

# Charakterisierung von Schraubendislokationen in Quasikristallen

Bachelorarbeit aus der Physik

Vorgelegt von  
**Katharina Lenk**  
17. August 2017

Institut für Theoretische Physik I  
Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg



Betreuer: Prof. Dr. Michael Schmiedeberg



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Grundlegende Begriffe</b>	<b>4</b>
2.1	Periodische Kristalle und Quasikristalle . . . . .	4
2.2	Dislokationen in periodischen Kristallen . . . . .	9
2.3	Dislokationen in Quasikristallen . . . . .	11
<b>3</b>	<b>Schraubendislokationen in dreidimensionalen Quasikristallen</b>	<b>14</b>
3.1	Schraubendislokationen in quasiperiodisch gestapelten Schichten . . .	14
3.1.1	Periodisch gestapelte Schichten mit Schraubendislokation . . .	14
3.1.2	Mathematische Beschreibung quasiperiodisch gestapelter Schichten . . . . .	19
3.1.3	Quasiperiodisch gestapelte Schichten mit Schraubendislokation in der Beschreibung als Ebenenschar . . . . .	20
3.1.4	Dichtefunktion quasiperiodisch gestapelter Schichten mit Schraubendislokation . . . . .	24
3.2	Schraubendislokationen in ikosaedrigen Quasikristallen . . . . .	28
3.2.1	Mathematische Beschreibung ikosaedrischer Quasikristalle . . .	28
3.2.2	Burgers-Vektor und Dislokationslinie einer Schraubendislokation im ikosaedrigen Quasikristall . . . . .	31
3.2.3	Charakterisierung des defektfreien ikosaedrigen Quasikristalls	33
3.2.4	Effekt einer Schraubendislokation auf die Struktur des ikosaedrigen Quasikristalls . . . . .	35
<b>4</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>48</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>50</b>

# Kapitel 1

## Einleitung

Am 8. April 1982 machte der israelische Wissenschaftler Dan Shechtman eine Entdeckung, die eines der grundlegenden Prinzipien der Kristallographie infrage stellte. Bei der Untersuchung einer schnell abgekühlten Aluminium-Mangan-Legierung mit dem Elektronenmikroskop erhielt er Beugungsbilder, die 10-zählige Symmetrie aufwiesen (siehe [21]). Dies widersprach der als kristallographische Restriktion bekannten Grundannahme, dass kristalline Festkörper nur 1-, 2-, 3-, 4- oder 6-zählige Drehachsen besitzen können. Jegliche Versuche, seine Entdeckung als bloßes Artefakt - wie etwa durch Zwillingsbildung im Kristall beim schnellen Kühlprozess - zu erklären, scheiterten jedoch. So führte sie nicht nur zu einer neuen Definition des Kristallbegriffes, sondern eröffnete darüber hinaus ein neues Gebiet der Kristallographie, das sich mit diesen neu entdeckten Kristallen mit "verbotener" Symmetrie, den sogenannten Quasikristallen, beschäftigt. Für seine Entdeckung erhielt Dan Shechtman den Nobelpreis für Chemie 2011 (vgl. [8]).

Seit 1982 wurden zahlreiche weitere Materialien entdeckt, die ebenfalls eine quasikristalline Phase besitzen. Auch deren Eigenschaften wurden umfassend untersucht. So erwiesen sich intermetallische Quasikristalle beispielsweise als besonders hart und spröde. Zudem besitzen sie ungewöhnliche thermische und elektronische Transporteigenschaften und haben eine geringe Oberflächenenergie, was sie besonders unempfindlich gegenüber Korrosion und Adhesion macht (vgl. [14]).

Die Eigenschaften kristalliner Festkörper werden häufig nicht nur durch ihre Idealstruktur, sondern auch durch die im Realkristall auftretenden Defekte bestimmt (vgl. [4, S. 299]). Eine wichtige Klasse solcher Kristallbaufehler sind sogenannte Dislokationen. Sie beeinflussen beispielsweise die plastische Verformbarkeit eines Materials (vgl. [2]) und spielen eine wesentliche Rolle beim Schmelzen zweidimensionaler periodischer Kristalle (siehe z.B. [16]). Auch in Quasikristallen können Dislokationen auftreten. Nach [9] wurden dazu bereits wenige Monate nach dem Bekanntwerden der ikosaedrigen Phase die ersten theoretischen Betrachtungen von Levine et al. in [13] und die ersten experimentellen Beobachtungen durch Hiraga und Hirabayashi 1987 in [10] veröffentlicht. Aufgrund der fehlenden Translationssymmetrie ergeben sich im Vergleich zu periodischen Kristallen jedoch einige Besonderheiten.

Gegenstand der vorliegenden Arbeit sind die Auswirkungen von Schraubendislokationen auf die Struktur dreidimensionaler Quasikristalle. Dabei handelt es sich um eine besondere Art von Dislokationen, die in periodischen Kristallen zu schrau-

benförmigem Wachstum führen können. In Kapitel 2 werden zunächst einige grundlegende Begriffe und Konzepte eingeführt, die bei der Behandlung von Dislokationen in Quasikristallen von Bedeutung sind. Kapitel 3 stellt den Hauptteil der Arbeit dar und beinhaltet die Betrachtungen zum Thema Schraubendislokationen in dreidimensionalen Quasikristallen. Dabei wird zunächst ein einfaches Modellsystem quasiperiodisch gestapelter Schichten mit Schraubendislokation und dessen Besonderheiten gegenüber dem Fall periodisch angeordneter Schichten behandelt, bevor anhand einiger Beispiele genauer auf die Auswirkungen von Schraubendislokationen auf die Struktur ikosaedrischer Quasikristalle eingegangen wird. Für die Untersuchungen werden auch graphische Darstellungen von Kristallschnitten herangezogen. Kapitel 4 beinhaltet abschließend eine kurze Zusammenfassung der Ergebnisse und soll zudem auf mögliche weiterführende Studien hinweisen. Zur Erstellung der in dieser Arbeit enthaltenen Abbildungen wurde, sofern keine andere Quelle angegeben, das Computeralgebrasystem SageMath (Version 7.4) oder GNU Octave (Version 4.0.0) verwendet.

# Kapitel 2

## Grundlegende Begriffe

### 2.1 Periodische Kristalle und Quasikristalle

Bis zur Entdeckung der Quasikristalle galt ein Körper genau dann als Kristall, wenn er aus einer periodischen Anordnung identischer Einheitszellen aufgebaut ist. Seit 1992 wird der Begriff Kristall allgemeiner definiert und umfasst alle Materialien mit diskreten Intensitätsmaxima im Beugungsbild (vgl. [8]).

Kristalle, welche zusätzlich die ursprüngliche Definition erfüllen, werden als periodische Kristalle bezeichnet. Sie müssen demnach aus der Translation einer einzigen Einheitszelle hervorgehen, die von  $D$  Vektoren  $\mathbf{t}_n \in \mathbb{R}^n$  ( $n = 1, 2, \dots, D$ ) aufgespannt wird, wobei  $D$  die Dimension des betrachteten Systems bezeichnet. Somit lässt sich jeder Gitterpunkt  $\mathbf{r}$  darstellen als

$$\mathbf{r} = \sum_{n=1}^D m_n \mathbf{t}_n \quad (2.1)$$

wobei die Koeffizienten  $m_n$  ganzzahlig sind (siehe z.B. [6, S.6], [20, S.35], [3, S.13]). Jeder Gitterpunkt kann dabei entweder mit einem einzelnen Atom bzw. Molekül oder mit einer festen Atom- bzw. Molekülanordnung dekoriert werden. Das gesamte Kristall-Gitter  $\mathcal{L}$  umfasst nach [6, S.6] die Menge aller Gitterpunkte

$$\mathcal{L} := \left\{ \mathbf{r} \in \mathbb{R}^D \mid \mathbf{r} = \sum_{n=1}^D m_n \mathbf{t}_n \right\} \quad (2.2)$$

mit  $m_n \in \mathbb{Z}$ . Zudem ist es möglich, den Kristall mithilfe einer Dichtefunktion  $\rho(\mathbf{x})$  darzustellen, welche die Periodizität des Gitters besitzt und für die somit gilt:

$$\rho(\mathbf{x}) = \rho(\mathbf{x} + \mathbf{r}) \quad (2.3)$$

für beliebige  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^D$  und  $\mathbf{r} \in \mathcal{L}$  (vgl. [7, S.5f]). Wie jede periodische Funktion lässt sich diese auch als Fourierreihe entwickeln, was folgende Darstellung ermöglicht:

$$\rho(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{G} \in \mathcal{L}_R} \rho_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{x}) \quad (2.4)$$

Dabei bezeichnet  $\rho_{\mathbf{G}}$  den jeweiligen Fourierkoeffizienten und  $\mathcal{L}_R$  das reziproke Gitter (vgl. [6, S.18]). Dieses beinhaltet alle reziproken Gittervektoren

$$\mathbf{G} = \sum_{n=1}^D k_n \mathbf{g}_n \quad (k_n \in \mathbb{Z}) \quad (2.5)$$

welche durch folgende Relation mit den Gittervektoren des Realraum-Gitters  $\mathcal{L}$  verknüpft sind (vgl. [6, S.15]):

$$\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{t}_j = 2\pi\delta_{ij} \quad (2.6)$$

Neben Translationssymmetrie können Kristalle auch gewisse Rotationssymmetrien aufweisen. Im Falle drei- und zweidimensionaler periodischer Kristalle sind jedoch nur 1-,2-,3-,4- und 6-zählige Drehachsen möglich. Diese Regel wird auch als kristallographische Restriktion bezeichnet (vgl. [20, S.7]).

Seit der Entdeckung der ikosaedrischen Phase einer Al-Mn-Legierung durch Dan Shechtman im Jahre 1982 und deren Veröffentlichung im Jahre 1984 in [21] ist jedoch bekannt, dass auch Materialien anderer Rotationssymmetrien mit diskreten Intensitätsmaxima im Beugungsbild existieren. Diese können im Gegensatz zu periodischen Kristallen nicht durch Translation einer einzigen Einheitszelle erzeugt werden, sondern sind in der Regel aus zwei oder mehr verschiedenen Kacheln aufgebaut. Dies gilt auch für Quasikristalle. Bisher gibt es noch keine einheitliche Definition des Begriffs Quasikristall. Zumeist bezieht er sich jedoch auf Kristalle mit nicht-kristallographischen Rotationssymmetrien, die zwar keine Translationssymmetrie, aber dennoch eine Fernordnung besitzen (vgl. [14]).

Ein einfaches Beispiel für einen eindimensionalen Quasikristall ist die sogenannte Fibonacci-Kette. Die Fibonacci-Kette ist eng mit der Fibonacci-Folge verknüpft, die Leonardo da Pisa (alias Fibonacci) um 1202 in rekursiver Form aufgestellt haben soll, um das Wachstum einer Kaninchen Population zu beschreiben (vgl. [20, S. 109]). Sie ist aus zwei Segmenten aufgebaut, deren Längenverhältnis dem goldenen Schnitt  $\tau$  entspricht, welcher gegeben ist durch

$$\tau = \frac{1 + \sqrt{5}}{2}. \quad (2.7)$$

Diese Segmente sind zwar nach einem festen Schema angeordnet, bilden aber trotzdem keine periodische Abfolge. Abschnitt 3.1.2 enthält genauere Erläuterungen zur Konstruktion einer Fibonacci-Kette. Ein zweidimensionales Beispiel eines Quasikristalls ist die sogenannte Penrose-Parkettierung. Sie ist aus zwei unterschiedlichen, rautenförmigen Kacheln aufgebaut, die gemäß fest vorgegebener Regeln aneinandergesetzt werden (siehe Abbildung 2.1). Weitere Informationen dazu befinden sich beispielsweise in [20, Kapitel 6]. Auch ikosaedrische Quasikristalle lassen sich mithilfe von Kacheln mit Legeregeln erzeugen (vgl. [12]). Eine mögliche Wahl für die Form der dreidimensionalen Kacheln ist in Abbildung 2.2 dargestellt.

