

Zur Hydrodynamik in Quasikristallen

Diplomarbeit von
Christof Walz

Hauptberichter Prof. Dr. H.-R. Trebin
Mitberichter Dr. J. Main

Universität Stuttgart
Institut für Theoretische und Angewandte Physik
Juli 2003

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Quasikristalle	3
1.1 Experimentelle Entdeckung	3
1.2 Quasikristalle im diskreten Bild	4
1.2.1 Das eindimensionale Quasigitter	5
1.2.2 Verallgemeinerung auf d -dimensionale Quasigitter	8
1.2.3 Bausteine von zwei- und dreidimensionalen Quasigittern	9
1.3 Beugung an translationsgeordneten Strukturen	10
1.3.1 Kristallographie des Festkörpers	10
1.3.2 Kristallographie von Quasikristallen	11
1.3.3 Definition Quasikristall	13
1.4 Quasikristalle im Kontinuumsbild	15
1.4.1 Stabilität und Freiheitsgrade im Kontinuumsbild	15
1.5 Ikosaeder-Symmetrien und Gruppe	16
2 Elastizitätstheorie	21
2.1 Klassische Kontinuumsmechanik	21
2.1.1 Deformation und Verzerrung	22
2.1.2 Kräfte und Spannungen	24
2.1.3 Materialverhalten, HOOKESches Gesetz	25
2.2 Erweiterte Elastizitätstheorie des Quasikristalls	27
2.2.1 Elastizitätstheorie von Quasikristallen	28
2.2.2 Elastizitätstheorie von ikosaedrischen Quasikristallen	30
3 Hydrodynamik	35
3.1 Erklärung Hydrodynamik, Verallgemeinerung	35
3.1.1 Fluidodynamik-Gleichungen von EULER und NAVIER-STOKES	38
3.1.2 Hydrodynamik in ikosaedrischen Quasikristallen - Teil 1	41
3.2 Formalismus für Hydrodynamik	46
3.2.1 POISSONklammern	49
3.2.2 Hydrodynamik in ikosaedrischen Quasikristallen - Teil 2	53
3.3 Qualitatives Verhalten	56

3.3.1	Dispersionsrelation	58
4	Numerik von physikalischen Beispielen	61
4.1	Eindimensionaler Spezialfall	61
4.2	Numerik	63
4.2.1	Konstanten	63
4.2.2	Skalierung der Gleichungen	64
4.2.3	Finite Differenzen	66
4.2.4	Test des Algorithmus	67
4.3	Physikalische Beispiele	68
4.3.1	Impulsanregung	68
4.3.2	Phasonische Flipwahrscheinlichkeit	69
4.3.3	Phasonenwand	70
4.3.4	Eindrücken des Festkörpers, phononische Verschiebung	72
5	Anelastizität	75
5.1	Anelastisches Materialverhalten	75
5.2	Anelastizität aus Hydrodynamischen Gleichungen	78
5.2.1	Anelastizität aufgrund von Leerstellendiffusion	79
5.2.2	Anelastizität aufgrund der Phasonendiffusion	80
5.2.3	Viskoelastizität durch Leerstellen- und Phasonendiffusion	81
	Zusammenfassung	83
A	Rechnungen zum Kapitel Hydrodynamik	85
A.1	Variationsrechnung	85
A.2	POISSONklammern	86
A.3	Hydrodynamische Gleichungen	87
B	Literaturvergleich	91
B.1	Grenzfall isotroper Festkörper	91
B.2	Ishii : Umdeutung ρ und Reibungskoeffizient Γ_d	91
B.3	Hydrodynamik nach Khannanov	92
B.4	Dynamische Gleichungen der Elastodynamik	93
C	Messungen phasonischer Diffusion	95
C.1	Radiotracer Messung von Blüher	95
C.2	Mechanische Spektroskopie von Damson	95
C.3	Untersuchung mit TEM von Feuerbacher	96
C.4	Diffuse Streuung von deBoissieu	96
	Literaturverzeichnis	99

Einleitung

Als im Jahr 1984 eine neue Materialklasse, später Quasikristall genannt, von Shechtman et al. [1] entdeckt wurde, sorgte dies dafür, dass grundlegende Annahmen der Festkörperphysik überdacht werden mussten. Die Symmetrie des beobachteten diskreten Beugungsbilds des Quasikristalls war nicht vereinbar mit einem aus Elementarzellen bestehenden periodischen Aufbau des Festkörpers. Und gerade ein periodischer Aufbau der Materie wurde bis dahin als Voraussetzung für ein diskrete Beugungsbild mit scharfen BRAGG-Reflexen angenommen. Zwar waren in der Mathematik seit den siebziger Jahren lückenlose, aperiodische Ausfüllungen des Raums bekannt, doch der experimentelle Beweis, dass diese Materieform tatsächlich von der Natur realisiert wird und zu scharfen BRAGG-Reflexen führt, war noch nicht erbracht. Wie bedeutsam die Entdeckung dieser neuen Materialklasse ist, spiegelt sich darin wieder, dass die Veröffentlichung der Entdeckung zu den zehn meistzitierten Artikeln in *Physical Review Letters* zählt.

Geometrisch lässt sich ein Quasikristall als eine Projektion aus einem höherdimensionalen Raum darstellen. Diese Konstruktion führt zu einem neuen Phasenfreiheitsgrad, der Phason genannt wird. Neben der geometrischen Konstruktion kann man einen Quasikristall auch kontinuumstheoretisch beschreiben. Der phasonische Freiheitsgrad führt dort zu einem Beitrag der freien Energie und zu einer Kopplung mit dem phononischen Freiheitsgrad. Neben einer statischen Beschreibung, der Elastizitätstheorie, ist vor allem eine dynamische Theorie interessant. Wie entwickeln sich Phasonen mit der Zeit? Welche Wechselwirkungen bestehen mit den Phononen, wie beeinflussen sie diese? Diese Fragen stellen sich bei der Interpretation von Experimenten, wie z.B. die Auswirkung auf die Intensität von Beugungsbildern oder Versuche zur mechanischen Spektroskopie.

Für die dynamische Beschreibung des Quasikristalls wird in dieser Arbeit eine hydrodynamische Theorie verwendet. Hydrodynamik beschreibt niederenergetische, langwellige Störungen von makroskopischen Variablen aus dem thermodynamischen Gleichgewichts und deren Relaxation. Charakteristisch für dieses gekoppelte partielle Differenzialgleichungssystem ist dabei, dass sie sich als Erhaltungsgleichungen formulieren lassen.

In dieser Diplomarbeit werden die Gleichungen der Hydrodynamik für einen ikosaedrischen Quasikristall hergeleitet und das charakteristische Verhalten der hydrodynamischen Variablen untersucht. Nach der Herleitung erfolgt eine numerische Behandlung eines ein-dimensionalen Beispielsystems. Motiviert durch die Numerik werden zeitabhängige Mate-

rialgleichungen aus den hydrodynamischen Gleichungen abgeleitet.

Die Diplomarbeit gliedert sich in folgende fünf Kapitel:

1. Quasikristalle

In diesem Kapitel erfolgt die Beschreibung von Quasikristallen. Dabei werden zwei Sichtweisen vorgestellt: die diskrete und die kontinuierliche. Während die diskrete Beschreibung eine anschauliche Vorstellung des neuen Freiheitsgrades, des Phasons als Flip der Atomkonfiguration, vermittelt, ist die kontinuierliche Beschreibung Ausgangspunkt für die Elastizitätstheorie und die Hydrodynamik.

2. Elastizitätstheorie

Da der phasonische Freiheitsgrad einen Beitrag zur elastischen Energie liefert, muss die Kontinuumsmechanik erweitert werden. Diese Erweiterung erfolgt analog zum phononischen Freiheitsgrad. Die Symmetrie des ikosaedrischen Quasikristalls reduziert mit Hilfe der Gruppentheorie die in der Elastizitätstheorie notwendigen Konstanten.

3. Hydrodynamik

Nachdem in den ersten beiden Kapiteln die Quasikristalle vorgestellt und die Auswirkungen auf die Elastizitätstheorie erläutert worden sind, erfolgt in diesem Kapitel die zeitabhängige Beschreibung mit Hilfe der Hydrodynamik. Dazu wird zunächst der Begriff „Hydrodynamik“ erläutert, und am bekannten Beispiel der Fluidodynamik wiederholt. Eine erste Herleitung der hydrodynamischen Gleichungen erfolgt in Analogie zur Fluidodynamik. Danach wird eine formale Herleitung mit Hilfe von POISSONklammern wiedergegeben. Als Abschluss dieses Kapitels wird mit der Dispersionsrelation das qualitative hydrodynamische Verhalten angegeben.

4. Numerik von physikalischen Beispielen

Die hydrodynamischen Gleichungen werden anhand eines eindimensionalen Beispiels numerisch gelöst. Durch spezielle Rand- und Anfangswertbedingungen erfolgt eine Lösung von verschiedenen physikalischen Problemstellungen. Das Antwortverhalten des Quasikristalls motiviert die Frage nach den Materialgesetzen.

5. Anelastizität

Im abschließenden Kapitel erfolgt die Ableitung von Materialgesetzen der Anelastizität aus den hydrodynamischen Gleichungen. Für die Leerstellen- und Phasonendiffusion resultiert dies in der Form eines „zeitabhängigen“ HOOKEschen Gesetzes.

Anhang

Im ersten Teil des Anhangs sind einige Rechnungen zum Kapitel Hydrodynamik ausgeführt. In Anhang B werden Verbesserungen an den hydrodynamischen Gleichungen und eine allgemeine dynamische Theorie vorgestellt. Im letzten Teil des Anhangs wird kurz auf experimentelle Messungen von Diffusionsmechanismen in ikosaedrischen Quasikristallen, insbesondere der Phasonendiffusion, eingegangen.

Kapitel 1

Quasikristalle

In diesem ersten Kapitel soll zunächst einmal der Begriff des Quasikristalls erklärt werden. Dabei wird insbesondere auf die Besonderheiten dieser erst in den achtziger Jahren entdeckten Festkörperklasse eingegangen. Die Entdeckung und die Auswirkungen auf die Festkörperphysik sind Gegenstand des ersten Unterkapitels. Um eine erste Vorstellung von einem Quasikristall zu vermitteln, stelle ich in dem zweiten Unterkapitel die anschauliche geometrische Projektionsmethode am Beispiel eines eindimensionalen Quasikristalls vor. Danach wird die Verallgemeinerung auf höherdimensionale Quasikristalle gezeigt. Im vierten Unterkapitel wird der Quasikristall im Kontinuumsbild betrachtet. Das Auftreten eines diskreten Beugungsmusters ohne Periodizität wird nachgewiesen, sowie eines neuen Freiheitsgrades und dessen Bezug zum diskreten Modell. Im letzten Abschnitt wird noch die Symmetrie des betrachteten Quasikristalls betrachtet und damit eine Grundlage für die anschließenden Kapitel geschaffen.

1.1 Experimentelle Entdeckung

Quasikristalle wurden im Jahr 1984 von Shechtman, Blech, Gratias und Cahn [1] experimentell entdeckt. In ihrer Veröffentlichung berichten die Autoren von einem Festkörper, den sie aus einer rasch abgekühlten Aluminium-Mangan Schmelze gewinnen konnten und der ein scharfes Elektronenbeugungsbild einer fünfzählige Symmetrieachse zeigte.

Das Besondere an einer fünfzähligen Symmetrie bei einem Festkörper ist, dass sich diese in zwei und drei Dimensionen nicht vereinbaren lässt mit einem periodischen Aufbau der Materie, d.h. nicht translationsinvariant ist. Neben sechs fünfzähligen Symmetrieachsen wurden noch zehn dreizählige und 15 zweizählige festgestellt, zusammen also die Symmetrie eines Ikosaeders (siehe Abb.1.6). Die bis dahin verbreitete Annahme, dass nur eine periodische (translationsinvariante) Anordnung von elementaren Bausteinen (im zweidimensionalen Raum fünf, im dreidimensionalen 14 verschiedene BRAVAISgitter) ein scharfes Beugungsbild erzeugen kann, war somit widerlegt.



Abbildung 1.1: Elektronenbeugungsbild einer fünzfähigen Symmetrieachse aus [1]. Das Beugungsbild selbst zeigt zehnzählige Symmetrie.

In den nachfolgenden Jahren wurden noch eine Vielzahl weiterer Strukturen entdeckt, die nicht mit den kristallographischen Symmetrien eines periodischen Kristalls übereinstimmen (so z.B. acht-, zehn-, und zwölfzählige Achsen). Neben dreidimensionalen quasiperiodischen Strukturen wurden auch solche beobachtet, die in einer Ebene quasiperiodisch angeordnet sind und in der dazu orthogonalen Dimension periodisch. Sie erhielten den Namen T-Phasen. Später wird sich noch zeigen, dass der Begriff Quasikristall nicht nur Festkörper mit so genannten „kristallographisch verbotenen“ Symmetrien bezeichnet, sondern allgemeiner zu fassen ist.

1.2 Quasikristalle im diskreten Bild

Die Einschränkung auf die genannten kristallographischen Symmetrien lässt sich bis auf Johannes Kepler zurückverfolgen. Dieser zeigte in seinem Werk „Harmonices Mundi Libri V“ von 1619, dass nur diese mit einer periodischen, lückenlosen Ausfüllung des dreidimensionalen Raumes (der Ebene im Zweidimensionalen) verträglich sind.

Doch Penrose bewies 1974 [2], dass es auch aperiodische lückenlose Parkettierungen (auch Tilings genannt) der Ebene gibt. Aus vier verschiedenen Bausteinen (Pentagon, fünfzackiger Stern, Boot und Raute) und bestimmten Anordnungsregeln, konstruierte er ein aperiodisches Muster. Später konnte er noch die Anzahl der verschiedenen Bausteine von vier auf zwei reduzieren (Drache und Pfeil, oder zwei Rauten gleicher Seitenlänge mit verschiedenen Winkeln, siehe Abb.1.2).

Als kurze Vorbemerkung zur Beschreibung der geometrischen Konstruktion von quasiperiodischen Mustern sei darauf hingewiesen, dass durch diese Konstruktionen quasiperiodische Gitter (kurz: Quasigitter) erzeugt werden. Ein Quasikristall (quasiperiodischer Kristall) ist ein mit einer Atombasis dekoriertes Quasigitter. Durch die Dekoration kann

sich, wie beim periodischen Kristall, die Symmetrie des Kristalls gegenüber der des Gitters ändern. Dieser Problemkreis wird aber im Rahmen dieser Diplomarbeit nicht betrachtet. Der Einfachheit halber kann man annehmen, dass der Quasikristall an jedem Vertex seines Gitters mit einem Atom (eiatomige Basis) dekoriert ist.

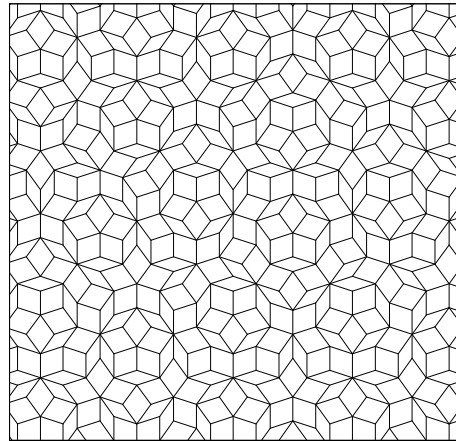


Abbildung 1.2: PENROSETiling bestehend aus dünner und dicker Raute (aus [3]). Betrachtet man das Bild genauer, so kann man erkennen, dass die Kanten der Rauten auf parallelen Scharen von fünf verschiedenen Geraden liegen. Dies beweist die weitreichende Orientierungsordnung des Quasigitters.

1.2.1 Das eindimensionale Quasigitter

Die folgende Diskussion der Projektionsmethode ist kurz gehalten. Für eine mathematisch strenge Beschreibung sei auf Zoglauer [4], sowie Duneau und Katz [5] verwiesen. Gemeinsames Charakteristikum der Projektionsmethoden für Quasigitter ist, dass ein d -dimensionales Gitter aus einem n -dimensionalem Raum, mit $n > d$, erzeugt wird.

Streifenprojektionsmethode

Als so genannten Einbettungsraum, also höherdimensionalen Raum, wählen wir den euklidischen Raum \mathbb{R}^2 mit den orthonormalen Basisvektoren \mathbf{e}_0 und \mathbf{e}_1 . Mit \mathbb{Z}^2 bezeichnen wir die Menge der Punkte mit ganzzahligen Koordinaten. Zusätzlich zum schon vorhandenen Koordinatensystem legen wir noch ein zweites in das Schaubild mit gleichem Ursprung 0, allerdings um einen Winkel α gedreht. Die Steigung der neuen x -Achse beträgt im alten Koordinatensystem $m = \tan \alpha$, die der neuen y -Achse $-1/m$. Ist die Steigung $m = \frac{p}{q}$, mit $p, q \in \mathbb{Z}, q \neq 0$, eine rationale Zahl, so schneidet die Gerade nach einer Periode P wieder in einem Punkt aus \mathbb{Z}^2 . Projiziert man die Punkte des \mathbb{Z}^2 senkrecht auf die Gerade, so ergibt sich eine diskrete Menge, die sich nach der Periode P wiederholt.

Im Folgenden sei die neue x -Achse mit physikalischem Raum, bzw. Parallelraum \mathbf{E}^{\parallel} , und die neue y -Achse mit Dualraum bzw. Orthogonalraum \mathbf{E}^{\perp} bezeichnet. Wählt man für die Steigung m jetzt eine irrational Zahl, also $m \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{Q}$, so ergibt die Projektion ein grundlegend anderes Resultat. Während der Schnitt der Punkte des \mathbb{Z}^2 mit dem Parallelraum \mathbf{E}^{\parallel} nur den Ursprung enthält:

$$\mathbb{Z}^2 \cap \mathbf{E}^{\parallel} = \{O\}, \quad (1.1)$$

liegen die senkrecht auf den Parallelraum \mathbf{E}^{\parallel} projizierten Punkte des \mathbb{Z}^2 dicht. Da auch die Steigung der Projektionsgerade ($-1/m$) irrational ist, kann man jedem Punkt des \mathbb{Z}^2 eindeutig eine Projektionsgerade und einen projizierten Punkt im Parallelraum zuordnen. Um wiederum zu einer nicht dichten Menge zu kommen, muss man die zu projizierenden Punkte einschränken. Dies geschieht durch ein Auswahlkriterium. Projiziert man das durch \mathbf{e}_0 und \mathbf{e}_1 aufgespannte Einheitsquadrat W^2 auf den Orthogonalraum, so erhält man den Akzeptanzbereich \mathcal{A} . Diesen verschiebt man entlang des Parallelraums. Alle Punkte, die in diesem Streifen S liegen, werden nun auf den Parallelraum projiziert, wobei der Streifen als halboffen angenommen wird, also ein Rand gehört zum Streifen, der andere nicht.

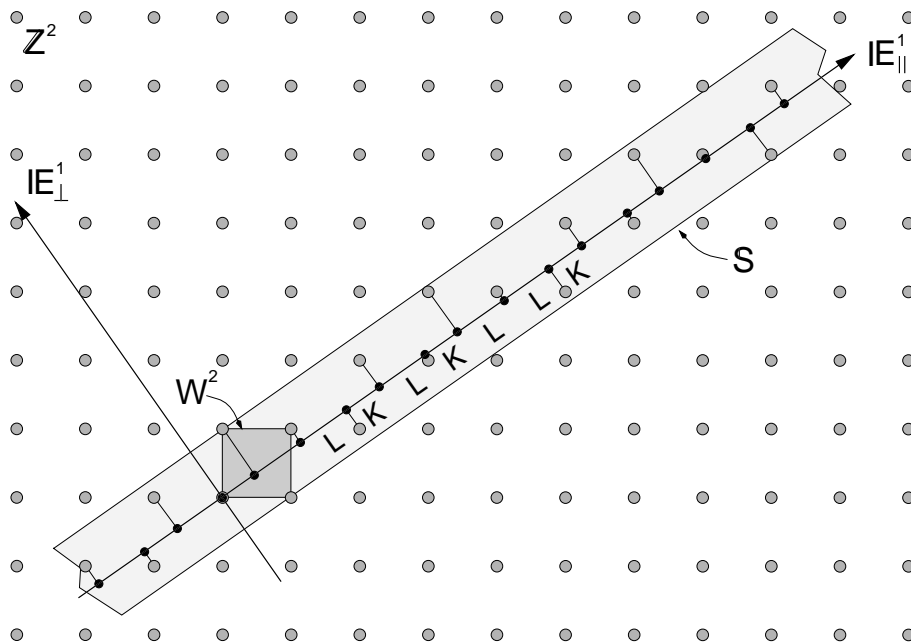


Abbildung 1.3: Der Projektionsformalismus am Beispiel eines eindimensionalen Quasikristall (aus [3]). Das ursprüngliche Koordinatensystem wurde nicht eingezeichnet. Die Abfolge der kurzen K und langen L Abstände ergibt die so genannte FIBONACCISEQUENZ. Der obere Rand gehört zum Streifen S , der untere nicht.

Die auf den Parallelraum projizierten Punkte liegen nun nicht mehr dicht, sondern bilden eine diskrete Menge. Es kommen genau zwei verschiedene Abstände zwischen zwei auf-

einander folgenden Punkten im Parallelraum vor, ein kurzer (K) und ein langer (L). Die Abfolge der Abstände ist aufgrund der irrationalen Steigung des Auswahlstreifens aperiodisch. In Abb. 1.3 wurde die Steigung gleich dem goldenen Schnitt τ gewählt, $m = \tau = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$. Der Grenzwert des Verhältnis zweier aufeinander folgender Zahlen der FIBONACCIfolge f_n ist gerade gleich dem goldenen Schnitt τ :

$$f_{n+1} = f_n + f_{n-1}, \quad f_0 = f_1 = 1, \quad (1.2)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{f_{n+1}}{f_n} = \tau. \quad (1.3)$$

In der FIBONACCIsequenz ist auch das Verhältnis der beiden Abstände $\frac{L}{K}$ sowie ihre relative Häufigkeit gleich τ .

Methode der atomaren Hyperflächen

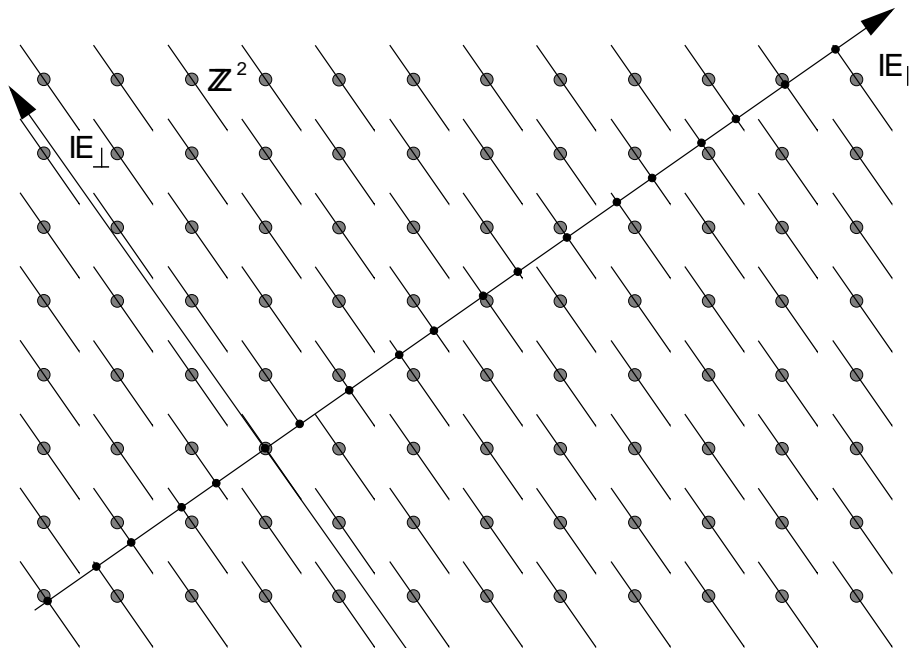


Abbildung 1.4: Methode der atomaren Hyperflächen aus [6].

Neben dem Streifenprojektionsformalismus gibt es noch weitere Methoden, Quasikristalle aus einem höherdimensionalen Hyperraum zu erzeugen. Ein dem Streifenprojektionsformalismus ähnliches Verfahren ist die Methode der atomaren Hyperflächen. Man geht wieder von einem mit den Basisvektoren \mathbf{e}_0 und \mathbf{e}_1 und einem dazu gedrehten (mit Parallel- und Orthogonalraum) Koordinatensystem aus. Diesmal wird aber an jedem Punkt des

\mathbb{Z}^2 als atomare Hyperfläche der invertierte Akzeptanzbereich $-\mathcal{A}$ des Streifenprojektionsformalismus angeheftet. Der physikalische Raum wird jetzt an jedem Schnittpunkt des Parallelraums mit diesen (halboffenen) atomaren Hyperflächen dekoriert. Die Methode der atomaren Hyperflächen erzeugt ein Quasigitter, das zum mit dem Projektionsformalismus konstruierten äquivalent ist. Äquivalent bedeutet hierbei, dass sich die beiden Quasigitter nur durch eine Translation im physikalischen Raum unterscheiden können.

Der Vollständigkeit halber sei noch der von deBruijn [7] entwickelte Gridformalismus zur Erzeugung quasiperiodischer Gitter erwähnt. Diese Methode, hier nicht beschrieben, ist besonders gut geeignet, um die Entstehung der Orientierungsordnung, d.h. die Anordnung der Kanten von den Rauten in Scharen paralleler Geraden, wie in Abb.1.2, zu erklären.

Verschiebungen im Parallel- und Orthogonalraum: Phononen und Phasonen

Durch eine globale Translation im Parallelraum $\mathbf{u} \in \mathbf{E}^{\parallel}$ erhält man ein äquivalentes Quasigitter. Ist die Translation dagegen lokal $\mathbf{u}(\mathbf{x}^{\parallel})$, so verschiebt man die Atompositionen gegeneinander. Dies ist der, von einem periodischen Kristall bekannte, Freiheitsgrad der Phononen.

Die Frage, die sich nun unmittelbar stellt, ist, was für Konsequenzen eine Verschiebung im Orthogonalraum hat. Die Auswirkung einer globalen Translation im Orthogonalraum $\mathbf{w} \in \mathbf{E}^{\perp}$ erkennt man am besten (in Abb. 1.3) an den Atomen mit den Positionen (0,1) und (1,0) im ursprünglichen Koordinatensystem. Da der Streifen halboffen ist, wird nur ein Punkt (0,1) auf den Parallelraum projiziert, der andere (1,0) nicht. Für jede infinitesimal kleine Translation in Richtung $-\mathbf{x}^{\perp}$ wird dann nicht mehr der Punkt (0,1) projiziert, sondern jetzt (1,0). Dies hat bei der Parkettierung des physikalischen Raums zur Folge, dass aus einer Abfolge von Abständen $KL \rightarrow LK$ wird, und umgekehrt. Das Atom hat also seine Position zu einer zuvor noch nicht vorhandenen gewechselt, man spricht von einem Flip, genauer phasonischem Flip. Bemerkenswert dabei ist auch, dass für jedes verschwundene Atom ein neues dazukommt. Die Masse bleibt bei einer solchen Transformation erhalten. Genauso wie beim phononischen Freiheitsgrad führt eine lokale Translation im Orthogonalraum $\mathbf{w}(\mathbf{x}^{\parallel}) \in \mathbf{E}^{\perp}$ zu einem weiteren Freiheitsgrad, der Phasonenfreiheitsgrad genannt wird. Wichtig ist dabei noch die Forderung, dass die Verschiebung $\mathbf{w}(\mathbf{x}^{\parallel})$ nur von der Koordinate \mathbf{x}^{\parallel} im physikalischen Raum abhängt, und nicht von der physikalisch unzugänglichen \mathbf{x}^{\perp} des Orthogonalraums.

1.2.2 Verallgemeinerung auf d -dimensionale Quasigitter

Ausgangspunkt ist wieder der n -dimensionale Raum \mathbb{R}^n ($n > d$). Aus diesem wählt man die Menge \mathbb{Z}^n der ganzzahligen Linearkombinationen der orthonormalen Einheitsbasis $\mathbf{e}_0, \dots, \mathbf{e}_{n-1}$ aus. Diese bilden ein kubisches Hypergitter. Man legt einen d -dimensionalen

Unterraum $\mathbf{E}^d = \mathbf{E}^{\parallel}$ so in den Hyperraum, dass

$$\mathbb{Z}^n \cap \mathbf{E}^d = \{O\} \text{ oder } \emptyset. \quad (1.4)$$

Den Akzeptanzbereich \mathcal{A} erhält man, indem der n -dimensionale Hyperwürfel $W^n = [0, \mathbf{e}_i)$, $i = 0, \dots, n-1$, entlang des Parallelraums \mathbf{E}^{\parallel} verschoben wird¹. Es werden wiederum nur Punkte dieses halboffenen Streifens S auf den physikalischen Raum projiziert. Ist die Dimension des Parallelraums \mathbf{E}^{\parallel} gleich der Dimension des Orthogonalraums \mathbf{E}^{\perp} , so spricht man auch von einer minimalen Einbettung, ansonsten (für $n > 2d$) kann man die erzeugten d -dimensionalen Quasigitter noch in lokale Isomorphieklassen unterteilen. Zwei Quasigitter sind lokal isomorph zueinander, wenn jeder endliche Ausschnitt des einen auch im anderen vorkommt. Bei einer nicht minimalen Einbettung kann man den Orthogonalraum \mathbf{E}^{\perp} in invariante Unterräume aufteilen. Eine Translation in einem dieser Unterräume entspricht dann dem phasonischem Freiheitsgrad, eine Translation im anderen wechselt im Allgemeinen die lokale Isomorphieklasse.

1.2.3 Bausteine von zwei- und dreidimensionalen Quasigittern

Wie wir beim eindimensionalen Quasigitter gesehen haben, lässt dieses sich aus zwei Bausteinen, den Abständen K und L , konstruieren. Von zweidimensionalen Quasikristallen wissen wir, dass man diese aus zwei verschiedenen Rauten (s. Abb.1.2) oder — wie ursprünglich von Penrose [2] vorgeschlagen — aus vier Bausteinen konstruieren können. Das PENROSETiling, das eine fünfzählige Symmetrie besitzt, kann man als eine Projektion aus einem fünfdimensionalen kubischen Hypergitter auf einen zweidimensionalen physikalischen Raum gewinnen. Diese Einbettung ist nicht minimal, und man kann verschiedene Isomorphieklassen unterscheiden. Für Dimensionen größer als eins muss man bei der Konstruktion des Quasigitters aus den Bausteinen noch gewisse lokale Anpassungsregeln beachten. Diese stellen sicher, dass man keine periodische Anordnung der Bausteine erhält. Für

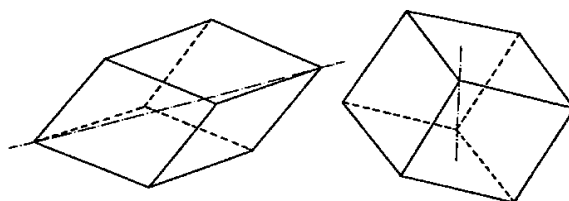


Abbildung 1.5: Die beiden Bausteine des dreidimensionalen Quasikristalls sind ein prolat-
es (links) und ein oblates Rhomboeder (rechts), aus [8].

¹Dies ist nicht die allgemeinste Form einen Quasikristall zu konstruieren. Weder muss das Hypergitter kubisch sein, noch muss zur Erzeugung des Akzeptanzbereichs ein Hyperwürfel verschoben werden.

den dreidimensionalen ikosaedrischen Quasikristall sind die Bausteine ein prolates und ein oblates Rhomboeder. Diese unterscheiden sich in den Winkeln bei gleichen Seitenlängen. Die Projektion erfolgt durch minimale Einbettung aus einem sechsdimensionalen kubischen Hypergitter.

1.3 Beugung an translationsgeordneten Strukturen

Nachdem der Schwerpunkt in diesem Kapitel bisher auf der geometrischen Konstruktion von Quasikristallen gelegen hat und wir somit eine erste Vorstellung von dieser Festkörperstruktur bekommen haben, soll im Folgenden vor allem auf die Erklärung der diskreten (scharfen) BRAGG-Peaks von Quasikristallen eingegangen werden. Es ist vor allem dieser Punkt (und dessen Folgen), der die Entdeckung von Quasikristallen so interessant machte.

1.3.1 Kristallographie des Festkörpers

Bei der Kristallographie wird ein Festkörper z.B. mit einem Röntgen- oder Elektronenstrahl (mit Wellenvektor \mathbf{k}) bestrahlt. Man beobachtet als Beugungsbild eine Intensitätsverteilung $I(\mathbf{k})$, die das Betragsquadrat des Strukturfaktors $F(\mathbf{k})$ ist. Der Strukturfaktor wiederum ist die FOURIERtransformierte der Streudichte $\rho(\mathbf{x})$ (im Folgenden mit der Massendichte gleichgesetzt).

$$I(\mathbf{k}) = |F(\mathbf{k})|^2, \quad (1.5)$$

$$\rho(\mathbf{x}) = \int F(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} d^d k, \quad (1.6)$$

$$F(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int \rho(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} d^d x. \quad (1.7)$$

Mit (1.5)-(1.7) folgt für die Streuintensität:

$$I(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{2d}} \int \int e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \rho(\mathbf{x}) \rho(\mathbf{x} + \mathbf{x}') d^d x d^d x'. \quad (1.8)$$

Ein periodischer Kristall zeichnet sich durch Translationsinvarianz aus, d.h.

$$\rho(\mathbf{x} + \mathbf{t}) = \rho(\mathbf{x}), \quad (1.9)$$

mit \mathbf{t} als Translationsvektor. Für ein d -dimensionales periodisches Kristallgitter \mathcal{G} kann man jeden Translationsvektor \mathbf{t} als ganzzahlige Linearkombination von d Basistranslationen $\mathbf{t}_0, \dots, \mathbf{t}_{d-1}$ ausdrücken, also

$$\mathbf{t} = n_i \mathbf{t}_i, \quad n_i \in \mathbb{Z}, \quad \forall \mathbf{t} \in \mathcal{G}. \quad (1.10)$$

Für die Wellenvektoren \mathbf{k} kann man dann auch eine d -dimensionale Basis $\mathbf{k}_0, \dots, \mathbf{k}_{d-1}$ wählen, so dass gilt:

$$\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{t}_j = 2\pi\delta_{ij}, \quad i, j = 0, \dots, d-1. \quad (1.11)$$

Diese Vektoren sind die Basis des reziproken Raums, und ihre ganzzahligen Linearkombinationen bilden das reziproke Gitter $\tilde{\mathcal{G}}$.

Vernachlässigt man die Atombasis, d.h. betrachtet man nur ein Gitter mit punktförmigen Atomen als Streuzentren, so ergibt sich für die Dichte

$$\rho(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{t} \in \mathcal{G}} \rho_0 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{t}), \quad (1.12)$$

und deren FOURIERtransformierte

$$F(\mathbf{k}) = \frac{\rho_0}{(2\pi)^d} \sum_{\mathbf{k}' \in \tilde{\mathcal{G}}} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'), \quad (1.13)$$

also eine Summe von DIRACschen Deltafunktionen an den Punkten des reziproken Gitters.

Somit führt eine periodische Anordnung zu einem Strukturfaktor, der aus Deltafunktionen besteht, und es treten scharfe BRAGG-Reflexe für Wellenvektoren, die gleich einem reziproken Gittervektor sind, auf.

Ist aber der periodische Aufbau aus einer Elementarzelle die einzige Möglichkeit ein Beugungsbild mit scharfen BRAGG-Reflexen zu erhalten? Lange Zeit ging man davon aus und hat Translationsinvarianz als Voraussetzung für scharfe BRAGG-Reflexe angenommen.

1.3.2 Kristallographie von Quasikristallen

Wie im Unterkapitel 1.2 über Quasikristalle im diskreten Bild erklärt, lassen sich d -dimensionale Quasikristalle aus einem höherdimensionalen Raum \mathbb{R}^n durch Parallelprojektion π^{\parallel} auf einen Unterraum, den physikalischen Raum $\mathbf{E}^d = \mathbf{E}^{\parallel}$, erzeugen. Der Raum \mathbb{R}^n lässt sich dabei in die Unterräume des physikalischen Parallelraums \mathbf{E}^{\parallel} und des Orthogonalraums \mathbf{E}^{\perp} aufteilen.

$$\mathbb{R}^n = \mathbf{E}^{\parallel} \oplus \mathbf{E}^{\perp}. \quad (1.14)$$

Die ganzzahligen Linearkombinationen der Basisvektoren \mathbf{e}_i (mit $i = 0, \dots, n-1$) definieren das kubische Hypergitter \mathbb{Z}^n . Die Projektion einer Auswahl des Hypergitters auf den physikalischen Raum bildet den Quasikristall.

