd-Mn system. *Phil. Mag. A*, **74**(4):939–956, 1996.
- [16] Bresson, L. Mechanical Properties of Quasicrystals. In F. Hippert und D. Gratias (Herausgeber), *Lectures on Quasicrystals*, Seiten 549–559. Les Editions de Physique, Les Ulis, 1994.
- [17] Cahn, J. W., D. Shechtman und D. Gratias. Indexing of icosahedral quasiperiodic crystals. *J. Mater. Res.*, **1**(1):13–26, 1986.
- [18] Chattopadhyay, K., K. Lele, S. Thangaraj und S. Ranganathan. Vacancy ordered phases and one-dimensional quasiperiodicity. *Acta Metall.*, **35**:727–733, 1987.
- [19] Conway, J. H. und N. J. A. Sloane. *Sphere Packings, lattices and groups*. Springer-Verlag, 1999.
- [20] Curtis, C. W. und I. Reiner. *Representation Theory of Finite Groups and Associative Algebras*, Band 11 von *Pure and Appl. Math.*. Interscience, New York, 2. Auflage, 1962.
- [21] Dade, E. C. Deux groupes finis ayant la même algèbre de group sur tout corps. *Math. Z.*, **119**:345–348, 1971.
- [22] de Bruijn, N. G. Algebraic theory of Penrose’s non-periodic tilings of the plane. *Nederl. Akad. Wetensch. Proceedings of Ser. A*, **43**:39–66, 1981.
- [23] Dilger, C. *Versetzungsbewegungen in dreidimensionalen Quasikristallen*. Diplomarbeit, Universität Stuttgart, 1995.

- [24] Ding, D., R. Wang, W. Yang, C. Hu und Y. Qin. Elasticity theory of straight dislocations in quasicrystals. *Phil. Mag. Lett.*, **72**(5):353–359, 1995.
- [25] Dokuchaev, M. A., S. O. Juriaans und C. P. Milies. Integral Group Rings of Frobenius Groups and the Conjecture of H.J. Zassenhaus. *Commun. Alg.*, **25**(7):2311–2325, 1997.
- [26] Duneau, M. N-dimensional crystallography and the icosahedral group. In F. Hippert und D. Gratias (Herausgeber), *Lectures on quasicrystals*, Seiten 153–186. Les Editions de Physique, Les Ulis, 1994.
- [27] Duneau, M. und M. Audier. Approximant phases of quasicrystals. In F. Hippert und D. Gratias (Herausgeber), *Lectures on quasicrystals*, Seiten 283–333. Les Editions de Physique, Les Ulis, 1994.
- [28] Duneau, M. und A. Katz. Quasiperiodic patterns. *Phys. Rev. Lett.*, **54**:2688–2691, 1985.
- [29] Feuerbacher, M. Picture of a complex metadislocation arrangement in ξ' -Al-Pd-Mn. <http://iffwww.iff.kfa-juelich.de/jcem/metals/research.htm>.
- [30] Feuerbacher, M. und D. Caillard. [010] dislocations in complex metallic alloy ξ' -Al-Pd-Mn. *to appear in Acta Materialia*, 2004.
- [31] Feuerbacher, M., H. Klein, M. Bartsch, U. Messerschmidt und K. Urban. A comparative study of the plastic behaviour of icosahedral and ξ' -Al-Pd-Mn. *Mater. Sci. Eng. A*, **294-296**:736–741, 2000.
- [32] Feuerbacher, M., F. Momprou und D. Caillard. The Dynamics of Phason Diffusion in Icosahedral Al-Pd-Mn Quasicrystal. unveröffentlicht.
- [33] Frank, F. C. und J. S. Kaspar. Complex alloy structures regarded as sphere packings. *Acta Crystallogr.*, **11**:184, 1958.
- [34] Friedrich, W., W. P. Knipping und M. Laue. Interferenzerscheinungen bei Röntgenstrahlen. *Sitzungsberichte Bayrische Akademie der Wissenschaften*, **303 322**, 1912.
- [35] Gödecke, T. und R. Lück. The Aluminium-Palladium-Manganese System in the Range from 60 to 100 at. *Z. Metallk.*, **86**(2):109–121, 1995.
- [36] Grushko, B., M. Yurechko und N. Tamura. A contribution to the Al-Pd-Mn phase diagram. *J. All. Comp.*, **290**:164–171, 1999.
- [37] Haasen, P. *Physikalische Metallkunde*. Springer Verlag, 1994.