Ähnlich wie bei periodischen Kristallen lässt sich die Dichte von Quasikristallen in Form einer ortsabhängigen Funktion  $\rho(\mathbf{x})$  darstellen. Diese ist zwar nicht periodisch, kann als quasiperiodische Funktion aber dennoch wie in Gleichung (2.4) als Fourierreihe entwickelt werden. Es ist jedoch zu beachten, dass die reziproken Gittervektoren aufgrund der unterschiedlichen Einheitszellen nun nicht mehr aus einem

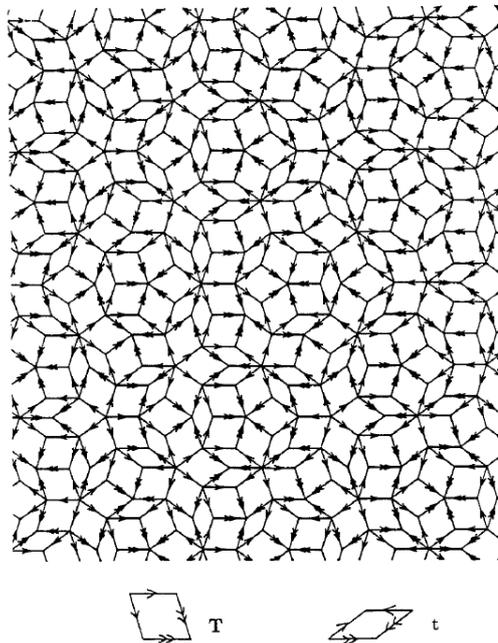


Abbildung 2.1: Die Penrose-Parkettierung (oben) setzt sich aus zwei verschiedenen, rautenförmigen Kacheln (unten) zusammen. Diese werden entsprechend der an den Kanten befindlichen Markierungen aneinandergesetzt. (Abbildung aus [11])

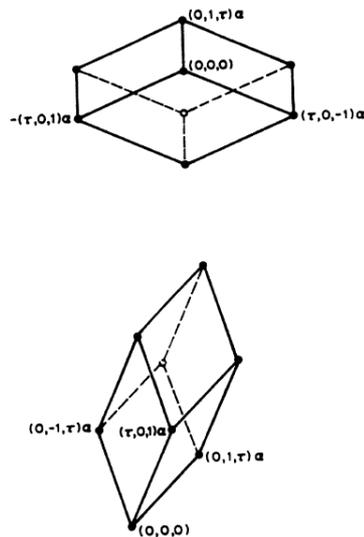


Abbildung 2.2: Die hier gezeigten Rhomboeder können zum Aufbau eines ikosaedrischen Quasikristalls verwendet werden. Das Verhältnis ihrer Volumina entspricht der goldenen Zahl  $\tau$ . (Abbildung aus [12])

Satz von  $D$  Vektoren  $\{\mathbf{g}_n\}$  gebildet werden können. Stattdessen sind  $n_i D$  Vektoren erforderlich, wobei  $n_i$  die Anzahl der unabhängigen Längenskalen im Kristall angibt. Somit lässt sich jeder reziproke Gittervektor schreiben als

$$\mathbf{G} = \sum_{m=1}^{n_i D} k_m \mathbf{g}_m \quad (2.8)$$

mit ganzzahligen Koeffizienten  $k_m$  (vgl. [22]).

Neben der Konstruktion aus unterschiedlichen Kacheln können Quasikristalle auch mithilfe der Projektionsmethode erzeugt werden. Wie beispielsweise in [7, S.19-20] und [20, S.54-58] beschrieben, wird dabei eine Teilmenge von Punkten eines periodischen Gitters in einem höherdimensionalen Hyperraum auf den physikalischen Raum projiziert. Bei geeigneter Wahl der Menge der projizierten Punkte und der relativen Orientierung des physikalischen Raumes zum Hyperraum-Gitter erhält man so ein quasiperiodisches Gitter im physikalischen Raum. Die typische Vorgehensweise zur Konstruktion eines  $D$ -dimensionalen Quasikristalls ist dabei folgendermaßen: Zunächst wird in einem  $N$ -dimensionalen Hyperraum mit  $N > D$  ein  $N$ -dimensionales periodisches Gitter festgelegt. Meist wird dabei ein kubisches Gitter verwendet. Anschließend wird die Orientierung des physikalischen Raumes  $E^{\parallel}$  gewählt. Dieser stellt im Hyperraum eine  $D$ -dimensionale Hyperfläche dar und muss bezüglich der Basisvektoren des Hyper-Gitters eine irrationale Steigung besitzen. Andernfalls erhält man kein quasiperiodisches, sondern ein periodisches Muster. Das orthogonale Komplement von  $E^{\parallel}$  wird im Folgenden als Orthogonalraum  $E^{\perp}$  bezeichnet. Nun gilt es, die Menge der zu projizierenden Punkte festzulegen. Dafür wird ein sogenanntes Akzeptanzfenster  $\bar{A}$  definiert, das im Orthogonalraum liegt. Die kanonische Wahl für dieses Akzeptanzfenster ist die orthogonale Projektion der kubischen Einheitszelle des Hyper-Gitters auf  $E^{\perp}$ . Schließlich werden alle Punkte des Hyper-Gitters auf den physikalischen Raum  $E^{\parallel}$  projiziert, deren orthogonale Projektion auf  $E^{\perp}$  innerhalb des Akzeptanzfensters  $\bar{A}$  liegt. Abbildung 2.3 veranschaulicht die Erzeugung einer Fibonacci-Kette durch Projektion eines zweidimensionalen Quadratgitters auf den eindimensionalen physikalischen Raum mit der Steigung  $\tau$ .

Häufig wird statt des soeben beschriebenen Projektionsformalismus auch eine Schnittmethode verwendet. Genauere Erläuterungen hierzu können u.a. [7, S.17-19] entnommen werden. Bei dieser Methode werden die Gitterpunkte des Hyper-Gitters mit Atomflächen  $A$  dekoriert, welche parallel zum Orthogonalraum  $E^{\perp}$  liegen. Das quasiperiodische Gitter im physikalischen Raum  $E^{\parallel}$  besteht dann aus dessen Schnittpunkten mit den Atomflächen  $A$ . Entspricht die Form der Atomflächen  $A$  der Form des Akzeptanzfensters  $\bar{A}$  des Projektionsformalismus, so sind beide Methoden äquivalent. Die Methode der Atomflächen zur Konstruktion einer Fibonacci-Kette wird in Abbildung 2.4 veranschaulicht.

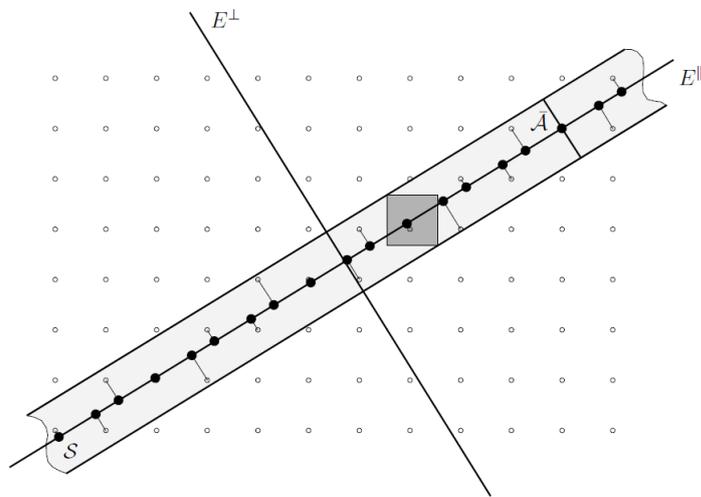


Abbildung 2.3: Eine eindimensionale Fibonacci-Kette wird mithilfe der Projektionsmethode konstruiert. Alle zu projizierenden Punkte liegen innerhalb eines Streifens, der durch das Akzeptanzfenster  $\bar{A}$  definiert ist. (Abbildung aus [7])

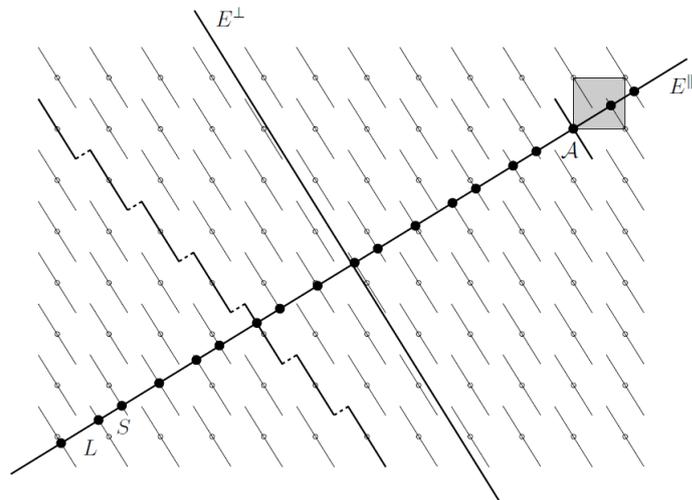


Abbildung 2.4: Eine eindimensionale Fibonacci-Kette wird mithilfe der Methode der Atomflächen konstruiert. Die Atomflächen  $A$  entsprechen in Form und Größe dem Akzeptanzfenster in Abb. 2.3. (Abbildung aus [7])

## 2.2 Dislokationen in periodischen Kristallen

Im vorhergehenden Kapitel wurden ausschließlich ideale Kristalle betrachtet. In der Realität sind Kristalle jedoch selten vollkommen defektfrei anzutreffen. Dabei können Anzahl und Art der Defekte einen wesentlichen Einfluss auf die physikalischen Eigenschaften des Festkörpers haben. Grundsätzlich lassen sich Defekte dreidimensionaler Kristalle in drei Gruppen einteilen. Die erste Gruppe umfasst alle sogenannten Punktdefekte, wie etwa Fremdbausteine oder Leerstellen. Die anderen beiden beinhalten alle Linien- bzw. Flächendefekte. Typische Flächendefekte sind beispielsweise Stapelfehler, Kleinwinkelkorngrenzen oder Zwillingsgrenzen (vgl. [4, S.299]).

Im Folgenden werden sogenannte Dislokationen, auch Versetzungen genannt, genauer betrachtet. Dabei handelt es sich um Liniendefekte. Das Konzept einer allgemeinen Dislokation in einem periodischen Kristall lässt sich anhand des sogenannten Volterra-Prozesses beschreiben. Dabei wird zunächst von einem idealen Kristall ausgegangen. Dieser wird entlang einer beliebigen Ebene zerschnitten, welche durch die Dislokationslinie  $L$  begrenzt wird. Die dabei entstandenen Schnittflächen können nun um einen beliebigen Gittervektor gegeneinander verschoben und wieder zusammengefügt werden. Abschließend werden alle Lücken zwischen den Schnittflächen mit defektfreiem Material ausgefüllt, bzw. alles überschüssige Material entfernt. Da die Verschiebung der beiden Schnittflächen um einen Vektor des Kristallgitters durchgeführt wurde, ist der so entstandene Kristall außerhalb der Dislokationslinie  $L$  abgesehen von kontinuierlichen Deformationen vollkommen defektfrei. Den Verschiebungsvektor bezeichnet man als Burgers-Vektor  $\mathbf{b}$ . Tatsächlich lässt sich eine Dislokation sogar eindeutig durch ihre Dislokationslinie  $L$  und ihren Burgers-Vektor  $\mathbf{b}$  charakterisieren. Die genaue Wahl der Ebene, entlang der der Kristall zerschnitten wird, ist dabei irrelevant (vgl. [3, S.190 f]).

Es können prinzipiell zwei grundlegende Arten von Dislokationen unterschieden werden, aus denen sich alle Versetzungen zusammensetzen lassen. Die erste Art wird als Stufenversetzung bezeichnet. Bei einer reinen Stufenversetzung steht der Burgers-Vektor senkrecht zur Versetzungslinie. Ein Beispiel ist in Abbildung 2.5 dargestellt. Wie sich darin erkennen lässt, kann eine Stufenversetzung auch als das Einfügen bzw. Entfernen einer Halbebene im idealen Kristallgitter aufgefasst werden. Die Versetzungslinie liegt dann dort, wo die Halbebene endet. Die zweite Art bezeichnet man als Schraubenversetzung. Bei einer reinen Schraubenversetzung liegt der Burgers-Vektor parallel zur Dislokationslinie. Somit ergibt sich ein Kristall dessen Ebenen sich ähnlich einer Wendeltreppe um die Defektlinie winden (vgl. [4, S.301 f]). Abbildung 2.6 zeigt eine schematische Darstellung einer solchen Schraubenversetzung.

