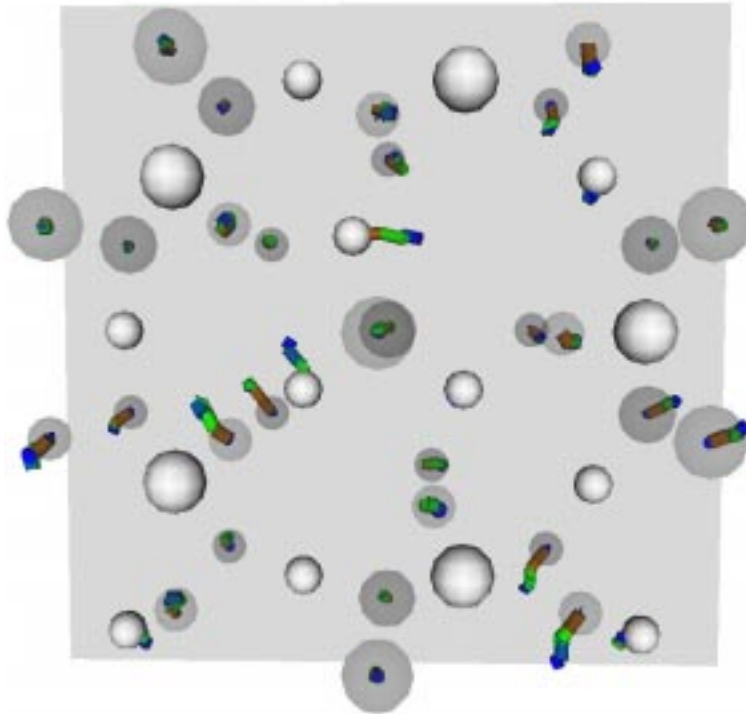


# Die atomare Dynamik dekadagonaler Quasikristalle

Diplomarbeit  
von  
Dietmar Bunz



Hauptberichter: Prof. Dr. H.-R. Trebin

Mitberichter: Dr. habil. R. Friedrich

Institut für Theoretische und Angewandte Physik  
Universität Stuttgart

April 1999



# Inhaltsverzeichnis

<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>1 Quasikristalle</b>	<b>3</b>
1.1 Klassifikation von Festkörpern . . . . .	4
1.2 Der Begriff des Quasikristalls . . . . .	5
1.3 Verallgemeinerte Kristallographie . . . . .	7
1.4 Modellierung quasiperiodischer Strukturen . . . . .	7
1.4.1 Streifenprojektionsformalismus . . . . .	8
1.4.2 Formalismus der atomaren Hyperflächen . . . . .	8
1.5 Der Begriff des Tilings . . . . .	9
1.5.1 Penrose- und Dreiecksmuster . . . . .	10
1.5.2 Random Tilings . . . . .	10
1.6 Phasonen . . . . .	12
1.6.1 Flips im Dreiecksmuster . . . . .	13
1.6.2 Experimentelle Hinweise auf Phasonen . . . . .	15
<b>2 Strukturmodelle für dekagonales AlCuCo</b>	<b>17</b>
2.1 Die Dekorationen von Burkov . . . . .	18
2.2 Das Burkov-Zeger-Modell . . . . .	20
2.2.1 Strichmuster und Dekoration . . . . .	22
2.2.2 Atomare Struktur . . . . .	22
2.2.3 Phasonische Flips . . . . .	25
<b>3 Molekulardynamik</b>	<b>27</b>
3.1 Grundlagen . . . . .	27
3.1.1 Zwischen Experiment und Theorie . . . . .	28
3.1.2 Qualität der Simulation . . . . .	28
3.2 Molekulardynamische Methoden . . . . .	30
3.2.1 Einheiten . . . . .	30
3.2.2 Algorithmen . . . . .	31
3.2.3 Periodische Randbedingungen . . . . .	34
3.2.4 Optimierungsmethoden . . . . .	34
3.2.5 Integratoren . . . . .	36

3.2.6	Anfangsproblematik . . . . .	36
3.3	Visualisierung . . . . .	38
<b>4</b>	<b>Simulationen</b>	<b>41</b>
4.1	Der Quasikristall im Computer . . . . .	41
4.1.1	IMD . . . . .	43
4.1.2	Verwendete Approximanten . . . . .	43
4.1.3	Potential . . . . .	44
4.2	Detektion von phasonischen Flips . . . . .	44
4.2.1	Die atomaren Positionen bei einem Flip . . . . .	44
4.2.2	Implementierung in IMD . . . . .	46
4.2.3	Toleranz . . . . .	48
4.2.4	Test des Flip-Detektors . . . . .	50
4.3	Durchgeführte Simulationen . . . . .	52
4.3.1	Anfangsproblematik . . . . .	52
4.3.2	Nachträgliche Filterung . . . . .	52
<b>5</b>	<b>Ergebnisse</b>	<b>55</b>
5.1	Auswertung des Flip-Detektors . . . . .	55
5.2	Bewegungshistogramme . . . . .	57
5.3	Atomare Dynamik . . . . .	58
5.3.1	Bewegungen im Burkov-Zeger-Modell . . . . .	61
5.3.2	Bewegungen im Burkov-I-Modell . . . . .	65
5.3.3	Vergleich der atomaren Bewegungen der beiden Modelle . . . . .	66
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>69</b>
<b>A</b>	<b>Radiale Dichtefunktion</b>	<b>71</b>
<b>B</b>	<b>Zur Visualisierung</b>	<b>73</b>
B.1	Visualisierung mit VRML . . . . .	73
B.2	Potentialvisualisierung eines idealen Flips . . . . .	74
<b>C</b>	<b>Zusammenfassung der Simulationsläufe</b>	<b>77</b>
C.1	Verwendete Aproximanten . . . . .	78
C.2	Durchgeführte Simulationen . . . . .	81
C.3	Beugungsbilder und Paarverteilungsfunktionen . . . . .	82
C.4	Flip-Statistiken . . . . .	84
C.4.1	Testsimulationen . . . . .	84
C.4.2	Produktionsläufe . . . . .	86
C.4.3	Diagramme zum Flipverhalten . . . . .	88
C.5	Vergleichssimulationen . . . . .	94
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>95</b>

# Abbildungsverzeichnis

1.1	Beugungsbild von i-AlMn . . . . .	3
1.2	Kristall mit NaCl-Struktur (schematisch) . . . . .	6
1.3	Amorpher Festkörper (schematisch) . . . . .	6
1.4	Quasikristall (schematisch) . . . . .	6
1.5	Der Steifenprojektionsformalismus in $\mathbb{Z}^2$ . . . . .	8
1.6	Der Formalismus der atomaren Hyperflächen . . . . .	9
1.7	Penrosemuster . . . . .	10
1.8	Ausschnitt aus dem Tübinger Dreiecksmuster . . . . .	11
1.9	Elementare Flips in verschiedenen Dimensionen . . . . .	12
1.10	Änderung des Schnittverlaufs durch Phasonen . . . . .	13
1.11	Elementare Flips im Dreiecksmuster . . . . .	14
1.12	Randomisiertes Dreiecksmuster . . . . .	14
1.13	Arrheniusdiagramm des Diffusionskoeffizienten . . . . .	15
1.14	Assisted Phason Hopping (schematisch) . . . . .	16
2.1	Ternäres Phasendiagramm von AlCuCo . . . . .	17
2.2	Dekaprismatische Nadeln aus AlCuCo . . . . .	18
2.3	Dekoration der Dreiecke in den Burkov-Modellen . . . . .	19
2.4	Die Burkov-Modelle für AlCuCo . . . . .	19
2.5	Atomare Hyperflächen nach Zeger . . . . .	21
2.6	Tiling einer Doppelschicht nach Zeger . . . . .	21
2.7	Atomabstände im Burkov-Zeger-Modell . . . . .	22
2.8	Vergleich zwischen Dreiecksmuster und Zwei-Niveau-Tiling . . . . .	23
2.9	Der kleinste Atomabstand im Burkov-Zeger-Modell . . . . .	23
2.10	Umgebung der Zehnerringe aus TM-Atomen . . . . .	24
2.11	Zehnerring aus sechs TM- und vier Al-Atomen . . . . .	24
2.12	Atomare Bewegungen bei Trapez- und Simpletonflip . . . . .	25
2.13	Änderung des Tilings bei einem Flip . . . . .	26
3.1	Die Rolle der Computersimulationen . . . . .	29
3.2	Der Leap-Frog-Algorithmus . . . . .	33
3.3	Der Velocity-Verlet-Algorithmus . . . . .	33
3.4	Anteil der Oberflächenatome eines Probenwürfels . . . . .	34
3.5	Periodische Randbedingungen . . . . .	35

3.6	Das Linked-Cell-Verfahren . . . . .	35
3.7	Visualisierung der einzelnen Teilchenbewegungen . . . . .	39
4.1	Erzeugung quasikristalliner Approximanten . . . . .	42
4.2	Der kleine Approximant <b>approx1</b> . . . . .	43
4.3	Das zur Simulation verwendete Paarpotential . . . . .	45
4.4	Das für Vergleichssimulationen verwendete Lennard-Jones-Potential . . . . .	45
4.5	Die X- und Y-Positionen im Zwei-Niveau-Tiling . . . . .	46
4.6	Der Flip-Detektor . . . . .	47
4.7	Funktionsschema des Flip-Detektors . . . . .	47
4.8	Abstand und Tiefe der Potentialminima . . . . .	49
4.9	Toleranzbereich des Flipdetektors . . . . .	49
4.10	Eine Ebene des kleinen Testapproximanten <b>aprox1</b> . . . . .	50
4.11	Atombewegungen in einer Testsimulation . . . . .	51
5.1	Anzahl der vom Flip-Detektor erfaßten Ereignisse . . . . .	56
5.2	Vergleich der Ergebnisse des Flip-Detektors mit allen Atombewegungen . . . . .	57
5.3	Dreidimensionales Bewegungshistogramm . . . . .	58
5.4	Zentraler Ausschnitt des Approximanten <b>aprox2</b> . . . . .	59
5.5	Sterische Verhältnisse im Quasikristall . . . . .	60
5.6	Kleiner Ausschnitt über drei Doppelschichten . . . . .	61
5.7	Al-Atome wandern auf zentrale Positionen in Zehnerringen . . . . .	62
5.8	Zehnerring mit Al- und TM-Atomen . . . . .	63
5.9	Bewegungen benachbarter Atome . . . . .	64
5.10	Vergleich der Atombewegungen: Burkov-Zeger-Modell . . . . .	66
5.11	Vergleich der Atombewegungen: Burkov-I-Modell . . . . .	67
B.1	Beispiel der Objektdarstellung mit VRML . . . . .	73
B.2	Ablauf eines idealen phasonischen Flips . . . . .	75
C.1	Symbolbezeichnung zu den Abbildungen der Approximanten . . . . .	78
C.2	Testapproximant <b>aprox1</b> mit 680 Atomen . . . . .	78
C.3	Approximant <b>aprox2</b> mit 13980 Atomen . . . . .	79
C.4	Burkov-I-Approximant <b>burkovI</b> mit 7540 Atomen . . . . .	80
C.5	Beugungsbild und Paarverteilungsfunktion des Approximanten <b>aprox2</b> . . . . .	82
C.6	Beugungsbild und Paarverteilungsfunktion am Ende von <b>AND001</b> . . . . .	82
C.7	Beugungsbild und Paarverteilungsfunktion am Ende von <b>AND010</b> . . . . .	83
C.8	Beugungsbild und Paarverteilungsfunktion am Ende von <b>AND050</b> . . . . .	83
C.9	Atombewegung in den Testsimulationen . . . . .	85
C.10	Zurückgelegter Weg je Flip in den Testsimulationen . . . . .	85
C.11	Verlauf von Temperatur und Energie bei $T=0,01$ . . . . .	88
C.12	Verlauf von Temperatur und Energie bei $T=0,10$ . . . . .	89
C.13	Anzahl der Flips (nach Flipytyp) . . . . .	90
C.14	Anzahl der Flips je Atom . . . . .	90

C.15 Zurückgelegter Weg je Flip . . . . .	91
C.16 Temperaturabhängigkeit des zurückgelegten Wegs je Flips . . . . .	91
C.17 Temperaturabhängigkeit der Dauer eines Flips . . . . .	92
C.18 Temperaturabhängigkeit der Verweilzeiten zwischen Mehrfachflips . . . . .	92
C.19 AND: Gesamte Atombewegung von 150-500 MD-Zeiten . . . . .	93
C.20 NVE: Gesamte Atombewegung von 650-2500 MD-Zeiten . . . . .	93
C.21 Atombewegung unter verschiedenen Konfigurationen und Potentialen . . . . .	94





# Tabellenverzeichnis

1.1	Erlaubte zyklische Symmetrie in Abhängigkeit der Raumdimension . . . . .	7
1.2	Häufigkeiten der Vertexkonfigurationen im Tübinger Dreiecksmuster . . . . .	11
3.1	Kantenlänge der simulierbaren Probenwürfel . . . . .	28
3.2	Zusammenhang der dimensionslosen MD-Einheiten mit realen Größen . . . . .	30
3.3	Die Basiseinheiten der durchgeführten Simulationen . . . . .	31
3.4	Beschreibung der Funktionsweise einiger MD-Integratoren . . . . .	37
4.1	Die Größe quasikristalliner Approximanten . . . . .	41
4.2	Anteil der flipfähigen Atome auf Y-Positionen . . . . .	46
4.3	Abstand und Tiefe der Potentialminima . . . . .	48
5.1	Ergebnisse des Flip-Detektors . . . . .	56
C.1	Die Parameter der wichtigsten Simulationen . . . . .	81
C.2	Flip-Statistik zu <b>Test1</b> . . . . .	84
C.3	Flip-Statistik zu <b>Test2</b> . . . . .	84
C.4	Flip-Statistiken der Anderson-Simulationen über 500 MD-Zeiten . . . . .	86
C.5	Flip-Statistik der Anderson-Simulation über 2500 MD-Zeiten . . . . .	86
C.6	Flip-Statistik der Anderson-Simulation mit Lennard-Jones-Potential . . . . .	87
C.7	Flip-Statistik der Anderson-Simulation des <b>burkov1</b> -Approximanten . . . . .	87
C.8	Flip-Statistiken der mikrokanonischen Simulationen . . . . .	87



# Einleitung

*Unverhofft kommt oft*

In der Festkörperphysik wurde 1982 eine bis dahin nicht für möglich gehaltene Entdeckung gemacht. SHECHTMAN *et al.* erhielten bei der Untersuchung von schnell abgekühlten AlMn-Legierungen Proben, deren Beugungsbilder ikosaedrische Symmetrie aufwiesen [25]. Nach eingehenden Untersuchungen zeigte sich, daß die erhaltenen Legierungen eine Festkörperphase darstellten, für die später LEVINE und STEINHARDT den Begriff *Quasikristall* prägten [18]. Nachdem SHECHTMAN *et al.* ihre Ergebnisse im Jahre 1984 veröffentlicht hatten, entdeckte BENDERSKY *et al.* kurz darauf die T-Phasen [2]. Bei diesen Quasikristallen sind zweidimensionale quasiperiodische atomare Schichten periodisch entlang einer dazu senkrechten Achse gestapelt.

Aufgrund der quasiperiodischen Atomanordnung gibt es in allen Quasikristallen neue atomare Bewegungsmoden: Die *Phasonen*, korrelierte Bewegungen benachbarter Atome.

Entsprechend den geometrischen Modellen für die Beschreibung von Quasikristallen sollten die Atome auf ganz charakteristische Weise von diesen *phasonischen* Bewegungsmöglichkeiten Gebrauch machen.

In der vorliegenden Arbeit geht es um die Untersuchung der atomaren Dynamik in der dekagonalen quasikristallinen T-Phase d-Al<sub>62</sub>Cu<sub>19</sub>Co<sub>19</sub> mit Hilfe molekulardynamischer Methoden.

Das Ziel war es, korrelierte Atombewegungen in AlCuCo aufzufinden.<sup>1</sup> Der Weg führte über Computersimulationen an verschiedenen Strukturmodellen. Das besondere Augenmerk lag dabei auf der Untersuchung von Gemeinsamkeiten und Unterschieden in der atomaren Bewegung der einzelnen Konfigurationen. Dies erlaubt eine Einordnung der lokalen atomaren Umgebungen hinsichtlich ihrer Stabilität gegenüber phasonischen Prozessen. Als Auswertungsmethoden waren Bewegungsstatistiken und Datenvisualisierung ständige Begleiter. Durch Kombination von statistischen Daten aller Atome mit der Darstellung von einzelnen Details auf atomarer Ebene lassen sich die beobachteten Bewegungsprozesse analysieren. Im Ergebnis lassen sich die atomaren Prozesse verstehen und Stabilitätskriterien für quasikristalline Strukturmodelle aufzeigen.

---

<sup>1</sup>Unter AlCuCo ist in dieser Arbeit immer d-Al<sub>62</sub>Cu<sub>19</sub>Co<sub>19</sub> zu verstehen.

Der Bezug zur klassischen Festkörperphysik wird im ersten Kapitel hergestellt. Wichtige Begriffe und Methoden zur Generierung quasikristalliner Strukturen werden erläutert. Das zweite Kapitel illustriert die Anwendung der vorgestellten Methoden anhand verschiedener Strukturmodelle für AlCuCo. Molekulardynamik und Computersimulationen sind der Inhalt des dritten Kapitels. Der molekulardynamische Ansatz zur Simulation quasikristalliner Modelle sowie die entwickelten Mittel zur Detektion der Atombewegungen sind Gegenstand des vierten Kapitels. Erkenntnisse und Analysen aus den Simulationsrechnungen werden im fünften Kapitel vorgestellt.

# Kapitel 1

## Quasikristalle

Bis zur Entdeckung der Quasikristalle durch SHECHTMAN *et al.* 1982 und der Veröffentlichung ihrer Ergebnisse 1984 [25] hatte man geglaubt, daß fünfzählige Rotationssymmetrie bei translationsgeordneten Festkörpern unter keinen Umständen auftreten kann, da sich diese nicht mit der in der klassischen Kristallographie geforderten Translationsinvarianz vereinbaren läßt (Abb. 1.1).



Abbildung 1.1: Beugungsbild von  $i$ -AlMn (aus [25]).<sup>1</sup>

SHECHTMAN *et al.* konnten durch elektronenmikroskopische Untersuchungen sowie durch Elektronen- und Röntgenbeugungsexperimente ausschließen, daß es sich bei der erhaltenen Probe um einen periodischen Kristall mit großer Einheitszelle oder um mehrfach verzwilligte Kristalle handelte. In den darauffolgenden Jahren wurden weitere, meist ternäre Metallegierungen gefunden, deren Struktur 5-, 8-, 10- oder 12-zählige Symmetrieachsen

---

<sup>1</sup>Das  $i$  steht für *ikosaedrische Symmetrie*.

aufwiesen.<sup>2</sup> Die inzwischen als *Quasikristalle* bezeichneten Metallegierungen besitzen eine quasiperiodische und damit nicht translationsinvariante Atomanordnung.

## 1.1 Klassifikation von Festkörpern

Mit Hilfe von Beugungsexperimenten lassen sich Rückschlüsse auf die atomare Struktur der untersuchten Probe ziehen.

Ist  $\rho(\mathbf{r})$  eine skalare Dichte der untersuchten Probe, dann ist die Streuamplitude  $S(\mathbf{k})$  die Fouriertransformierte von  $\rho(\mathbf{r})$ :<sup>3</sup>

$$S(\mathbf{k}) = \int d^3r \rho(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (1.1)$$

Die gemessene Streuintensität  $I(\mathbf{k})$  ist das Betragsquadrat dieser Streuamplitude:

$$I(\mathbf{k}) = |S(\mathbf{k})|^2 = \int d^3r e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \int d^3r' \rho(\mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}' + \mathbf{r}). \quad (1.2)$$

Festkörper lassen sich somit entsprechend ihren Beugungsbildern klassifizieren. Im folgenden sollen drei verschiedene Festkörperstrukturen hinsichtlich Atomanordnung, Beugungsbild und radialer Dichtefunktion untersucht werden.<sup>4</sup>

*Kristalline Festkörper* sind *translationssymmetrisch*: Sie besitzen in allen drei Raumrichtungen eine regelmäßige, periodisch wiederkehrende Atomanordnung. Das Beugungsbild zeigt scharfe Braggreflexe entsprechend der Punktsymmetriegruppe<sup>5</sup> der zugrundeliegenden Atomanordnung (Abb. 1.2). Die Abstandsvektoren der *Gitterpunkte* sind ganzzahlige Linearkombinationen von  $d \leq 3$  Basisvektoren. Das von diesen Basisvektoren aufgespannte Parallelepipet bildet die Elementarzelle des Kristalls. Durch Translation dieser Elementarzelle um ganzzahlige Linearkombinationen der Basisvektoren wird der gesamte Kristall periodisch überdeckt.

*Amorphe Festkörper* zeigen keine Fernordnung. Eine gewisse Nahordnung in der unmittelbaren Nachbarschaft der einzelnen Atoms ist jedoch auch hier vorhanden. Oberhalb eines minimalen Abstandes  $r_{\min}$  kommen alle Abstände vor. Amorphe Festkörper sind oft *isotrop*, es gibt keine ausgezeichneten Raumrichtungen. Das Beugungsbild zeigt — abgesehen von wenigen zentralen Ringen durch eine vorhandene Nahordnung — keine Struktur (Abb. 1.3).

---

<sup>2</sup>Ein Überblick der ersten entdeckten Quasikristalle findet man in [28].

<sup>3</sup>Dabei bezeichnet  $\mathbf{r}$  einen Ortsvektor im physikalischen Raum und  $\mathbf{k}$  einen Vektor im reziproken Raum. Bei der *skalaren Dichte* kann es sich — je nach Art des Beugungsexperiments — zum Beispiel um Ladungs- oder Massendichte handeln.

<sup>4</sup>Die *radiale Dichtefunktion* gibt die Atomdichte in Abhängigkeit des Abstandes wider (siehe Anhang A).

<sup>5</sup>Die Gruppe aller möglichen Operationen (Drehungen, Spiegelungen, etc.) die eine gegebene Struktur invariant lassen.

*Quasikristalle* besitzen eine weitreichende *Translationsordnung*, jedoch keine *Translationssymmetrie*. Die nicht periodische Atomanordnung erlaubt auch kristallographisch verbotene Punktsymmetrien im Beugungsmuster (Abb. 1.4). Um die Atomanordnung in einem Quasikristall durch ganzzahlige Linearkombinationen zu beschreiben sind  $d > 3$  Basisvektoren notwendig.

Vergleicht man die Beugungsmuster von periodischen Kristallen mit denen von Quasikristallen, so gibt es — außer der Symmetrie — einen weiteren Unterschied: Im quasikristallinen Fall gibt es keinen minimalen Abstand zwischen zwei Beugungspunkten. Die ganzzahligen Linearkombinationen der Basisvektoren liegen dicht.<sup>6</sup>

## 1.2 Der Begriff des Quasikristalls

Das periodische Gitter in  $n$  Dimensionen ist dadurch gekennzeichnet, daß alle Punkte dieses Gitters sowohl im physikalischen als auch im reziproken Raum *ganzzahlige* Linearkombinationen von  $n$  Vektoren sind.<sup>7</sup> Für quasikristalline Strukturen in  $n$  Dimensionen sind  $d > n$  Vektoren im  $\mathbf{k}$ -Raum zur Indizierung der Beugungspunkte und im physikalischen Raum zur Konstruktion des Gitters erforderlich.

Vor dem experimentellen Hintergrund aus Abs. 1.1 ergeben sich die STEINHARDT und OSTLUND [27] entnommenen Definitionen:

- Die Streuamplitude einer *translationsgeordneten Struktur* läßt sich als Summe von  $\delta$ -Reflexen darstellen.
- Eine  $n$ -dimensionale *quasiperiodische Struktur* ist eine translationsgeordnete Struktur, deren minimale Basis  $\mathbf{B}$  im Fourierraum einen endlichen Rang größer  $n$  hat.<sup>8</sup>

$$\text{Rg}(\mathbf{B}) = d > n$$

- Ein *Quasikristall* ist eine quasiperiodische Struktur mit nichtkristallographischer Symmetrie.<sup>9</sup>

---

<sup>6</sup>Für den experimentellen Fall bedeutet dies, daß mit besserer Auflösung im Beugungsmuster immer neue Braggreflexe zwischen den schon vorhandenen auftauchen.

<sup>7</sup>Die Symmetrie des reziproken Gitters zeigt sich im Beugungsbild.

<sup>8</sup>Die *minimale Basis* ist die Menge der Vektoren die mindestens benötigt werden, um in einer Punkte-menge die Lage eines jeden Punktes als ganzzahlige Linearkombination dieser Vektoren darzustellen.

<sup>9</sup>Quasiperiodische Strukturen die dies nicht erfüllen, werden als inkommensurable Kristalle bezeichnet.

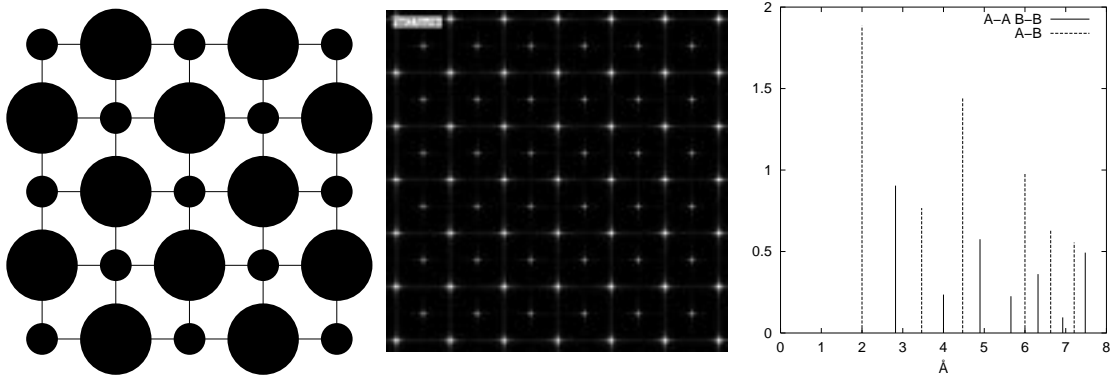


Abbildung 1.2: Kristall mit NaCl-Struktur und einer Gitterkonstanten von  $4 \text{ \AA}$  (schematisch). Periodische Atomanordnung, vierzähliges Beugungsbild und diskrete radiale Dichtefunktion. Bei periodischen Festkörpern kann das Beugungsmuster nur 2-, 3-, 4- und 6-zählige Symmetrie aufweisen (siehe Tab. 1.1).

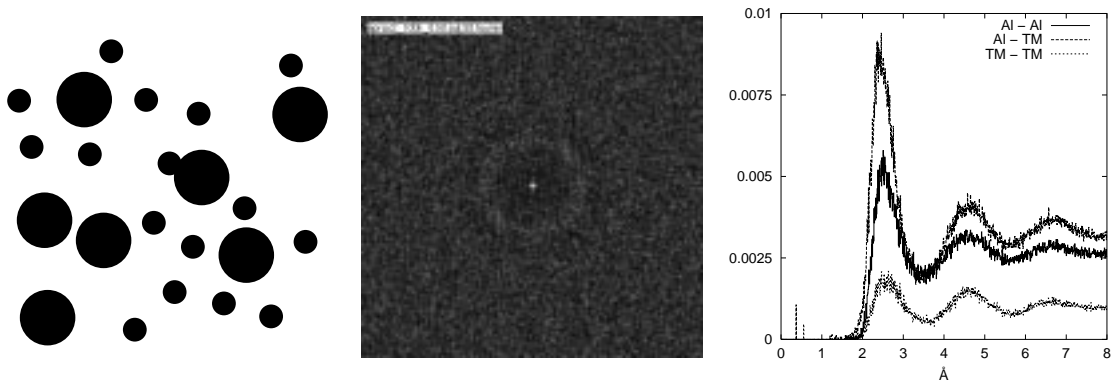


Abbildung 1.3: Amorpher Festkörper (schematisch). Ungeordnete Atomanordnung, diffuses Beugungsbild und kontinuierliche radiale Dichtefunktion.

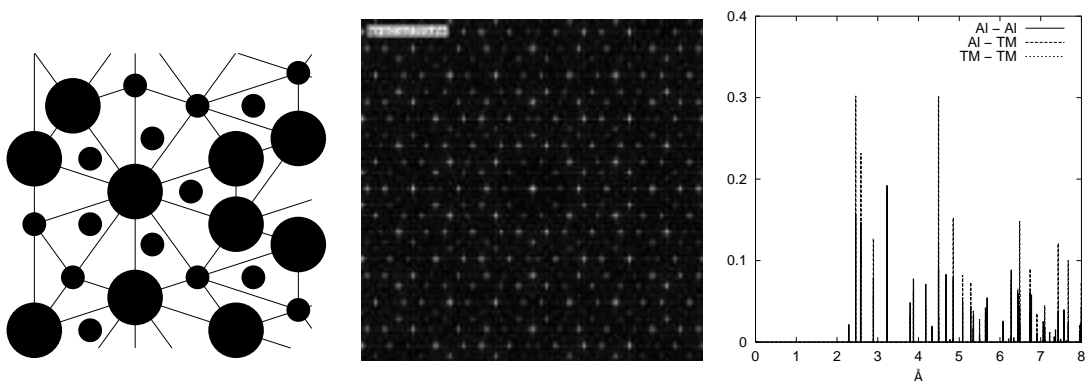


Abbildung 1.4: Quasikristall (schematisch). Geordnete Atomanordnung, zehnzähliges Beugungsbild und diskrete radiale Verteilungsfunktion. Im linken Bild haben die kurzen Striche eine Länge von  $2,89 \text{ \AA}$ , die langen Striche eine Länge von  $4,68 \text{ \AA}$ .



## 1.3 Verallgemeinerte Kristallographie

Für jede beliebige Punktsymmetrie gibt es eine Anzahl  $d$  von Vektoren, deren ganzzahlige Linearkombinationen ein Gitter mit dieser Punktsymmetrie beschreiben kann.

Die „klassischen“ kristallographisch erlaubten Punktsymmetrien lassen ein  $d$ -dimensionales Gitter im physikalischen Raum ( $n \leq 3$ ) invariant. Für den Drehwinkel  $\phi$  gilt in drei Dimensionen:  $\phi \in \{0, \pi, \frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{4}, \frac{2\pi}{6}\}$ , das Gitter kann 2-, 3-, 4- oder 6-zählige Symmetrieachsen besitzen. Höherdimensionale Gitter ( $n > 3$ ) können nichtkristallographische Punktsymmetrien zeigen.<sup>10</sup>

LEVITOV und RHYNER [19] zeigten 1988 mittels gruppentheoretischer Überlegungen, daß die Frage nach der kleinsten Raumdimension  $\phi$  zur Einbettung eines *translationssymmetrischen* Gitters mit  $m$ -zähliger Symmetrie durch die Eulerfunktion<sup>11</sup> beantwortet wird:

$$\phi(m) = |\{l | 1 \leq l < m, \text{ggT}(l, m) = 1\}| \quad (1.3)$$

In Tab. 1.1 sind die erlaubten Symmetrien bis zu einer Raumdimension von vier zusammengestellt. Da Hypergitter<sup>12</sup> die bei Quasikristallen vorkommenden Symmetrien zeigen, bietet sich die Einbettung in höherdimensionale Räume an: Quasiperiodische Strukturen lassen sich als Projektion einer Teilmenge eines periodischen Hypergitters in den physikalischen Raum beschreiben. Im nächsten Abschnitt sollen zwei Verfahren erläutert werden, die dies zur Erzeugung quasiperiodischer Strukturen anwenden.

Dim.	$\phi(m)$	$l$	Erlaubte zyklische Symmetrie
1	1	2	2
2	2	3, 4, 6	2, 3, 4, 6
3	3	–	2, 3, 4, 6
4	4	5, 8, 10, 12	2, 3, 4, 5, 6, 8, 10, 12

Tabelle 1.1: Erlaubte zyklische Symmetrie in Abhängigkeit der Raumdimension eines periodischen Gitters.

## 1.4 Modellierung quasiperiodischer Strukturen

Quasiperiodische Strukturen lassen sich mit verschiedenen Methoden erzeugen. Im folgenden sollen der Streifenprojektionsformalismus und der Formalismus der atomaren Hyperflächen vorgestellt werden.

<sup>10</sup>Kristallographisch bedeutet hier: Bezogen auf periodische Strukturen in drei Dimensionen (siehe Tab. 1.1).

<sup>11</sup>Die Eulerfunktion gibt die Anzahl der teilerfremden Zahlen kleiner als  $m$  an.

<sup>12</sup>Periodische Gitter in  $d > 3$  Dimensionen.

### 1.4.1 Streifenprojektionsformalismus

Im Streifenprojektionsformalismus legt man durch ein  $d$ -dimensionales Gitter einen Schnitt der Dimension  $n$  ( $n < d$ ) mit irrationaler Steigung. Der  $d$ -dimensionale Raum des Hypergitters zerfällt damit in einen  $n$ -dimensionalen Tiling- oder *Parallelraum*  $E^{\parallel}$  und einen dazu senkrechten  $(d - n)$ -dimensionalen *Orthogonalraum*  $E^{\perp}$ . Werden alle Punkte des Orthogonalraums in den Parallelraum projiziert, so liegen diese Punkte dicht. Um daraus ein diskretes quasiperiodisches Muster zu erhalten, wählt man zur Projektion nur Gitterpunkte aus einem Streifen, dessen Kanten parallel zum Parallelraum liegen. Die Projektion dieses Auswahlstreifens in den Orthogonalraum heißt *Akzeptanzbereich* (Abb. 1.5).

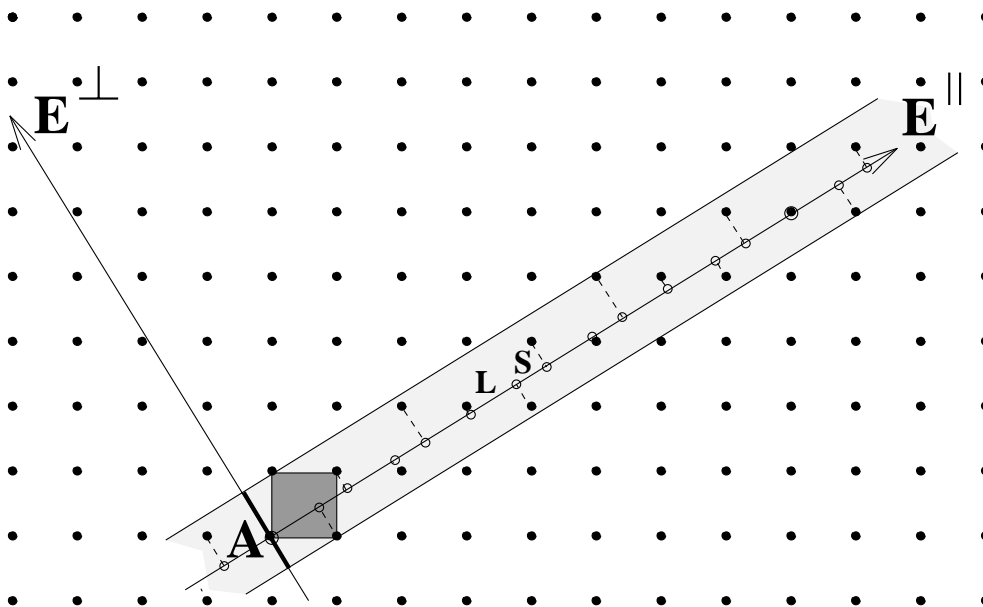


Abbildung 1.5: Der Streifenprojektionsformalismus an einem Beispiel aus dem  $\mathbb{Z}^2$  mit einem Einheitsquadrat als Grundlage der Streifenbreite (aus [33]). **A** bezeichnet den Akzeptanzbereich, **L** und **S** die im Tilingraum  $E^{\parallel}$  erhaltenen Strecken. Bei einer Steigung von  $\tau^{-1}$  stellt die erhaltene Abfolge von **L** und **S** die Fibonaccikette dar.<sup>14</sup>

### 1.4.2 Formalismus der atomaren Hyperflächen

Anstatt durch einen  $d$ -dimensionalen Auswahlstreifen einen Teil der Punkte des  $d$ -dimensionalen Hypergitters herauszuschneiden und anschließend zu projizieren, wird beim Formalismus der atomaren Hyperflächen an jeden Gitterpunkt ein  $(d - n)$ -dimensionales Polytop<sup>15</sup> geheftet, das senkrecht zum physikalischen Raum steht. Der Schnitt von  $E^{\parallel}$

<sup>14</sup>Die Zahl  $\tau = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$  ist der *Goldene Schnitt*.

<sup>15</sup>Polyeder in beliebigen Dimensionen.

mit den Polytopen liefert dann die Punkte der quasiperiodischen Struktur (Abb. 1.6). Im physikalischen Raum repräsentiert jeder Schnittpunkt ein Atom, weshalb das Polytop als *atomare Hyperfläche* bezeichnet wird.

Wird die Oberfläche des Polytops in verschiedene Bereiche eingeteilt, die jeweils für eine bestimmte Atomsorte stehen, so erhält man ein mit verschiedenen Atomsorten dekoriertes quasikristallines Muster.

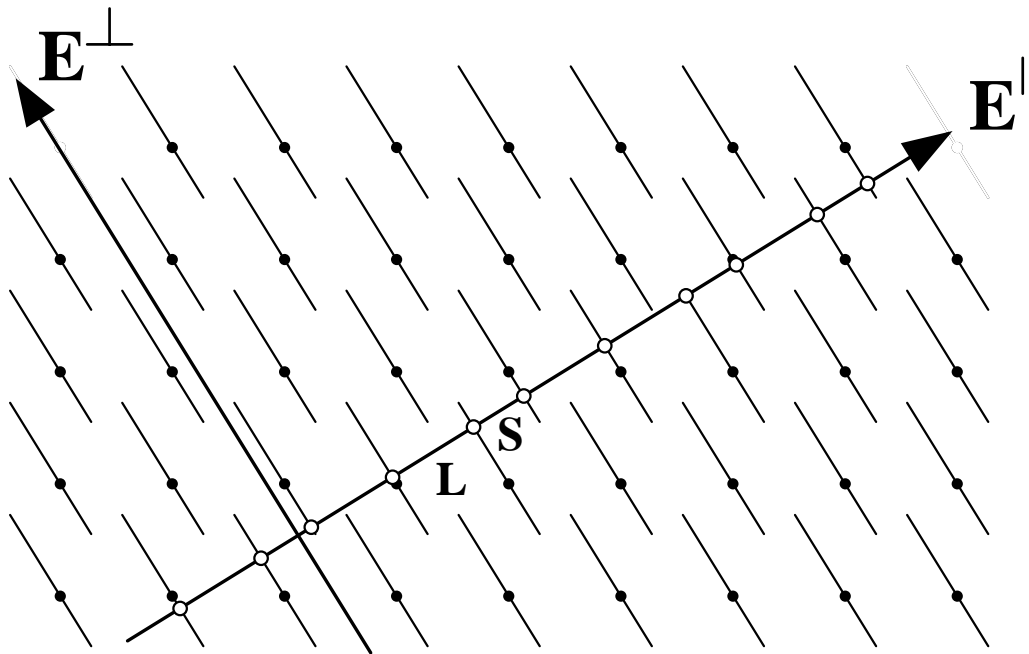


Abbildung 1.6: Der Formalismus der atomaren Hyperflächen (aus [34]).