- [38] Hertweck, M. *Eine Lösung des Isomorphieproblems für ganzzahlige Gruppenringe von endlichen Gruppen*. Doktorarbeit, Universität Stuttgart, 1999.
- [39] Hiller, H. The Crystallographic Restriction in Higher Dimensions. *Acta Crystallographica*, **A41**:541–544, 1985.
- [40] Hiraga, K., M. Kaneko, Y. Matsuo und S. Hashimoto. The structure of Al_3Mn : close relationship to decagonal quasicrystals. *Phil. Mag. B*, **67**(3):193–205, 1993.
- [41] Hiraga, K. und W. Sun. The atomic arrangement of an Al-Pd-Mn decagonal quasicrystal studied by high-resolution electron microscopy. *Phil. Mag. Lett.*, **67**(2):117–123, 1993.
- [42] Hirth, J. P. und J. Lothe. *Theory of dislocations*. J. Wiley and Sons, New York, 1982.
- [43] Humphreys, J. E. *Reflection groups and Coxeter groups*. Cambridge University Press, 1994.
- [44] Ishimasa, T. und M. Mori. New superlattice ordering in Al-Pd-Mn and Al-Pd-Mn-Si icosahedral quasicrystals. *Phil. Mag. B*, **66**(4):513–532, 1992.
- [45] Jänich, K. *Topologie*. Springer-Verlag, 1994.
- [46] Janot, C. *Quasicrystals: A Primer*. Clarendon Press, Oxford, 1994.
- [47] Janssen, T. *Crystallographic Groups*. North-Holland/American Elsevier, 1973.
- [48] Janssen, T. From Quasiperiodic to More Complex Systems. In F. Axel (Herausgeber), *Beyond Quasicrystals*, Seiten 75–140. Les Editions De Physique, 1995.
- [49] Katz, A. und D. Gratias. Introduction to quasicrystals. In E. Hippert und D. Gratias (Herausgeber), *Lectures on Quasicrystals*, Seiten 187–264. World Scientific, 1994.
- [50] Kimmerle, W. On automorphisms of $\mathbb{Z}G$ and the Zassenhaus conjectures. *Canadian Math. Society*, **18**:383–397, 1996.
- [51] Kittel, C. *Einführung in die Festkörperphysik*. R. Oldenbourg Verlag, 11. Auflage, 1996.
- [52] Klein, H. *Mechanische Eigenschaften von ikosaedrischen Al-Pd-Mn Quasikristallen*. Doktorarbeit, RWTH Aachen, 1997.
- [53] Klein, H., M. Audier, M. Boudard und M. de Boissieu. Phason defects in Al-Pd-Mn approximant phases. *Phil. Mag. A*, **73**(2):309–331, 1996.

- [54] Klein, H., M. Boudard, M. Audier, M. de Boissieu, H. Vincent, L. Beraha und M. Duaneau. The T-Al₃(Mn, Pd) quasicrystalline approximant: chemical order and phason defects. *Phil. Mag. Lett.*, **75**(4):197–208, 1997.
- [55] Klein, H., M. Durand-Charre und M. Audier. Liquid-solid equilibria in the quasicrystalline regions of the Al-Pd-Mn phase diagram. *J. All. Comp.*, **296**:128–137, 2000.
- [56] Klein, H. und M. Feuerbacher. Structure of dislocations and stacking faults in the complex intermetallic ξ' -(Al-Pd-Mn) phase. *Phil. Mag.*, **83**(36):4103–4122, 2003.
- [57] Klein, H., M. Feuerbacher, P. Schall und K. Urban. Novel Type of Dislocation in an Al-Pd-Mn Quasicrystal Approximant. *Phys. Rev. Lett.*, **82**(17):3468–3471, 1999.
- [58] Klemm, M. *Symmetrien von Ornamenten und Kristallen*. Springer-Verlag, 1982.
- [59] Klingler, L. Construction of a counterexample to a conjecture of Zassenhaus. *Commun. Alg.*, **19**:2303–2330, 1993.
- [60] Koschella, U. *Zur Phason-Phonon-Kopplung in dekalonalen Quasikristallen*. Diplomarbeit, Universität Stuttgart, 2001.
- [61] Levine, D. und P. J. Steinhardt. Quasicrystals. I. Definition and Structure. *Phys. Rev. B*, **34**:596–616, July 1986.
- [62] Li, H. L. und K. H. Kuo. Some new crystalline approximants of Al-Pd-Mn quasicrystals. *Phil. Mag. Lett.*, **70**(1):55–62, 1994.
- [63] Lifshitz, R. The definition of quasicrystals. Konferenzvortrag Aperiodic 2000.
- [64] Ludwig, W. und C. Falter. *Symmetries in Physics*. Springer-Verlag, 1988.
- [65] Luthar, I. S. und I. B. S. Passi. Zassenhaus conjecture for A_5 . *Indian Acad. Science (Math. Science)*, **99**(1):1–5, 1989.
- [66] Ma, L., R. Wang und K. H. Kuo. Decagonal quasicrystals and related crystalline phases in rapidly solidified Al-Ir, Al-Pd and Al-Pt. *Scr. Metall.*, **22**:1791–1796, 1988.
- [67] Matsuo, Y. The structure of Al₃Pd: close relationship to decagonal quasicrystals. *Phil. Mag. Lett.*, **70**(3):155–161, 1994.
- [68] Momprou, F., L. Bresson, P. Cordier und D. Caillard. Dislocation climb and low-temperature plasticity of an Al-Pd-Mn quasicrystal. *Phil. Mag.*, **83**(27):3133–3157, 2003.