Die Einteilung in kristallographisch erlaubte und verbotene Symmetrien hängt von der Dimension des periodischen Gitters ab. Insbesondere gilt die Einschränkung auf (1,2,3,4,6)-zählige Symmetrieachsen nur in zwei und drei Dimensionen. Durch die Projektion aus dem höherdimensionalen Raum \mathbb{R}^n ergibt sich nun die Möglichkeit für ursprünglich (d.h. für zwei oder drei Dimensionen) kristallographisch verbotene Symmetrien, da diese ja in \mathbb{R}^n

für $n > d = 3$ erlaubt sind. Die Projektion aus einem n -dimensionalem Raum sei jetzt am Beispiel des ikosaedrischen Quasikristalls erklärt. Der Einbettungsraum ist minimal, und besitzt die Dimension sechs, der physikalische Raum hat, wie der Orthogonalraum, die Dimension drei. Ortsvektoren \mathbf{x} des Hyperraums \mathbb{R}^n lassen sich in Anteile im Parallelraum \mathbf{E}^{\parallel} und des Orthogonalraums \mathbf{E}^{\perp} zerlegen:

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}^{\parallel} \oplus \mathbf{x}^{\perp}. \quad (1.15)$$

Mit Hilfe der Basisvektoren \mathbf{e}_i des Hypergitters lassen sich die Basisvektoren $\boldsymbol{\kappa}_i$ des reziproken Gitters definieren.

$$\mathbf{e}_i \cdot \boldsymbol{\kappa}_j = 2\pi\delta_{ij} \quad i, j = 0, \dots, n-1. \quad (1.16)$$

Die Vektoren des reziproken Hypergitters lassen sich wieder in zwei Anteile aufteilen:

$$\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k}^{\parallel} \oplus \mathbf{k}^{\perp}. \quad (1.17)$$

Kalugin et al. zeigten in [9] dass auch der Strukturfaktor von Quasikristallen aus einer Summe von Deltafunktionen besteht:

$$F(\mathbf{k}) = \sum_{\boldsymbol{\kappa}} S(\mathbf{k}^{\perp})\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}^{\parallel}), \quad (1.18)$$

wobei $S(\mathbf{k}^{\perp})$ die FOURIERtransformierte der Projektion des Auswahlstreifens auf \mathbf{E}^{\perp} (also des Akzeptanzbereiches \mathcal{A}) ist. Dazu noch folgende Anmerkungen:

- Die Projektionen der Basisvektoren des reziproken kubischen Hypergitters auf \mathbf{E}^{\parallel}

$$\pi^{\parallel}(\boldsymbol{\kappa}_i) = \mathbf{k}_i^{\parallel} \quad (1.19)$$

sind, da die Dimension des Hyperraums $n = 6$ größer ist als die des physikalischen Raums $d = 3$, nicht linear unabhängig über den reellen Zahlen. Allerdings sind sie ganzzahlig linear unabhängig. Dies ist die Folge der irrationalen Einbettung des physikalischen Raums. Beim eindimensionalen Quasikristall ist dies gerade die irrationale Steigung.

- Die BRAGG-Reflexe bilden eine dichte Menge, da man mit einer ganzzahligen Linearkombination von projizierten Gitterbasisvektoren \mathbf{k}_i^{\parallel} jedem reziproken Vektor \mathbf{k}^{\parallel} beliebig nahe kommen kann.

$$\exists n_i : \left| \mathbf{k}^{\parallel} - n_i \mathbf{k}_i^{\parallel} \right| < \epsilon \quad \text{für beliebiges } \epsilon \in \mathbb{R}^+. \quad (1.20)$$

- Das beobachtete diskrete BRAGG-Spektrum kommt nun dadurch zustande, dass die Intensität der meisten Reflexe verschwindend klein ist und durch die Messapparatur nicht mehr aufgelöst werden kann. Die verschwindende Intensität ist der Einfluss der FOURIERtransformierten des Akzeptanzbereichs $S(\mathbf{k}^{\perp})$. Dieses Verhalten ist vergleichbar mit dem diskreten Bild, in dem durch die Einführung des Auswahlstreifens die projizierten Punkte nicht mehr dicht im physikalischen Raum liegen.

Symmetrien des Beugungsbildes

Ist das Beugungsbild eines Kristalls invariant unter einer Symmetrieoperation g einer Gruppe G , dann folgt für die Intensität

$$I(g\mathbf{k}) = I(\mathbf{k}) \quad \forall g \in G. \quad (1.21)$$

Für den Strukturfaktor folgt mit Gleichung (1.5) unmittelbar, dass er proportional zu einem Phasenfaktor $\phi(g, \mathbf{k})$ ist:

$$F(g\mathbf{k}) = e^{i\phi(g, \mathbf{k})} F(\mathbf{k}). \quad (1.22)$$

Mit (1.7) und der Tatsache, dass die Dichte $\rho(\mathbf{x})$ eine reelle Größe ist, erhält man für das komplex konjugierte des Streufaktors:

$$F^*(\mathbf{k}) = F(-\mathbf{k}), \quad (1.23)$$

und somit für die Intensität des Beugungsbild:

$$I(-\mathbf{k}) = |F(-\mathbf{k})|^2 = |F(\mathbf{k})|^2 = I(\mathbf{k}). \quad (1.24)$$

Das Beugungsbild ist also immer invariant unter der Rauminversion. Ein Beispiel hierfür ist ja auch Abb.1.1, bei der man eine zehnzählige Symmetrie erkennen kann, die auf eine fünfzählige Symmetrieachse zurückgeht.

Weitere wichtige Folgerungen aus der Invarianz der Intensität des Beugungsbildes unter Symmetrieoperationen g sind bei Ricker [6] gezeigt. Insbesondere überträgt sich die Invarianz auf das reziproke Gitter $\tilde{\mathcal{G}}$, nicht aber auf das direkte Gitter \mathcal{G} . Beim periodischen Gitter ist die Symmetrie auch für das direkte Gitter gegeben.

1.3.3 Definition Quasikristall

Bevor wir schließlich zu der Definition des Quasikristalls kommen, soll noch eine andere verwandte Festkörperklasse vorgestellt werden.

Inkommensurable Kristalle

Inkommensurable Kristalle bestehen aus einer periodischen Grundstruktur, die mit einer dazu inkommensurablen Periode moduliert wird. Inkommensurabel bedeutet hierbei, dass das Verhältnis beider Perioden eine irrationale Zahl ist. Beispiele hierfür sind die Verschiebungsmodulation (Atome sind aus periodischer Sollposition verschoben, die Modulation erfolgt in einer zur Grundstruktur inkommensurablen Periode), Besetzungsmodulation (die

Besetzung der Gitterpositionen erfolgt durch verschiedene Atomsorten) und zusammengesetzte Strukturen (zwei oder mehrere Gitter, jedes für sich translationsinvariant, mit zueinander inkommensurablen Perioden werden zu einem Gitter zusammengesetzt). Auch das Beugungsbild eines inkommensurablen Kristalls zeigt scharfe BRAGG-Reflexe, der Strukturfaktor besteht aus Deltafunktionen. Da der inkommensurable Kristall auf einer periodischen Grundstruktur aufbaut, zeigt sein Beugungsbild Hauptreflexe der Grundstruktur. Die Periodizität der Grundstruktur bedingt, dass auch diese Kristalle nur kristallographisch erlaubte Symmetrien zeigen.

Definition Quasikristall nach Steinhardt und Ostlund [10]

- (i) Der Streufaktor einer translationsgeordneten Struktur ist als eine diskrete Summe von BRAGG-Reflexen gegeben.

Wie wir gesehen haben ist Translationsinvarianz, wie bei periodischen Kristallen gegeben, eine zu starke (hinreichende, aber nicht notwendige) Forderung für das Auftreten von BRAGG-Reflexen.

- (ii) Ein Quasikristall ist eine quasiperiodische Struktur mit einer kristallographisch verbotenen Symmetrie.

Im Gegensatz dazu ist ein inkommensurabler Kristall eine quasiperiodische Struktur mit einer kristallographisch erlaubten Symmetrie.

Eine Einschränkung muss man zu Punkt (ii) dieser Definition von 1987 noch machen. Nach der Entdeckung von Quasikristallen mit „kristallographisch erlaubter“ Symmetrie ist die Abgrenzung in kristallographisch erlaubte und verbotene Symmetrien hinfällig (siehe Lifshitz [11] und dessen Referenzen; es sei denn man akzeptiert Ausnahmen zu dieser Definition). Quasikristalle können also neben kristallographisch erlaubten auch verbotene Symmetrieachsen besitzen. Die Unterscheidung zwischen Quasikristallen und inkommensurablen Kristallen erfolgt dann durch unterschiedliche physikalische Eigenschaften [10]:

- Inkommensurable Kristalle kann man als Modulation eines Kristallgitters beschreiben, Quasikristalle nicht.
- Das Beugungsbild des inkommensurablen Kristalls enthält Hauptreflexe, die einem erlaubten Kristall-Muster zugeordnet werden können.
- Die inkommensurablen Längenskalen eines inkommensurablen Kristalls variieren kontinuierlich mit physikalischen Größen (z.B. Druck, Temperatur), die von Quasikristallen nicht.
- Das Transformationsverhalten der phasonischen Verschiebung unterscheidet sich bei inkommensurablen Kristallen und Quasikristallen.

1.4 Quasikristalle im Kontinuumsbild

In der bisherigen Beschreibung gingen wir von punktförmigen Atomen aus. Für das Kontinuumsbild wird jedem Ort \mathbf{x} eine Dichte $\rho(\mathbf{x})$ zugeordnet. Relative Maxima der Dichte werden dann mit Atompositionen identifiziert.

Als Folge des diskreten Beugungsbildes kann man jede Art von Kristall als Summe von Partialwellen mit Wellenvektoren des reziproken Gitters $\tilde{\mathcal{G}}$ schreiben.

$$\rho(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k} \in \tilde{\mathcal{G}}} \rho_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}. \quad (1.25)$$

Beim Quasikristall wird dabei über das reziproke Gitter mit $\boldsymbol{\kappa}$ summiert, da die Dimension n des Hyperraums \mathbb{R}^n größer ist als die des physikalischen Raums \mathbf{E}^d . Die Dichte im Hyperraum ergibt sich zu:

$$\rho(\mathbf{x}) = \sum_{\boldsymbol{\kappa} \in \tilde{\mathcal{G}}} \rho_{\boldsymbol{\kappa}} e^{i\boldsymbol{\kappa}\mathbf{x}} = \sum_{\boldsymbol{\kappa} \in \tilde{\mathcal{G}}} \rho_{\boldsymbol{\kappa}} e^{i\mathbf{k}^{\parallel}\mathbf{x}^{\parallel} + \mathbf{k}^{\perp}\mathbf{x}^{\perp}}. \quad (1.26)$$

Diese Hyperraumdichte ist periodisch, vollzieht man hingegen die Projektion auf den physikalischen Raum (Einschränkung von \mathbf{x} auf \mathbf{x}^{\parallel} , da $\pi^{\parallel}(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^{\parallel}$), so erhält man eine quasiperiodische Dichte $\rho(\mathbf{x}^{\parallel})$. Für einen periodischen Kristall ist die Dimension des Hyperraums gleich der des physikalischen Raums $n = d$.

Formal kann man beim Quasikristall für (1.25) mit (1.6) und (1.18) folgende Identifizierung vornehmen:

$$\rho_{\boldsymbol{\kappa}} = S(\mathbf{k}^{\perp}). \quad (1.27)$$

Der FOURIERKoeffizient $\rho_{\boldsymbol{\kappa}}$ der Dichte hat einen Betrag und eine Phase:

$$\rho_{\boldsymbol{\kappa}} = |\rho_{\boldsymbol{\kappa}}| e^{i\phi_{\boldsymbol{\kappa}}}. \quad (1.28)$$

1.4.1 Stabilität und Freiheitsgrade im Kontinuumsbild

Die Stabilität und die zusätzlichen Freiheitsgrade im Kontinuumsbild lassen sich am Besten mit einer phänomenologischen LANDAU-Theorie erklären. Die wesentlichen Punkte sollen hier wiedergegeben werden, für ausführlichere Erklärungen sei auf die Literatur verwiesen (Übersichtsartikel von Lubensky [12], Bak [13], Levine et al. [14] und Ricker [6]).

Im Rahmen der LANDAU-Theorie wird die Stabilität einer geordneten Phase untersucht. Als Ordnungsparameter, der die geordnete von der ungeordneten Phase unterscheidet, kommt für translationsgeordnete Strukturen der Fourierkoeffizient $\rho_{\mathbf{k}}$ der Dichte in Frage. Unter der Annahme, dass die freie Energie eine analytische Funktion des Ordnungsparameters darstellt, wird diese in Potenzen von $\rho_{\mathbf{k}}$ entwickelt. Exakter formuliert ist die freie Energie ein Funktional des Ordnungsparameters (mit Betrag $|\rho_{\mathbf{k}}|$ und Phase $\phi_{\mathbf{k}}$):

$$F[\rho_{\mathbf{k}}]. \quad (1.29)$$

Für die Stabilität der geordneten Phase wird nun das Minimum der freien Energie bestimmt:

$$\frac{\delta F[\rho_{\mathbf{k}}]}{\delta \rho_{\mathbf{k}}} \stackrel{!}{=} 0. \quad (1.30)$$

Da die Entwicklung in den $\rho_{\mathbf{k}}$ von der Symmetrie der Struktur abhängt, ist die stabile Phase diejenige mit der kleinsten minimierten freien Energie. Das wichtigste Ergebnis der Minimierung der freien Energie ist, dass nicht alle Phasen der FOURIERkoeffizienten festgelegt werden. Es sind noch Freiheitsgrade übrig, die zur gleichen freien Energie führen. Im diskreten Bild entspricht dies den lokal isomorphen Quasikristallen. Beim ikosaedrischen Quasikristall ergeben sich insgesamt sechs Phasenfreiheitsgrade, die durch die Basisvektoren des reziproken Gitters $\boldsymbol{\kappa}_i$ und dem sechsdimensionalen Verschiebungsvektor $\boldsymbol{\zeta}$ parametrisiert werden können:

$$\phi_i = \boldsymbol{\kappa}_i \cdot \boldsymbol{\zeta}, \quad i = 0, \dots, 5. \quad (1.31)$$

Dies kann man wieder in Anteile im physikalischen und im Orthogonalraum aufteilen, mit den Verschiebungen in den jeweiligen Räumen:

$$\boldsymbol{\zeta} = \boldsymbol{\zeta}^{\parallel} \oplus \boldsymbol{\zeta}^{\perp} \stackrel{!}{=} \mathbf{u} \oplus \mathbf{w}, \quad (1.32)$$

$$\phi_i = \boldsymbol{\kappa}_i \cdot \boldsymbol{\zeta} = \mathbf{k}_i^{\parallel} \cdot \mathbf{u} + \mathbf{k}_i^{\perp} \cdot \mathbf{w}, \quad i = 0, \dots, 5. \quad (1.33)$$

Vom periodischen Kristall wissen wir, dass man mit der Verschiebung \mathbf{u} den Freiheitsgrad der Phononen beschreibt. Die Verschiebung im Orthogonalraum \mathbf{w} führen zu einer Änderung der relativen Phase der Dichtepartialwellen. Daraus resultiert die Bezeichnung Phason.

1.5 Ikosaeder-Symmetrien und Gruppe

Da der in dieser Arbeit betrachtete Quasikristall ikosaedrische Symmetrie besitzt, soll in diesem Unterkapitel auf diese näher eingegangen werden. Zunächst werden die Symmetrien als Rotationen im Dreidimensionalen beschrieben, um danach auf verschiedene Darstellungen der Symmetrioperationen zu verallgemeinern. Damit wird die Grundlage für die Anwendung der Gruppentheorie in den folgenden Kapiteln über Elastizitätstheorie und Hydrodynamik gelegt. Ein Ikosaeder I (Abb.1.6) besteht aus 20 gleichseitigen Dreiecken mit 30 Kanten und zwölf Ecken.

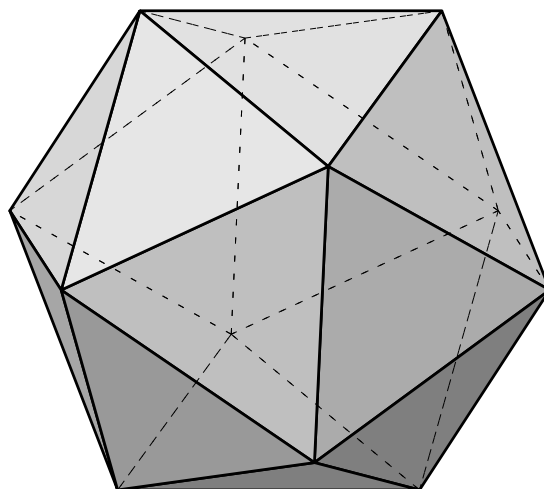


Abbildung 1.6: Ikosaeder, aus [3]

Anhand der Abb.1.6 wollen wir uns die Symmetrieoperationen g der Ikosaedergruppe Y veranschaulichen. Unter einer Symmetrieoperation g verstehen wir alle Operationen g , die, angewandt auf den Ikosaeder, diesen in sich selbst überführen:

$$gI = I \quad \forall g \in Y. \quad (1.34)$$

Wir wollen uns im Folgenden auf Drehsymmetrien beschränken. Von diesen gibt es drei verschiedene Arten:

- (i) Zweizählige Symmetrieachsen: Diese gehen von einer Kantenmitte durch den Mittelpunkt des Ikosaeders zur gegenüberliegenden Kantenmitte. Es gibt insgesamt 15 verschiedener solcher zweizähligen Symmetrieachsen. Die Anzahl der Elemente beträgt ohne die Identität 15. Allgemein gibt es für eine n -zählige Drehachse $(n - 1)$ mal die Anzahl der Drehachsen verschiedene Elemente.
- (ii) Dreizählige Symmetrieachsen: Diese gehen durch die Flächenmitten der Dreiecke und durch den Mittelpunkt. Von diesen gibt es zehn verschiedene, mit 20 Elementen.
- (iii) Fünzfählige Symmetrieachsen: Durch einen Eckpunkt und den Mittelpunkt. Von den fünfzähligen Symmetrieachsen gibt es sechs verschiedene, mit insgesamt 24 Elementen.

Zusammengefasst hat die Ikosaedergruppe, mit der Identität E , 60 verschiedene Elemente.

Das bisherige Bild von Symmetrioperationen g am Beispiel der Rotationen des Ikosaeders ist ein Spezialfall einer irreduziblen Darstellung in drei Dimensionen². Die Rotation ist nur eine bestimmte Darstellung der Symmetrioperation g . Im Allgemeinen ist eine Darstellung eines Gruppenelements g einer endlichen Gruppe G reduzibel. Man kann dann die Darstellung in einzelne Bausteine, den irreduziblen Darstellungen, zerlegen (siehe dazu die Darstellungstheorie der Gruppentheorie). Wichtigstes Hilfsmittel hierbei ist die basisunabhängige Spur der Matrixdarstellung eines Gruppenelements, Charakter χ genannt. Da die Charaktere für Elemente aus der selben Konjugationsklasse gleich sind, ist es ausreichend, diese für jede Konjugationsklasse und irreduzible Darstellung anzugeben. Dies geschieht mit Hilfe der Charaktertafel³ (Tab. 1.1). Die Ikosaedergruppe besteht aus fünf Konjugationsklassen $E, C_\pi, C_{2\pi/3}, C_{2\pi/5}, C_{4\pi/5}$, die dargestellt als räumliche Rotationen die Identität und Drehungen um die angegebenen Winkel beschreiben. Mit Γ^k wird eine k -dimensionale Darstellung bezeichnet, vor den Konjugationsklassen stehen die Anzahl der Elemente einer Konjugationsklasse.

	1 E	15 C_π	20 $C_{2\pi/3}$	12 $C_{2\pi/5}$	12 $C_{4\pi/5}$
$\chi(\Gamma^1)$	1	1	1	1	1
$\chi(\Gamma^3)$	3	-1	0	τ	$-\frac{1}{\tau}$
$\chi(\Gamma^{3'})$	3	-1	0	$-\frac{1}{\tau}$	τ
$\chi(\Gamma^4)$	4	0	1	-1	-1
$\chi(\Gamma^5)$	5	1	-1	0	0
$\chi(\Gamma_r^6)$	6	-2	0	1	1

Tabelle 1.1: Charaktertafel der Ikosaedergruppe, sowie Charaktere für die reduzible Darstellung Γ_r^6 , aus [12].

Die irreduziblen Darstellungen der Ikosaedergruppe haben die Dimension eins, drei, vier und fünf, wobei sich die beiden dreidimensionalen Darstellungen voneinander unterscheiden. Die sechsdimensionale Darstellung des kubischen Hypergitters stellt für die Gruppentheorie eine reduzible Darstellung Γ_r^6 der Ikosaedergruppe dar. Die Häufigkeit a_i mit der eine irreduzible Darstellung Γ^i in einer reduziblen $\Gamma(g)$ vorkommt, ist:

$$a_i = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \chi(\Gamma_r(g)) \chi^*(\Gamma^i(g)) \quad (1.35)$$

$$= \frac{n_C}{|G|} \sum_C \chi(\Gamma_r(C)) \chi^*(\Gamma^i(C)), \quad (1.36)$$

mit $|G|$ der Ordnung (Anzahl der Elemente) der Gruppe G , n_C der Ordnung der Klasse C . In der zweiten Zeile geht die Summe über alle Klassen, statt über die Elemente der Gruppe.

²Zur Gruppentheorie siehe Literatur wie z.B. [15], [16].

³ $\tau = \frac{\sqrt{5}+1}{2}$ ist wieder der goldene Schnitt, eine Lösung von $\tau^2 = \tau + 1 \Rightarrow \tau - \frac{1}{\tau} = 1$

Man kann die sechsdimensionale Darstellung in die beiden dreidimensionalen irreduziblen Darstellungen zerlegen. In der Γ^3 Darstellung wird die Ikosaedergruppe durch die Rotationen beschrieben. Die andere Darstellung $\Gamma^{3'}$ beschreibt zwar auch Rotationen, allerdings zum Teil mit einem anderen Drehwinkel.

Der Hyperraum \mathbb{R}^6 zerfällt in zwei, unter der Ikosaedergruppe invariante Unterräume:

$$\Gamma_r^6 = \Gamma^3 \oplus \Gamma^{3'}. \quad (1.37)$$

Diese werden dem physikalischen Raum und dem Orthogonalraum zugeordnet. Die Zuordnung wird im Rahmen der Kontinuumsmechanik des nächsten Kapitels nach Verwendung finden:

$$\Gamma^3 \rightarrow \text{physikalischer Raum } \mathbf{E}^{\parallel}, \quad (1.38a)$$

$$\Gamma^{3'} \rightarrow \text{Orthogonalraum } \mathbf{E}^{\perp}. \quad (1.38b)$$

Kapitel 2

Elastizitätstheorie

Dieses Kapitel beschreibt das mechanische Antwortverhalten von Materie auf eine äußere Störung. Die Antwort wird in der Elastizitätstheorie als instantan angenommen, d.h. über das zeitliche Verhalten wird keine Aussage gemacht. Die Hydrodynamik ist eine Erweiterung der Elastizitätstheorie, mit der die Zeitabhängigkeit untersucht werden kann. Zunächst wird auf die klassische Kontinuumsmechanik eingegangen (siehe Becker und Bürger [17], Trebin [18]), um danach die Erweiterung durch die phasonischen Freiheitsgrade zu berücksichtigen. Die Elastizitätstheorie von Quasikristallen ist in den Vorgängerarbeiten von Bachteler [19], [20] und Ricker [6] ausführlich beschrieben.

2.1 Klassische Kontinuumsmechanik

Als klassische, phänomenologische Feldtheorie beschreibt die Kontinuumsmechanik das mechanische und thermische Verhalten von Materie. Die Beschreibung erfolgt dabei auf einem makroskopischen Niveau und beinhaltet alle Aggregatzustände. Flüssigkeiten werden vor allem mit Gleichungen der Fluidmechanik beschrieben, Festkörper mit denen der Elastizitätstheorie. Doch ist die Einteilung der Materie im Rahmen der Kontinuumsmechanik in die Aggregatzustände nicht zwingend, vielmehr sind die Übergänge in der Beschreibung fließend. Der diskrete Aufbau der Materie wird ignoriert. Es ist daher offensichtlich, dass die mit Hilfe der Kontinuumsmechanik erlangten Erkenntnisse nur auf Längenskalen, die groß sind gegenüber dem diskreten Maßstab (bei Festkörpern typischerweise einige Ångström), Gültigkeit besitzen. Im Rahmen dieses Kapitels wird nur das isotherme, mechanische Antwortverhalten von Materie betrachtet, die Elastizitätstheorie.

In der Kontinuumsmechanik verwendet man zwei verschiedene Koordinatensysteme. Dies sind die (materiellen) LAGRANGESchen Koordinaten ξ , sowie die (räumlichen) EULERSchen Koordinaten \boldsymbol{x} . Die LAGRANGESche Beschreibung folgt aus der klassischen Punktmechanik, indem man von dem diskreten Teilchenindex i den Übergang zu einem kontinuierlichem Parameter ξ macht. Die EULERSchen Koordinaten werden vor allem in der

Hydrodynamik (genaue Erklärung des Begriffs im Kapitel über Hydrodynamik) verwendet. Eine physikalische Größe $\phi(\mathbf{x}, t)$ wird dabei als Funktion der Ortskoordinate \mathbf{x} und der Zeit t angegeben, also feldtheoretisch beschrieben.

Betrachten wir einen bestimmten Punkt X des Kontinuums. Die materielle Koordinate $\boldsymbol{\xi}$ ist fest mit einem Punkt X verbunden und somit eine zeitlich unveränderliche Größe. Man kann die LAGRANGESche Koordinate $\boldsymbol{\xi}$ mit dem materiellen Punkt X selbst identifizieren. Die EULERSche Koordinate $\mathbf{x}(t)$ gibt hingegen in einem räumlich festen Koordinatensystem den physikalischen Ort an, an dem sich ein materieller Punkt X zur Zeit t befindet und ist somit zeitlich veränderlich. Um die beiden Beschreibungen vergleichen zu können, benutzt man eine Referenzkonfiguration zur Referenzzeit t_0 :

$$\boldsymbol{\xi} = \mathbf{x}(t = t_0). \quad (2.1)$$

Die Ortskoordinate \mathbf{x} zur Zeit t_0 ist also gleich der LAGRANGESchen Koordinate $\boldsymbol{\xi}$. Für die Elastizitätstheorie ist es sinnvoll eine undeformierte Referenzkonfiguration zu wählen. Die Abhängigkeit von der Referenzzeit t_0 wird im Folgenden als bekannt vorausgesetzt und nicht mehr explizit erwähnt.

Da sich zwei materielle Punkte X_1 und X_2 zur selben Zeit nicht am selben physikalischen Ort \mathbf{x} befinden können, sind die beiden Beschreibungen eineindeutig ineinander umwandelbar:

$$\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\xi}(\mathbf{x}, t), \quad (2.2)$$

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}(\boldsymbol{\xi}, t). \quad (2.3)$$

Der Verschiebungsvektor¹ \mathbf{u} ist definiert als Differenz zwischen der EULERSchen und der LAGRANGESchen Koordinate:

$$\mathbf{u}(\boldsymbol{\xi}) := \mathbf{x}(\boldsymbol{\xi}, t) - \boldsymbol{\xi}, \quad (2.4)$$

beschreibt also die vektorielle Differenz zwischen aktuellem Ort und dem zur Referenzzeit t_0 des materiellen Punktes X .

2.1.1 Deformation und Verzerrung

Um ein Maß für die lokale Deformation zu erhalten, geht man von der differentiellen Formulierung von (2.3) aus²:

$$dx_i(\boldsymbol{\xi}, t) = \frac{\partial x_i(\boldsymbol{\xi}, t)}{\partial \xi_j} d\xi_j =: F_{ij}(\boldsymbol{\xi}, t) d\xi_j, \quad (2.5)$$

$$F_{ij}(\boldsymbol{\xi}, t) := \frac{\partial x_i(\boldsymbol{\xi}, t)}{\partial \xi_j}, \quad (2.6)$$

$$d\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi}, t) =: \mathbf{F} d\boldsymbol{\xi}. \quad (2.7)$$

¹Die Beschreibung erfolgt im LAGRANGESchen Bild.

²Bei doppelt auftretenden Indices wird die EINSTEINSche Summenkonvention angewandt.

Dabei wurde der Deformationsgradiententensor \mathbf{F} definiert. Mit (2.4) erhält man den Verschiebungsgradienten $\delta\mathbf{F}$:

$$dx_i(\boldsymbol{\xi}, t) = \left(\delta_{ij} + \frac{\partial u_i(\boldsymbol{\xi}, t)}{\partial \xi_j} \right) d\xi_j =: (\delta_{ij} + \delta F_{ij}(\boldsymbol{\xi}, t)) d\xi_j, \quad (2.8)$$

$$\delta F_{ij}(\boldsymbol{\xi}, t) := \frac{\partial u_i(\boldsymbol{\xi}, t)}{\partial \xi_j}, \quad (2.9)$$

$$d\mathbf{x}(\boldsymbol{\xi}, t) =: (\mathbf{1} + \delta\mathbf{F}) d\boldsymbol{\xi}. \quad (2.10)$$

Reine Translationen werden durch eine konstante Verschiebung \mathbf{u} beschrieben. Der Verschiebungsgradient $\delta\mathbf{F}$ verschwindet dabei. Der Deformationsgradient \mathbf{F} beschreibt neben der Verzerrung auch noch Rotationen. Die Determinante von \mathbf{F} ist immer positiv³. Der Deformationsgradient \mathbf{F} ist deshalb in zwei Tensoren zerlegbar, von dem einer die reine Verzerrung beschreibt, während der andere ein orthogonaler Tensor der Rotation ist.

Als Maß für eine reine Verzerrung wird im Allgemeinen ein weiterer Tensor angegeben, nämlich der GREENSche Verzerrungstensor $\boldsymbol{\varepsilon}$. Dieser ist definiert als Differenz zwischen dem Quadrat des infinitesimalen Abstands $d\mathbf{x}$ der aktuellen Konfiguration und der Referenzkonfiguration:

$$d\mathbf{x}^2 - d\boldsymbol{\xi}^2 =: 2 d\boldsymbol{\xi}^t \boldsymbol{\varepsilon} d\boldsymbol{\xi}. \quad (2.11)$$

Ausgedrückt mit Hilfe des Deformations- \mathbf{F} und des Verschiebungsgradienten $\delta\mathbf{F}$ lautet dieser:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}(\mathbf{F}^t \mathbf{F} - \mathbf{1}) \quad (2.12)$$

$$= \frac{1}{2}(\delta\mathbf{F}^t + \delta\mathbf{F} + \delta\mathbf{F}^t \delta\mathbf{F}), \quad (2.13)$$

und in Komponentenschreibweise:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial \xi_j} + \frac{\partial u_j}{\partial \xi_i} \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial u_k}{\partial \xi_i} \frac{\partial u_k}{\partial \xi_j}. \quad (2.14)$$

Wie man anhand von (2.14) leicht sieht, ist $\boldsymbol{\varepsilon}$ symmetrisch:

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji} \quad \forall i, j. \quad (2.15)$$

Für einen Festkörper ist die Annahme, dass benachbarte Punkte ähnliche Verschiebungen erfahren und somit benachbart bleiben, plausibel. Dies drückt man in der so genannten „geometrischen“ Linearisierung aus:

$$\left| \frac{\partial u_i}{\partial \xi_j} \right| \ll 1 \quad \forall i, j. \quad (2.16)$$

³Folgt aus der Tatsache, dass zwei materielle Punkte $X_{1,2}$ sich nie am selben physikalischen Punkt \mathbf{x} befinden können.

Der GREENSche Verzerrungstensor vereinfacht sich damit zu:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial \xi_j} + \frac{\partial u_j}{\partial \xi_i} \right). \quad (2.17)$$

Die bisherige Betrachtung erfolgte in materiellen Koordinaten. Durch die geometrische Linearisierung ergibt sich eine weitere Vereinfachung. Die Beschreibung in LAGRANGESchen Koordinaten ist gleich der in EULERSchen:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (2.18)$$

2.1.2 Kräfte und Spannungen

Durch äußere Kräfte, sowie innere Inhomogenitäten treten in einem elastischen Kontinuum Spannungen auf. Teilt man einen Kontinuumskörper entlang einer Ebene mit dem Normalenvektor \mathbf{n} , so muss man, um den Körper im mechanischen Gleichgewicht zu halten, an der Oberfläche eine Flächenkraft $\mathbf{t}(\mathbf{n})$ aufbringen. Diese bezeichnet man auch als Spannungsvektor und hat die Dimension von Kraft pro Fläche. Für die andere Ebene mit Normalenvektor $-\mathbf{n}$ muss, nach dem dritten NEWTONSchen Axiom, $\mathbf{t}(-\mathbf{n}) = -\mathbf{t}(\mathbf{n})$ gelten. Den CAUCHYSchen Spannungstensor $\boldsymbol{\sigma}$ definiert man als den linearen Zusammenhang zwischen Flächennormalen \mathbf{n} und dem Spannungsvektor \mathbf{t} :

$$\mathbf{t}(\mathbf{x}, \mathbf{n}) = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})\mathbf{n}. \quad (2.19)$$

Aus der Drehimpulsbilanz kann man folgern, dass der Spannungstensor symmetrisch ist. Diese Folgerung ist aber nicht richtig, falls z.B. zusätzliche magnetische Wechselwirkungen auftreten. Im Folgenden wird in dieser Arbeit von symmetrischen Spannungstensoren ausgegangen:

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji} \quad \forall i, j. \quad (2.20)$$

Neben den Flächenkräften, die durch den Spannungstensor $\boldsymbol{\sigma}$ ausgedrückt werden können, gibt es noch weitreichende Volumenkräfte $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ mit der Dimension Kraft pro Volumen. Ein typisches Beispiel dafür ist die Gravitation.

Das Kräftegleichgewicht eines Kontinuums B mit Rand ∂B ist dann gegeben durch:

$$\int_B \mathbf{f}(\mathbf{x}) dV + \oint_{\partial B} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} df = 0, \quad (2.21)$$

oder nach Umformung mit dem Satz von GAUSS:

$$\int_B \left(\mathbf{f}(\mathbf{x}) + \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) \right) dV = 0. \quad (2.22)$$

Da dies unabhängig von B gelten muss, folgt für den Integranden:

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f} = 0. \quad (2.23)$$

Das ist die so genannte **Hauptgleichung der Elastostatik**.

2.1.3 Experimentelles Materialverhalten, HOOKEsches Gesetz

Die bisherigen Gleichungen sind unabhängig vom jeweiligen Material gültig. Die material-spezifischen Eigenschaften treten bei dem noch ausstehenden Zusammenhang zwischen Verzerrung und Spannung hinzu. Je nach experimentellem Verhalten des Körpers auf mechanische Beanspruchung unterscheidet man vier Kategorien des Materialverhaltens (nach Haupt [21]):

- (i) Die **Elastizitätstheorie** beschreibt geschwindigkeitsunabhängige Antworten des Systems ohne Hystereseeigenschaften. Das Antwortverhalten ist vollständig reversibel. Ein Spezialfall davon, die lineare Elastizitätstheorie, wird in diesem Kapitel genauer beschrieben.
- (ii) Auch die **Plastizität** ist unabhängig von der Geschwindigkeit, hat aber eine Hysterese.
- (iii) Ist das Antwortverhalten geschwindigkeitsabhängig und zeigt dabei keine Hysterese im Gleichgewicht, so spricht man von **Viskoelastizität**. In Kapitel 5 wird noch genauer darauf eingegangen, insbesondere auf die lineare Viskoelastizität. Durch Viskoelastizität werden eine Vielzahl rheologischer Modelle beschrieben.
- (iv) Die **Viskoplastizität** ist geschwindigkeitsabhängig und hat auch im Gleichgewicht eine Hysterese.

Die Einteilung erfolgt also anhand der Geschwindigkeitsabhängigkeit und der Hystereseeigenschaften. Eine weitere Einteilung nach Betten [22] fasst die Viskoelastizität und Viskoplastizität zur Kriechmechanik zusammen. Da die Einteilung aufgrund des experimentellen Antwortverhaltens erfolgt, ist diese somit von den Versuchsbedingungen abhängig. Ein Körper kann unter dem einen Experiment ein rein elastisches Verhalten zeigen, während er bei einem anderen Experiment besser durch ein viskoelastisches Modell beschrieben wird.

Im allgemeinsten Fall der Elastizität ist der Zusammenhang von Spannung und Verzerrung durch ein Funktional gegeben:

$$F[\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\sigma}] = 0. \quad (2.24)$$

Unter folgenden Annahmen erhält man das HOOKEsche Gesetz:

$$\sigma_{ij}(\boldsymbol{x}) = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}(\boldsymbol{x}). \quad (2.25)$$

- (i) Gleichzeitigkeit: Das HOOKEsche Material reagiert instantan mit einer inneren Spannung bei vorgegebener Verzerrung (und umgekehrt). Insbesondere treten keine Gedächtniseffekte auf. (2.25) ist unabhängig von der Zeit t .