Der Formalismus der atomaren Hyperflächen ist vollkommen äquivalent zum Streifenprojektionsformalismus, wenn die atomare Hyperfläche das Negative des Akzeptanzbereichs ist [33].<sup>16</sup>

## 1.5 Der Begriff des Tilings

Ein *Tiling* ist eine lückenlose und überlappungsfreie Parkettierung des  $d$ -dimensionalen Raumes mit einer abzählbaren Anzahl verschiedener  $d$ -dimensionaler Bausteine, die als *Tiles* bezeichnet werden. Als *Vertizes* werden die Eckpunkte der Tiles bezeichnet.

Verbindet man in einer quasiperiodischen  $n$ -dimensionalen Punkteanordnung nebeneinander liegende Punkte, so ist das resultierende Muster ein quasiperiodisches  $n$ -dimensionales Tiling.

<sup>16</sup>Das Negative eines Körpers ergibt sich durch Punktspiegelung am Koordinatenursprung.

### 1.5.1 Penrose- und Dreiecksmuster

Lange vor der Entdeckung der Quasikristalle waren Tilings bekannt, die zu einer lückenlosen, quasiperiodischen Parkettierung des zwei- oder dreidimensionalen Raumes führen. Das einfachste ist das aus nur zwei unterschiedlichen Rauten bestehende Penrosemuster [22] (Abb. 1.7). Der spitze Winkel der beiden Rauten beträgt  $36^\circ$  bzw.  $72^\circ$ .

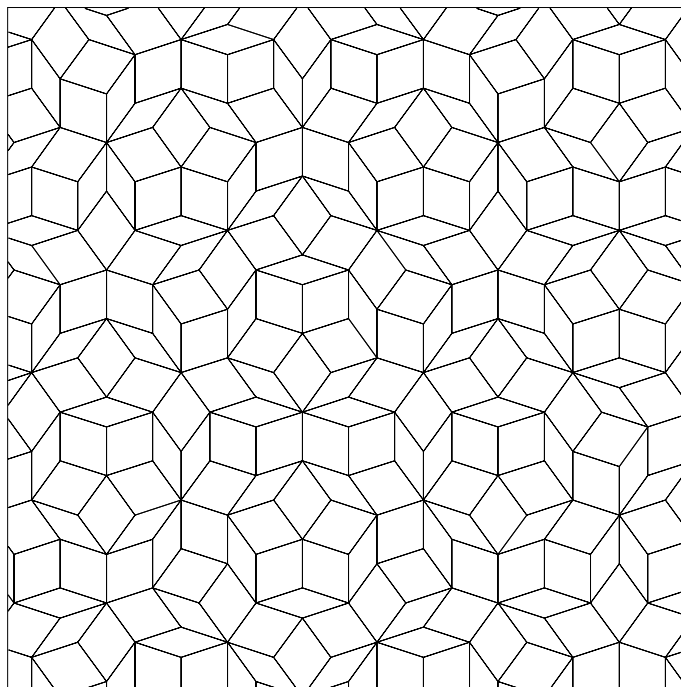


Abbildung 1.7: Das aus zwei verschiedenen Rauten bestehende Penrose-Tiling (aus [33]).

Ein weiteres Tiling ist das *Tübinger Dreiecksmuster* [1], welches als Bausteine ein spitzwinkliges und ein stumpfwinkliges gleichseitiges Dreieck verwendet (Abb. 1.8).<sup>17</sup> Der spitze Winkel des spitzwinkligen Dreiecks beträgt  $36^\circ$ . Der stumpfe Winkel des stumpfwinkligen Dreiecks beträgt  $144^\circ$ . Im Tübinger Dreiecksmuster treten insgesamt neun verschiedene Vertex-Konfigurationen auf (Tab. 1.2).

### 1.5.2 Random Tilings

Alternativ zu den quasiperiodischen Tilings führten HENLEY [13] und ELSER [9] das *Random Tiling* ein. In einem Random Tiling werden die einzelnen Tiles Eckpunkt an Eckpunkt gelegt. Es gibt keine weiteren Anbauregeln.<sup>18</sup>

<sup>17</sup>Das Tübinger Dreiecksmuster ist für die später behandelten Strukturmodelle von d-AlCuCo von wesentlicher Bedeutung.

<sup>18</sup>Es muß natürlich entweder durch entsprechende Wahl der Bausteine oder durch den Baumeister gewährleistet sein, daß kein periodisches Muster entsteht.

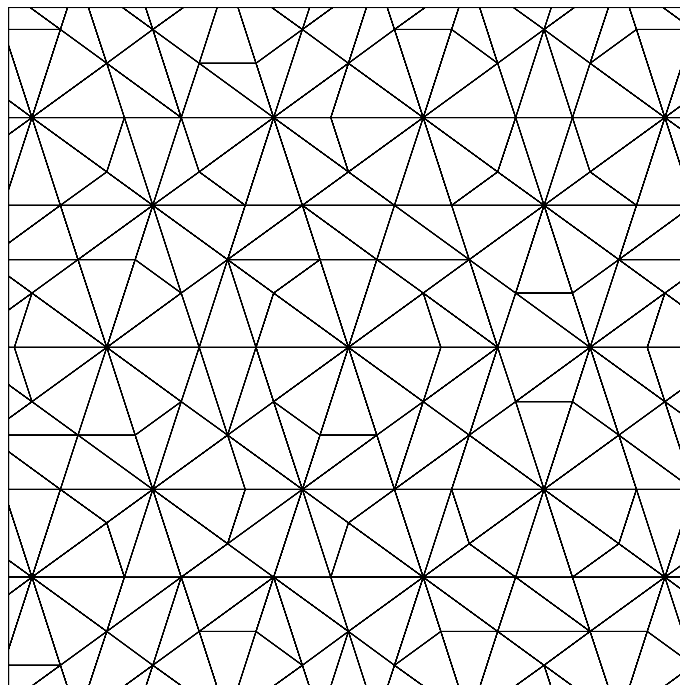


Abbildung 1.8: Ausschnitt aus dem Tübinger Dreiecksmuster (aus [33]).

Vertexkonfiguration									
Relative Häufigkeit	$\tau^{-3}$	$2\tau^{-4}$	$2\tau^{-5}$	$2\tau^{-6}$	$\tau^{-7}$	$\tau^{-7}$	$2\tau^{-8}$	$\tau^{-9}$	$\tau^{-6}$

Tabelle 1.2: Relative Häufigkeiten der einzelnen Vertexkonfigurationen im Tübinger Dreiecksmuster (aus [34]).

## 1.6 Phasonen

Setzt man an jeden Punkt eines quasiperiodischen Musters ein Atom, so erhält man quasikristalline Strukturen. In dem Bild der vorgestellten mathematischen Beschreibungen gibt es neben den atomaren Bewegungsmöglichkeiten im Parallelraum  $E^{\parallel}$  noch einen weiteren Freiheitsgrad: Die Verschiebung des Akzeptanzbereichs bzw. der atomaren Hyperflächen parallel zum Orthogonalraum  $E^{\perp}$ . Formal stellt dies eine neue Bewegungsmöglichkeit der quasikristallin angeordneten Atome dar, die in klassischen Kristallen nicht vorhanden ist. Wird beim Streifenprojektionsformalismus der Akzeptanzbereich parallel zum Orthogonalraum etwas verschoben, so fallen dadurch einige Punkte des Hypergitters aus dem Streifen heraus. Für diese müssen auf der anderen Seite des Streifens neue Gitterpunkte in den Streifen eintreten, da keine Atome erzeugt oder vernichtet werden dürfen.

Völlig äquivalent hierzu ist beim Formalismus der atomaren Hyperflächen eine Verschiebung der Schnittlinie. Die Schnittlinie verläßt eine atomare Hyperfläche, muß aber sogleich eine benachbarte Hyperfläche neu schneiden. Die Atomtypen beider angeschnittener Hyperflächen müssen ebenfalls übereinstimmen, da kein Elementwechsel stattfinden darf.

Diese korrelierten atomaren Umstrukturierungen in Quasikristallen werden als *Phasonen* bezeichnet. Wird der Streifen oder die Schnittlinie nur lokal etwas in Richtung des Orthogonalraums verzerrt, so resultiert daraus eine ebenfalls lokalisierte Atombewegung. Dieser einzelne Sprungprozess wird als *phasonischer Flip* oder kurz als *Flip* bezeichnet (Abb. 1.9).

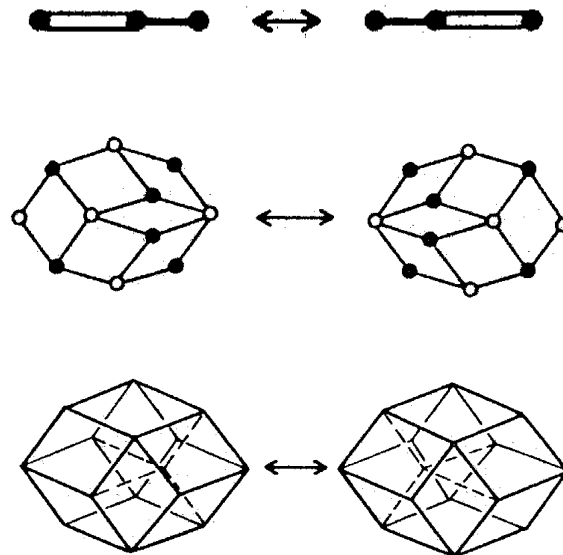


Abbildung 1.9: *Elementare Flips in verschiedenen Dimensionen (aus [14]).*

*Im Eindimensionalen wird die Abfolge zweier Segmente vertauscht (oben). Im Zwei- und Dreidimensionalen ändert sich die Position eines Vertex im Tiling (Mitte und unten).*

Durch lokalisierte phasonische Flips wird aus einem idealen Quasikristall ein Random Ti-

ling: Die Atomanordnung kann nicht mehr als *ebener Schnitt* durch das Hypergitter gewonnen werden (Abb. 1.10).

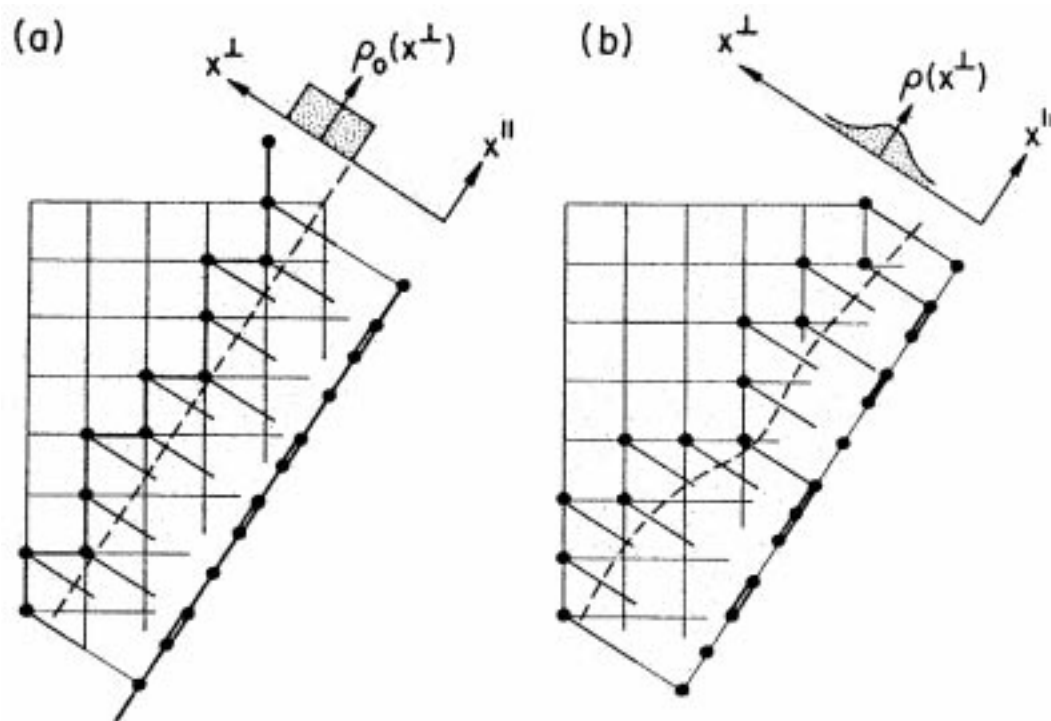


Abbildung 1.10: Änderung des Verlaufs der Schnittlinie durch Phasonen (aus [14]). Aus einem idealen quasiperiodischen Tiling (a) wird ein Random Tiling (b). Im idealen quasiperiodischen Tiling ist die Dichte der Schnittpunkte über der gesamten Hyperfläche gleichverteilt. Durch Verbiegung der Schnittlinie entsteht ein Random Tiling. Die Dichteverteilung der Schnittpunkte besitzt ein Maximum im Zentrum der Hyperfläche.

### 1.6.1 Flips im Dreiecksmuster

Im Tübinger Dreiecksmuster gibt es zwei Arten von elementaren Flips (Abb. 1.11) [33]:

- Der *Simpletonflip* ergibt sich, wenn ein Schnittpunkt die atomare Hyperfläche verläßt und in eine benachbarte Hyperfläche eintritt.
- Der *Trapezflip* kommt bei der Wanderung des Schnittpunktes durch verschiedene Tilingumgebungen innerhalb derselben atomaren Hyperfläche zustande.

Durch das Vertauschen von spitzen und stumpfen Dreiecken im Tübinger Dreiecksmuster ergibt sich ein Random Tiling. In einem randomisierten Dreiecksmuster treten auch Vertexkonfigurationen auf, die im idealen Dreiecksmuster nicht vorhanden sind.<sup>19</sup> Insgesamt können 198 verschiedene Vertexkonfigurationen auftreten [33].

<sup>19</sup>Diese Vertizes werden auch als *falsche Vertizes* bezeichnet.

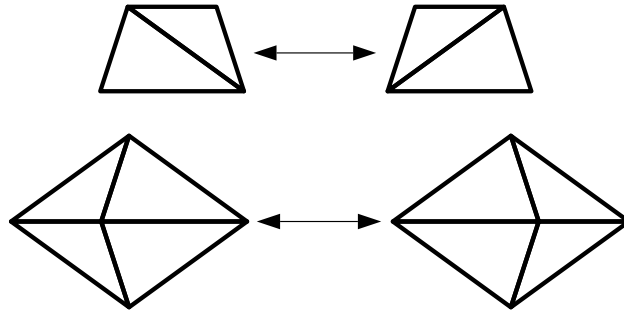


Abbildung 1.11: *Elementare Flips im Dreiecksmuster (aus [33]).*  
*Trapezflip (oben) und Simpletonflip (unten).*

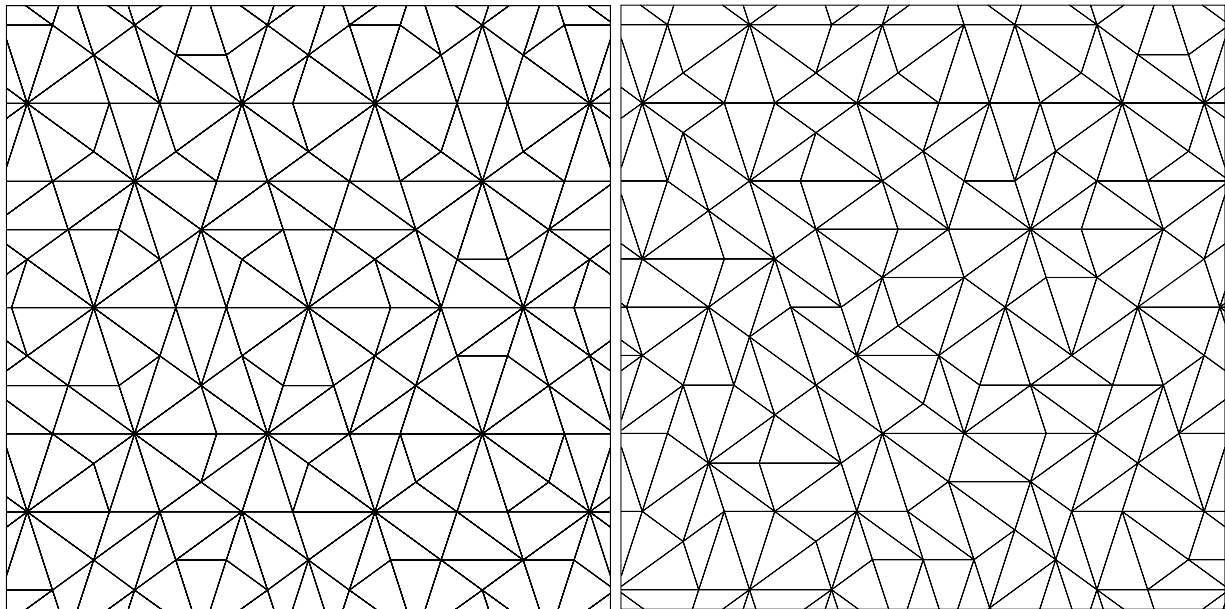


Abbildung 1.12: *Durch Flips entsteht aus einem idealen quasiperiodischen Dreiecksmuster (links) ein Random Tiling (rechts) (aus [33]).*



## 1.6.2 Experimentelle Hinweise auf Phasonen

### Phasonische Diffusion

Durch eine Abfolge von Trapez- und Simpletonflips kann eine weitreichende atomare Diffusion in Quasikristallen stattfinden, ohne daß hierfür strukturelle Defekte, wie zum Beispiel Leerstellen, vorhanden sein müssen. KATZ und KALUGIN zeigten in einer Modellrechnung, daß sich die Aktivierungsenergie für diesen Diffusionsmechanismus aus zwei Komponenten zusammensetzt: Der Energie zur Überwindung der Potentialbarriere bei einem Sprung und einem Anteil, mit dem die phasonische Unordnung des zuvor idealen Quasikristalls berücksichtigt wird [17]. Die Aktivierungsenergie dieser *phasoneninduzierten Selbstdiffusion* ist — im Vergleich zu anderen Diffusionsmechanismen — sehr niedrig, so daß man in Quasikristallen zur Beschreibung der Diffusion im wesentlichen zwei Temperaturbereiche unterscheiden muß. Im unteren Temperaturbereich sollte der phasonische Beitrag zur Diffusion dominieren. Im oberen Temperaturbereich sollte die Leerstellendiffusion überwiegen. Neuere Experimente zur Messung des Diffusionskoeffizienten in Quasikristallen zeigen tatsächlich einen Wechsel des vorherrschenden Diffusionsmechanismus im erwarteten Temperaturbereich: Das Arrheniusdiagramm des Diffusionskoeffizienten zeigt bei etwa 450 °C einen deutlichen Knick (Abb. 1.13) [3].

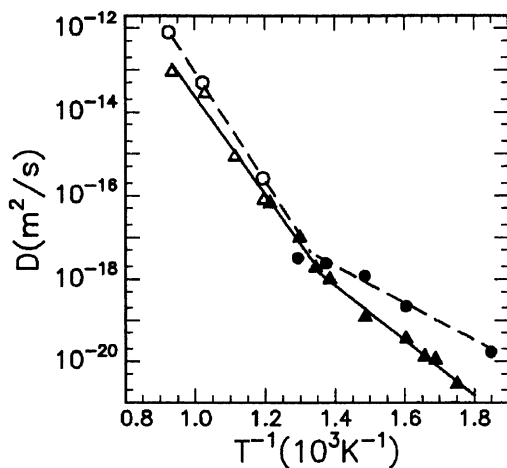


Abbildung 1.13: Arrheniusdiagramm des Diffusionskoeffizienten von AlPdMn (aus [3]).

### Neutronenstreuxperimente

Die Wellenlängen thermischer und subthermischer<sup>20</sup> Neutronen liegen in der Größenordnung von 1 – 10 Å und sind damit gleich groß oder größer als der Abstand der Atomkerne in Kristallen [4]. Neben kohärenter Streuung durch die vorhandene weitreichende Translationsordnung und diffuser Streuung infolge der thermischen Bewegung sowie durch die immer

<sup>20</sup>Neutronen, deren Energie kleiner als 0,02 eV ist.

vorhandenen Fehlstellen, gibt es einen quasielastischen<sup>21</sup> Anteil, der durch sprungartige Atombewegung verursacht wird. Dies führt zu einer Verbreiterung am Fuß des elastischen Streusignals. Beugungsexperimente mit subthermischen Neutronen erlauben daher die Untersuchung von dynamischen Eigenschaften der Atomkerne in Quasikristallen. LYONNARD und CODDENS haben mit Time-of-Flight-Neutronenstreuung die Streuintensität im Bereich der elastischen Streulinie gemessen. Durch Anpassung von Sprungvektoren und Sprungzeiten anhand theoretischer Modelle wurde anschließend versucht, das gemessene Signal zu erklären [6]. Die untersuchten Quasikristalle waren i-AlMnPd und i-AlCuFe [20]. Die ermittelten Sprungweiten in i-AlCuFe liegen für Cu bei 1,9 Å und 3,9 Å sowie bei 2,9 Å für Fe. Die Relaxationszeiten der Sprünge sind 5 – 20 ps (Cu) sowie 300 ps (Fe). Als Erklärung wurde von CODDENS das *assisted phason hopping*-Modell entwickelt (Abb. 1.14).

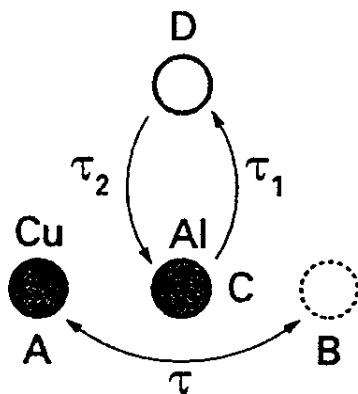


Abbildung 1.14: *Assisted Phason Hopping* (schematisch). Das Cu-Atom kann nur von A nach B springen, wenn das Al-Atom zuvor von C nach D springt (aus [6]).

Bei diesem Prozess müssen sich *zwei* Atome *korreliert* bewegen. Dadurch lassen sich die gewonnenen experimentellen Daten theoretisch erklären [7]. Ein atomistisches Bild auf der Grundlage eines quasikristallinen Strukturmodells konnte jedoch noch nicht aufgezeigt werden.

---

<sup>21</sup>Inkohärente inelastische Streuung mit sehr kleinem Energieübertrag.

## Kapitel 2

# Strukturmodelle für dekagonales AlCuCo

Kurz nach der Veröffentlichung von SHECHTMAN *et al.* entdeckten BENDERSKY *et al.* 1985 translationsperiodische Quasikristalle. In diesen sogenannten T-Phasen sind zweidimensionale quasikristalline Schichten entlang der dritten Achse periodisch angeordnet. HE *et al.* fanden einige Jahre nach dieser Entdeckung die dekagonale quasikristalline T-Phase AlCuCo [12].<sup>1</sup> Es zeigte sich, daß diese Aluminiumlegierung in einem bestimmten Bereich des Phasendiagramms einen thermodynamisch stabilen Quasikristall bildet (Abb. 2.1).

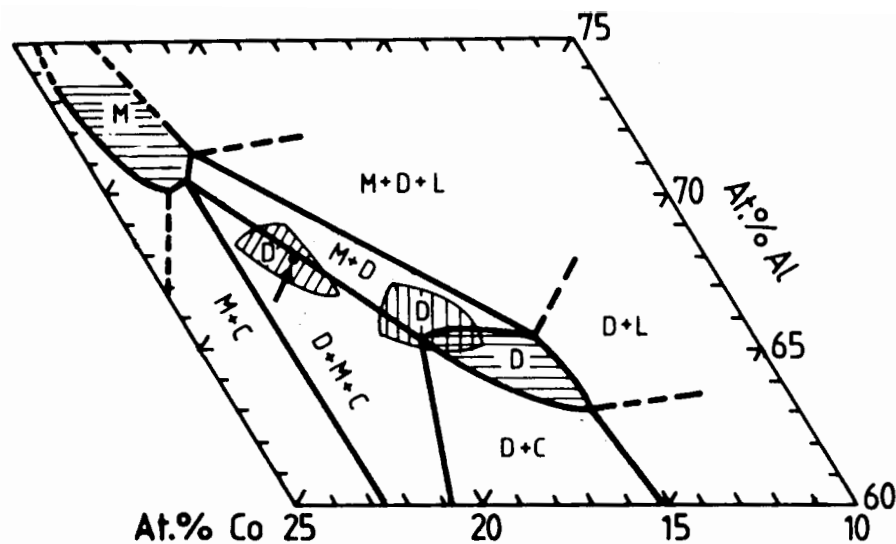


Abbildung 2.1: Ausschnitt aus dem ternären Phasendiagramm von AlCuCo (aus [31]). Mit abnehmender Temperatur bewegt sich die dekagonale Phase D von links oben nach rechts unten – 1000° C (Pfeil), 900° C und 800° C. (Bezeichnung der Phasen: C CsCl-Struktur, D dekagonal, L flüssig, M monoklin.)

<sup>1</sup>Wie sich bei weiteren Untersuchungen zeigte, sind AlCuCo und AlNiCo isostrukturelle Legierungen.

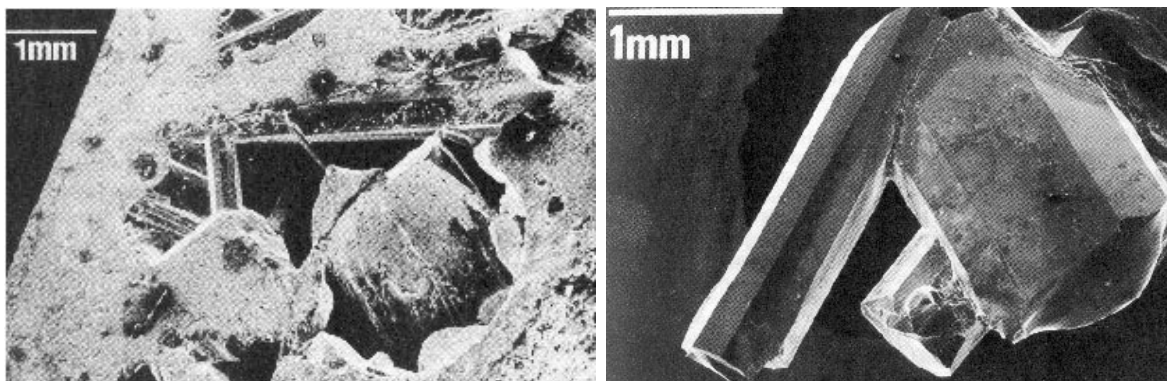


Abbildung 2.2: Dekaprismatische Nadeln aus  $AlCuCo$  (aus [31]).

Aus der Schmelze lassen sich quasikristalline Einkristalle bis zu einer Größe von einigen Millimetern züchten (Abb. 2.2). Diese beiden Eigenschaften gaben Raum für eine umfassende Untersuchung dieser quasikristallinen Legierung.

Nach den experimentellen Daten besteht  $AlCuCo$  aus zwei quasiperiodischen fünfzähligen Schichten, deren Symmetrieachsen durch eine Drehung von  $36^\circ$  ineinander übergehen. Die Struktur zeigt damit eine verallgemeinerte dekagonale Symmetrieachse. Der Abstand der Schichten ergibt sich experimentell zu  $2,05 - 2,1 \text{ \AA}$ . Gleiche Schichten haben einen Abstand von  $4,1 - 4,2 \text{ \AA}$ . Nach den erhaltenen Beugungsbildern sind die Atome in den einzelnen Ebenen exakt quasiperiodisch angeordnet.

Zum Aufbau konkreter Strukturmodelle für Quasikristalle gibt es verschiedene Ansätze, wobei beide Methoden einander äquivalent sind:<sup>2</sup>

- Ausgehend von einem Dreiecksmuster gelangt man durch Dekoration der Tiles mit Atomen zu einem Modell für die atomare Struktur eines Quasikristalls.
- Über atomare Hyperflächen ergeben sich direkt die quasiperiodischen Atompositionen.<sup>3</sup>

## 2.1 Die Dekorationen von Burkov

Durch Dekoration eines Tilings auf der Grundlage des Tübinger Dreiecksmusters erhielt BURKOV [5] zwei Strukturmodelle.

Die Tiles sind ein mit 34 Atomen dekoriertes spitzwinkliges Dreieck und ein mit 21 Atomen dekoriertes stumpfwinkliges Dreieck. Es werden dabei nur Atome in die Tiles gesetzt. Vertices und Kanten bleiben unbesetzt. Die beiden Varianten unterschieden sich in der Anordnung der Atome in den Tiles (Abb. 2.3). Der wesentliche Unterschied in den Atomumgebungen der beiden Dekorationen sind die mit Al-Atomen besetzten Zehnerringe bei Burkov-I. Diese sind bei Burkov-II nicht vorhanden (Abb. 2.4).

<sup>2</sup>Zu jedem quasiperiodischen Tiling gibt es passende atomare Hyperflächen.

<sup>3</sup>Über die so erhaltene Struktur kann nachträglich ein Tiling gelegt werden.

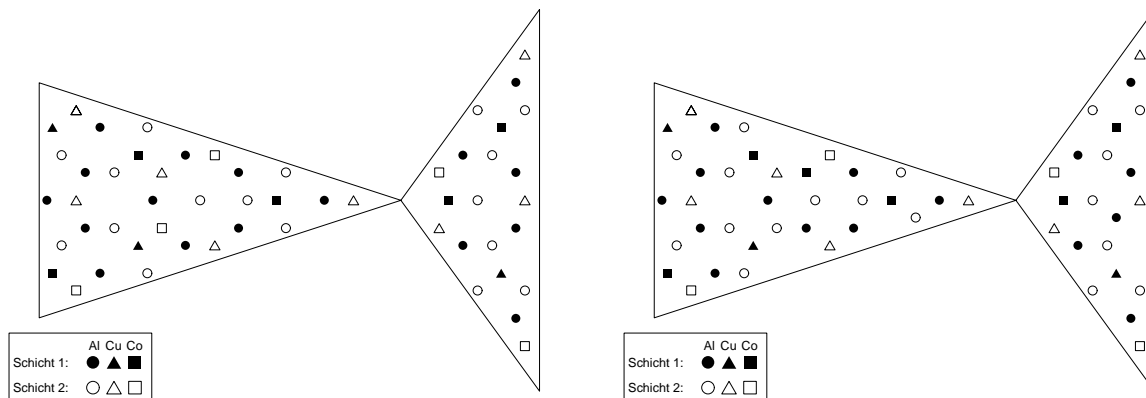


Abbildung 2.3: Die Dekoration der Dreiecke für die beiden Modelle von Burkov. Links Burkov-I, rechts Burkov-II (aus [33]).

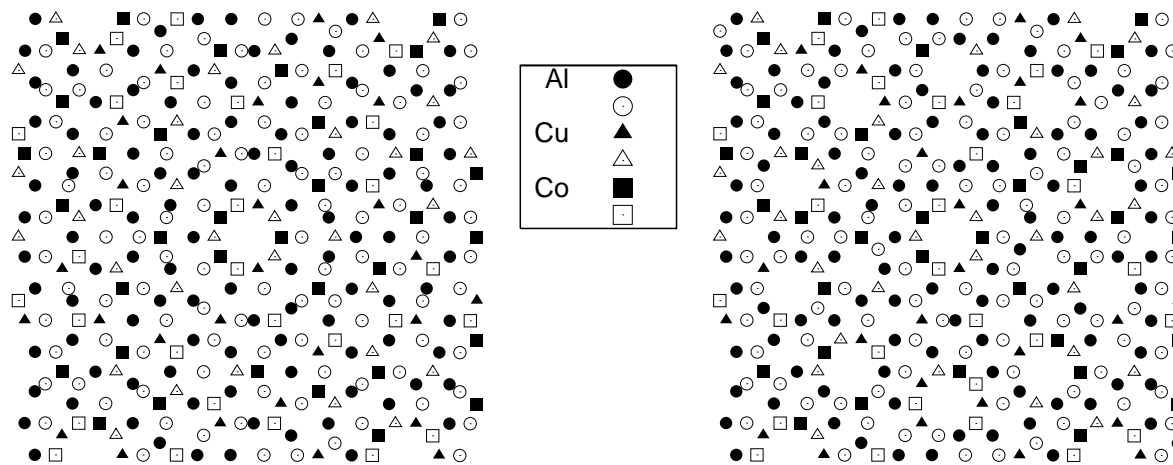


Abbildung 2.4: Die beiden von Burkov entworfenen Modelle für  $d\text{-Al}_{62}\text{Cu}_{19}\text{Co}_{19}$ . Links Burkov-I, rechts Burkov-II. Gefüllte Symbole geben die Atome der einen, leere Symbole die Atome der anderen Schicht wider.

## 2.2 Das Burkov-Zeger-Modell

ZEGER beschäftigte sich intensiv mit der Entwicklung eines Strukturmodells für dekagonales AlCuCo in dem es möglich ist in physikalisch sinnvoller Weise Phasonen zu beschreiben [33]. Als Ausgangspunkt ihrer Arbeit diente das zweite Modell von Burkov. ZEGER entwarf eine alternative Beschreibung dieses Modells, bei der jede der beiden atomaren Schichten durch ein eigenes Dreiecksmuster beschrieben wird.

Die Al-, Cu- und Co-Atome der ersten Schicht besitzen ein Zehneck als Hyperfläche und liegen auf den Vertizes eines Dreiecksmusters. Die restlichen Al-Atome der ersten Schicht haben einen symmetrischen Fünfstern als Hyperfläche und sitzen auf der Hälfte aller Umkreispositionen der spitzwinkligen Dreiecke (Abb. 2.5). Die zweite Schicht wird hierzu analog gebildet. Die resultierende Dekoration ist in Abb. 2.6 dargestellt. Im oberen Teil des Bildes ist ein Ausschnitt des Dreiecksmusters der ersten Schicht eingezeichnet. Im unteren Teil ist ein entsprechender Ausschnitt des Dreiecksmusters für die zweite Schicht wiedergegeben. Das mit dieser alternativen Beschreibung zusammenhängende Modell wird als *Burkov-Zeger-Modell* bezeichnet.

Der Vorteil dieser Beschreibung gegenüber der von BURKOV gewählten liegt — wie sich im folgenden zeigen wird — in der einfachen Beschreibung physikalisch sinnvoller Flips.<sup>4</sup>

Die Eigenschaften dieses Modells sind:

- Jede Ebene besitzt eine verallgemeinerte fünfzählige Symmetrie.
- Beide Ebenen zusammen bilden eine Doppelschicht. Diese zeigt eine verallgemeinerte zehnzählige Symmetrie.
- Es gibt für jede der beiden Ebenen ein eigenes Tiling.
- Der Anteil der Al-Atome ist  $\tau^{-1}$  und der Anteil der TM-Atome ist  $\tau^{-2}$ .<sup>5</sup>
- Alle Vertizes sind von Atomen besetzt.
- Die Hälfte der Umkreismittelpunkte der spitzwinkligen Dreiecke sind mit Al-Atome besetzt.

---

<sup>4</sup>Detailliertere Ausführung hierzu findet man in [33].

<sup>5</sup>In den durchgeführten Simulationen wird nicht zwischen Kupfer und Kobalt unterschieden. Daher sind Kupfer- und Kobaltatome unter der Bezeichnung *TM* zusammengefaßt (von engl. *Transition Metal*).

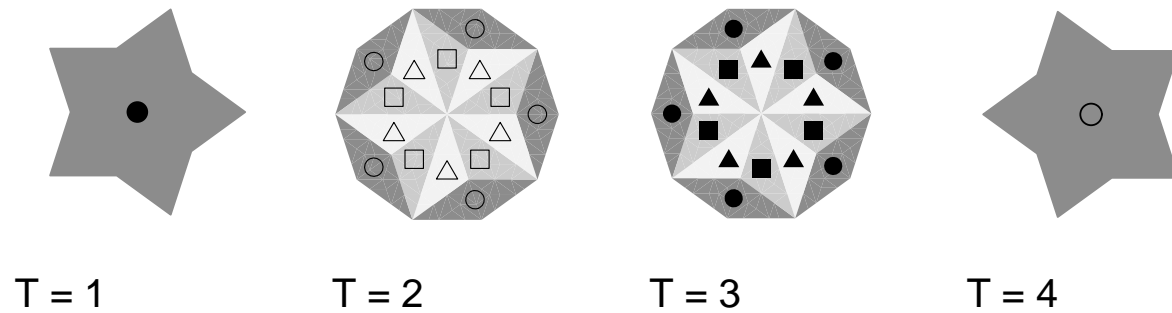


Abbildung 2.5: Die atomaren Hyperflächen im Burkov-Zeger-Modell. Die Flächenverhältnisse geben direkt den Anteil der einzelnen Atomsorten wider (aus [33]).

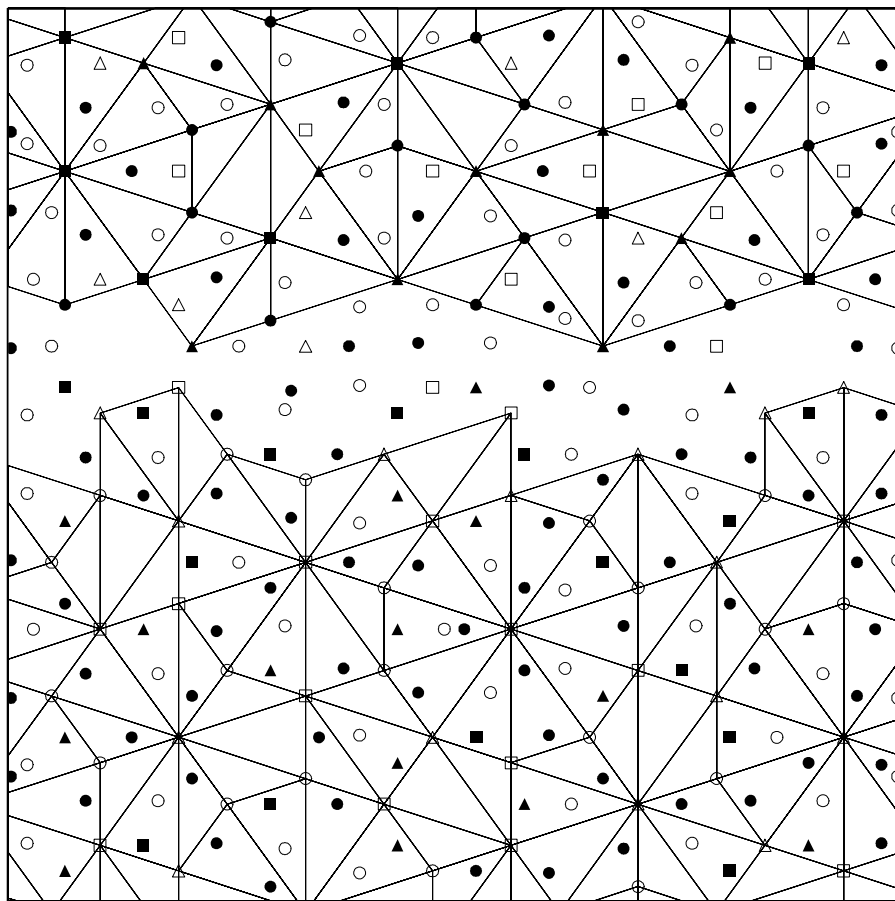


Abbildung 2.6: Das Burkov-Zeger-Modell besitzt für jede Schicht ein eigenes Tiling. Im oberen Teil des Bildes ist ein Ausschnitt des Dreiecksmusters der ersten Schicht eingezeichnet. Im unteren Teil ist ein entsprechender Ausschnitt des Dreiecksmusters für die zweite Schicht wiedergegeben (aus [33]).