- [69] Pauling, L. The crystal structure of magnesium stannide. *J. Am. Chem. Soc.*, **45**:2777–2780, 1923.
- [70] Pauling, L. ? *American Scientist*, **43**:285, 1955.
- [71] Penrose, R. The Rôle of Aesthetics in Pure and Applied Mathematical Research. *Bull. Inst. Math. and its Appl.*, **10**:266–271, 1974.
- [72] Rosenfeld, R., M. Feuerbacher, B. Baufeld, M. Bartsch, M. Wollgarten, G. Hanke, M. Beyss, U. Messerschmidt und K. Urban. Study of plastically deformed icosahedral Al–Pd–Mn single quasicrystals by transmission electron microscopy. *Phil. Mag. Lett.*, **72**(6):375–384, 1995.
- [73] Rüdinger, A. *Der phasonische Freiheitsgrad in ikosaedrischen Quasikristallen: Auswirkungen auf Selbstdiffusion, Ebenenstruktur und Versetzungen*. Diplomarbeit, Universität Stuttgart, 1994.
- [74] Salthouse, J. A. und M. J. Ware. *Point group character tables and related data*. Cambridge University Press, 1972.
- [75] Sehgal, S. K. *Units in integral group rings*. Harlow, Longman, 1993.
- [76] Senechal, M. Introduction to lattice geometry. In M. Waldschmidt, P. Moussa, J.-M. Luck und C. Itzykson (Herausgeber), *From Number Theory to Physics*, Seite 476. Springer-Verlag, Berlin, 1992.
- [77] Senechal, M. *Quasicrystals and Geometry*. Cambridge University Press, 1995.
- [78] Shechtman, D., I. Blech, D. Gratias und J. W. Cahn. Metallic Phase with Long-Range Orientational Order and No Translational Symmetry. *Phys. Rev. Lett.*, **53**(20):1951–1953, 1984.
- [79] Shindo, D. und K. Hiraga. *High-Resolution Electron Microscopy for Materials Science*. Springer-Verlag, 1998.
- [80] Shramchenko, N. und F. Dénoyer. The Al-Pd-Mn quasicrystalline approximant ξ' -phase revisited. *Eur. Phys. J. B*, **29**:51–59, 2002.
- [81] Socolar, J. E. S., T. C. Lubensky und P. J. Steinhardt. Phonons, phasons, and dislocations in quasicrystals. *Phys. Rev. B*, **34**(5):3345–3360, 1986.
- [82] Sternberg, S. *Group Theory in Physics*. Cambridge University Press, 1994.
- [83] Stöcker, R. und H. Zieschang. *Algebraische Topologie*. B. G. Teubner Stuttgart, 1994.