- (ii) Homogenität: Der HOOKEsche Tensor \mathbf{C} , auch Elastizitätstensor genannt, ist für jeden physikalischen Ort \mathbf{x} des Körpers gleich, $\mathbf{C} \neq \mathbf{C}(\mathbf{x})$.
- (iii) Linearität: Die Spannung hängt linear von der Verzerrung ab. Dies ist ein Beispiel der „physikalischen“ Linearisierung, nicht zu verwechseln mit der „geometrischen“ Linearisierung⁴.
- (iv) Lokalität: Die Wechselwirkung zwischen Spannung $\sigma_{ij}(\mathbf{x})$ und Verzerrung $\varepsilon_{kl}(\mathbf{x})$ tritt nur am selben physikalischen Ort \mathbf{x} auf.

Die freie elastische Energiedichte f berechnet sich differenziell nach:

$$df = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} \stackrel{!}{=} \frac{\partial f}{\partial \varepsilon_{ij}} d\varepsilon_{ij}, \quad (2.26)$$

$$\Rightarrow \quad \sigma_{ij} = \frac{\partial f}{\partial \varepsilon_{ij}}. \quad (2.27)$$

Geht man von einem Energienullpunkt $f_0 = 0$ aus, so erhält man durch Integration⁵:

$$f = \frac{1}{2} C_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl}. \quad (2.28)$$

Die Komponenten des HOOKEschen Tensors nennt man auch Elastizitätskonstanten oder Elastizitätsmoduln. Die Nachgiebigkeit \mathbf{S} ist die Inverse des HOOKEschen Tensors $\mathbf{S} = \mathbf{C}^{-1}$.

Der HOOKEsche Tensor hat als Tensor vierter Stufe maximal $3^4 = 81$ verschiedene Komponenten. Durch Permutationssymmetrien der Indices lässt sich diese Anzahl reduzieren. So folgt aus der Symmetrie des Verzerrungstensors (2.15) und des Spannungstensors (2.20):

$$C_{ijkl} \stackrel{(2.15)}{=} C_{jikl}, \quad C_{ijkl} \stackrel{(2.20)}{=} C_{ijlk}. \quad (2.29)$$

Schließlich reduziert sich die Anzahl auf 21 unabhängige Komponenten, da sich die Elastizitätskonstanten als (vertauschbare) zweite Ableitungen der freien elastischen Energiedichte nach den Verzerrungen schreiben lassen.

$$C_{ijkl} = \frac{\partial^2 f}{\partial \varepsilon_{ij} \partial \varepsilon_{kl}} \Rightarrow C_{ijkl} = C_{klij}. \quad (2.30)$$

Die bisherige Permutationssymmetrien gelten für jedes Material. Durch die Punktsymmetrie des Festkörpers kann die Anzahl unabhängiger elastischer Konstanten weiter verringert werden. So treten nur bei trikliner Symmetrie alle 21 unabhängige Komponenten auf, bei kubischer Symmetrie sind es dagegen nur drei. Der einfachste Fall ist der isotrope Festkörper. Dieser besitzt die volle Rotationssymmetrie der Gruppe $SO(3)$. Wir wollen hier noch ein wenig näher auf den isotropen Festkörper eingehen, da, wie wir später (Kapitel 2.2.2) noch sehen werden, sich die Elastizitätstheorie für die phononische Verzerrung bei Ikosaedersymmetrie nicht vom isotropen Fall unterscheidet.

⁴Selbst die Nichtlineare Elastizitätstheorie ist für Festkörper im Allgemeinen im Rahmen der geometrischen Linearisierung gültig, siehe z.B. [6].

⁵Implizit wird angenommen, dass f eine analytische Funktion ist.

Isotropie

Bei Isotropie gibt es nur zwei unabhängige Elastizitätskonstanten. Diese beschreiben zwei unterschiedliche Moden der Verzerrung, die reine Volumenänderung und die reine Gestaltsänderung bei konstantem Volumen. Die Volumenänderung ist durch die Spur des Verzerrungstensors gegeben:

$$\frac{\Delta V}{V} = \nabla \cdot \mathbf{u} = \varepsilon_{ii}. \quad (2.31)$$

Die Gestaltsänderung wird durch den spurlosen Verzerrungstensor beschrieben:

$$\tilde{\varepsilon}_{ij} = \varepsilon_{ij} - \delta_{ij} \frac{\varepsilon_{kk}}{d}, \quad d = \delta_{ii} = 3. \quad (2.32)$$

Die freie elastische Energiedichte ist eine quadratische Funktion dieser Grundmoden:

$$f = \frac{1}{2} \lambda_1 (\varepsilon_{ii})^2 + \frac{1}{2} \lambda_2 (\tilde{\varepsilon}_{ij} \tilde{\varepsilon}_{ij}). \quad (2.33)$$

Gruppentheoretisch betrachtet, stellen die beiden quadratischen Ausdrücke in (2.33) Invarianten dar, d.h. sie ändern sich bei einem Wechsel in ein symmetrieäquivalentes Koordinatensystem nicht.

Die in der Literatur am häufigsten verwendeten Elastizitätskonstanten sind aber die LAMÉschen Konstanten λ und μ . Mit diesen Beiden werden die Gleichungen für die freie elastische Energie und der HOOKESche Tensor:

$$f = \frac{1}{2} \lambda (\varepsilon_{ii})^2 + \mu (\varepsilon_{ij} \varepsilon_{ij}), \quad (2.34)$$

$$C_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}). \quad (2.35)$$

Damit der Körper keine Energie gewinnen kann, indem er sich verformt, gelten folgende Stabilitätsbedingungen:

$$\lambda_1, \lambda_2 > 0. \quad (2.36)$$

Weitere gebräuchliche Bezeichnungen für die Elastizität der verschiedenen Moden sind die Kompressibilität κ sowie das Schubmodul (Torsionsmodul) G , beides positive Größen:

$$\kappa^{-1} := \lambda + \frac{2}{3} \mu = \lambda_1, \quad (2.37)$$

$$G := \mu = \frac{\lambda_2}{2}. \quad (2.38)$$

2.2 Erweiterte Elastizitätstheorie des Quasikristalls

Die erweiterte Elastizitätstheorie von Quasikristallen berücksichtigt, neben dem bekannten Freiheitsgrad der Phononen, den phasonischen Freiheitsgrad. Analog zum klassischen Fall werden die physikalischen Größen um Orthogonalraumkomponenten erweitert.

2.2.1 Elastizitätstheorie von Quasikristallen

Da die Beschreibung des Quasikristalls im n -dimensionalen Hyperraum \mathbb{R}^n erfolgt, werden zunächst die LAGRANGE- und EULERSchen Koordinaten um eine Orthogonalraumkomponente erweitert:

$$\boldsymbol{\xi} = (\pi^{\parallel} + \pi^{\perp})\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\xi}^{\parallel} \oplus \boldsymbol{\xi}^{\perp}, \quad (2.39)$$

$$\boldsymbol{x} = (\pi^{\parallel} + \pi^{\perp})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{\parallel} \oplus \boldsymbol{x}^{\perp}. \quad (2.40)$$

Die Verschiebung $\boldsymbol{\zeta}$ im Hyperraum ist wie in (1.32) definiert. Für die Kontinuumsmechanik wird noch die Forderung gestellt, dass die Verschiebung nur von der Parallelraumkomponente der LAGRANGESchen Koordinate abhängt. Die Orthogonalraumkomponente ist physikalisch nicht zugänglich, und würde somit zu einer Unbestimmtheit führen.

$$\boldsymbol{\zeta}(\boldsymbol{\xi}^{\parallel}, t) = \boldsymbol{x}(\boldsymbol{\xi}, t) - \boldsymbol{\xi}. \quad (2.41)$$

Mit diesen Voraussetzungen kann analog zu Kapitel 2.1 der Deformationsgradiententensor, der Verzerrungstensor, der Spannungstensor und die freie elastische Energiedichte eingeführt werden⁶:

$$dx_{\alpha}(\boldsymbol{\xi}, t) = \frac{\partial x_{\alpha}(\boldsymbol{\xi}, t)}{\partial \xi_{\beta}} d\xi_{\beta} =: F_{\alpha\beta}(\boldsymbol{\xi}, t) d\xi_{\beta} \quad (2.42)$$

$$= \left(\delta_{\alpha\beta} + \frac{\partial \zeta_{\alpha}}{\partial \xi_{\beta}} \right) d\xi_{\beta} =: \left(\delta_{\alpha\beta} + \delta F_{\alpha\beta}(\boldsymbol{\xi}, t) \right) d\xi_{\beta}, \quad (2.43)$$

$$F_{\alpha\beta} = \frac{\partial x_{\alpha}(\boldsymbol{\xi}, t)}{\partial \xi_{\beta}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x_i^{\parallel}}{\partial \xi_j^{\parallel}} & \frac{\partial x_i^{\parallel}}{\partial \xi_j^{\perp}} \\ \frac{\partial x_i^{\perp}}{\partial \xi_j^{\parallel}} & \frac{\partial x_i^{\perp}}{\partial \xi_j^{\perp}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial x_i^{\parallel}}{\partial \xi_j^{\parallel}} \right)^{d \times d} & 0^{d \times (n-d)} \\ \left(\frac{\partial x_i^{\perp}}{\partial \xi_j^{\parallel}} \right)^{(n-d) \times d} & \mathbb{1}^{(n-d) \times (n-d)} \end{pmatrix}^{n \times n}, \quad (2.44)$$

$$\delta F_{\alpha\beta} = \frac{\partial \zeta_{\alpha}(\boldsymbol{\xi}, t)}{\partial \xi_{\beta}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \zeta_i^{\parallel}}{\partial \xi_j^{\parallel}} & \frac{\partial \zeta_i^{\parallel}}{\partial \xi_j^{\perp}} \\ \frac{\partial \zeta_i^{\perp}}{\partial \xi_j^{\parallel}} & \frac{\partial \zeta_i^{\perp}}{\partial \xi_j^{\perp}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \zeta_i^{\parallel}}{\partial \xi_j^{\parallel}} & 0 \\ \frac{\partial \zeta_i^{\perp}}{\partial \xi_j^{\parallel}} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.45)$$

Die Definition des Verzerrungstensors ist wie in (2.11), und lässt sich in einen phononischen $\boldsymbol{\eta}$ und einen phasonischen $\boldsymbol{\chi}$ Beitrag aufteilen:

$$\begin{aligned} d\boldsymbol{x}^2 - d\boldsymbol{\xi}^2 &=: 2 d\boldsymbol{\xi}^t \tilde{\boldsymbol{\eta}} d\boldsymbol{\xi} \\ &= 2 d\boldsymbol{\xi}^{\parallel,t} \tilde{\boldsymbol{\eta}}^{\parallel\parallel} d\boldsymbol{\xi}^{\parallel} + 2 d\boldsymbol{\xi}^{\parallel,t} \tilde{\boldsymbol{\eta}}^{\parallel\perp} d\boldsymbol{\xi}^{\perp} + 2 d\boldsymbol{\xi}^{\perp,t} \tilde{\boldsymbol{\eta}}^{\perp\parallel} d\boldsymbol{\xi}^{\parallel} + 2 d\boldsymbol{\xi}^{\perp,t} \tilde{\boldsymbol{\eta}}^{\perp\perp} d\boldsymbol{\xi}^{\perp} \\ &=: 2 d\boldsymbol{\xi}^{\parallel,t} \boldsymbol{\varepsilon} d\boldsymbol{\xi}^{\parallel} + 2 d\boldsymbol{\xi}^{\perp,t} \boldsymbol{\chi} d\boldsymbol{\xi}^{\parallel}. \end{aligned} \quad (2.46)$$

⁶Für die Komponenten im Hyperraum werden griechische Indices (von $0, \dots, n-1$) verwendet, für die Parallelraum- und Orthogonalraumkomponenten Lateinische (von $0, \dots, d-1$ bzw. $0, \dots, n-d-1$).

Die letzte Umformung folgt, da wegen (2.45) $\tilde{\boldsymbol{\eta}}^{\perp\perp} = 0$, sowie $d\xi^{\parallel,t} \tilde{\boldsymbol{\eta}}^{\parallel\perp} d\xi^\perp = d\xi^{\perp,t} \tilde{\boldsymbol{\eta}}^{\perp\parallel} d\xi^\parallel$. Der Verzerrungstensor $\tilde{\boldsymbol{\eta}}$ lautet, ausgedrückt in den Anteilen $\boldsymbol{\varepsilon}$ und $\boldsymbol{\chi}$:

$$\tilde{\boldsymbol{\eta}}_{\alpha\beta}^{n \times n} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{ij}^{d \times d} & 0^{d \times (n-d)} \\ \chi_{ij}^{(n-d) \times d} & 0^{(n-d) \times (n-d)} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\eta}^{n \times d} := \begin{pmatrix} \boldsymbol{\varepsilon} \\ \boldsymbol{\chi} \end{pmatrix}^{n \times d}. \quad (2.47)$$

Mit der geometrischen Linearisierung der Verschiebungen, $\zeta_i^\parallel = u_i$, $\zeta_i^\perp = w_i$ vereinfachen sich die Verzerrungstensoren zu:

$$\left| \frac{\partial \zeta_\alpha}{\partial \xi_\beta} \right| \ll 1, \quad (2.48)$$

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial \xi_j^\parallel} + \frac{\partial u_j}{\partial \xi_i^\parallel} \right) \quad \text{und} \quad \chi_{ij} = \frac{\partial w_i}{\partial \xi_j^\parallel}. \quad (2.49)$$

Bemerkenswert dabei ist, dass der phasonische Anteil χ_{ij} des Verzerrungstensors im Allgemeinen nicht symmetrisch ist⁷.

Desweiteren wird auch die Spannung um einen phasonischen Anteil $\boldsymbol{\sigma}^u$ erweitert:

$$\boldsymbol{\sigma} := \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}^u \\ \boldsymbol{\sigma}^w \end{pmatrix}, \quad (2.50)$$

sowie die Volumenkraft:

$$\boldsymbol{f} := \begin{pmatrix} \boldsymbol{f}^u \\ \boldsymbol{f}^w \end{pmatrix}. \quad (2.51)$$

Die **Hauptgleichung der Elastostatik** (2.23) sieht formal gleich aus, gliedert sich aber in zwei Anteile:

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{f} = 0, \quad (2.52)$$

$$\frac{\partial \sigma_{\alpha i}}{\partial x_i^\parallel} + f_\alpha = 0,$$

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}^u + \boldsymbol{f}^u = 0, \quad (2.52a)$$

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}^w + \boldsymbol{f}^w = 0. \quad (2.52b)$$

Als Materialgesetz der linearen Elastizitätstheorie ergibt sich verallgemeinert für Quasikristalle:

$$\sigma_{\alpha i} = C_{\alpha i \beta j} \eta_{\beta j}. \quad (2.53)$$

⁷Beim phasonischen Anteil ist folgende Aufteilung sinnvoll $\frac{\partial u_i}{\partial \xi_j^\parallel} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial \xi_j^\parallel} + \frac{\partial u_j}{\partial \xi_i^\parallel} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial \xi_j^\parallel} - \frac{\partial u_j}{\partial \xi_i^\parallel} \right)$. Der antisymmetrische Term beschreibt eine Rotation, nur der symmetrische Term geht ins Verzerrungsmaß ein.

Die freie elastische Energiedichte ist:

$$f = \frac{1}{2} C_{\alpha i \beta j} \eta_{\alpha i} \eta_{\beta j}, \quad (2.54)$$

$$\sigma_{\alpha i} = \frac{\partial f}{\partial \eta_{\alpha i}}, \quad (2.55)$$

$$\sigma_{ij}^u = \frac{\partial f}{\partial \varepsilon_{ij}}, \quad \sigma_{ij}^w = \frac{\partial f}{\partial \chi_{ij}}. \quad (2.55a)$$

Die phasonischen Beiträge zur Energie wurden somit formal eingeführt. Als anschauliche Begründung sei wieder das diskrete Bild ins Gedächtnis gerufen. Eine phasonische Verschiebung kann dort zu einem Flip, also einer Umkonfiguration des Quasikristalls führen. Dabei werden die lokalen Anpassungsregeln verletzt, wofür Energie benötigt wird (Socolar et al. [23]). Die phasonische Verzerrung χ_{ij} vergleicht durch Gradientenbildung die phasonische Verschiebung w_i an verschiedenen physikalischen Orten. Der Beitrag zur freien elastischen Energiedichte kommt also von weitreichenden Wechselwirkungen, die die Verteilung der phasonischen Flips im Quasikristall beschreiben. Die phasonische Kraft \mathbf{f}_w kann, vom diskreten Bild aus betrachtet, als Kraft interpretiert werden, die nötig ist, um einen Konfigurationswechsel zu erreichen, also eine entgegengesetzte Pinningkraft.

Wie wir im nächsten Abschnitt am Beispiel des ikosaedrischen Quasikristalls sehen werden, lässt sich die freie elastische Energiedichte in drei Terme aufteilen:

$$f = f_u(\varepsilon_{ij}) + f_w(\chi_{ij}) + f_{uw}(\varepsilon_{ij}, \chi_{kl}). \quad (2.56)$$

Der erste Term ist der von der klassischen Elastizitätstheorie bekannte rein phononische Anteil f_u , der zweite ein rein phasonischer Anteil f_w und der dritte Term f_{uw} beschreibt eine Kopplung zwischen phononischer und phasonischer Verzerrung. Dieser gibt an, ob bei gegebener phononischer Verzerrung eine Umkonfiguration (und damit eine phasonische Verzerrung) energetisch günstiger ist (das gleiche gilt natürlich auch umgekehrt).

2.2.2 Elastizitätstheorie von ikosaedrischen Quasikristallen

Für die Bestimmung der Anzahl unabhängiger Elastizitätskonstanten ist es wichtig, die Anzahl der unabhängigen Bewegungsmoden zu kennen. Beim isotropen Fall waren dies die Volumenausdehnung und die Gestaltsänderung. Zwar lassen sich beim ikosaedrischen Quasikristall keine solchen anschaulichen Beschreibungen für die Moden mit phasonischem Anteil angeben, man kann aber die Anzahl der Moden, und damit die der Elastizitätskonstanten, leicht mit Hilfe der Gruppentheorie berechnen. Die unabhängigen Moden werden in invarianten Unterräumen beschreiben. Diese Unterräume transformieren sich nach unterschiedlichen irreduziblen Darstellungen in symmetrieäquivalente Koordinatensysteme,

wenn man darauf ein Element g der Symmetriegruppe G , in unserem Fall der Ikosaedergruppe Y , anwendet. So transformiert sich ein polarer Vektor des physikalischen Raums, wie der Ortsvektor, nach der irreduziblen Darstellung Γ^3 , ein polarer Vektor des Orthogonalraums nach $\Gamma^{3'}$ (siehe Zuordnung (1.38)) und ein Skalar, wie z.B. die freie elastische Energiedichte, nach Γ^1 . Die freie elastische Energiedichte ist also eine Invariante unter der Wirkung der Ikosaedergruppe.

Um die Form der freien elastischen Energiedichte zu bekommen, müssen wir zunächst das Transformationsverhalten der Verzerrungstensen bestimmen. Da die Verzerrungstensen ein direktes Produkt zweier irreduzibler Darstellungen sind, kann man diese Produktdarstellung in eine CLEBSCH-GORDAN-Reihe zerlegen. Die direkte Produktdarstellung selbst ist reduzibel und kann als direkte Summe irreduzibler Darstellungen angegeben werden:

$$\Gamma^i \otimes \Gamma^j = \bigoplus_k c_{ijk} \Gamma^k, \quad (2.57)$$

mit den Vielfachheiten c_{ijk} der irreduziblen Darstellung Γ^k :

$$c_{ijk} = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \chi^*(\Gamma^i(g)) \chi^*(\Gamma^j(g)) \chi(\Gamma^k(g)). \quad (2.58)$$

Dabei wurde die Eigenschaft, dass der Charakter einer Produktdarstellung gleich dem Produkt der Charaktere der irreduziblen Darstellungen ist, benutzt.

$$\chi(\Gamma^i(g) \otimes \Gamma^j(g)) = \chi(\Gamma^i(g)) \cdot \chi(\Gamma^j(g)). \quad (2.59)$$

physikalische Größe		Darstellung
freie elastische Energiedichte	f	Γ^1
Vektoren des physikalischen Raums	$\mathbf{x}^{\parallel}, \mathbf{u}, \nabla = \nabla^{\parallel}$	Γ^3
Vektoren des Orthogonalraums	$\mathbf{x}^{\perp}, \mathbf{w}, \nabla^{\perp}$	$\Gamma^{3'}$
phonon. Verschiebungsgradient	$\nabla \mathbf{u}$	$\Gamma^3 \otimes \Gamma^3 = \Gamma^1 \oplus \Gamma^3 \oplus \Gamma^5$
phonon. Verzerrungstensor	$\boldsymbol{\varepsilon} = [\nabla \mathbf{u}]_{sym.}$	$[\Gamma^3 \otimes \Gamma^3]_{sym.} = \Gamma^1 \oplus \Gamma^5$
phason. Verzerrungstensor	$\boldsymbol{\chi} = \nabla \mathbf{w}$	$\Gamma^3 \otimes \Gamma^{3'} = \Gamma^4 \oplus \Gamma^5$
Verzerrungstensor	$\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\varepsilon} \oplus \boldsymbol{\chi}$	$\Gamma^1 \oplus \Gamma^5 \oplus \Gamma^4 \oplus \Gamma^5$

Tabelle 2.1: Transformationsverhalten unter Ikosaedergruppe Y

In Tabelle 2.1 sieht man, dass durch die Symmetrisierung des phononischen Verzerrungstensors $\boldsymbol{\varepsilon}$ ein Anteil des phononischen Verschiebungsgradienten herausfällt, der sich

nach Γ^3 transformiert. Dies ist gerade der antisymmetrische Anteil, der eine Rotation beschreibt. Beim phasonischen Verzerrungstensor gibt es keinen Anteil, der sich nach Γ^3 oder $\Gamma^{3'}$ transformiert. Für das Verzerrungsmaß werden alle 9 Komponenten benötigt.

Was jetzt noch für die lineare Elastizitätstheorie fehlt, sind quadratische Terme aus irreduziblen Darstellungen, die die freie elastische Energiedichte f ergeben. f transformiert sich nach der Einsdarstellung Γ^1 und ist gleich den Anteilen aus dem direkten Produkt aus $\boldsymbol{\eta} \otimes \boldsymbol{\eta}$, die sich nach der Einsdarstellung transformieren:

$$\boldsymbol{\eta} \otimes \boldsymbol{\eta} \Rightarrow (\Gamma^1 \oplus \Gamma^5 \oplus \Gamma^4 \oplus \Gamma^5) \otimes (\Gamma^1 \oplus \Gamma^5 \oplus \Gamma^4 \oplus \Gamma^5). \quad (2.60)$$

Da aus der Gruppentheorie bekannt ist, dass nur Produkte aus zwei gleichen irreduziblen Darstellungen in der Produktdarstellung sich nach Γ^1 transformieren⁸ ergibt sich für die freie elastische Energiedichte in einer symmetrieangepassten Basis:

$$\begin{aligned} f &= \frac{\lambda_1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}_{\Gamma^1} \boldsymbol{\varepsilon}_{\Gamma^1} + \frac{\lambda_2}{2} \boldsymbol{\varepsilon}_{\Gamma^5} \boldsymbol{\varepsilon}_{\Gamma^5} \\ &\quad + \lambda_3 \boldsymbol{\varepsilon}_{\Gamma^5} \boldsymbol{\chi}_{\Gamma^5} \\ &\quad + \frac{\lambda_4}{2} \boldsymbol{\chi}_{\Gamma^4} \boldsymbol{\chi}_{\Gamma^4} + \frac{\lambda_5}{2} \boldsymbol{\chi}_{\Gamma^5} \boldsymbol{\chi}_{\Gamma^5}. \end{aligned} \quad (2.61)$$

Die explizite Form der symmetrieangepassten Basis wurde von Ishii [24] angegeben:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\Gamma^1} = \frac{1}{\sqrt{3}} (\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}), \quad (2.62)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\Gamma^5} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2\sqrt{3}} (-\tau^2 \varepsilon_{11} + \frac{1}{\tau^2} \varepsilon_{22} + (\tau + \frac{1}{\tau}) \varepsilon_{33}) \\ \frac{1}{2} (\frac{1}{\tau} \varepsilon_{11} - \tau \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}) \\ \sqrt{2} \varepsilon_{12} \\ \sqrt{2} \varepsilon_{23} \\ \sqrt{2} \varepsilon_{31} \end{pmatrix}, \quad (2.63)$$

$$\boldsymbol{\chi}_{\Gamma^4} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} \chi_{11} + \chi_{22} + \chi_{33} \\ \frac{1}{\tau} \chi_{21} + \tau \chi_{12} \\ \frac{1}{\tau} \chi_{32} + \tau \chi_{23} \\ \frac{1}{\tau} \chi_{13} + \tau \chi_{31} \end{pmatrix}, \quad (2.64)$$

$$\boldsymbol{\chi}_{\Gamma^5} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} \sqrt{3} (\chi_{11} - \chi_{22}) \\ \chi_{11} + \chi_{22} - 2\chi_{33} \\ \sqrt{2} (\tau \chi_{21} - \frac{1}{\tau} \chi_{12}) \\ \sqrt{2} (\tau \chi_{32} - \frac{1}{\tau} \chi_{23}) \\ \sqrt{2} (\tau \chi_{13} - \frac{1}{\tau} \chi_{31}) \end{pmatrix}. \quad (2.65)$$

⁸Ein Beispiel dafür ist der phononische Verzerrungstensor in Tab.2.1.

Die Basisvektoren der Verzerrungen wirken, je nach Transformationsverhalten, in invarianten Unterräumen. Da sich sowohl die phononische Verzerrung $\boldsymbol{\varepsilon}_{\Gamma^5}$ als auch die phasonische $\boldsymbol{\chi}_{\Gamma^5}$ nach Γ^5 transformieren, ergibt die Kombination dieser beiden den Kopplungsterm in der freien elastischen Energiedichte.

$\boldsymbol{\varepsilon}_{\Gamma^1}$ ist proportional zur Spur von $\boldsymbol{\varepsilon}$ und beschreibt die Volumenänderung, $\boldsymbol{\varepsilon}_{\Gamma^5}$ ist äquivalent zum spurlosen Verzerrungstensor $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}$, der die Mode der Gestaltsänderung wiedergibt. Die rein phononische Verzerrung ist beim ikosaedrischen Quasikristall äquivalent zum isotropen Fall.

Den verallgemeinerten Spannungstensor kann man auch in irreduzible Darstellungen zerlegen, und man erhält damit für das HOOKEsche Gesetz:

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}_{\Gamma^1}^u \\ \boldsymbol{\sigma}_{\Gamma^5}^u \\ \boldsymbol{\sigma}_{\Gamma^4}^w \\ \boldsymbol{\sigma}_{\Gamma^5}^w \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & \lambda_3 \\ 0 & 0 & \lambda_4 & 0 \\ 0 & \lambda_3 & 0 & \lambda_5 \end{pmatrix}}_{\mathbf{C}} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}_{\Gamma^1}^u \\ \boldsymbol{\varepsilon}_{\Gamma^5}^u \\ \boldsymbol{\chi}_{\Gamma^4}^w \\ \boldsymbol{\chi}_{\Gamma^5}^w \end{pmatrix}. \quad (2.66)$$

Die Stabilitätsbedingungen für die λ_i erhält man aus der Forderung, dass alle Verzerrungen $\boldsymbol{\eta}$ einen positiven Beitrag zur freien elastischen Energiedichte liefern müssen. Dafür müssen die Eigenwerte des HOOKEschen Tensors \mathbf{C} positiv sein. Dies führt auf folgende Ungleichungen für die Elastizitätskonstanten:

$$\text{phononische Elastizitätskonstanten} \quad \lambda_1, \lambda_2 > 0, \quad (2.67a)$$

$$\text{phasonische Elastizitätskonstanten} \quad \lambda_4, \lambda_5 > 0, \quad (2.67b)$$

$$\text{Kopplungskonstante} \quad \lambda_2 \lambda_5 > \lambda_3^2. \quad (2.67c)$$

Beim ikosaedrischen Quasikristall ergaben sich vier Verzerrungsmoden (jeweils zwei phononisch und phasonisch), von denen zwei koppeln. Die Anzahl der Elastizitätskonstanten ist daher fünf. Die Kopplungskonstante λ_3 kann dabei negativ sein.

In der Literatur kommen eine Vielzahl von verschiedenen Elastizitätskonstanten vor (siehe Diskussion in [20], [6]). Dies liegt vor allem daran, dass in verschiedenen Koordinatensystemen unterschiedliche Linearkombinationen der symmetrieangepassten Basisvektoren zusammengefasst werden.

Kapitel 3

Hydrodynamik

In diesem Kapitel wird der Schwerpunkt dieser Diplomarbeit behandelt. Die grundlegende Veröffentlichung, auf die dieses Thema aufbaut, ist von Lubensky, Ramaswamy und Toner [25]. Zum Thema Hydrodynamik seien als ausführliche Einführung die Bücher von Forster [26], sowie von Chaikin und Lubensky [27] genannt. Die Erweiterung der Hydrodynamik wurde in einem Übersichtsartikel von Martin, Parodi und Pershan [28] zusammengefasst. Schließlich sei noch der Übersichtsartikel von Lubensky [12] über Hydrodynamik in quasi-periodischen Strukturen erwähnt.

Doch zurück zum eigentlichen Thema. Was wird denn nun bei der Hydrodynamik des Quasikristalls behandelt? Mit Hydrodynamik verbindet man Bewegungsgleichungen von Flüssigkeiten wie die EULER oder NAVIER-STOKES Gleichung (solche und ähnliche Gleichungen seien im Folgenden mit Fluidodynamik bezeichnet). Man kann aber den Ansatz der Hydrodynamik verallgemeinern und damit eine ganze Klasse von Bewegungsgleichungen für viele Systeme herleiten. So sind hydrodynamische Gleichungen für periodische Kristalle, Flüssigkristalle, Suprafluide, amorphe Festkörper, Gläser und Spin-Wellen bekannt.

3.1 Erklärung Hydrodynamik, Verallgemeinerung

Betrachtet man ein Viel-Teilchen-System im thermodynamischen Gleichgewicht, so ist es nicht notwendig jeden einzelnen der unzähligen mikroskopischen Freiheitsgrade zu beschreiben, sondern eine geringe Anzahl makroskopischer Freiheitsgrade bestimmt den Gleichgewichtszustand. Beispiele solcher makroskopischer Freiheitsgrade sind die innere Energie, Temperatur, Druck, Dichte, . . . Das thermodynamische Gleichgewicht stellt sich durch Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Teilchen ein. Nehmen wir an, dass die Wechselwirkung durch Stöße erfolgt und eine charakteristische Zeit τ im Mittel zwischen zwei Stößen vergeht. Der zwischen den Stößen zurückgelegte Weg sei λ . Für eine oszillierende Störung des Gleichgewichts mit der Periode ω und dem Wellenvektor q variiert die Störung

langsam auf Skalen der Länge λ und der Zeit τ , falls gilt:

$$\omega\tau \ll 1, \quad q\lambda \ll 1. \quad (3.1)$$

Es finden also viele Stöße statt, die das Viel-Teilchen System wieder ins Gleichgewicht bringen. Das System befindet sich zwar nicht im globalen thermodynamischen Gleichgewicht, aber zumindest in einem lokalen Gleichgewichtszustand. Viele Störungen relaxieren schnell wieder ins Gleichgewicht, doch gibt es auch bestimmte Klassen von Variablen mit langsamer zeitlicher Änderung (langsam auf der Zeitskala von τ) und großer Wellenlänge (auf der Längenskala λ). Man unterscheidet dabei zwei Klassen von Variablen:

- (i) Dichten von Erhaltungsgrößen (wie Energiedichte, Massendichte, Impulsdichte)
- (ii) Variablen, die kontinuierlich gebrochene Symmetrien beschreiben. Diese sind beim Festkörper identisch mit den elastischen Variablen, die den Ordnungsparameter beschreiben (phononische und phasonische Verschiebung, Direktor bzw. Q-Tensor bei Flüssigkristall).

Sei $a(\mathbf{x}, t)$ eine Erhaltungsgröße für die eine Erhaltungsgleichung gilt¹:

$$\frac{\partial a}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0. \quad (3.2)$$

FOURIERtransformiert man diese Gleichung so sieht man, dass die Frequenz ω im Grenzfall $q \rightarrow 0$ gegen Null geht.

Gebrochene Symmetrien werden beim Festkörper durch elastische Variablen wie \mathbf{u} und \mathbf{w} beschrieben. Räumlich homogene Änderungen lassen die freie Energie invariant. Solche Änderungen sind durch einen Wellenvektor $\mathbf{q} = 0$ gekennzeichnet. Da die freie Energie unverändert ist, bleibt das System im thermodynamischen Gleichgewicht, das einen stationären Zustand darstellt. Die Frequenz, die man damit verbindet, ist Null für $\mathbf{q} = 0$. Unter der Annahme, dass ω eine analytische Funktion von \mathbf{q} ist, folgt, dass auch bei dieser Klasse von Variablen für die Frequenz $\omega \rightarrow 0$ für $q \rightarrow 0$ gilt.

Um die Gleichung (3.2) zu schließen, muss man den Strom \mathbf{j} wieder mit der hydrodynamischen Variablen in Verbindung setzen. Diese Gleichungen sind die „Konstitutiven Gesetze“. Ein typisches Beispiel ist das FICKSche Gesetz $\mathbf{j} = -D\nabla a$, mit a als Konzentration und D als Diffusionskonstante. Die Erhaltungsgleichung beschreibt dann die Diffusion der Konzentration $a(\mathbf{x}, t)$:

$$\frac{\partial a}{\partial t} - D\nabla^2 a = 0. \quad (3.3)$$

Die Dispersionsrelation $\omega(q)$ erhält man durch FOURIERtransformation in Raum und Zeit:

$$\omega = -iDq^2. \quad (3.4)$$

¹Hydrodynamische Gleichungen werden im Allgemeinen in EULERSchen Koordinaten formuliert.

Ein anderes typisches Beispiel ist, wenn der Strom selbst wieder als Erhaltungsgröße darstellbar ist. Dazu folgendes eindimensionale Modellsystem mit $a(x, t)$ und $b(x, t)$:

$$\frac{\partial a}{\partial t} + c \nabla b = 0, \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial b}{\partial t} + c \nabla a = 0. \quad (3.6)$$

Dieses gekoppelte Gleichungssystem (erster Ordnung in der Zeit) entspricht einer Wellengleichung (zweiter Ordnung in der Zeit) mit Schallgeschwindigkeit c . Die Dispersionsrelation ist $\omega = \pm cq$.

An diesen einfachen Beispielen kann man viele allgemeine Eigenschaften der Hydrodynamik erkennen.

- (i) Hydrodynamik beschreibt langsam variierende, langwellige Störungen aus dem Gleichgewicht. Die Dispersionsrelation der Störung $\omega(q)$ ist als Funktion des Wellenvektors q entwickelbar. Dabei ist kein konstanter Term vorhanden, d.h.

$$\lim_{q \rightarrow 0} \omega(q) = 0. \quad (3.7)$$

Je langwelliger die Störung, umso mehr Zeit braucht das System um zu relaxieren.

- (ii) Typische Moden sind diffusiv oder propagierend. Die Einteilung in diffusiv oder propagierend erfolgt dabei durch den führenden Term der Dispersionsrelation. Diffusive Moden legen eine Zeitrichtung fest. Propagierende sind dagegen zeitumkehrinvariant, deshalb treten diese immer paarweise auf.
- (iii) Die Anzahl der hydrodynamischen Variablen entspricht der Anzahl der Moden. Gleichung (3.3) ergab eine diffusive Mode, (3.5) zwei (ein Paar) propagierende Moden.

Da die Beschreibung der Hydrodynamik mit den zwei Klassen von Variablen erfolgt, müssen gegebenenfalls die thermodynamischen Gleichungen um diese erweitert werden. Die zu den hydrodynamischen Variablen thermodynamisch konjugierten Felder sind als partielle Ableitungen der Energiedichte oder der freien Energiedichte nach den hydrodynamischen Variablen darstellbar (konkretes Beispiel siehe bei Flüssigkeiten und Quasikristall).

Für die Ströme \mathbf{j} nimmt man an, dass sie als lokale Funktion der thermodynamisch konjugierten Felder der hydrodynamischen Variablen darstellbar sind. Im Allgemeinen setzt man eine schnell abbrechende Entwicklung im Gradienten an, da die Auslenkung aus dem Gleichgewicht als klein anzunehmen ist. Die Ströme sind dann meist proportional zu den Feldern bzw. Gradienten der Felder. Bei den Strömen unterscheidet man zwei Arten :

- (i) **Reaktive Ströme** treten dann auf, wenn ein Strom selbst wieder Erhaltungsgröße ist, und führen zu propagierenden Moden. Reaktive Ströme sind dissipationslos, die

Entropie bleibt also erhalten. Oft werden diese Ströme durch die Forderung der Invarianz unter einer GALILEI-Transformation eingeführt. Diese Ströme zeigen das gleiche Verhalten unter Zeitumkehr wie die mit ihnen verbundenen thermodynamischen Felder.