### 2.2.1 Strichmuster und Dekoration

Der den Modellen zugrundeliegende Formalismus der atomaren Hyperflächen liefert die Atompositionen. Bei der Auswahl eines zur erhaltenen Atomanordnung passenden Tilings gibt es gewisse Freiheiten (Abb. 2.8):

- Über die Atomanordnung kann ein Dreiecksmuster gelegt werden. Die Atomabstände in den einzelnen Schichten, und damit die Kantenlänge der Dreiecke, werden nach experimentellen Daten angepaßt. Die kurze Kantenlänge beträgt  $S = 2,89 \text{ \AA}$ . Die lange Seite  $L = \tau \cdot S = 4,68 \text{ \AA}$ . Der Umkreisradius dieser Dreiecke ist  $r_u = \frac{1}{\sqrt{3-\tau}} \cdot S = 2,46 \text{ \AA}$  (Abb. 2.7).
- Der kürzeste auftretende Atomabstand innerhalb einer Schicht ist der Umkreisradius der Dreiecke  $r_u = 2,46 \text{ \AA}$ . Werden alle Atompositionen mit Strichen dieser Länge verbunden, so besitzt das erhaltene Muster die Bausteine eines Zwei-Niveau-Tilings (siehe [14]).

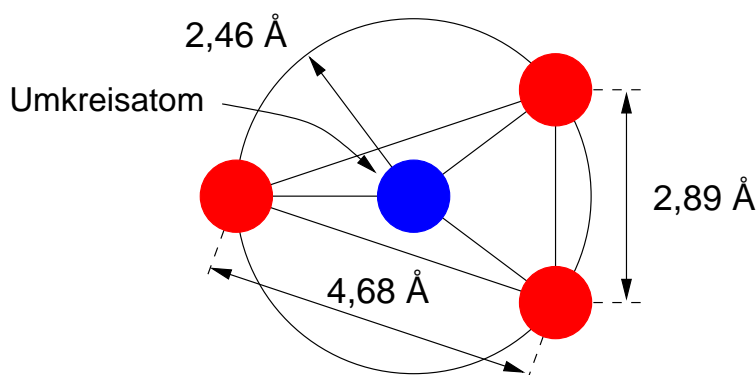


Abbildung 2.7: Atomabstände im Burkov-Zeger-Modell. Der Umkreisradius ist  $2,46 \text{ \AA}$ .

### 2.2.2 Atomare Struktur

In der atomaren Struktur der Doppelschichten des Burkov-Zeger-Modells zeigen sich verschiedene charakteristische Atomanordnungen:<sup>6</sup>

- Der kleinste Atomabstand beträgt  $2,29 \text{ \AA}$ . Er besteht zwischen zwei Al-Atomen auf Umkreispositionen in benachbarten Schichten. (Abb. 2.9).
- Es gibt atomare Zehnerringe aus TM-Atomen, die von einem Zehnring aus Al-Atomen und weiteren 10 TM-Atomen umgeben sind (Abb. 2.10).
- In den gemischten Zehnringen aus TM- und Al-Atomen beträgt die Anzahl der enthaltenen Al-Atome immer 2, 4 oder 6 (Abb. 2.11).

<sup>6</sup>In Abb. 2.9, Abb. 2.10 und Abb. 2.11 ist die Farbe der Atome entsprechend der Schichtabfolge gewählt. Der Radius der Al-Atome ist  $0,6 \text{ \AA}$  und der Radius der TM-Atome ist  $1,0 \text{ \AA}$ .



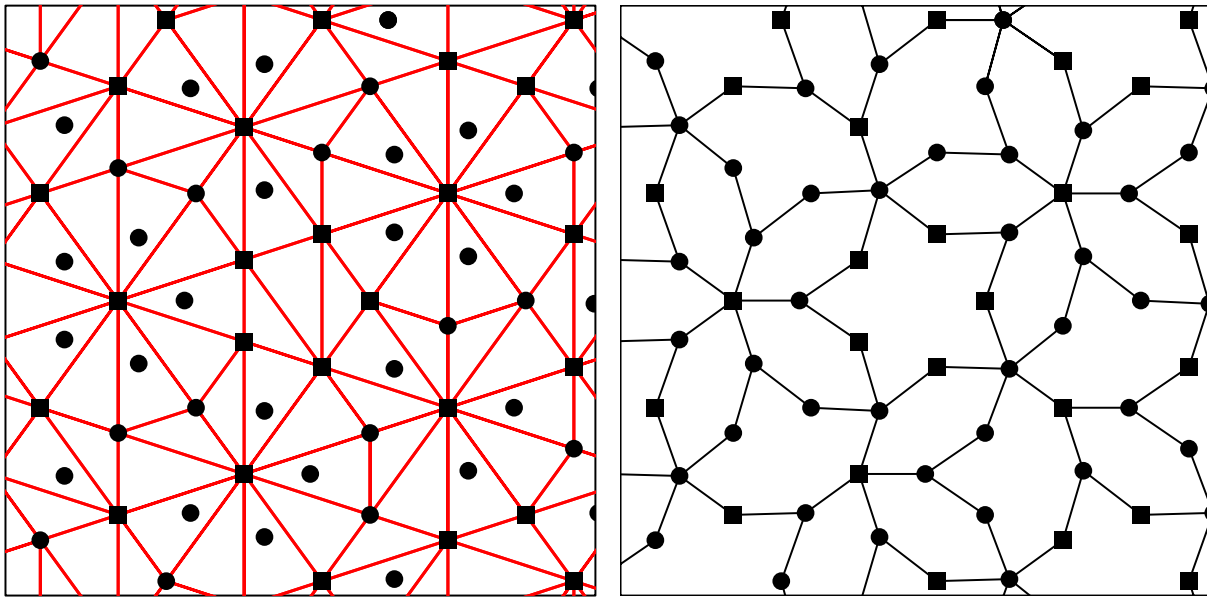


Abbildung 2.8: Dekoration der gleichen Atomanordnung unter zwei verschiedenen Tilings. Links Dreieckmuster, rechts Zwei-Niveau-Tiling.

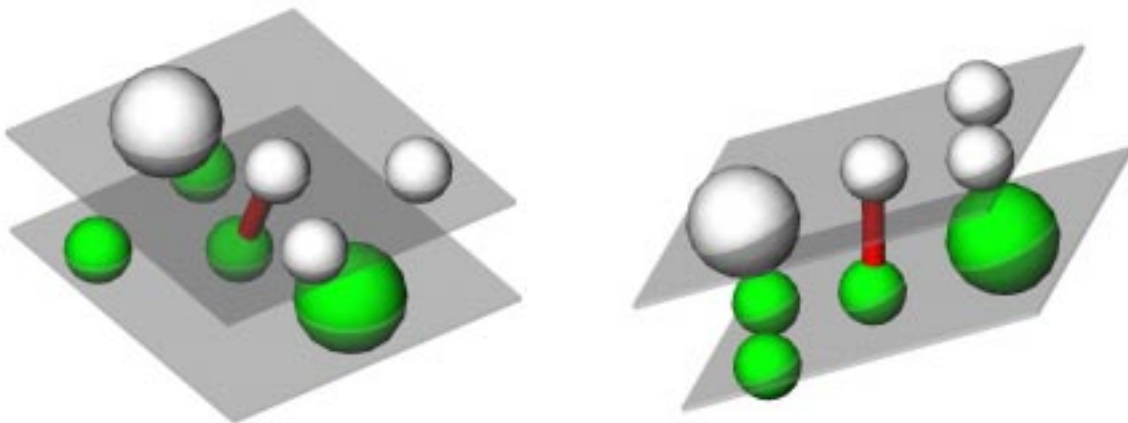


Abbildung 2.9: Der kleinste Atomabstand im Burkov-Zeger-Modell besteht zwischen zwei Al-Atomen innerhalb einer Doppelschicht (siehe auch Abb. 2.6). Die beiden Atome sind zur besseren Darstellung durch einen Zylinder verbunden.

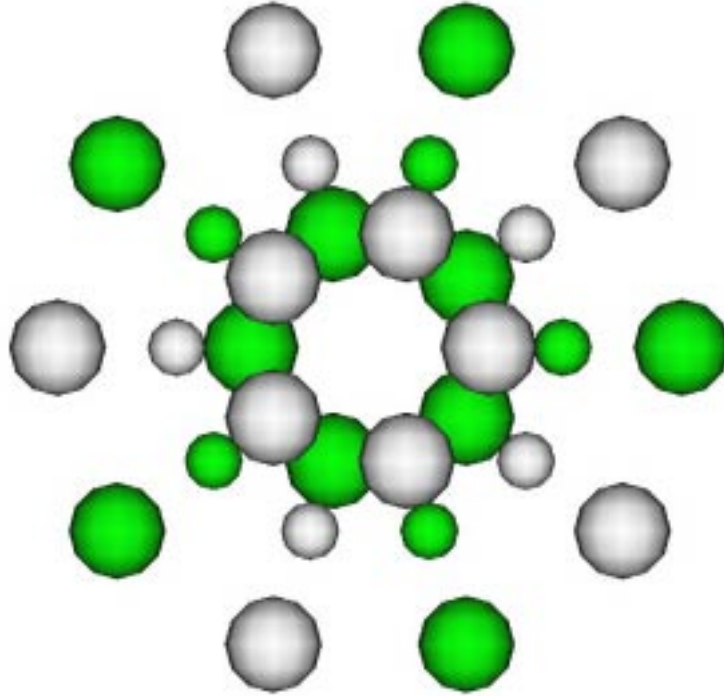


Abbildung 2.10: Umgebung der Zehnerringe aus TM-Atomen (siehe auch Abb. 2.6). Die Al-Atome sind von jeweils drei TM-Atomen umgeben (siehe auch Abb. 2.9).

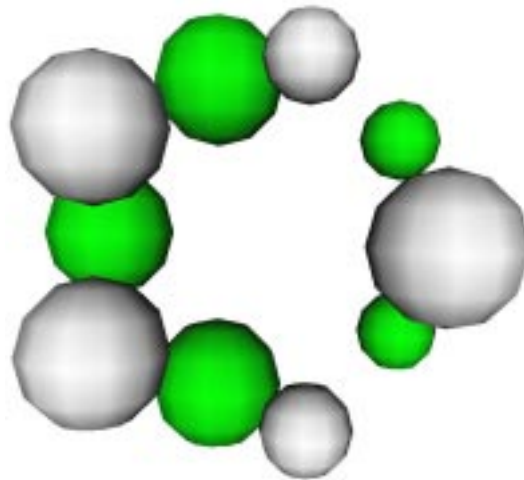


Abbildung 2.11: Perspektivische Ansicht eines Zehnerrings aus sechs TM- und vier Al-Atomen. Die kleinen Al-Atome können — im Gegensatz zu den großen TM-Atomen — leicht ins Innere des Rings wandern.

### 2.2.3 Phasonische Flips

Im atomaren Bild zeigen die im Dreiecksmuster vorgestellten Flips unterschiedliche Auswirkungen (Abb. 2.12):

- Der bei einem Simpletonflip zurückgelegte Weg beträgt je Atom  $\frac{\tau-1}{\sqrt{\tau+2}} = 0,94 \text{ \AA}$ . Bei einer alternative Erklärung der Umgruppierung wandern die beiden Atome aneinander vorbei. Die zurückgelegten Wege betragen dabei  $S = 2,89 \text{ \AA}$  und  $L - S = 1,78 \text{ \AA}$ . Aus sterischen Gründen wird diese Bewegung jedoch sehr stark behindert, da bei geradliniger Wanderung der minimale Atomabstand nur  $\frac{\tau-1}{2\sqrt{3-\tau}} = 0,76 \text{ \AA}$  betragen würde [32].
- Bei einem Trapezflip vertauschen im Tiling ein stumpfwinkliges und ein spitzwinkliges Dreieck. Es findet dabei jedoch keine Atombewegung statt.

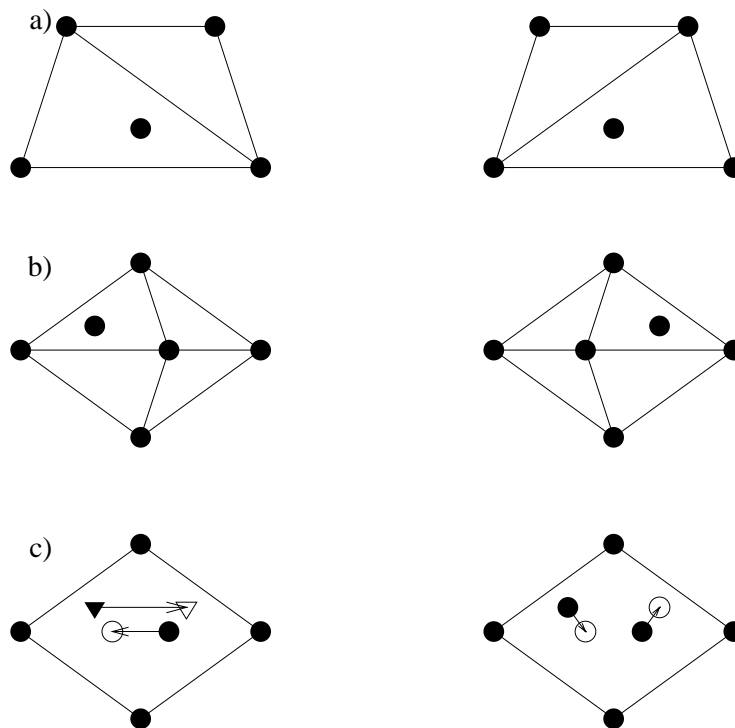


Abbildung 2.12: Atomare Bewegungen bei Trapez- und Simpletonflip. Nur der Simpletonflip ist mit einer atomaren Umordnung verbunden (aus [32]).

a) Trapezflip

b) Simpletonflip

c) Mögliche Atombewegungen im Simpletonflip

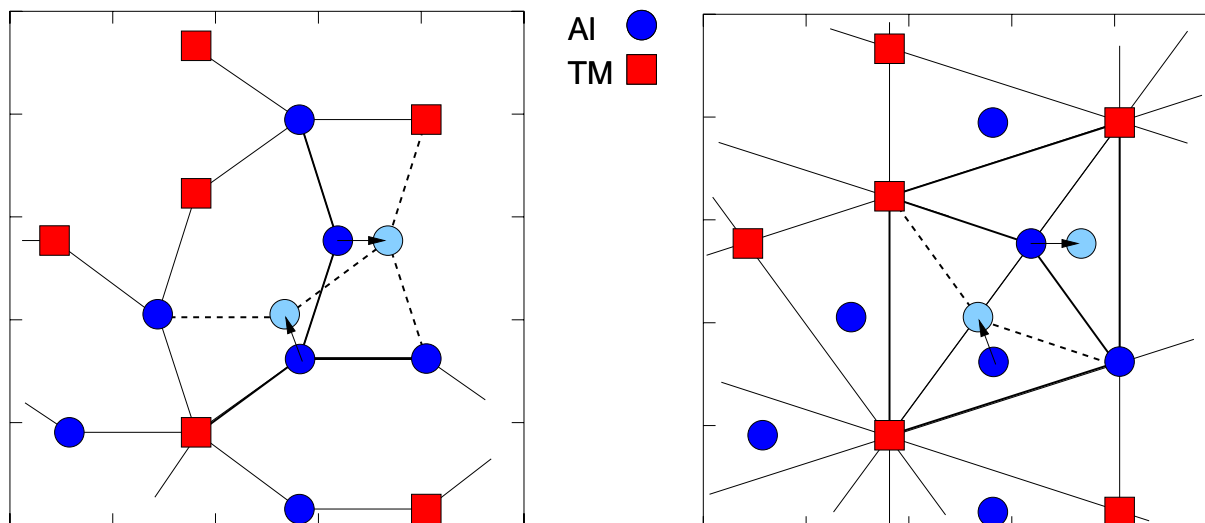


Abbildung 2.13: Die Änderung des Tilings bei einem lokalisierten phasonischen Flip. Links im Zwei-Niveau-Tiling, rechts im Dreiecksmuster.

Die graphische Darstellung der elementaren atomaren Flips ist vom gewählten Tiling abhängig (Abb. 2.13).<sup>7</sup>

Nach Abb. 2.5 liegen immer Al-Atome am Rand der atomaren Hyperflächen. Daher treten phasonische Bewegungen — zumindest nach dem zugrundeliegenden Modell — bei den Al-Atomen schon bei einer geringfügigen Verbiegung des Parallelraums auf. Physikalisch bedeutet dies, daß die Al-Atome eine höhere Wahrscheinlichkeit für phasonische Bewegungen aufweisen als die TM-Atome. Dadurch sollten die Al-Atome insgesamt eine größere Beweglichkeit als die TM-Atome zeigen.

<sup>7</sup>Im folgenden ist unter einem Flip stets ein Simpletonflip zu verstehen, da nur dieser mit einer Atombewegung verbunden ist.

# Kapitel 3

## Molekulardynamik

### 3.1 Grundlagen

Durch die Entwicklung von elektronischen Rechenanlagen ist es möglich geworden, Vielteilchenprobleme über numerische Lösungsverfahren zu berechnen.

Numerische Methoden zur Berechnung der zeitlichen Entwicklung eines Systems klassischer Teilchen gehen auf die zeitlich stückweise Integration der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen zurück. Prinzipiell werden bei allen numerischen Methoden einmal in jedem Zeitschritt die auf die einzelnen Teilchen wirkenden Kräfte berechnet. Für die Dauer eines Zeitschritts wirken nun die so berechneten Kräfte, und die Teilchengeschwindigkeiten ändern sich entsprechend, bevor im nächsten Zeitschritt die wirkenden Kräfte erneut berechnet werden. Dabei ist es unwesentlich, ob es sich bei den Teilchen um einzelne Atome oder um ganze Galaxien handelt. Es ist unmittelbar einsichtig, daß die Übereinstimmung zwischen numerisch berechneten und tatsächlichen physikalischen Trajektorien umso besser sein wird, je kleiner die gewählten Zeitschritte sind.

#### Entwicklung

Die *Molekulardynamik* (MD) versucht, den realen physikalischen (Fest-)Körper auf atomarer oder molekularer Ebene zu simulieren. Für Simulationen von makroskopischen Proben sind jedoch Rechenleistungen notwendig, die weit über die Leistungsfähigkeit aller verfügbaren Computer hinausgeht. Auf den schnellsten Höchstleistungsrechnern, die es derzeit (1999) gibt, lassen sich — etwas optimistisch betrachtet — Simulationen mit bis zu  $10^9$  Teilchen durchführen, was einem realen Probenwürfel von 0,0002 mm Kantenlänge entsprechen würde.<sup>1</sup> Makroskopische Teilchenzahlen bewegen sich im Bereich von einem Mol, was  $6 \cdot 10^{23}$  Teilchen entspricht. Hier findet der Übergang zur Kontinuumsmechanik bzw. zur statistischen Mechanik statt.

---

<sup>1</sup>Eine realistischere Betrachtung führt auf eine maximale Anzahl von  $10^6$  Teilchen — wenn man tatsächlich simulieren will, und sich nicht damit zufrieden gibt nur einige wenige Zeitschritte berechnet zu haben.

Jahr	2000	2020	2040	2060
Probenlänge (mm)	0,0002	0,002	0,02	0,2

Tabelle 3.1: *Kantenlänge der simulierbaren Probenwürfel bei optimistischer Abschätzung der Rechenleistung.*

Geht die Entwicklung der verfügbaren Rechenleistung wie in den letzten 10 Jahren weiter — und es gibt keinen Grund daran zu zweifeln — so ergeben sich die in Tab. 3.1 angegebenen Abmessungen der simulierbaren Probengrößen.<sup>2</sup>

## Datenmengen — Datenreduktion

Das eigentliche Problem ist aber schon heute nicht die Rechengeschwindigkeit sondern die Aufbereitung der erhaltenen Daten damit man wissenschaftliche Erkenntnisse gewinnen kann.

Unter Anbetracht der großen Teilchenzahlen, mit denen man in der Molekulardynamik umzugehen hat, ist es von wesentlicher Bedeutung, geeignete Methoden zu entwickeln, die bereits während des Simulationslaufes aus der erzeugten Datenflut die physikalisch relevanten Ergebnisse extrahieren und darstellen.<sup>3</sup>

### 3.1.1 Zwischen Experiment und Theorie

Im klassischen Verständnis der Physik können molekulardynamische Simulationen weder dem Experiment noch der Theorie zugeordnet werden. Im Computer wird versucht durch experimentelle Variation von Ausgangskordinaten, Potential, Temperatur, Thermostat, etc., bestimmte theoretisch vorhergesagte Eigenschaften nachzuweisen oder der Theorie noch verschlossene Gebiete genauer zu beleuchten. Es sollen auf anderem Weg nicht zu erhaltende bzw. nicht zugängliche Resultate gewonnen werden. Ebenso können Simulationsrechnungen zur Überprüfung von alternativen theoretischen oder experimentellen Methoden herangezogen werden (Abb. 3.1).

### 3.1.2 Qualität der Simulation

Ein Grundproblem jeder MD-Simulation sind die verwendeten Potentiale. Von ihnen hängt im wesentlichen die Dynamik der simulierten Teilchenkonfiguration ab. Meistens werden die Wechselwirkungen auf Zweikörperkräfte beschränkt und kugelsymmetrische Paarpotentiale eingesetzt.

Bei empirisch ermittelten Potentialen werden die Parameter durch Vergleich mit dem Experiment angepasst. Aus der molekulardynamischen Rechnung können so alle auch im

<sup>2</sup>Die realistischere Abschätzung hinkt etwa 20 Jahre hinterher.

<sup>3</sup>Position und Geschwindigkeit eines jeden Atoms: 100 Byte je Teilchen und Zeitschritt.

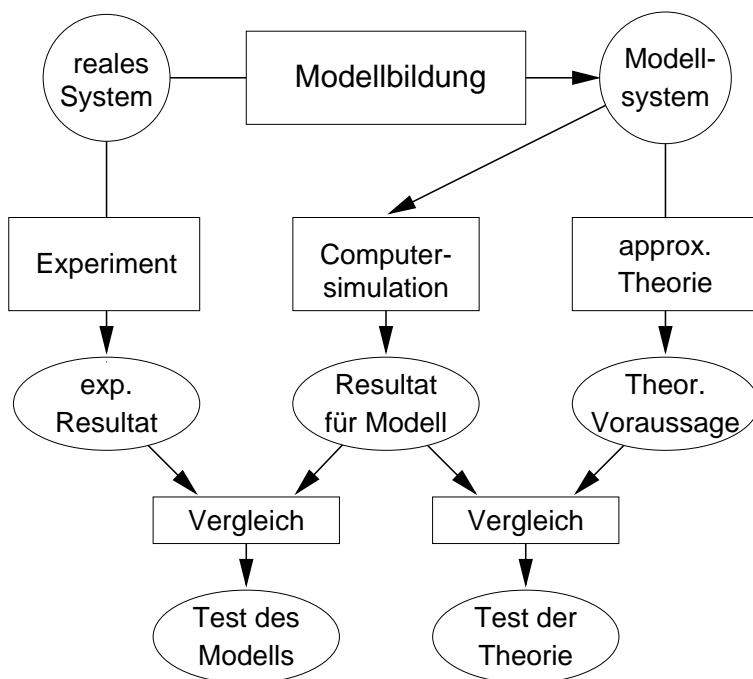


Abbildung 3.1: Zwischen *Experiment* und *Theorie* — die Rolle der *Computersimulation* (nach [11]).

Experiment gemessenen Größen quantitativ verifiziert werden.<sup>4</sup>

Wünschenswert sind *ab-initio*-Potentiale, die vollständig auf der Basis von quantenmechanischen Überlegungen unter Berücksichtigung der Atomanordnungen berechnet worden sind. Aus praktischen Gründen wird jedoch am häufigsten das *Lennard-Jones-Potential* oder Modifikationen davon verwendet. Es ist im wesentlichen ein Konstrukt aus Van-der-Waalscher Anziehung  $-r^{-6}$  und Hard-Core-Abstoßung  $r^{-12}$ :

$$\mathbf{V}_{ij} = \epsilon_{ij} \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right]. \quad (3.1)$$

Dabei ist  $\epsilon_{ij}$  die Tiefe des Wechselwirkungspotentials und  $r_{ij}$  der Gleichgewichtsabstand zwischen Atom  $i$  und Atom  $j$ . Dieses Potential ist sehr gut geeignet für die Beschreibung der interatomaren Anziehung in Molekülen — erscheint jedoch vom theoretischen Standpunkt prinzipiell ungeeignet für die Beschreibung von Festkörpern.

Die atomare Wechselwirkung quasikristalliner, insbesondere dekadogaler Strukturen läßt sich nicht zufriedenstellend mit einfachen Potentialen beschreiben.<sup>5</sup>

<sup>4</sup>Der Zweck heiligt die Mittel: Das Potential ist gut, wenn durch Simulationen die experimentell beobachteten Eigenschaften ebenfalls gemessen werden.

<sup>5</sup>Näheres zu Potentialen für Quasikristalle in [24]. Für die Simulationen dieser Arbeit wurde ein Potentialsatz von MIHALKOVIČ *et al.* verwendet (siehe Abs. 4.1.3).

## 3.2 Molekulardynamische Methoden

### 3.2.1 Einheiten

Die willkürlichen Simulationseinheiten sind durch Vorgabe des Wechselwirkungspotentials und der Ausgangskonfiguration an reale Einheiten gebunden (Tab. 3.2).<sup>6</sup>

- Die Massenskala ist direkt an die Ausgangskonfiguration gekoppelt.<sup>7</sup>
- Die Längenskala ist direkt sowohl an das verwendete Potential als auch an die Ausgangskonfiguration gekoppelt.
- Die Energieskala ist direkt an das verwendete Potential gekoppelt.
- Die Temperaturskala ist an das Potential gekoppelt. Sie ergibt sich jedoch nicht aus  $E = k_B T$  zu  $T[\text{K}] = 11605 \cdot U[\text{eV}]$ , sondern muß über Testsimulationen kalibriert werden. Ein möglicher Weg ist die Bestimmung des Schmelzpunktes der Probe auf molekulardynamischem Weg. Der Temperaturwert der Schmelzsimulation entspricht dann der absoluten Schmelztemperatur des Probenmaterials.<sup>8</sup>
- Die Zeitskala ergibt sich aus Energie-, Massen- und Längeneinheit:

$$E = \frac{1}{2}mv^2 \approx mv^2 = m\frac{s^2}{t^2} \implies t = \sqrt{\frac{m \cdot s^2}{E}}$$

Die in dieser Arbeit verwendeten Einheiten sind Tab. 3.3 zu entnehmen.

Größe	Gegeben durch	Umrechnung
Masse $m$	Konfiguration	–
Länge $s$	Potential, Konfiguration	–
Energie $E$	Potential	–
Temperatur $T$	Potential	Schmelzpunktanalyse
Zeit $t$	Masse $m$ , Länge $s$ , Energie $E$	$\sqrt{\frac{m \cdot s^2}{E}}$

Tabelle 3.2: Zusammenhang der dimensionslosen MD-Einheiten mit realen Größen.

<sup>6</sup>Potential und Ausgangskonfiguration müssen in den gleichen Längeneinheiten gegeben sein.

<sup>7</sup>*Direkt* bedeutet hier: Der Umrechnungsfaktor ergibt sich durch direkten Vergleich der dimensionslosen MD-Größen mit den realen Werten.

<sup>8</sup>Der Wert der Schmelztemperatur entspricht ungefähr der maximalen Potentialtiefe.



Größe	Basiseinheit
Länge s	1 Å = 1 = 10 <sup>-10</sup> m
Masse m	Masse(Al) = 1 = 26,98 · 1,66 · 10 <sup>-27</sup> kg
Energie E	1 eV = 1 = 1,602 · 10 <sup>-19</sup> J ≈ 10000 K
Temperatur T	2 · T <sub>Schmelzpunkt</sub> ≈ 2000 K ≈ 0,2 · 1,602 · 10 <sup>-19</sup> J
Zeit t	1,02 · 10 <sup>-14</sup> s = 1 (über Energie) 4,5 · 10 <sup>-15</sup> s = 1 (über Temperatur)

Tabelle 3.3: Die Basiseinheiten der durchgeführten Simulationen.

### 3.2.2 Algorithmen

Bei molekulardynamischen Simulationen werden die klassischen Hamiltonschen Bewegungsgleichungen für alle Teilchen innerhalb der Simulationsbox berechnet.

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (3.2)$$

Es wird versucht die tatsächlichen Teilchenbahnen durch Polygonzüge anzunähern. Bei kontinuierlichen Potentialen muß in jedem Zeitschritt die auf das Teilchen wirkende Kraft bestimmt werden.<sup>9</sup> Aus Kraft und Beschleunigung wird der von den einzelnen Teilchen im Zeitschritt  $\delta t$  zurückgelegte Weg berechnet. Diese Problemstellung führte zur Entwicklung verschiedener Algorithmen.

#### Verlet-Algorithmus

Addiert man zur Taylorreihe  $r_i(t + \delta t)$

$$r_i(t + \delta t) = r_i(t) + \delta t v_i(t) + \frac{(\delta t)^2}{2} \ddot{r}_i(t) + \dots \quad (3.3)$$

die analoge Reihe für  $r_i(t - \delta t)$  so fallen alle ungeraden Potenzen von  $\delta t$  heraus und es ergibt sich (bis auf Glieder vierter Ordnung)

$$r_i(t + \delta t) = 2r_i(t) - r_i(t - \delta t) + (\delta t)^2 \ddot{r}_i(t). \quad (3.4)$$

Die Geschwindigkeit tritt nicht explizit auf und wird bei Bedarf aus der Differenz

$$v_i(t) = \frac{r_i(t + \delta t) - r_i(t - \delta t)}{2\delta t} \quad (3.5)$$

berechnet.

---

<sup>9</sup>Bei diskreten Potentialen (*Harte Kugel, Square-Well*) ist dies nicht notwendig.

### Leap-Frog-Algorithmus

Eine Umformung des Verlet-Algorithmus führt zum Leap-Frog-Algorithmus (Abb. 3.2).

$$\mathbf{r}_i(\mathbf{t} + \delta\mathbf{t}) = \mathbf{r}_i(\mathbf{t}) + \delta\mathbf{t}\mathbf{v}_i(\mathbf{t} + \frac{\delta\mathbf{t}}{2}) \quad (3.6)$$

$$\mathbf{v}_i(\mathbf{t} + \frac{\delta\mathbf{t}}{2}) = \mathbf{v}_i(\mathbf{t} - \frac{\delta\mathbf{t}}{2}) + \frac{\delta\mathbf{t}}{m_i}\mathbf{F}_i(\mathbf{t}) \quad (3.7)$$

In diesem Ansatz werden Ort und Geschwindigkeit einen halben Zeitschritt versetzt ermittelt.<sup>10</sup> Die Geschwindigkeit zum Zeitpunkt  $\mathbf{t}$  muß wieder nachträglich berechnet werden:

$$\mathbf{v}_i(\mathbf{t}) = \frac{\mathbf{v}_i(\mathbf{t} - \frac{\delta\mathbf{t}}{2}) + \mathbf{v}_i(\mathbf{t} + \frac{\delta\mathbf{t}}{2})}{2}. \quad (3.8)$$

### Velocity-Verlet-Algorithmus

Beim Velocity-Verlet-Algorithmus wird zuerst der neue Ort, und dann mit der Information der Kraft am neuen Ort, die Geschwindigkeit berechnet (Abb. 3.3).

$$\mathbf{r}_i(\mathbf{t} + \delta\mathbf{t}) = \mathbf{r}_i(\mathbf{t}) + \delta\mathbf{t}\mathbf{v}_i(\mathbf{t}) + \frac{(\delta\mathbf{t})^2}{2m_i}\mathbf{F}_i(\mathbf{t}) \quad (3.9)$$

$$\mathbf{v}_i(\mathbf{t} + \delta\mathbf{t}) = \mathbf{v}_i(\mathbf{t}) + \frac{\delta\mathbf{t}}{2m_i}[\mathbf{F}_i(\mathbf{t}) + \mathbf{F}_i(\mathbf{t} + \delta\mathbf{t})] \quad (3.10)$$

Verziert man diese Algorithmen mit Input- und Outputfiltern, sowie mit einigen Thermostaten (Tab. 3.4), so erhält man ein komplettes MD-Paket.<sup>11</sup>

---

<sup>10</sup>Was diesem Algorithmus seinen Namen verschafft hat (Abb. 3.2): *Leapfrog* (engl.) – Bocksprung.

<sup>11</sup>Das ist natürlich untertrieben: Ein gutes MD-Programm — wie das eingesetzte IMD — erfordert ausgeklügelte Programmier Techniken, um die Leistungsfähigkeit von Hochleistungsrechnern voll auszuschöpfen und komplexe physikalische Probleme simulieren zu können.

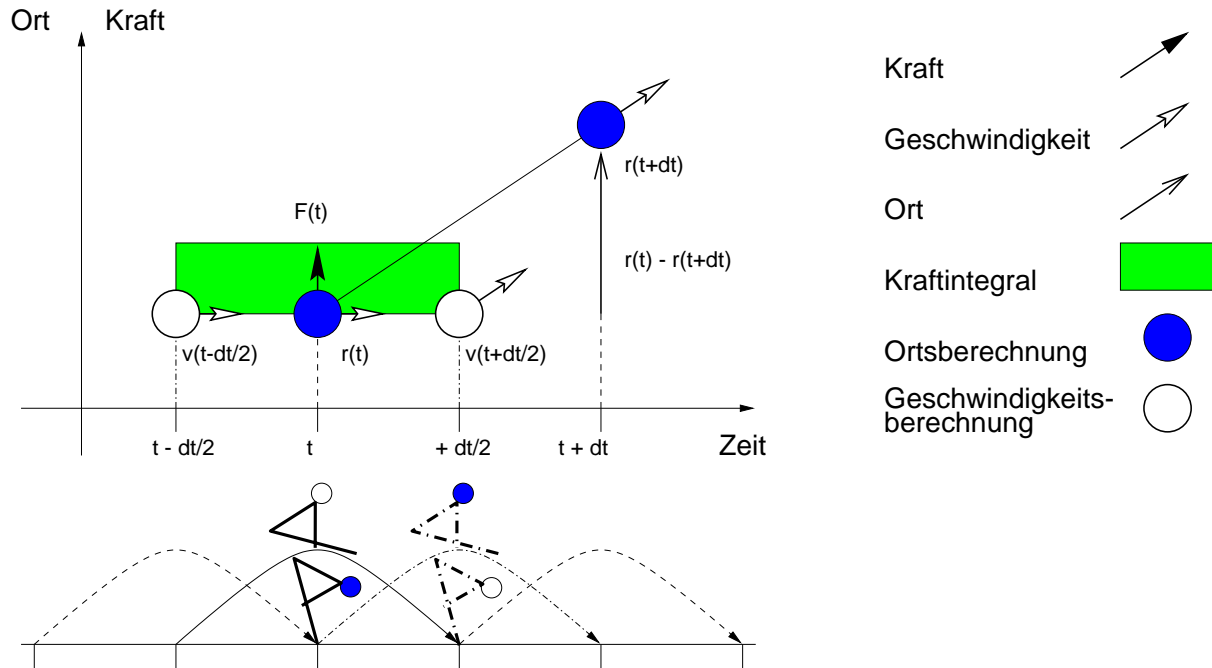


Abbildung 3.2: Der Leap-Frog-Algorithmus. Ort und Geschwindigkeit werden einen halben Zeitschritt versetzt berechnet. Bildlich gesprochen überspringen sich Orts- und Geschwindigkeitsberechnung wechselseitig.

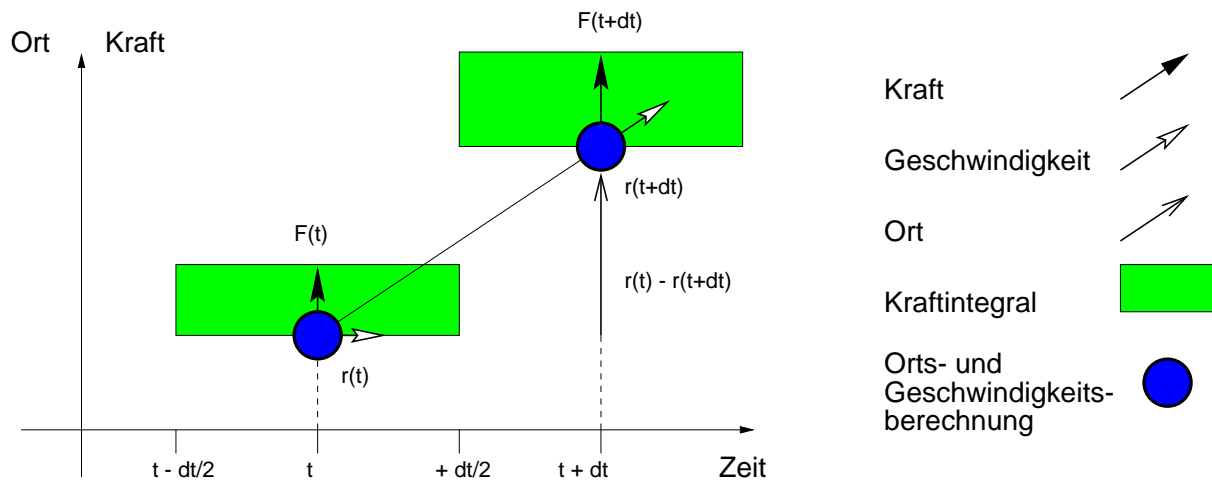


Abbildung 3.3: Der Velocity-Verlet-Algorithmus.

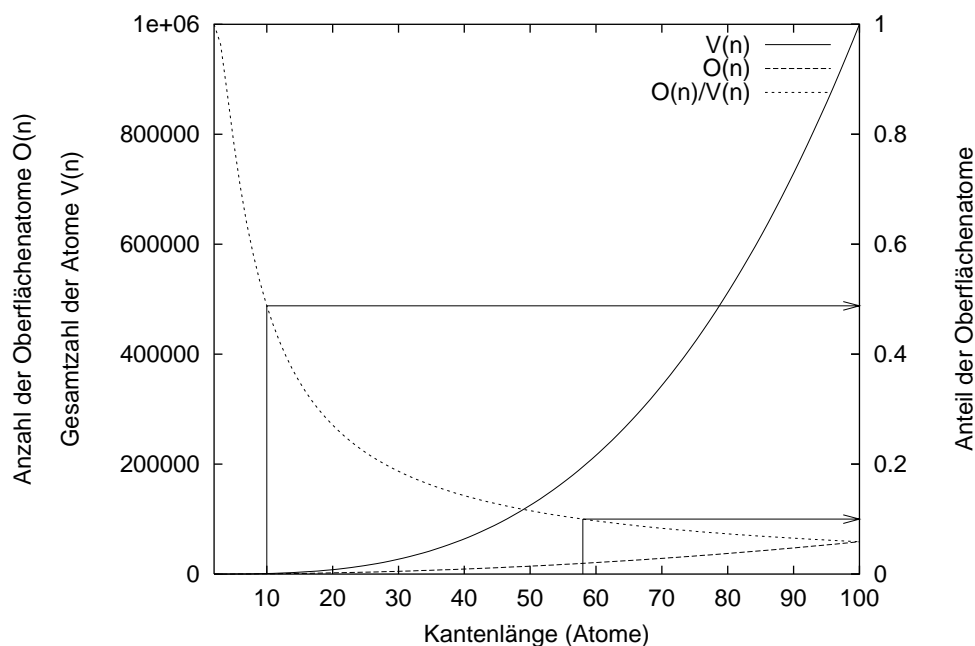


Abbildung 3.4: Anteil der Oberflächenatome bei verschiedenen Kantenlängen  $n$  (in Atomen) des Probenwürfels. Die Gesamtzahl der Atome skaliert mit  $n^3$ , die Anzahl der Oberflächenatome mit  $6n^2 - 12n + 8$ . Bei  $n^3 = 1000$  Atomen sitzen 48 Prozent davon an der Oberfläche. Bei  $n^3 = 1000000$  beträgt der Anteil der Oberflächenatome nur noch 6 Prozent.