Die Behandlung von Dislokationen im Rahmen der Elastizitätstheorie erfolgt anhand eines Verschiebungsfeldes  $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ , welches die Deformation des Festkörpers am Ort  $\mathbf{x}$  beschreibt. Der Kristall wird hierbei als kontinuierliches Medium aufgefasst. Der Burgers-Vektor  $\mathbf{b}$  entspricht gerade der Summe aller Verschiebungen  $\mathbf{u}(\mathbf{x})$  entlang eines beliebigen, geschlossenen Weges  $\mathcal{C}$  um den Versetzungskern, sodass gilt (vgl. [3, S.201-203]):

$$\oint_{\mathcal{C}} d\mathbf{u} = \oint_{\mathcal{C}} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial s} ds = \mathbf{b} \quad (2.9)$$

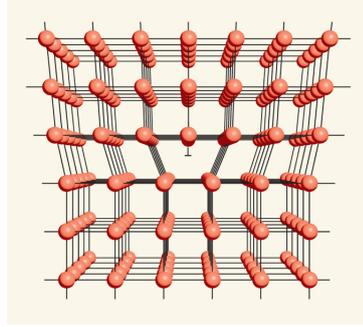


Abbildung 2.5: Stufendislokation in einem kubischen Kristallgitter (Abbildung aus [15])

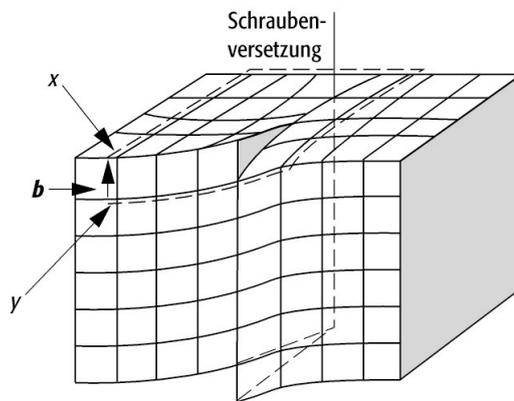


Abbildung 2.6: Darstellung einer reinen Schraubenversetzung in einem periodischen Kristall (Abbildung aus [1])

Zur Konstruktion einer Versetzung in zwei Dimensionen oder einer geraden Versetzung in drei Dimensionen bietet sich laut [3, S.195] daher beispielsweise ein Verschiebungsfeld der Form

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{b} \frac{\theta}{2\pi} \quad (2.10)$$

an, bei der linear im Polarwinkel  $\theta$  um den Versetzungskern interpoliert wird.

## 2.3 Dislokationen in Quasikristallen

Auch in Quasikristallen können Dislokationen auftreten. Allerdings gestaltet sich deren Betrachtung etwas komplizierter als in periodischen Kristallen. Denn aufgrund der fehlenden Translationssymmetrie ermöglicht ein reines Verschiebungsfeld  $\mathbf{u}$  der Form (2.10) kein defektfreies Zusammenfügen des Kristalls nach einem vollen Umlauf um den Versetzungskern. Für eine volle Dislokation im Quasikristall sind daher zusätzliche Änderungen der relativen Positionen der Gitterpunkte nötig. Diese werden auch als phasonische Flips bezeichnet und können mithilfe eines phasonischen Verschiebungsfeldes  $\mathbf{v}(\mathbf{x})$  beschrieben werden (vgl. [19]). Zur besseren Unterscheidbarkeit wird  $\mathbf{u}(\mathbf{x})$  im Folgenden als phononisches Verschiebungsfeld bezeichnet.

Um zu verstehen, welche Verschiebungsfelder ein direktes Zusammenfügen des Kristalls nach einem vollen Umlauf um den Versetzungskern erlauben, ist es sinnvoll, zunächst die Dichtefunktion  $\rho(\mathbf{x})$  zu betrachten. Nach [19] fordert man für die phononischen Verschiebungen  $\Delta\mathbf{u}$  und phasonischen Verschiebungen  $\Delta\mathbf{v}$ :

$$\rho_{\mathbf{v}=\Delta\mathbf{v}}(\mathbf{x} - \Delta\mathbf{u}) = \rho_{\mathbf{v}=0}(\mathbf{x}) \quad (2.11)$$

Eine unmittelbare Lösung der Gleichung ist an dieser Stelle noch nicht möglich, da die genaue Wirkung der phasonischen Verschiebung  $\Delta\mathbf{v}$  bisher nicht näher spezifiziert wurde. Hier können die Projektionsmethode bzw. die Methode der Atomflächen Abhilfe schaffen, welche in Kapitel 2.1 eingeführt wurden. Diese machen deutlich, dass sich ein Quasikristall auch als Projektion bzw. Schnitt eines höherdimensionalen periodischen Gitters auffassen lässt. Wie jedes periodische Gitter bleibt dieses invariant unter Verschiebung um einen beliebigen Gittervektor  $\mathbf{r}$  der Form (2.1). Sei  $\Delta\boldsymbol{\gamma}$  nun eine solche Verschiebung, dann gilt für die  $N$ -dimensionale Dichte offensichtlich

$$\rho^{(N)}(\mathbf{x}^{(N)}) = \rho^{(N)}(\mathbf{x}^{(N)} - \Delta\boldsymbol{\gamma}) \quad (2.12)$$

wobei  $\mathbf{x}^{(N)}$  einen beliebigen Ortsvektor im  $N$ -dimensionalen Hyperraum bezeichnet. Dass diese Gleichung tatsächlich erfüllt wird, lässt sich auch durch Ausschreiben der Dichtefunktion als Fourierreihe wie in (2.4) und Nutzung der Relation (2.6) zwischen reziprokem und direktem Kristallgitter überprüfen.

Die Invarianz des  $N$ -dimensionalen Hyper-Gitters unter der Verschiebung  $\Delta\boldsymbol{\gamma}$  ist jedoch nur eine Bedingung, die erfüllt werden sollte. Zusätzlich fordert man, dass sich das ursprüngliche und das neu erzeugte Quasikristall-Gitter in der selben LI-Klasse (engl. *local indistinguishability class* oder *local isomorphism class*, siehe dazu [7, S.33]) befinden.

Zwei Quasikristalle sind in der selben LI-Klasse, wenn sie lokal ununterscheidbar sind. Sie sind genau dann lokal ununterscheidbar, wenn es für jeden Punkt  $\mathbf{P}$  des einen Gitters und jede Strecke  $l$  eine Translation des anderen Gitters gibt, so dass die beiden Gitter innerhalb einer Kugel mit Radius  $l$  um  $\mathbf{P}$  übereinstimmen (vgl. [18, S.21]). Befinden sich zwei Quasikristalle in der selben LI-Klasse, so besitzen sie insbesondere auch die gleiche freie Energie und das gleiche Beugungsmuster (vgl. [3, S.189]). Bei ikosaedrigen Quasikristallen, welche durch Projektion eines 6-dimensionalen Hyper-Gitters auf den physikalischen Raum erzeugt werden, führen alle möglichen Verschiebungen  $\Delta\boldsymbol{\gamma}$  zu Strukturen der selben LI-Klasse (vgl. [3, S.161]).

Der 6-dimensionale Verschiebungsvektor  $\Delta\boldsymbol{\gamma}$  lässt sich somit in einen dreidimensionalen phononischen Anteil  $\Delta\mathbf{u} = \Pi^{\parallel}(\Delta\boldsymbol{\gamma}) \in E^{\parallel}$  und einen dreidimensionalen phasonischen Anteil  $\Delta\mathbf{v} = \Pi^{\perp}(\Delta\boldsymbol{\gamma}) \in E^{\perp}$  aufteilen, wobei  $\Pi^{\parallel}$  und  $\Pi^{\perp}$  die orthogonalen Projektionsoperatoren auf den physikalischen Raum  $E^{\parallel}$  bzw. den Orthogonalraum  $E^{\perp}$  bezeichnen. Der phononische Anteil, welcher ausschließlich im physikalischen Raum liegt führt zu einfachen Translationen des Gitters, während der phasonische Anteil zu Änderungen der relativen Positionen der Gitterpunkte führt. Da  $E^{\parallel}$  eine irrationale Steigung bezüglich der Basis des periodischen Hyper-Gitters besitzt, ist das Auftreten eines rein phononischen oder phasonischen Burgersvektors bei einer vollen Dislokation nicht möglich. In ikosaedrischen Quasikristallen bleibt das 3-dimensionale Gitter also unter allen Verschiebungen  $\Delta\boldsymbol{\gamma}$  invariant, die das 6-dimensionale Hypergitter unverändert lassen. Somit lässt sich ein 6-dimensionaler Burgers-Vektor  $\mathbf{b}^{(6)}$  definieren, für den gilt

$$\mathbf{b}^{(6)} = \Delta\boldsymbol{\gamma} = \mathbf{t}^{(6)} \quad (2.13)$$

mit beliebigem Vektor  $\mathbf{t}^{(6)}$  aus dem direkten 6-dimensionalen Hyper-Gitter. Die zugehörige 6-dimensionale Dichtefunktion lässt sich nun schreiben als

$$\rho_{\boldsymbol{\gamma}=\Delta\boldsymbol{\gamma}}^{(6)}(\mathbf{x}^{(6)}) = \rho^{(6)}(\mathbf{x}^{(6)} - \Delta\boldsymbol{\gamma}) = \sum_{\mathbf{G}^{(6)} \in \mathcal{L}_R^{(6)}} \rho_{\mathbf{G}^{(6)}} \exp(i\mathbf{G}^{(6)} \cdot (\mathbf{x}^{(6)} - \Delta\boldsymbol{\gamma})) \quad (2.14)$$

Durch die Verschiebung  $\Delta\boldsymbol{\gamma}$  ist also ein zusätzlicher Phasenterm  $\Delta\phi_{\mathbf{G}^{(6)}}$  hinzugekommen, welcher sich folgendermaßen umformen lässt:

$$\Delta\phi_{\mathbf{G}^{(6)}} = \mathbf{G}^{(6)} \cdot \Delta\boldsymbol{\gamma} = \mathbf{G}^{\parallel} \cdot \Delta\mathbf{u} + \mathbf{G}^{\perp} \cdot \Delta\mathbf{v} \quad (2.15)$$

mit den dreidimensionalen Komponenten des 6-dimensionalen reziproken Gittervektors  $\mathbf{G}^{\parallel} = \Pi^{\parallel}(\mathbf{G}^{(6)})$  im physikalischen Raum und  $\mathbf{G}^{\perp} = \Pi^{\perp}(\mathbf{G}^{(6)})$  im Orthogonalraum. Dieser Phasenterm kann auch als Teil der komplexen Phase der Fourierkoeffizienten  $\rho_{\mathbf{G}^{(6)}} = |\rho_{\mathbf{G}^{(6)}}| \exp(i\phi_{\mathbf{G}^{(6)}})$  aufgefasst werden. Mit  $\phi_{\mathbf{G}^{(6)}} = \phi_{\mathbf{G}^{(6)},0} - \Delta\phi_{\mathbf{G}^{(6)}}$  erhält man also

$$\rho_{\boldsymbol{\gamma}=\Delta\boldsymbol{\gamma}}^{(6)}(\mathbf{x}^{(6)}) = \sum_{\mathbf{G}^{(6)} \in \mathcal{L}_R^{(6)}} |\rho_{\mathbf{G}^{(6)}}| \exp(i\mathbf{G}^{(6)} \cdot \mathbf{x}^{(6)} + i\phi_{\mathbf{G}^{(6)},0} - i\Delta\phi_{\mathbf{G}^{(6)}}) \quad (2.16)$$

Der Übergang von der 6-dimensionalen Beschreibung der Dichtefunktion zur 3-dimensionalen Beschreibung erfolgt nun, analog zu den Betrachtungen in [3, S. 187] für ein 5-dimensionales Hyper-Gitter, durch Restriktion der  $\mathbf{x}^{(6)}$  auf den physikalischen Raum. Somit erhält man für die dreidimensionale Dichtefunktion

$$\rho_{\mathbf{u},\mathbf{v}}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{G}^{\parallel} \in \mathcal{L}_R} |\rho_{\mathbf{G}^{\parallel}}| \exp(i\mathbf{G}^{\parallel} \cdot \mathbf{x} + i\phi_{\mathbf{G}^{\parallel},0} - i\mathbf{G}^{\parallel} \cdot \mathbf{u} - i\mathbf{G}^{\perp} \cdot \mathbf{v}) \quad (2.17)$$

Führt man nun ein 6-dimensionales, ortsabhängiges Verschiebungsfeld  $\boldsymbol{\gamma}(\mathbf{x}^{(6)})$  ein, so muss für jeden geschlossenen Weg  $\mathcal{C}$  um die Dislokation analog zu Gleichung (2.9) gelten:

$$\oint_{\mathcal{C}} d\boldsymbol{\gamma} = \oint_{\mathcal{C}} \frac{\partial\boldsymbol{\gamma}}{\partial s} ds = \mathbf{b}^{(6)} \quad (2.18)$$

Teilt man den Burgers-Vektor nun wiederum in einen dreidimensionalen phononischen Anteil  $\mathbf{b}^{\parallel} = \Delta \mathbf{u} \in E^{\parallel}$  und einen dreidimensionalen phasonischen Anteil  $\mathbf{b}^{\perp} = \Delta \mathbf{v} \in E^{\perp}$  auf, so erhält man mit Gleichung (2.18) wie auch in [17] angegeben:

$$\oint_{\mathcal{C}} d\mathbf{u} = \oint_{\mathcal{C}} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial s} ds = \mathbf{b}^{\parallel} \quad (2.19a)$$

$$\oint_{\mathcal{C}} d\mathbf{v} = \oint_{\mathcal{C}} \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial s} ds = \mathbf{b}^{\perp} \quad (2.19b)$$

Dabei bezeichnen  $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x})$  und  $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{x})$  die nun ebenfalls ortsabhängigen, dreidimensionalen phononischen bzw. phasonischen Komponenten des Verschiebungsfeldes  $\boldsymbol{\gamma}(\mathbf{x})$ . In Analogie zum periodischen Kristall können  $\mathbf{u}$  und  $\mathbf{v}$  linear um den Versetzungskern interpoliert werden, sodass sich, ähnlich wie in Gleichung (2.10), beispielsweise schreiben lässt:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{b}^{\parallel} \frac{\theta}{2\pi} \quad (2.20a)$$

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \mathbf{b}^{\perp} \frac{\theta}{2\pi} \quad (2.20b)$$

Durch Einsetzen geeigneter Verschiebungsfelder in Gleichung (2.17) erhält man schließlich die Dichtefunktion eines Quasikristalls mit Dislokation.