- (ii) **Dissipative Ströme** koppeln im Gegensatz zu den reaktiven Strömen an thermodynamische Felder mit entgegengesetztem Vorzeichen bei einer Zeitumkehr. Wie der Name schon impliziert wird dadurch Dissipation beschrieben, die Entropie nimmt zu.

3.1.1 Fluiddynamik–Gleichungen von EULER und NAVIER-STOKES

In diesem Unterkapitel soll der allgemein beschriebene Formalismus am bekannten Beispiel der Gleichungen von EULER und NAVIER-STOKES verdeutlicht werden. Bei Flüssigkeiten sind Massendichte ρ , Impulsdichte g_i und die Energiedichte ϵ erhalten:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_i g_i = 0, \quad (3.8a)$$

$$\frac{\partial g_i}{\partial t} + \nabla_j \pi_{ij} = 0, \quad (3.8b)$$

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \nabla_i j_i^\epsilon = 0. \quad (3.8c)$$

Die Impulsdichte \mathbf{g} ist sowohl Massenstrom \mathbf{j}^ρ als auch selbst Erhaltungsgröße, mit dem Impulsstromtensor π_{ij} . Die Anzahl der hydrodynamischen Variablen ist fünf, zwei skalare ϵ , ρ und eine vektorielle \mathbf{g} . Die Anzahl der Moden ist daher auch fünf. Dies können zwei Paar propagierende und eine diffusive Mode sein, oder ein Paar propagierender und drei diffusive. Propagierende Moden sind vorhanden, da die Impulsdichte als Strom ρ und \mathbf{g} koppelt. Wie man in (3.8a) erkennen kann, erfolgt die Kopplung der Dichteänderung an den Gradienten der Impulsdichte, also nur der longitudinale Anteil koppelt als Massenstrom. Dies ist auch physikalisch sinnvoll, da es in Flüssigkeiten keine Transversalwellen geben kann. Die beiden transversalen Komponenten der Impulsdichte treten als diffusive Moden auf. Die noch verbleibende Mode beschreibt die Wärmeleitung (diffusiv).

Ausgangspunkt für die Änderung der Entropiedichte ist die thermodynamische Relation (entspricht 1.Hauptsatz der Thermodynamik für pro Volumen bezogene Größen):

$$T ds = d\epsilon - \mu d\rho - v_i dg_i. \quad (3.9)$$

Dabei ist T die Temperatur, s die Entropiedichte, ϵ die Energiedichte (totale Energiedichte, bestehend aus innerer Energie und kinetischer Energie, deshalb auch Term $v_i dg_i$ in (3.9)), μ das chemische Potential pro Masseneinheit, ρ die Massendichte, v_i die Geschwindigkeit und g_i die Impulsdichte. Die lokale Änderung der Entropiedichte besteht aus der lokalen (zeitlichen) Ableitung und dem konvektiven Anteil:

$$ds = \left(\frac{\partial s}{\partial t} + v_i \nabla_i s \right) dt. \quad (3.10)$$

Für die lokale (zeitliche) Änderung werden die Erhaltungsgleichungen (3.8) eingesetzt:

$$\begin{aligned} T \frac{\partial s}{\partial t} + T v_i \nabla_i s &\stackrel{(3.9)}{=} \frac{\partial \epsilon}{\partial t} - \mu \frac{\partial \rho}{\partial t} - v_i \frac{\partial g_i}{\partial t} + v_i \nabla_i \epsilon - \mu v_i \nabla_i \rho - v_i v_j \nabla_i g_j \\ &\stackrel{(3.8)}{=} -\nabla_i j_i^\epsilon + \mu \nabla_i g_i + v_i \nabla_j \pi_{ij} + v_i \nabla_i \epsilon - \mu v_i \nabla_i \rho - v_i v_j \nabla_i g_j. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Die Bilanzgleichung für die Entropieänderung ist eine globale Gleichung. Neben der lokalen Änderung muss noch die Änderung des Integrationsvolumens beachtet werden (REYNOLDSches Transporttheorem, siehe z.B. [29]). Nach dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik ist die Entropie konstant für reversible Prozesse und nimmt zu für irreversible. Die Änderung der Entropiedichte setzt sich aus drei Termen zusammen (lokale Formulierung der Entropieproduktionsrate):

$$T \left[\frac{\partial s}{\partial t} + \nabla_i \left(v_i s + \frac{Q_i}{T} \right) \right] \geq 0. \quad (3.12)$$

Der erste Term beschreibt die explizite zeitliche Änderung, der zweite den räumlichen Transport als Divergenz des materiebehafteten Entropieflusses $v_i s$, und der letzte den Wärmestrom Q_i . Setzt man (3.11) in (3.12) ein, so erhält man:

$$\begin{aligned} (3.12) &= \nabla_i \left(Q_i - j_i^\epsilon + \mu g_i + \pi_{ji} v_j + \epsilon v_i - \rho \mu v_i - v_i v_j g_j \right) - \frac{Q_i}{T} \nabla_i T \\ &\quad - (g_i - \rho v_i) \nabla_i \mu - [\pi_{ji} - v_i g_j - (-\epsilon + T s + \mu \rho + v_k g_k) \delta_{ij}] \nabla_i v_j \geq 0. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Als Folge der beliebigen Präparation der Anfangsbedingungen durch Vorgabe der Gradienten der Temperatur T , des chemischen Potentials μ und der Geschwindigkeit v_i muss der Divergenzterm in (3.13) verschwinden. Der Wärmestrom Q_i ist somit bis auf eine Konstante gegeben durch:

$$Q_i = j_i^\epsilon - \mu(g_i - \rho v_i) - \epsilon v_i + v_i v_j g_j - \pi_{ji} v_j. \quad (3.14)$$

Beim letzten Term in (3.13) kann man den isotropen Anteil mit dem KRONECKERdelta δ_{ij} mit dem Druck p identifizieren. Dies folgt aus der EULERgleichung der Thermodynamik für auf Volumen bezogene Größen:

$$p = -(\epsilon - T s - \mu \rho - v_k g_k). \quad (3.15)$$

Damit erhält man für die Entropiebilanz:

$$T \left[\frac{\partial s}{\partial t} + \nabla_i \left(v_i s + \frac{Q_i}{T} \right) \right] = -\frac{Q_i \nabla_i T}{T} - (g_i - \rho v_i) \nabla_i \mu - [\pi_{ji} - p \delta_{ij} - v_i g_j] \nabla_i v_j \geq 0. \quad (3.16)$$

Die reversiblen Ströme werden durch die Forderung bestimmt, dass die rechte Seite von (3.16) = 0 verschwinden soll, d.h. die Entropie konstant bleibt. Wegen der frei wählbaren Präparation der Anfangsbedingungen muss dies für jeden Term einzeln erfüllt sein:

$$g_i = \rho v_i, \quad (3.17a)$$

$$\pi_{ij} = p \delta_{ij} + v_j g_i \stackrel{!}{=} -\sigma_{ij} + v_j g_i, \quad (3.17b)$$

$$j_i^\epsilon = (\epsilon + p) v_i \quad \text{folgt aus} \quad Q_i = 0 \quad \text{mit} \quad (3.14). \quad (3.17c)$$

Dabei wurde der Spannungstensor $\sigma_{ij} = -p\delta_{ij}$ eingeführt. Wie man sieht, hat dieser das entgegengesetzte Vorzeichen vom Impulsstromtensor. Die EULERgleichung der Hydrodynamik erhält man mit den Erhaltungsgleichungen (3.8a), (3.8b) der Massen- und Impulsdichte, sowie den dazugehörigen reversiblen Strömen (3.17a), (3.17b):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_i(\rho v_i) = 0, \quad (3.18a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_i}{\partial t} &= -\nabla_j \pi_{ij} \\ &\stackrel{(3.17b)}{=} -\nabla_i p - \nabla_j(\rho v_i v_j). \end{aligned} \quad (3.18b)$$

Die Bilanzgleichung für die Entropie (3.16) drückt für die EULERgleichung die Entropieerhaltung aus:

$$\frac{\partial s}{\partial t} + \nabla_i(v_i s) = 0. \quad (3.19)$$

In der Literatur wird die EULERgleichung im Allgemeinen als eine Gleichung für die Geschwindigkeit v_i angegeben. Diese erhält man indem die Gleichung für die Änderung der Impulsdichte (3.18b) mit Hilfe von (3.17a) und der Massenerhaltung (3.18a) umgeformt wird (EULERgleichung ohne äußere Kraft):

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p. \quad (3.20)$$

Die Gleichungen von NAVIER-STOKES beschreiben dissipative Flüssigkeiten. Die Entropieproduktionsrate ist daher positiv. An welcher Stelle treten nun dissipative Ströme auf? Da die Massenerhaltung weiterhin gültig sein soll, ergeben sich nur Änderungen für den Wärmestrom und den Impulsstromtensor:

$$\begin{aligned} T \left[\frac{\partial s}{\partial t} + \nabla_i \left(v_i s + \frac{Q_i}{T} \right) \right] &= \underbrace{-\frac{Q_i \nabla_i T}{T}}_{>0} - \underbrace{[\pi_{ji} - p\delta_{ij} - v_i g_j]}_{>0} \nabla_i v_j > 0. \\ \Rightarrow Q_i^D &< 0, \end{aligned} \quad (3.21a)$$

$$\Rightarrow \pi_{ij} = p\delta_{ij} + \rho v_i v_j - \sigma_{ij}^D, \quad \sigma_{ij}^D > 0. \quad (3.21b)$$

σ_{ij}^D ist der dissipative Spannungstensor. Jetzt müssen noch die Ströme mit den thermodynamisch konjugierten Feldern in Beziehung gebracht werden. Dies geschieht mit Materialgleichungen. Die irreversiblen Ströme werden durch thermodynamische Kräfte angetrieben. Diese kann man als rasch abbrechende Entwicklung im Gradienten annehmen. Im Allgemeinen ist schon ein Term proportional zum Gradienten einer thermodynamisch konjugierten Größe ausreichend. Da es sich um irreversible Ströme handelt, koppeln nur Ströme und Felder mit entgegengesetztem Vorzeichen bei einer Zeitumkehr $t \rightarrow -t$. Q_i^D und v_i wechseln

das Vorzeichen, T und σ_{ij}^D nicht. Damit folgt:

$$Q_i^D = -\kappa_{ij} \nabla_j T, \quad (3.22a)$$

$$\sigma_{ij}^D = \tilde{\eta}_{ijkl} \nabla_k v_l, \quad (3.22b)$$

$$\Rightarrow T \left[\frac{\partial s}{\partial t} + \nabla_i \left(v_i s + \frac{Q_i}{T} \right) \right] = \kappa_{ij} \frac{\nabla_j T \nabla_i T}{T} + \tilde{\eta}_{ijkl} \nabla_k v_l \nabla_i v_j > 0. \quad (3.22c)$$

Die kinetischen Koeffizienten κ_{ij} und $\tilde{\eta}_{ijkl}$ sind die Tensoren der Wärmeleitfähigkeit bzw. der (dynamischen) Viskosität mit positiven Eigenwerten. Die Anzahl unabhängiger Einträge der Tensoren lassen sich wieder mit Symmetrieargumenten bestimmen. Bei Flüssigkeiten gibt es zwei Viskositäten, die Volumen- und die Scherviskosität. Die kinetischen Koeffizienten zeichnen sich auch durch eine weitere Symmetrie aus. Für den hypothetischen Fall, dass der Wärmestrom an den Geschwindigkeitsgradienten koppelt, folgt, dass auch der Temperaturgradient mit dem gleichen Tensor an den Impulsstrom koppelt. Dieses Symmetrieprinzip der kinetischen Koeffizienten wird auch ONSAGERprinzip genannt [30].

hydro. Variable	rev. Strom	irrev. Strom	thermo. Feld	thermo. Kraft
ρ	$g_i = \rho v_i$	—	μ	—
g_i	$\pi_{ij} = p\delta_{ij} + g_i v_j$	$\sigma_{ij}^D = \tilde{\eta}_{ijkl} \nabla_k v_l$	v_i	$\nabla_k v_l$
s	$v s, Q_i^R = 0$	$Q_i^D = -\kappa_{ij} \nabla_j T$	T	$\nabla_j T$

Tabelle 3.1: Übersicht der thermodynamischen Größen

Betrachtet man nur die Gleichungen für die Massen- (3.8a) und Impulserhaltung (3.8b), so erhält man mit den Flüssen (3.17a) und (3.21b) die Gleichungen von NAVIER-STOKES:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_i (\rho v_i) = 0, \quad (3.23a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_i}{\partial t} &= -\nabla_j \pi_{ij} \\ &\stackrel{(3.21b)}{=} -\nabla_i p - \nabla_j (\rho v_i v_j) + \nabla_j \sigma_{ij}^D. \end{aligned} \quad (3.23b)$$

Die übliche Darstellung ist wieder eine Gleichung für die Geschwindigkeit v_i . Diese erhält man ausgehend von (3.23b) mit dem Massenstrom (3.17a), der Massenerhaltung (3.23a) und dem dissipativen Impulsstrom (3.22b):

$$\rho \frac{\partial v_i}{\partial t} + \rho (v_k \nabla_k) v_i = -\nabla_i p + \nabla_j \tilde{\eta}_{ijkl} \nabla_k v_l. \quad (3.24)$$

3.1.2 Hydrodynamik in ikosaedrischen Quasikristallen - Teil 1

Bevor die Gleichungen der Hydrodynamik für einen ikosaedrischen Quasikristall hergeleitet werden, soll zunächst die freie Energie F des Quasikristalls bestimmt werden. In Kapitel

2.2.2 wurde die freie elastische Energie eingeführt. Diese besteht in harmonischer Näherung aus quadratischen Termen der Verzerrungen $\varepsilon_{ij} = (\nabla_i u_j)_{\text{sym.}}$ und $\chi_{ij} = \nabla_i w_j$. Für einen perfekten Quasikristall ist diese, zusammen mit der kinetischen Energiedichte $f_{\text{kin.}}$, die vollständige freie Energiedichte.

$$f = f_{\text{kin.}} + f_{\text{el.}} = \frac{g^2}{2\rho} + f_{\text{el.}} \quad (3.25)$$

Allerdings ist ein perfekter Quasikristall, wie ein perfekter Kristall, nur eine Idealvorstellung. Jeder reale Kristall hat eine bestimmte Anzahl an Leerstellen. Da ein Kristall ohne Leerstellen einen hoch geordneten Zustand darstellt, sind Störungen der Ordnung (in Form von Leerstellen) wegen der Entropiezunahme vorteilhaft. Fleming und Cohen haben in einem Artikel über Hydrodynamik von Festkörpern [31] gezeigt, dass ohne Berücksichtigung von Leerstellen, die Modenanzahl kleiner ist als die Anzahl hydrodynamischer Variablen. Dies lässt sich, wie im Folgenden gezeigt wird, darauf zurückführen, dass die hydrodynamischen Variablen eines perfekten Kristalls keine unabhängigen Größen sind. Wie berücksichtigt man nun den Einfluss der Leerstellen? Beim perfekten Kristall geht man davon aus, dass jeder Gitterplatz besetzt ist. Die relative Volumenänderung ist gleich der Spur des (phononischen) Verzerrungstensors (2.31) und auch gleich der relativen Dichteänderung (Dichte $\rho(\mathbf{x}, t) = \rho_0 + \delta\rho(\mathbf{x}, t)$):

$$\frac{\Delta V}{V} = \nabla \cdot \mathbf{u} = \varepsilon_{ii} = -\frac{\delta\rho}{\rho_0}. \quad (3.26)$$

Die Dichteänderung ist also durch die Divergenz des Verschiebungsvektors \mathbf{u} schon eindeutig festgelegt, und damit keine unabhängige Variable mehr. Wenn Leerstellen vorhanden sind, wird mit dieser Beziehung nur der Gitteranteil der Dichteänderung $\delta\rho_{\text{Gitter}}$ angegeben. Die vollständige Dichteänderung enthält einen weiteren Term, der die Änderung der Dichte durch die Leerstellen berücksichtigt:

$$\delta\rho = \delta\rho_{\text{Gitter}} - \delta\rho_{\text{Leerstellen}}. \quad (3.27)$$

Die freie Energie muss dann auch noch um Terme erweitert werden, die proportional zu der Dichteänderung sind. Da die Dichte, als skalare Größe, sich nach der Einsdarstellung Γ^1 unter der Ikosaedergruppe Y transformiert, gibt es insgesamt zwei zusätzliche Terme, einen (in einfachster Näherung) quadratischen in der Dichteänderung sowie einen Kopplungsterm zwischen der Dichteänderung und dem Anteil des Verzerrungstensors, der sich nach Γ^1 transformiert²:

$$f_{\text{erw.}} = \frac{1}{2}A \left(\frac{\delta\rho(\mathbf{x}, t)}{\rho_0} \right)^2 + B \left(\frac{\delta\rho(\mathbf{x}, t)}{\rho_0} \right) \nabla \cdot \mathbf{u} + f_{\text{el.}}. \quad (3.28)$$

²Bei der freien Energiedichte werden drei Bezeichnungen verwendet f , $f_{\text{erw.}}$, $f_{\text{el.}}$. $f_{\text{el.}}$ bezeichnet die freie elastische Energiedichte, $f_{\text{erw.}}$ die um die Dichteänderung erweiterte Energiedichte (3.28) sowie die gesamte freie Energiedichte $f = f_{\text{erw.}} + f_{\text{kin.}}$, bei der noch der kinetische Anteil (3.25) hinzukommt.

f_{el} ist die freie elastische Energiedichte. Die Konstante A ist eine inverse Kompressibilität (bei konstanter Verzerrung) und B koppelt die Dichteänderung an die Gitterausdehnung. Auch für diese Konstanten lassen sich Stabilitätsbedingungen angeben, die sich, wie in Kapitel 2.2.2, aus der Forderung nach positiven Eigenwerten für den, durch die Dichteänderung erweiterten, Elastizitätstensor $\mathbf{C}_{\text{erw.}}$ ergeben:

$$f_{\text{erw.}} = \frac{1}{2} \left(\delta\rho_{\Gamma_1}, \boldsymbol{\sigma}_{\Gamma_1}^u, \boldsymbol{\sigma}_{\Gamma_5}^u, \boldsymbol{\sigma}_{\Gamma_4}^w, \boldsymbol{\sigma}_{\Gamma_5}^w \right) \underbrace{\begin{pmatrix} A & B & 0 & 0 & 0 \\ B & \lambda_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_2 & 0 & \lambda_3 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_4 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & 0 & \lambda_5 \end{pmatrix}}_{\mathbf{C}_{\text{erw.}}} \begin{pmatrix} \delta\rho_{\Gamma_1} \\ \boldsymbol{\epsilon}_{\Gamma_1}^u \\ \boldsymbol{\epsilon}_{\Gamma_5}^u \\ \boldsymbol{\chi}_{\Gamma_4}^w \\ \boldsymbol{\chi}_{\Gamma_5}^w \end{pmatrix}, \quad (3.29)$$

$$\Rightarrow A > 0, \quad \left(\lambda + \frac{2}{3}\mu \right) > 0, \quad A \left(\lambda + \frac{2}{3}\mu \right) > B^2. \quad (3.30)$$

Die Ableitung der hydrodynamischen Gleichungen kann damit analog zu denen der Fluid-dynamik erfolgen. Die Erhaltungsgleichungen für die Massendichte³ ρ , die Impulsdichte g_i und die Energiedichte ϵ , werden um Gleichungen in den Variablen der gebrochenen Symmetrien erweitert. Dies sind für den Quasikristall die phononische Verschiebung u_i und die phasonische Verschiebung w_i :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_i g_i = 0, \quad (3.31a)$$

$$\frac{\partial g_i}{\partial t} + \nabla_j \pi_{ij} = 0, \quad (3.31b)$$

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \nabla_i j_i^\epsilon = 0, \quad (3.31c)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = v_i - X_i^u, \quad (3.31d)$$

$$\frac{\partial w_i}{\partial t} = -X_i^w. \quad (3.31e)$$

In (3.31d) und (3.31e) wurden für die „Flüsse“ der Ansatz \mathbf{X}^u und \mathbf{X}^w gemacht. Ihre Bestimmung erfolgt genauso wie die Ströme der Erhaltungsgleichungen. Da die phononische Verschiebung \mathbf{u} sich wie ein Ortsvektor verhält, ist ein Teil der zeitlichen Ableitung durch die Geschwindigkeit \mathbf{v} in (3.31d) gegeben.

Die thermodynamische Grundrelation (3.9) muss um Terme, die den Beitrag der Verschiebungen angibt, erweitert werden. Da nur Gradienten der Verschiebungen zu einem

³Der betrachtete ikosaedrische Quasikristall AIPdMn besteht aus drei verschiedenen Atomarten. Strenggenommen müsste für alle drei eine Erhaltungsgleichung der Teilchenzahl gelten. Dies wird hier nicht berücksichtigt.

Anstieg der Energie führen, ist es zweckmäßig, diese für die thermodynamische Grundrelation zu benutzen:

$$Tds = d\epsilon - \mu d\rho - v_i dg_i - h_{ij}^u d(\nabla_i u_j) - h_{ij}^w d(\nabla_i w_j). \quad (3.32)$$

$h_{ij}^{u,w}$ sind die zu $\nabla_i u_j$ und $\nabla_i w_j$ thermodynamisch konjugierten Felder. Da $(\nabla_i u_j)$ symmetrisch ist, gilt dies auch für h_{ij}^u . Die konjugierten Felder lassen sich als partielle Ableitungen der inneren Energiedichte ϵ bzw. der freien Energiedichte $f = \epsilon - Ts$ angeben:

$$df = sdT + \mu d\rho + v_i dg_i + h_{ij}^u d(\nabla_i u_j) + h_{ij}^w d(\nabla_i w_j), \quad (3.33)$$

$$h_{ij}^u \stackrel{(3.32)}{=} \left. \frac{\partial \epsilon}{\partial \nabla_i u_j} \right|_{s,\rho,g_i,\nabla_i w_j} \stackrel{(3.33)}{=} \left. \frac{\partial f}{\partial \nabla_i u_j} \right|_{T,\rho,g_i,\nabla_i w_j}, \quad (3.34a)$$

$$h_{ij}^w \stackrel{(3.32)}{=} \left. \frac{\partial \epsilon}{\partial \nabla_i w_j} \right|_{s,\rho,g_i,\nabla_i u_j} \stackrel{(3.33)}{=} \left. \frac{\partial f}{\partial \nabla_i w_j} \right|_{T,\rho,g_i,\nabla_i u_j}. \quad (3.34b)$$

h_{ij}^u ist mit (3.34) und (3.28) gleich dem elastischen phononischen Spannungstensor σ^u plus einem Term $B \frac{\delta \rho}{\rho_0} \delta_{ij}$. Dem phasonischen Spannungstensor σ^w entspricht h_{ij}^w . Für die lokale Entropieänderung ergibt sich:

$$\begin{aligned} T \frac{ds}{dt} &= \frac{\partial s}{\partial t} + v_i \nabla_i s \\ &\stackrel{(3.32)}{=} \frac{\partial \epsilon}{\partial t} - \mu \frac{\partial \rho}{\partial t} - v_i \frac{\partial g_i}{\partial t} - h_{ij}^u \frac{\partial (\nabla_i u_j)}{\partial t} - h_{ij}^w \frac{\partial (\nabla_i w_j)}{\partial t} \\ &\quad + v_i \nabla_i \epsilon - \mu v_i \nabla_i \rho - v_i v_j \nabla_i g_j - v_i h_{kl}^u \nabla_i (\nabla_k u_l) - v_i h_{kl}^w \nabla_i (\nabla_k w_l) \\ &\stackrel{(3.31)}{=} -\nabla_i j_i^\epsilon + \mu \nabla_i g_i + v_i \nabla_j \pi_{ij} - h_{ij}^u \nabla_i (v_j - X_j^u) + h_{ij}^w \nabla_i X_j^w \\ &\quad + v_i \nabla_i \epsilon - \mu v_i \nabla_i \rho - v_i v_j \nabla_i g_j - v_i h_{kl}^u \nabla_i (\nabla_k u_l) - v_i h_{kl}^w \nabla_i (\nabla_k w_l). \end{aligned} \quad (3.35)$$

Da die freie Energie $F = \int f d^d x$ nur von den Gradienten der Verschiebungen abhängt und nicht von den Verschiebungen selbst, gilt, mit Hilfe der Funktionalableitung⁴, folgende Umformung:

$$\frac{\delta F[\nabla_i u_j, \nabla_i w_j]}{\delta u_j} = -\nabla_i \frac{\partial f}{\partial (\nabla_i u_j)} = -\nabla_i h_{ij}^u, \quad (3.36)$$

$$\frac{\delta F[\nabla_i u_j, \nabla_i w_j]}{\delta w_j} = -\nabla_i \frac{\partial f}{\partial (\nabla_i w_j)} = -\nabla_i h_{ij}^w. \quad (3.37)$$

⁴Zur Funktionalableitung siehe Anhang A.

Damit ist die Bilanzgleichung der Entropiedichte (3.12) gegeben durch:

$$\begin{aligned}
& T \left[\frac{\partial s}{\partial t} + \nabla_i \left(v_i s + \frac{Q_i}{T} \right) \right] \\
&= \nabla_i \left(Q_i - Q_i^{\text{fl.}} + v_k h_{ij}^u \nabla_k u_j + v_k h_{ij}^w \nabla_k w_j + h_{ij}^u X_j^u + h_{ij}^w X_j^w \right) - \frac{Q_i}{T} \nabla_i T \\
&\quad - (g_i - \rho v_i) \nabla_i \mu - [\pi_{ji} - \pi_{ji}^{\text{fl.}} + h_{ji}^u - h_{ik}^u (\nabla_j u_k) - h_{ik}^w (\nabla_j w_k)] \nabla_i v_j \\
&\quad + (X_j^u - v_k \nabla_k u_j) \frac{\delta F}{\delta u_j} + (X_j^w - v_k \nabla_k w_j) \frac{\delta F}{\delta w_j} \geq 0.
\end{aligned} \tag{3.38}$$

Die Abkürzungen für die Ströme $\pi_{ij}^{\text{fl.}}$ und $Q_i^{\text{fl.}}$ sind aus dem Kapitel 3.1.1 über Fluidodynamik bekannt (3.17b) bzw. (3.14).

Die reversiblen Ströme erhält man wieder durch Nullsetzen der einzelnen unabhängigen Terme:

$$g_i = \rho v_i, \tag{3.39a}$$

$$\pi_{ij} = \pi_{ij}^{\text{fl.}} - h_{ij}^u + h_{jk}^u \nabla_i u_k + h_{jk}^w \nabla_i w_k, \tag{3.39b}$$

$$\begin{aligned}
j_i^\epsilon &= (\epsilon + p) v_i + v_j h_{ij}^u + v_j h_{ik}^u (\nabla_j u_k) + v_j h_{ik}^w (\nabla_j w_k) \\
&\quad - h_{ij}^u X_j^u - h_{ij}^w X_j^w - v_i h_{jk}^u (\nabla_j u_k) - v_i h_{jk}^w (\nabla_j w_k),
\end{aligned} \tag{3.39c}$$

$$X_i^u = v_k (\nabla_k u_i), \tag{3.39d}$$

$$X_i^w = v_k (\nabla_k w_i). \tag{3.39e}$$

Und schließlich als Materialgesetze für die dissipativen Ströme:

$$\pi_{ij}^D = -\tilde{\eta}_{ijkl} \nabla_k v_l, \tag{3.40a}$$

$$Q_i^D = -\kappa \nabla_i T + \Gamma_{Qu} \frac{\delta F}{\delta u_i}, \tag{3.40b}$$

$$X_i^{u,D} = \Gamma_u \frac{\delta F}{\delta u_i} + \Gamma_{Qu} \nabla_i T, \tag{3.40c}$$

$$X_i^{w,D} = \Gamma_w \frac{\delta F}{\delta u_i}. \tag{3.40d}$$

Die kinetischen Koeffizienten κ , Γ_{Qu} , Γ_u und Γ_w sind im allgemeinen Fall Tensoren zweiter Stufe, für ikosaedrische Symmetrie besitzen sie Diagonalforn. Aufgrund des ONSA-GERSchen Symmetrieprinzips tritt Γ_{Qu} sowohl beim Wärmestrom als auch beim Fluss für die phononische Verschiebung auf. Außerdem kommen keine Kopplungsterme Γ_{Qw} und Γ_{uw} vor da sich \mathbf{w} nach einer anderen Darstellung transformiert als \mathbf{u} und ∇T . Vernachlässigt man den Wärmestrom (3.40b) und den Term proportional zum Temperaturgradienten in

(3.40c), so erhält man unter Berücksichtigung von:

$$f = \epsilon - Ts, \quad \mu \stackrel{(3.33)}{=} \frac{\partial f}{\partial \rho}, \quad v_k \stackrel{(3.33)}{=} \frac{\partial f}{\partial g_k}, \quad (3.41)$$

$$p \stackrel{(3.15)}{=} -(\epsilon - Ts - \mu\rho - v_k g_k) \stackrel{(3.41)}{=} -\left(f - \rho \frac{\partial f}{\partial \rho} - g_k \frac{\partial f}{\partial g_k}\right), \quad (3.42)$$

$$f \stackrel{\text{isotherm}}{=} f(\rho, g_k, (\nabla_k u_l), (\nabla_k w_l)), \quad (3.43)$$

$$\nabla_i f \stackrel{(3.33)}{=} \frac{\partial f}{\partial \rho} \nabla_i \rho + \frac{\partial f}{\partial g_k} \nabla_i g_k + \frac{\partial f}{\partial (\nabla_k u_l)} \nabla_i (\nabla_k u_l) + \frac{\partial f}{\partial (\nabla_k w_l)} \nabla_i (\nabla_k w_l), \quad (3.44)$$

$$\frac{\delta F}{\delta \rho} = \frac{\partial f}{\partial \rho}, \quad (3.45)$$

schließlich mit (3.31), (3.39) und (3.40) als isotherme hydrodynamische Gleichungen des Quasikristalls:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_k (v_k \rho) = 0, \quad (3.46a)$$

$$\frac{\partial g_i}{\partial t} + \nabla_k (v_k g_i) - \nabla_j \tilde{\eta}_{ijkl} \nabla_k v_l = -(\delta_{ij} - \nabla_i u_j) \frac{\delta F}{\delta u_j} + (\nabla_i w_j) \frac{\delta F}{\delta w_j} - \rho \nabla_i \frac{\delta F_{\text{erw.}}}{\delta \rho}, \quad (3.46b)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + v_k \nabla_k u_i = v_i - \Gamma_u \frac{\delta F}{\delta u_i}, \quad (3.46c)$$

$$\frac{\partial w_i}{\partial t} + v_k \nabla_k w_i = -\Gamma_w \frac{\delta F}{\delta w_i}. \quad (3.46d)$$

Die Massenerhaltung (3.46a) bleibt weiterhin gültig. Die phasonischen Flips bewirken zwar eine Änderung der Atomkonfiguration, doch sind die Abstände der Flips klein (siehe am Beispiel des eindimensionalen Quasikristalls, dort erfolgen nur Wechsel von Abständen K zu L und umgekehrt) und die makroskopisch gemittelte Größe ρ bleibt erhalten.

3.2 Formalismus für Hydrodynamik

Neben der bisher vorgestellten Herleitung von hydrodynamischen Gleichungen, gibt es noch einen weiteren, verallgemeinerten Formalismus. Dieser beschreibt auch andere langsam variierende Variablen, für die, im Gegensatz zu den hydrodynamischen Variablen (3.7), die Dispersionsrelation im Grenzfall $q \rightarrow 0$ nicht gegen Null geht:

$$\lim_{q \rightarrow 0} \omega_0 = \frac{2\pi}{\tau_0}, \quad \frac{\tau}{\tau_0} \ll 1. \quad (3.47)$$

Die charakteristische Zeitskala τ_0 der neuen Variablen ist also groß im Vergleich zu den mikroskopischen Stoßzeiten τ . Als Beispiel für diese zusätzlichen „langsamen“ Variablen

seien hier der Betrag der Magnetisierung eines Antiferromagneten und eines planaren Ferromagneten genannt (Halperin et al. [32]). Auch beinhaltet der verallgemeinerte Formalismus Fluktuationen, die z.B. bei Phasenübergängen wichtig sind (Glasübergang: Das et al. [33], [34]). Andere Anwendungsbeispiele sind Flüssigkristalle (Mazenko et al. [35]) und amorphe Festkörper (Das [36]). Beschränkt man sich auf hydrodynamische Variablen und vernachlässigt man die Fluktuationen, so ergeben sich die hydrodynamischen Gleichungen.

Als Literaturangabe für diesen Abschnitt seien, neben den Büchern von Forster [26] sowie Chaikin und Lubensky [27], die Zusammenfassung im Artikel von Stark und Lubensky [37] und die Übersichtsartikel von Ma und Mazenko [38] sowie Mori und Fujisaka [39] erwähnt. In der Veröffentlichung von Mori und Fujisaka erfolgt die Herleitung der Bewegungsgleichungen ausgehend von einem mikroskopischen Modell. Im Rahmen dieser Diplomarbeit soll diese Herleitung nicht wiedergegeben werden, sondern es soll die Herkunft der einzelnen Terme erläutert werden. Dann soll am Beispiel des ikosaedrischen Quasikristalls die Äquivalenz zu den Gleichungen (3.46) explizit gezeigt werden.

Die Bewegungsgleichungen für die Menge der Variablen $\{\Psi_\alpha\}$ lauten im verallgemeinerten Formalismus:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi_\alpha(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \underbrace{\int \{\Psi_\alpha(\mathbf{x}, t), \Psi_\beta(\mathbf{x}', t)\} \frac{\delta H}{\delta \Psi_\beta(\mathbf{x}', t)} d^d x'}_{\text{Term A}} - \underbrace{\int d^d x' \frac{\delta}{\delta \Psi_\beta(\mathbf{x}', t)} \{\Psi_\alpha(\mathbf{x}, t), \Psi_\beta(\mathbf{x}', t)\}}_{\text{Term B}} \\ + \underbrace{\Gamma_{\alpha\beta} \frac{\delta H}{\delta \Psi_\beta(\mathbf{x}, t)}}_{\text{Term C}} = \underbrace{\zeta_\alpha(\mathbf{x}, t)}_{\text{Term D}}. \end{aligned} \quad (3.48)$$

Die hydrodynamischen Variablen Ψ_α sind im Fall der Fluidodynamik die Energiedichte ϵ , die Massendichte ρ und die Impulsdichte \mathbf{g} . Beim Quasikristall werden diese um die phononische und phasonische Verschiebung \mathbf{u} und \mathbf{w} erweitert. In (3.48) bezeichnet $\{, \}$ die POISSONKlammer zwischen den hydrodynamischen Variablen. H ist die makroskopische HAMILTONfunktion, und als Funktional abhängig von den Ψ_α . $\Gamma_{\alpha\beta}$ ist die Matrix der kinetischen Koeffizienten (z.B. $\Gamma_{gg} = \tilde{\eta}_{ijkl}$ Viskosität als Reibungsterm der Impulsgleichung) und $\zeta_\alpha(\mathbf{x}, t)$ die stochastische Fluktuation.

Im Folgenden soll die Herkunft der Terme C und D gezeigt werden. Term C ist der Anteil der irreversiblen Ströme und macht zusammen mit dem Fluktuationsterm D die Gleichung (3.48) zu einer verallgemeinerten LANGEVINGleichung. Für eine einzelne Variable lautet die LANGEVINGleichung:

$$\frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\Gamma \Psi(\mathbf{x}, t) + \zeta(\mathbf{x}, t). \quad (3.49)$$

Als Beispiel sei Ψ gleich dem Impuls \mathbf{g} , dann relaxiert dieser unter der Einwirkung einer stochastischen Kraft $\zeta(t)$ mit dem Reibungskoeffizienten Γ . Erweitert man die LANGEVINGleichung auf mehrere Variablen und lässt Nichtlinearitäten zu, so erhält man mit der

Funktionalableitung der HAMILTONfunktion H :

$$\frac{\partial \Psi_\alpha(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\Gamma_{\alpha\beta} \frac{\delta H}{\delta \Psi_\beta(\mathbf{x}, t)} + \zeta_\alpha(\mathbf{x}, t). \quad (3.50)$$

Das durch (3.50) beschriebene Modell, wird als zeitabhängiges GINZBURG-LANDAU Modell bezeichnet.