### 3.2.3 Periodische Randbedingungen

Wie bereits angeführt bewegen sich die simulierbaren Probengrößen im mikroskopischen Bereich (Tab. 3.1). Oberflächeneffekte können daher insbesondere bei kleinen Atomkonfigurationen nicht vernachlässigt werden (Abb. 3.4).

Abhilfe schafft hier der Einsatz von *periodischen Randbedingungen*: Die eigentliche Simulationsbox wird in alle Raumrichtungen periodisch fortgesetzt (Abb. 3.5). Es treten dadurch keine Oberflächeneffekte mehr auf. Dem simulierten System wird jedoch künstlich eine Periodizität aufgeprägt.

### 3.2.4 Optimierungsmethoden

Die Routine zur Kraftberechnung benötigt die meiste Zeit bei MD-Simulationen (etwa 90 Prozent). Bei bis ins Unendliche reichenden Potentialen müßte man bei jedem Simulationsschritt die Wechselwirkung mit allen anderen Atomen in der Simulationsbox berechnen. Aus praktischen Erwägungen modifiziert man das Wechselwirkungspotential so, daß es in einem Abstand  $r_{\text{cutoff}}$  stetig differenzierbar zu null wird. Dadurch müssen nur Wechselwirkungen mit Atomen innerhalb einer Kugel mit diesem Radius bei der Kraftberechnung berücksichtigt werden.<sup>12</sup>

<sup>12</sup>Das Wechselwirkungspotential muß für große  $r$  schneller als  $\frac{1}{r^2}$  abfallen.

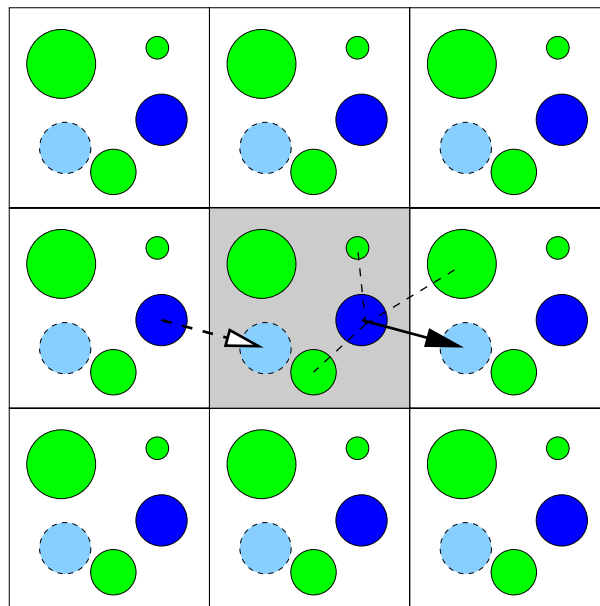


Abbildung 3.5: Periodische Randbedingungen. Die eigentliche Simulationsbox ist in allen Raumrichtungen von Abbildern ihrer selbst umgeben.

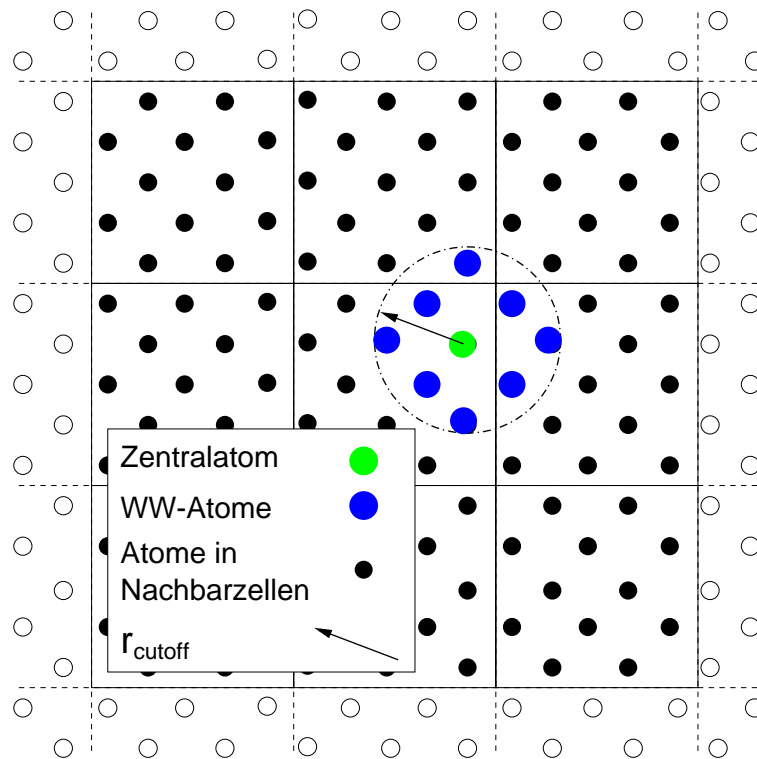


Abbildung 3.6: Im Linked-Cell-Verfahren läuft die Schleife zur Kraftberechnung nur über die eigene und alle angrenzenden Zellen. Teilchen innerhalb  $r_{\text{cutoff}}$  wechselwirken miteinander.

Zu beachten ist hierbei die *Minimum Image Condition*: Die Simulationsbox muß mindestens doppelt so groß wie der maximale Wechselwirkungsradius  $r_{\text{cutoff}}$  sein, da ansonsten das Teilchen mit seinem eigenen Abbild in den Nachbarzellen wechselwirkt.

Doch welche Atome befinden sich im Wechselwirkungsabstand? Die Simulationsbox wird in Zellen eingeteilt, wobei die Kantenlänge etwas größer als  $r_{\text{cutoff}}$  gewählt wird. Bei jedem Simulationsschritt läuft die Schleife über alle Atome in der eigenen und in allen Nachbarzellen. Die Kraft wird nur für Atome innerhalb  $r_{\text{cutoff}}$  berechnet. In regelmässigen Intervallen werden dann die Atome in den einzelnen Zellen neu sortiert.<sup>13</sup> Dieser Algorithmus wird *Linked-Cell* bezeichnet und hat den großen Vorteil, daß damit der Zeitbedarf einer Simulation linear mit der Probengröße skaliert (Abb. 3.6).

Der Linked-Cell-Algorithmus läßt sich trivial parallelisieren.<sup>14</sup> Die Zellen werden auf die vorhandenen CPUs aufgeteilt, wobei die Zellenanordnung im physikalischen Raum mit der Topologie der CPU-Vernetzung in der Computer-Hardware übereinstimmen sollte, da nur benachbarte Zellen Atome austauschen — und damit auch auf benachbarten CPUs beheimatet sein sollten. Wandert ein Teilchen von einer Zelle zur nächsten, so wird es auf den entsprechenden Prozessorknoten verschoben.<sup>15</sup>

### 3.2.5 Integratoren

Die MD-Integratoren sind für das Einhalten der gewünschten physikalischen Randbedingungen verantwortlich (Tab. 3.4).<sup>16</sup>

### 3.2.6 Anfangsproblematik

Sowohl die Ausgangskonfiguration als auch die Wechselwirkungspotentiale sind in vielen Fällen nur empirisch bekannt bzw. folgen aus theoretischen Modellen. Die Ausgangskonfiguration stellt also — unter den verwendeten Potentialen — nicht den relaxierten Zustand dar.

Zu Beginn der Simulation versuchen die Atome unter den gegebenen Paarpotentialen die energetisch günstigsten Positionen einzunehmen. Zum Teil wird zu diesem Zweck eine mikrokonvergente Simulation (MIK) durchgeführt, doch entzieht dieser Algorithmus derart schnell alle vorhandene Bewegungsenergie, daß praktisch jede Konfiguration in ihrer Ausgangsstruktur erhalten bleibt. Anderson-Simulationen (AND) bei konstanter und niedriger Temperatur mit nicht allzu kurzer Dauer liefern bessere Ergebnisse: Die Atome haben mehr Zeit und genügend Bewegungsenergie zum Relaxieren.

Die relaxierte Konfiguration ist anschließend Ausgangspunkt für längere mikrokanonische Simulationen mit dem NVE-Integrator.

---

<sup>13</sup>Dies erfolgt typischerweise alle 100 – 1000 Zeitschritte.

<sup>14</sup>Parallelrechner besitzen mehrere Prozessorknoten. Damit ein Programm diese Architektur ausnutzen kann, muß sich der Programmablauf in unabhängige Unterprozess aufgespalten lassen.

<sup>15</sup>Bis auf einige Feinheiten hat man damit den Programmcode parallelisiert.

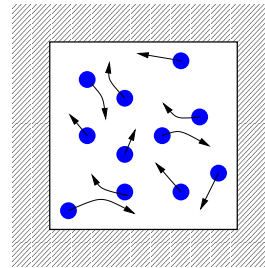
<sup>16</sup>Zum Beispiel muß die Geschwindigkeitsverteilung der Atome bei einer Simulation mit vorgegebener Temperatur muß immer einer Maxwell-Verteilung entsprechen.

**Mikrokanonisches Ensemble (NVE)**

Erhaltung von *Teilchenzahl, Volumen, Energie*.

Reskalierung der Teilchengeschwindigkeiten zur Erhaltung der Gesamtenergie. Die Teilchentrajektorien entwickeln sich dadurch weitestgehend ohne äußere Eingriffe.

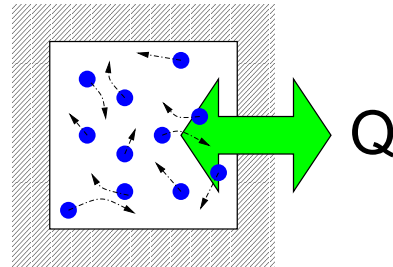
Dieser Integrator ist sehr gut für lange Simulationsläufe einsetzbar.

**Kanonisches Ensemble (NVT)**

Erhaltung von *Teilchenzahl, Volumen, Temperatur*.

Kopplung der Teilchen an ein externes Wärmebad. Dies wird durch Modifikation der Bewegungsgleichungen erreicht. Die Stärke der Kopplung an die einzelnen Teilchen kann eingestellt werden.

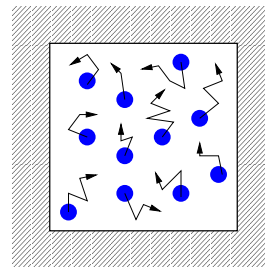
Eine zufriedenstellende Einstellung dieser Kopplungsstärke gestaltet sich jedoch schwierig; die Simulationen können leicht in Schwingungen geraten.

**Anderson-Thermostat (AND)**

Erhaltung von *Teilchenzahl, Volumen, Temperatur*.

Reinitialisierung (neuer Betrag und neue Richtung) der Teilchengeschwindigkeiten für einen Teil der Teilchen in jedem Zeitschritt. Dadurch verlaufen die Teilchentrajektorien stark gestört.

Dieser Integrator läßt sich sehr gut zur Relaxation bei konstanter oder nur leicht veränderlicher Temperatur einsetzen.

**Mikrokonvergenz (MIK)**

Erhaltung von *Teilchenzahl, Volumen*.

Die Teilchen können sich nur in Richtung des *lokalen* Potentialminimums bewegen. Dadurch wird dem System permanent Energie entzogen.

Die Relaxation unter diesem Integrator entspricht einer äußerst schnellen Abkühlung der Konfiguration („Schockfrost“).

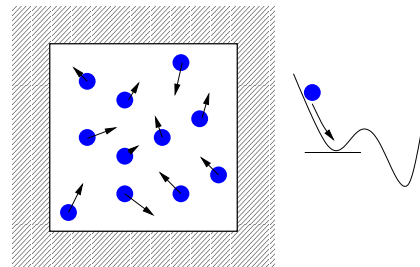


Tabelle 3.4: Beschreibung der Funktionsweise einiger MD-Integratoren.

### 3.3 Visualisierung

Bilder sagen mehr als Worte: Die interaktive zwei- oder dreidimensionale Visualisierung der Atombewegungen ermöglicht eine detaillierte Untersuchung der atomaren Dynamik. Eine typische MD-Simulation liefert über mehrere 100 000 Zeitschritte Position und Geschwindigkeit mehrerer 10000 – 100000 Teilchen. Geht es um die Visualisierung linien- oder flächenhafter Effekte, kann man sich bei der Darstellung auf zwei Dimensionen beschränken. Die Darstellung dreidimensionaler Strukturen gestaltet sich erheblich schwieriger. Bei der Visualisierung von echten Volumeneffekten, wie zum Beispiel der Bewegung aller Teilchen im gesamten Simulationsvolumen, gibt es verschiedene Aspekte zu berücksichtigen:

- Die einzelnen Teilchenarten,<sup>17</sup>
- die sterischen Verhältnisse der Teilchen zueinander,
- der zurückgelegte Weg eines jeden Teilchens,
- der zeitliche Verlauf der Teilchenbewegung,
- charakteristische Teilcheneigenschaften (wie zum Beispiel die kinetische oder potentielle Energie), und
- die charakteristische Teilchenbewegungen (um zum Beispiel große Ortsstabilität oder große Beweglichkeit einzelner Atome besser zu erkennen).

Die Freiheitsgrade zur expliziten Darstellung von Objekten bleiben hinter der Vielzahl der Darstellungswünsche zurück:

- Form
- Größe
- Farbe
- Transparenz

Die Problematik besteht damit sowohl in der Zuordnung der gewünschten Eigenschaften auf die vorhandenen Freiheitsgrade der Darstellung als auch in der Projektion der erzeugten dreidimensionalen Darstellung auf die zweidimensionalen Ausgabemedien.<sup>18</sup> Einen Einblick in die physikalischen Abläufe erhält man daher erst beim interaktiven Betrachten der visualisierten Daten. Die daraus gewonnenen statischen Bilder vermögen leider nicht den vollen Informationsgehalt der visualisierten Daten zu vermitteln.

---

<sup>17</sup>Bei Systemen aus verschiedenen Teilchentypen.

<sup>18</sup>Die verschiedenen Ausgabemedien zeigen eine unterschiedliche Darstellung derselben Daten: Objekte, die auf einem Graphikbildschirm brilliant und kontrastreich erscheinen, können auf dem Ausdruck eines Schwarzweißdruckers kaum zu erkennen sein.



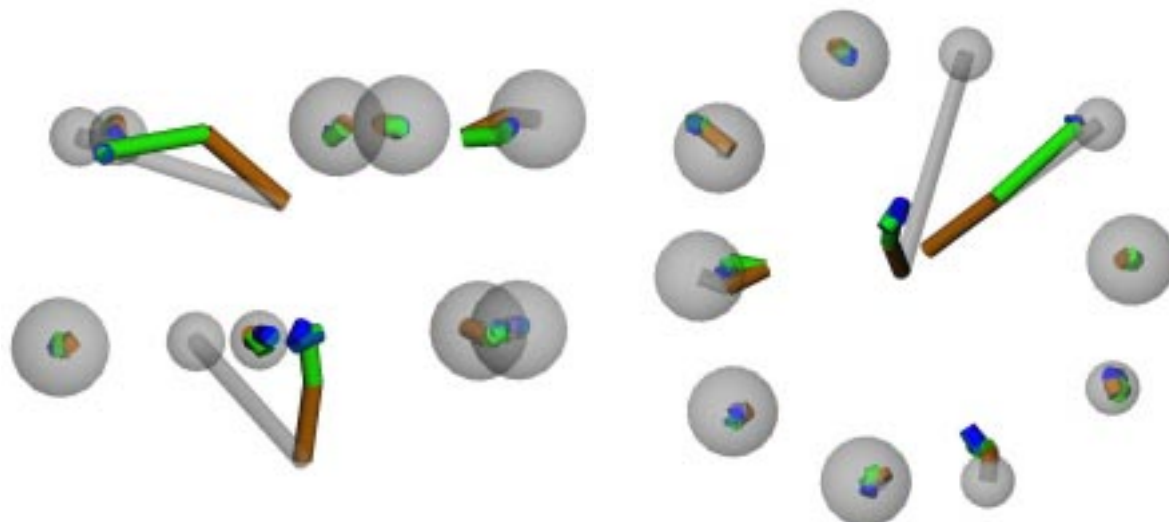


Abbildung 3.7: Visualisierung der einzelnen Teilchenbewegungen. In der Relaxationsrechnung (AND) bewegt sich ein Teilchen auf eine Zwischenschichtposition (hellgrauer Zylinder). Bei der anschließenden mikrokanonischen Simulation (NVE) läuft es zurück in die dekadonale Ebene.

### Darstellung der Teilchenbewegung

Zur Visualisierung der Teilchenbewegungen aller Atome der Konfiguration wird an den Ausgangsort der Atome eine transparente Kugel gesetzt. Über den Kugeldurchmesser ist die Teilchensorte erkennbar. Kleine Kugeln (Radius  $0,3 \text{ \AA}$ ) repräsentieren Aluminiumatome, große Kugeln (Radius  $0,5 \text{ \AA}$ ) repräsentieren Übergangsmetallatome. Ein Zylinder (Radius  $0,1 \text{ \AA}$ ) verbindet aufeinanderfolgende Atompositionen miteinander. Aus der Zylinderfarbe ist die zeitliche Abfolge ersichtlich (Abb. 3.7).

Bei den Darstellungen in dieser Arbeit sind die während der Relaxation (AND) zurückgelegten Wege mit transparenten (hellgrauen) Zylindern dargestellt. Die Zylinderfarbe ändert sich in der mikrokanonischen Simulation (NVE) entsprechend der zeitlichen Abfolge von rot (Anfang) über grün bis blau (Ende).<sup>19</sup>

<sup>19</sup>In der schwarzweißen Darstellung werden rot *und* blau als dunkelgrau abgebildet.



# Kapitel 4

## Simulationen

### 4.1 Der Quasikristall im Computer

Der Einsatz von periodischen Randbedingungen fordert zugleich periodische Randbedingungen der verwendeten Atomkonfiguration. Bei periodischen Randbedingungen lassen sich aperiodische — also auch quasiperiodische und quasikristalline — Strukturen nicht ohne Anschlußprobleme an den Rändern in die Simulationsbox einpassen. Es muß daher eine pseudo-quasikristalline Atomkonfiguration erzeugt werden, welche periodischen Randbedingungen genügt.

Im geometrischen Bild des Schnittformalismus bedeutet dies, daß der irrationale Schnitt durch das Hypergitter durch einen rationalen Schnitt mit der Steigung  $p/q$  approximiert wird (Abb. 4.1).

Bei den quasiperiodischen Dekorationen der beiden Burkov-Modelle und des Burkov-Zeger-Modells für AlCuCo hat der irrationale Schnitt die Steigung  $\tau$ . Zur Erzeugung von rationalen, quasikristallinen Approximanten dieser Modelle werden je nach gewünschter Ausdehnung in der quasiperiodischen Ebene die  $p$ - und  $q$ -Werte vorgegeben (Tab. 4.1).

$p$	$q$	Atome <sup>1</sup>		Ausdehnung (Å)
5	3	68	(136)	$23,2959 \times 19,8167$
8	5	178	(356)	$37,6936 \times 32,0641$
13	8	466	(932)	$60,9894 \times 51,8806$
21	13	1220	(2440)	$98,6827 \times 83,9447$
34	21	3194	(6388)	$159,672 \times 135,825$

Tabelle 4.1: Die Größe quasikristalliner Approximanten des Burkov-Zeger-Modells in Abhängigkeit des Quotienten  $p/q$ . Durch periodische Stapelung der erzeugten Doppelschichten ergeben sich dreidimensionale Atomkonfigurationen.

---

<sup>1</sup>Atome je Schicht (Atome je Doppelschicht).

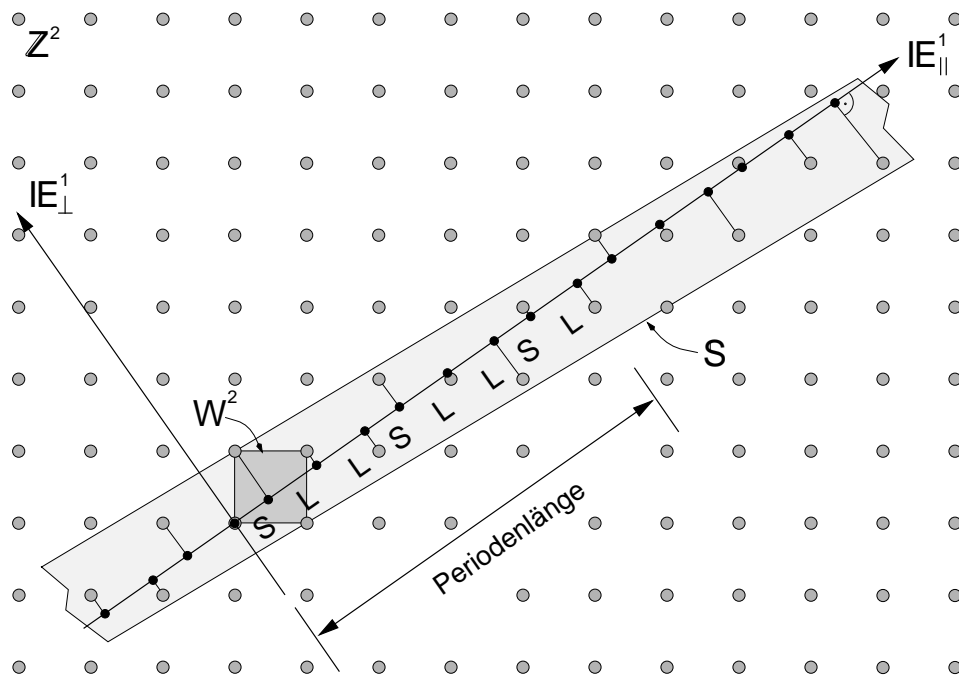


Abbildung 4.1: Durch einen Schnitt mit rationaler Steigung erhält man einen quasiperiodischen Approximanten (aus [8]).

### 4.1.1 IMD

Die Durchführung der beschriebenen MD-Simulationen erfolgte mit IMD – *ITAP Molecular Dynamics* – einem Programmpaket, dessen Gerüst ursprünglich von Stadler [26] geschrieben, inzwischen um viele Funktionen erweitert und ergänzt worden ist. IMD läuft sowohl auf gewöhnlichen UNIX-Workstations mit RISC-Prozessoren<sup>2</sup> als auch auf massivparallelen Hochleistungsrechnern. Es verwendet den Leap-Frog-Algorithmus und setzt zur Geschwindigkeitsoptimierung das Linked-Cell-Verfahren ein. Verschiedene MD-Integratoren sind implementiert.

### 4.1.2 Verwendete Approximanten

Einige Testsimulationen erfolgten mit einem  $5/3$ -Approximanten aus 5 Doppelschichten und insgesamt 680 Atomen. Dieser Approximant wird im folgenden mit **aprox1** bezeichnet. Seine geometrischen Abmessungen betragen  $23,30 \text{ \AA} \times 19,82 \text{ \AA} \times 20,90 \text{ \AA}$ .

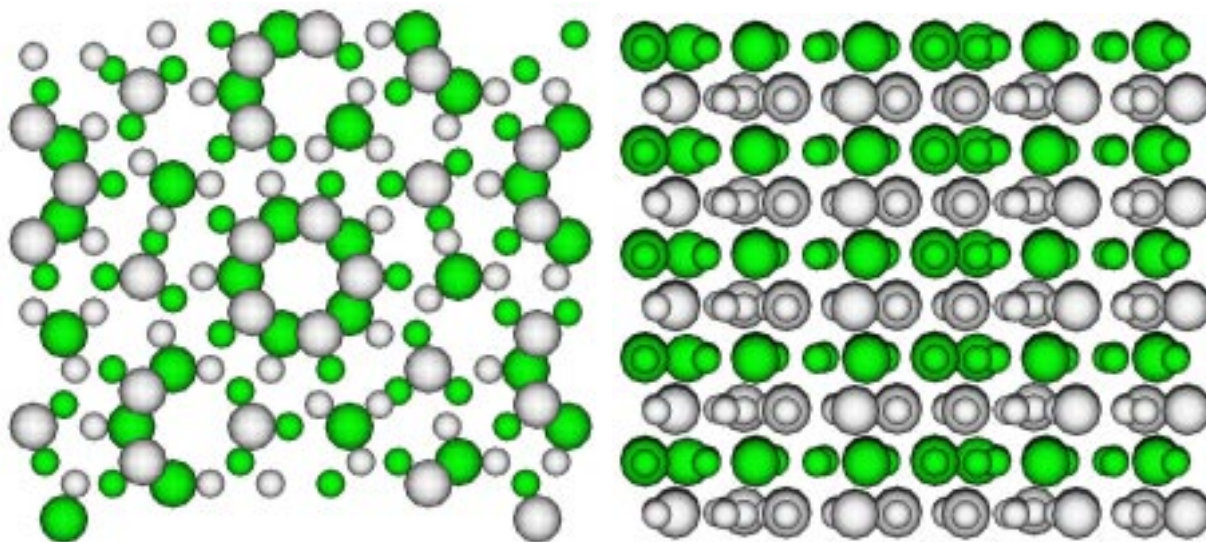


Abbildung 4.2: Aufsicht und Seitenansicht des kleinen Approximanten **aprox1**. Die Atome sind in den quasikristallinen Ebenen weniger dicht angeordnet als in der dekadagonalen Achse (Radius der Al-Atome:  $0,6 \text{ \AA}$ , Radius der TM-Atome:  $1,0 \text{ \AA}$ ).

Die meisten Simulationen wurden unter Verwendung eines  $13/8$ -Approximanten aus 15 Doppelschichten mit insgesamt 13980 Atomen durchgeführt. Dieser Approximant wird im folgenden mit **aprox2** bezeichnet. Dieser Approximant entspricht einem simulierten Probenwürfel mit einer geometrischen Abmessung von  $60,99 \text{ \AA} \times 51,88 \text{ \AA} \times 62,70 \text{ \AA}$ .

---

<sup>2</sup>*Reduced Instruction Set Computer*: Prozessor mit reduziertem Befehlssatz. Der Prozessor ist auf die Abarbeitung einiger weniger Befehle optimiert.

### 4.1.3 Potential

Das Paarpotential für die MD-Simulationen an den AlCuCo-Approximanten stammt von MIHALKOVIČ *et al.* [21]. Es ist für aluminiumreiches ikosaedrisches AlMn optimiert und zeigt für die TM-Atome stark ausgeprägte weitreichende Friedel-Oszillationen (Abb. 4.3). Zur Optimierung der Rechengeschwindigkeit ist  $r_{\text{cutoff}}$  zu etwa 6 Å gewählt.<sup>3</sup> Es zeigte sich in den Simulationsläufen, daß dieses Potential gut für die Simulation von AlCuCo geeignet ist. Die Atomschichten erweisen sich als weitestgehend stabil. Die Struktur von Beugungsbild und radialer Dichtefunktion bleiben erhalten. Vergleichssimulationen mit einem Lennard-Jones-Potential (Abb. 4.4) zeigen eine sehr viel stärkere Atombewegung.

## 4.2 Detektion von phasonischen Flips

Nach dem Burkov-Zeger-Modell sollten phasonische Flips im Tiling auftreten. Durch den Flip ändern sich die Umgebungen der geflippten Atome auf charakteristische Weise. Dadurch lassen sich phasonische Flips aus Sicht der flippenden Atome durch charakteristische Umgebungsänderungen bestimmen. Im folgenden werden Grundlagen und Implementation eines Detektors erläutert, der dies verwendet, um Flips durch *Änderungen in der atomaren Nachbarschaft* der einzelnen Atome zu erkennen.

### 4.2.1 Die atomaren Positionen bei einem Flip

Zur Klassifikation der Atompositionen beim lokalisierten Flip im Zwei-Niveau-Tiling werden zwei verschiedene charakteristische Positionen verwendet (Abb. 4.5):

- Y-Position: Das Atom hat drei Nachbarn im Abstand von 2,46 Å. Die Verbindungsvektoren zu den Nachbarn schließen einen Winkel von 144° oder 72° ein.
- X-Position: Das Atom hat zwei Nachbarn im Abstand von 2,46 Å. Die Verbindungsvektoren zu den Nachbarn schließen einen Winkel von 144° ein.

Aus den verwendeten atomaren Hyperflächen (Abb. 2.5) geht hervor, daß  $\tau^{-2}$  aller Al-Atome auf X-Positionen liegen. Durch Abzählen der flipfähigen Al-Atome auf Umkreispositionen erhält man die Häufigkeit der Y-Positionen in den einzelnen Vertexkonfigurationen (Tab. 4.2).

Flipfähig sind somit  $\tau^{-1}$  aller Al-Atome auf Umkreispositionen. Mit dem gesamten Anteil der Al-Umkreispositionen von  $\tau^{-1}$  kommt man auf  $\tau^{-2}$  flipfähige Al-Atome in Y-Positionen.  $\tau^{-3}$  aller Al-Atome sitzen auf nicht flipfähigen Positionen.

Beim Ablauf eines einzelnen lokalisierten Flips lassen sich die Atombewegungen in verschiedene Klassen einteilen:

---

<sup>3</sup>In [21] gehen die Oszillationen bis zu einem Radius von 10 Å. Dies würde in der MD den 3- bis 4-fachen Rechenaufwand bedeuten.

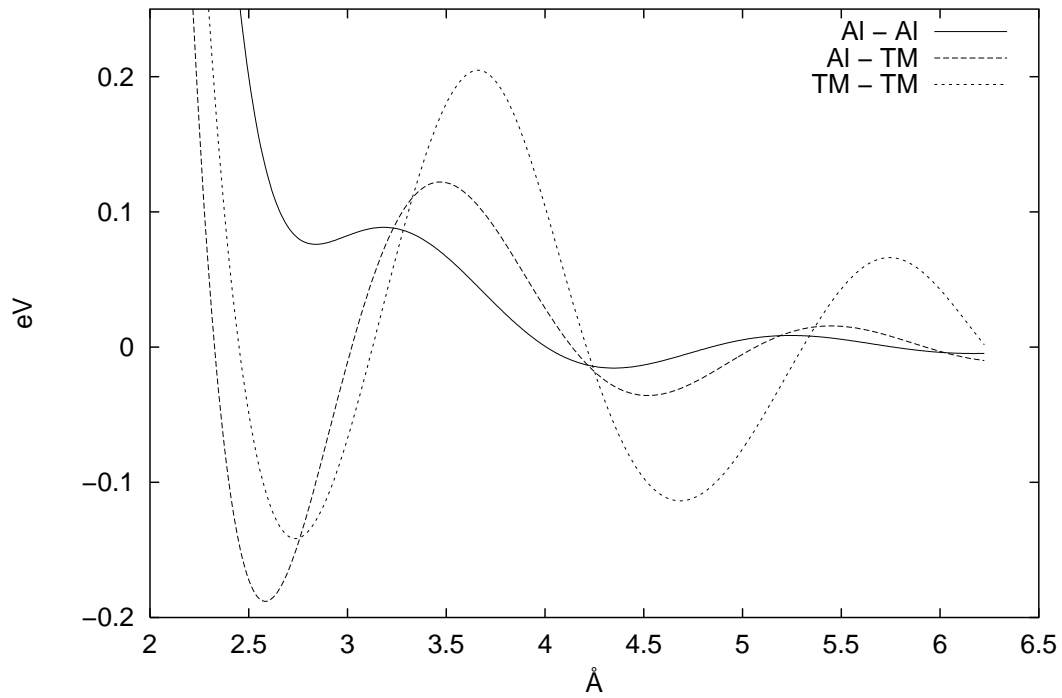


Abbildung 4.3: Das zur Simulation verwendete Paarpotential.

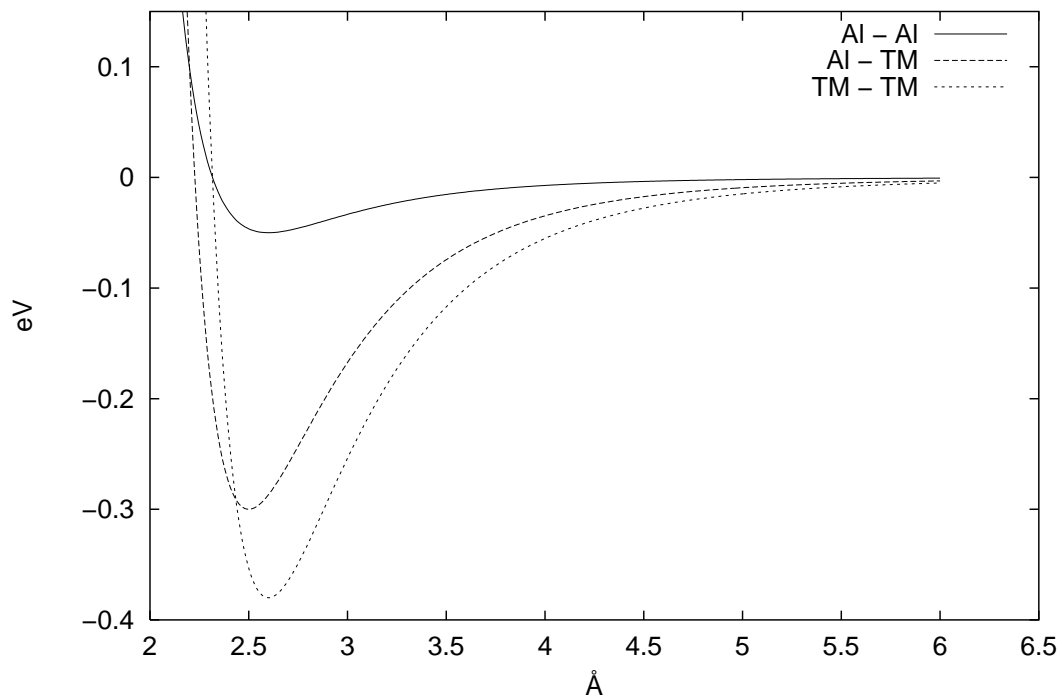


Abbildung 4.4: Das für Vergleichssimulationen verwendete Lennard-Jones-Potential.

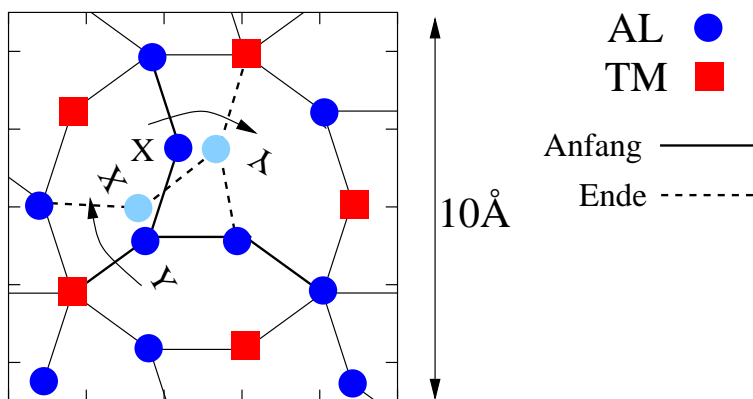


Abbildung 4.5: Im Zwei-Niveau-Tiling gibt es zwei charakteristische Atomumgebungen — die X- und Y-Positionen.

Vertex (Tab. 1.2)	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Anzahl Al-Atome	0	0	0	1	–	2	3	4	5
davon flipfähig	–	–	–	1	–	2	2	1	0

Tabelle 4.2: Anteil der flipfähigen Atome auf Y-Positionen (aus [34]).

- *Exakter Flip*: Beide Atome wandern gleichzeitig. Dabei ändert das eine Atom seine Position von X nach Y und das andere simultan von Y nach X (XY- und YX-Flip).
- *Verzögerter Flip*: Nur ein Atom wandert von seiner ursprünglichen X-Position auf die benachbarte freie X-Position (XX-Flip). Zu einem späteren Zeitpunkt zieht das alte Nachbaratom nach und wandert von seiner X-Position zur benachbarten X-Position. Dadurch ändert sich — ohne daß es sich bewegt — die Position des ersten Atoms von X nach Y.

In beiden Fällen beträgt der von den Atomen jeweils zurückgelegte Weg  $0,94 \text{ \AA}$ . Die resultierende Strukturänderung im Quasikristall ist identisch.

Neben YX-, XY- und XX-Flips können auch YY-Flips auftreten: Das Atom wandert von einer Y-Position auf eine benachbarte Y-Position.

## 4.2.2 Implementierung in IMD

Zur Detektion dieser Atombewegungen in den durchgeführten Simulationen wurde in IMD ein Flip-Detektor implementiert, der nach charakteristischen Änderungen der Umgebung eines jeden Atoms während des Simulationslaufs sucht (Abb. 4.7). Beim Auftreten eines Flips werden die gewünschten Flip-Daten ausgegeben.<sup>4</sup>

<sup>4</sup>Dies sind im wesentlichen: Atomnummer; Start- und Stoppzeit; Atomnummer der Nachbaratome; Flip-Typ; Weg(Vektor): Seit Simulationsbeginn, seit letztem Flip, seit Beginn des aktuellen Flips.



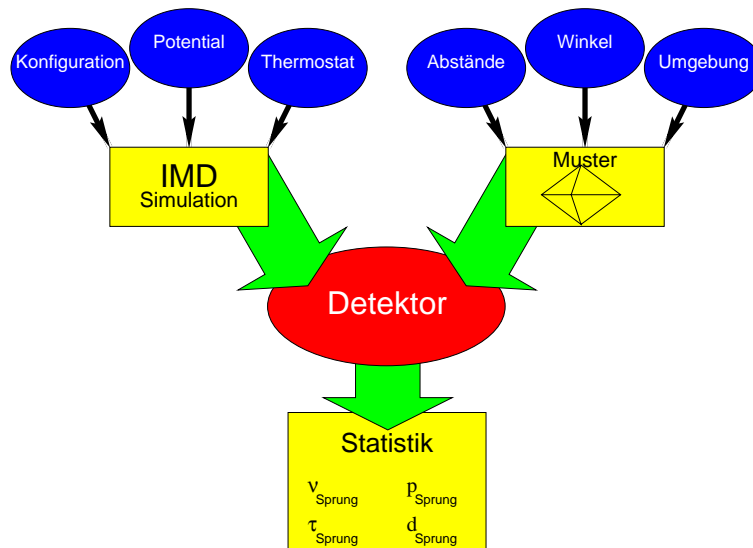


Abbildung 4.6: Der Flip-Detektor. Auf Basis des bestehenden Simulationsprogramms sollen phasonische Flips in dekadagonalen Quasikristallen aufgefunden werden. Aus den detektierten Ereignissen lassen sich statistische Größen über das Flipverhalten der Atome gewinnen.