# Kapitel 3

## Schraubendislokationen in dreidimensionalen Quasikristallen

In diesem Kapitel werden Schraubendislokationen in dreidimensionalen Quasikristallen genauer betrachtet. Während Stufendislokationen in Quasikristallen bereits umfassend untersucht wurden, existiert nur wenig Literatur, welche sich explizit mit der Theorie von Schraubendislokationen in Quasikristallen auseinandersetzt. Dies hängt vermutlich mit der Tatsache zusammen, dass die Betrachtungen häufig vom zweidimensionalen Fall ausgehen. In zwei Dimensionen stellt eine Versetzung jedoch keinen Linien-, sondern einen Punktdefekt dar. Somit kann der Burgers-Vektor niemals parallel zum Versetzungskern verlaufen und es existiert kein zweidimensionales Analogon zur Schraubendislokation. Bei der quasiperiodischen Stapelung mehrerer Schichten ist deren Auftreten jedoch durchaus denkbar. Dieser Fall wird in Kapitel 3.1 genauer beleuchtet. Kapitel 3.2 soll zudem einen Überblick über Schraubendislokationen in ikosaedrischen Quasikristallen bieten.

### 3.1 Schraubendislokationen in quasiperiodisch gestapelten Schichten

#### 3.1.1 Periodisch gestapelte Schichten mit Schraubendislokation

Bevor genauer auf die Beschreibung quasiperiodisch gestapelter Schichten und deren strukturelle Veränderung durch Schraubendislokationen eingegangen wird, erfolgt in diesem Unterkapitel zunächst eine Betrachtung periodisch angeordneter Ebenen, um die Unterschiede der beiden Fälle zu verdeutlichen. Die Ebenen des hier behandelten Systems stehen im defektfreien Zustand senkrecht zur  $z$ -Achse und haben den Abstand  $d$ . Sie lassen sich also als Schar von Ebenen mit Ebenengleichung  $z = z_n$  beschreiben, wobei die periodische Folge  $z_n$  gegeben ist durch

$$z_n = d(n + c) \tag{3.1}$$

mit  $n \in \mathbb{Z}$  und  $c \in \mathbb{R}$ . Liegt kein Defekt vor, so ist der Parameter  $c$  räumlich konstant. Eine Variation dieses Parameters bewirkt eine globale Translation des

Systems. Verändert man  $c$  um eine ganze Zahl, dann entspricht dies einer Gittertranslation, sodass man wieder dasselbe Gitter erhält.

Zur Konstruktion einer Schraubenversetzung muss der Parameter  $c$  positionsabhängig gemacht werden. Die Dislokationslinie verläuft in diesem Beispiel, ebenso wie der Burgers-Vektor, parallel zur  $z$ -Achse. Der Parameter  $c$  wird nun linear im Polarwinkel  $\theta$  um den Versetzungskern variiert, sodass gilt

$$c(\theta) = c(0) + \Delta c \frac{\theta}{2\pi}. \quad (3.2)$$

Um ein Aneinanderfügen der Ebenen nach einem vollen Umlauf um den Versetzungskern zu ermöglichen, muss  $\Delta c$  offensichtlich einer ganzen Zahl entsprechen. Der zugehörige, dreidimensionale Burgers-Vektor lautet:

$$\mathbf{b} = d\Delta c \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \Delta c \in \mathbb{Z}. \quad (3.3)$$

Die Abbildungen 3.1(a) bis (c) zeigen ein System von fünf periodisch gestapelten Schichten im defektfreien Zustand, sowie mit Schraubendislokationen zu zwei verschiedenen Burgers-Vektoren. Die Burgers-Vektoren wurden gemäß Gleichung (3.3) gewählt, sodass die unterschiedlichen Schichten außerhalb des Versetzungskerns stetig ineinander übergehen und eine schraubenförmige Struktur bilden. Da der Parameter  $c$  hier lediglich vom Polarwinkel und nicht vom Radius abhängt, genügt auch ein Auftragen der  $z$ -Koordinaten aller Schichten über dem Winkel  $\theta$ , um die Struktur eindeutig zu charakterisieren. Dies entspricht einem zweidimensionalen Schnitt in Form eines Zylindermantels um die Dislokationslinie. Abbildung 3.2 zeigt die entsprechenden Darstellungen zu den in Abbildung 3.1 veranschaulichten Systemen. Die  $z$ -Koordinate ist hier in Einheiten der Gitterkonstante  $d$  aus Gleichung (3.1) und der Winkel  $\theta$  im Bogenmaß angegeben. Auch aus diesen Plots lässt sich durch Vergleich der Lage der einzelnen Schichten bei  $\theta = 0$  und  $\theta = 2\pi$  ablesen, dass ein stetiges Zusammenfügen nach einem vollen Umlauf um den Versetzungskern möglich ist.

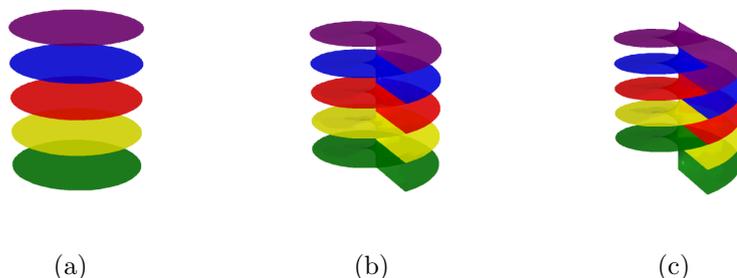
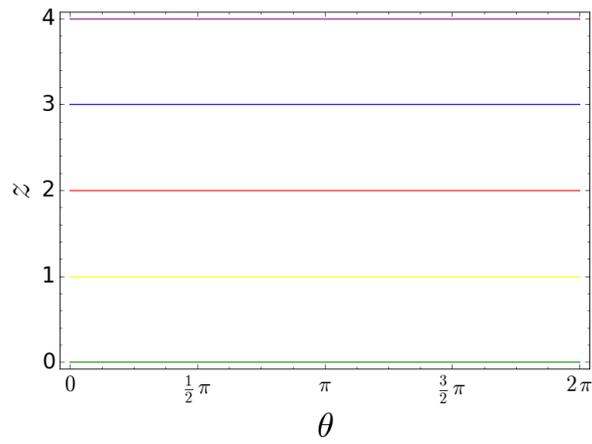
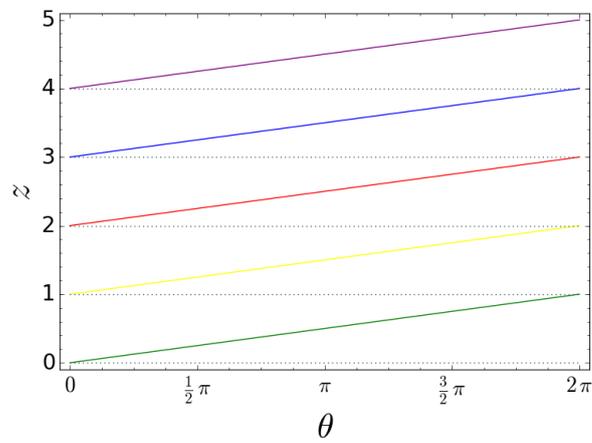


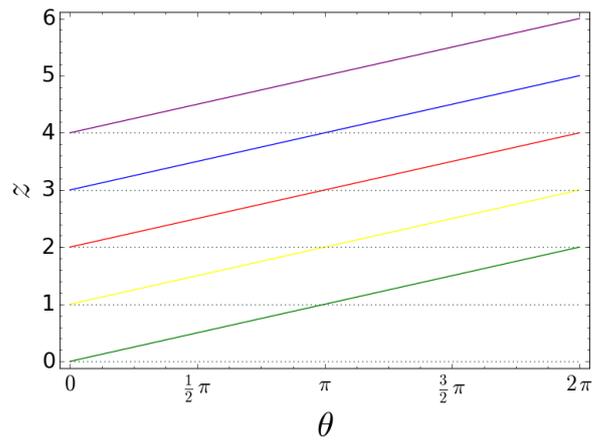
Abbildung 3.1: (a) Ausschnitt aus einem System fünf periodisch gestapelter Ebenen ohne Defekt; (b) Der gleiche Ausschnitt mit Schraubendislokation zum Burgers-Vektor  $\mathbf{b} = d(0, 0, 1)$  im Zentrum; (c) Der gleiche Ausschnitt mit Schraubendislokation zum Burgers-Vektor  $\mathbf{b} = 2d(0, 0, 1)$  im Zentrum



(a)



(b)



(c)

Abbildung 3.2:  $z$ -Koordinaten der Schichten in Einheiten der Gitterkonstante  $d$  in Abhängigkeit des Polarwinkels  $\theta$  in Bogenmaß. Die Diagramme korrespondieren jeweils zu den Darstellungen aus Abbildung 3.1.

Auch eine Beschreibung als Dichtefunktion der Form (2.4) ist möglich. Im Fall des hier betrachteten Systems periodisch gestapelter Schichten reicht ein Basisvektor

$$\mathbf{g} = \frac{2\pi}{d} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

aus, um alle reziproken Gittervektoren  $\mathbf{G}_n = n\mathbf{g}$  ( $n \in \mathbb{Z}$ ) zu bilden, da es in  $z$ -Richtung einem eindimensionalen, periodischen Kristall entspricht. Die zugehörige Dichtefunktion lautet dann

$$\rho(\mathbf{x}) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} |\rho_{\mathbf{G}_n}| \exp(in\mathbf{g} \cdot [\mathbf{x} - \mathbf{u}] + i\phi_{\mathbf{G}_n,0}). \quad (3.5)$$

Unter Verwendung der eulerschen Formel  $\cos(x) = \frac{1}{2}[\exp(ix) + \exp(-ix)]$  lässt sie sich schreiben als

$$\rho(\mathbf{x}) = |\rho_0| + \sum_{n \in \mathbb{N}} 2|\rho_{\mathbf{G}_n}| \cos(n\mathbf{g} \cdot [\mathbf{x} - \mathbf{u}] + \phi_{\mathbf{G}_n,0}). \quad (3.6)$$

Dabei wurde auch ausgenutzt, dass es sich bei der Dichtefunktion um eine reelle Funktion handelt, sodass für die komplexen Fourierkoeffizienten jedes reziproken Gittervektors und dessen reflektierten Bildes die Beziehung  $\rho_{-\mathbf{G}_n} = \overline{\rho_{\mathbf{G}_n}}$  gelten muss. Eine Änderung in  $\mathbf{u}$  bewirkt eine Translation der gesamten Funktion. Entspricht  $\mathbf{u}$  einem Burgers-Vektor der Form (3.3), so erhält man aufgrund der  $2\pi$ -Periodizität des Kosinus denselben Funktionsverlauf wie für  $\mathbf{u} = \mathbf{0}$ . Somit kann  $\mathbf{u}$  als das Verschiebungsfeld der Elastizitätstheorie aufgefasst werden, welches schon in Kapitel 2.2 eingeführt wurde. Eine Schraubendislokation kann nun beispielsweise durch räumliche Variation des Verschiebungsfeldes nach Gleichung (2.10) erzeugt werden.