- [84] Sun, W. und K. Hiraga. Non-equilibrium and equilibrium Al-Pd-Mn decagonal quasicrystals and their related crystals: structural characteristics and relationship revealed by high-resolution electron microscopy. *Phil. Mag. Lett.*, **70**(5):311–317, 1994.
- [85] Sun, W. und K. Hiraga. High-resolution electron microscopy study of the early stage of formation of a Al-Pd-Mn decagonal quasicrystal from its crystalline approximants. *Phil. Mag. Lett.*, **73**(6):395–404, 1996.
- [86] Sun, W. und K. Hiraga. High-resolution transmission electron microscopy of the Al-Pd-Mn decagonal quasicrystal with 1.6 nm periodicity and its crystalline approximants. *Phil. Mag. A*, **73**(4):951–971, 1996.
- [87] Sun, W. und K. Hiraga. Al-Pd-Mn decagonal quasicrystals formed with different tiling structures. *Phil. Mag. A*, **76**(3):509–526, 1997.
- [88] Trebin, H. R. Gruppentheoretische Methoden in der Physik, Vorlesungsskript, 2003.
- [89] Tsai, A. P., A. Inoue, Y. Yokoyama und T. Masumoto. Stable icosahedral AlPdMn and AlPdRe alloys. *Mat. Transactions JIM*, **31**:98–103, 1990.
- [90] Tsai, A. P., Y. Yokoyama, A. Inoue und T. Masumoto. Formation, microstructure, chemical long-range order, and stability of quasicrystals in AlPdMn alloys. *J. Mater. Res.*, **6**:2646–2652, 1991.
- [91] Urban, K., M. Feuerbacher und H. Klein. Plasticity of quasicrystalline alloys and their crystalline intermetallic approximants. *Radiation Effects and Defects in Solids*, **157**:137–144, 2002.
- [92] Urban, K., M. Feuerbacher und M. Wollgarten. Mechanical Properties of Quasicrystals. In J.-B. Suck, M. Schreiber und P. Häussler (Herausgeber), *Quasicrystals: An Introduction to Structure, Physical Properties, and Applications*, Band 55 von *Materials Science*, Seiten 305–318. Springer-Verlag, 2002.
- [93] Wang, R., M. Feuerbacher, M. Wollgarten und K. Urban. Dislocation reactions in icosahedral Al-Pd-Mn quasicrystals. *Phil. Mag. A*, **77**(2):523–540, 1998.
- [94] Wollgarten, M., V. Franz, M. Feuerbacher und K. Urban. Defects. In J.-B. Suck, M. Schreiber und P. Häussler (Herausgeber), *Quasicrystals: An Introduction to Structure, Physical Properties and Applications*, Band 55 von *Materials Science*, Seiten 26–279. Springer-Verlag, 2002.
- [95] Wollgarten, M., C. Metzmacher, R. Rosenfeld und M. Feuerbacher. On the energy ratio between the phonon and the phason part of dislocations in icosahedral Al-Pd-Mn quasicrystals. *Phil. Mag. A*, **76**(2):455–470, 1997.

- [96] Wollgarten, M. und H. Saka. Microstructural investigation of the brittle-to-ductile transition in Al–Pd–Mn quasicrystals. *Phil. Mag. A*, **79**(9):2195–2208, 1999.
- [97] Yu, D. P., G. Ren und Z. Zhang. High-Resolution Electron Microscopy Analysis of Structural Defects in a (2/1, 5/3)-Type Approximant of a Decagonal Quasicrystal of an Al-Pd-Mn Alloy. *Metallurgical and Materials Transactions A*, **27A**:2911–2915, 1996.

Danksagung

Herrn Prof. Trebin danke ich für die freundliche Aufnahme an seinem Institut und die interessante Aufgabenstellung. Ich hatte die Freiheit, eigene Ideen zu entwickeln und selbständig zu arbeiten. Trotzdem konnte ich jederzeit Hilfestellungen und richtungsweisende Anleitungen erhalten.

Bei Herrn Prof. Kimmerle bedanke ich mich für die Übernahme des Mitberichts und sein Interesse an meiner Arbeit im Grenzgebiet zwischen Mathematik und Physik. Durch zahlreiche Denkanstöße konnte ich einen Einblick in das spannende Gebiet der ganzzahligen Darstellungstheorie gewinnen.

Herzlich bedanken möchte ich mich bei meinem Zimmerkollegen Frohmut Rösch. Seine Diskussionsbereitschaft hat mir den Einstieg in das Gebiet der Quasikristalle erleichtert. Dr. Franz Gähler und Peter Brommer haben die Mühe auf sich genommen, Teile des Manuskripts Korrektur zu lesen, wofür ich mich bedanken möchte. Die Arbeit wurde nicht zuletzt auch durch das gute Arbeitsklima am Institut für Theoretische und Angewandte Physik gefördert. Darum sei an dieser Stelle allen Mitarbeitern des Instituts gedankt.

Der Studienstiftung des deutschen Volkes bin ich für die materielle Förderung zu Dank verpflichtet.

Meinen Eltern möchte ich für die vielfältige Unterstützung danken, die mir ein sorgenfreies Studium ermöglichte.

Meiner Freundin Cosima danke ich für ihre Geduld und Liebe.