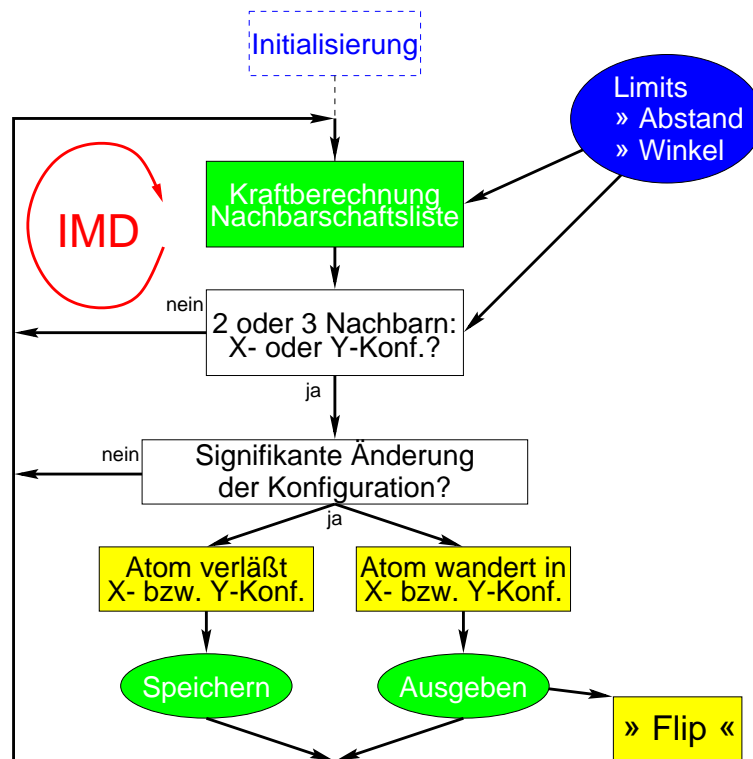


Abbildung 4.7: Funktionsschema des Flip-Detektors. Änderungen in der Nachbarschaftsumgebung sind das Kriterium zur Detektion der Flips.

Die Umgebungskonfiguration (X- oder Y-Position) des Atoms wird über die Verbindungsvektoren zu den nächsten Nachbarn in derselben quasikristallinen Ebene bestimmt (vgl. Abb. 4.5).

- Besitzt das Atom zwei oder drei Nachbarn in einer Entfernung von  $2,46 \text{ \AA} \pm 0,2 \text{ \AA}$  und
- schließen die Verbindungsvektoren einen Winkel von  $72^\circ$  oder  $144^\circ$  ein,

dann befindet sich das Atom bei zwei Nachbarn auf einer X-Position, bei drei Nachbarn auf einer Y-Position.

Ist das Atom in einer X- oder Y-Position, wird seine Umgebung (Nachbaratome, Abstände, Zeitpunkt, aktuelle Position) gespeichert. Ändert sich die Umgebung des Atoms dahingehend, daß es die aktuelle X- oder Y-Position verläßt, so wird dies ebenfalls gespeichert. Eine Ausgabe der gespeicherten Daten erfolgt erst, wenn das Atom erneut auf eine X- oder Y-Position wandert, wobei das Atom dabei absolut um mindestens  $0,5 \text{ \AA}$  gewandert sein muß.

### 4.2.3 Toleranz

Selbst wenn die Atome sich im Idealfall exakt nach dem theoretischen Phasonenmodell bewegen, sind immer thermische Fluktuationen der Atombewegung überlagert. Eine gewisse Robustheit gegenüber geringfügigen, nichtsignifikanten Ortsveränderungen der Atome ist daher unabdingbar.

Der Toleranzbereich sollte dabei in der Größenordnung der thermischen Fluktuation der Atome liegen, ist also vom verwendeten Potential, d. h. von der Krümmung in den Potentialminima, abhängig.

	Abstand (Å)	Tiefe (eV)		Breite (Å)	
		abs.	rel.	abs.	bei 0,01 eV
Al – Al	2,84	+0,076	0,012	0,46	0,34
	4,35	-0,016	0,024	1,31	0,63
Al – TM	2,59	-0,188	0,31	1,21	0,18
	4,51	-0,036	0,049	1,39	0,45
TM – TM	2,74	-0,142	0,35	1,33	0,30
	4,68	-0,114	0,18	1,60	0,50

Tabelle 4.3: Abstand, absolute und relative Tiefe sowie absolute Breite und Breite für 0,01 eV der Potentialminima.

Die Toleranzparameter des Flip-Detektors sind:

- Toleranz des Atomabstands:  $\Delta x = 0,2 \text{ \AA}$ .

- Toleranz in der z-Koordinate des Nachbaratoms:  $\Delta z = 0,5 \text{ \AA}$ .
- Winkeltoleranz für X- oder Y-Position:  $\Delta\theta = \frac{\pi}{20} = 9^\circ$ .

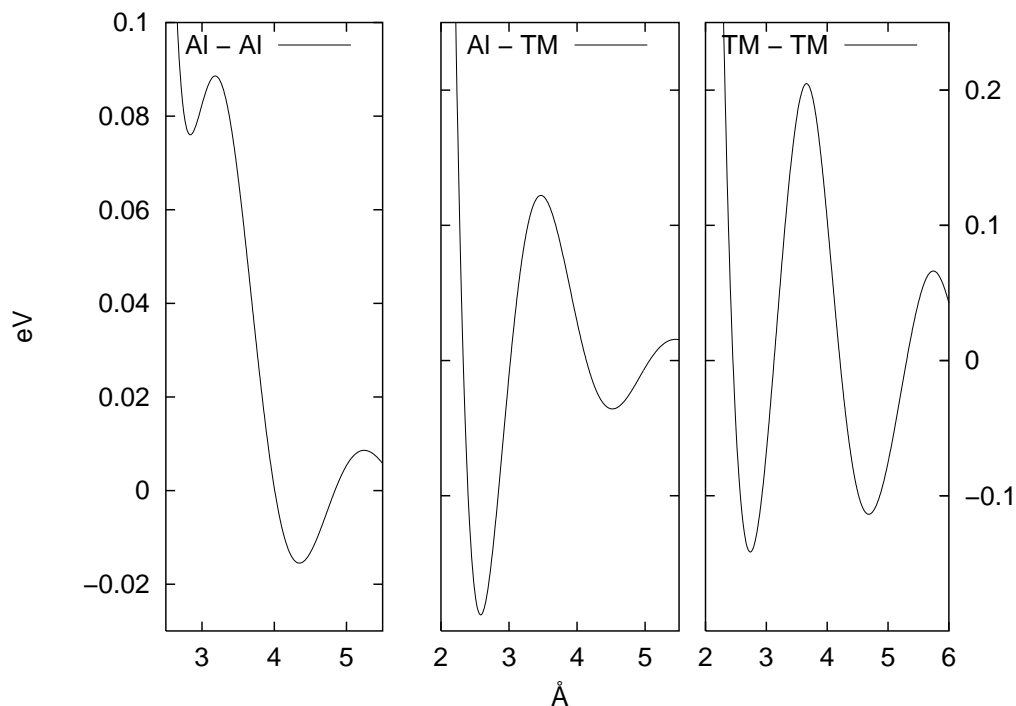


Abbildung 4.8: Abstand und Tiefe der Potentialminima.

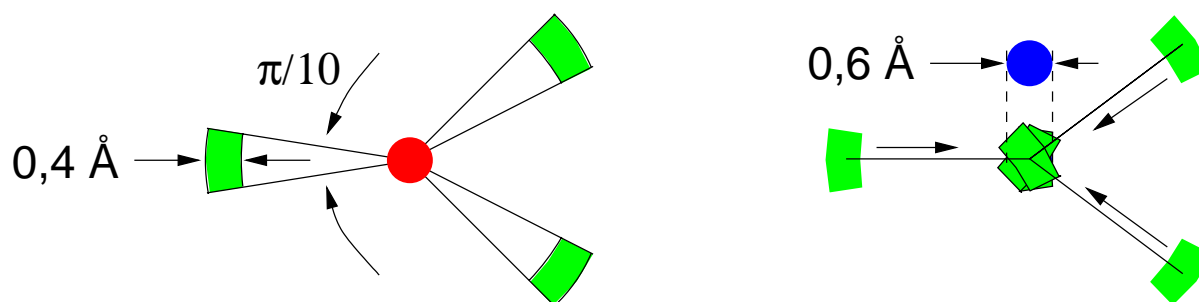


Abbildung 4.9: Toleranzbereich des Flipdetektors.

Mit diesen Werten ergibt sich als Toleranzbereich ein Zylinder von etwa  $0,6 \text{ \AA}$  Durchmesser in der quasikristallinen Ebene und einer Höhe von  $0,5 \text{ \AA}$  (Abb. 4.9). Nach Tab. 4.3 ist der Flip-Detektor bei tiefen Temperaturen hinreichend robust gegen thermische Fluktuationen. Durch den eingebauten Toleranzbereich verschiebt sich der detektierte Weg eines als *ideal* angenommenen Flips zu kürzeren Werten, da das Abwandern aus der alten Position zu spät, und das Eintreffen in die neue Position zu früh protokolliert wird.<sup>5</sup>

<sup>5</sup>Aus diesem Grund ist bei der Auswertung der vom Flip-Detektor erzeugten Daten die Sprungweite

### 4.2.4 Test des Flip-Detektors

Durch Testsimulationen an dem kleinen Approximanten `aprox1` mit 680 Atomen wurde die Funktionsfähigkeit des Flip-Detektors überprüft.<sup>6</sup> Über den gesamten Simulationsverlauf wurden die Atombewegungen manuell nach stattgefundenen Flips untersucht und mit den vom Flipdetektor protokollierten Ereignissen verglichen. Der Flipdetektor erkannte in den Testläufen alle „von Hand“ ermittelten Flips.

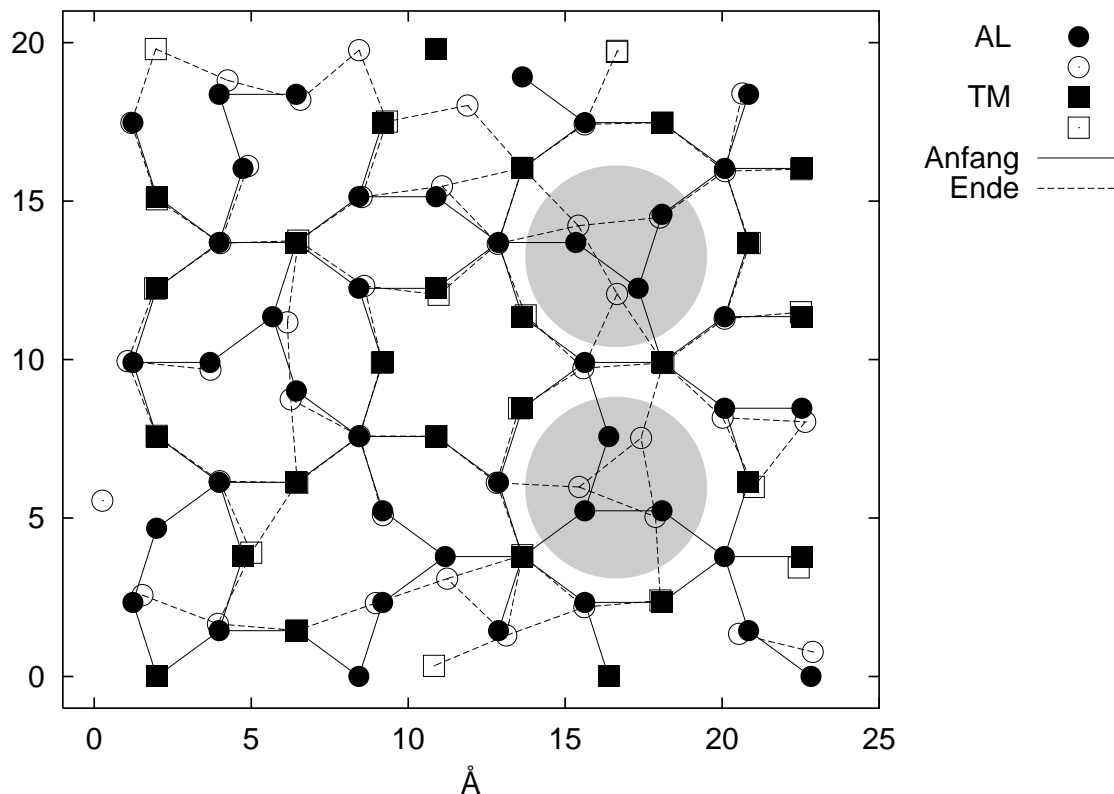


Abbildung 4.10: Eine Ebene des kleinen Testapproximanten `aprox1`. Die Simulationsdauer betrug 50 MD-Zeiten bei  $T=0,01$ . Die detektierten korrelierten idealen Flips sind hervorgehoben. Ausgefüllte Symbole zeigen die Atompositionen zu Simulationsbeginn, leere Symbole die Positionen am Simulationende. Die Änderung der Atompositionen ist mit Abb. 4.5 und Abb. 4.11 zu vergleichen.

etwas zu kleineren Distanzen verschoben. Die ideale Sprungweite wird mit  $0,8 - 1,0 \text{ \AA}$  angesetzt.

<sup>6</sup>Die Parameter zweier Testsimulationen sind in Tab. C.1 zusammengestellt.

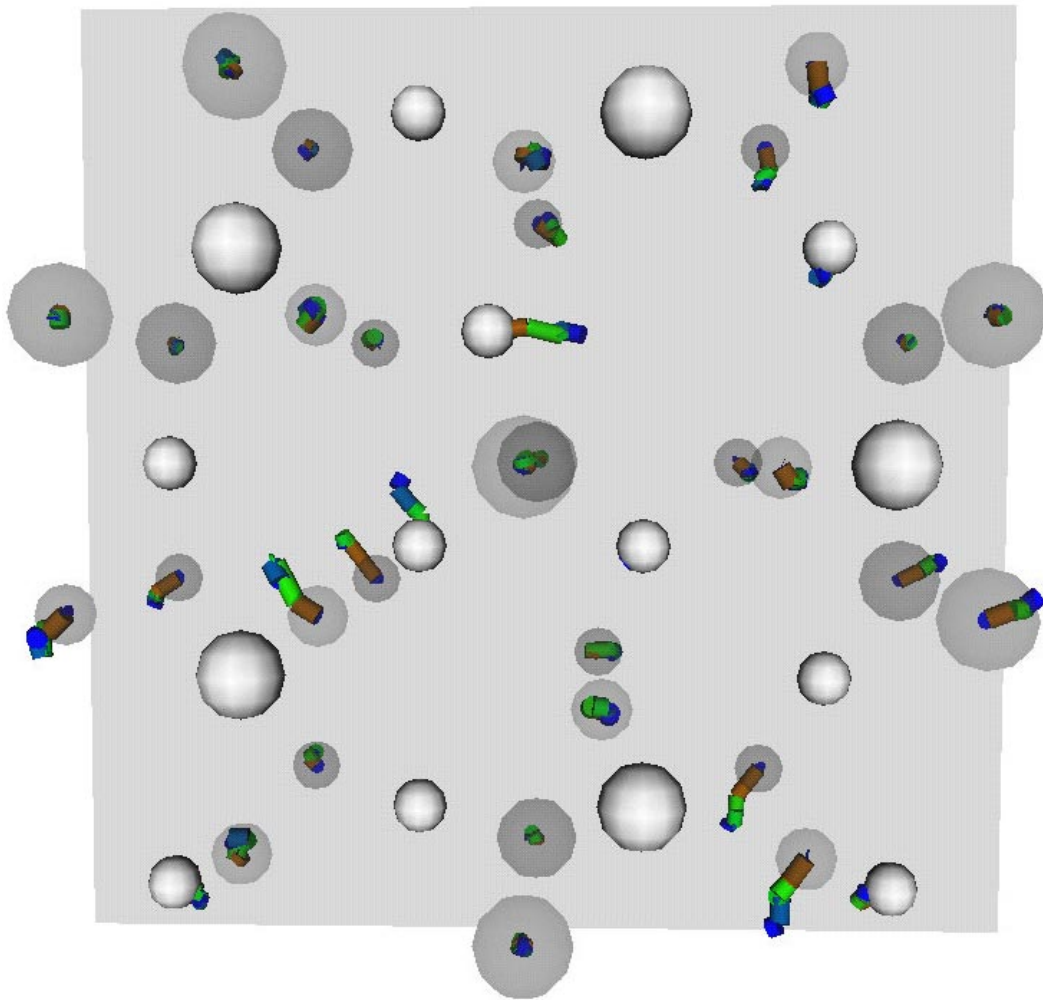


Abbildung 4.11: *Atombewegungen in einer Testsimulation. Die Atome in der Ebene von Abb. 4.10 sind weiß, Atome einer Ebene davor und dahinter sind transparent dargestellt. Der Ausschnitt zeigt den unteren Flip aus Abb. 4.10. Eine Bildfolge der Potentialvisualisierung dieses Flips befindet sich in Anhang B.2.*

## 4.3 Durchgeführte Simulationen

Die Simulationsrechnungen wurden mit unterschiedlichen MD-Integratoren bei verschiedenen Temperaturen durchgeführt. Als Ausgangskonfigurationen dienten Approximanten des Burkov-Zeger- und des Burkov-I-Modells.<sup>7</sup> Die Paarwechselwirkungen erfolgten primär mit dem Potentialsatz von MIHALKOVIČ (Abb. 4.3). Bei einigen Vergleichsrechnungen wurde ein Lennard-Jones-Potential verwendet (Abb. 4.4).

Die Relaxationssimulation mit dem Anderson-Thermostat AND diente der Überführung des Ausgangsapproximanten in ein tieferes Minimum des Konfigurationsraums. Mit der anschließenden NVE-Simulation wurde das Gleichgewichtsverhalten untersucht.

Eine Zusammenfassung der Statistiken befindet sich in Anhang C. Darunter sind in Tab. C.1 die wichtigsten Simulationen zusammengestellt.

### 4.3.1 Anfangsproblematik

Voraussetzungen für ideale Flips sind:

- Die Anordnung der Nachbaratome entspricht im Ausgangszustand dem Modell des idealen Flips.
- Die Anordnung der Nachbaratome entspricht im Endzustand dem Modell des idealen Flips.
- Das Atom selbst ist absolut eine Wegstrecke von  $0,94 \text{ \AA}$  gewandert.

Verwendet man als Ausgangskonfiguration die vorgestellten Approximanten, so ist zu Simulationsbeginn die erste Bedingung auf natürliche Weise erfüllt: Im Ausgangsapproximant sitzen alle Atome auf idealen Positionen. Der Flip-Detektor liefert daher — bei längerer Simulation — für den Beginn signifikant andere Statistiken über das Flipverhalten der Atome als zu späteren Simulationszeiten.

### 4.3.2 Nachträgliche Filterung

Die vom Flip-Detektor gelieferten Ereignisse lassen sich durch nachträgliche Filterung beliebig weiter einschränken. Als Unterscheidungskriterien können herangezogen werden:

- Start- oder Stoppzeit
- Flipdauer
- Weglänge
- Verhalten der Nachbaratome

---

<sup>7</sup>Simulationen mit dem Burkov-II-Modell wurden nicht durchgeführt, da sich das Burkov-Zeger-Modell in der Anordnung der einzelnen Atome nur unwesentlich von Burkov-II unterscheidet.

Betrachtet man zum Beispiel nur Ereignisse, bei denen die Wegstrecke zwischen 0,8 und 1,0 Å liegt und zu einem späteren Zeitpunkt auch eines der Nachbaratome genau die gleichen Kriterien erfüllt, so bekommt man nur dem theoretischen Modell entsprechende korrelierte Atombewegungen extrahiert. Zur näheren Klassifizierung der Flips werden daher zwei weitere Begriffe eingeführt:

- *Ideal* bedeutet: Das Atom hat bei einem Flip einen Weg zwischen 0,8 und 1,0 Å zurückgelegt.
- *Korreliert* bedeutet: Ein Atom und eines seiner Nachbaratome werden zu unterschiedlichen Zeitpunkten detektiert. Nach diesem *korrelierten* Flip sind beide Atome wieder Nachbarn.

Unter der Annahme, daß der Flip-Detektor alle tatsächlichen Flips detektiert und die übrigen Ereignisse zum statistischen thermischen Untergrund gehören, ist das temperaturabhängige Verhältnis aller detektierten Ereignisse, zu den so nachträglich gefilterten Ereignissen der Anteil der idealen phasonischen Flips an der gesamten Atombewegung.





# Kapitel 5

## Ergebnisse

Die Erkenntnisse zur atomaren Dynamik ergeben sich aus mehreren Beiträgen:

- Der Flip-Detektor liefert statistische Daten bezüglich der spezifischen Atombewegungen in phasonischen Flips.
- Durch Vergleich der zurückgelegten Wege zwischen Anfangs- und Endkonfiguration wird die räumliche Orientierung der Atombewegung deutlich.
- Über die Visualisierung der gesamten Atombewegung können korrelierte Bewegungen im Volumen aufgefunden werden.

Eine ausführliche Zusammenstellung aller Simulationsläufe mit verschiedenen Diagrammen zur Auswertung der vom Flip-Detektor gelieferten Daten befindet sich in Anhang C.

### 5.1 Auswertung des Flip-Detektors

Entgegen den Resultaten der Testläufe zeigte sich bei den Produktionsläufen nur eine Häufigkeit von 10 – 15 Prozent an *idealen* Flips (Tab. 5.1). Diese muß in Relation zu den gesamten Atombewegungen gesetzt werden: Der Anteil der um 0,8 – 1,1 Å gewanderten Atome liegt bei 4 – 6 Prozent (Abb. 5.2). Der Anteil der *korrelierten idealen* Flips beträgt bei allen Simulationen etwa 3 Prozent aller Ereignisse.

Aus den detektierten Ereignissen aller Simulationen lassen sich folgende Resultate extrahieren:

- Nach spätestens 1000 MD-Zeiten bleiben die Flipraten auf einem konstanten Niveau (Abb. C.13). Das Temperaturverhalten der Fliprate skaliert mit  $T^{2,7}$  (Abb. 5.1).
- Bei höherer Temperatur werden viele Atome mehrfach detektiert. Etwa 3000 Atome (21 Prozent) zeigen eine außergewöhnlich hohe Flipaktivität (Abb. C.14).
- Die zurückgelegten Wege in den detektierten Ereignissen zeigen bei 1,5 Å ein Minimum (Abb. C.16). Im Histogramm der gesamten Atombewegung (Abb. C.20) ist dies ebenfalls deutlich zu sehen.

Temperatur Integrator	0,01		0,02		0,05		0,10		Test (AND)		0,02 (AND)
	AND	NVE	AND	NVE	AND	NVE	AND	NVE	aprox1	aprox2	burkov1
Flips	160	292	980	2650	12640		85094	190184	7196	2140	459
ideal	0,127	0,110	0,129	0,163	0,179		0,131	0,164	0,54	0,356	0,137
korr.-id.	0,028	0,012	0,012	0,020	0,034		0,026	0,035	0,114	0,148	0,012
Einfachflips	0,158	0,151	0,143	0,047	0,021		0,001	0,000	1,00	0,743	0,084
Atome	13980								680	13980	7540
< 0,5Å	0,965	0,968	0,955				0,733	0,611	0,847	0,825	0,955
0,5 – 0,8Å	0,009	0,006	0,014				0,125	0,082	0,115	0,104	0,012
0,8 – 1,1Å	0,003	0,002	0,005				0,040	0,018	0,012	0,024	0,006
> 1,1Å	0,023	0,024	0,026				0,102	0,289	0,026	0,047	0,027

Tabelle 5.1: Die Ergebnisse des Flip-Detektors. Zum Vergleich ist in der unteren Tabellenhälfte die gesamte Atombewegung in den Simulationen angegeben. Die Anzahl der Flips bezieht sich auf eine effektive Simulationsdauer von 100 MD-Zeiten.

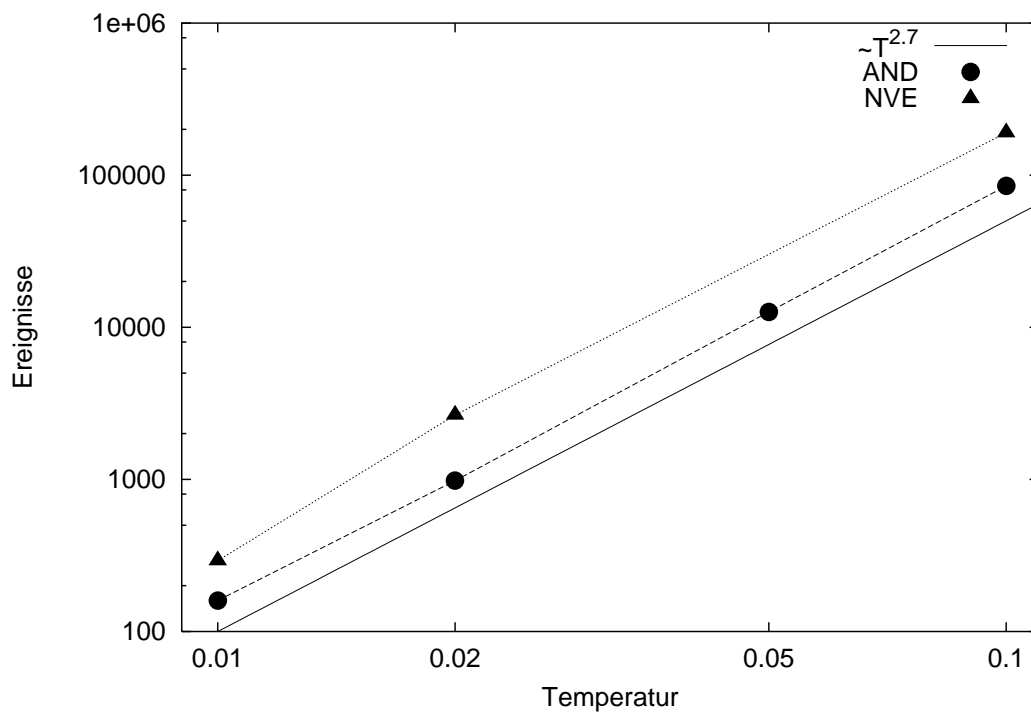


Abbildung 5.1: Die Anzahl der vom Flip-Detektor erfaßten Ereignisse skaliert mit  $T^{2,7}$ .

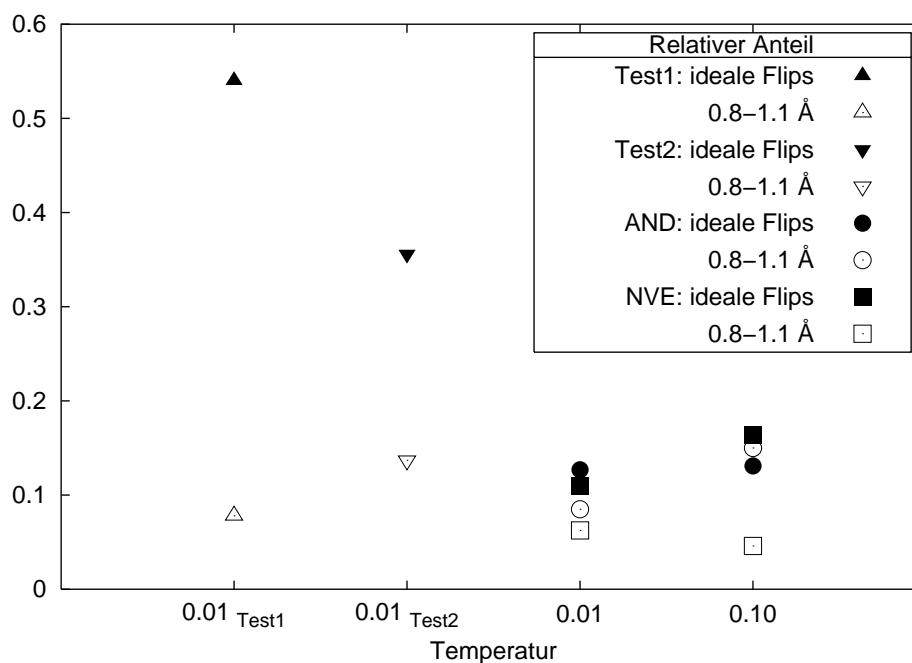


Abbildung 5.2: Vergleich der Ergebnisse des Flip-Detektors mit allen Atombewegungen. Anteil idealer Flips an allen detektierten Ereignissen und Anteil der um  $0,8 - 1,1 \text{ \AA}$  gewanderten Atome an allen mehr als  $0,5 \text{ \AA}$  gewanderten Atomen.

- Die Flip-Dauer (Abb. C.17) zeigt einen exponentiellen Verlauf. Die Ruhezeit zwischen Mehrfachflips (Abb. C.18) folgt einem Potenzgesetz.
- Die Weglängen der vom Flip-Detektor erfaßten Atombewegungen liegen im Vergleich zu allen Atombewegungen signifikant häufiger im Intervall von  $0,8 - 1,0 \text{ \AA}$  (Abb. 5.2).

## 5.2 Bewegungshistogramme

In den räumlichen Bewegungshistogrammen ist die dekadonale Symmetrie deutlich sichtbar (Abb. 5.3). Aufschlußreiche Erkenntnisse ergeben sich aus der Kombination des Bewegungshistogramms mit interaktiven Visualisierungen: Ist eine bestimmte Atombewegung in der Visualisierung häufig zu sehen, so ist diese auch im Histogramm zu erkennen.

Mit der Visualisierung wurden charakteristische Atombewegungen aufgesucht, wie zum Beispiel der Sprung der Al-Atome ins Innere der gemischten Zehnerringe. Aus der atomaren Struktur (Abb. C.2 und Abb. C.3) geht hervor, daß dieser Sprung mit einer Atombewegung von etwa  $2,5 \text{ \AA}$  verbunden ist. Das Bewegungshistogramm der Atome (Abb. C.20) zeigt — zumindest bei höherer Temperatur — ebenfalls ein ausgeprägtes Maximum in diesem Bereich.

Die Weglängen der korrelierten Atombewegungen in der dekadonalen Achse liegen im Ångström-Bereich. Diese Bewegungen gehen im thermischen Rauschen unter. Sie sind daher auch im Histogramm nicht sichtbar.

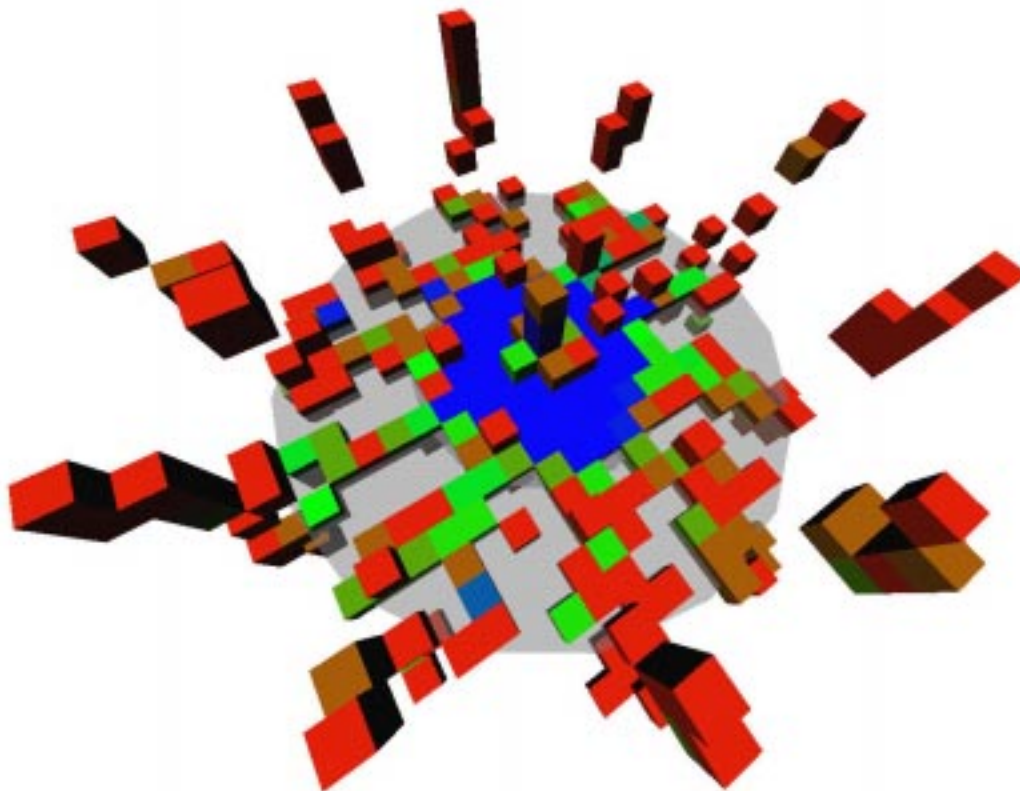


Abbildung 5.3: Weg-Histogramm aller Atombewegungen in dem Simulationslauf bei  $T=0,02$  (perspektivische Ansicht). Die dekadonale Symmetrie zeigt sich deutlich in den bevorzugten Wanderungsrichtungen. Kein Atom wandert mehr als etwa  $2 \text{ \AA}$  in der dekadonalen Achse. Die graue Scheibe hat einen Radius von  $2 \text{ \AA}$ . Die einzelnen Würfel haben eine Kantenlänge von  $0,2 \text{ \AA}$  und zeigen an, daß ein Atom in dieses Raumelement gewandert ist.

### 5.3 Atomare Dynamik

Die beobachteten korrelierten atomaren Bewegungen lassen sich im wesentlichen zwei Arten zuordnen:

- Korrelierte Bewegungen entlang der dekadonalen Achse.
- Korrelierte Bewegungen über zwei quasikristalline Doppelschichten.

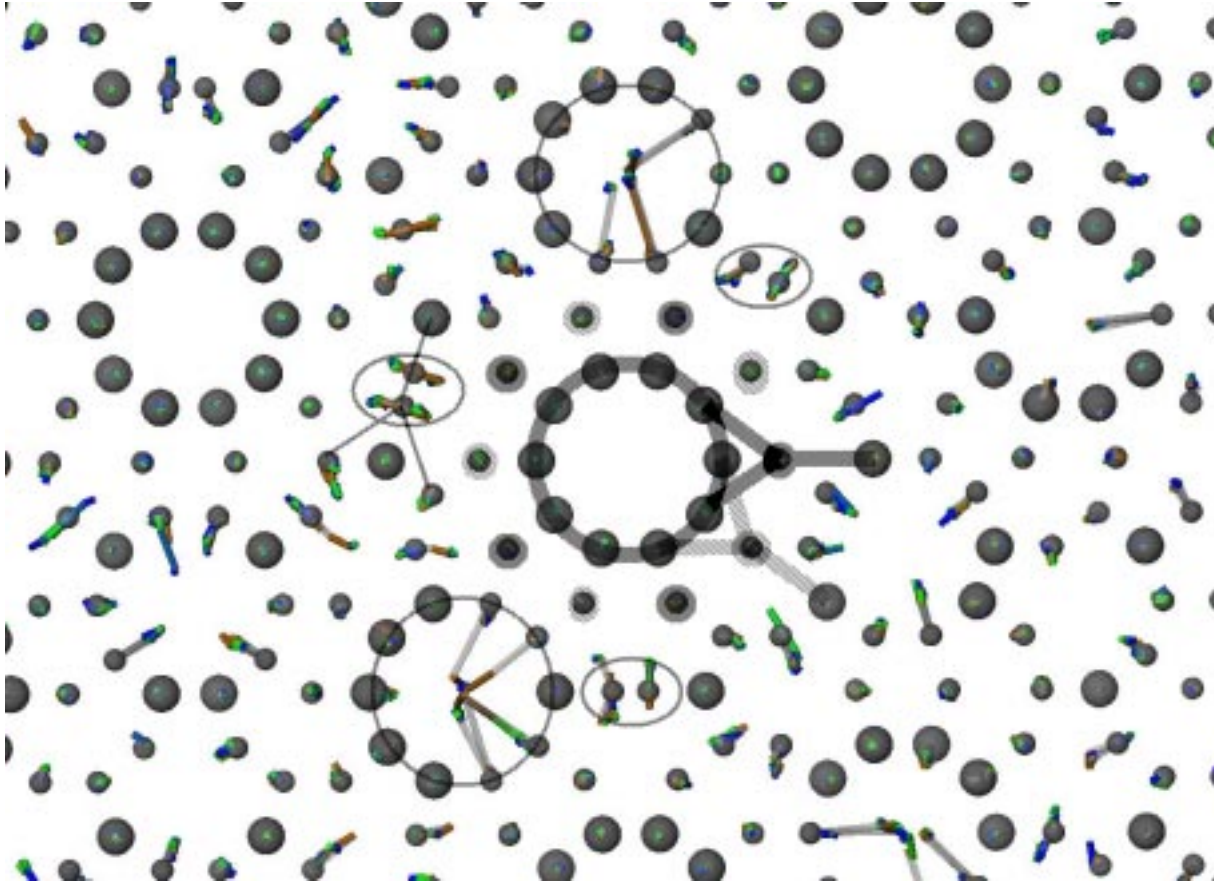


Abbildung 5.4: Zentraler Ausschnitt des Approximanten `aprox2`. Die Atombewegungen sind über den gesamten Simulationslauf eingezeichnet. Al-Atome zeigen eine große Tendenz zur Besetzung der zentralen Position in gemischten Zehnerringen (große dünne Kreise). Die Bewegung der Al-Atome auf den Positionen aus Abb. 2.9 sind ebenfalls überdurchschnittlich groß (kleine dünne Ellipsen). Die TM-Zehnerringe (Abb. 2.10) bleiben äußerst stabil (großer dicker Kreis). Auch die Umgebung dieser Zehnerring zeigt eine große Stabilität (dicke Linien).

*Unkorrelierte Bewegungen*, bei denen sich einzelne Atome zwischen ortsfesten Nachbarnbewegungen bewegen, sind — nach erfolgter Relaxation — selten. Entweder ist die Bewegung auf allen äquivalenten Positionen in allen Schichten vorhanden, oder sie hängt mit der Atombewegung in der unmittelbaren Nachbarschicht zusammen. Dies ist auch über sterische Überlegungen einsichtig (Abb. 5.5).