Die Terme A und B beschreiben die reversiblen Ströme und sind das Ergebnis der Mittelung mikroskopischer klassischer Bewegungsgleichungen. Die makroskopischen hydrodynamischen Felder $\Psi_\alpha(\mathbf{x}, t)$ seien Mittelungen $\langle \dots \rangle$ (coarse graining) der mikroskopischen Felder $\Psi_\alpha^\mu(\mathbf{x}, \{\mathbf{x}^\alpha\}, \{\mathbf{p}^\alpha\})$ (Beispiele für mikroskopische Felder siehe A.2), die selbst Funktionen von kanonischen Variablen $\{\mathbf{x}^\alpha\}, \{\mathbf{p}^\alpha\}$ sind.

$$\Psi_\alpha(\mathbf{x}, t) = \langle \Psi_\alpha^\mu(\mathbf{x}, \{\mathbf{x}^\alpha\}, \{\mathbf{p}^\alpha\}) \rangle \quad (3.51)$$

Daher gilt folgende Bewegungsgleichung⁵ mit der mikroskopischen HAMILTONfunktion $H^\mu(\{\mathbf{x}^\alpha\}, \{\mathbf{p}^\alpha\})$:

$$\frac{\partial \Psi_\alpha^\mu}{\partial t} = \{H^\mu, \Psi_\alpha^\mu\}. \quad (3.52)$$

Da die Beschreibung der Hydrodynamik in makroskopischen Variablen Ψ_α erfolgt, muss man über die mikroskopischen Ψ_α^μ mitteln. Dabei geht die mikroskopische HAMILTONfunktion $H^\mu(\{\mathbf{x}^\alpha\}, \{\mathbf{p}^\alpha\})$ in das makroskopische Funktional $H[\Psi_\alpha]$ über. Dieses, makroskopische HAMILTONfunktion genannt, hängt von den makroskopischen Variablen Ψ_α ab. Mit Hilfe der Funktionalableitung lässt sich (3.52) umformen zu:

$$\frac{\partial \Psi_\alpha(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \int \left(\{ \Psi_\beta(\mathbf{x}'), \Psi_\alpha(\mathbf{x}, t) \} \frac{\delta H}{\delta \Psi_\beta(\mathbf{x}', t)} \right) d^d x'. \quad (3.53)$$

Die statistischen Mittelwerte von Observablen in der makroskopischen Darstellung stimmen mit den statistischen Mittelwerten in der mikroskopischen Darstellung überein. Term B in (3.48) resultiert aus dem Übergang von mikroskopischen zu makroskopischen Größen. Man erhält die Form von Term B aus der Forderung, dass die Variablen eine bestimmte Wahrscheinlichkeitsverteilung (nach FOKKER-PLANCK-SMOLUCHOWSKI) wiedergeben müssen und für lange Zeiten ins Gleichgewicht relaxieren (siehe Kapitel 8.6 in Chaikin und Lubensky [27]). Der Beitrag von Term B ist im Allgemeinen entweder vernachlässigbar oder verschwindet, wie wir beim ikosaedrischen Quasikristall noch sehen werden.

Kennt man die HAMILTONfunktion H in Abhängigkeit der hydrodynamischen Variablen Ψ_α und die POISSONklammern, so erhält man mit (3.48) die hydrodynamischen Gleichungen. Von den irreversiblen Strömen ist zwar die Form von Term C bekannt, man hat aber kein Kriterium, welche der kinetischen Koeffizienten $\Gamma_{\alpha\beta}$ von Null verschieden sind. Der Vorteil dieses Formalismus gegenüber dem mit der Entropieproduktionsrate liegt darin, dass sich selbst nichtlineare Terme einfach berechnen lassen. Die Komponenten von $\Gamma_{\alpha\beta}$ werden dann so gewählt, dass die linearisierte Form von (3.48) mit den Gleichungen der linearen Hydrodynamik übereinstimmen.

⁵Entspricht der LIOUVILLEgleichung für generalisierte Koordinaten.

3.2.1 POISSONklammern

Die Herleitung von hydrodynamischen Gleichungen wurde auf die Bestimmung der POISSONklammern reduziert. Diese lassen sich auf drei Arten berechnen. Die makroskopische POISSONklammer ist durch die Mittelung der mikroskopischen, klassischen POISSONklammer⁶ gegeben:

$$\{\Psi_\alpha(\mathbf{x}), \Psi_\beta(\mathbf{x}')\} = \langle \{\Psi_\alpha^\mu(\mathbf{x}), \Psi_\beta^\mu(\mathbf{x}')\} \rangle. \quad (3.54)$$

Wobei die mikroskopische, klassische POISSONklammer folgendermaßen definiert ist:

$$\{f, g\} := \sum_{\alpha, i} \frac{\partial f}{\partial p_i^\alpha} \frac{\partial g}{\partial x_i^\alpha} - \frac{\partial f}{\partial x_i^\alpha} \frac{\partial g}{\partial p_i^\alpha}, \quad (3.55)$$

mit α als Teilchenindex und i als Index der Vektorkomponente.

Neben der klassischen POISSONklammer kann man auch den quantenmechanischen Kommutator $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ berechnen. Dabei gehen die klassischen Observablen f in quantenmechanische Operatoren \hat{f} über. Die POISSONklammer entspricht bis auf einen Faktor $\frac{i}{\hbar}$ dem Kommutator:

$$\{, \} \Leftrightarrow \frac{i}{\hbar} [,]. \quad (3.56)$$

Diese beiden Ansätze werden für den ikosaedrischen Quasikristall in Anhang A betrachtet. Im folgenden soll ein weiterer Ansatz vorgestellt werden, der auf Dzyaloshinskii und Volovick [40] zurückgeht. Eine Anwendung dieser Methode zur Herleitung hydrodynamischer Gleichungen bei Flüssigkristallen wurde von Volovik und Kats in [41] veröffentlicht. Das Ergebnis dieses neuen Ansatz besteht darin, dass sich die POISSONklammern durch die Variation des Transformationsverhaltens der hydrodynamischen Variablen bestimmen lassen.

Um dieses Ergebnis zu erhalten, geht man von der Theorie kontinuierlicher Gruppen aus. Dort wird ein Element g der Gruppe G durch m reelle, kontinuierliche Parameter α_i beschrieben:

$$g(\alpha_i) \in G, \quad \alpha_i \in \mathbb{R}, \quad i = 1, \dots, m. \quad (3.57)$$

Die Verknüpfung „ \cdot “ zweier Elemente $a(\alpha_i)$ und $b(\beta_i)$ ergibt ein Element $c(\gamma_i) \in G$:

$$c(\gamma_i) = a(\alpha_i) \cdot b(\beta_i) \quad i = 1, \dots, m. \quad (3.58)$$

Für die kontinuierlichen Parameter gilt dabei:

$$\gamma_i = \varphi_i(\alpha_1, \dots, \alpha_m, \beta_1, \dots, \beta_m). \quad (3.59)$$

⁶Im Zusammenhang mit den klassischen POISSONklammern wird von der Konvention abgewichen, dass griechische Indices die Komponenten des Hyperraums bezeichnen.

Man spricht von einer LIEGRUPPE wenn, neben der Erfüllung der Gruppenaxiome (Assoziativität, Abgeschlossenheit, Existenz des neutralen Elements und der Inversen), die φ_i (beliebig oft) kontinuierlich differenzierbare Funktionen aller Parameter α_i und β_i sind. Für die Differenzierbarkeit ist der Begriff der Nachbarschaft wichtig. Dieser und andere topologische Eigenschaften sind weitere Voraussetzungen für eine LIEGRUPPE (siehe z.B. [15], [16], [42]). Wählt man die Parameter α_i so, dass das neutrale Element (Identität) e durch $\alpha_i(e) = 0$ parametrisiert wird, so werden durch die partiellen Ableitungen nach den Parametern die infinitesimalen Generatoren (Erzeugenden) L_i der LIEGRUPPE definiert:

$$L_i := \left. \frac{\partial a(\dots, \alpha_i, \dots)}{\partial \alpha_i} \right|_{\alpha_i=0}. \quad (3.60)$$

Das Gruppenelement a ist damit in einer Entwicklung darstellbar:

$$a(\dots, \alpha_i, \dots) = e(\dots, 0, \dots) + \alpha_i L_i + \mathcal{O}(\alpha_i^2). \quad (3.61)$$

Eine LIEALGEBRA wird durch die zusätzliche Verknüpfung des Kommutators zwischen den Erzeugenden L_i definiert:

$$[L_i, L_k] = c_{ij}^k L_k \quad i, j, k = 1, \dots, m. \quad (3.62)$$

c_{ij}^k wird als Strukturkonstante bezeichnet. Eine LIEALGEBRA erfüllt auch die folgenden Eigenschaften der Antisymmetrie, Linearität und der JACOBIIDENTITÄT:

$$[L_i, L_j] = -[L_j, L_i], \quad (3.63)$$

$$[\alpha L_i + \beta L_j, L_k] = \alpha [L_i, L_k] + \beta [L_j, L_k] \quad \alpha, \beta \in \mathbb{R} \text{ oder } \mathbb{C}, \quad (3.64)$$

$$[L_i, [L_j, L_k]] + [L_k, [L_i, L_j]] + [L_j, [L_k, L_i]] = 0. \quad (3.65)$$

Für eine Translation sind die Erzeugenden die Impulsoperatoren, für eine Rotation die Drehimpuls (oder Spin-) Operatoren. Elastizitätstheorie basiert auf der Beschreibung der Transformation des Koordinatensystems. Genau wie in der Hydrodynamik wird dies durch die Gruppe der lokalen Verschiebungen beschrieben:

$$x^k \longrightarrow x^k + u^k(\mathbf{x}). \quad (3.66)$$

Den hydrodynamischen Variablen a, b, c, \dots werden Elemente A, B, C, \dots einer Algebra der Transformationsgruppe G zugeordnet:

$$\{a, b, c, \dots\} \longrightarrow \{A, B, C, \dots\}. \quad (3.67)$$

Die Elemente der Algebra lassen sich, wie bei einer FROBENIUSALGEBRA einer diskreten Gruppe, als Linearkombinationen der Gruppenelemente g ausdrücken:

$$A = \sum_{g \in G} A(g)g, \quad A(g) \in \mathbb{R} \text{ oder } \mathbb{C}. \quad (3.68)$$

Die Summe über die Gruppenelemente geht dabei über in ein Integral über die kontinuierlichen Parameter. Unter einer Transformation $g \in G$ werden die Elemente der Algebra folgendermaßen transformiert:

$$A \longrightarrow gAg^{-1}. \quad (3.69)$$

Für eine infinitesimale Transformation δg mit $g = 1 + \delta g$ lautet dies in linearer Näherung:

$$A \longrightarrow A + \delta A, \quad (3.70)$$

$$\delta A = [\delta g, A]. \quad (3.71)$$

Die infinitesimale Transformation lässt sich auch als Funktion des infinitesimalen lokalen Transformationswinkel $\alpha^k(\mathbf{x})$ und der Erzeugenden $L_k(\mathbf{x})$ der Transformation ausdrücken. Da die Transformationswinkel und die Erzeugenden Feldgrößen sind, muss über das Volumen integriert werden:

$$\delta g = \frac{i}{\hbar} \int \alpha^k(\mathbf{x}) L_k(\mathbf{x}) d^d x. \quad (3.72)$$

Für die Gruppe der Verschiebungen ist der infinitesimale Winkel $\alpha^k = u^k$, und die Erzeugende ist der Impulsoperator. Mit (3.71) und (3.72) erhält man für δA :

$$\delta A(\mathbf{y}) = \frac{i}{\hbar} \int \alpha^k(\mathbf{x}) [L_k(\mathbf{x}), A(\mathbf{y})] d^d x. \quad (3.73)$$

Diese Gleichung lässt sich auch als lineares Funktional des infinitesimalen Winkels α^k auffassen. Da es sich um infinitesimale Größen δA und α^k handelt, erhält man den Kommutator als folgende Variation nach dem Winkel α^k :

$$\frac{\delta A(\mathbf{y})}{\delta \alpha^k(\mathbf{x})} = \frac{i}{\hbar} [L_k(\mathbf{x}), A(\mathbf{y})]. \quad (3.74)$$

Entsprechend dem Übergang von der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik, mit:

$$\frac{\delta A}{\delta \alpha} = \frac{i}{\hbar} [L, A] \quad \Leftrightarrow \quad \{l, a\} = \frac{\delta a}{\delta \alpha}. \quad (3.75)$$

gelten für die hydrodynamischen Variablen a, b, \dots und den zugehörigen Erzeugenden $l^k(\mathbf{x})$:

$$\{l_k(\mathbf{x}), a(\mathbf{y})\} = \frac{\delta a(\mathbf{y})}{\delta \alpha^k(\mathbf{x})}. \quad (3.76)$$

Die POISSONklammern zwischen hydrodynamischen Variablen a, b, \dots , die nicht zu den Erzeugenden einer Transformation gehören, verschwinden,

$$\{a, a\} = \{a, b\} = \{b, b\} = 0, \quad (3.77)$$

während für die Erzeugenden l_k selbst gilt:

$$\{l_k(\mathbf{x}), l_m(\mathbf{y})\} = \frac{\delta l_m(\mathbf{y})}{\delta \alpha^k(\mathbf{x})}. \quad (3.78)$$

Um die Variation bestimmen zu können, muss man jetzt noch das Verhalten der hydrodynamischen Variablen a unter der infinitesimalen Transformation (für die Hydrodynamik $x^k \rightarrow x'^k = x^k + u^k(\mathbf{x})$) kennen. Tensordichten $(p+q)$ ter Stufe (p kontravariant, q kovariant) transformieren sich allgemein bei einer Koordinatentransformation nach [43]:

$$T_{j_1 \dots j_q}^{i_1 \dots i_p} = J^W \frac{\partial x'^{i_1}}{\partial x^{k_1}} \dots \frac{\partial x'^{i_p}}{\partial x^{k_p}} \frac{\partial x^{l_1}}{\partial x'^{j_1}} \dots \frac{\partial x^{l_q}}{\partial x'^{j_q}} T_{l_1 \dots l_q}^{k_1 \dots k_p}, \quad (3.79)$$

$$J = \left| \frac{\partial x^i}{\partial x'^j} \right|. \quad (3.80)$$

W ist das Gewicht der JACOBI-Determinante J , für die hier betrachteten Fälle gilt $W = 1$. Für den Fall eines kovarianten Tensors erster Stufe gilt:

$$\frac{\partial x^i}{\partial x'^j} = \delta_j^i - \frac{\partial u^i}{\partial x'^j}. \quad (3.81)$$

Und für die JACOBI-Determinante (in linearer Näherung für die infinitesimalen $\frac{\partial u^i}{\partial x'^j}$):

$$J = 1 - \frac{\partial u^i}{\partial x'^i}. \quad (3.82)$$

Damit folgt für die Variation des kovarianten Vektors t_j :

$$\delta t_j = t'_j(x') - t_j(x'), \quad (3.83)$$

$$t'_j(x') = J \frac{\partial x^i}{\partial x'^j} t_i(x) \quad (3.84)$$

$$\begin{aligned} &= \left(1 - \frac{\partial u^m}{\partial x'^m} \right) \left(\delta_j^i - \frac{\partial u^i}{\partial x'^j} \right) t_i \\ &\cong t_j(x' - u) - t_j(x') \frac{\partial u^m}{\partial x'^m} - t_i(x') \frac{\partial u^i}{\partial x'^j}. \end{aligned} \quad (3.85)$$

Für δt_j ergeben sich schließlich drei Terme:

$$\delta t_j = -u^i \frac{\partial t_j}{\partial x'^i} - t_j \frac{\partial u^i}{\partial x'^i} - t_i \frac{\partial u^i}{\partial x'^j}. \quad (3.86)$$

Der erste Term beschreibt die Verschiebung um den Vektor u^k , der zweite Anteil berücksichtigt, dass es sich bei den hydrodynamischen Variablen um Tensordichten handelt. Der dritte Term resultiert von der Transformation eines kovarianten Vektors. Dieser Term ist bei den Tensoren nullter Stufe nicht vorhanden. Für die Dichte ρ und die Impulsdichte g_k erhält man mit (3.86) folgende Terme, die sowohl für eine Flüssigkeit als auch für den ikosaedrischen Quasikristall gültig sind:

$$\delta \rho = -u^l \nabla_l \rho - \rho \nabla_l u^l, \quad (3.87a)$$

$$\delta g_k = -u^l \nabla_l g_k - g_k \nabla_l u^l - g_l \nabla_k u^l. \quad (3.87b)$$

Mit (3.87) und (3.76)-(3.78) ergeben sich die POISSONklammern von Dichte und Impulsdichte zu (Gl. (3.88) und (3.89) explizit in [40]):

$$\{g_i(\mathbf{x}), \rho(\mathbf{x}')\} = \rho(\mathbf{x}) \nabla_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (3.88)$$

$$\{g_i(\mathbf{x}), g_j(\mathbf{x}')\} = \left(g_j(\mathbf{x}) \nabla_i - g_i(\mathbf{x}') \nabla'_j \right) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (3.89)$$

Die POISSONklammern für die phononische und phasonische Verschiebung lassen sich einfacher bestimmen, da die Verschiebungen selbst die infinitesimalen Größen sind:

$$\{g_i(\mathbf{x}), u_j(\mathbf{x}')\} = \frac{\delta u_j(\mathbf{x}')}{\delta u^i(\mathbf{x})} = \left[\delta_{ij} - \nabla'_i u_j(\mathbf{x}') \right] \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (3.90)$$

$$\{g_i(\mathbf{x}), w_j(\mathbf{x}')\} = \frac{\delta w_j(\mathbf{x}')}{\delta u^i(\mathbf{x})} = - \left[\nabla'_i w_j(\mathbf{x}') \right] \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (3.91)$$

Der Unterschied zwischen (3.90) und (3.91) kommt daher, dass die phasonische Verschiebung w_j nur eine Funktion der Ortskomponente ist, aber selbst Element des Orthogonalraums ist.

3.2.2 Hydrodynamik in ikosaedrigen Quasikristallen - Teil 2

Die hydrodynamischen Variablen eines ikosaedrigen Quasikristalls sind die Energiedichte ϵ , Massendichte ρ , Impulsdichte \mathbf{g} sowie die phononische \mathbf{u} und phasonische Verschiebung \mathbf{w} . Die Energiedichte ϵ wird im Folgenden nicht betrachtet.

Die HAMILTONfunktion H entspricht der freien Energie, bestehend aus einem elastischen Anteil, einer Erweiterung des elastischen Anteils durch die Dichteänderung sowie eines kinetischen Anteils:

$$H = \int d^d x \left[\frac{\mathbf{g}^2}{2\rho} + \frac{1}{2} A \left(\frac{\delta\rho}{\rho_0} \right)^2 + B \left(\frac{\delta\rho}{\rho_0} \right) \nabla \cdot \mathbf{u} \right] + F_{\text{el.}}(\mathbf{u}, \mathbf{w}) \quad (3.92)$$

$$= H_{\text{kin.}} + H_{\text{erw.}}, \quad (3.93)$$

$$H_{\text{kin.}} = \int \frac{\mathbf{g}^2}{2\rho} d^d x. \quad (3.94)$$

$F_{\text{el.}}(\mathbf{u}, \mathbf{w})$ ist die freie elastische Energie, die aus drei Teilen besteht (siehe (2.56), (2.61)):

$$F_{\text{el.}}(\mathbf{u}, \mathbf{w}) = F_u + F_w + F_{uw}. \quad (3.95)$$

Mit den POISSONklammern (3.88)-(3.91) bzw. (A.8)-(A.11) lassen sich nun die hydrodynamischen Gleichungen berechnen (siehe Anhang A). Die von Null verschiedenen

kinetischen Koeffizienten sind $\Gamma_{gg} = \tilde{\eta}_{ijkl}$, $\Gamma_{uu} = \Gamma_u$ und $\Gamma_{ww} = \Gamma_w$. Die hydrodynamischen Gleichungen lauten zusammengefasst:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_k (v_k \rho) = 0, \quad (3.96a)$$

$$\frac{\partial g_i}{\partial t} + \nabla_k (v_k g_i) - \nabla_j \tilde{\eta}_{ijkl} \nabla_k v_l = -(\delta_{ij} - \nabla_i u_j) \frac{\delta H}{\delta u_j} + (\nabla_i w_j) \frac{\delta H}{\delta w_j} - \rho \nabla_i \frac{\delta H_{\text{erw.}}}{\delta \rho}, \quad (3.96b)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + v_k \nabla_k u_i = v_i - \Gamma_u \frac{\delta H}{\delta u_i}, \quad (3.96c)$$

$$\frac{\partial w_i}{\partial t} + v_k \nabla_k w_i = -\Gamma_w \frac{\delta H}{\delta w_i}. \quad (3.96d)$$

$H_{\text{erw.}}$ entspricht der erweiterten freien Energie $F_{\text{erw.}}$. Die hydrodynamischen Gleichungen stimmen mit den auf konventionellem Weg hergeleiteten Gleichungen (3.46) überein, wenn man H und $H_{\text{erw.}}$ durch F bzw. $F_{\text{erw.}}$ ersetzt.

Bevor in Kapitel 3.3 die Dispersionsrelation berechnet wird, soll anhand der Gleichungen (3.96) die Modenstruktur argumentativ bestimmt werden. Insgesamt werden zehn Moden erwartet (drei vektorielle und eine skalare hydrodynamische Variable). Da die phononische Verschiebung über die Geschwindigkeit \mathbf{v} an die Impulsdichte koppelt, werden drei Paar Moden propagierend sein. Die Phasonen besitzen, neben dem Term der konvektiven Ableitung, nur einen dissipativen Term. Deshalb wird für die Phasonen ein dissipatives Verhalten erwartet (insgesamt drei Moden). Die verbleibende Mode kann deshalb nur diffusiv sein. Es ist die Mode der Leerstellendiffusion.

Die Dispersionsrelation wird im FOURIERraum bestimmt. Die FOURIERtransformation $F(\mathbf{q}, \omega)$ einer Funktion $F(\mathbf{x}, t)$ ist folgendermaßen definiert:

$$F(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{d+1}} \int \int F(\mathbf{q}, \omega) e^{-i(\omega t - \mathbf{q} \cdot \mathbf{x})} d^d q d\omega. \quad (3.97)$$

Es gelten damit die Ersetzungen:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow -i\omega, \quad \nabla_i \rightarrow iq_i. \quad (3.98)$$

Die einzelnen Terme der freien elastischen Energie sind als Funktion der FOURIERtransformierten Felder $\mathbf{u}(\mathbf{q})$ und $\mathbf{w}(\mathbf{q})$ in [25] angegeben und lauten:

$$F_u = \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \left[\frac{1}{2} (\lambda + 2\mu) q_i q_j + \frac{1}{2} \mu (q^2 \delta_{ij} - q_i q_j) \right] u_i(\mathbf{q}) u_j(-\mathbf{q}), \quad (3.99)$$

$$F_w = \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \frac{1}{2} M_{ij}(\mathbf{q}) w_i(\mathbf{q}) w_j(\mathbf{q}), \quad (3.100)$$

$$F_{uw} = \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} C_{ij}(\mathbf{q}) u_i(\mathbf{q}) w_j(\mathbf{q}), \quad (3.101)$$

mit

$$M_{ij} = K_1 q^2 \delta_{ij} + K_{ij}, \quad (3.102)$$

$$K_{ij}(\mathbf{q}) = \frac{K_2}{\tau^2} \begin{pmatrix} \tau^4 q_x^2 + q_y^2 + \tau^2 q_z^2 & -2\tau^2 q_y q_z & -2\tau^2 q_x q_z \\ -2\tau^2 q_y q_z & q_x^2 + \tau^2 q_y^2 + \tau^4 q_z^2 & 2\tau^2 q_x q_y \\ -2\tau^2 q_x q_z & 2\tau^2 q_x q_y & \tau^2 q_x^2 + \tau^4 q_y^2 + q_z^2 \end{pmatrix}, \quad (3.103)$$

$$C_{ij}(\mathbf{q}) = \frac{K_3}{\tau^2} \begin{pmatrix} 2\tau q_x q_z & 2\tau^3 q_x q_y & -\tau^2 q_x^2 - \tau q_y^2 + \tau^3 q_z^2 \\ -2\tau^3 q_y q_z & \tau^3 q_x^2 - \tau^2 q_y^2 - \tau q_z^2 & -2\tau q_x q_y \\ \tau q_x^2 - \tau^3 q_y^2 + \tau^2 q_z^2 & -2\tau q_y q_z & 2\tau^3 q_x q_z \end{pmatrix}. \quad (3.104)$$

Für die Elastizitätskonstanten der Kopplung K_3 und des rein phasonischen Anteils der Energie K_1 und K_2 gilt:

$$K_1 = \lambda_5, \quad K_2 = \lambda_4 - \lambda_5, \quad K_3 = \lambda_3. \quad (3.105)$$

Damit und mit (2.67), (3.30) lauten die Stabilitätsbedingungen:

$$A > 0, \quad \left(\lambda + \frac{2}{3}\mu\right) > 0, \quad A \left(\lambda + \frac{2}{3}\mu\right) > B^2, \quad \mu > 0, \quad K_1 > 0, \quad (K_1 + K_2) > 0. \quad (3.106)$$

Äußere Kräfte

In diesem Unterabschnitt soll die Auswirkung von externen Kräften auf die hydrodynamischen Gleichungen bestimmt werden. Die externe Kräfte lassen sich in zwei Klassen aufteilen. Die erste sind Volumenkräfte, die sich durch einen Vektor der Kraftdichte mit Komponenten im Parallel- und Orthogonalraum angeben lassen:

$$\mathbf{b}^{\text{ext.}}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \mathbf{b}^{\parallel}(\mathbf{x}) \\ \mathbf{b}^{\perp}(\mathbf{x}) \end{pmatrix}. \quad (3.107)$$

Die zweite Klasse seien Flächenkräfte, die durch einen Spannungstensor beschrieben werden:

$$\boldsymbol{\sigma}^{\text{ext.}}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}^u(\mathbf{x}) \\ \boldsymbol{\sigma}^w(\mathbf{x}) \end{pmatrix}. \quad (3.108)$$

In der Hamiltonfunktion ergeben sich zwei neue Beiträge:

$$H^{\text{ext.}} = \int \left(\mathbf{b}^{\text{ext.}}(\mathbf{x}') \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{u}(\mathbf{x}') \\ \mathbf{w}(\mathbf{x}') \end{pmatrix} - \boldsymbol{\sigma}^{\text{ext.}}(\mathbf{x}') : \boldsymbol{\eta}(\mathbf{x}') \right) d^d x'. \quad (3.109)$$

Im zweiten Term bezeichnet „:“ die vollständige Kontraktion, d.h. die Summation über alle Indices. Das Minuszeichen berücksichtigt das gerichtete Volumen. Die Variation der Hamiltonfunktion ergibt:

$$\frac{\delta H^{\text{ext.}}}{\delta \mathbf{u}(\mathbf{x})} = \mathbf{b}^{\parallel} + \nabla \sigma^{u,\text{ext.}}, \quad (3.110)$$

$$\frac{\delta H^{\text{ext.}}}{\delta \mathbf{w}(\mathbf{x})} = \mathbf{b}^{\perp} + \nabla \sigma^{w,\text{ext.}}. \quad (3.111)$$

Damit erhalten folgende hydrodynamischen Gleichungen zusätzliche Terme:

$$u_i \rightarrow \Gamma_u \left(b_i^{\parallel} + \nabla_k \sigma_{ki}^{u,\text{ext.}} \right), \quad (3.112)$$

$$w_i \rightarrow \Gamma_w \left(b_i^{\perp} + \nabla_k \sigma_{ki}^{w,\text{ext.}} \right), \quad (3.113)$$

$$g_i \rightarrow b_i^{\parallel} + \nabla_k \sigma_{ki}^{u,\text{ext.}} - b_j^{\parallel} (\nabla_i u_j) - (\nabla_i u_j) (\nabla_k \sigma_{kj}^{u,\text{ext.}}) \\ + b_j^{\perp} (\nabla_i w_j) - (\nabla_i w_j) (\nabla_k \sigma_{kj}^{w,\text{ext.}}). \quad (3.114)$$

3.3 Qualitatives Verhalten

Um das qualitative Verhalten von den Bewegungsmoden der hydrodynamischen Variablen zu erhalten, betrachtet man die Dispersionsrelation $\omega(q)$. Diese erhält man durch Linearisierung und FOURIERtransformation von (3.96). Bei der Linearisierung nimmt man an, dass die Geschwindigkeit \mathbf{v} klein ist, so dass man Terme mit $\mathbf{v} \cdot (\text{hydrodyn. Variable})$ sowie höhere Ordnungen in hydrodynamischen Variablen vernachlässigen kann. Die linearisierten Gleichungen (3.96) lauten:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_k g_k = 0, \quad (3.115a)$$

$$\frac{\partial g_i}{\partial t} - \nabla_j \eta_{ijkl} \nabla_k g_l = -\frac{\delta H}{\delta u_i} - \rho_0 \nabla_i \frac{\delta H_{\text{erw.}}}{\delta \rho}, \quad (3.115b)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = \frac{g_i}{\rho_0} - \Gamma_u \frac{\delta H}{\delta u_i}, \quad (3.115c)$$

$$\frac{\partial w_i}{\partial t} = -\Gamma_w \frac{\delta H}{\delta w_i}. \quad (3.115d)$$

Dabei wurde beim Reibungsterm der Impulsdichte g_i von der dynamischen $\tilde{\eta}$ zur kinematischen Viskosität $\eta = \frac{\tilde{\eta}}{\rho_0}$ übergegangen.

Der Tensor der Viskosität η_{ijkl} hat wegen der hohen Symmetrie der Ikosaedergruppe nur zwei unabhängige Komponenten. Diese lassen sich als transversale und longitudinale Viskosität ausdrücken:

$$\eta_{ijkl} = (\eta_L - \frac{4}{3}\eta_T)\delta_{ij} + \eta_T(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\delta_{kl}) \\ = \eta_L\delta_{ij}\delta_{kl} + \eta_T(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk} - 2\delta_{ij}\delta_{kl}), \quad (3.116)$$

$$\begin{aligned}
\nabla_j(\eta_{ijkl}\nabla_k g_l) &= \nabla_j\eta_L\delta_{ij}\delta_{kl}\nabla_k g_l + \nabla_j\eta_T(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk} - 2\delta_{ij}\delta_{kl})\nabla_k g_l \\
&= \eta_L\nabla_i\nabla_j g_j + \eta_T\left(\nabla_l\nabla_i g_l + \nabla_k\nabla_k g_i - 2\nabla_i\nabla_k g_k\right) \\
&= \eta_L\nabla_i(\nabla\cdot\mathbf{g}) + \eta_T\left(\nabla^2 g_i - \nabla_i(\nabla\cdot\mathbf{g})\right).
\end{aligned} \tag{3.117}$$

Im Folgenden seien die hydrodynamischen Variablen Funktionen von \mathbf{q} und ω :

$$\frac{\delta H}{\delta u_i} = -iq_i B \frac{\delta\rho}{\rho_0} + (\lambda + 2\mu)q_k q_i u_k + \mu q^2 \left(\delta_{ij} - \frac{q_i q_j}{q^2} \right) u_j + C_{il} w_l, \tag{3.118a}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\delta H}{\delta w_i} &= \frac{\delta F_w}{\delta w_i} + \frac{\delta F_{uw}}{\delta w_i} \\
&= M_{ik} w_k + C_{ki} u_k, \quad \text{da } M_{ij} = M_{ji},
\end{aligned} \tag{3.118b}$$

$$\frac{\delta H_{\text{erw.}}}{\delta\rho} = A \frac{\delta\rho}{\rho_0^2} + \frac{iB}{\rho_0} q_j u_j. \tag{3.118c}$$

In isotropen Medien erfolgt eine Entkopplung zwischen longitudinalen und transversalen Wellen. Deshalb führen wir an dieser Stelle den longitudinalen \mathbf{Q} und den transversalen \mathbf{P} Projektionsoperator ein:

$$P_{ij} := \delta_{ij} - Q_{ij} := \delta_{ij} - \frac{q_i q_j}{q^2}. \tag{3.119}$$

$$-i\omega\delta\rho = -i\mathbf{q}\cdot\mathbf{g}, \tag{3.120a}$$

$$-i\omega\mathbf{u} = \frac{\mathbf{g}}{\rho_0} - \Gamma_u \left[-iB \frac{\delta\rho}{\rho_0} \mathbf{q} + (\lambda + 2\mu)q^2 \underline{\mathbf{Q}}\mathbf{u} + \mu q^2 \underline{\mathbf{P}}\mathbf{u} + \underline{\mathbf{C}}\mathbf{w} \right], \tag{3.120b}$$

$$-i\omega\mathbf{g} = -(\eta_L q^2 \underline{\mathbf{Q}} + \eta_T q^2 \underline{\mathbf{P}}) \mathbf{g} - i(A - B) \frac{\delta\rho}{\rho_0} \mathbf{q} - (\lambda + 2\mu - B)q^2 \underline{\mathbf{Q}}\mathbf{u} - \underline{\mathbf{C}}\mathbf{w}, \tag{3.120c}$$

$$-i\omega\mathbf{w} = -\Gamma_w [\underline{\mathbf{M}}\mathbf{w} + \underline{\mathbf{C}}^t \mathbf{u}]. \tag{3.120d}$$

Für die longitudinalen (Index L) und die transversalen Anteile (Index T) erhält man:

$$-i\omega\delta\rho = -i\mathbf{q}\cdot\mathbf{g}, \tag{3.121a}$$

$$-i\omega\mathbf{u}_T = \frac{\mathbf{g}_T}{\rho_0} - \Gamma_u [\mu q^2 \mathbf{u}_T + \underline{\mathbf{P}}(\hat{\mathbf{q}})\underline{\mathbf{C}}(\mathbf{q})\mathbf{w}], \tag{3.121b}$$

$$-i\omega u_L = \frac{g_L}{\rho_0} - \Gamma_u \left[(\lambda + 2\mu)q^2 u_L + \hat{\mathbf{q}}\cdot\underline{\mathbf{C}}(\mathbf{q})\mathbf{w} - iBq \frac{\delta\rho}{\rho_0} \right], \tag{3.121c}$$

$$-i\omega\mathbf{g}_T = -\eta_T q^2 \mathbf{g}_T - \mu q^2 \mathbf{u}_T - \underline{\mathbf{P}}(\hat{\mathbf{q}})\underline{\mathbf{C}}(\mathbf{q})\mathbf{w}, \tag{3.121d}$$

$$-i\omega g_L = -\eta_L q^2 g_L - (\lambda + 2\mu - B)q^2 u_L - \hat{\mathbf{q}}\cdot\underline{\mathbf{C}}(\mathbf{q})\mathbf{w} - i(A - B)q \frac{\delta\rho}{\rho_0}, \tag{3.121e}$$

$$-i\omega\mathbf{w} = -\Gamma_w [\underline{\mathbf{M}}(\mathbf{q})\mathbf{w} + \underline{\mathbf{C}}^t(\mathbf{q})\mathbf{u}]. \tag{3.121f}$$

3.3.1 Dispersionsrelation

Da die Hydrodynamik niederenergetische, langwellige Anregungen beschreibt, kann man die Frequenz ω in Potenzen von q entwickeln. Dabei muss der konstante Term verschwinden. Bei der Berechnung der Dispersionsrelation wurden nur Terme berücksichtigt, die einen linearen oder quadratischen Beitrag in q zur Dispersionsrelation beitragen. Die Gleichung (3.121f) der Phasonen erzeugt nur eine Kopplung zwischen longitudinalem und transversalem Anteil in Ordnung $\omega \propto \mathcal{O}(q^3)$:

$$\mathbf{w} = \frac{-i\Gamma_w \underline{\mathbf{C}}^t}{\omega} (\underline{\mathbf{P}} + \underline{\mathbf{Q}}) \mathbf{u}. \quad (3.122)$$

Dies führt auf Gleichungen für den transversalen:

$$(-i\omega + \Gamma_u \mu q^2) \mathbf{u}_T = \frac{\mathbf{g}_T}{\rho_0}, \quad (3.123)$$

$$(-i\omega + \eta_T q^2) \mathbf{g}_T + \left[\mu q^2 \mathbb{1} - \frac{\Gamma_w \underline{\mathbf{P}} \underline{\mathbf{C}} \underline{\mathbf{C}}^t \underline{\mathbf{P}}}{-i\omega} \right] \mathbf{u}_T = 0, \quad (3.124)$$

und longitudinalen Anteil⁷:

$$-i\omega \delta\rho + i q g_L = 0, \quad (3.125)$$

$$\begin{aligned} (-i\omega + \eta_L q^2) g_L + i(\lambda + 2\mu + A - 2B) q \frac{\delta\rho}{\rho_0} + \Gamma_u (\lambda + 2\mu - B)^2 \frac{\delta\rho}{\rho_0} \frac{q^3}{\omega} \\ + \frac{\Gamma_w}{\omega q} \text{Tr}(\underline{\mathbf{Q}} \underline{\mathbf{C}} \underline{\mathbf{C}}^t) \frac{\delta\rho}{\rho_0} = 0. \end{aligned} \quad (3.126)$$

Die Dispersionsrelation für die longitudinal propagierende Moden lautet:

$$\omega = \pm c_L q - \frac{i}{2} \left[\eta_L + \frac{\Gamma_w}{\rho_0 c_L^2} \frac{\text{Tr}(\underline{\mathbf{Q}} \underline{\mathbf{C}} \underline{\mathbf{C}}^t)}{q^4} + \frac{\Gamma_u (\lambda + 2\mu - B)^2}{\rho_0 c_L^2} \right] q^2, \quad (3.127)$$

mit der Schallgeschwindigkeit:

$$\rho_0 c_L^2 = \lambda + 2\mu + A - 2B, \quad (3.128)$$

und die Dispersionrelation der transversalen Moden:

$$\omega_\alpha = \pm c_T q - \frac{i}{2} \left[\eta_T + \Gamma_u \mu + \frac{\Gamma_w \lambda_\alpha}{\mu} \frac{1}{q^4} \right] q^2, \quad \alpha = 1, 2, \quad (3.129)$$

mit der Schallgeschwindigkeit:

$$\rho_0 c_T^2 = \mu, \quad (3.130)$$

⁷Mit Tr ist die Spur einer Matrix bezeichnet.

und λ_α sind die zwei von Null verschiedenen Eigenwerte von $\underline{\mathbf{P}} \underline{\mathbf{C}} \underline{\mathbf{C}}^t \underline{\mathbf{P}}$.