Für eine direkte, graphische Darstellung der Anordnung müsste nun streng genommen ein Volumenintegral über die Funktion (3.6) ausgeführt werden, da sie lediglich die Dichte in Abhängigkeit des Ortes beschreibt. Geht man jedoch beispielsweise davon aus, dass die Dichtefunktion in  $z$ -Richtung einem Dirac-Kamm entspricht, so kann eine geeignete Dekoration mit Schichten auch auf einfachere Weise gefunden werden. Denn eine Integration führt zu einer Anordnung von Schichten, welche sich genau an den Orten der  $\delta$ -Peaks befinden. Die Periodizität des Dirac-Kamms wird dabei bereits vom ersten Summanden mit  $n = 1$  vorgegeben und die Dirac-Impulse fallen mit den Maxima dieser Kosinus-Funktion zusammen. Um die Position der einzelnen Schichten zu veranschaulichen reicht es daher aus, die Summe bereits nach dem ersten Glied abzurechnen und einen geeigneten Schwellenwert zu wählen. Alle Bereiche, für welche die erhaltenen Funktionswerte oberhalb dieses Schwellenwertes liegen, werden als Schicht aufgefasst. Der Konstante Anteil  $|\rho_0|$  kann dabei entfallen und auch die Summation über die abzählbar unendliche Menge der natürlichen Zahlen ist nicht mehr nötig.

Dies ermöglicht das Erzeugen von Grafiken, die mit den Darstellungen aus Abbildung 3.2 übereinstimmen. Drei Beispiele solcher Grafiken sind in den Abbildungen 3.3(a) bis (c) zu sehen. Es handelt sich hierbei um Schnitte entlang eines Zylindermantels um den Versetzungskern. Da die  $z$ -Koordinate nur von  $\theta$  abhängt ist der

Radius des Zylinders irrelevant für das Ergebnis. Der Schwellenwert wurde auf 95% der maximalen Dichte gesetzt. Alle Bereiche in denen die genäherte Dichtefunktion oberhalb dieses Schwellenwertes liegt wurden blau eingefärbt und repräsentieren die Schichten.

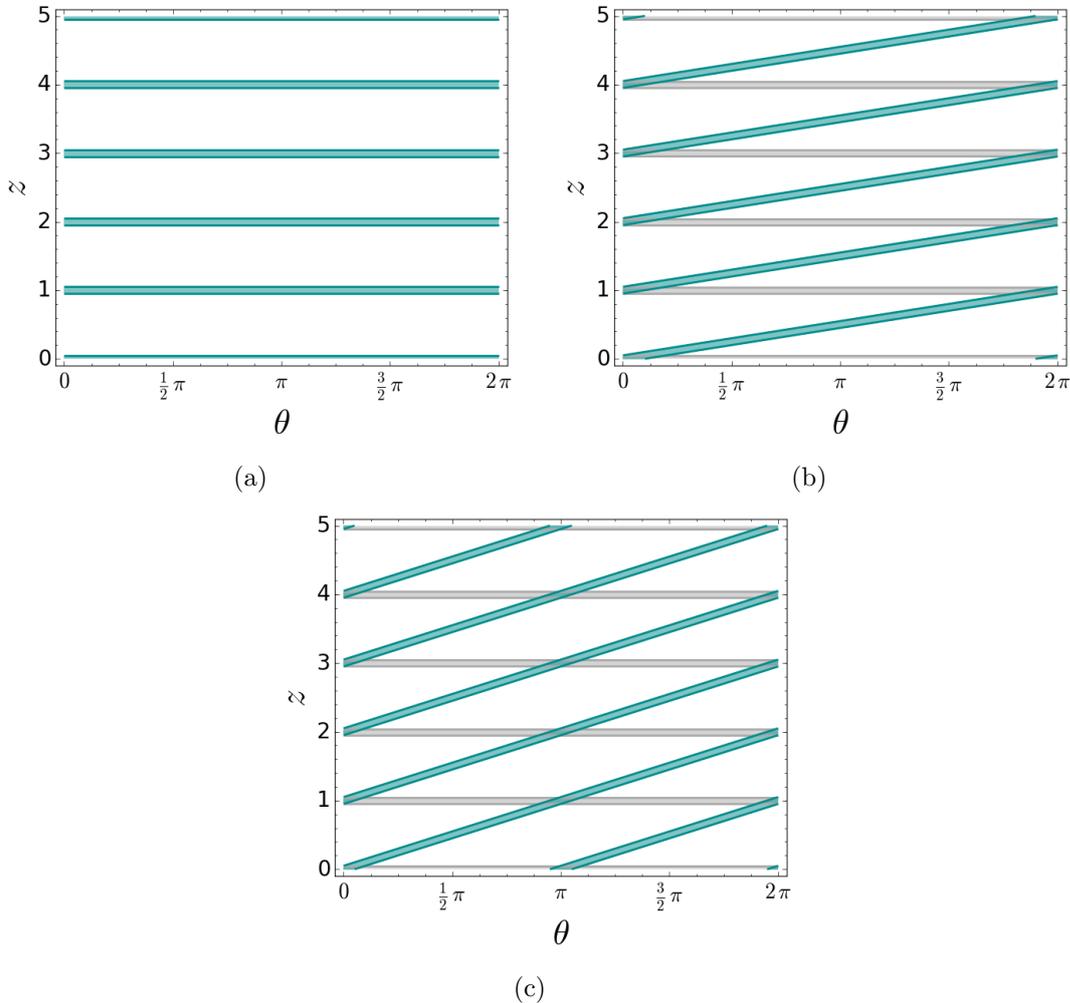


Abbildung 3.3: Zweidimensionale Schnitte entlang eines Zylindermantels durch ein System periodisch gestapelter Schichten: (a) System ohne Defekt; (b) System mit Schraubendislokation zum Burgers-Vektor  $\mathbf{b} = d(0, 0, 1)$  im Zentrum des Zylinders; (c) System mit Schraubendislokation zum Burgers-Vektor  $\mathbf{b} = 2d(0, 0, 1)$  im Zentrum des Zylinders; Die  $z$ -Werte sind analog zu Abbildung 3.2 in Vielfachen von  $d$  angegeben, der Winkel ist im Bogenmaß gemessen. Die Darstellung erfolgte mithilfe der durch ihren ersten Summanden approximierten Dichtefunktion. Alle Bereiche, in denen sie den Schwellenwert überschreitet, wurden blau markiert. Die grauen Bereiche in (b) und (c) markieren die Lage der Schichten im defektfreien System.

### 3.1.2 Mathematische Beschreibung quasiperiodisch gestapelter Schichten

Im Folgenden wird ein einfaches Modellsystem betrachtet, welches aus quasiperiodisch angeordneten, identischen Schichten besteht. Die Dislokationslinie soll dabei senkrecht zu diesen Schichten stehen. Es handelt sich also um eine Struktur, deren Aufbau in einer Dimension einem Quasikristall entspricht. Als Beispiel einer solchen quasiperiodischen Anordnung wird hier eine Fibonacci-Kette herangezogen.

Wie bereits in Abschnitt 2.1 erwähnt, besteht sie aus zwei unterschiedlichen Segmenten mit dem Längenverhältnis  $\tau$ . Diese Segmente entsprechen im hier betrachteten Modellsystem den Abständen zwischen den einzelnen Ebenen. Die Anordnung der Segmente erfolgt dabei gemäß der Ersetzungsregel

$$L \rightarrow LK, K \rightarrow L \quad (3.7)$$

wobei  $L$  das längere und  $K$  das kürzere Segment bezeichnet. Mithilfe dieser Wachstumsregel kann eine Fibonacci-Kette beliebiger Länge erzeugt werden. Startet man mit einem kurzen Segment, so kann der schrittweise Aufbau beispielsweise wie folgt aussehen:

$$\begin{aligned} &K \\ &L \\ &LK \\ &LKL \\ &LKLLK \\ &LKLLKLLK \\ &LKLLKLLKLLK \\ &\dots \end{aligned}$$

(siehe dazu z.B. [20, S.111 f]).

Die Anzahl der Segmente nach  $n$  Schritten entspricht gerade der  $n$ -ten Fibonacci-Zahl.

Außerdem kann eine eindimensionale, quasiperiodische Abfolge nach [22] mithilfe der Gleichungen

$$x_N = N + \alpha + \rho \lfloor N\sigma + \beta \rfloor, \quad N \in \mathbb{N} \quad (3.8)$$

beschrieben werden. Dabei bezeichnet  $\sigma$  eine irrationale Zahl zwischen 0 und 1,  $\rho$  eine positive reelle Zahl und  $\alpha$  und  $\beta$  sind beliebig wählbare, reelle Parameter. Die hier verwendete Abrundungsfunktion  $\lfloor x \rfloor$  einer reellen Zahl  $x$  gibt die größte ganze Zahl kleiner oder gleich  $x$  an. Setzt man nun  $\rho = \sigma = \frac{1}{\tau}$  sowie  $\alpha = a$  und  $\beta = \frac{1}{2} + b$  mit  $a, b \in \mathbb{R}$ , so erhält man die Folge

$$z_n = n + a + \frac{1}{\tau} \left\lfloor \frac{n}{\tau} + \frac{1}{2} + b \right\rfloor \quad (3.9)$$

mit  $n \in \mathbb{N}$ . Dabei handelt es sich um eine weitere Möglichkeit zur Konstruktion einer Fibonacci-Kette. Der Abstand  $z_{n+1} - z_n$  entspricht jeweils entweder der Länge

eines kurzen ( $K$ ) oder eines langen ( $L$ ) Segmentes. Das Modellsystem kann nun als Schar von Ebenen mit den Ebenengleichungen  $z = z_n l$  ( $n \in \mathbb{N}$ ) mit beliebiger Längeneinheit  $l$  aufgefasst werden.

Eine weitere Herangehensweise ist die Projektionsmethode bzw. die Methode der Atomflächen. Mithilfe dieser Methoden kann eine Fibonacci-Kette aus einem zweidimensionalen periodischen Gitter (siehe Kapitel 2.1) erzeugt werden. Sie bietet einen einfachen Weg zur Bestimmung der reziproken Gittervektoren, was eine Beschreibung als Dichtefunktion der Form (2.4) ermöglicht.

Zur Untersuchung der Auswirkungen von Schraubendislokationen auf das oben vorgestellte Modellsystem werden in dieser Arbeit zum einen die Konstruktion als Schar von Ebenen und zum anderen die Darstellung als Dichtefunktion herangezogen.

### 3.1.3 Quasiperiodisch gestapelte Schichten mit Schraubendislokation in der Beschreibung als Ebenenschar

Im Gegensatz zur Struktur periodisch angeordneter Kristallebenen mit Schraubendislokation lässt sich die Struktur quasiperiodisch gestapelter Schichten nicht als Schraube um den Versetzungskern mit einheitlicher Ganghöhe wie in den Abbildungen 3.1(b) und (c) veranschaulichen. Denn aufgrund der unterschiedlichen Abstände zwischen den Ebenen und deren aperiodischer Anordnung lässt sich keine Ganghöhe festlegen, welche zur Verbindung der Schichten nach einem vollen Umlauf um die Dislokationslinie führt. Dennoch können, wie in Kapitel 2.3 erläutert, Burgers-Vektoren gefunden werden, die diese Bedingung erfüllen. Dies wirft die Frage auf, in welcher Weise die Struktur quasiperiodisch gestapelter Schichten durch das Einbringen einer Schraubendislokation beeinflusst wird. Zur Beantwortung dieser Frage wird hier zunächst die Betrachtung als Ebenenschar mit quasiperiodischer Abfolge genauer behandelt.

Die  $z$ -Koordinaten der Ebenen im defektfreien System sind durch Gleichung (3.9) festgelegt. Die Methode zum Einbringen einer Versetzung orientiert sich hier an der Behandlung topologischer Defekte in einem zweidimensionalen Gitter parallel, quasiperiodisch angeordneter Linien durch Socolar, Lubensky und Steinhardt in [22, Abschnitt V.]. Die Schnittpunkte dieses Gitters mit der  $x$ -Achse lassen sich mit Gleichung (3.8) definieren. Im Artikel wird darauf hingewiesen, dass die Parameter  $\alpha$  und  $\beta$  eng mit der phononischen Verschiebung  $\mathbf{u}$  und der phasonischen Verschiebung  $\mathbf{v}$  verbunden sind. Denn eine Änderung des Parameters  $\alpha$  führt zu einer Translation des gesamten Gitters, während eine Variation von  $\beta$  eine Verschiebung einzelner Gitterlinien, also eine Umordnung, bewirkt. Außerdem wird eine mögliche Modifikation von  $\alpha$  und  $\beta$  angegeben, welche das Gitter invariant lässt. Die zugehörige Transformation wird als Umklapp bezeichnet und führt lediglich zur Umnummerierung der Gitterlinien. Dabei werden  $\alpha$  und  $\beta$  jeweils um die Beträge  $\Delta\alpha$  bzw.  $\Delta\beta$  verändert, welche sich laut [22] in folgender Form schreiben lassen:

$$\Delta\alpha = P + Q\rho \quad (3.10a)$$

$$\Delta\beta = P\sigma - Q \quad (3.10b)$$

mit  $P, Q \in \mathbb{Z}$ . Socolar et. al nutzen diese Transformation in oben genannter Quelle

um Stufendislokationen im zweidimensionalen Liniengitter zu erzeugen. Dies erfolgt durch das Einführen winkelabhängiger Parameter  $\alpha(\theta)$  und  $\beta(\theta)$  mit  $\alpha(2\pi) - \alpha(0) = \Delta\alpha$  bzw.  $\beta(2\pi) - \beta(0) = \Delta\beta$ . Der Winkel  $\theta$  bezeichnet hier wie üblich den Polariswinkel um den Versetzungskern.