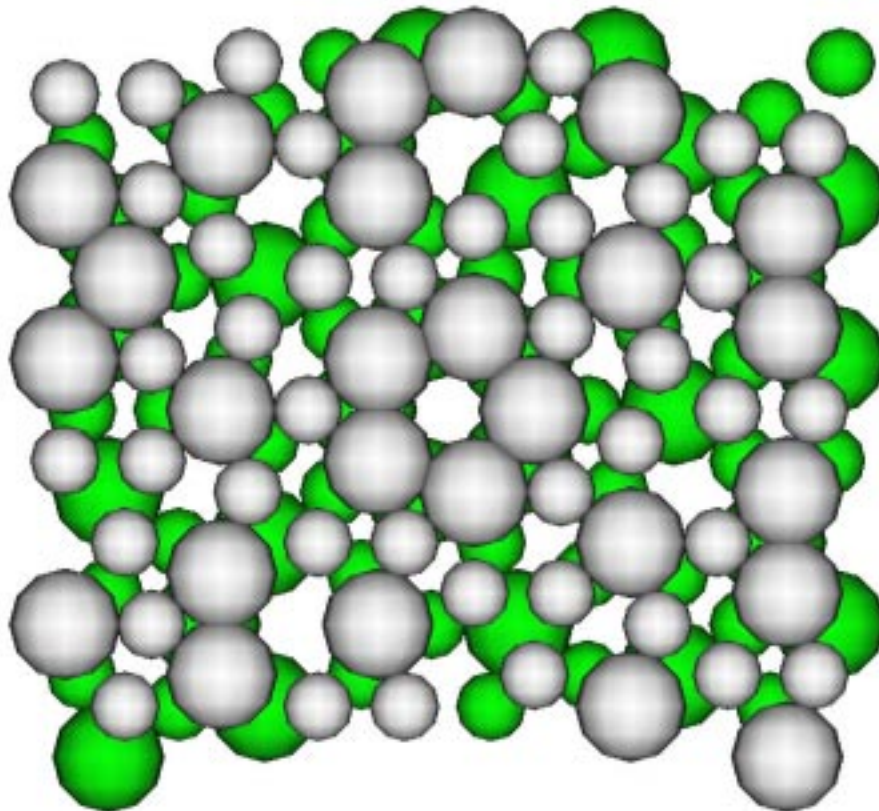


Abbildung 5.5: *Sterische Verhältnisse im untersuchten Quasikristall. Unkorrelierte Bewegungen sind kaum möglich (Radius der Al-Atome: 1,0 Å, Radius der TM-Atome: 1,6 Å).*

Bei den Simulationsläufen erfolgte nach Relaxation über 500 MD-Zeiten anschließend eine mikrokanonische Simulation über 2500 MD-Zeiten. Zusammenfassend läßt sich sagen, daß meist nur Al-Atome ihre Position wesentlich ändern (Abb. C.20). Die TM-Atome bleiben weitestgehend ortsfest.<sup>1</sup> Man könnte sagen, die Al-Atome bilden — je nach Simulationstemperatur — einen mehr oder weniger *viskosen Teilchensee* zwischen einem *Gitter aus TM-Atomen*.

Zu Beginn der Relaxation treten die stärksten und größten Bewegungen auf. Zum Teil wandern alle Atome einer bestimmten Position an einen neuen Ort. Die zehnzähligen TM-Doppelringe bleiben stabil, ebenso die diese umgebenden 10 Al-Atome und die darauffolgenden TM-Atome (Abb. 2.10 und Abb. 5.4). Es zeigt sich eine deutliche Tendenz

<sup>1</sup>Die TM-Atome entfernen sich nicht mehr als etwa 0,5 Å von ihren Ausgangspositionen.

zur Bildung von gemischten Al-zentrierten Zehneringen. Einige Al-Atom wandern aus den Schichtebenen auf Zwischenschichtplätze, bevorzugt in gemischten Ringen. In der mikrokanonischen NVE-Simulation bleiben im Mittel die Atome auf ihren nach der Relaxation eingenommenen Positionen. Auf Zwischenschichtplätzen befindliche Atome wandern zurück in ihre Ausgangsschicht.<sup>2</sup>

### 5.3.1 Bewegungen im Burkov-Zeger-Modell

Eine Vorstellung der atomaren Bewegungen geben Abb. 5.4 und Abb. 5.6 wider. Wie alle folgenden Bilder sind auch diese bei einer Simulationstemperatur von  $T=0,02$  erstellt.<sup>3</sup>

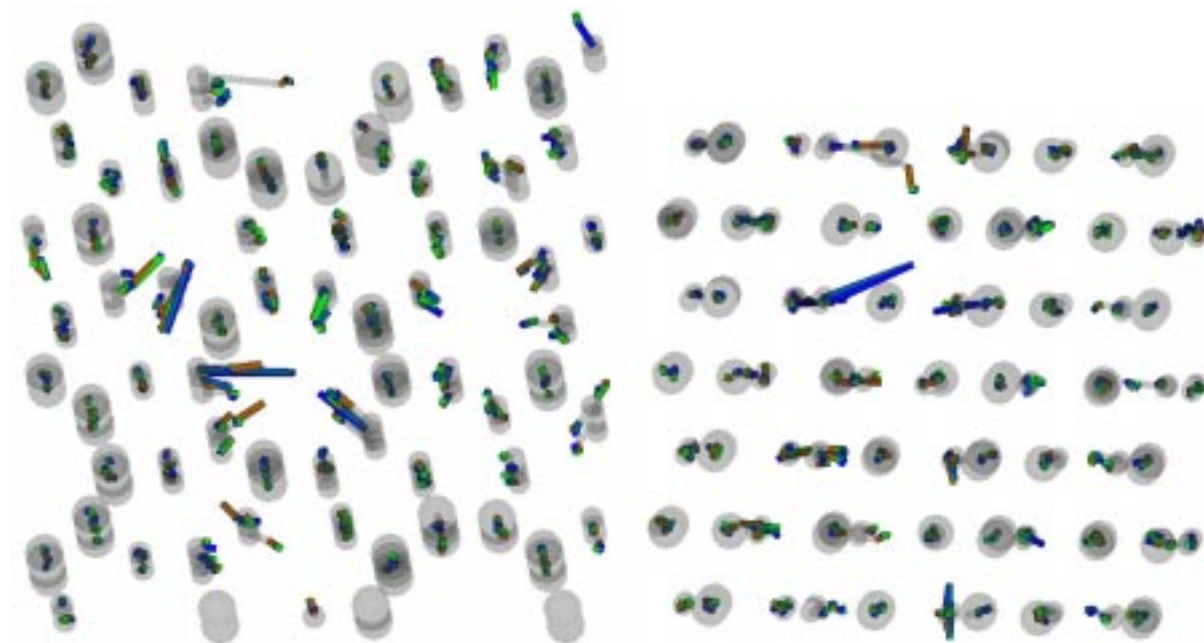


Abbildung 5.6: Kleiner Ausschnitt über drei Doppelschichten. Die Al-Atome wandern in Leerräume. In der frontalen Ansicht sind die atomaren Bewegungen in der quasikristallinen Ebene zu sehen (links). Der seitliche Anblick zeigt, daß es nur wenig Bewegung längs der dekadagonalen Achse gibt (rechts).

#### Bewegungen in der dekadagonalen Achse

Auf einzelnen Positionen bewegen sich *alle* Al-Atome (fast) *aller* Schichten an eine neue Position (Abb. 5.7). In die gemischten Zehneringe aus TM- und Al-Atomen wandern immer Al-Atome der Randpositionen ein. Die eingewanderten Al-Atome zeigen eine große Beweglichkeit entlang der dekadagonalen Achse (Abb. 5.8).

<sup>2</sup>Zur graphischen Darstellung siehe Abs. 3.3.

<sup>3</sup>Die Bilder zeigen die gesamte Atombewegung in dem Simulationslauf AND002 – NVE002.

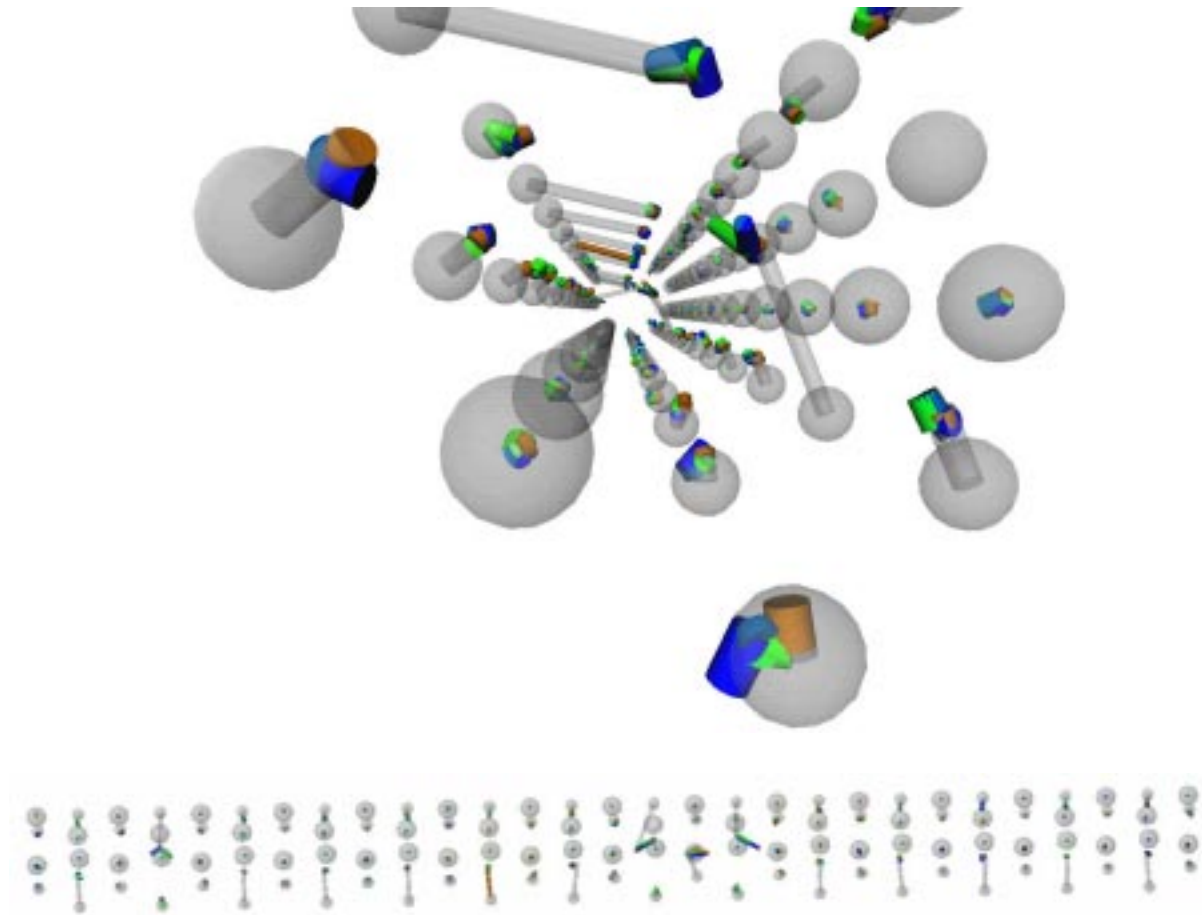


Abbildung 5.7: In diesem Ring springen fast alle Al-Atome aus einer bestimmten Ringposition in das Ringzentrum (siehe Abb. 5.4). Nur Al-Atome einer der beiden Schichten wandern.

Open: Perspektivischer Anblick entlang der dekadonalen Achse.

Unten: Ansicht senkrecht zur dekadonalen Achse.



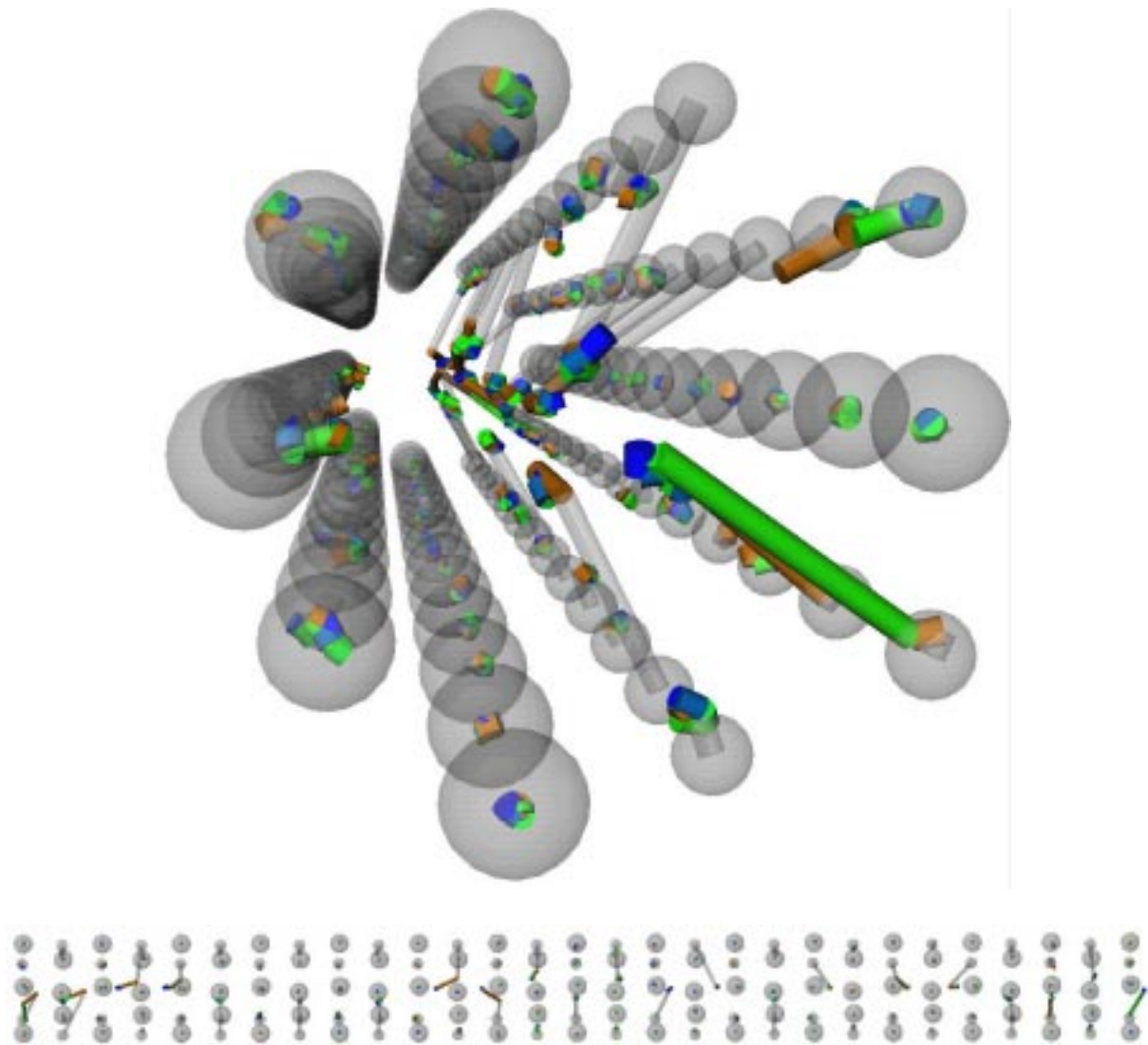


Abbildung 5.8: Zehnerring aus vier Al- und sechs TM-Atomen (siehe Abb. 5.4). Im Mittel springt je Doppelschicht Al-Atom in den Ring. Die bereits eingewanderten Al-Atome zeigen eine große Beweglichkeit in der dekadonalen Achse.

Oben: Perspektivische Ansicht entlang der dekadonalen Achse.

Unten: Ansicht senkrecht zur dekadonalen Achse.

## Bewegungen in quasikristallinen Doppelschichten

Auf bestimmten Positionen bewegen sich die Atome in benachbarten Schichten um  $180^\circ$  phasenverschoben.<sup>4</sup> Die Atome sind in der periodischen Richtung dichter angeordnet als in den quasikristallinen Ebenen (Abb. 4.2). Daraus ergibt sich zwangsläufig die korrelierte Bewegung benachbarter Atome.

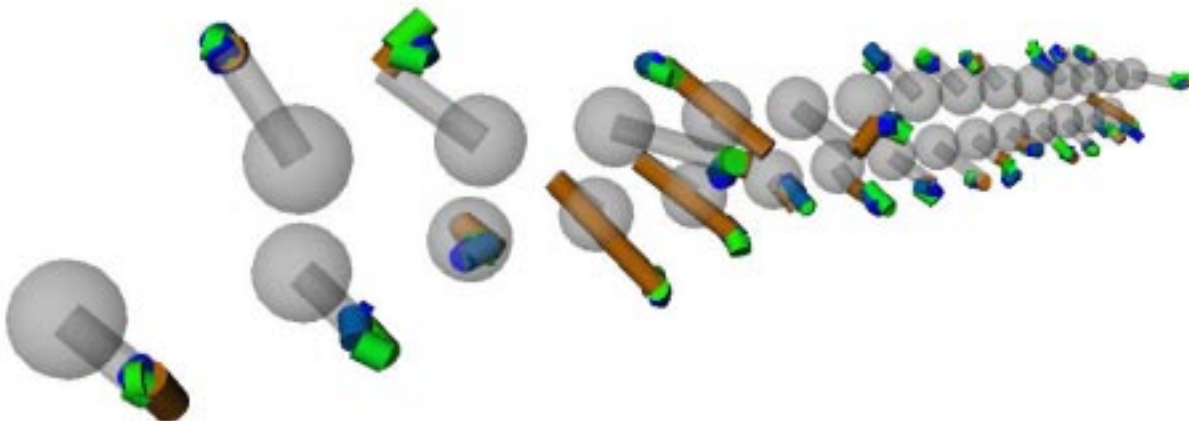


Abbildung 5.9: *Perspektivische Ansicht der Bewegungen benachbarter Atome. Die Atome in aufeinanderfolgenden Schichten verhalten sich um  $180^\circ$  phasenverschoben (siehe Abb. 5.4).*

Die wichtigsten Strukturmerkmale und ihre molekulardynamischen Eigenschaften sind:

- Die zehnzähligen Ringe aus TM-Atomen (Abb. 2.10) bleiben — zusammen mit ihrer Umgebung — äußerst stabil.
- Bei zehnzähligen Ringe mit unterschiedlichem Al/TM-Verhältnis (Abb. 2.11) wandert im Mittel je Doppelschicht ein Al-Atom auf eine neue Position im Zentrum des Rings. Diese Atome zeigen dann eine große Beweglichkeit in der dekadagonalen Achse.
- Entlang der Achsen zwischen den zehnzähligen TM-Ringen bewegen sich die meisten Atome in Schichtebene orthogonal zu diesen Achsen (Abb. 5.10). Diese Achsen stellen sozusagen die Hauptachsen der Atombewegung in der dekadagonalen Ebene des Quasikristalls dar.
- Atome auf den zentralen Positionen aus Abb. 2.9 zeigen eine korrelierte Bewegung mit ihren Nachbaratomen.

---

<sup>4</sup>Der Bewegungsvektor ist entgegengesetzt gerichtet.

Aus diesen Analysen ergeben sich die *stabilen Grundbausteine* im AlCuCo-Quasikristall:

- Zehnzählige Doppelringe aus  $2 \times 5$  TM-Atomen
- Ein Al-Atom in der Mitte von drei TM-Atomen

Sehr instabil sind gemischte zehnzählige Doppelringe, insbesondere wenn es Sektoren ohne TM-Atome gibt. Diese Doppelringe werden stabilisiert, wenn ein Al-Atom in die zentrale Position wandert oder wenn die Peripherieatome einen Kreis um ein zentrales Al-Atom bilden. In diesem Fall wandern auch beteiligte TM-Atome – das Al-Atom schafft sich seinen eigenen Käfig.

### 5.3.2 Bewegungen im Burkov-I-Modell

Wie schon erwähnt sind der wesentliche Unterschied gegenüber Burkov-Zeger — zumindest was die atomare Dynamik in den MD-Simulationen betrifft — die Al-zentrierten Zehner-*ringe*. In den durchgeführten Simulationen am Burkov-Zeger-Modell zeigte sich eine starke Tendenz zur Bildung von Al-zentrierten Zehnerringen.

Diese Struktur ist im Burkov-I-Modell bereits vorhanden. Daher zeigt die Simulation mit dem *burkovI*-Aproximanten unter dem verwendeten Potential *deutlich geringere Atombewegungen* als die am Burkov-Zeger-Modell durchgeführten Simulationen. Dies ist sowohl aus dem Weg-Histogramm (Abb. C.21) als auch in der Darstellung der gesamten Atombewegungen (Abb. 5.10 und Abb. 5.11) ersichtlich.

### 5.3.3 Vergleich der atomaren Bewegungen der beiden Modelle

Eine Gegenüberstellung der in beiden Modellen auftretenden Atombewegungen liefert eine Bestätigung der anhand der Simulationen des Burkov-Zeger-Modells erstellten Stabilitätskriterien. Dargestellt in Abb. 5.10 und Abb. 5.11 sind die Atombewegungen von 7 Doppelschichten über den Lauf der Anderson-Simulationen AND002 bzw. AND002-BI (500 MD-Zeiten,  $T=0.02$ ).<sup>5</sup>

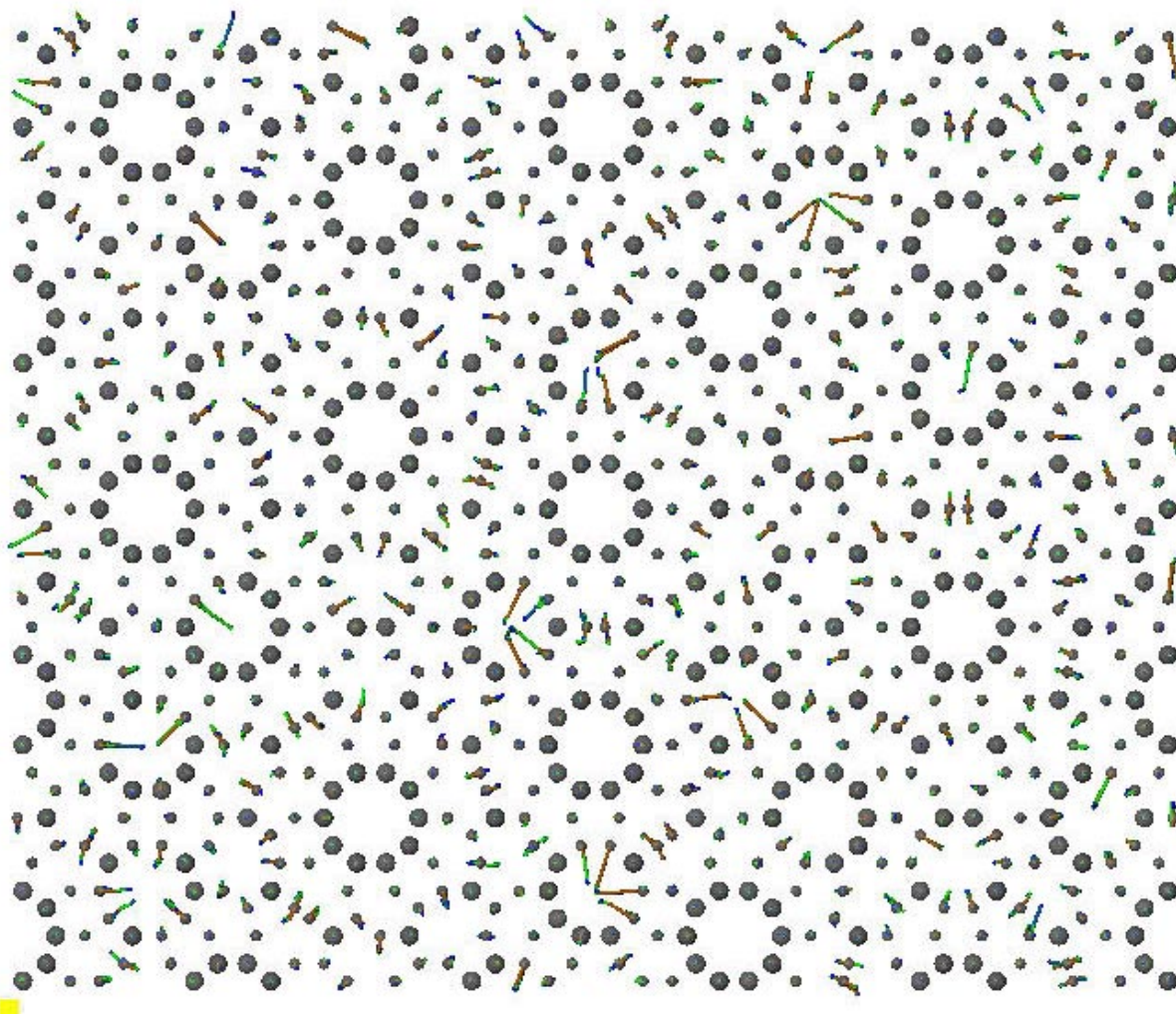


Abbildung 5.10: Atombewegungen im Burkov-Zeger-Modell. Das Bild zeigt die Projektion von 7 Schichten des Approximanten `approx2` entlang der dekadonalen Achse. Die abgebildete Ansicht entspricht einer simulierten Probengröße von  $60 \text{ \AA} \times 50 \text{ \AA}$ .

<sup>5</sup>Die beiden Bilder umfassen jeweils näherungsweise 3500 Atome. Zusammen mit 5 Bewegungsintervallen sind insgesamt etwa 20000 Objekte darzustellen. Damit ist die Grenze der interaktiven Darstellung auf einer gewöhnlichen Graphikworkstation erreicht.

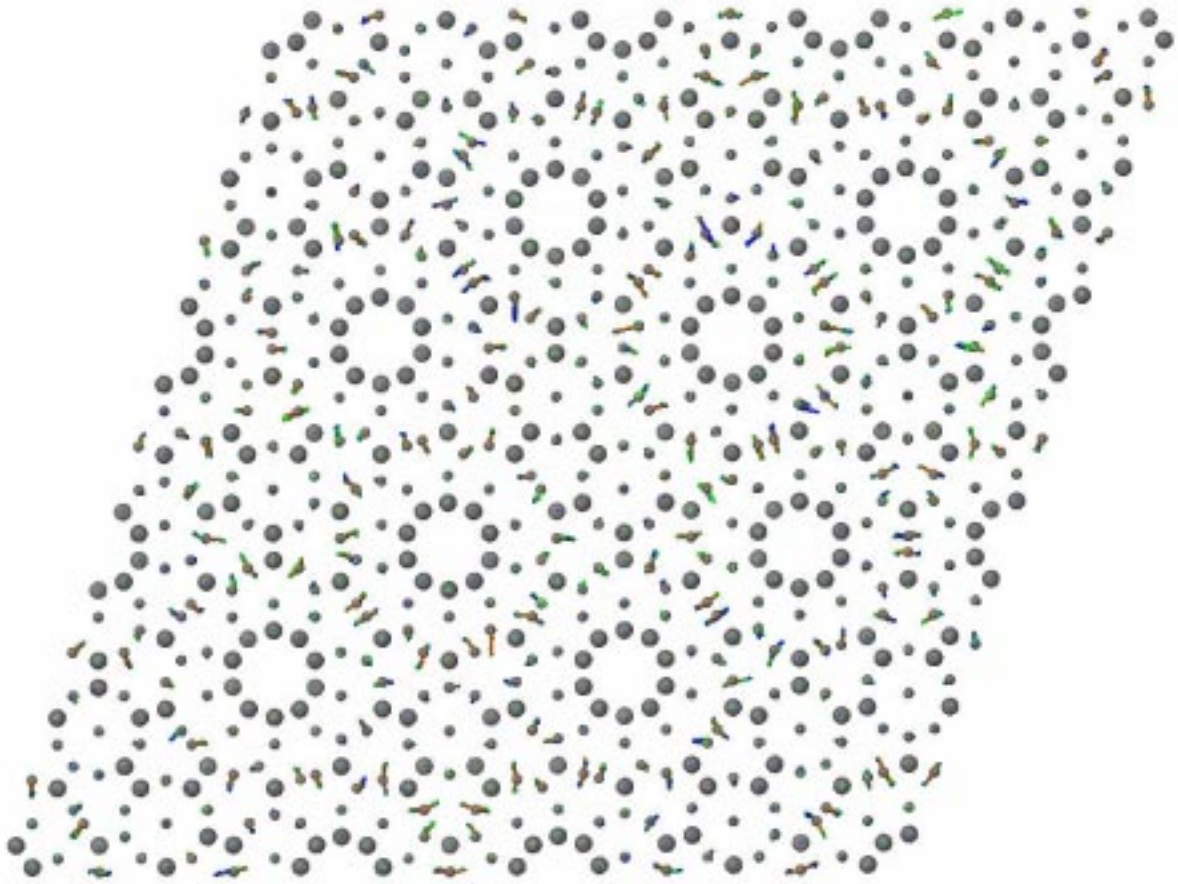


Abbildung 5.11: Atombewegungen im Burkov-I-Modell. Das Bild zeigt die Projektion von 7 Schichten des Approximanten burkov1 entlang der dekadonalen Achse. Die Seitenlänge der abgebildete Raute ist 50 Å.



# Kapitel 6

## Zusammenfassung und Ausblick

Die vorliegende Arbeit hatte die Untersuchung der atomaren Dynamik in dekadonalem AlCuCo mit Hilfe molekuldynamischer Methoden zur Aufgabe.

In den Simulationen wurde das nach ZEGER modifizierte Strukturmodell von BURKOV verwendet. Die Wechselwirkung erfolgte durch radialsymmetrische Paarpotentiale nach einem Ansatz von MIHALKOVIČ. Die Simulationen wurden ohne Unterscheidung der Übergangsmetallatome gerechnet. Die Simulationstemperatur bewegte sich im Bereich von  $1/50 - 1/5$  der Schmelztemperatur.

Schwerpunkt der Arbeit war das Auffindung von phasonischen Flips in den quasikristallinen Ebenen. Zum Aufspüren dieser Flips wurde in ein vorhandenes Molekuldynamikprogramm ein Flip-Detektor implementiert. Dieser sucht nach charakteristischen Änderungen in den Atomumgebungen bei phasonischen Prozessen und detektiert potentielle Flips. In Testsimulationen konnte der Flip-Detektor alle Ereignisse zuverlässig feststellen. Bei längeren Simulationsläufen an einer Atomkonfiguration mit 13980 Atomen bei tiefer Temperatur zeigten sich jedoch nach einer anfänglichen Phase großer Aktivität nur sehr geringe Flipraten. Die Weglänge der phasonischen Bewegungen liegt im Bereich von  $0,9 \text{ \AA}$ . Daher überdecken bei höherer Temperatur die thermische Atombewegungen diese korrelierten Bewegungsmode. Der Vergleich von Simulationen bei unterschiedlichen Temperaturen liefert kein qualitativ unterschiedliches Flipverhalten.

Zur genaueren Untersuchung der Atombewegung wurde eine Methode zur interaktiven Darstellung des gesamten zeitlichen Verlaufs aller Atombewegungen entwickelt. Dies ermöglichte einen detaillierten Einblick in den Ablauf der atomaren Bewegungsprozesse. Es zeigten sich dabei korrelierte Bewegungen in der dekadonalen Achse.

Als stabile Strukturelemente erweisen sich zehnzählige Ringe, die nur aus Übergangsmetallatomen bestehen und Aluminiumpositionen, wenn diese von drei Übergangsmetallatomen in derselben Schicht umgeben sind. Bei Ringstrukturen mit Aluminiumatomen auf Randpositionen springt im Mittel immer ein Aluminiumatom je Doppelschicht auf die zentrale Position. In dieser Umgebung sieht das Zentralatom eine von den restlichen Randatomen gebildete Röhre. Es zeigt dadurch eine große Beweglichkeit in der dekadonalen Achse. Diese könnte Anlaß für eine größere Diffusion entlang der dekadonalen Achse sein.

Einige Aluminiumatome auf charakteristischen Positionen zeigen ein korreliertes Verhalten

mit ihren Nachbaratomen in der dekadonalen Achse: In aufeinanderfolgenden Schichten weisen die Bewegungsvektoren in entgegengesetzte Richtungen. Die Atome bewegen sich sozusagen um  $180^\circ$  phasenverschoben.

In allen Simulationen haben die Aluminiumatome eine sehr viel größere Beweglichkeit als die Übergangsmetallatome. In einer anschaulichen Beschreibung kann von einem statischen Gitter der Übergangsmetallatome gesprochen werden, zwischen dem sich ein See aus Aluminiumatomen befindet. Dies steht in Übereinstimmung mit der theoretischen Voraussage, daß die Aluminiumatome eine größere Beweglichkeit als die Übergangsmetallatome aufweisen.

### **Ausblick**

Phasonische Bewegungsprozesse in den quasikristallinen Schichten ließen sich unter den gegebenen Randbedingungen nicht zuverlässig nachweisen. Es zeigten sich jedoch in den Relaxationsrechnungen deutlich mehr phasonische Flips als in den anschließend durchgeführten mikrokanonischen Simulationen. Dies deutet darauf hin, daß Phasonen vor allem in Nichtgleichgewichtsprozessen auftreten.

Bei der Visualisierung der simulierten Atombewegungen zeigte sich auf einigen Atompositionen ein korreliertes Verhalten in der dekadonalen Achse. Es stellt sich daher die Frage, in welchem Zusammenhang diese Dynamik mit den phasonischen Bewegungsmoden steht.

In den Simulationen wird von den Atomen die Bildung von aluminiumzentrierten Ringen angestrebt. Dieses Strukturelement ist im Burkov-I-Modell bereits vorhanden. Die Unterschiede in den Vergleichsimulationen können im wesentlichen der unterschiedlichen Struktur dieser Zehnerringe in den beiden Modellen zugeschrieben werden. Die größere Beweglichkeit in dekadonaler Richtung der in diesen Zehnerringen befindlichen Aluminiumatomen könnte sich experimentell in einem anisotropen Diffusionskoeffizienten zeigen.



# Anhang A

## Radiale Dichtefunktion

Die *radiale Verteilungsfunktion* gibt an, wieviele Atome sich in einem Volumen zwischen zwei Abständen  $r$  und  $dr$  befinden:

$$G(r) = 4\pi r^2 \rho(r).$$

Die *radiale Dichtefunktion*  $\rho(r)$  gibt die Dichte der Atome im Abstand  $r$  an:

$$\rho(r) = \lim_{dr \rightarrow 0} \frac{\int_r^{r+dr} \sum_i \delta(r - r_i)}{\int_r^{r+dr} dV}.$$

Für Abstände kleiner als der minimale Atomabstand ist  $\rho(r) = 0$ . Für große Abstände erreicht  $\rho(r)$  den Wert der mittleren Atomdichte. Sowohl für  $G(r)$  als auch für  $\rho(r)$  wird in der Literatur der Begriff *Paarverteilungsfunktion* verwendet.



# Anhang B

## Zur Visualisierung

### B.1 Visualisierung mit VRML

Die *Virtual Reality Modeling Language* (VRML) ist das Standarddateiformat für *Virtual Reality* und *Virtuelle Welten* im Internet.<sup>1</sup> Da es sich bei VRML-Dateien um Text-Files handelt, können VRML-Welten leicht erstellt werden. Vorhandene Daten lassen sich durch einfache Filter in VRML konvertieren. Zur Betrachtung der VRML-Welten gibt es sowohl frei erhältliche Programme als auch kommerzielle Software.

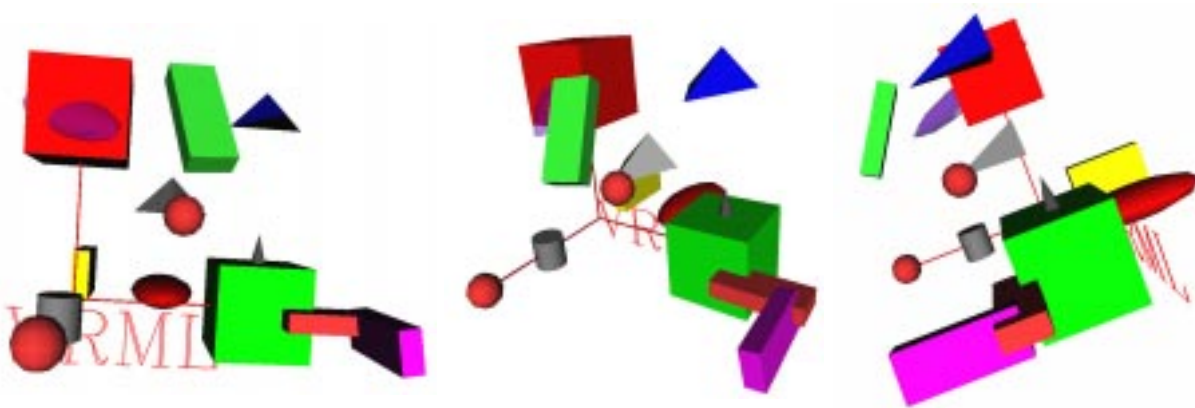


Abbildung B.1: Ein Beispiel der Objektdarstellung mit VRML. Durch Änderung der Perspektive bekommt der Betrachter einen räumlichen Eindruck der Objekte.

---

<sup>1</sup>Früher als *Virtual Reality Markup Language* bezeichnet. „VRML“ wird „vermal“ ausgesprochen. Allgemeine Informationen gibt es im Internet unter <http://www.vrml.org>.

Gegenüber HTML besitzt VRML die Fähigkeit zur interaktiven Darstellung in einem räumlichen und zeitlichen Kontext:<sup>2</sup>

- Räumlich: Die VRML-Welt wird aus verschiedenen dreidimensionalen Objekten gebildet, die frei plaziert werden können (Abb. B.1).<sup>3</sup>
- Interaktiv: Der Betrachter kann sich in den VRML-Welten frei bewegen und die dargestellten Objekte aus verschiedenen Perspektiven betrachten.
- Zeitlich: Es können sich Objekte und Objektkoordinaten zeitlich verändern.<sup>4</sup>

Die Grundelemente (*Primitives*) von VRML sind Quader (*Cube*), Kegel (*Cone*), Zylinder (*Cylinder*) und Kugel (*Sphere*). Zusammen mit den Operatoren für Verschiebung (*Translation*), Drehung (*Rotation*), Skalierung (*Scale*) und den Materialeigenschaften (*Material*) lassen sich mit geringem Aufwand hochwertige dreidimensionale Visualisierungen physikalischer Daten durchführen. Die erstellten Welten lassen sich durch interaktive Betrachtung auf vielfältige Weise untersuchen — bis hin zum virtuellen Flug durch die visualisierten Daten. Qualität und Geschwindigkeit der Darstellung hängt dabei von der verwendeten Hard- und Software ab, mit der die VRML-Welten auf dem Bildschirm dargestellt werden.<sup>5</sup>

## B.2 Potentialvisualisierung eines idealen Flips

In einem Käfig aus zehn Atomen (5 Al- und 5 TM-Atomen) führen zwei Atome einen phasonischen Flip durch. Dieser Flip ist in Testsimulation `Test1` zu beobachten.<sup>6</sup>

Für jedes Atom in der dekadagonalen Ebene wurde das von den anderen Atomen erzeugte Potentialgebirge berechnet. Das Potentialminimum um die tatsächliche Atomposition wird — bis zu einem willkürlichen Wert von 2,0 Potentialeinheiten — in ein Bild gezeichnet und alle Bilder kombiniert. Das Ergebnis zeigt jedes Atom (als kleinen weißen Punkt) in seinem Potentialminimum. Generiert man während der Simulation Bilder in regelmäßigen Zeitintervallen, so erhält man einen Film eines phasonischen Flips — mit den dazugehörigen Potentialminima der einzelnen Atome.

Die Potentiale der Al-Atome sind deutlich flacher als die der TM-Atome. Dies ist durch den Potentialverlauf in Abb. 4.3 unmittelbar einsichtig. Dadurch wird verständlich, weshalb die Al-Atome in den Simulationen um ein vielfaches mobiler sind als die stärker in ihren Potentialminima gebundenen TM-Atome.

---

<sup>2</sup>Die *Hypertext Markup Language* ist die Seitenbeschreibungssprache für WWW-Dokumente.

<sup>3</sup>Es wird dem Betrachter eine *virtuelle Welt* dargestellt.

<sup>4</sup>Seit VRML Version 2.0.

<sup>5</sup>Die Aufbereitung der Daten zur zweidimensionalen Darstellung wird als *Rendering* bezeichnet.

<sup>6</sup>Siehe auch Abb. 4.5 und Abb. 4.10.