(3.127) und (3.129) sind die Dispersionsrelationen für die sechs propagierenden Moden im Quasikristall. Die restlichen vier sind diffusiv und beschreiben die Phasonen- und Leerstellendiffusion. Im nächsten Kapitel sind auch diese Dispersionsrelationen für den dort behandelten Spezialfall explizit angegeben. Der diffuse Charakter der Phasonen lässt sich leicht an (3.121f) erkennen, wenn man die Kopplungsmatrix $\underline{\mathbf{C}}$ vernachlässigt und sich daran erinnert, dass $\underline{\mathbf{M}}$ eine Funktion zweiter Ordnung in q ist.

Kapitel 4

Numerik von physikalischen Beispielen

In diesem Kapitel sollen die Bewegungsmoden der hydrodynamischen Variablen durch numerische Simulation veranschaulicht werden. Insbesondere ist der zusätzliche phasonische Freiheitsgrad, sowie dessen Kopplung an die Phononen, von Interesse. Dazu wird ein eindimensionaler Spezialfall der hydrodynamischen Gleichungen des ikosaedrischen Quasikristalls behandelt. Man erhält dabei zwei propagierende und zwei diffusive Moden. Nach der Vorstellung des numerischen Algorithmus wird das System für einige physikalische Beispiele gelöst. Die betrachteten physikalischen Beispiele sind Modelle für reale Experimente, wie die Verbreiterung einer Phasonenwand nach Durchgang einer Versetzung oder Versuche zur mechanischen Spektroskopie.

4.1 Eindimensionaler Spezialfall

Als Spezialfall wird eine Welle betrachtet, die sich in z -Richtung ausbreitet, d.h. mit einem Wellenvektor: $\mathbf{q} = (0, 0, q)^t$. Für die Komponenten der Impulsdichte, der phononischen und phasonischen Verschiebung folgt¹:

$$g := g_z, \quad u := u_z, \quad w := w_x. \quad (4.1)$$

Die anderen Komponenten der Vektoren entkoppeln. Die linearisierten, FOURIERtransformierten Gleichungen (3.121) ergeben sich zu ($\eta := \eta_L, K_{12} := K_1 + K_2$):

¹Zur besseren Unterscheidung von der Frequenz ω wird für die phasonische Verschiebung w verwendet.

$$-i\omega\delta\rho = -igq, \quad (4.2a)$$

$$-i\omega u = \frac{g}{\rho_0} - \Gamma_u \left[(\lambda + 2\mu)q^2 u - iBq \frac{\delta\rho}{\rho_0} + K_3 q^2 w \right], \quad (4.2b)$$

$$-i\omega g = -\eta q^2 g - (\lambda + 2\mu - B)q^2 u - K_3 q^2 w - i(A - B) \frac{\delta\rho}{\rho_0} q, \quad (4.2c)$$

$$-i\omega w = -\Gamma_w [K_{12} q^2 w + K_3 q^2 u]. \quad (4.2d)$$

Die Dispersionsrelation für diesen Spezialfall lautet:

$$\omega_{1,2} = \pm c_L q - \frac{i}{2} \left[\eta + \frac{\Gamma_u (\lambda + 2\mu - B)^2 + \Gamma_w K_3^2}{\rho_0 c_L^2} \right] q^2, \quad (4.3)$$

mit der longitudinalen Schallgeschwindigkeit:

$$c_L = \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu + A - 2B}{\rho_0}}, \quad (4.4)$$

sowie $\omega_{3,4} = b_{3,4} q^2$, mit $b_{3,4}$ als Lösungen der quadratischen Gleichung:

$$\begin{aligned} -c_L^2 \rho_0 b^2 + i \left[\Gamma_u (B^2 - A(\lambda + 2\mu)) + \Gamma_w (K_3^2 - K_{12}(\lambda + 2\mu + A - 2B)) \right] b \\ + \Gamma_u \Gamma_w \left(K_{12} (A(\lambda + 2\mu) - B^2) - A K_3^2 \right) = 0. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Für die in der Simulation verwendeten Zahlenwerte sind die Lösungen diffusiv:

$$\omega_{3,4} = -i |b_{3,4}| q^2. \quad (4.6)$$

Im Ortsraum lauten die hydrodynamischen Gleichungen ($\partial_t := \frac{\partial}{\partial t}$, $\nabla := \frac{\partial}{\partial z}$):

$$\partial_t \delta\rho = -\nabla g, \quad (4.7a)$$

$$\partial_t g = \eta \nabla^2 g + (\lambda + 2\mu - B) \nabla^2 u + K_3 \nabla^2 w - (A - B) \frac{\nabla \delta\rho}{\rho_0}, \quad (4.7b)$$

$$\partial_t u = \frac{g}{\rho_0} + \Gamma_u \left[(\lambda + 2\mu) \nabla^2 u + \frac{B}{\rho_0} \nabla \delta\rho + K_3 \nabla^2 w \right], \quad (4.7c)$$

$$\partial_t w = \Gamma_w [K_{12} \nabla^2 w + K_3 \nabla^2 u]. \quad (4.7d)$$

Die stationären Lösungen erhält man, indem die Zeitableitungen gleich Null gesetzt werden:

$$\delta\rho_{st}(z) = -\mathcal{K} g_0 z + \delta\rho_0, \quad (4.8a)$$

$$g_{st}(z) = g_0, \quad (4.8b)$$

$$u_{st}(z) = -\mathcal{L} g_0 z^2 + u_1 z + u_0, \quad (4.8c)$$

$$w_{st}(z) = \frac{K_3}{K_{12}} \mathcal{L} g_0 z^2 + w_1 z + w_0. \quad (4.8d)$$

Dabei sind $\delta\rho_0, g_0, u_1, u_0, w_1, w_0$ Integrationskonstanten, die durch die Randwerte bestimmt werden. \mathcal{K}, \mathcal{L} hängen von den kinetischen Koeffizienten und den elastischen Konstanten ab:

$$\mathcal{L} = \frac{\Gamma_u}{\rho_0(A-B)} \left[\left(\lambda + 2\mu - \frac{K_3^2}{K_{12}} \right) A - B^2 \right], \quad (4.9)$$

$$\mathcal{K} = \frac{\rho_0}{A-B} \left(\lambda + 2\mu - B - \frac{K_3^2}{K_{12}} \right) \mathcal{L}. \quad (4.10)$$

4.2 Numerik

4.2.1 Konstanten

Im Folgenden werden die in der Numerik verwendeten Werte der Konstanten für den ikosaedrischen Quasikristall AlPdMn angegeben. Für die freie elastische Energie wurden die von Ricker [6] angegebenen Konstanten übernommen. Die rein phasonenelastischen Konstanten λ, μ wurden von Amazit et al. [44] durch Messung der Schallgeschwindigkeit bestimmt:

$$\lambda = 85 \text{ GPa}, \quad \mu = 65 \text{ GPa}. \quad (4.11)$$

Die rein phasonenelastischen Konstanten wurden von Létoublon et. al. [45], [46] mit Neutronen- und Röntgenstreuexperimenten an ikosaedrischem AlPdMn gemessen. Die phasonenelastischen Konstanten ergaben sich dabei zu:

$$K_1 = 0,044 \text{ GPa}, \quad K_2 = -0,0396 \text{ GPa}. \quad (4.12)$$

Da für die Kopplungskonstante K_3 keine experimentellen Ergebnisse vorliegen, wurde als Wert

$$K_3 = 0,2 \text{ GPa}. \quad (4.13)$$

angenommen. Aus Computersimulationen für einen dekadagonalen Quasikristall (Koschella [47]) ist bekannt, dass der Wert für die Kopplungskonstante die gleiche Größenordnung hat wie die rein phasonenelastischen Konstanten. Der angenommene Wert ist größer als die phasonenelastischen Konstanten, und kleiner als der durch die Stabilitätsbedingung erlaubte Maximalwert $K_{3,\max} = 2,4 \text{ GPa}$. Dadurch wird der Einfluss der Phasonen hervorgehoben.

Für die elastischen Konstanten der Dichteänderung A und B wurde die Größenordnung als typische elastische Konstante abgeschätzt.

Die kinetischen Koeffizienten wurden so festgelegt, dass durch die aus den Dispersionsrelationen (4.3)-(4.5) bekannten Diffusionskoeffizienten für die Phasonen- und Leerstellendiffusion in etwa die Größenordnung der experimentell ermittelten Phasonendiffusionskonstanten wiedergegeben wurde. Die Leerstellendiffusionskonstante wurde, zur besseren

Konstante	Wert	Quelle
ρ_0	$5,08 \frac{g}{cm^3}$	Amazit [44]
η	$1 \frac{cm^2}{s}$	Lubensky [25] (Annahme)
Γ_u	$4,8 \cdot 10^{-17} \frac{m^3 s}{kg}$	Annahme
Γ_w	$4,8 \cdot 10^{-19} \frac{m^3 s}{kg}$	Annahme, de Boissieu
A	1 GPa	Annahme
B	1 GPa	Annahme
λ	85 GPa	Amazit [44]
μ	65 GPa	Amazit [44]
K_1	0,044 GPa	Létoublon [46]
K_2	-0,0396 GPa	Létoublon [46]
$K_{12} = K_1 + K_2$	0,0044 GPa	
K_3	0,2 GPa	Annahme, max. 2,4 GPa

Tabelle 4.1: Tabelle der Konstanten

Unterscheidung in der Numerik, größer als die Phasonendiffusionskonstante angenommen. Vorläufiges Messergebnis² nach de Boissieu für die Phasonendiffusionskonstante ist:

$$D_{\text{Phason}} = 2,1 \cdot 10^{-16} \frac{m^2}{s}. \quad (4.14)$$

Mit diesen Werten und (4.5) folgt für die kinetischen Koeffizienten:

$$\Gamma_u = 4,8 \cdot 10^{-21} \frac{m^3 s}{kg}, \quad (4.15)$$

$$\Gamma_w = 4,8 \cdot 10^{-23} \frac{m^3 s}{kg}. \quad (4.16)$$

Da durch die Zeitintegration der hydrodynamischen Gleichungen nur das qualitative Verhalten veranschaulicht werden sollte, wurden die kinetischen Koeffizienten $\Gamma_{u,w}$ für die Numerik mit einem Faktor 10^4 durchmultipliziert. Damit ließ sich die Rechenzeit erheblich verkürzen. Der Einfluss der Diffusion von Leerstellen und Phasonen war weiterhin mehrere Größenordnungen kleiner als durch die viskose Reibung von η .

4.2.2 Skalierung der Gleichungen

Bei der numerischen Behandlung der Gleichungen (4.7a)-(4.7d) führten die um mehrere Größenordnungen unterschiedlichen Zeitskalen der Propagation sowie der verschiedenen

²Siehe Anhang C.

diffusiven Moden dazu, dass numerische Rundungsfehler die physikalischen Effekte übertrafen. Deshalb wurden die hydrodynamischen Variablen skaliert:

$$\begin{aligned} t &\rightarrow \tilde{t}t', & z &\rightarrow \tilde{z}z', \\ \rho(z, t) &\rightarrow \tilde{\rho}\rho'(z, t), & g &\rightarrow \tilde{g}g'(z, t), & u &\rightarrow \tilde{u}u'(z, t), & w &\rightarrow \tilde{w}w'(z, t), \end{aligned} \quad (4.17)$$

mit den Skalierungsfaktoren \tilde{t} , \tilde{z} , $\tilde{\rho}$, \tilde{g} , \tilde{u} , \tilde{w} . Der Skalierungsfaktor für die Dichte wird als Mittelwert der Dichte ρ_0 angenommen:

$$\tilde{\rho} := \rho_0. \quad (4.18)$$

Für die Impulsdichte g wird folgende Annahme getroffen:

$$\tilde{g} := \tilde{\rho} \frac{\tilde{z}}{\tilde{t}}. \quad (4.19)$$

Damit ergeben sich die skalierten Gleichungen zu:

$$\partial_{t'} \delta \rho' = -\nabla' g', \quad (4.20a)$$

$$\partial_{t'} g' = \eta \frac{\tilde{t}}{\tilde{z}^2} \nabla'^2 g' - \frac{A - B}{\rho_0} \frac{\tilde{t}^2}{\tilde{z}^2} \nabla' \delta \rho' + \frac{(\lambda + 2\mu - B) \tilde{u}}{\rho_0} \frac{\tilde{t}^2}{\tilde{z}} \nabla'^2 u' + \frac{K_3 \tilde{w}}{\rho_0} \frac{\tilde{t}^2}{\tilde{z}^2} \nabla'^2 w', \quad (4.20b)$$

$$\partial_{t'} u' = \frac{\tilde{z}}{\tilde{u}} g' + \Gamma_u B \frac{\tilde{t}}{\tilde{u} \tilde{z}} \nabla' \delta \rho' + \frac{(\lambda + 2\mu) \tilde{t}}{\tilde{z}^2} \nabla'^2 u' + \Gamma_u K_3 \frac{\tilde{w}}{\tilde{u}} \frac{\tilde{t}}{\tilde{z}^2} \nabla'^2 w', \quad (4.20c)$$

$$\partial_{t'} w' = \frac{\tilde{t}}{\tilde{z}^2} \nabla'^2 w' + \Gamma_w K_3 \frac{\tilde{u}}{\tilde{w}} \frac{\tilde{t}}{\tilde{z}^2} \nabla'^2 u'. \quad (4.20d)$$

Der in (4.20b) unterstrichene Term ist gleich der inversen REYNOLDSZahl, die anderen unterstrichenen Terme sind äquivalente Ausdrücke für die phononische und phasonische Verschiebung. Diese Terme dominieren den jeweiligen diffusiven Anteil der Dispersionsrelation. Nimmt man an, dass die Schallgeschwindigkeit c das Verhältnis von den Skalenfaktoren der Länge und der Zeit wiedergibt:

$$\frac{\tilde{z}}{\tilde{t}} := c, \quad (4.21)$$

so erhält man für die Dispersionsrelation, dass diese nicht von den Skalenfaktoren \tilde{u} und \tilde{w} abhängig ist. Es lässt sich nur noch durch einen freien Parameter \tilde{z} (oder \tilde{t}) das Größenverhältnis der diffusiven Moden zu dem propagierenden Teil bestimmen. Die Verhältnisse der diffusiven Moden lassen sich nicht skalieren.

Nachdem die skalierte Schallgeschwindigkeit auf Eins gesetzt wurde, kann man dies auch noch für die effektive Diffusionskonstante D der propagierenden Mode tun. Diese ist im Wesentlichen durch die kinematische Viskosität η gegeben:

$$\frac{D \tilde{t}}{\tilde{z}^2} \stackrel{!}{=} 1 \quad \Rightarrow \quad \tilde{t} = \frac{D}{c^2}. \quad (4.22)$$

Da die Skalierungsfaktoren der Verschiebungen \tilde{u} , \tilde{w} keinen Einfluss auf die Dispersionsrelation haben, wurden sie gleichgesetzt. Als Wert wurde ein Hundertstel Ångström angenommen, also etwa zwei Größenordnungen kleiner als typische Atomabstände:

$$\tilde{u} = \tilde{w} = 10^{-2} \text{Å}. \quad (4.23)$$

4.2.3 Finite Differenzen

Das skalierte partielle Differenzialgleichungssystem³ (4.20) wurde numerisch mit der Methode der finiten Differenzen integriert (siehe dazu Press et al. [48], Fletcher [49]). Der eindimensionale Stab der Länge L wurde dazu in ein äquidistantes Gitter mit Abstand dz diskretisiert. Für den Funktionswert gilt $f(z_i) = f_i$. Die ersten und zweiten Ortsableitungen wurden mit zentralen Differenzen approximiert:

$$\nabla f = \partial_z f \Rightarrow \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2dz}, \quad (4.24)$$

$$\nabla^2 f = \partial_z^2 f \Rightarrow \frac{f_{i+1} + f_{i-1} - 2f_i}{dz^2}. \quad (4.25)$$

Die Diskretisierung der Zeitableitungen erfolgte nach EULER. Dabei wurde ein explizites Zwei-Schritt-Schema verwendet. Explizit heißt dabei, dass alle neuen Werte mit Hilfe von schon bekannten Werten berechnet werden. In dem ersten (Halb-)Schritt wurden die Werte der hydrodynamischen Variablen $f_i(t + dt/2)$ als Funktion der Werte $f_i(t)$ berechnet. Im zweiten Schritt wurde ausgehend vom Wert $f_i(t)$ der neue Wert $f_i(t + dt)$ mit den Änderungen zur Zeit $t + dt/2$ berechnet. Mit $RHS(t)$ seien die rechten Seiten zum Zeitpunkt t von (4.20) bezeichnet. Diese sind abhängig von den jeweils vorkommenden hydrodynamischen Variablen:

$$\text{Zwischenschritt} \quad f_i(t + dt/2) = f_i(t) + \frac{dt}{2} \cdot RHS(t), \quad (4.26)$$

$$\text{Hauptschritt} \quad f_i(t + dt) = f_i(t) + dt \cdot RHS(t + dt/2). \quad (4.27)$$

Es ist offensichtlich, dass die Diskretisierung Einfluss auf die Genauigkeit und Stabilität des Lösungsalgorithmus hat. Insbesondere gilt dies für die Zeit- und Ortsschritte dt und dz . Die Stabilitätsanalyse nach VON NEUMANN liefert Bedingungen an das Verhältnis dieser beiden Schrittweiten. Bei einer einzelnen partiellen Differenzialgleichung sind dies (mit c Ausbreitungsgeschwindigkeit, D Diffusionskoeffizient):

$$\text{Propagation :} \quad \frac{c dt}{dz} \leq 1, \quad \text{COURANT Kriterium}, \quad (4.28)$$

$$\text{Diffusion :} \quad \frac{2D dt}{dz^2} \leq 1. \quad (4.29)$$

Für eine partielle Differenzialgleichung einer propagierenden Welle mit diffusiver Dämpfung gilt:

$$0 \leq \left(\frac{c}{dz/dt} \right) \leq \left(\frac{2D}{dz^2/dt} \right) \leq 1. \quad (4.30)$$

³In der Mathematik wird dieses System als parabolisch-hyperbolisch bezeichnet. Die Einteilung muss strenggenommen für jedes Paar (z, t) getroffen werden. Physikalisch beschreiben solche partiellen Differenzialgleichungen z.B. Wellenausbreitung und Diffusion. Sie sind typische Anfangswert- oder Randanfangswertprobleme. Elliptische partielle Differenzialgleichungen sind reine Randwertprobleme und werden meistens mit Relaxationsmethoden gelöst. Als Beispiel sei die LAPLACEgleichung aus der Elektrostatik genannt.

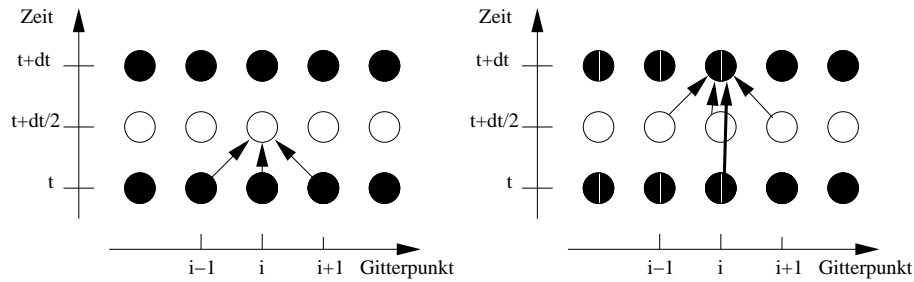


Abbildung 4.1: Graphische Veranschaulichung der Diskretisierung. Links ist der Zwischenschritt dargestellt, rechts der Hauptschritt. Die Kreise symbolisieren die Funktionswerte an den Gitterpunkten zu verschiedenen Zeiten.

Die VON NEUMANNsche Stabilitätsanalyse ergibt für das System (4.20) keine aussagekräftigen Bedingungen. Deshalb wurde zunächst die Bedingung (4.30) zur Orientierung genutzt. Wie sich dann herausgestellt hat, ist diese Bedingung zu einschränkend. Die Stabilität des Algorithmus wurde durch Vergleich mit bekannten Lösungen verifiziert.

4.2.4 Test des Algorithmus

Durch die Dispersionsrelation ist das charakteristische Verhalten des Gleichungssystems (4.20) bestimmt. Dies sind zwei propagierende Moden mit diffusiver Dämpfung, sowie zwei rein diffusive Moden. Die Lösungen für diese beiden Fälle sind in Spezialfällen bekannt.

Diffusive Moden

Die rein diffusiven Moden (Dispersionsrelation $\omega = -iDq^2$, Gleichung für Dichteänderung und Phasonen) wurden durch die Verbreiterung einer GAUSSschen Glocke getestet. Als Anfangsbedingung wurde eine Glockenfunktion der Breite B vorgegeben:

$$f(z, t = 0) = f_0 \exp\left(-\frac{(z - z_0)^2}{B^2}\right). \quad (4.31)$$

Diese verbreitert sich mit der Zeit gemäß:

$$f(z, t) = f_0 \sqrt{\frac{B^2}{4Dt + B^2}} \exp\left(-\frac{(z - z_0)^2}{4Dt + B^2}\right). \quad (4.32)$$

Das Verhalten der diffusiven Moden konnte damit am Abfallen der Amplitude sowie der Verbreiterung der Glockenform überprüft werden.

Propagierende Moden

Für die propagierenden Moden (Impulsdichte und phasonische Verschiebung) lautet die Dispersionsrelation $\omega = cq - iDq^2$. Regt man solch eine Mode an einem Rand periodisch an $f(z = 0, t) = f_0 \sin(\omega_0 t)$ so bildet sich eine mit der Geschwindigkeit c sich ausbreitende Welle aus, deren Amplitude exponentiell mit $f(z) = f_0 \exp(-z/l_0)$ abnimmt. Die charakteristische Abklinglänge l_0 ist eine Funktion der Diffusionskonstante, der Schallgeschwindigkeit, sowie der Anregungsfrequenz:

$$l_0 := \frac{c^3}{D\omega_0^2}. \quad (4.33)$$

Als Prüfkriterien für die propagierende Mode eignet sich daher die Ausbreitungsgeschwindigkeit c , sowie die Abklinglänge l_0 .

Die beiden Lösungen sind nur gültig, solange der Einfluss des Randes keine Rolle spielt. Die GAUSSglocken werden deshalb in die Mitte des Stabs gesetzt, und die Abklinglänge wird vor der ersten Reflexion bestimmt.

4.3 Physikalische Beispiele

Anhand einiger physikalischer Beispiele soll das Verhalten der hydrodynamischen Variablen bei verschiedenen Rand- und Anfangswerten veranschaulicht werden. Im ersten Beispiel wird anhand einer Impulsanregung das Verhalten des phasonischen Freiheitsgrades beschrieben. Das phasonische Antwortverhalten ist durch eine gedämpfte Welle gegeben. Im zweiten Beispiel wird explizit der phasonische Freiheitsgrad betrachtet. Aus der phasonischen Verschiebung wird eine lokale Flipwahrscheinlichkeit für die Atome berechnet. Das dritte Beispiel modelliert einen Quasikristall nach dem Durchgang einer Versetzung. Dabei wird die Verbreiterung einer so genannten Phasonenwand beobachtet. Im letzten Beispiel werden Versuche zur mechanischen Spektroskopie simuliert. Das Antwortverhalten auf das Eindringen des Quasikristalls motiviert die Beschreibung des Materialverhaltens durch Anelastizität. Darauf wird dann im folgenden Kapitel 5 in Form von Materialgleichungen eingegangen. Die Auftragung in den Diagrammen erfolgt jeweils in dimensionslosen, skalierten Einheiten.

4.3.1 Impulsanregung

Als Erstes wird die Antwort des Systems auf einen Schlag (deltaförmige Krafteinwirkung) untersucht (siehe Abb. 4.2). Dazu wird als Anfangsbedingung für die Impulsdichte ein schmaler Puls am linken Rand vorgegeben. Alle Randwerte werden auf Null gesetzt und fixiert. Durch die Elastizität schwingt das System zurück, dem positiven Peak der Impulsdichte folgt unmittelbar ein negativer. Die Dichte reagiert mit einer Massenverdichtung

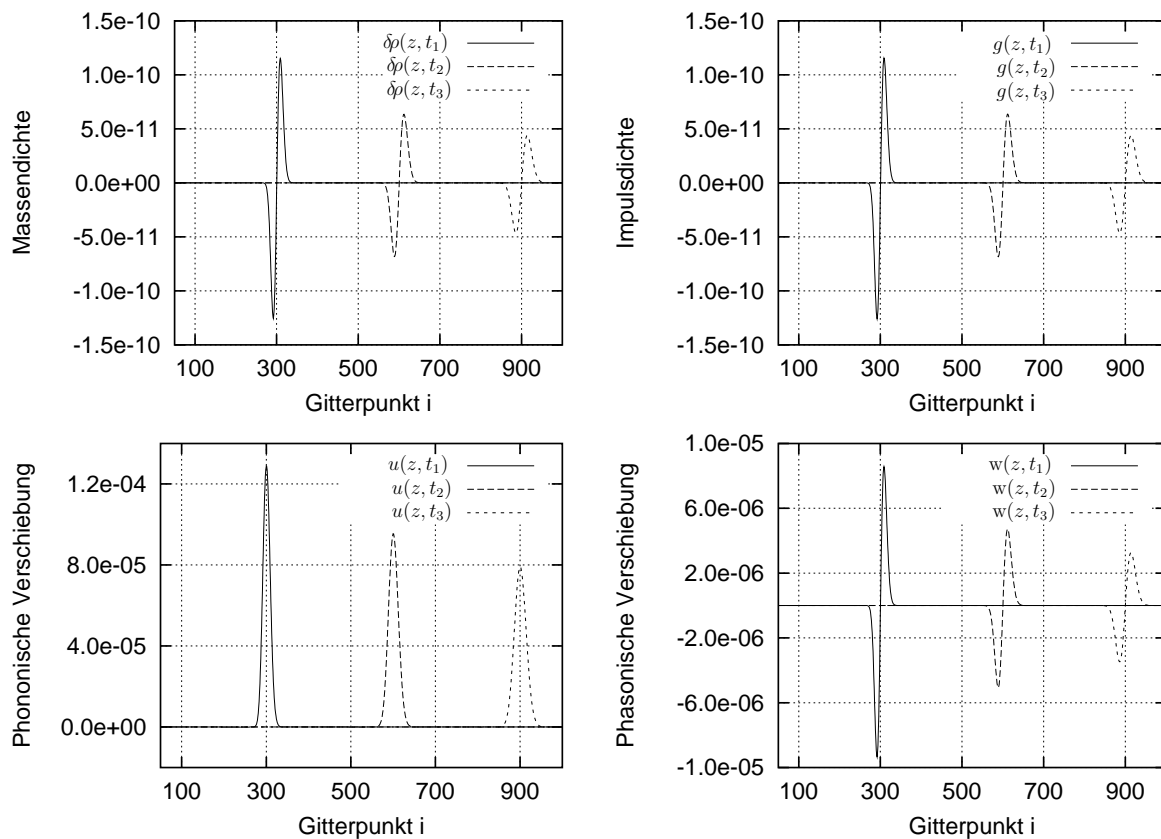


Abbildung 4.2: Impulskick: Die Anregung erfolgt durch einen Impulsstoß.

gefolgt von einer Verdünnung. Die phononische Verschiebung antwortet mit einem positiven Peak, der zum anderen Rand wandert und dabei sich verbreitert und an Amplitude abnimmt. Durch die Phasonen-Phononen Kopplung wird auch die phasonische Mode angeregt. Die phasonische Verschiebung folgt dabei den Phononen. An den festgehaltenen Rändern werden die hydrodynamischen Variablen reflektiert. Die Amplitude der phasonischen Verschiebung wechselt das Vorzeichen und die Störung propagiert in die andere Richtung. Durch die Dämpfung des Systems werden die Amplituden der Auslenkungen mit der Zeit vermindert. Die phononischen Störungen induzieren also durch die Kopplung phasonische Verschiebungen.

4.3.2 Phasonische Flipwahrscheinlichkeit

Beim Test des Algorithmus wurde ein Ende fest eingespannt und am anderen Ende die phononische Verschiebung $u(z = 0, t) = u_0 \sin(\omega_0 t)$ periodisch moduliert. Durch die Kopplung

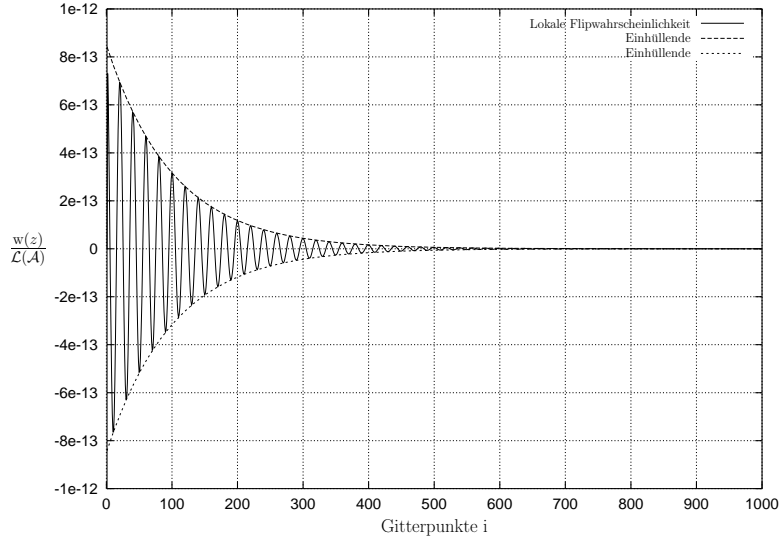


Abbildung 4.3: Veranschaulichung der „lokale Flipwahrscheinlichkeit“, diese wird durch die obere Einhüllende dargestellt.

der hydrodynamischen Gleichungen konnte man auch bei der Dichteänderung $\delta\rho$, der Impulsdichte g und der phasonischen Verschiebung w periodische Oszillationen beobachten. Aus der Größe der phasonischen Verschiebung lässt sich eine lokale Flipwahrscheinlichkeit abschätzen. Dazu bildet man das Verhältnis von phasonischer Verschiebung zu einer typischen Länge \mathcal{L} des Akzeptanzbereichs \mathcal{A} . Für den ikosaedrischen Quasikristall ist die Hypergitterkonstante $\mathcal{L}(\mathcal{A}) = 6,4 \text{ \AA}$ (Klein [50]) dafür geeignet:

$$\text{Flipwahrscheinlichkeit} = \left| \frac{w(z, t)}{\mathcal{L}(\mathcal{A})} \right|. \quad (4.34)$$

In Abb. 4.3 ist nicht die Flipwahrscheinlichkeit aufgetragen, sondern $\frac{w(z, t)}{\mathcal{L}(\mathcal{A})}$. Die Flipwahrscheinlichkeit erhält man durch Betragsbildung. Die Anregung der Phasonen erfolgte mit einer Amplitude von 10^{-2} \AA und einer Frequenz von $\omega_0 = 2,4 \cdot 10^{10} \frac{1}{s}$. Die Einhüllende folgt einem exponentiellen Abfall mit der Abklinglänge l_0 . Dies ist verständlich, da die phasonische Verschiebung von den Phononen verursacht wird und die phasonische Diffusion auf einer viel langsameren Zeitskala stattfindet. Die maximale Flipwahrscheinlichkeit beträgt $8 \cdot 10^{-13}$ am Rand an dem die Phononen angeregt werden, und fällt dann exponentiell ab.

4.3.3 Phasonenwand

Als nächstes Beispiel wird das zeitliche Verhalten einer so genannten Phasonenwand untersucht (Abb.4.4). Nach dem Durchgang einer Versetzung durch einen Quasikristall bleibt

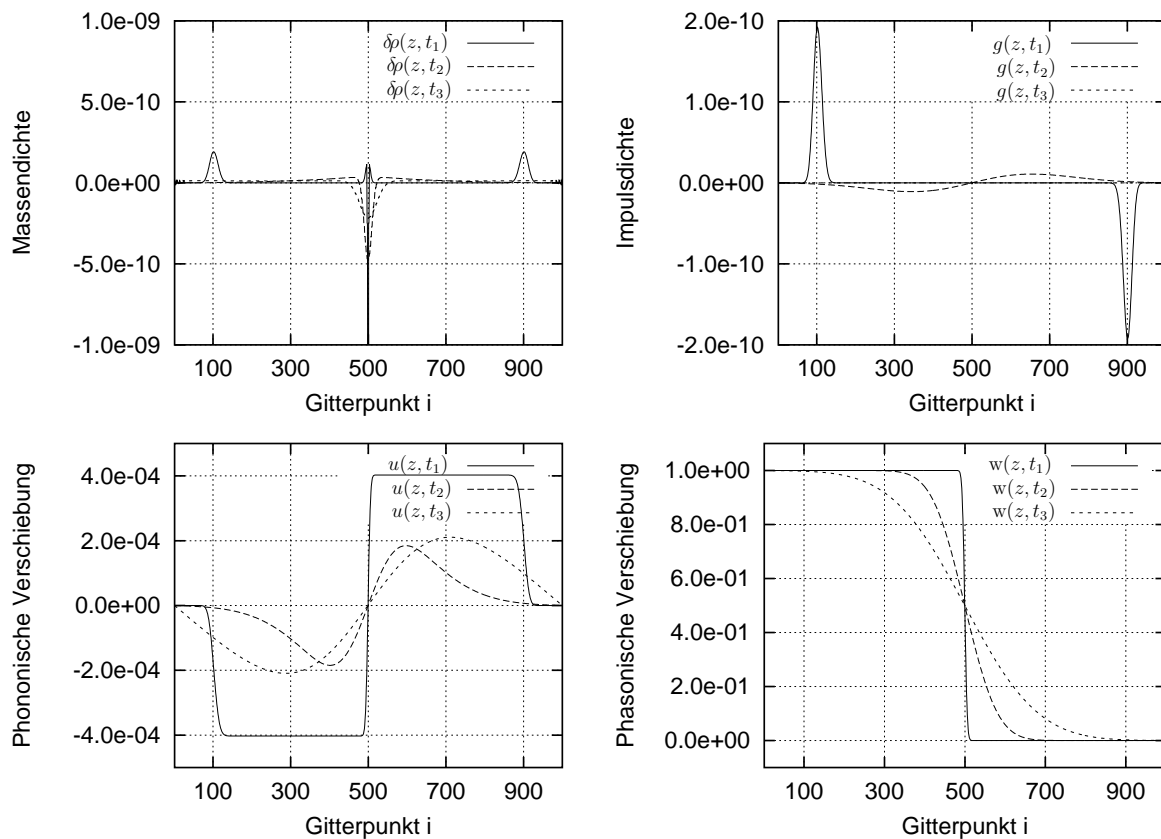


Abbildung 4.4: Zeitliches Verhalten mit Phasonenwand als Anfangsbedingung.

ein phasonischer Defekt zurück, der Phasonenwand genannt wird. Gezeigt wurde dieses Verhalten für ikosaedrischen Quasikristall in einer Molekulardynamik-Simulation von Dilger et al. [51] sowie experimentell mit einer Transmissions Elektronen Mikroskop (TEM) Aufnahme von Wang et al. [52]. Die Phasonenwand wird durch eine Stufenfunktion $w(z, t = 0) = w_0(1 - \Theta(z - z_0))$ der phasonischen Verschiebung als Anfangsbedingung realisiert. Die anderen Variablen werden auf Null gesetzt. Die einzige von Null verschiedene Anfangsbedingung ist der linke Rand der phasonischen Verschiebung, die auf den Wert w_0 gesetzt wird. Die stationäre Lösung für diesen Fall ist eine abfallende Gerade für die phasonische Verschiebung vom Wert w_0 am linken Rand auf Null am rechten. Die stationären Lösungen der anderen Variablen sind identisch Null. Betrachtet man die Variablen beim ersten Zeitschritt t_1 so ist die phasonische Verschiebung noch nahezu in der Ausgangskonfiguration. Bei der Dichteänderung und der Impulsdichte kann man zwei Verdichtungswellen beobachten, die nach der Reflexion an den Rändern wieder zur Mitte wandern. An der Stelle, an der die Stufenfunktion der Phasonen den Sprung macht, ist bei der Dichteänderung eine Verdünnung zu beobachten. Bei der phasonischen Verschiebung kann man erkennen,

wie sich die Verschiebung ausbreitet. Die phasonische Verschiebung bleibt auf einem konstanten Wert, da kein Impuls zum Zurückstellen vorhanden ist. Dies erfolgt erst nach der Reflexion an den Rändern. Durch die Reibung nehmen die Amplituden ab, und die Peaks verbreitern sich. Die hydrodynamischen Variablen gehen langsam in die stationären Lösungen über. Für eine „ansteigende“ Stufenfunktion als Anfangsbedingung der phasonischen Verschiebung erhält man eine Verdichtung bei der Massendichte und sich ausbreitende Verdünnungswellen.