Dieses Vorgehen wird im Folgenden auf die Erzeugung von Schraubendislokationen im hier untersuchten Modellsystem übertragen. Im Gegensatz zur zweidimensionalen Betrachtung in [22] handelt es sich beim Versetzungskern in diesem dreidimensionalen System jedoch nicht um einen Punkt, sondern um eine Linie. Ihr Verlauf wird in diesem Beispiel parallel zur  $z$ -Achse, also senkrecht zu den Ebenen, gewählt. Dabei werden  $a$  und  $b$  aus Gleichung (3.9) zwischen  $\theta = 0$  und  $\theta = 2\pi$  linear variiert. Die zugehörigen Änderungen  $\Delta a = a(2\pi) - a(0)$  und  $\Delta b = b(2\pi) - b(0)$  müssen sich nach den Gleichungen (3.10) in der Form

$$\Delta a = m_1 \frac{1}{\tau} + m_2 \quad (3.11a)$$

$$\Delta b = -m_1 + m_2 \frac{1}{\tau} \quad (3.11b)$$

mit  $m_1, m_2 \in \mathbb{Z}$  darstellen lassen, um ein lückenloses Zusammenfügen der Ebenen bei  $\theta = 0$  zu ermöglichen.

Wie bereits erwähnt sind diese Parameter mit der phononischen und phasonischen Verschiebung verknüpft. Variiert man ausschließlich  $a$  in  $\theta$ , so erhält man lediglich eine Verformung der einzelnen Ebenen. Dies entspricht der Wirkung einer winkelabhängigen, rein phononischen Verschiebung  $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ . Allerdings lassen sich dabei nicht alle Schichten bei  $\theta = 0$  wieder verbinden. Abbildung 3.4(a) veranschaulicht diesen Fall.

In Abbildung 3.4(b) ist dagegen eine reine, winkelabhängige Änderung von  $b$  dargestellt. Wie sich dort erkennen lässt ruft sie Sprünge in den Ebenen hervor, was der Wirkung einer phasonischen Verschiebung  $\mathbf{v}(\mathbf{x})$  entspricht. Auch hier ist ein Zusammenfügen bei  $\theta = 0$  nicht für alle Schichten möglich.

Die Kombination beider Variationen führt jedoch wie erwartet zum erhofften Ergebnis. Dies wird in Abbildung 3.4(c) verdeutlicht. Eine dreidimensionale Darstellung der untersten drei Schichten des quasiperiodischen Stapels ist in Abbildung 3.5 zu sehen. Das Aneinanderfügen der Ebenen nach einem vollen Umlauf um die Versetzung wird durch die Sprünge ermöglicht, welche von der Änderung des Parameters  $b$  hervorgerufen werden. Diese Sprünge entstehen immer dort, wo der Term innerhalb der Abrundungsfunktion in Gleichung (3.9) eine ganze Zahl überschreitet, also dort, wo gilt

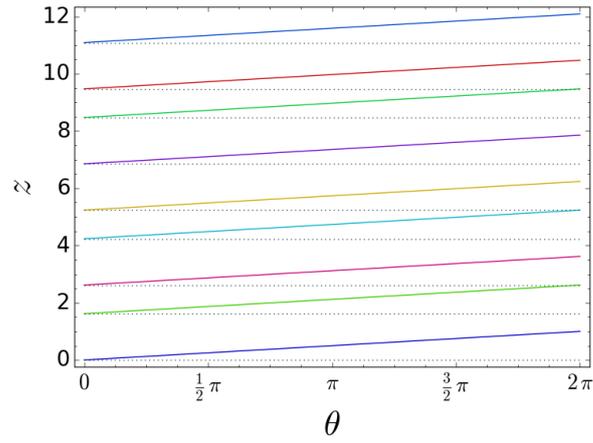
$$\frac{n}{\tau} + \frac{1}{2} + b(\theta) = k \in \mathbb{Z}. \quad (3.12)$$

Für die Abbildungen 3.4(b) und 3.4(c) wurde beispielsweise

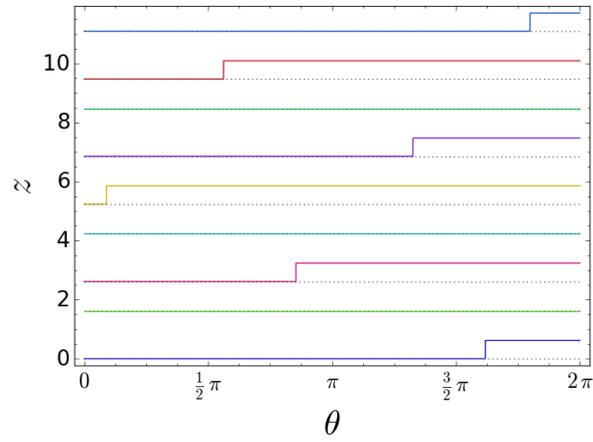
$$b(\theta) = \Delta b \frac{\theta}{2\pi} \quad (3.13)$$

gesetzt. Da der Winkel  $\theta$  zwischen 0 und  $2\pi$  liegt, gilt für die ganze Zahl  $k$  dann zusätzlich

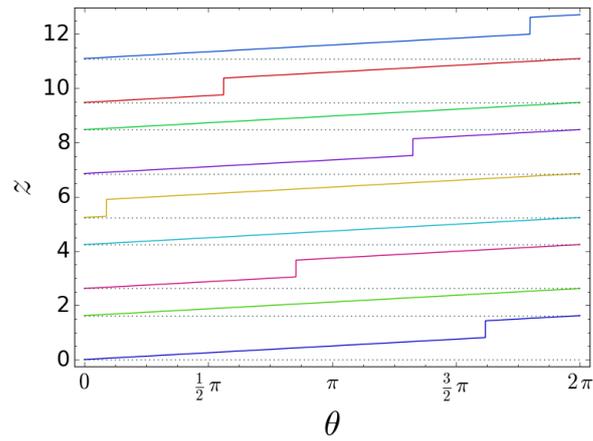
$$\begin{cases} \lceil \frac{n}{\tau} + \frac{1}{2} \rceil \leq k \leq \lfloor \frac{n}{\tau} + \frac{1}{2} + \Delta b \rfloor, & \Delta b > 0 \\ \lceil \frac{n}{\tau} + \frac{1}{2} + \Delta b \rceil \leq k \leq \lfloor \frac{n}{\tau} + \frac{1}{2} \rfloor, & \Delta b < 0 \end{cases} \quad (3.14)$$



(a) Variation von  $a$



(b) Variation von  $b$



(c) Variation von  $a$  und  $b$

Abbildung 3.4: Wirkung einer linearen Variation der Parameter  $a$  und  $b$  aus Gleichung (3.9) mit  $\Delta a = 1$  und  $\Delta b = \frac{1}{\tau}$  auf die Struktur der quasiperiodisch gestapelten Schichten; Die  $z$ -Koordinate der jeweiligen Schicht ist durch die Ebenengleichung  $z = z_n l$  festgelegt und wurde hier in Einheiten von  $l$  über dem Winkels  $\theta$  um den Versetzungskern aufgetragen.

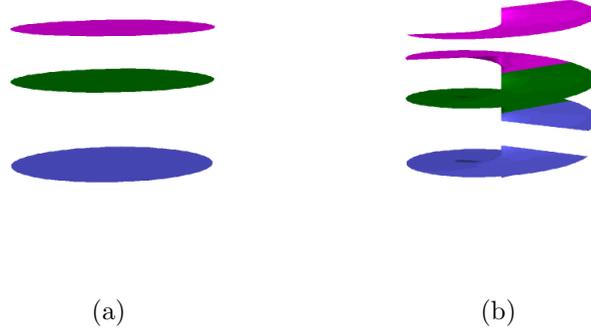


Abbildung 3.5: (a) Ausschnitt aus einem quasiperiodischen Stapel ohne Defekt; (b) Derselbe Ausschnitt aus einem quasiperiodischen Stapel mit Schraubendislokation im Zentrum (Der dargestellte Bereich entspricht den untersten drei Schichten aus Abbildung 3.4(c))

mit der Aufrundungsfunktion  $\lceil x \rceil$ . Sie gibt die kleinste, ganze Zahl an, die größer oder gleich  $x \in \mathbb{R}$  ist und lässt sich mit der Beziehung

$$\lceil x \rceil = \begin{cases} \lfloor x \rfloor + 1 & , x \notin \mathbb{Z} \\ \lfloor x \rfloor & , x \in \mathbb{Z} \end{cases} \quad (3.15)$$

durch die Abrundungsfunktion ausdrücken. Die Anzahl der Sprünge in der  $n$ -ten Ebene ergibt sich somit zu

$$k_{max} - k_{min} + 1 = \begin{cases} \lfloor \frac{n}{\tau} + \frac{1}{2} + \Delta b \rfloor - \lfloor \frac{n}{\tau} + \frac{1}{2} \rfloor, & \Delta b > 0 \\ \lfloor \frac{n}{\tau} + \frac{1}{2} \rfloor - \lfloor \frac{n}{\tau} + \frac{1}{2} + \Delta b \rfloor, & \Delta b < 0 \end{cases} \quad (3.16)$$

wobei  $k_{max}$  und  $k_{min}$  jeweils den maximal bzw. minimal möglichen Wert von  $k$  bezeichnen. Durch direktes Einsetzen von (3.11b) in (3.16) und in (3.9) und Vergleich der beiden Resultate wird ersichtlich, dass sich die Anzahl der Sprünge auch wie folgt ausdrücken lässt:

$$k_{max} - k_{min} + 1 = \begin{cases} (z_{n+m_2} - z_n - m_2)\tau - m_1 & , \Delta b > 0 \\ -[(z_{n+m_2} - z_n - m_2)\tau - m_1] & , \Delta b < 0 \end{cases} \quad (3.17)$$

Sie ist also eng mit der Fibonacci-Kette verbunden und wird von der Wahl der Parameter  $m_1$  und  $m_2$  bestimmt. Die Polarwinkel, bei denen die Unstetigkeitsstellen auftreten, hängen sowohl von  $n$  als auch von  $k$  ab und lassen sich mit folgender Gleichung explizit angeben

$$\theta_k^{(n)} = \frac{2\pi}{\Delta b} \left( k - \frac{n}{\tau} - \frac{1}{2} \right). \quad (3.18)$$

### 3.1.4 Dichtefunktion quasiperiodisch gestapelter Schichten mit Schraubendislokation

Um die Plausibilität der Ergebnisse aus Abschnitt 3.1.3 nochmals zu überprüfen wird im Folgenden auch die Betrachtung als Dichtefunktion herangezogen. Die  $z$ -Komponenten der zugehörigen reziproken Gittervektoren im Real- bzw. Orthogonalraum, sowie geeignete Burgers-Vektoren lassen sich mithilfe der Projektionsmethode bestimmen. Die  $x$ - und  $y$ -Komponenten sind jeweils Null. Zur Herleitung der gesuchten  $z$ -Komponenten wird zunächst ein zweidimensionales Quadratgitter mit Basisvektoren

$$\mathbf{t}_1 = t \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.19a)$$

$$\mathbf{t}_2 = t \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.19b)$$

betrachtet. Um eine Fibonacci-Kette zu erhalten wird der physikalische Raum  $E^\parallel$  als Gerade mit Steigung  $\tau$  festgelegt, sodass gilt

$$E^\parallel = \text{span}\{\mathbf{e}^\parallel\} \quad (3.20a)$$

$$E^\perp = \text{span}\{\mathbf{e}^\perp\} \quad (3.20b)$$

mit den normierten Basisvektoren

$$\mathbf{e}^\parallel = \frac{1}{\sqrt{1+\tau^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \tau \end{pmatrix} \quad (3.21a)$$

$$\mathbf{e}^\perp = \frac{1}{\sqrt{1+\tau^2}} \begin{pmatrix} -\tau \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.21b)$$

des physikalischen bzw. des Orthogonalraums. Die Projektionen des Quadratgitters auf  $E^\parallel$  bzw.  $E^\perp$  ergeben sich somit zu

$$t_1^\parallel = \Pi^\parallel(\mathbf{t}_1) = \mathbf{e}^\parallel \cdot \mathbf{t}_1 = \frac{t}{\sqrt{1+\tau^2}} \quad (3.22a)$$

$$t_2^\parallel = \Pi^\parallel(\mathbf{t}_2) = \mathbf{e}^\parallel \cdot \mathbf{t}_2 = \frac{t\tau}{\sqrt{1+\tau^2}} \quad (3.22b)$$

$$t_1^\perp = \Pi^\perp(\mathbf{t}_1) = \mathbf{e}^\perp \cdot \mathbf{t}_1 = -\frac{t\tau}{\sqrt{1+\tau^2}} \quad (3.22c)$$

$$t_2^\perp = \Pi^\perp(\mathbf{t}_2) = \mathbf{e}^\perp \cdot \mathbf{t}_2 = \frac{t}{\sqrt{1+\tau^2}} \quad (3.22d)$$

Laut [23] entsprechen alle Gittertranslationen des zweidimensionalen Gitters einem Umklapp in der projizierten Fibonacci-Kette, sodass das erzeugte Muster invariant bleibt. Desweiteren wird in der Quelle dargelegt, dass sich alle Umklapp-kongruenten Gitter in derselben LI-Klasse befinden. Daher wird im Folgenden angenommen, dass sich die  $z$ -Komponenten des phononischen und des phasonischen Anteils des Burgers-Vektors schreiben lassen als

$$b_z^\parallel = m_1 t_1^\parallel + m_2 t_2^\parallel \quad (3.23a)$$

$$b_z^\perp = m_1 t_1^\perp + m_2 t_2^\perp \quad (3.23b)$$

mit  $m_1, m_2 \in \mathbb{Z}$ . Wählt man als Gitterkonstante  $t = \frac{\sqrt{1+\tau^2}}{\tau}l$ , so entspricht dies gerade den zulässigen Werten für  $\Delta a$  und  $\Delta b$  aus vorheriger Betrachtung.