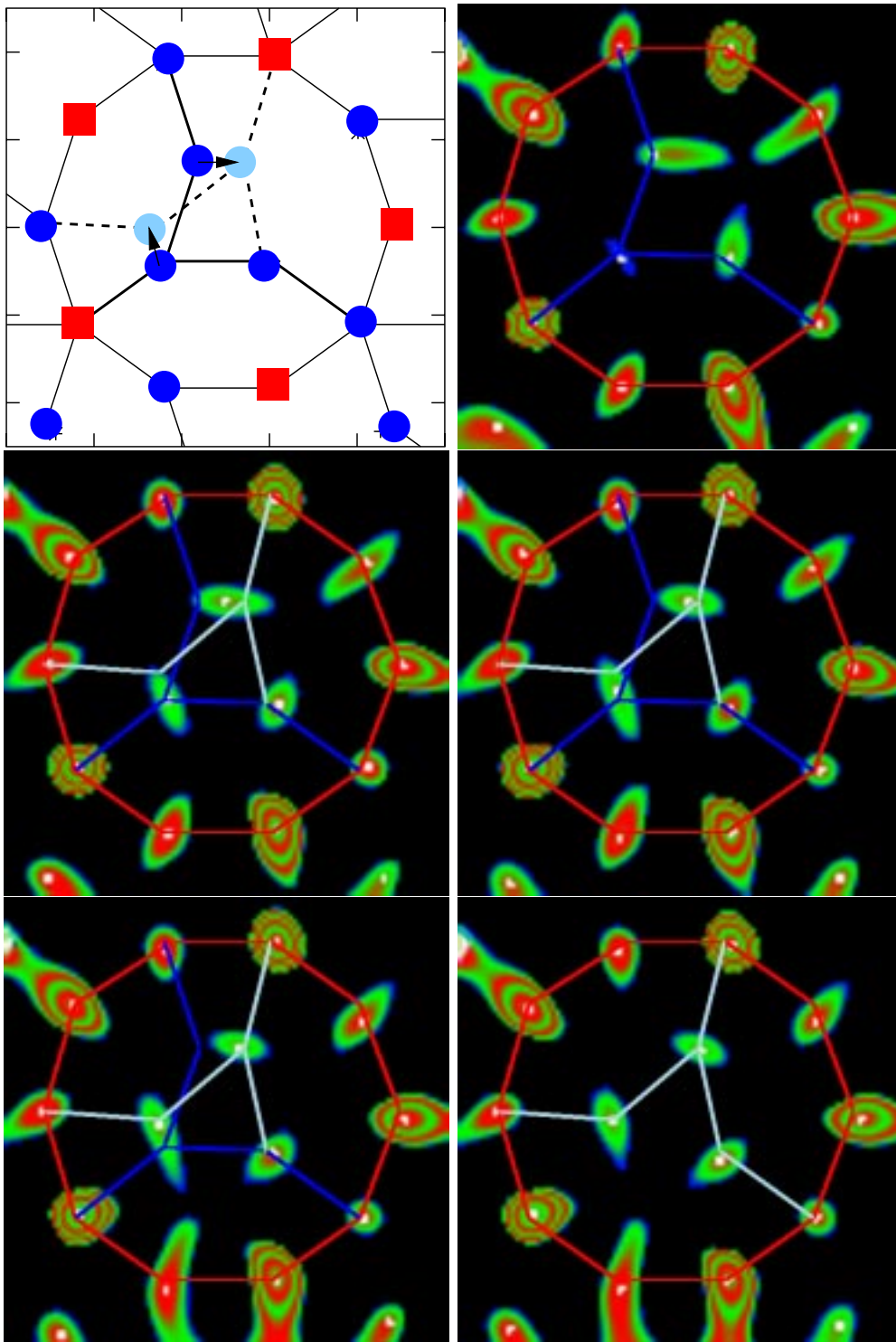


Abbildung B.2: Ablauf eines idealen phasonischen Flips im Potentialbild. Der Ablauf dieser Atombewegung ist Testsimulation Test1 entnommen. Es handelt sich um die in Abb. 4.11 dargestellte Atombewegung.



# Anhang C

## Zusammenfassung der Simulationsläufe

In diesem Abschnitt sind die relevanten Parameter aller wichtigen Simulationen zusammengestellt.

Bei allen Simulationen betrug die Schrittweite 0,005 MD-Zeiten und es wurde, außer bei AND002-LJ und NVE002-LJ, das Potential von MIHALKOVIČ (Abb. 4.3) verwendet.

Außer bei den Testsimulationen sind bei allen Statistiken und bei allen Histogrammen die ersten 150 MD-Zeiten (30000 Simulationsschritte) nicht berücksichtigt.

### Technische Daten einer typischen Simulation

Konfiguration	13980 Atome
Probengröße	$60,99 \text{ \AA} \times 51,88 \text{ \AA} \times 62,70 \text{ \AA}$
Simulationsdauer	$500000 \text{ Schritte} \times 0,005 \text{ MD-Zeiten} = 2500 \text{ MD-Zeiten} \approx 10 - 20 \text{ ps}$
Temperatur	$^{1/50} - ^{1/5} T_{\text{Schmelz}} \approx 25 - 250 \text{ K}$
Rechenzeit	$25000 \text{ Sekunden} \times 64 \text{ CPUs} \approx 2 \text{ Wochen}$
Datenmenge	$100 \frac{\text{Byte}}{\text{Teilchen} \cdot \text{Zeitschritt}} \approx 1,5 \text{ MB/Zeitschritt}$

## C.1 Verwendete Approximanten

Die Approximanten `aprox1` und `aprox2` entsprechen dem Burkov-Zeger-Modell für d-AlCuCo. Der `burkov1`-Approximant entspricht dem Burkov-I-Modell. Der einfache Schichtabstand aller Approximanten ist 2,09 Å.

	Al	TM
Schicht 1:	●	■
Schicht 2:	○	□

Abbildung C.1: *Symbolbezeichnung zu den Abbildungen der Approximanten. Ausgefüllte und leere Symbole unterscheiden Atome aus verschiedenen Schichten.*

### aprox1: Der Approximant für Testsimulationen

- 680 Atome (136 Atome je Doppelschicht)
- 5 Doppelschichten
- $\tau^{-2} = 260$  Atome auf X-Positionen
- $\tau^{-2} = 260$  Atome auf Y-Positionen
- Geometrische Abmessung: 23,30 Å × 19,82 Å × 20,90 Å

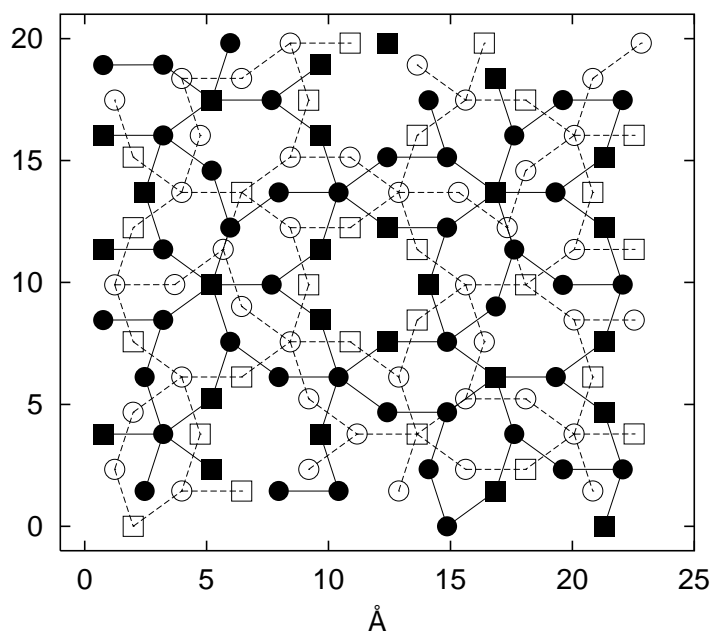


Abbildung C.2: *Testapproximant aprox1 mit 680 Atomen in 5 Doppelschichten. Die sterischen Verhältnisse sind in Abb. 4.2 und Abb. 5.5 wiedergegeben (Symbolbezeichnung entsprechend Abb. C.1).*



## aprox2: Der Approximant für die Produktionsläufe

- 13980 Atome (932 Atome je Doppelschicht)
- 15 Doppelschichten
- $\tau^{-2} = 5340$  Atome auf X-Position
- $\tau^{-2} = 5340$  Atome auf Y-Position
- Geometrische Abmessung:  $60,99 \text{ \AA} \times 51,88 \text{ \AA} \times 62,70 \text{ \AA}$

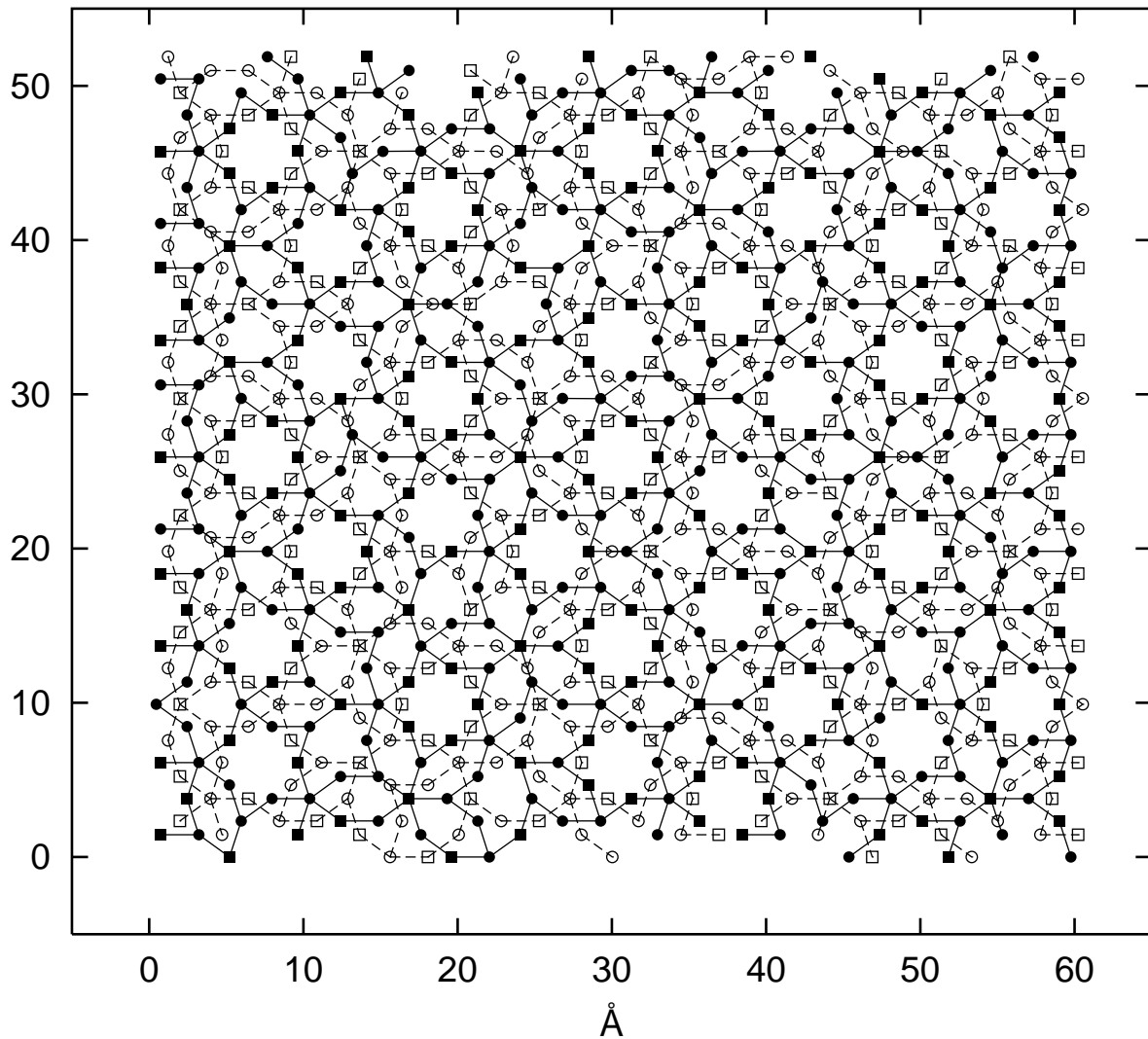


Abbildung C.3: Approximant aprox2 mit 13980 Atomen in 15 Doppelschichten (Symbolbezeichnung entsprechend Abb. C.1).

**burkovl: Der Approximant für das Burkov-I-Modell**

- 7540 Atome (754 Atome je Doppelschicht)
- 10 Doppelschichten
- Geometrische Abmessung:  $51,89 \text{ \AA} \times 51,89 \text{ \AA} \times 41,80 \text{ \AA}$

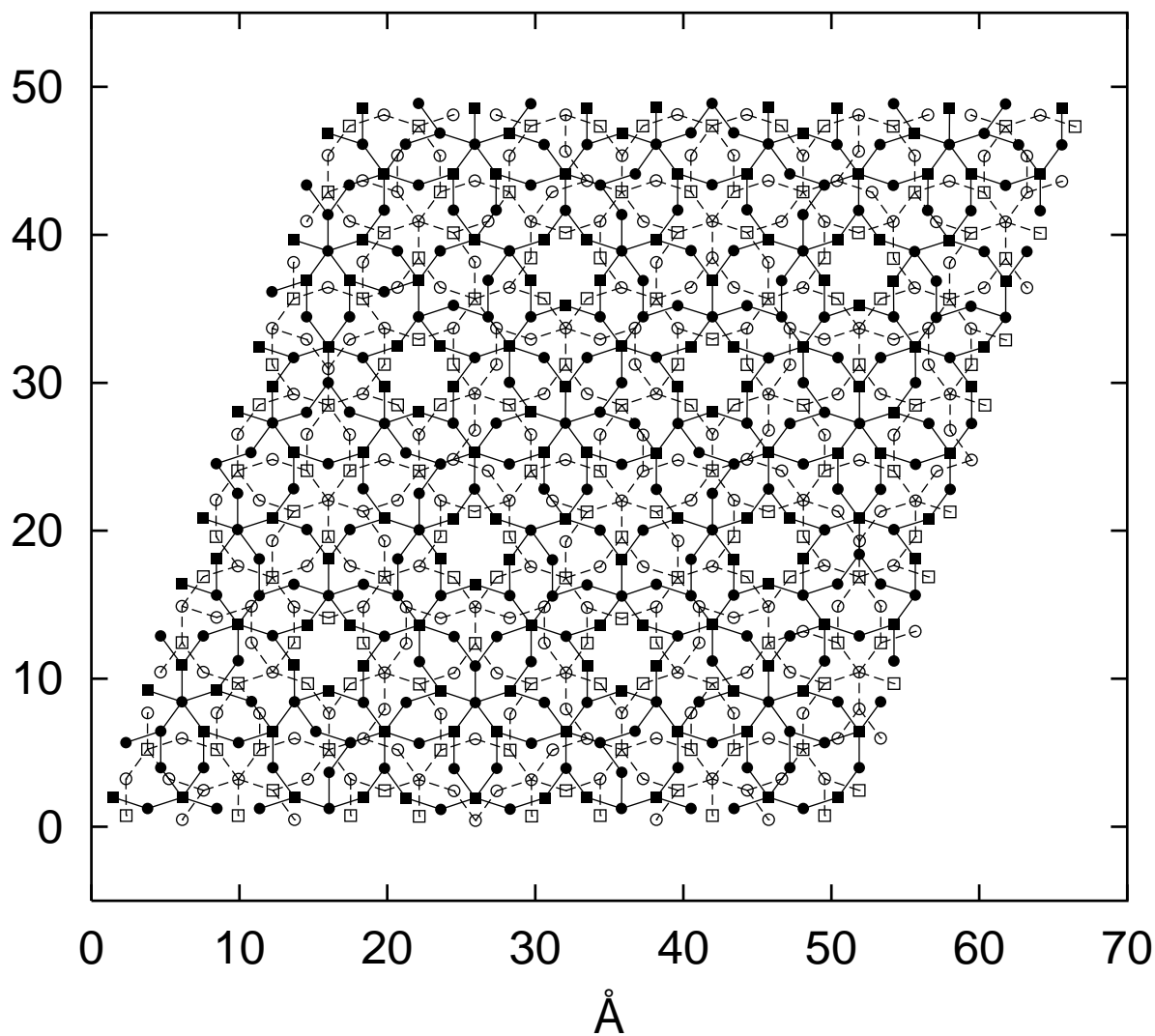


Abbildung C.4: *Burkov-I-Approximant burkovl mit 10 Doppelschichten zu je 754 Atomen. (Symbolbezeichnung entsprechend Abb. C.1).*

## C.2 Durchgeführte Simulationen

Bezeichnung	Integrator	Temperatur	Laufzeit		Konfiguration <sup>1</sup>
			Schritte	MD-Zeiten	
Test1	AND	0,01 – 0,01	10000	50	aprox1
Test2	AND	0,01 – 0,01	30000	150	aprox2
AND001	AND	0,01 – 0,01	100000	500	aprox2
AND002	AND	0,02 – 0,02	100000	500	aprox2
AND005	AND	0,05 – 0,05	100000	500	aprox2
AND010	AND	0,10 – 0,10	100000	500	aprox2
AND020	AND	0,20 – 0,20	100000	500	aprox2
AND050	AND	0,50 – 0,50	100000	500	aprox2
AND001-Long	AND	0,01 – 0,01	500000	2500	aprox2
AND050-001	AND	0,50 – 0,01	500000	2500	aprox2
NVE001	NVE	0,01	500000	2500	von AND001
NVE002	NVE	0,02	500000	2500	von AND002
NVE010	NVE	0,10	500000	2500	von AND010
AND001-LJ	AND	0,01 – 0,01	100000	500	aprox2-LJ
AND002-LJ	AND	0,02 – 0,02	100000	500	aprox2-LJ
AND002-BI	AND	0,02 – 0,02	100000	500	burkovl

Tabelle C.1: Zusammenstellung der Parameter der wichtigsten Simulationen.

---

<sup>1</sup>Zur Bezeichnung der Konfigurationen siehe Abs. C.1

### C.3 Beugungsbilder und Paarverteilungsfunktionen

Die Paarverteilungsfunktion und Beugungsbilder bei verschiedenen Simulationstemperaturen geben Aufschluß über den mittleren Abstand der Atome untereinander. Unter dem gegebenen Potential (Abb. 4.3) ist die Konfiguration bis etwa  $T=0,35$  stabil (Tab. 4.3).

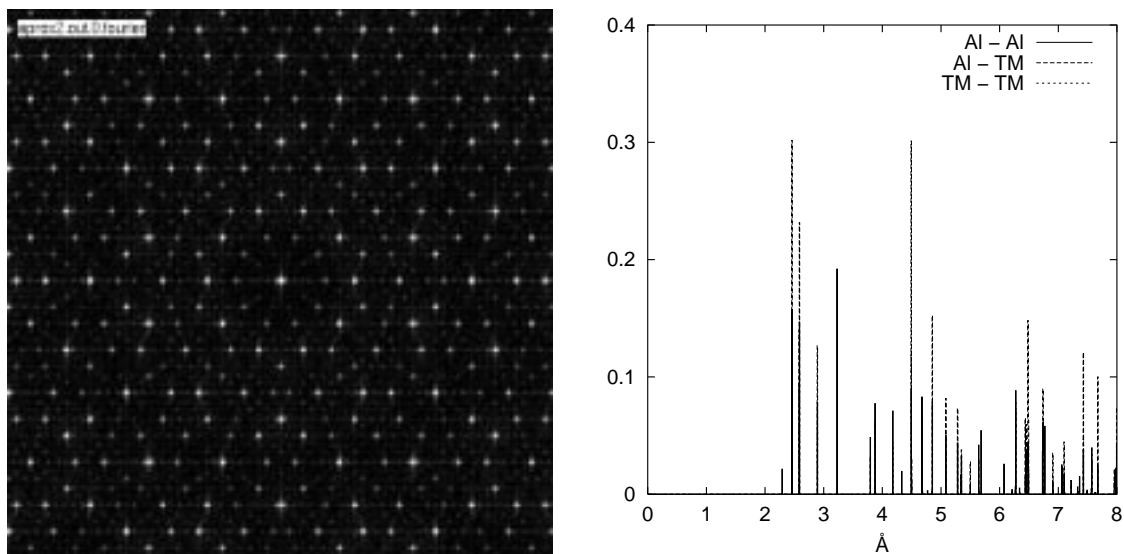


Abbildung C.5: Beugungsbild und Paarverteilungsfunktion des Approximanten *approx2*. Im Beugungsbild ist die dekadogonale Symmetrie deutlich sichtbar.

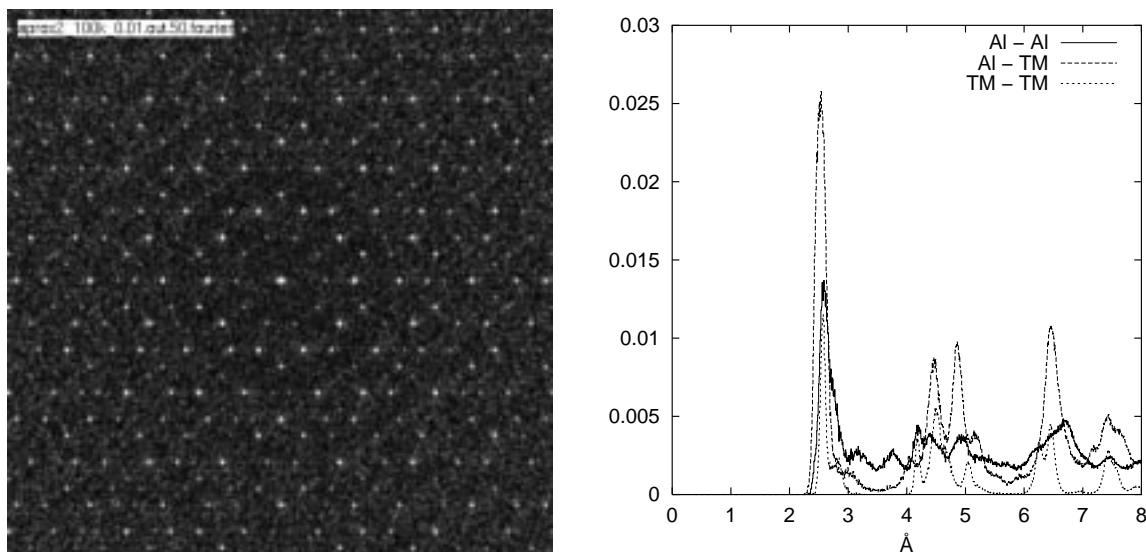


Abbildung C.6: Beugungsbild und Paarverteilungsfunktion am Ende von *AND001*. Das Beugungsbild hat gegenüber Abb. C.5 an Kontrast verloren.

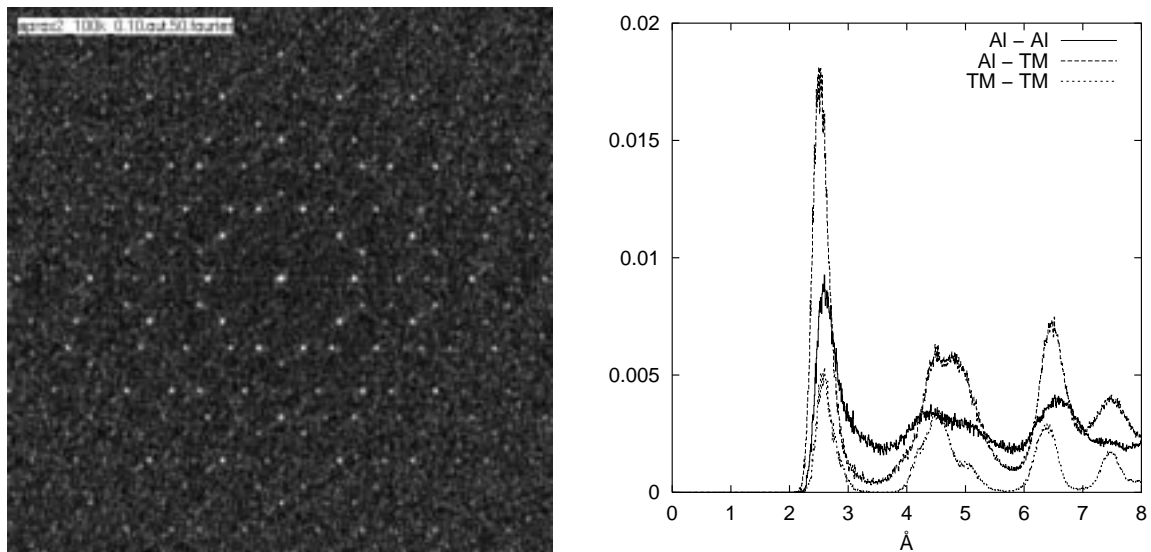


Abbildung C.7: Beugungsbild und Paarverteilungsfunktion am Ende von AND010. Im Beugungsbild gibt es einen diffusen Untergrund.

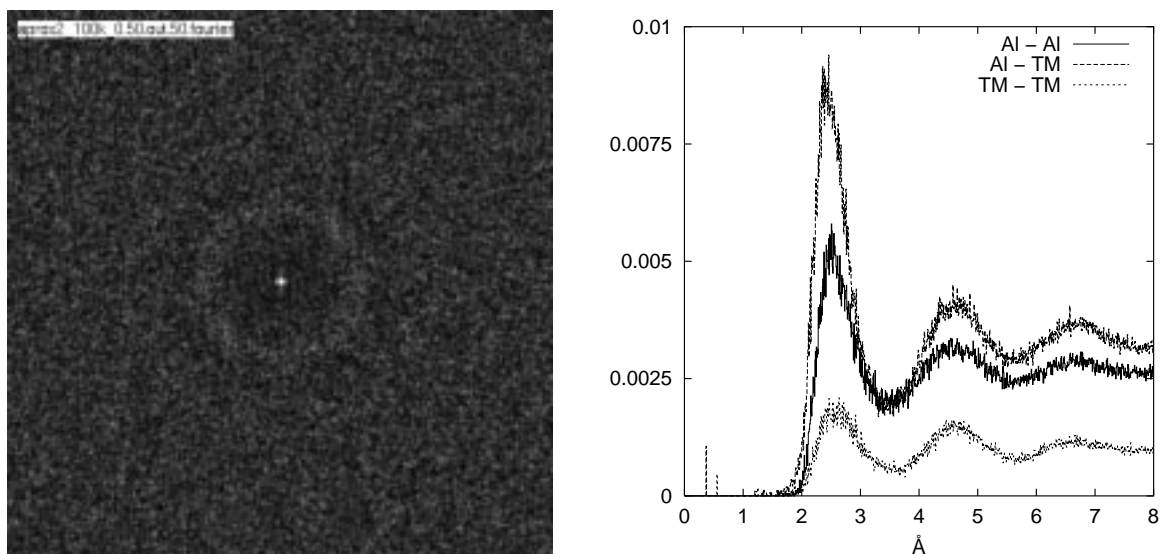


Abbildung C.8: Beugungsbild und Paarverteilungsfunktion am Ende von AND050. Die Konfiguration ist geschmolzen. Das Beugungsbild und die Paarverteilungsfunktion zeigen keine geordnete Atomanordnung mehr.

## C.4 Flip-Statistiken

Die nachträgliche Filterung erlaubt eine bessere Einstufung der detektierten Ereignisse.

- *Ideal* bedeutet: Das Atom hat bei einem Flip einen Weg zwischen 0,8 – 1,0 Å zurückgelegt.
- *Korreliert* bedeutet: Ein Atom und eines seiner Nachbarn werden zu unterschiedlichen Zeitpunkten detektiert. Nach diesem *korrelierten* Flip sind beide Atome wieder Nachbarn.

Erklärung zu den Zahlenangaben in den Tabellenfeldern:

- Die Anzahl der Ereignisse steht *ohne Klammerung*: 117
- Die Anzahl der mehrfach detektierten Atome steht in *eckigen Klammern*: [117]
- Die Anzahl der verschiedenen Atome steht in *runden Klammern*: (117)

### C.4.1 Testsimulationen

Bei den Testsimulationen **Test1** und **Test2** handelt es sich um kurze Simulationsläufe zur Überprüfung der Funktionsweise des Flip-Detektors.

T=0,01	total	X → X	Y → Y	Y → X	Y → Y
alle	35 [0] (35)	26 (26)	4 (4)	5 (5)	0 ( )
ideal	19 [0] (19)	15 (15)	3 (3)	1 (1)	0 ( )
korr.	8 [0] (8)	0 ( )	4 (4)	4 (4)	0 ( )
korr.-id.	4 [0] (4)	0 ( )	3 (3)	1 (1)	0 ( )

Tabelle C.2: *Flip-Statistik zu Test1 – ein Simulationslauf über 50 MD-Zeiten unter Verwendung des Approximanten approx1 mit 680 Atomen.*

T=0,01	total	X → X	Y → Y	Y → X	Y → Y
alle	1498 [385] (1298)	918 (769)	251 (251)	279 (277)	0 ( )
ideal	534 [51] (528)	268 (265)	138 (138)	128 (128)	0 ( )
korr.	444 [5] (442)	8 (8)	222 (222)	214 (214)	0 ( )
korr.-id.	222 [0] (222)	3 (3)	123 (123)	96 (96)	0 ( )

Tabelle C.3: *Flip-Statistik zu Test2 – ein Simulationslauf über 150 MD-Zeiten unter Verwendung des Approximanten approx2 mit 13980 Atomen.*

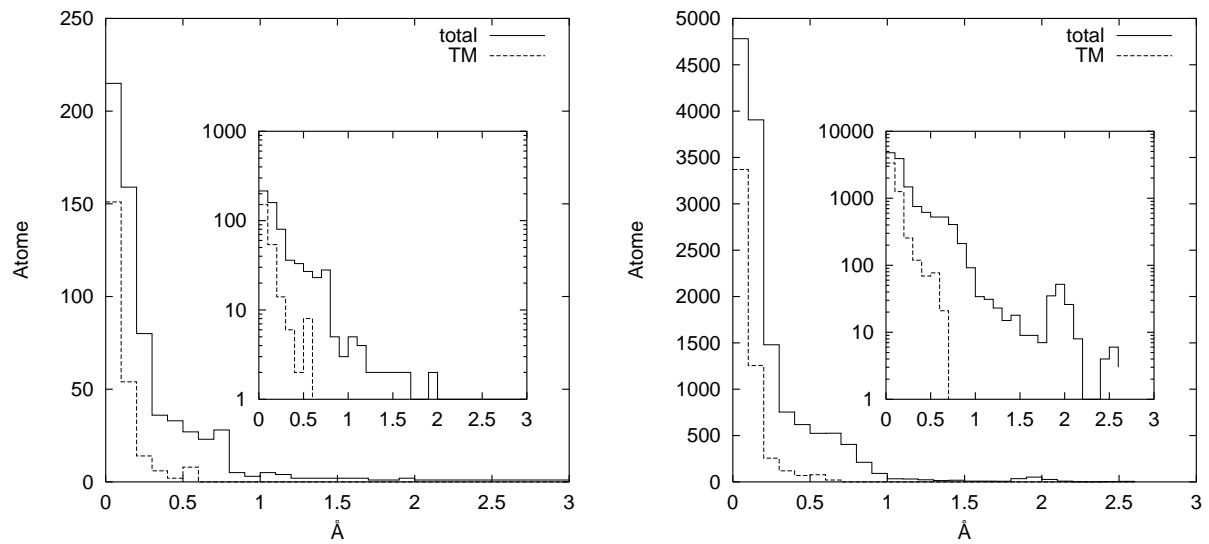


Abbildung C.9: Atombewegung in den Testsimulationen (links Test1, rechts Test2).

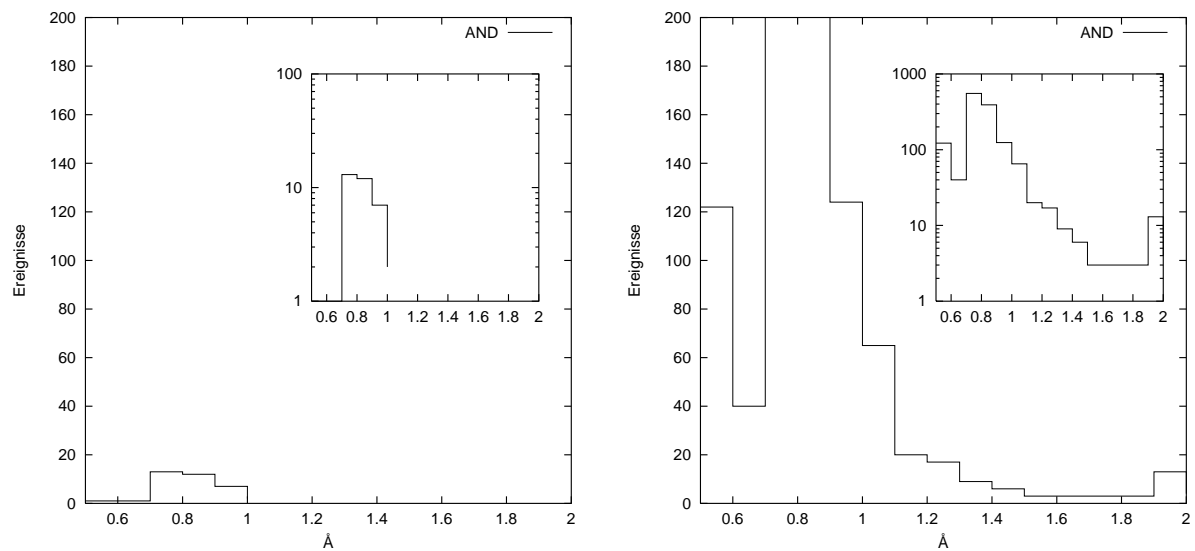


Abbildung C.10: Zurückgelegter Weg je Flip in den Testsimulationen (links Test1, rechts Test2).

## C.4.2 Produktionsläufe

### Relaxation (AND)

Die Anderson-Simulation über 500 MD-Zeiten (100000 Simulationsschritte) dienen primär der Relaxation des Ausgangsapproximanten. Die Simulation bei  $T=0,01$  über 2500 MD-Zeiten (500000 Schritte) liefert eine bessere Statistik als die gleiche Simulation über 150 MD-Zeiten. Zum Vergleich sind auch Anderson-Simulationen mit dem Burkov-I-Modell (Abb. C.4) und unter einem Lennard-Jones-Potential (Abb. 4.4) aufgeführt.

T=0,01	total	X → X	X → Y	Y → X	Y → Y
alle	131 [75] (114)	119 (102)	6 (6)	6 (6)	0 (0)
ideal	19 [9] (18)	16 (15)	3 (3)	0 (0)	0 (0)
korr.	2 [0] (2)	0 (0)	1 (1)	1 (1)	0 (0)
korr.-id.	1 [0] (1)	0 (0)	1 (1)	0 (0)	0 (0)

T=0,02	total	X → X	X → Y	Y → X	Y → Y
alle	686 [588] (444)	572 (364)	59 (59)	47 (47)	8 (7)
ideal	88 [47] (81)	60 (57)	19 (19)	7 (7)	2 (2)
korr.	44 [29] (42)	13 (13)	16 (16)	15 (15)	0 (0)
korr.-id.	8 [3] (8)	2 (2)	4 (4)	2 (2)	0 (0)

T=0,05	total	X → X	X → Y	Y → X	Y → Y
alle	8848 [8662] (3138)	6149 (2581)	1277 (1039)	1085 (926)	320 (285)
ideal	1583 [1379] (1089)	1066 (793)	294 (271)	195 (188)	28 (26)
korr.	1180 [1088] (787)	479 (408)	415 (384)	265 (243)	21 (20)
korr.-id.	305 [243] (262)	113 (109)	111 (110)	77 (76)	4 (4)

T=0,10	total	X → X	X → Y	Y → X	Y → Y
alle	59566 [59496] (8065)	36315 (7270)	8313 (4551)	8879 (4690)	6046 (3140)
ideal	7778 [7709] (3702)	5656 (3076)	1098 (952)	859 (779)	165 (159)
korr.	8000 [7918] (3448)	5226 (2853)	1481 (1201)	974 (845)	319 (303)
korr.-id.	1523 [1495] (1156)	911 (783)	371 (341)	215 (204)	26 (25)

Tabelle C.4: Flip-Statistiken der Anderson-Simulationen über 500 MD-Zeiten.

T=0,01	total	X → X	X → Y	Y → X	Y → Y
alle	753 [634] (358)	653 (292)	51 (47)	47 (46)	1 (1)
ideal	96 [53] (79)	59 (50)	26 (24)	11 (11)	0 (0)
korr.	56 [25] (52)	16 (16)	24 (24)	16 (16)	0 (0)
korr.-id.	21 [4] (21)	1 (1)	14 (14)	6 (6)	0 (0)

Tabelle C.5: Flip-Statistik der Anderson-Simulation über 2500 MD-Zeiten bei  $T=0,01$ .



T=0,02	total	X → X	X → Y	Y → X	Y → Y
alle	10125 [8736] (6528)	8057 (5566)	767 (733)	831 (779)	437 (424)
ideal	854 [686] (815)	678 (653)	64 (64)	96 (95)	16 (16)
korr.	2198 [1670] (1917)	1656 (1468)	200 (196)	203 (197)	129 (126)
korr.-id.	166 [119] (162)	122 (119)	18 (18)	20 (19)	6 (6)

Tabelle C.6: *Flip-Statistik der Anderson-Simulation über 500 MD-Zeiten bei T=0,02 unter dem Lennard-Jones-Potential aus Abb. 4.4.*

T=0,02	total	X → X	X → Y	Y → X	Y → Y
alle	321 [294] (192)	235 (145)	29 (28)	23 (22)	7 (7)
ideal	44 [34] (35)	16 (15)	12 (11)	12 (11)	4 (4)
korr.	6 [4] (6)	1 (1)	2 (2)	3 (3)	0 (0)
korr.-id.	4 [3] (4)	1 (1)	1 (1)	2 (2)	0 (0)

Tabelle C.7: *Flip-Statistik der Anderson-Simulation des burkovl-Approximanten über 500 MD-Zeiten bei T=0,02.*

### Mikrokanonische Simulation (NVE)

Die NVE-Simulationen stellen die eigentlichen Produktionsläufe dar. Als Ausgangskonfiguration wird eine unter dem Anderson-Integrator relaxierte Konfiguration verwendet.

T=0,01	total	X → X	X → Y	Y → X	Y → Y
alle	1372 [1164] (365)	1138 (266)	65 (57)	74 (67)	31 (31)
ideal	151 [138] (70)	121 (51)	14 (13)	14 (14)	2 (2)
korr.	36 [13] (33)	11 (11)	15 (14)	7 (7)	3 (3)
korr.-id.	6 [4] (5)	0 (0)	2 (2)	3 (3)	1 (1)

T=0,02	total	X → X	X → Y	Y → X	Y → Y
alle	12454 [11868] (1940)	9535 (1527)	1386 (650)	1249 (650)	211 (177)
ideal	2028 [1951] (663)	1379 (495)	365 (245)	259 (199)	24 (16)
korr.	1302 [1141] (488)	474 (265)	469 (254)	330 (188)	29 (28)
korr.-id.	252 [230] (157)	90 (69)	96 (77)	64 (50)	2 (2)

T=0,10	total	X → X	X → Y	Y → X	Y → Y
alle	893864 [893828] (11983)	544839 (11868)	134215 (9273)	139133 (8994)	75608 (7727)
ideal	146445 [146442] (8177)	105073 (7007)	21328 (5971)	16715 (5860)	3329 (2367)
korr.	182504 [182443] (11442)	118178 (10191)	31242 (7389)	21499 (6812)	11535 (4990)
korr.-id.	31217 [31213] (4823)	19795 (4076)	6949 (3126)	3690 (2347)	783 (690)

Tabelle C.8: *Flip-Statistiken der mikrokanonischen Simulationen über 2500 MD-Zeiten.*

### C.4.3 Diagramme zum Flipverhalten

Bei tiefer und hoher Temperatur wurde jeweils im Anschluß an eine Relaxationsrechnung mit dem Anderson-Intergrator (AND) über 500 MD-Zeiten eine mikrokanonische Simulation (NVE) über 2500 MD-Zeiten durchgeführt.<sup>2</sup> Im folgenden sind zum Vergleich der beiden Simulationen verschiedene Diagramme zum Simulationsverlauf und Flipverhalten aufgeführt.