4.3.4 Eindrücken des Festkörpers, phasonische Verschiebung

Als abschließendes Beispiel soll das Eindrücken des Stabs untersucht werden. Dazu wird eine konstante phasonische Verschiebung u_0 am linken Rand vorgegeben. Die physikalischen Experimente, die durch diese Rand- Anfangswertbedingung simuliert werden sollen, sind die Versuche zur mechanischen Spektroskopie von z.B. Weller et al. [53].

Aus der Forderung der elastischen Spannungsfreiheit kann man eine Bedingung für die phasonische Verschiebung ableiten:

$$\sigma_{ij}^u = \frac{\partial f_{el.}}{\partial \varepsilon_{ij}} \stackrel{!}{=} 0, \quad (4.35)$$

$$w(z=0) = \frac{K_3}{\lambda + 2\mu + A - 2B} u_0. \quad (4.36)$$

In der numerischen Simulation wurde von dem üblichen Parametersatz für die Konstanten abgewichen, um den Einfluss der Phasonen zu betonen (Verhältnis von K_3 zu phasonenelastischen Konstanten). Vom linken Rand breiten sich Peaks aus, die sich verbreitern und deren Amplitude abnimmt. Auch die phasonische Verschiebung wird durch die Kopplung angeregt. Da die Dynamik der Phasonen viel langsamer erfolgt als die der anderen Prozesse, geht das System fast in die stationäre Lösung für die Phononen über, während die Phasonen noch das Verhalten der Phasonenwand zeigen. In Abb. 4.5 wurde dieses Verhalten genauer untersucht. Als Anfangsbedingung wurde für die phasonische Verschiebung die stationäre Lösung (Gerade von u_0 auf Null) gewählt. Die unrelaxierten Phasonen sorgen für eine Abweichung der phasonischen Verschiebung von der stationären Lösung. Im Diagramm der Impulsdichte kann man erkennen wie sich eine Störung langsam ausbreitet. Um den zugehörigen Effekt bei der Dichteänderung darzustellen, wurde diese nicht vom linken Rand aus abgebildet, sondern ein Stück eingerückt. Das System ist solange gestört, bis auch die phasonische Verschiebung in die stationäre Lösung übergeht.

Diese Antwort des Quasikristalls auf eine mechanische Beanspruchung wirft die Frage auf, wie man das Verhalten in Form eines Materialgesetzes beschreiben kann. Im nächsten Kapitel wird auf diese Thematik eingegangen, die zu einem „zeitabhängigem“ Hooke'schem Gesetz führt.

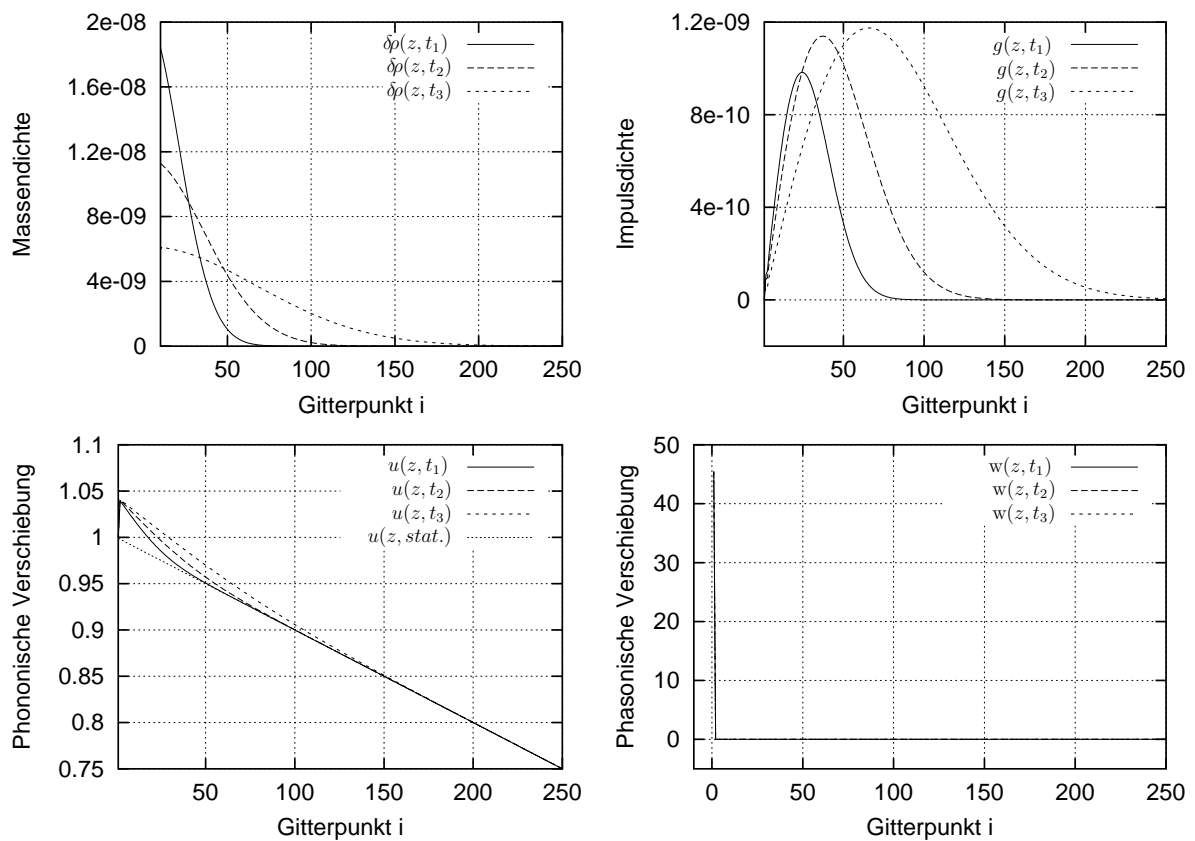


Abbildung 4.5: Einfluss der Phasonenrelaxation auf ein halbrelaxiertes System. Dargestellt ist nur das erste Viertel des Stabs. Wegen der Darstellbarkeit des Sprungs der phasonischen Verschiebung wurden noch zusätzliche Gitterpunkte hinzugenommen.

Kapitel 5

Anelastizität

Im letzten Kapitel haben wir gesehen, dass die Relaxation der Phasonen viel langsamer erfolgt als die der Phononen. Auch die Leerstellendiffusion ist ein lang andauernder Relaxationsprozess. Während die Phononen sich schon in einem Gleichgewichtszustand befinden, werden sie durch die noch nicht vollständig relaxierten Phasonen gestört. Betrachtet man nur die Leerstellen- und Phasonendiffusion, so kann man beiden jeweils eine Relaxationszeit und ein relaxiertes elastisches Modul zuordnen. Dieses Materialverhalten kann man durch einen Spezialfall der Viskoelastizität, die Anelastizität, beschreiben. Der Begriff Anelastizität wird im nächsten Abschnitt definiert, hier sei noch auf die Abgrenzung zur Inelastizität hingewiesen. Die **Inelastizität** beschreibt **nicht elastisches** Verhalten, also die gesamte Plasto- und Kriechmechanik. In diesem Kapitel werden aus den hydrodynamischen Gleichungen die Materialgesetze der Anelastizität abgeleitet.

5.1 Anelastisches Materialverhalten

Nach Nowick und Berry [54] wird Anelastizität folgendermaßen definiert:

- (i) Für jede Spannung gibt es im Gleichgewicht einen eindeutigen Wert der Verzerrung und umgekehrt.
- (ii) Der Gleichgewichtszustand wird erst nach dem Verstreichen einer gewissen Zeit erreicht.
- (iii) Die Beziehung zwischen Spannung und Verzerrung ist linear. Dabei wird Linearität in dem Sinne verstanden, dass für die Summe der Spannungen $\sigma(t) = \sigma_1(t) + \sigma_2(t)$, die jeweils eine Verzerrung $\varepsilon_1(t)$ und $\varepsilon_2(t)$ verursachen, die Gesamtverzerrung $\varepsilon(t) = \varepsilon_1(t) + \varepsilon_2(t)$ folgt.

Das Materialverhalten kann durch mechanische Modelle beschrieben werden (Abb. 5.1). Die Elastizität wird durch eine HOOKESche Feder symbolisiert, die Viskosität durch ein NEWTONSches Dämpfungsglied. Im Eindimensionalen lautet das HOOKESche Gesetz:

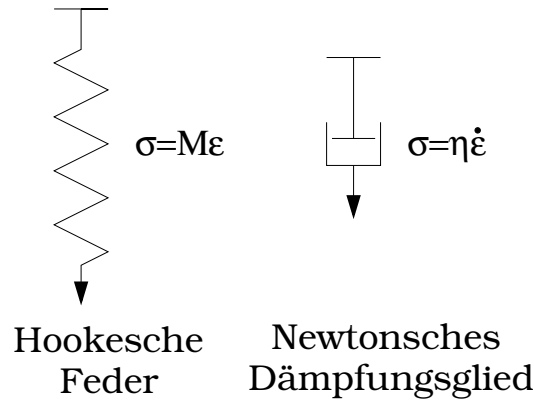


Abbildung 5.1: Mechanische Modelle für Elastizität (links) und Viskosität (rechts).

$$\sigma = M\varepsilon, \quad (5.1)$$

und die Gleichung für die Viskosität:

$$\sigma = \eta \partial_t \varepsilon = \tau M \partial_t \varepsilon, \quad (5.2)$$

mit dem Elastizitätsmodul M , der Zähigkeit η und der Zeitkonstanten τ .

Die mechanischen Modelle können kombiniert werden, um ein möglichst realistisches Modell für einen Festkörper zu beschreiben. Dabei unterscheidet man zwischen Parallel- und Reihenschaltung. Bei Reihenschaltung zweier Elemente sind die Spannungen gleich, während die Verzerrungen additiv sind:

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + \varepsilon_2, \quad \sigma = \sigma_1 = \sigma_2. \quad (5.3)$$

Bei Parallelschaltung dagegen sind die Verzerrungen gleich, und die Spannungen additiv:

$$\varepsilon = \varepsilon_1 = \varepsilon_2, \quad \sigma = \sigma_1 + \sigma_2. \quad (5.4)$$

Im einfachsten Modell reagiert ein Festkörper auf eine vorgegebene Verzerrung instantan mit dem Elastizitätsmodul M_U (Index U für unrelaxiert), um dann, mit einer Relaxationszeit τ , auf einen relaxierten Elastizitätsmodul M_R abzusinken (siehe Abb.5.2).

Ein solches einfaches Festkörpermodell wird durch den Standardkörper nach ZENER [55] beschrieben (siehe Abb.5.3).

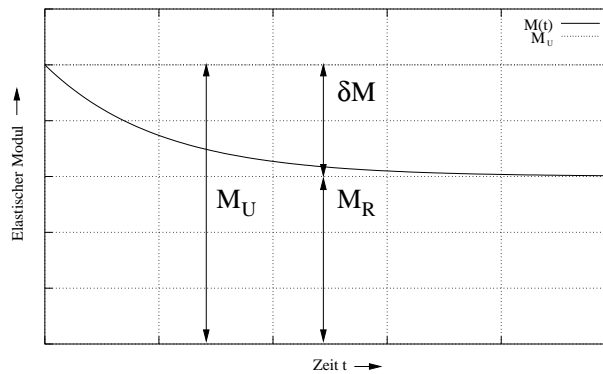


Abbildung 5.2: Antwortverhalten eines einfachen Festkörpers.

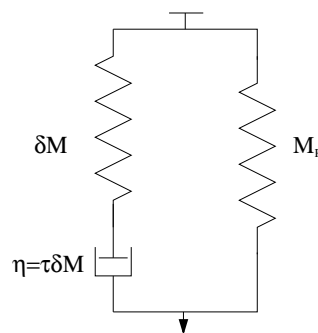


Abbildung 5.3: Einfaches Modell für das Antwortverhalten eines Festkörpers nach ZENER.

Als Materialgesetz ergibt sich eine Differenzialgleichung in der Zeit für die Spannung und Verzerrung:

$$\partial_t \sigma + \frac{\sigma}{\tau} = M_U \partial_t \varepsilon + M_R \frac{\varepsilon}{\tau}. \quad (5.5)$$

Die Lösung von (5.5) für eine zum Zeitpunkt $t = 0$ vorgegebene konstante Verzerrung ε_0 ist:

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \varepsilon_0, \quad \partial_t \varepsilon = 0; \quad t \geq 0, \\ \sigma &= M_U \varepsilon_0 \quad \text{für } t = 0, \end{aligned} \quad (5.6)$$

$$M(t) = \frac{\sigma(t)}{\varepsilon_0} = M_R + \underbrace{(M_U - M_R)}_{\delta M} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) = M_R + \delta M \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right). \quad (5.7)$$

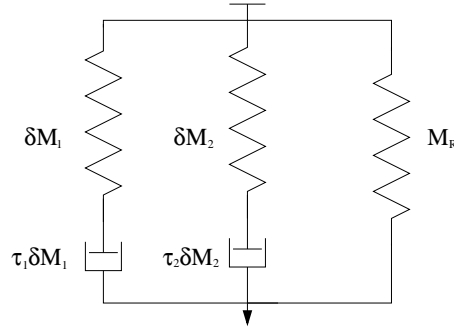


Abbildung 5.4: Fünfparametrisches Relaxationsmodell für zwei Relaxationszeiten

Ein weiteres Modell sei durch zwei verschiedene Relaxationsmechanismen beschrieben (siehe Abb.5.4):

$$\partial_t^2 \sigma + \left(\frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} \right) \partial_t \sigma + \frac{1}{\tau_1 \tau_2} \sigma = M_U \partial_t^2 \varepsilon + \left(\frac{\delta M_1}{\tau_2} + \frac{\delta M_2}{\tau_1} + \left(\frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} \right) M_R \right) \partial_t \varepsilon + \frac{M_R}{\tau_1 \tau_2} \varepsilon, \quad (5.8)$$

$$M_U - M_R = \delta M_1 + \delta M_2. \quad (5.9)$$

Mit der Relaxationsfunktion als Lösung zu dem Anfangswertproblem (5.6):

$$M(t) = M_R + \sum_i (\delta M_i) \exp\left(-\frac{t}{\tau_i}\right). \quad (5.10)$$

Mehrere Relaxationsmechanismen lassen sich durch weitere Parallelschaltung von Feder und Dämpfungsglied in einer Reihe erreichen. Für n Relaxationsmechanismen erhält man folgendes Materialgesetz:

$$a_0 \sigma + a_1 \partial_t \sigma + \dots + a_n \partial_t^n \sigma = b_0 \varepsilon + b_1 \partial_t \varepsilon + \dots + b_n \partial_t^n \varepsilon. \quad (5.11)$$

5.2 Anelastizität aus Hydrodynamischen Gleichungen

Nachdem im vorherigen Abschnitt der Begriff Anelastizität eingeführt und erklärt wurde, erfolgt in diesem und den nächsten Abschnitten die Ableitung der anelastischen Materialgleichungen aus den hydrodynamischen Gleichungen. Insbesondere werden die Relaxationszeiten und elastischen Moduln identifiziert. Ziel ist es, die hydrodynamischen Variablen der Dichteänderung $\delta\rho$ und der phasonische Verschiebung w zu eliminieren und durch Zeitableitungen vom Spannungs- und Verzerrungstensor auszudrücken.

Ausgangspunkt für die weiteren Betrachtungen ist die Identifikation des Spannungstensors in der Gleichung für die zeitliche Änderung der Impulsdichte (4.7b):

$$\partial_t g \stackrel{!}{=} \nabla \sigma. \quad (5.12)$$

Der Verzerrungstensor ist im Eindimensionalen durch $\varepsilon = \nabla u$ gegeben.

Als ersten Fall soll die reine Viskosität η betrachtet werden. Die anderen kinetischen Koeffizienten werden gleich Null gesetzt $\Gamma_u \stackrel{!}{=} 0 \stackrel{!}{=} \Gamma_w$:

$$\partial_t \delta \rho = -\nabla g, \quad (5.13a)$$

$$\begin{aligned} \partial_t g &= \eta \nabla^2 g + (\lambda + 2\mu - B) \nabla^2 u + K_3 \nabla^2 w - (A - B) \frac{\nabla \delta \rho}{\rho_0} \\ &\stackrel{(5.12)}{=} \nabla \sigma = \nabla \left(\eta \nabla g + (\lambda + 2\mu - B) \nabla u + K_3 \nabla w - (A - B) \frac{\delta \rho}{\rho_0} \right), \end{aligned} \quad (5.13b)$$

$$\partial_t u = \frac{g}{\rho_0}, \quad (5.13c)$$

$$\partial_t w = 0. \quad (5.13d)$$

Bildet man die Zeitableitung von dem durch (5.13b) definierten Spannungstensor und eliminiert die Dichteänderung, so erhält man:

$$\partial_t \sigma = (\lambda + 2\mu + A - 2B) \partial_t \varepsilon + \rho_0 \eta \partial_t^2 \varepsilon. \quad (5.14)$$

Die Viskosität führt also nicht zu Anelastizität, vielmehr zu einer allgemeineren viskoelastischen Gleichung. Dies ist auch nicht weiter verwunderlich, da das NEWTONsche Dämpfungsglied mit η die reine Viskosität beschreibt. Im folgenden wird daher die Viskosität η stets vernachlässigt.

5.2.1 Anelastizität aufgrund von Leerstellendiffusion

In diesem Abschnitt soll als einziger Relaxationsmechanismus die Leerstellendiffusion betrachtet werden. Die phasonischen Konstanten werden deshalb vernachlässigt. Auch ist es vorteilhaft die Umformungen im FOURIERraum vorzunehmen. Dort lautet die anelastische Gleichung (5.5):

$$\sigma + i \frac{\sigma}{\omega \tau} = i \frac{M_R \varepsilon}{\omega \tau} + M_U \varepsilon. \quad (5.15)$$

Mit der gleichen Vorgehensweise wie bei der reinen Viskosität erhält man für die Leerstellendiffusion:

$$\sigma + i \Gamma_u B q^2 \frac{\sigma}{\omega} = (\lambda + 2\mu + A - 2B) \varepsilon + i \Gamma_u B q^2 \left((\lambda + 2\mu) \frac{A}{B} - B \right) \frac{\varepsilon}{\omega}. \quad (5.16)$$

Die Relaxationszeit und die elastischen Modulen lassen sich durch Koeffizientenvergleich bestimmen:

$$M_U = (\lambda + 2\mu + A - 2B), \quad (5.17)$$

$$M_R = (\lambda + 2\mu)\frac{A}{B} - B, \quad (5.18)$$

$$\delta M_u = (\lambda + 2\mu) \left(1 - \frac{A}{B}\right) + A - B, \quad (5.19)$$

$$\tau_u^{-1} = \Gamma_u B q^2. \quad (5.20)$$

Die Relaxationszeit τ ist abhängig vom Wellenvektor, d.h. von der Probengeometrie. Auch hängt sie von der Kopplungskonstante B ab, also von der Stärke der Kopplung der Dichteänderung an die Gitterbewegung. Die elastische Konstante B tritt in der Relaxationszeit für die Leerstellendiffusion auf, da der kinetische Koeffizient Γ_u für die Leerstellendiffusion verantwortlich ist. Führt man einen kinetischen Koeffizienten Γ_ρ in (4.7a) für die Dichteänderung ein, so erhält man für die Parameter $\tau_\rho^{-1} = \frac{\Gamma_\rho A}{\rho_0^2}$, $M_U = \lambda + 2\mu + A - 2B$ und $M_R = \lambda + 2\mu - \frac{B^2}{A}$. Die Relaxationszeit hängt also von der Konstanten A der Dichteänderung ab. Durch Einführen des kinetischen Koeffizienten Γ_ρ erhält man allerdings eine Dispersionsrelation mit einem konstanten Term. Die Gleichungen beschreiben damit keine Hydrodynamik.

5.2.2 Anelastizität aufgrund der Phasonendiffusion

Dieselbe Betrachtung wird für den Fall mit der Phasonendiffusion als einzigem Relaxationsmechanismus wiederholt. Dort ergeben sich für die Konstanten:

$$M_U = (\lambda + 2\mu + A - 2B), \quad (5.21)$$

$$M_R = \lambda + 2\mu + A - 2B - \frac{K_3^2}{K_{12}}, \quad (5.22)$$

$$\delta M_w = \frac{K_3^2}{K_{12}}, \quad (5.23)$$

$$\tau_w^{-1} = \Gamma_w K_{12} q^2. \quad (5.24)$$

Die Relaxationszeit hängt nur von der rein phasonenelastischen Konstanten K_{12} ab. Sie ist wiederum abhängig von der Probengeometrie. Wie bei der Leerstellendiffusion ist auch hier der unrelaxierte Modul gleich den elastischen Konstanten aus der longitudinalen Schallgeschwindigkeit. Der Unterschied zwischen den unrelaxierten und relaxierten Moduln ist gleich dem Verhältnis des Quadrats der Kopplungskonstanten zur rein phasonenelastischen Konstanten.

5.2.3 Viskoelastizität durch Leerstellen- und Phasonendiffusion

Nachdem Gleichungen der Anelastizität für die Leerstellen- und Phasonendiffusion als jeweils einzige Relaxationsmechanismen aus den hydrodynamischen Gleichungen abgeleitet werden konnte, soll hier eine viskoelastische Gleichung für beide Relaxationsmechanismen bestimmt werden. Im FOURIERraum erhält man:

$$\begin{aligned}
& -i\omega^2\sigma + \omega (\Gamma_w K_{12}q^2 + \Gamma_u Bq^2) \sigma + i(\Gamma_u Bq^2)(\Gamma_w K_{12}q^2)\sigma \\
& = -i\omega^2(\lambda + 2\mu + A - 2B)\varepsilon \\
& + \omega \left[\left(\lambda + 2\mu + A - 2B - \frac{K_3^2}{K_{12}} \right) \Gamma_w K_{12}q^2 + \left((\lambda + 2\mu) \frac{A}{B} - B \right) \Gamma_u Bq^2 \right] \varepsilon \\
& + i(\Gamma_u Bq^2)(\Gamma_w K_{12}q^2) \left((\lambda + 2\mu) \frac{A}{B} - B - \frac{A}{B} \frac{K_3^2}{K_{12}} \right) \varepsilon. \tag{5.25}
\end{aligned}$$

Damit lassen sich wieder formal fünf Parameter identifizieren:

$$M_U = (\lambda + 2\mu + A - 2B), \tag{5.26}$$

$$M_R = (\lambda + 2\mu) \frac{A}{B} - B - \frac{A}{B} \frac{K_3^2}{K_{12}}, \tag{5.27}$$

$$\delta M_u = (\lambda + 2\mu) \left(1 - \frac{A}{B} \right) + A - B + \frac{K_3^2}{K_{12}} \left(\frac{A}{B} - 1 \right), \tag{5.28}$$

$$\delta M_w = \frac{A}{B} \frac{K_3^2}{K_{12}}, \tag{5.29}$$

$$\tau_u^{-1} = \Gamma_u Bq^2, \tag{5.30}$$

$$\tau_w^{-1} = \Gamma_w K_{12}q^2. \tag{5.31}$$

Allerdings ist die Differenz zwischen unrelaxiertem und relaxiertem Modul nicht gleich der Summe der Relaxationsmoduln:

$$M_U - M_R \neq \delta M_u + \delta M_w. \tag{5.32}$$

Die Gleichungen mit beiden Relaxationsmechanismen beschreiben also nicht anelastisches Verhalten, man kann nur noch von Viskoelastizität sprechen. Formal lassen sich die hydrodynamischen Gleichungen so ändern, dass man die Parameter der einzelnen Relaxationsmechanismen (5.17)-(5.24) wieder erhält. Vernachlässigt man folgenden Term in (4.7c):

$$\partial_t u = \dots + \underline{\Gamma_u K_3 \nabla^2 w}, \tag{5.33}$$

so erhält man für die Parameter:

$$M_U = (\lambda + 2\mu + A - 2B), \quad (5.34)$$

$$M_R = (\lambda + 2\mu) \frac{A}{B} - B - \frac{K_3^2}{K_{12}}, \quad (5.35)$$

$$\delta M_u = (\lambda + 2\mu) \left(1 - \frac{A}{B}\right) + A - B, \quad (5.36)$$

$$\delta M_w = \frac{K_3^2}{K_{12}}, \quad (5.37)$$

$$\tau_u^{-1} = \Gamma_u B q^2, \quad (5.38)$$

$$\tau_w^{-1} = \Gamma_w K_{12} q^2. \quad (5.39)$$

Die Auswirkung der Vernachlässigung betrifft bei der Dispersionsrelation nur die rein diffusiven Moden (4.5). Dort wird der Term $\Gamma_u \Gamma_w \mathbf{A} K_3^2$ zu $\Gamma_u \Gamma_w \mathbf{B} K_3^2$. Die Vernachlässigung des Terms $\Gamma_u K_3 \nabla^2 w$ ist aber rein willkürlich, insbesondere da der dazu entsprechende Term $\Gamma_w K_3 \nabla^2 u$ bei der Phasonenbewegungsgleichung weiterhin beachtet wird.

Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Diplomarbeit wurden Fragestellungen zur Hydrodynamik in Quasikristallen bearbeitet. Dafür wurde im ersten Kapitel die Festkörperklasse Quasikristalle beschrieben. Mathematisch lassen sich Quasikristalle als Projektion aus einem höherdimensionalen Hyperraum konstruieren. Daraus resultieren die besonderen Eigenschaften dieser Materialklasse, z.B. die aperiodische lückenlose Parkettierung des Raums und die für periodische Kristalle „kristallographisch verbotenen“ Symmetrien. Die höherdimensionale Beschreibung führt zu einer weiteren charakteristischen Eigenschaft, den Phasonen. Diese lassen sich im diskreten Bild als Flip der Atomkonfiguration interpretieren. Im Kontinuumsbild stellen sie einen weiteren Freiheitsgrad dar, der eine gewisse Verwandtschaft zur phononischen Verschiebung aufweist.

Im zweiten Kapitel wurde die für die Phasonen notwendige Erweiterung der Elastizitätstheorie beschrieben. Diese stellt einen zeitunabhängigen Zusammenhang zwischen mechanischer Beanspruchung und Antwortverhalten eines Kontinuums dar.

Im dritten Kapitel wurde die Grundlage für die zeitabhängige Beschreibung gelegt. Zunächst wurde der Begriff Hydrodynamik präzisiert. Darunter versteht man niederenergetische, langwellige Störungen eines Systems, die sich in Form von Erhaltungsgleichungen beschreiben lassen. Am bekannten Beispiel einer Flüssigkeit wurden die hydrodynamischen Gleichungen von EULER und NAVIER-STOKES hergeleitet. Mit dem gleichen Ansatz wurden hydrodynamische Gleichungen für einen ikosaedrischen Quasikristall aufgestellt. Die Herleitung dieser Gleichungen wurde mit einem weiteren, formaleren Ansatz wiederholt. Vorteilhaft war dabei, dass sich die reaktiven Terme in einem Automatismus ergaben. Für die Reibungsterme musste aber auf den Entropieproduktionsformalismus zurückgegriffen werden. Die Modenstruktur der hydrodynamischen Variablen wurde untersucht, diese teilen sich in propagierende und diffusive Moden auf.

Im vierten Kapitel wurde ein eindimensionaler Spezialfall der Hydrodynamik numerisch gelöst. Dazu wurde das System diskretisiert und skaliert. Mit Hilfe des Lösungsalgorithmus wurde das zeitliche Antwortverhalten des Quasikristalls auf verschiedene physikalische Problemstellungen analysiert. Es wurde am Verhalten auf einen Impulsstoß die Auswirkungen auf den zusätzlichen Freiheitsgrad der Phasonen verdeutlicht. Eine Abschätzung für die lokale Flipwahrscheinlichkeit bei periodischer Anregung wurde abgeleitet, und das zeitliche Verhalten nach Durchgang einer Versetzung (Verbreiterung einer Phasonenwand) unter-

sucht. Die unterschiedliche Relaxation der Phononen und Phasonen auf das Eindringen des Quasikristalls motivierte das daran anschließende Kapitel, in dem auf zeitabhängige Materialgesetze eingegangen wurde. Die Materialgesetze folgten dabei aus den hydrodynamischen Gleichungen. Für die Leerstellen- und Phasonendiffusion konnten jeweils anelastische Materialgleichungen abgeleitet werden.

Als Ansatz für zukünftige Arbeiten zur Hydrodynamik in Quasikristallen seien hier zwei Aufgaben festgehalten. Die erste Aufgabe besteht darin, die hydrodynamischen Gleichungen zu verbessern bzw. zu erweitern. Vor allem die in Anhang B.2 von Ishii [58] vorgestellte Aufteilung der Dichte in einen Beitrag des Gitters und eine Defektdichte erscheint vielversprechend. Dadurch könnte man einen kinetischen Koeffizienten für die Defektdichte einführen, und die Form der Parameter der anelastischen Gleichungen würde eine intuitivere Form annehmen (die Relaxationszeit der Leerstellendiffusion wäre dann proportional zum kinetischen Koeffizienten der Defektdichte, siehe Kapitel 5.2.1).

Der zweite große Aufgabenbereich besteht in der Anwendung der hydrodynamischen Gleichungen auf die Interpretation von Messergebnissen. So lassen sich aus den hydrodynamischen Gleichungen Debye-Waller Faktoren berechnen, die mit Beugungsexperimenten verglichen werden können. Insbesondere der Einfluss der Phasonen ist dabei von Interesse. Aus Experimenten der mechanischen Spektroskopie lassen sich Konstanten der Materialgesetze bestimmen. Aus diesen kann man wiederum die Konstanten in den hydrodynamischen Gleichungen gewinnen. Neben der Interpretation von realen Experimenten, kann man diese auch durch Molekulardynamik simulieren. Auch dadurch lassen sich wieder Materialkonstanten bestimmen.

Anhang A

Rechnungen zum Kapitel Hydrodynamik

A.1 Variationsrechnung

In diesem Teil des Anhangs A seien die verwendeten Ergebnisse aus der Variationsrechnung zusammengefasst:

$$\frac{\delta f(\mathbf{x})}{\delta f(\mathbf{y})} = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}). \quad (\text{A.1})$$

Gegeben sei ein Funktional $F[\phi(\mathbf{x})] = \int d\mathbf{x} f(\phi(\mathbf{x}), \nabla\phi(\mathbf{x}))$, dann ist die Variation:

$$\begin{aligned} \frac{\delta F}{\delta\phi(\mathbf{y})} &= \int d^d x \frac{\delta f}{\delta\phi(\mathbf{y})} \\ &= \int d^d x \left[\frac{\partial f}{\partial\phi(\mathbf{x})} \frac{\delta\phi(\mathbf{x})}{\delta\phi(\mathbf{y})} + \frac{\partial f}{\partial\nabla\phi(\mathbf{x})} \frac{\delta\nabla\phi(\mathbf{x})}{\delta\phi(\mathbf{y})} \right] \\ &= \int d^d x \left[\frac{\partial f}{\partial\phi(\mathbf{x})} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) + \frac{\partial f}{\partial\nabla\phi(\mathbf{x})} \cdot \nabla\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Der letzte Term wird partiell integriert, dabei liefert der Oberflächenterm wegen der Deltafunktion keinen Beitrag, somit gilt:

$$\frac{\delta F}{\delta\phi(\mathbf{y})} = \frac{\partial f}{\partial\phi(\mathbf{y})} - \nabla \cdot \frac{\partial f}{\partial\nabla\phi(\mathbf{y})}. \quad (\text{A.3})$$

A.2 POISSONklammern

Klassische POISSONklammern

Für die Bestimmung der klassischen POISSONklammern muss man zunächst die mikroskopische Form der hydrodynamischen Variablen angeben. Diese lauten:

$$\rho(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha} m \delta(\mathbf{x}_{\alpha} - \mathbf{x}), \quad (\text{A.4})$$

$$g_i(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha} p_i^{\alpha} \delta(\mathbf{x}_{\alpha} - \mathbf{x}), \quad (\text{A.5})$$

$$u_i(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha} u_i^{\alpha} \delta(\mathbf{x}_{\alpha} - \mathbf{x}), \quad (\text{A.6})$$

$$w_i(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha} w_i^{\alpha} \delta(\mathbf{x}_{\alpha} - \mathbf{x}). \quad (\text{A.7})$$

Bei der Berechnung ist darauf zu achten, dass die phononische Verschiebung u_i sich wie ein Ortsvektor verhält, während dies bei der phasonischen nicht der Fall ist. Da die Masendichte ρ und die beiden Verschiebungen nur Funktionen des Orts und nicht des Impuls sind, ergeben sich mit (3.55) folgende von Null verschiedene POISSONklammern:

$$\{g_i(\mathbf{x}), \rho(\mathbf{x}')\} = \rho(\mathbf{x}) \nabla_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (\text{A.8})$$

$$\{g_i(\mathbf{x}), g_j(\mathbf{x}')\} = \left(g_j(\mathbf{x}) \nabla_i - g_i(\mathbf{x}') \nabla'_j \right) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (\text{A.9})$$

$$\{u_i(\mathbf{x}), g_j(\mathbf{x}')\} = \left[-\delta_{ij} + \nabla_j u_i(\mathbf{x}) \right] \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (\text{A.10})$$

$$\{w_i(\mathbf{x}), g_j(\mathbf{x}')\} = \left[\nabla_j w_i(\mathbf{x}) \right] \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (\text{A.11})$$

Die POISSONklammern (A.8) und (A.9) sind identisch zu den POISSONklammern einer einfachen Flüssigkeit.

Kommutatoren

Für die Berechnung der Kommutatoren ist es notwendig die klassischen Observablen zu symmetrisieren. Für den Impulsoperator $\hat{\mathbf{g}}$ folgt:

$$\hat{\mathbf{g}} = \frac{\hbar}{2i} \sum_{\alpha} \left(\nabla_{\alpha} \delta(\mathbf{x}_{\alpha} - \mathbf{x}) + \delta(\mathbf{x}_{\alpha} - \mathbf{x}) \nabla_{\alpha} \right). \quad (\text{A.12})$$

Man erhält damit dasselbe Ergebnis wie (A.8)-(A.11). Für (A.8) und (A.9) ist dies von Dzyaloshinskii et al. [40] ausgeführt.

A.3 Hydrodynamische Gleichungen

Im Folgenden werden die hydrodynamischen Gleichungen der vier Variablen ρ , \mathbf{g} , \mathbf{u} , \mathbf{w} mit Hilfe der POISSONklammern hergeleitet. Die Abhängigkeit der hydrodynamischen Variablen von \mathbf{x} , \mathbf{x}' und t ist explizit nur bei Mehrdeutigkeit angegeben.