Aus der Beziehung (2.6) zwischen reziprokem und direktem Gitter folgt, dass das reziproke Gitter eines zweidimensionalen Quadratgitters mit Gitterkonstante  $t$  ebenfalls ein Quadratgitter mit Gitterkonstante

$$g = \frac{2\pi}{t} \quad (3.24)$$

ist. Dies gilt allgemein für alle kubischen Gitter beliebiger Dimension. Damit erhält man für die Basisvektoren des reziproken Gitters

$$\mathbf{g}_1 = g \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.25a)$$

$$\mathbf{g}_2 = g \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.25b)$$

und für deren Projektionen auf den physikalischen Raum  $E^\parallel$  bzw. den Orthogonalraum  $E^\perp$  entsprechend

$$g_1^\parallel = \Pi^\parallel(\mathbf{g}_1) = \mathbf{e}^\parallel \cdot \mathbf{g}_1 = \frac{g}{\sqrt{1+\tau^2}} \quad (3.26a)$$

$$g_2^\parallel = \Pi^\parallel(\mathbf{g}_2) = \mathbf{e}^\parallel \cdot \mathbf{g}_2 = \frac{g\tau}{\sqrt{1+\tau^2}} \quad (3.26b)$$

$$g_1^\perp = \Pi^\perp(\mathbf{g}_1) = \mathbf{e}^\perp \cdot \mathbf{g}_1 = -\frac{g\tau}{\sqrt{1+\tau^2}} \quad (3.26c)$$

$$g_2^\perp = \Pi^\perp(\mathbf{g}_2) = \mathbf{e}^\perp \cdot \mathbf{g}_2 = \frac{g}{\sqrt{1+\tau^2}}. \quad (3.26d)$$

In Kapitel 2.3 wurde bereits erläutert, wie man aus einer sechsdimensionalen, periodischen Funktion die Dichtefunktion eines dreidimensionalen, ikosaedrischen Quasikristalls mit Dislokation konstruieren kann. Analog lässt sich auch eine ein-dimensionale, quasiperiodische Funktion aus der zweidimensionalen Dichtefunktion des hier betrachteten Quadratgitters der Form

$$\rho_{u_z, v_z}(z) = \sum_{G^\parallel \in \mathcal{L}_R} |\rho_{G^\parallel}| \exp(iG^\parallel z + i\phi_{G^\parallel, 0} - iG^\parallel u_z - iG^\perp v_z) \quad (3.27)$$

ableiten. Diese kann nun so auf drei Dimensionen erweitert werden, dass ein System quasiperiodisch gestapelter Schichten beschrieben wird. Dafür setzt man

$$\rho_{\mathbf{u}, \mathbf{v}}(\mathbf{x}) = \rho_{u_z, v_z}(z) \quad (3.28)$$

mit  $\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$ . Definiert man außerdem

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ u_z \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ v_z \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}^\parallel = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ G^\parallel \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{G}^\perp = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ G^\perp \end{pmatrix},$$

so lässt sich auch schreiben

$$\rho_{\mathbf{u},\mathbf{v}}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{G}^{\parallel} \in \mathcal{L}_R} |\rho_{\mathbf{G}^{\parallel}}| \exp(i\mathbf{G}^{\parallel} \cdot \mathbf{x} + i\phi_{\mathbf{G}^{\parallel},0} - i\mathbf{G}^{\parallel} \cdot \mathbf{u} - i\mathbf{G}^{\perp} \cdot \mathbf{v}), \quad (3.29)$$

was Gleichung (2.17) entspricht. Eine Schraubendislokation lässt sich nun durch örtliche Variation des phononischen Verschiebungsfeldes  $\mathbf{u}$  und des phasonischen Verschiebungsfeldes  $\mathbf{v}$  gemäß den Gleichungen (2.20) beschreiben. Für den phononischen bzw. phasonischen Anteil des Burgers-Vektors setzt man dabei

$$\mathbf{b}^{\parallel} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ b_z^{\parallel} \end{pmatrix} \quad (3.30a)$$

$$\mathbf{b}^{\perp} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ b_z^{\perp} \end{pmatrix}, \quad (3.30b)$$

wobei die  $z$ -Komponenten  $b_z^{\parallel}$  und  $b_z^{\perp}$  gemäß (3.23a) und (3.23b) gewählt werden müssen.

Zur graphischen Darstellung wird diese Funktion, ähnlich wie bei der Betrachtung periodisch gestapelter Schichten in Abschnitt 3.1.1, wieder durch Summation über einen endlichen Satz von reziproken Gittervektoren approximiert. Dieser besteht aus den Basisvektoren des reziproken Gitters und deren reflektierten Bildern. Die Dekoration mit Schichten erfolgt ebenfalls durch Wahl eines geeigneten Schwellenwertes.

In den Abbildungen 3.6(a) bis 3.6(d) sind die auf diese Weise erzeugten Darstellungen zu sehen. Es handelt sich um Schnitte entlang eines Zylindermantels um den Versetzungskern. Die Variation der phononischen und der phasonischen Verschiebung zeigen die gleiche Wirkung wie in Abbildung 3.4. Auch die Sprünge in den einzelnen Schichten treten bei denselben Winkeln auf. Denn wie in Abbildung 3.4 wurde der Burgers-Vektor so gewählt, dass der Betrag seines phononischen Anteils dem kürzeren Ebenenabstand entspricht.

An dieser Stelle sei außerdem auf das mögliche Auftreten von Artefakten aufgrund der Darstellungsmethode hingewiesen. Denn die Wahl des Schwellenwertes ist zwar grundsätzlich willkürlich, kann jedoch zu mehr oder weniger physikalisch sinnvollen Dekorationen führen. Für die Abbildungen 3.6(a) bis 3.6(c) wurde dieser beispielsweise auf  $\frac{3}{4}$  des Maximums festgelegt. Wählt man einen niedrigeren Schwellenwert wie in Abbildung 3.6(d), so kann es bei den Sprüngen zu Überlappungen der Schichten kommen. Dieser Effekt ist aus physikalischer Sicht problematisch, da er, im Vergleich zum entsprechenden System ohne Defekt, die Entstehung zusätzlichen Materials erfordert. Wird der Schwellenwert dagegen sehr hoch gewählt, so treten größere, horizontale Lücken auf, was einem Verschwinden von Material gleichkäme.

Dennoch liefern beide Darstellungsmethoden dieselben, qualitativen Ergebnisse über die Auswirkungen von Schraubendislokationen auf die Struktur quasiperiodisch gestapelter Schichten. Tatsächlich können Schraubendislokationen zu einem spiralförmigen Wachstum führen. Aufgrund der Quasiperiodizität der Anordnung müssen an gewissen Stellen jedoch zusätzliche Sprünge in den Ebenen entstehen. Diese werden vom phononischen Verschiebungsfeld hervorgerufen.

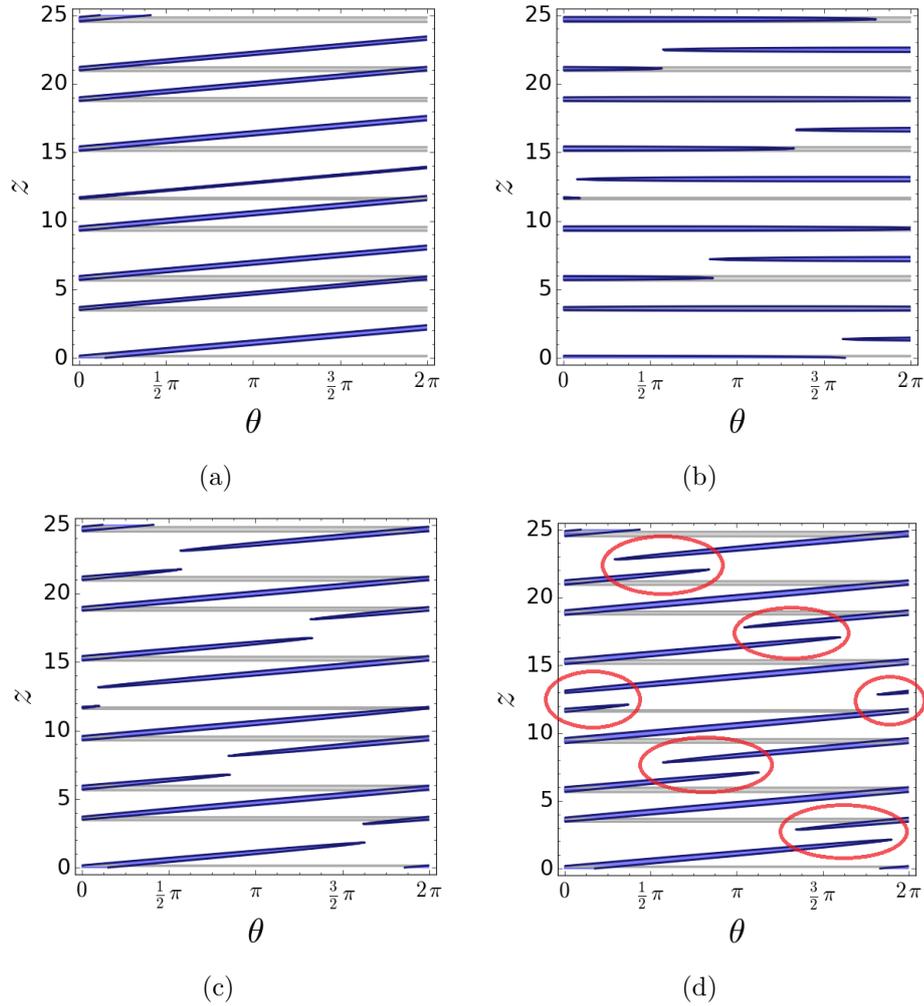


Abbildung 3.6: Zylinderförmige Schnitte durch ein System quasiperiodisch gestapelter Schichten: Die  $z$ -Werte sind in Einheiten der Gitterkonstante  $t$  des direkten, zweidimensionalen Hyper-Gitters angegeben. Die Darstellung wurde mithilfe einer durch eine endliche Anzahl von Summanden genäherte Dichtefunktion erzeugt. Die Bereiche, in denen sie den Schwellenwert überschreitet sind blau gekennzeichnet und repräsentieren die einzelnen Schichten. Zusätzlich ist in jeder Abbildung die Lage der Ebenen des defektfreien Systems in hellgrau dargestellt. (a) und (b) zeigen die Struktur für eine reine Variation von  $\mathbf{u}$  bzw.  $\mathbf{v}$ . (c) veranschaulicht eine volle Schraubendislokation. Für diese Abbildungen wurde der Schwellenwert auf  $\frac{3}{4}$  des Maximums gesetzt. (d) illustriert dieselbe Funktion wie (c). Jedoch wurde ein kleinerer Schwellenwert von nur  $\frac{2}{3}$  des Maximalwertes gewählt, was zu horizontalen Überlappungen der Schichten im Bereich der Sprünge führt. Die entsprechenden Bereiche wurden rot eingekreist.