#### Verlauf von Temperatur und Energie

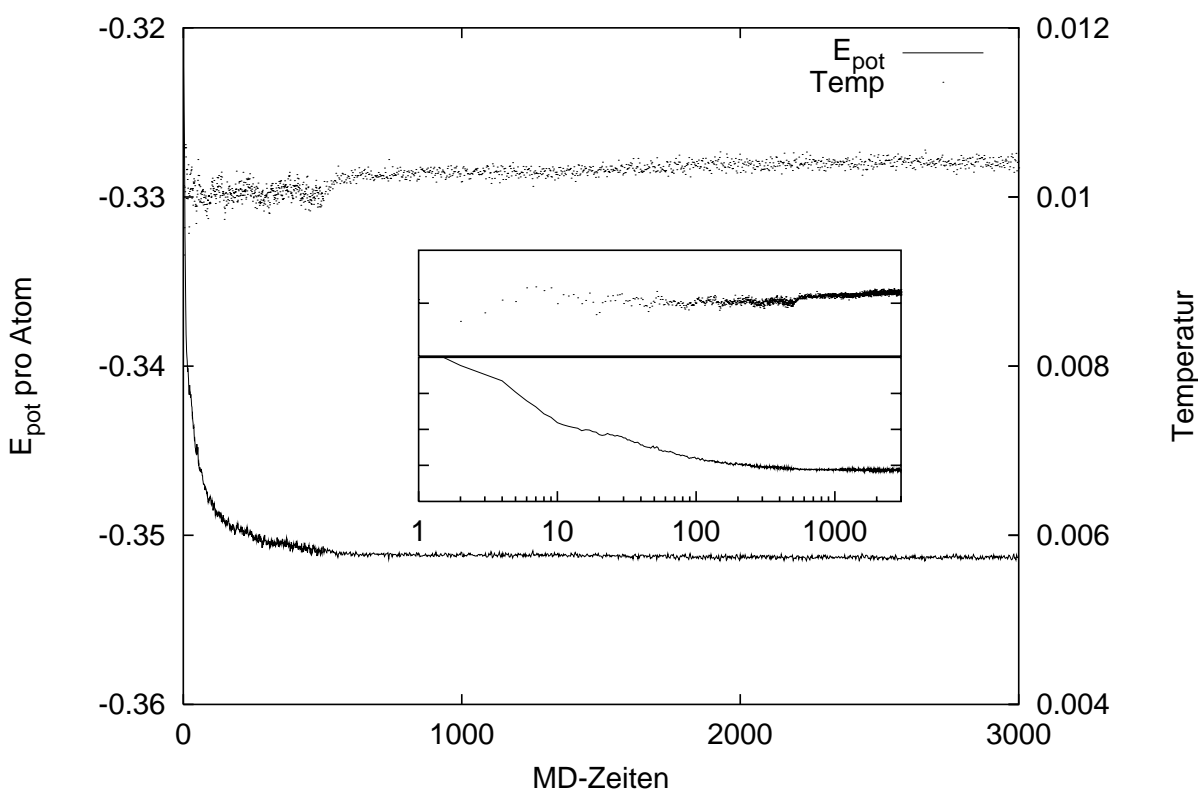


Abbildung C.11: Verlauf von Temperatur und Energie bei  $T=0,01$ . Der Übergang zwischen AND001 und NVE001 bei 500 MD-Zeiten ist sichtbar. Sowohl Temperatur- als auch Energiefluktuationen sind bei der NVE-Simulation deutlich geringer als bei der AND-Simulation.

<sup>2</sup>Die beiden Simulationsläufe sind:  
 AND001 und NVE001 –  $T=0,01$  – etwa  $1/50$  der Schmelztemperatur, und  
 AND010 und NVE010 –  $T=0,10$  – etwa  $1/5$  der Schmelztemperatur.

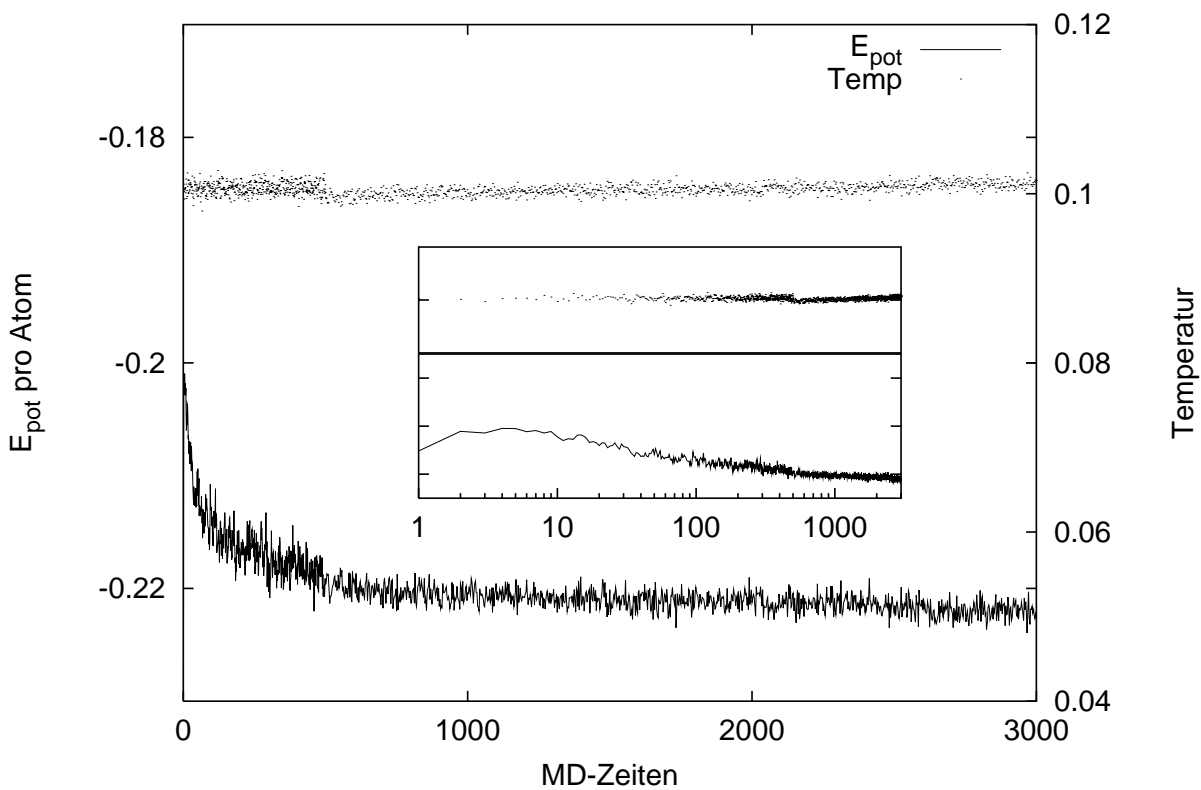


Abbildung C.12: Verlauf von Temperatur und Energie bei  $T=0,10$ . Der Übergang zwischen AND010 und NVE010 bei 500 MD-Zeiten ist deutlich sichtbar.

## Anzahl der Flips

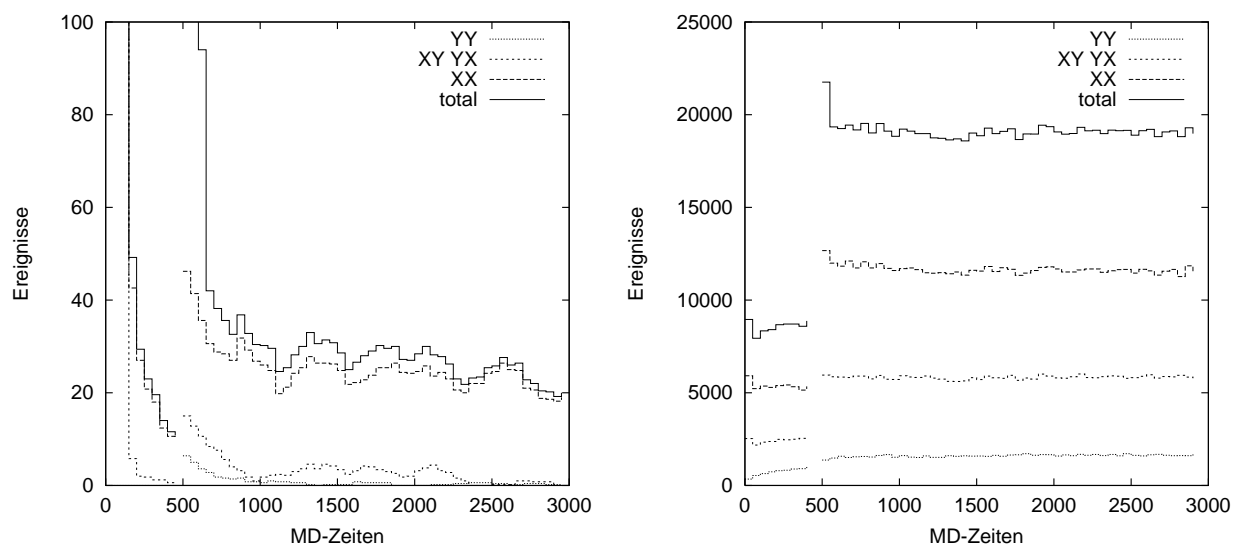


Abbildung C.13: Anzahl der Flips (nach Flipytyp). Mittelung über 50 MD-Zeiten (links  $T=0,01$ , rechts  $T=0,10$ ). Nach kurzer Zeit hat sich die Fliprate bei NVE auf ein konstantes Niveau eingestellt.

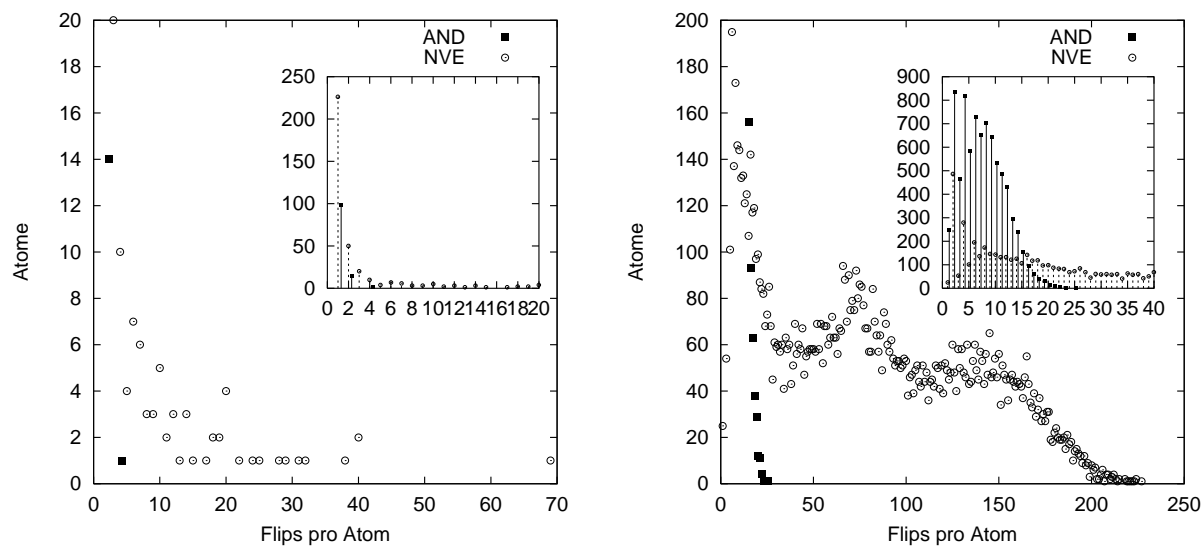


Abbildung C.14: Anzahl der Flips je Atom. Vergleich von AND- und NVE-Simulation (links  $T=0,01$ , rechts  $T=0,10$ ). Bei  $T=0,10$  zeigen etwa 3000 Atome eine erhöhte Fliprate (Bereich zwischen 50 und 100 Flips je Atom).

## Zurückgelegter Weg je Flip

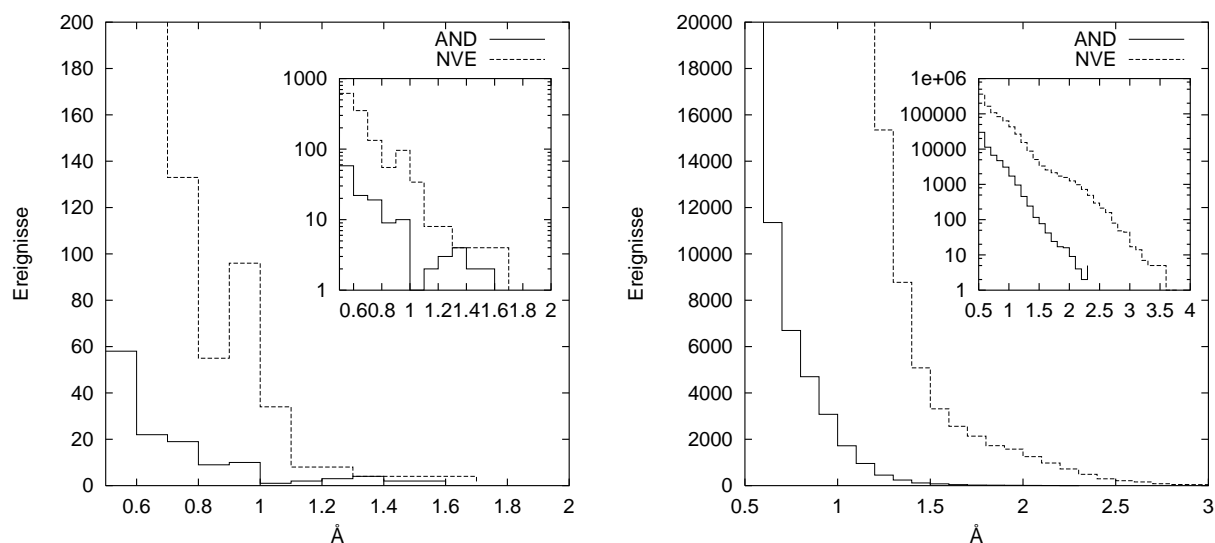


Abbildung C.15: Zurückgelegter Weg je Flip. Vergleich von AND- und NVE-Simulation (links  $T=0,01$ , rechts  $T=0,10$ ).

## Temperaturabhängige Eigenschaften der Flips

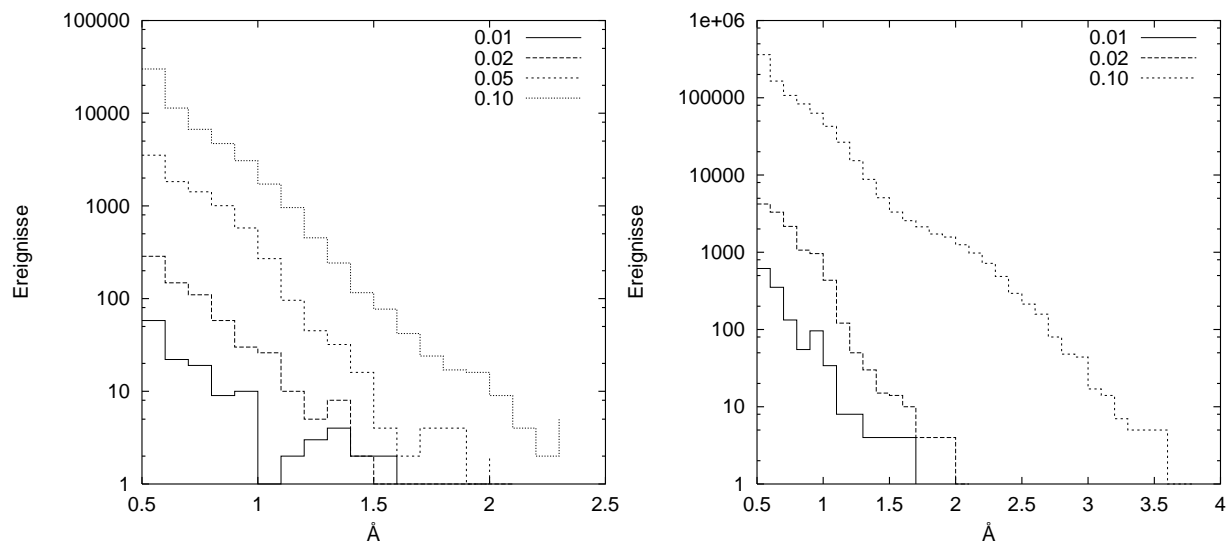


Abbildung C.16: Temperaturabhängigkeit des zurückgelegten Wegs je Flips (links AND, rechts NVE).

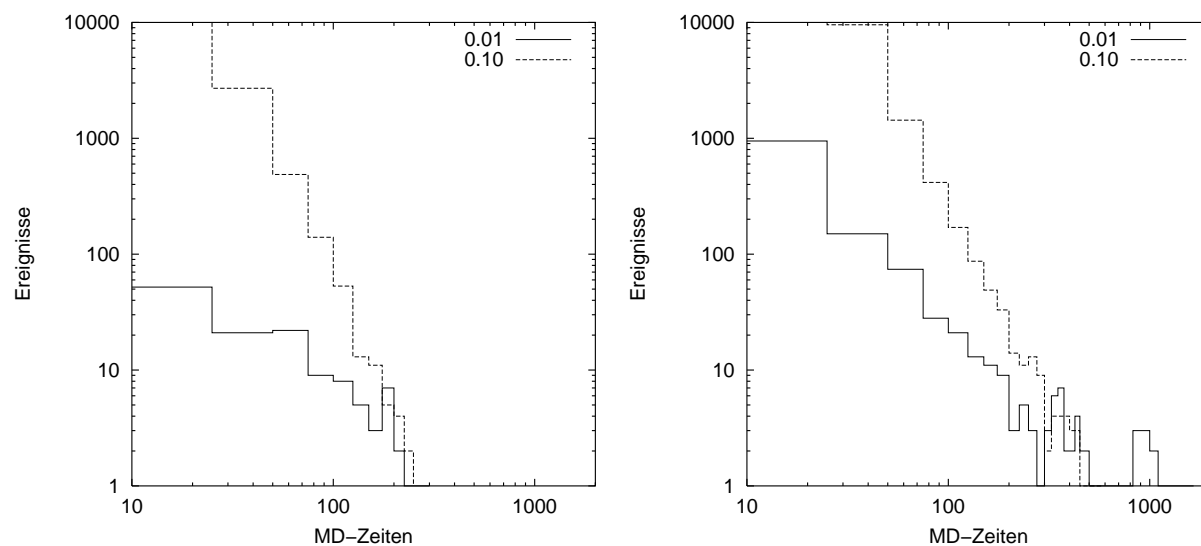


Abbildung C.17: Temperaturabhängigkeit der Dauer eines Flips (links AND, rechts NVE).

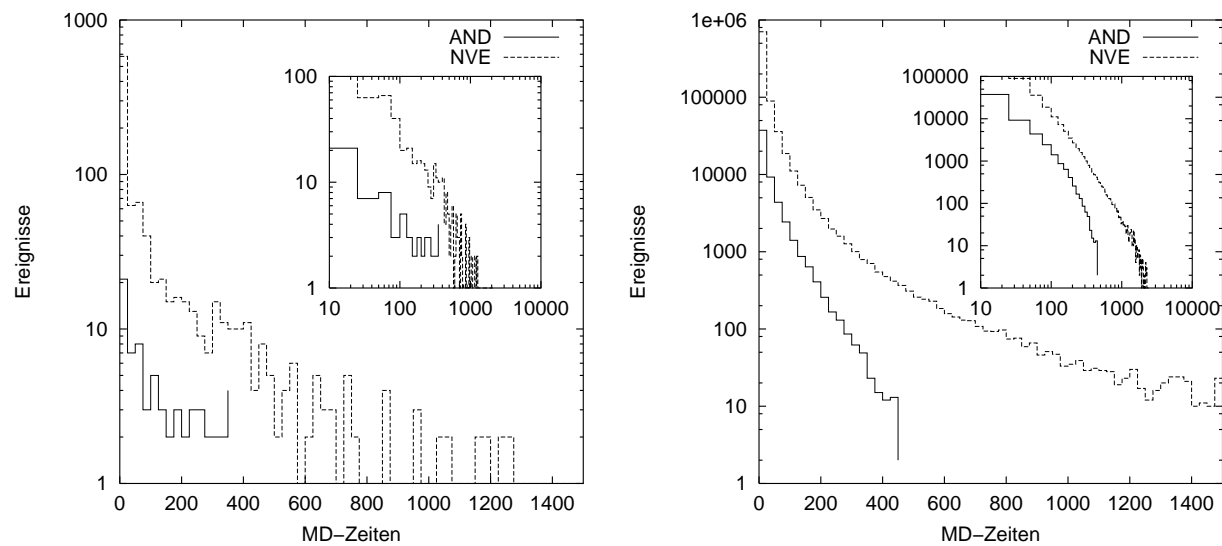


Abbildung C.18: Temperaturabhängigkeit der Verweilzeiten zwischen Mehrfachflips eines Atoms (links  $T=0,01$ , rechts  $T=0,10$ ).

## Gesamte Atombewegung in den Simulationen

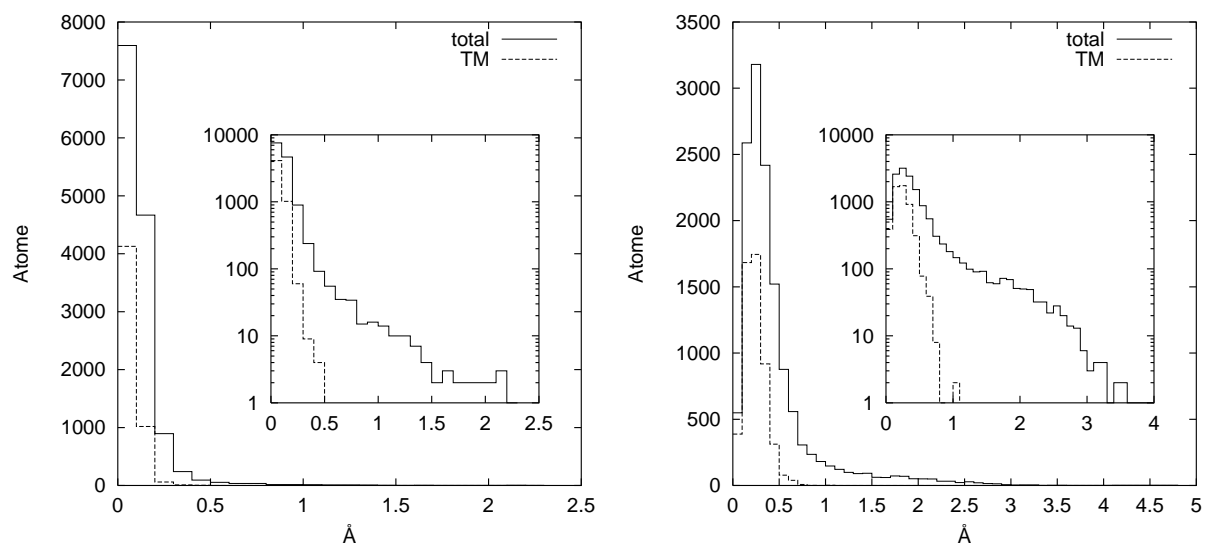


Abbildung C.19: Gesamte Atombewegung von 150-500 MD-Zeiten (AND). Temperaturabhängigkeit (links  $T=0,01$ , rechts  $T=0,10$ ).

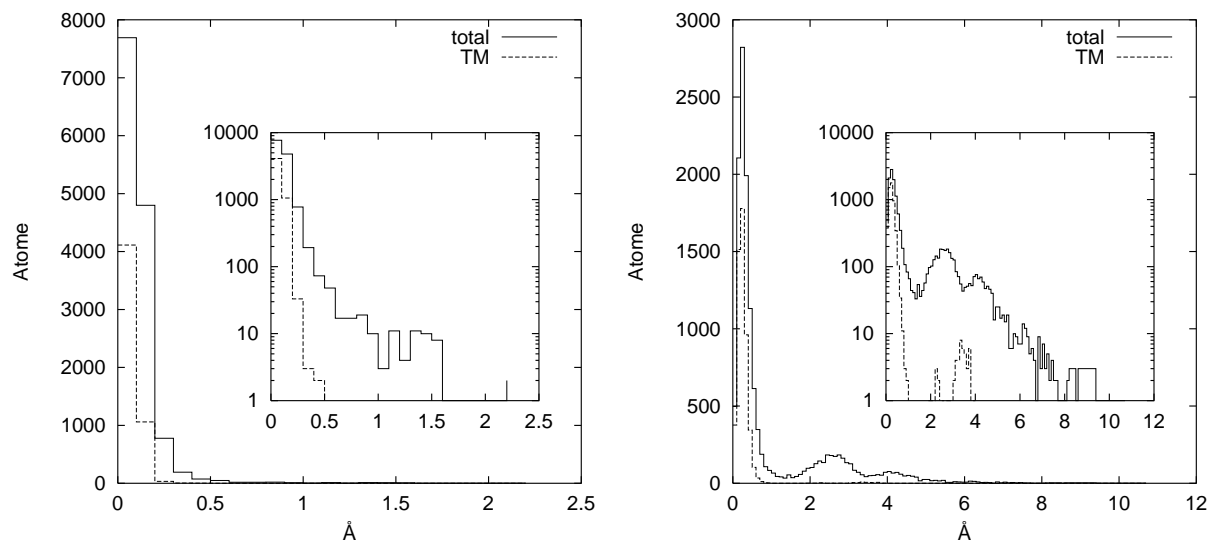


Abbildung C.20: Gesamte Atombewegung von 650-2500 MD-Zeiten (NVE). Temperaturabhängigkeit (links  $T=0,01$ , rechts  $T=0,10$ ).

## C.5 Vergleichssimulationen

Zum Vergleich zweier unterschiedlicher Konfigurationen ist neben den Simulationsläufen mit dem `aprox2`-Approximanten auch eine Simulation mit dem `burkovl`-Approximanten durchgeführt worden. Zum Vergleich zweier unterschiedlicher Potentiale wurde der `aprox2`-Approximant auch unter dem Lennard-Jones-Potential (Abb. 4.4) simuliert. Alle Vergleichssimulationen sind bei einer Temperatur von  $T=0,02$  gerechnet.

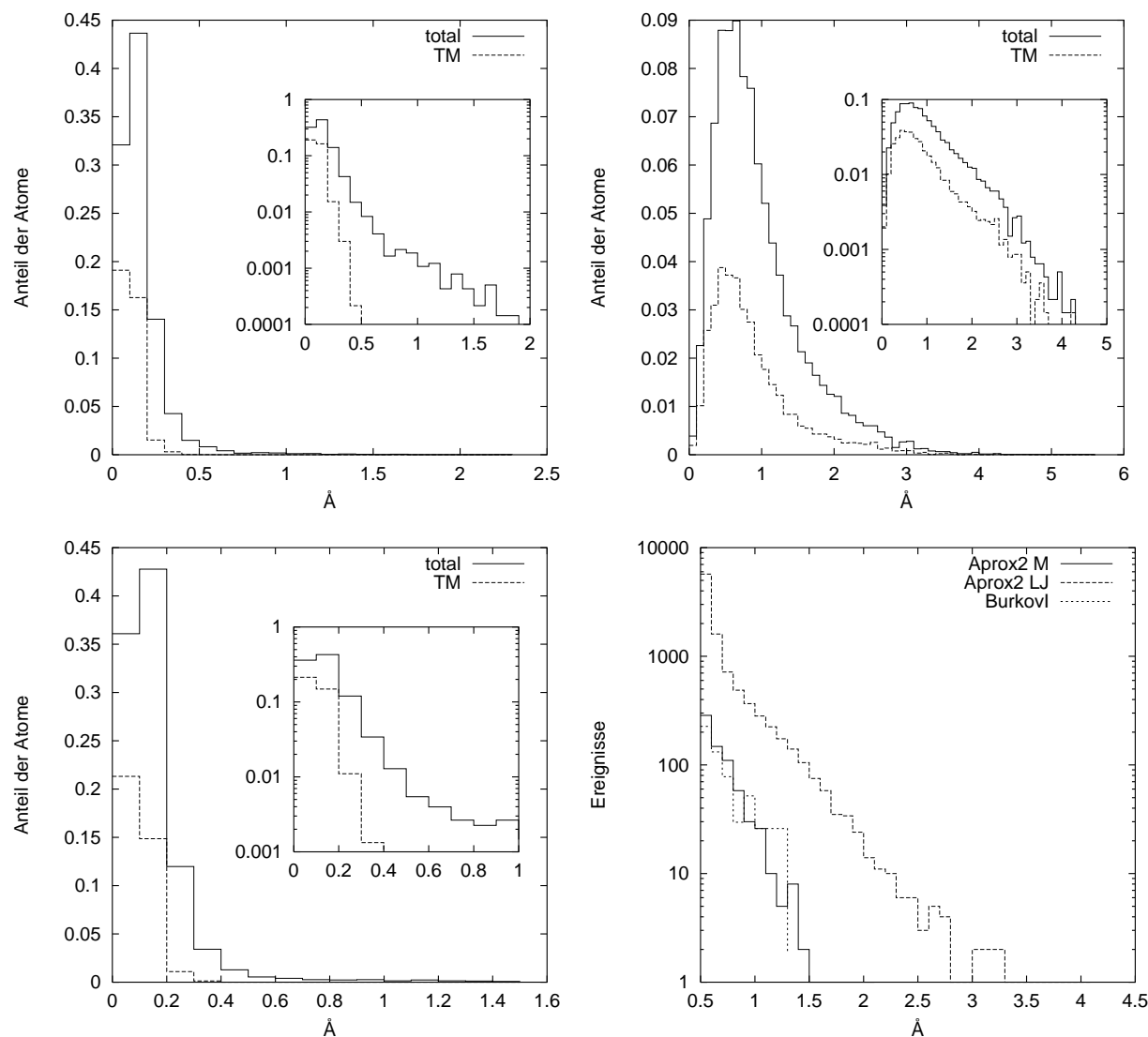


Abbildung C.21: Atombewegung unter verschiedenen Konfigurationen und Potentialen (AND). Von links oben: `aprox2` unter MIHALKOVIČ-Potential (Abb. 4.3), `aprox2` unter Lennard-Jones-Potential (Abb. 4.4), `burkovl` unter MIHALKOVIČ-Potential; zurückgelegter Weg je Flip bei den drei Simulationen.



# Literaturverzeichnis

- [1] BAAKE, M.; KRAMER, P.; SCHLOTTMANN, M.; ZEIDLER, D.: *The Triangle Pattern – A New Quasiperiodic Tiling with Fivefold Symmetry*. Preprint TPT-QC-89-08-1, Universität Tübingen (1989)
- [2] BENDERSKY, L.: *Quasicrystal with One-Dimensional Translation Symmetry and A Tenfold Rotation Axis*. Phys.Rev.Lett.,**55**:1461-1463 (1985)
- [3] BLÜHER, R.; SCHARWÄCHTER, P.; FRANK, W.; KRONMÜLLER, H.: *First Low-Temperature Radiotracer Studies of Diffusion in Icosahedral Quasicrystals*. Phys.Rev.Lett.,**80**:1014-1017 (1998)
- [4] BRÖCKER, B.: *dtv-Atlas zur Atomphysik*. DTV, München (1993)
- [5] BURKOV, S.E.: *Structure Model of the Al-Cu-Co Decagonal Quasicrystal*. Phys.Rev.Lett.,**67**:614 (1993)
- [6] CODDENS, G.; LYONNARD, S.; CALVAYRAC, Y.: *Time Scales and Atomic Species in the Dynamics of AlCuFe Quasicrystals*. Phys.Rev.Lett.,**78**:4209-4212 (1997)
- [7] CODDENS, G.; LYONNARD, S.; HENNION, B.; CALVAYRAC, Y.: *Correlated Simultaneous Phason Jumps in an Icosahedral AlPdMn Quasicrystal*. Eingereicht an Phys.Rev.Lett. (1999)
- [8] DILGER, C.: *Versetzungsbewegungen in dreidimensionalen Quasikristallen*. Diplomarbeit, Universität Stuttgart (1995)
- [9] ELSER, V.: *Comment on Quasicrystals: A New Class of Ordered Structures*. Phys.Rev.Lett.,**54**:1730 (1985)
- [10] FUJIWARA, T.; OGAWA, T. (Eds.): *Quasicrystals*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg (1990)
- [11] HABERLANDT, R.; FRITSCHKE, F.; PEINEL, G.; HEINZINGER, K.: *Molekulardynamik – Grundlagen und Anwendungen*. Vieweg & Sohn Verlagsges. mbH, Braunschweig/Wiesbaden (1995)

- [12] HE, L.X.; WU, Y.K.; KUO, K.H.: *Decagonal Quasicrystals with Different Periodicities along the Tenfold Axis in Rapidly Solidified Al<sub>65</sub>Cu<sub>20</sub>M<sub>15</sub> (M=Mn, Fe, Co, or Ni)*. J.Mat.Sci.Lett., **7**:1284 (1988)
- [13] HENLEY, C.L.: *Random Tiling with Quasicrystal Order: Transfer-Matrix Approach*. J.Phys.A, **21**:1649-1677 (1988)
- [14] HENLEY, C.L.: *Random Tiling Models*, in STEINHARDT, P.J.; DIVICENCO, D. (Eds.): *Quasicrystals - The State of the Art*. World Scientific, Singapore (1991)
- [15] JARIĆ, M.V. (Ed.): *Introduction to Quasicrystals*. Academic Press, Inc., San Diego, USA (1988)
- [16] JARIĆ, M.V. (Ed.): *Introduction to the Mathematics of Quasicrystals*. Academic Press, Inc., San Diego, USA (1987)
- [17] KALUGIN, P.A.; KATZ, A.: *A Mechanism for Self-diffusion in Quasicrystals*. Europhys. Lett., **21**:921-926 (1993)
- [18] LEVINE, D.; STEINHARDT, P.J.: *Quasicrystals: A New Class of Ordered Structures*. Phys.Rev.Lett., **53**:2477-2480 (1984)
- [19] LEVITOV, L.S.; RYHNER, J.: *Crystallography of Quasicrystals; Applications to Icosahedral Symmetry*. J.Phys.France, **49**:1835-1849 (1988)
- [20] LYONNARD, S.; CODDENS, G.; CALVAYRAC, Y.; GRATIAS, D.: *Dynamics of Phason Hopping in AlCuFe and AlMnPd Quasicrystals*. Physica B, 234-236:4209-4212 (1997)
- [21] MIHALKOVIČ, M.; ZHU, W.J.; HENLEY, C.L.; PHILLIPS, R.: *Icosahedral Quasicrystal Decoration Models: II. Optimization under Realistic Al-Mn Potentials*. Phys.Rev.B, **53**:9021 (1996)
- [22] PENROSE, R.: *The Role of Aesthetics in Pure and Applied Mathematical Research*. Bull.Inst.Math.Appl., **10**:266-271 (1974)
- [23] ROTH, JOHANNES: *Thermodynamische Stabilität von Quasikristallen und der Einfluß von Frenkeldefekten*. Dissertation, Universität Stuttgart (1992)
- [24] SCHAUZ, HANS: *Atomare Potentiale zur molekulardynamischen Beschreibung von Quasikristallen*. Diplomarbeit, Universität Stuttgart (1998)
- [25] SHECHTMAN, D.; BLECH, I.; GRATIAS, D.; CAHN, J.W.: *Metallic Phase with Long-Ranged Oriented Order and No Translational Symmetry*. Phys.Rev.Lett., **53**:1951-1953 (1984)
- [26] STADLER, JÖRG: *Molekulardynamische Studien an dekadagonalen Quasikristallen*. Dissertation, Universität Stuttgart (1995)

- [27] STEINHARDT, P.J.; OSTLUND, S. (Eds.): *The Physics of Quasicrystals*. World Scientific, Singapore (1987)
- [28] STEUERER, W.: *The Structure of Quasicrystals*. Zeitschrift f. Kristall.,**190**:179-234 (1990)
- [29] STÖCKER, H. (Hrsg.): *Taschenbuch der Physik*. Verlag Harri Deutsch, Thun (1994)
- [30] TILDESLEY, D.J.; ALLEN, M.P.: *Computer Simulation of Liquids*. Oxford Science Publications (1987)
- [31] WITTMANN, R.: *Elektronenmikroskopische, metallurgische und mechanische Untersuchungen der dekalagonalen Phase im System Al-Co-Cu(-Si)*. Dissertation, KFA Jülich (1993)
- [32] WOLFANGEL, DIETER: *Phasonendynamik in dekalagonalen Quasikristallen*. Diplomarbeit, Universität Stuttgart (1998)
- [33] ZEGER, GABRIELE: *Strukturmodelle und ihre Anwendung: Die dekalagonale quasikristalline T-Phase d-AlCuCo*. Diplomarbeit, Universität Stuttgart (1995)
- [34] ZEGER, GABRIELE: *Strukturuntersuchung dekalagonaler Quasikristalle mittels numerischer Simulation von Channeling-Rückstreuprofilen*. Dissertation, Universität Stuttgart (1999)



# Danksagung

Am Ende meiner Diplomarbeit möchte ich allen danken, die zu ihrem Gelingen beigetragen haben. Mein besonderer Dank gilt dabei Herrn Prof. Hans-Rainer Trebin für die freundliche Aufnahme an seinem Institut und Herrn Dr. habil. Rudolf Friedrich für die Übernahme des Mitberichts.

Ich hatte das große Glück mit Gabi Zeger und Andreas Rüdinger im gleichen Raum sitzen zu dürfen.<sup>1</sup> Ihre fachliche Kompetenz und ihre Hilfsbereitschaft ersparten mir fast immer den Gang in die Bibliothek. Viele physikalische und noch mehr unphysikalische Äußerungen und Ereignisse werden mir unvergessen bleiben.<sup>2</sup>

Ich möchte „unserem“ *Senior Scientist* Dieter Ventzki meinen Respekt aussprechen. Die Diskussionen mit ihm waren eine willkommene Abwechslung zum Physikalltag und haben meine Zeit am ITAP bereichert.

*Nearest Neighbours* Holger Stark und Jutta Hahn, Johannes `root#` Roth, Franz *Tiling* Gähler, Michael  $\LaTeX$  Reichenstein, Bettina Rank und Dorothee Stammler sowie allen anderen Institutsmitgliedern danke ich für die Hilfe bei trivialen und komplizierten Problemen sowie für das hervorragende Arbeitsklima und die angenehme Atmosphäre am Institut.

---

<sup>1</sup>Andreas wünsche ich alles Gute bei *Big Blue*.

<sup>2</sup>Holger weiß wovon die Rede ist.