Gleichung für $\rho(\mathbf{x}, t)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(\mathbf{x})}{\partial t} + \int \{\rho(\mathbf{x}), g_i(\mathbf{x}')\} \frac{\delta H}{\delta g_i(\mathbf{x}')} d^d x' &= 0, \\ \frac{\partial \rho(\mathbf{x})}{\partial t} - \int \rho(\mathbf{x}') \left(\nabla'_i \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \right) \frac{g_i(\mathbf{x}')}{\rho(\mathbf{x}')} d^d x' &= 0, \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_i g_i &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Gleichung für $u_i(\mathbf{x}, t)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_i(\mathbf{x})}{\partial t} + \int \{u_i(\mathbf{x}), g_j(\mathbf{x}')\} \frac{\delta H}{\delta g_j(\mathbf{x}')} d^d x' + \Gamma_u \frac{\delta H}{\delta u_i(\mathbf{x})} &= 0 \\ \frac{\partial u_i(\mathbf{x})}{\partial t} + \int \left[-\delta_{ij} + \nabla_j u_i(\mathbf{x}) \right] \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \frac{g_j(\mathbf{x}')}{\rho(\mathbf{x}')} d^d x' + \Gamma_u \frac{\delta H}{\delta u_i(\mathbf{x})} &= 0 \\ \frac{\partial u_i}{\partial t} + v_j (\nabla_j u_i) + \Gamma_u \frac{\delta H}{\delta u_i} - v_i &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Gleichung für $w_i(\mathbf{x}, t)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial w_i(\mathbf{x})}{\partial t} + \int \{w_i(\mathbf{x}), g_j(\mathbf{x}')\} \frac{\delta H}{\delta g_j(\mathbf{x}')} d^d x' + \Gamma_w \frac{\delta H}{\delta w_i(\mathbf{x})} &= 0, \\ \frac{\partial w_i(\mathbf{x})}{\partial t} + \int \left[\nabla_j w_i(\mathbf{x}) \right] \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \frac{g_j(\mathbf{x}')}{\rho(\mathbf{x}')} d^d x' + \Gamma_w \frac{\delta H}{\delta w_i(\mathbf{x})} &= 0, \\ \frac{\partial w_i}{\partial t} + v_j (\nabla_j w_i) + \Gamma_w \frac{\delta H}{\delta w_i} &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Gleichung für $g_i(\mathbf{x}, t)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_i(\mathbf{x})}{\partial t} + \int \left(\{g_i(\mathbf{x}), \rho(\mathbf{x}')\} \frac{\delta H}{\delta \rho(\mathbf{x}')} + \{g_i(\mathbf{x}), g_j(\mathbf{x}')\} \frac{\delta H}{\delta g_j(\mathbf{x}')} \right. \\ \left. + \{g_i(\mathbf{x}), u_j(\mathbf{x}')\} \frac{\delta H}{\delta u_j(\mathbf{x}')} + \{g_i(\mathbf{x}), w_j(\mathbf{x}')\} \frac{\delta H}{\delta w_j(\mathbf{x}')} \right) d^d x' \\ - \int d^d x' \frac{\delta}{\delta \Psi_\beta(\mathbf{x}')} \{g_i(\mathbf{x}), \Psi_\beta(\mathbf{x}')\} + \Gamma_{gg} \frac{\delta H}{\delta g_i(\mathbf{x})} = 0. \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Da die POISSONKlammer der Impulsdichte mit sich selbst die einzige nichtverschwindende ist, gibt es einen Beitrag mit Variation dieser POISSONKlammer. Die Terme werden im Folgenden einzeln berechnet:

$$\begin{aligned} \int \{g_i(\mathbf{x}), \rho(\mathbf{x}')\} \frac{\delta H}{\delta \rho(\mathbf{x}')} d^d x' &= \int \rho(\mathbf{x}) \nabla_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \frac{\delta(H_{\text{kin.}} + H_{\text{erw.}})}{\delta \rho(\mathbf{x}')} d^d x' \\ &= \rho(\mathbf{x}) \nabla_i \int \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \frac{\delta(H_{\text{kin.}} + H_{\text{erw.}})}{\delta \rho(\mathbf{x}')} d^d x' \\ &= \rho(\mathbf{x}) \nabla_i \left(\frac{\delta H_{\text{erw.}}}{\delta \rho(\mathbf{x})} + \frac{\delta H_{\text{kin.}}}{\delta \rho(\mathbf{x})} \right) \\ &= \rho \nabla_i \left(\frac{\delta H_{\text{erw.}}}{\delta \rho} \right) + \rho \nabla_i \left(-\frac{1}{2} \frac{\mathbf{g}^2}{\rho^2} \right) \\ &= \rho \nabla_i \left(\frac{\delta H_{\text{erw.}}}{\delta \rho} \right) - \rho \frac{g_j}{\rho} \nabla_i \left(\frac{g_j}{\rho} \right) \\ &= \rho \nabla_i \left(\frac{\delta H_{\text{erw.}}}{\delta \rho} \right) - g_j \nabla_i v_j, \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

$$\begin{aligned} \int \{g_i(\mathbf{x}), g_j(\mathbf{x}')\} \frac{\delta H}{\delta g_j(\mathbf{x}')} d^d x' &= \int v_j(\mathbf{x}') (g_j(\mathbf{x}) \nabla_i - g_i(\mathbf{x}') \nabla'_j) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d^d x' \\ &= g_j(\mathbf{x}) \nabla_i \int \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') v_j(\mathbf{x}') d^d x' \\ &\quad - \int v_j(\mathbf{x}') g_i(\mathbf{x}') \nabla'_j \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d^d x' \\ &= g_j \nabla_i v_j + \nabla_j (v_j g_i). \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Der letzte Term von (A.17) und der erste von (A.18) heben sich gegenseitig auf.

$$\begin{aligned} \int \{g_i(\mathbf{x}), u_j(\mathbf{x}')\} \frac{\delta H}{\delta u_j(\mathbf{x}')} d^d x' &= - \int \left[-\delta_{ij} + \nabla'_i u_j(\mathbf{x}') \right] \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \frac{\delta H}{\delta u_j(\mathbf{x}')} d^d x' \\ &= \left[\delta_{ij} - \nabla_i u_j \right] \frac{\delta H}{\delta u_j}, \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

$$\begin{aligned}
\int \{g_i(\mathbf{x}), w_j(\mathbf{x}')\} \frac{\delta H}{\delta w_j(\mathbf{x}')} d^d x' &= - \int [\nabla'_i w_j(\mathbf{x}')] \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \frac{\delta H}{\delta w_j(\mathbf{x}')} d^d x' \\
&= - (\nabla_i w_j) \frac{\delta H}{\delta w_j}.
\end{aligned} \tag{A.20}$$

Die Gleichung mit dem kinetischen Koeffizienten Γ_{gg} ergibt:

$$\Gamma_{gg} \frac{\delta H}{\delta g_i(\mathbf{x})} = - \nabla_j (\tilde{\eta}_{ijkl} \nabla_k v_l), \tag{A.21}$$

$$\begin{aligned}
&\int d^d x' \frac{\delta}{\delta \Psi_\beta(\mathbf{x}')} \{g_i(\mathbf{x}), \Psi_\beta(\mathbf{x}')\} \\
&= \int d^d x' \left(\frac{\delta}{\delta \rho(\mathbf{x}')} \{g_i(\mathbf{x}), \rho(\mathbf{x}')\} + \frac{\delta}{\delta g_j(\mathbf{x}')} \{g_i(\mathbf{x}), g_j(\mathbf{x}')\} \right. \\
&\quad \left. + \frac{\delta}{\delta u_j(\mathbf{x}')} \{g_i(\mathbf{x}), u_j(\mathbf{x}')\} + \frac{\delta}{\delta w_j(\mathbf{x}')} \{g_i(\mathbf{x}), w_j(\mathbf{x}')\} \right).
\end{aligned} \tag{A.22}$$

Wieder termweise betrachtet:

$$\begin{aligned}
\int d^d x' \frac{\delta}{\delta u_j(\mathbf{x}')} \{g_i(\mathbf{x}), u_j(\mathbf{x}')\} &= \int d^d x' \frac{\delta}{\delta u_j(\mathbf{x}')} [\delta_{ij} - \nabla'_i u_j(\mathbf{x}')] \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \\
&= - \int d^d x' \left(\nabla'_i \frac{\delta u_j(\mathbf{x}')}{\delta u_j(\mathbf{x}')} \right) \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) \\
&= - \int d^d x' (\nabla'_i 1) \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) = 0.
\end{aligned} \tag{A.23}$$

Der Term mit w_j an Stelle von u_j geht analog.

$$\begin{aligned}
&\int d^d x' \left(\frac{\delta}{\delta \rho(\mathbf{x}')} \{g_i(\mathbf{x}), \rho(\mathbf{x}')\} + \frac{\delta}{\delta g_j(\mathbf{x}')} \{g_i(\mathbf{x}), g_j(\mathbf{x}')\} \right) \\
&= \int d^d x' \left(\frac{\delta}{\delta \rho(\mathbf{x}')} \rho(\mathbf{x}) \nabla_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + \frac{\delta}{\delta g_j(\mathbf{x}')} (g_j(\mathbf{x}) \nabla_i - g_i(\mathbf{x}') \nabla'_j) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \right) \\
&= \int \left(\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \nabla_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \nabla_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') - \delta_{ij} \nabla'_j \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \right) d^d x' \\
&= \int \left([-\nabla_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')] \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \nabla_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') (\nabla'_i 1) \right) d^d x' \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{A.24}$$

Die ersten beiden Terme der vorletzten Zeile sind jeweils identisch gleich Null, da für beide gilt $a = -a \Rightarrow a = 0$.

Hydrodynamische Gleichungen

Die vier hydrodynamischen Gleichungen lauten zusammengefasst:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_k (v_k \rho) = 0, \quad (\text{A.25a})$$

$$\frac{\partial g_i}{\partial t} + \nabla_k (v_k g_i) - \nabla_j \tilde{\eta}_{ijkl} \nabla_k v_l = -(\delta_{ij} - \nabla_i u_j) \frac{\delta H}{\delta u_j} + (\nabla_i w_j) \frac{\delta H}{\delta w_j} - \rho \nabla_i \frac{\delta H_{\text{erw.}}}{\delta \rho}, \quad (\text{A.25b})$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + v_k \nabla_k u_i = v_i - \Gamma_u \frac{\delta H}{\delta u_i}, \quad (\text{A.25c})$$

$$\frac{\partial w_i}{\partial t} + v_k \nabla_k w_i = -\Gamma_w \frac{\delta H}{\delta w_i}. \quad (\text{A.25d})$$

Anhang B

Literaturvergleich

B.1 Grenzfall isotroper Festkörper

Vernachlässigt man den phasonischen Freiheitsgrad \boldsymbol{w} und damit alle phasonische Konstanten wie K_1, K_2, K_3, Γ_w , dann sind die hydrodynamischen Gleichungen identisch zu denen eines isotropen Festkörpers. Dies ist z.B. ein amorpher Festkörper. Die von Cohen, Fleming und Gibbs in [56] sowie von Das und Schilling in [57] angegebenen Gleichungen für einen amorphen Festkörper stimmen im Grenzfall ohne Phasonen mit denen des ikosaedrischen Quasikristalls überein. Insbesondere gilt dies für die in [57] angegebenen Schallgeschwindigkeiten und Diffusionskoeffizienten. Zwar kann man bei amorphen Materialien nicht mehr von Gitterplätzen ausgehen, es ist aber trotzdem sinnvoll jedem Atom eine ursprüngliche Position zuzuordnen. Die Verschiebung \boldsymbol{u} ist dann die Abweichung von dieser ursprünglichen Position. Unter der Leerstellenbewegung versteht man eine Umordnung der Konfiguration des amorphen Festkörpers.

B.2 Ishii : Umdeutung ρ und Reibungskoeffizient Γ_d

Ishii teilt in [58] die Massendichte ρ in verschiedene Beiträge auf:

$$\rho = \rho_{\text{qg}} + \rho_{\text{d}} = \rho_{\text{qg}} + (\rho_{\text{zg}} - \rho_{\text{leer}}). \quad (\text{B.1})$$

Dabei wurde die Quasigitterdichte ρ_{qg} und die Defektdichte ρ_{d} , die aus Zwischengitteratomen (ρ_{zg}) und Leerstellen (ρ_{leer}) besteht, eingeführt. Statt der Massendichte wird die Defektdichte als unabhängige hydrodynamische Variable verwendet. Die Defektdichte erlaubt einen neuen kinetischen Koeffizienten Γ_{d} .

B.3 Hydrodynamik nach Khannanov

Khannanov beschreibt in [59] die hydrodynamischen Gleichungen in ikosaedrischen Quasikristallen. Motivation für diese Veröffentlichung ist die Form der Leerstellendiffusion in den Dispersionsrelationen der propagierenden Moden. In der Veröffentlichung von Lubensky et al. [25] ist durch einen Rechenfehler kein Term proportional zur Leerstellendiffusion (Γ_u) in dem diffusiven Anteil der Dispersionsrelation für die longitudinale, propagierende Mode. Khannanov nimmt dies als Anlass für einen anderen Ansatz. Als hydrodynamische Variablen berücksichtigt er die Massendichte ρ , die Impulsdichte \mathbf{g} , die phasonische Verschiebung \mathbf{w} und an Stelle der phononischen Verschiebung \mathbf{u} die (skalare) Leerstellenkonzentration C . Die Anzahl der hydrodynamischen Variablen verringert sich von zehn auf acht. Wegen dem Vorhandensein von Leerstellen ist die elastische Verschiebung nicht mehr eindeutig gegeben. Statt einer lokalen Verschiebung \mathbf{u} geht Khannanov nur von einer totalen Verschiebung \mathbf{U} aus. Für den Strom der Leerstellenkonzentration wird die gleiche Abhängigkeit angenommen, wie für eine Mischung einer binären Flüssigkeit. Die linearisierte Gleichung für die Leerstellenkonzentration lautet:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\Delta C + D\gamma\Delta p. \quad (\text{B.2})$$

D und γ sind Konstanten und p der Druck, der proportional der Spur des Spannungstensors ist. Die von Lubensky abweichende Ergebnisse für die Dispersionsrelationen mit diesem Ansatz sind:

- (i) Die longitudinale Schallgeschwindigkeit ist $c_L = \sqrt{\frac{\lambda+2\mu}{\rho_0}}$, also die Leerstellen haben keinen Einfluss.
- (ii) Die Leerstellendiffusion liefert einen Beitrag zur Dämpfung der longitudinalen Mode.
- (iii) Die Leerstellendiffusion liefert dagegen keinen Beitrag zur Dämpfung der transversalen Mode.

Wie schon erwähnt führt der Ansatz von Lubensky auch zu einem Beitrag der Leerstellendiffusion zur Dämpfung der longitudinalen Dispersionsrelation. Punkt (iii) kann man am besten überprüfen, indem man den phasonischen Freiheitsgrad eliminiert, und die Dispersionsrelation dann mit dem Ergebnis für einen amorphen Festkörper mit Leerstellen vergleicht. So erhält man in [36] einen Term entsprechend $\Gamma_u\mu$ für die Dämpfung der transversalen Dispersionsrelation. Die Abweichung bei Khannanov liegt wahrscheinlich in der nicht exakten Entwicklung in Potenzen von q . So wird der Term $D\Delta C$ als höhere Ordnung in q vernachlässigt.

Dzyaloshinskii und Volovick untersuchen in [40] die Auswirkung von Leerstellen auf das Konzept der lokalen Verschiebung \mathbf{u} . Sie kommen zu dem Ergebnis, dass zumindest für die linearisierten Gleichungen dieses Konzept die gültigen hydrodynamischen Gleichungen reproduziert.

B.4 Dynamische Gleichungen der Elastodynamik

Modell von Ding et al.

In der klassischen Elastizitätstheorie wird die Hauptgleichung der Elastostatik durch einen Trägheitsterm zu einer dynamischen Gleichung erweitert:

$$\nabla_j \sigma_{ij} + f_i = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}. \quad (\text{B.3})$$

Diese Erweiterung wurde auf die Hauptgleichungen der Elastostatik für den Quasikristall von Ding et al. [60] übertragen:

$$\nabla_j \sigma_{ij}^u + f_i^u = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}, \quad (\text{B.4})$$

$$\nabla_j \sigma_{ij}^w + f_i^w = \rho \frac{\partial^2 w_i}{\partial t^2}. \quad (\text{B.5})$$

Dieser Ansatz führt auf propagierende Moden für die Phasonen. Später wurde die Frage aufgeworfen, wieso die Dichte als Trägheit auch bei den Phasonen auftritt. Dies lässt sich nicht in Übereinstimmung bringen mit der Vorstellung des Phasons als Atomflip. Als Trägheitsmasse für die Phasonen wurde dann eine nicht näher spezifiziert effektive Dichte ρ_{eff} eingeführt:

$$\nabla_j \sigma_{ij}^w + f_i^w = \rho_{\text{eff}} \frac{\partial^2 w_i}{\partial t^2}. \quad (\text{B.6})$$

Minimal-Modell von Rochal und Lorman

Rochal und Lorman vergleichen in [61] die Ansätze von Lubensky et al. [25] und Ding et al. [60] mit experimentellen Ergebnissen. Insbesondere die Tatsache, dass Phasonen nicht propagierende sondern diffusive Moden sind führte zu einer Modifikation der Gleichungen der Elastodynamik. Die effektive Masse ρ_{eff} bei den Phasonen wurde Null gesetzt, die phononische Volumenkraft vernachlässigt, und die phasonische Volumenkraft proportional zur Zeitableitung der phasonischen Verschiebung angenommen $f_i^w = -D \frac{\partial w_i}{\partial t}$:

$$\nabla_j \sigma_{ij}^u = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}, \quad (\text{B.7})$$

$$\nabla_j \sigma_{ij}^w = D \frac{\partial w_i}{\partial t}. \quad (\text{B.8})$$

Bei den hydrodynamischen Gleichungen von Lubensky wurde die Gleichung der phononischen Verschiebung \mathbf{u} kritisiert, insbesondere die Form der zugrundeliegenden dissipativen Funktion. Die Struktur der Moden, Phononen propagierend und Phasonen diffusiv wurde, bestätigt.

Anhang C

Messungen phasonischer Diffusion

In diesem Anhang werden verschiedene Experimente zu Diffusionsmechanismen in ikosaedrischen Quasikristallen vorgestellt. Dabei wird jeweils ein anderes Messkonzept beschrieben. Die Ergebnisse zur Phasonendiffusion unterscheiden sich zum Teil erheblich. Da die Messungen im Allgemeinen in Abhängigkeit von der Temperatur durchgeführt werden, lassen sich die Ergebnisse in Form von ARRHENIUS-Gesetzen darstellen. Diese haben folgende Form:

$$f(T) = f_{\infty} \exp\left(-\frac{\Delta H}{k_B T}\right). \quad (\text{C.1})$$

$f(T)$ ist z.B. die inverse Resonanzfrequenz, oder die Diffusionskonstante, ΔH die Aktivierungsenthalpie und $k_B T$ der BOLTZMANNfaktor.

C.1 Radiotracer Messung von Blüher

Experimente mit radioaktiven Traceratomen wurden von Blüher et al. [62] durchgeführt. Die Diffusionskoeffizienten wurden aus den Eindringprofilen der Traceratome bestimmt. Die Messungen erfolgten in zwei Temperaturbereichen. Die Diffusion über 450°C wurde einem Leerstellenmechanismus zugeschrieben, die Diffusion bei niedrigeren Temperaturen wurde durch einen von Phasonen begünstigten Mechanismus interpretiert. Für die Aktivierungsenthalpie wurde ein Wert von $\Delta H = 1\text{eV}$ angegeben, sowie $D_{\infty} = 10^{-10} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$. Berechnet man für diesen Mechanismus die Diffusionskonstante bei 800 K so erhält man einen Wert von $5 \cdot 10^{-17} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$.

C.2 Mechanische Spektroskopie von Damson

Damson et al. [63] führten Versuche der mechanische Spektroskopie an Quasikristallen durch. Dabei wurde eine Probe zu mechanischen Schwingungen angeregt und das zeitliche

Verhalten der Amplitude gemessen. Aus dem logarithmischen Dekrement θ der Amplitude $A(n)$ wurde der Q-Faktor der inneren Reibung bestimmt:

$$Q^{-1} = \frac{\theta}{\pi} = \frac{1}{\pi n} \ln \frac{A(0)}{A(n)}. \quad (\text{C.2})$$

Trägt man Q^{-1} über der Temperatur T auf, so erhält man zwei Peaks, die von verschiedenen Relaxationsmechanismen stammen. Der Peak bei 370 K wird Punktdefekten wie z.B. Leerstellen zugeordnet. Der zweite Peak bei etwa 870 K stammt dagegen von phasonischen Defekten. Die ARRHENIUS-Parameter wurden mit $\Delta H = 4.0\text{eV}$ und $\tau_{\infty}^{-1} = 3 \cdot 10^{24} \text{s}^{-1}$ angegeben. Für D_{∞} wurde ein Wert von $2 \cdot 10^4 \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$ abgeschätzt. Damit ergibt sich $D(800 \text{ K}) = 10^{-21} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$.

C.3 Untersuchung mit TEM von Feuerbacher

Feuerbacher et al. [64] berichten über eine direkte Methode die phasonischen Defekte eines Quasikristalls zu beobachten. Dabei werden in-situ Aufnahmen einer Probe in einem Transmissionen-Elektronen-Mikroskop untersucht. In dem Experiment wurde das allmähliche Verschwinden (mit Abklingzeit t) der Defekte in Abhängigkeit von der Temperatur gemessen. Folgende ARRHENIUS-Parameter ergaben sich dabei:

$$\Delta H = 4,28\text{eV}, \quad t_{\infty}^{-1} = 3,8 \cdot 10^{21} \text{s}^{-1}. \quad (\text{C.3})$$

Eine Abschätzung für die Diffusionskonstante liefert $D_{\infty} = 5 \cdot 10^7 \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$ und $D(800 \text{ K}) = 10^{-20} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$.

C.4 Diffuse Streuung von deBoissieu

De Boissieu et al. haben die Phasonendiffusionskonstante mit Röntgenstreuexperimenten bestimmt.

	$D_{\text{Phason}}[\text{m}^2/\text{s}]$
ICQ 8 (8.-13.9.2002) [65]	$2,7 \cdot 10^{-17}$
pers. Mitteilung (5.3.2003) [66]	$1,1 \cdot 10^{-15}$
Nancy (27.5.2003) [67]	$2,1 \cdot 10^{-16}$

In einem Konferenzvortrag auf der ICQ 8 wurde über die Messung von diffusiver Streuung aufgrund von Phasonfluktuationen berichtet. Der in der Tabelle angegebene Wert für die Phasonendiffusionskonstante wurde aber noch korrigiert [66]. Auf dem Abschlusskolloquium des Schwerpunktprogramms Quasikristalle in Nancy berichtete de Boissieu über die

Bestimmung der Phasonendiffusionskonstante wiederum durch diffuse Streuung. Starke Intensitätsfluktuationen führten zu so genannten Speckle Mustern. Die Messungen erfolgten bei etwa 650°C. Bisher ist noch keine gedruckte Veröffentlichung über diese Experimente erschienen. Die angegebenen Werte für die Phasonendiffusionskonstante sind sicher nicht die endgültigen, doch ist damit die Größenordnung vorgegeben.

Literaturverzeichnis

- [1] SHECHTMAN, D., BLECH, I., GRATIAS, D., CAHN, J. W.: *Metallic Phase with Long-Range Orientational Order and No Translational Symmetry*, Phys. Rev. Lett., **53**:1951–1953, 1984
- [2] PENROSE, R.: *The Rôle of Aesthetics in Pure and Applied Mathematical Research*, Bull. Inst. Math. and its Appl., **10**:266–271, 1974
- [3] DILGER, C.: *Versetzungsbewegungen in dreidimensionalen Quasikristallen*, Diplomarbeit, Universität Stuttgart, 1995
- [4] ZOGLAUER, T.: *Methoden zur Konstruktion quasikristalliner Strukturen*, Wissenschaftliche Arbeit für das Lehramt an Gymnasien, Institut für Theoretische und Angewandte Physik, Universität Stuttgart, 1986
- [5] DUNEAU, M., KATZ, A.: *Quasiperiodic patterns*, Phys. Rev. Lett., **54**:2688–2691, 1985
- [6] RICKER, M.: *Zur Kontinuumstheorie der Versetzungen in ikosaedrischen Quasikristallen*, Diplomarbeit, Universität Stuttgart, 2000
- [7] DEBRUIJN, N. G.: *Algebraic theory of Penrose's non-periodic tilings of the plane*, Nederl. Akad. Wetensch. Proceedings of Ser. A, **43**:39–66, 1981
- [8] PETERS, J.: *Neue Strukturmodelle für Halbleiter: Tetrakoordinierte Quasikristalle*, Diplomarbeit, Universität Stuttgart, 1989
- [9] KALUGIN, P. A., YU.KITAYEV, A., LEVITOV, L. S.: *6-dimensional properties of Al_{0.86}Mn_{0.14} alloy*, J. Physique Lett., **46**:601–607, 1985
- [10] STEINHARDT, P. J., OSTLUND, S.: *The Physics of Quasicrystals*, World Scientific, Singapore, 1987
- [11] LIFSHTIZ, R.: *The definition of quasicrystals*, Konferenzvortrag Aperiodic 2000
- [12] LUBENSKY, T. C.: *Symmetry, elasticity, and hydrodynamics in quasiperiodic structures*, in M. V. Jarić (Herausgeber), *Introduction to Quasicrystals*, S. 199–280, Academic Press, Incorporated, San Diego, 1988

- [13] BAK, P.: *Symmetry, stability, and elastic properties of icosahedral incommensurate crystals*, Phys. Rev. B, **32**:5764–5772, 1985
- [14] LEVINE, D., LUBENSKY, T. C., OSTLUND, S., RAMASWAMY, S., STEINHARDT, P. J., TONER, J.: *Elasticity and Dislocations in Pentagonal and Icosahedral Quasicrystals*, Phys. Rev. Lett., **54**:1520–1523, 1985
- [15] HAMERMESH, M.: *Group theory and its application to physical problems*, Dover Publications, Incorporated, New York, 2. Auflage, 1989
- [16] TREBIN, H.-R.: *Gruppentheoretische Methoden der Physik*, Vorlesungsmitschrieb, Universität Stuttgart, SS 1997, WS 1997/ 98
- [17] BECKER, E., BÜRGER, W.: *Kontinuumsmechanik*, B.G. Teubner, Stuttgart, 1975
- [18] TREBIN, H.-R.: *Private Notizen zur Kontinuumsmechanik-Vorlesung*, WS 1995/ 96
- [19] BACHTELER, J.: *Zur Elastizitätstheorie in ikosaedrischen Quasikristallen*, Diplomarbeit, Universität Stuttgart, 1994
- [20] BACHTELER, J.: *Kontinuumstheorie der Versetzungen in ikosaedrischen Quasikristallen*, Dissertation, Universität Stuttgart, 1999
- [21] HAUPT, P.: *Continuum Mechanics and Theory of Materials*, Springer Verlag, 2000
- [22] BETTEN, J.: *Kontinuumsmechanik, Elasto-, Plasto- und Kriechmechanik*, Springer-Verlag, Berlin, 1993
- [23] SOCOLAR, J. E. S., LUBENSKY, T. C., STEINHARDT, P. J.: *Phonons, phasons, and dislocations in quasicrystals.*, Phys. Rev. B, **34**:3345–3360, 1986
- [24] ISHII, Y.: *Mode locking in quasicrystals*, Phys. Rev. B, **39**:11862–11871, 1989
- [25] LUBENSKY, T. C., RAMASWAMY, S., TONER, J.: *Hydrodynamics of icosahedral quasicrystals*, Phys. Rev. B, **32**:7444–7452, 1985
- [26] FORSTER, D.: *Hydrodynamic Fluctuations, Broken Symmetry, and Correlation Functions*, Band 47 von *Frontiers in Physics: A Lecture Note and Reprint Series*, W. A. Benjamin, Incorporated, Massachusetts, 1975
- [27] CHAIKIN, P., LUBENSKY, T. C.: *Principles of Condensed Matter Physics*, Cambridge University Press, Cambridge, 1995
- [28] MARTIN, P. C., PARODI, O., PERSHAN, P. S.: *Unified hydrodynamic theory for crystals, liquid crystals, and normal fluids*, Phys. Rev. A, **6**:2401–2420, 1972
- [29] ALTENBACH, J., ALTENBACH, H.: *Einführung in die Kontinuumsmechanik*, Teubner, Stuttgart, 1994

- [30] LANDAU, L. D., LIFSCHITZ, E. M.: *Statistische Physik, Teil 1*, Band 5 von *Lehrbuch der Theoretischen Physik*, Akademie-Verlag, Berlin, 6. Auflage, 1984
- [31] FLEMING, P. D., COHEN, C.: *Hydrodynamics of solids*, Phys. Rev. B, **13**:500–516, 1976
- [32] HALPERIN, B., HOHENBERG, P.: *Hydrodynamic theory of spin waves*, Phys. Rev., **188**:898–918, 1969
- [33] DAS, S. P., MAZENKO, G. F., RAMASWAMY, S., TONER, J.: *Hydrodynamic theory of the glass transition*, Phys. Rev. Lett., **54**:118–121, 1985
- [34] DAS, S. P., MAZENKO, G. F.: *Fluctuating nonlinear hydrodynamics and the liquid-glass transition*, Phys. Rev. A, **34**:2265–2282, 1986
- [35] MAZENKO, G. F., RAMASWAMY, S., TONER, J.: *Breakdown of conventional hydrodynamics for smectic-A, hexatic-B, and cholesteric liquid crystals*, Phys. Rev. A, **28**:1618–1636, 1983
- [36] DAS, S. P.: *Model of defect diffusion and development of the boson peak in an amorphous solid*, Phys. Rev. E, **59**:3870–3875, 1999
- [37] STARK, H., LUBENSKY, T. C.: *Poisson-bracket approach to the dynamics of nematic liquid crystals*, Phys. Rev. E, **67**:061709, 2003
- [38] MA, S., MAZENKO, G. F.: *Critical dynamics of ferromagnets in $6-\epsilon$ dimensions: General discussion and detailed calculation*, Phys. Rev. B, **11**:4077–4100, 1975
- [39] MORI, H., FUJISAKA, H.: *On nonlinear dynamics of fluctuations*, Prog. Theor. Phys., **49**:764–775, 1973
- [40] DZYALOSHINSKII, I. E., VOLOVICK, G. E.: *Poisson brackets in condensed matter physics*, Ann. Phys. (N.Y.), **125**:67, 1980
- [41] VOLOVIK, G. E., KATS, E. I.: *Nonlinear hydrodynamics of liquid crystals*, Sov. Phys. JETP, **54**:122–126, 1981
- [42] LUDWIG, W., FALTER, C.: *Symmetries in Physics*, Springer-Verlag, 1988
- [43] WEINBERG, S.: *Gravitation and Cosmology*, John Wiley and Sons, New York, 1972
- [44] AMAZIT, Y., FISCHER, M., PERRIN, B., ZAREMBOWITCH, A.: *Ultrasonic investigations of large single AlPdMn icosahedral quasicrystals*, in C. Janot, R. Mossieri (Herausgeber), *Proceedings of the 5th International Conference on Quasicrystals*, S. 584–587. World Scientific, Singapore, 1995
- [45] LÉTOUBLON, A.: *Study of the diffuse scattering in the icosahedral AlPdMn phases*, Dissertation, Institut National Polytechnique de Grenoble, 1999

- [46] LÉTOUBLON, A., DE BOISSIEU, M., BOUDARD, M., MANCINI, L., GASTALDI, J., HENNION, B., CAUDRON, R., BELLISSENT, R.: *Phason elastic constants of the icosahedral Al-Pd-Mn phase derived from diffuse scattering measurements*, *Phil. Mag. Lett.*, **81**:273–283, 2001
- [47] KOSCHELLA, U.: *Zur Phason-Phonon-Kopplung in dekadagonalen Quasikristallen*, Diplomarbeit, Universität Stuttgart, 2001
- [48] PRESS, W. H., TEUKOLSKY, S. A., VETTERLING, W. T., FLANNERY, B. P.: *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*, Academic Press, Cambridge, 2. Auflage, 1992
- [49] FLETCHER, C. A. J.: *Computational Techniques for Fluid Dynamics - Fundamental and General Techniques*, Band 1, Springer-Verlag, 1991
- [50] KLEIN, H., AUDIER, M., BOUDARD, M., DE BOISSIEU, M.: *Phason defects in Al-Pd-Mn approximant phases*, *Phil. Mag. A*, **73**:309–331, 1996
- [51] DILGER, C., MIKULLA, R., ROTH, J., TREBIN, H.-R.: *Simulation of shear stress in icosahedral quasicrystals*, *Phil. Mag. A*, **75**:425–441, 1997
- [52] WANG, R., FEUERBACHER, M., YANG, W., URBAN, K.: *Stacking faults in high-temperature-deformed Al-Pd-Mn icosahedral quasicrystals*, *Phil. Mag. A*, **78**:273–284, 1998
- [53] WELLER, M., DAMSON, B.: *Mechanical Spectroscopy of Quasicrystals*, in H.-R. Trebin (Herausgeber), *Quasicrystals – Structure and Physical Properties*, S. 523–535, Wiley-VCH, 2003
- [54] NOWICK, A. S., BERRY, B. S.: *Anelastic Relaxation in Crystalline Solids*, Academic Press, New York and London, 1972
- [55] ZENER, C.: *Elasticity and Anelasticity of Metals*, University of Chicago Press, 1948
- [56] COHEN, C., FLEMING, P. D., GIBBS, J. H.: *Hydrodynamics of amorphous solids with application to the light-scattering spectrum*, *Phys. Rev. B*, **13**:866–877, 1976
- [57] DAS, S. P., SCHILLING, R.: *Fluctuating hydrodynamics and diffusion in amorphous solids*, *Phys. Rev. E*, **50**:1265–1273, 1994
- [58] ISHII, Y.: *Low-energy phason dynamics in quasicrystals*, in S. Takeuchi, T. Fujiwara (Herausgeber), *Proceedings of the 6th International Conference on Quasicrystals*, S. 459–462. World Scientific, 1998
- [59] KHANNANOV, S. K.: *Dynamics of elastic and phason fields in quasicrystals*, *Phys. Met. Metallogr. (USSR)*, **93**:397–403, 2002

-
- [60] DING, D., YANG, W., HU, C., WANG, R.: *Generalized elasticity theory of quasicrystals*, Phys. Rev. B, **48**:7003–7010, 1993
- [61] ROCHAL, S. B., LORMAN, V. L.: *Minimal model of the phonon-phason dynamics in icosahedral quasicrystals and its application to the problem of internal friction in the i-AlPdMn alloy*, Phys. Rev. B, **66**:1442041–1442049, 2002
- [62] BLÜHER, R., SCHARWAECHTER, P., FRANK, W., KRONMÜLLER, H.: *First Low-Temperature Radiotracer Studies of Diffusion in Icosahedral Quasicrystals*, Phys. Rev. Lett., **80**:1014–1017, 1998
- [63] DAMSON, B., WELLER, M., FEUERBACHER, M., GRUSHKO, B., URBAN, K.: *Mechanical spectroscopy of quasicrystals*, J. All. Comp., **310**:184–189, 2000
- [64] FEUERBACHER, M., MOMPIOU, F., CAILLARD, D.: *The dynamics of phason diffusion in icosahedral Al-Pd-Mn quasicrystal*, unveröffentlicht
- [65] DE BOISSIEU, M., TAKAKURA, H., TSAI, A. P.: *Phasons fluctuations in icosahedral phases*, Konferenzvortrag ICQ 8, Bangalore 2002
- [66] DE BOISSIEU, M.: 2003, persönliche Mitteilung
- [67] DE BOISSIEU, M., FRANCOUAL, S., LIVET, F., YAKKHOV, F., BLEY, F., CAUDRON, R.: *Dynamics of long wavelength phason fluctuations*, Abschlusskolloquium Nancy 2003

Danksagung

Faust:

*Da steh ich nun, ich armer Tor!
und bin so klug als wie zuvor;*

Schüler:

Das sieht schon besser aus! Man sieht doch, wo und wie.

Mephistopheles:

Grau, teurer Freund, ist alle Theorie,

Faust : Der Tragödie erster Teil, J.W.v.Goethe

Auch ich möchte meine Diplomarbeit schließen mit dem Dank an all diejenigen, die mir im Laufe des Studiums und der Diplomarbeit geholfen haben.

Bei Herrn Prof. Trebin bedanke ich mich für die Möglichkeit die Diplomarbeit an seinem Institut durchzuführen, die interessante Aufgabenstellung und für seine Betreuung.

Herrn PD Main danke ich für die Übernahme des Mitberichts und sein Interesse, das er während der Betreuung gezeigt hat.

Bei Ulrich Koschella bedanke ich mich für sein Interesse am Fortschritt meiner Diplomarbeit, die Betreuung und dass er die Mühe des Korrekturlesens übernommen hat.

Von Michael Reichenstein konnte ich von seiner Kenntnis der Hydrodynamik von Flüssigkristallen profitieren.

Für die Bekanntschaft und sein Interesse möchte ich mich bei Herrn Prof. Fan bedanken.

Peter Brommer, als Zimmernachbar die erste Anlaufstation für Fragen, danke ich für die geduldigen Antworten.

Bedanken möchte ich mich auch bei allen bis jetzt noch nicht genannten Institutskollegen für ihre Hilfe, Rat, Zusammenarbeit, Interesse, ...:

Michael Engel, Frohmut Rösch, Stephen Hocker, Christoph Rudhart, Gunther Schaaf, Dr. Johannes Roth, Dr. Franz Gähler und auch der ganzen Arbeitsgruppe Schaefer.

Ganz besonderen Dank gilt meinen Eltern für ihre menschliche und finanzielle Unterstützung während all der Jahre, und für die Freiheit die sie mir lassen.

Meinem Bruder danke ich dafür, dass er für mich da ist, wenn ich ihn brauche.

Bei meinen Freunden, die ich an der Universität Stuttgart und der University of Massachusetts, Amherst kennengelernt habe, möchte ich mich auch bedanken.

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

Stuttgart, im Juli 2003

Christof Walz