## 3.2 Schraubendislokationen in ikosaedrischen Quasikristallen

Die Betrachtungen im vorhergehenden Kapitel beschränken sich auf dreidimensionale Systeme, die nur in einer Dimension Quasiperiodizität aufweisen. Daher lassen sich die bisherigen Ergebnisse nicht unmittelbar auf dreidimensionale Kristalle übertragen, die entlang mehrerer Raumrichtungen quasiperiodisch aufgebaut sind. Dazu gehören auch ikosaedrische Quasikristalle. Das Beugungsbild eines ikosaedrischen Quasikristalls besitzt dieselben Punktsymmetrien wie der Ikosaeder (vgl. [17]). Dieser gehört zu den fünf platonischen Körpern und hat 6 fünfzählige, 10 dreizählige und 15 zweizählige Drehachsen (siehe Abb. 3.7). Wie sich Schraubendislokationen auf die Struktur ikosaedrischer Quasikristalle auswirken, wird in diesem Abschnitt anhand einiger Beispiele behandelt.

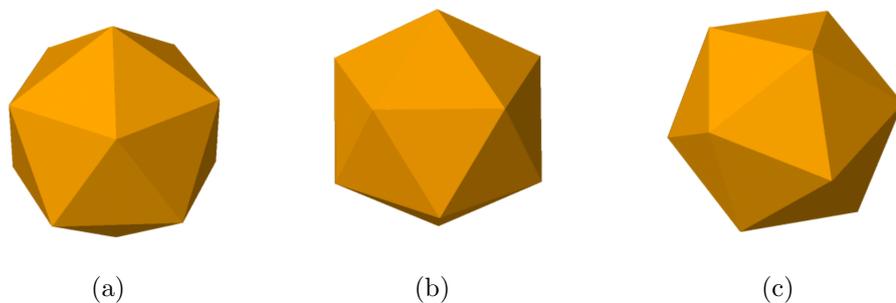


Abbildung 3.7: Ansicht eines Ikosaeders aus einer fünfzähligen (a), einer zweizähligen (b) und einer dreizähligen (c) Richtung

### 3.2.1 Mathematische Beschreibung ikosaedrischer Quasikristalle

Für eine genauere Untersuchung von Schraubendislokationen in ikosaedrischen Quasikristallen benötigt man eine geeignete mathematische Beschreibung ihrer Struktur. In Kapitel 2.1 wurde bereits kurz auf einige Möglichkeiten zur Erzeugung quasiperiodischer Muster eingegangen. Für die Betrachtungen ikosaedrischer Quasikristalle in dieser Arbeit werden insbesondere der Projektionsformalismus bzw. die Methode der Atomflächen eine wichtige Rolle spielen. Grundsätzlich existieren mehrere Möglichkeiten mithilfe dieser Methoden einen Quasikristall mit ikosaedrischer Symmetrie zu konstruieren. In der Natur wurden bereits zwei ikosaedrische Phasen, nämlich die fci (face centered icosahedral) und die si (simple icosahedral) Phase, entdeckt. Letztere lässt sich mithilfe eines sechsdimensionalen, kubisch primitiven (sc) Hyper-Gitters erzeugen, während erstere aus dem sechsdimensionalen Pendant des kubisch flächenzentrierten (fcc) Gitters hervorgeht (vgl. [24, S.45]).

Für die folgenden Betrachtungen wird beispielhaft ein si Quasikristall herangezogen werden. Die Beschreibung seiner Struktur wird anhand der Dichtefunktion (2.17) aus Kapitel 2.3 erfolgen. Zu diesem Zweck müssen die dreidimensionalen Projektionen  $\mathbf{g}_n^{\parallel}$  und  $\mathbf{g}_n^{\perp}$  der sechsdimensionalen reziproken Gittervektoren  $\mathbf{g}_n^{(6)}$  ( $n = 1, 2, \dots, 6$ )

auf den physikalischen Raum  $E^{\parallel}$  bzw. den Orthogonalraum  $E^{\perp}$  ermittelt werden. Die relative Orientierung zwischen der Basis des 6-dimensionalen Hyper-Gitters und dem physikalischen Raum lässt sich nach [5] mithilfe folgender Rotationsmatrix beschreiben:

$$R = \frac{1}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 1 & \tau & 0 & -1 & \tau & 0 \\ \tau & 0 & 1 & \tau & 0 & -1 \\ 0 & 1 & \tau & 0 & -1 & \tau \\ -\tau & 1 & 0 & \tau & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -\tau & 1 & 0 & \tau \\ 0 & -\tau & 1 & 0 & \tau & 1 \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

Das Symbol  $\tau$  bezeichnet dabei wie üblich die Zahl des goldenen Schnitts (siehe (2.7)). Die Matrix repräsentiert die Drehung einer 6-dimensionalen Orthonormalbasis bezüglich der Basis des Hyper-Gitters. Erstere setzt sich aus drei Vektoren, die den physikalischen Raum aufspannen und drei weiteren Vektoren, die den Orthogonalraum aufspannen zusammen. Somit erhält man für die Darstellungsmatrizen der orthogonalen Projektionsoperatoren  $\Pi^{\parallel}$  und  $\Pi^{\perp}$  auf den physikalischen Raum  $E^{\parallel}$  bzw. den Orthogonalraum  $E^{\perp}$ :

$$\Pi^{\parallel} = \frac{1}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 1 & \tau & 0 & -1 & \tau & 0 \\ \tau & 0 & 1 & \tau & 0 & -1 \\ 0 & 1 & \tau & 0 & -1 & \tau \end{pmatrix} \quad (3.32a)$$

$$\Pi^{\perp} = \frac{1}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} -\tau & 1 & 0 & \tau & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -\tau & 1 & 0 & \tau \\ 0 & -\tau & 1 & 0 & \tau & 1 \end{pmatrix} \quad (3.32b)$$

Bei Anwendung auf die Basisvektoren des direkten Hyper-Gitters  $\mathbf{t}_n^{(6)}$  ergeben sich die dreidimensionalen Vektoren

$$\begin{aligned} \mathbf{t}_1^{\parallel} &= \frac{t}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 1 \\ \tau \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{t}_2^{\parallel} = \frac{t}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} \tau \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{t}_3^{\parallel} &= \frac{t}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \tau \end{pmatrix}, \mathbf{t}_4^{\parallel} = \frac{t}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} -1 \\ \tau \\ 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.33)$$

$$\mathbf{t}_5^{\parallel} = \frac{t}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} \tau \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \mathbf{t}_6^{\parallel} = \frac{t}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ \tau \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{t}_1^{\perp} &= \frac{t}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} -\tau \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{t}_2^{\perp} = \frac{t}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -\tau \end{pmatrix}, \\ \mathbf{t}_3^{\perp} &= \frac{t}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 0 \\ -\tau \\ 1 \end{pmatrix}, \mathbf{t}_4^{\perp} = \frac{t}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} \tau \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.34)$$

$$\mathbf{t}_5^{\perp} = \frac{t}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \tau \end{pmatrix}, \mathbf{t}_6^{\perp} = \frac{t}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 0 \\ \tau \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Wie bereits in Abschnitt 3.1.4 erwähnt ist das reziproke Gitter eines kubisch primitiven Gitters ebenfalls ein kubisch primitives Gitter und die zugehörigen Gitterkonstanten erfüllen Relation (3.24). Somit erhält man für die Projektionen der Basisvektoren des reziproken Hyper-Gitters entsprechend

$$\begin{aligned}
\mathbf{g}_1^{\parallel} &= \frac{g}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 1 \\ \tau \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{g}_2^{\parallel} = \frac{g}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} \tau \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \\
\mathbf{g}_3^{\parallel} &= \frac{g}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \tau \end{pmatrix}, \mathbf{g}_4^{\parallel} = \frac{g}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} -1 \\ \tau \\ 0 \end{pmatrix}, \\
\mathbf{g}_5^{\parallel} &= \frac{g}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} \tau \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \mathbf{g}_6^{\parallel} = \frac{g}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ \tau \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{3.35}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{g}_1^{\perp} &= \frac{g}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} -\tau \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{g}_2^{\perp} = \frac{g}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -\tau \end{pmatrix}, \\
\mathbf{g}_3^{\perp} &= \frac{g}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 0 \\ -\tau \\ 1 \end{pmatrix}, \mathbf{g}_4^{\perp} = \frac{g}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} \tau \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \\
\mathbf{g}_5^{\perp} &= \frac{g}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \tau \end{pmatrix}, \mathbf{g}_6^{\perp} = \frac{g}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 0 \\ \tau \\ 1 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{3.36}$$

Wie in Abbildung 3.8 veranschaulicht, zeigen diese Vektoren zu sechs der zwölf Ecken eines Ikosaeders. Nimmt man ihre reflektierten Bilder hinzu, so werden sogar alle Ecken des entsprechenden Ikosaeders getroffen. Nach [22] bilden sie zusammen den minimalen Satz von Vektoren, welcher die gesamte Symmetrie des Systems beschreibt. An dieser Stelle sei noch darauf hingewiesen, dass die Wahl der Rotationsmatrix  $R$  keineswegs eindeutig vorgegeben ist. Sie hängt von der Wahl der Basis ab, die den physikalischen Raum  $E^{\parallel}$  aufspannt. Hier wurde diese so gewählt, dass die Koordinatenachsen jeweils in zweizählige Richtungen des Ikosaeders zeigen.

Mithilfe dieser Gittervektoren lässt sich explizit die Dichtefunktion eines Quasikristalls mit ikosaedrischer Symmetrie zu beliebigen phononischen Verschiebungsfeldern  $\mathbf{u}(\mathbf{x})$  und phasonischen Verschiebungsfeldern  $\mathbf{v}(\mathbf{x})$  angeben. Diese wird bei den folgenden Untersuchungen verwendet werden.

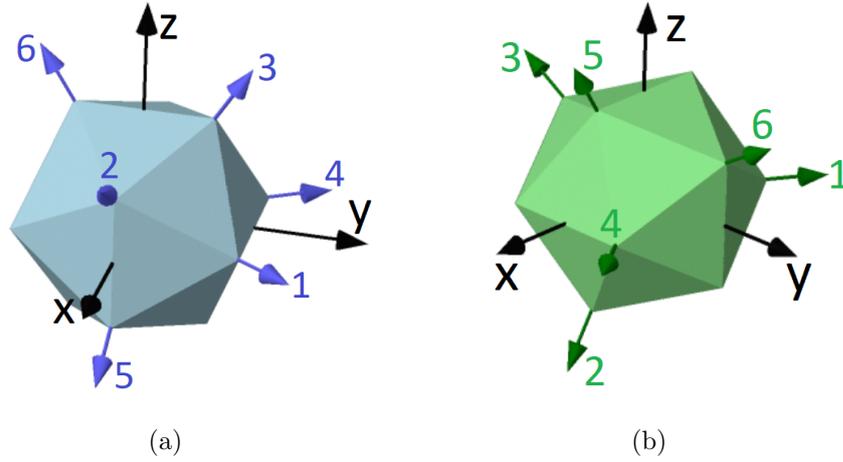


Abbildung 3.8: (a) Projektionen der Basisvektoren eines 6-dimensionalen, kubischen Gitters auf den dreidimensionalen, physikalischen Raum und deren Beziehung zum Ikosaeder; (b) Projektionen der Basisvektoren eines 6-dimensionalen, kubischen Gitters auf den dreidimensionalen Orthogonalraum und deren Beziehung zum Ikosaeder

### 3.2.2 Burgers-Vektor und Dislokationslinie einer Schraubendislokation im ikosaedrischen Quasikristall

Um geeignete Verschiebungsfelder  $\mathbf{u}(\mathbf{x})$  und  $\mathbf{v}(\mathbf{x})$  zur Konstruktion einer Schraubendislokation angeben zu können wird zunächst ein geeigneter Burgers-Vektor benötigt. In Kapitel 2.3 wurde bereits darauf hingewiesen, dass der Burgers-Vektor im ikosaedrischen Quasikristall immer einem Vektor des direkten Hyper-Gitters entsprechen muss. Da sich jeder Vektor des direkten Hyper-Gitters in der Form von Gleichung (2.1) schreiben lässt, gilt somit auch für den Burgers-Vektor

$$\mathbf{b}^{(6)} = \sum_{n=1}^6 m_n \mathbf{t}_n^{(6)}, \quad m_n \in \mathbb{Z}. \quad (3.37)$$

Der Satz von Vektoren  $\mathbf{t}_n^{(6)}$  bezeichnet dabei die Basis des direkten Hyper-Gitters. Für den phononischen und phasonischen Anteil erhält man somit:

$$\mathbf{b}^{\parallel} = \Pi^{\parallel}(\mathbf{b}^{(6)}) = \sum_{n=1}^6 m_n \Pi^{\parallel}(\mathbf{t}_n^{(6)}) = \sum_{n=1}^6 m_n \mathbf{t}_n^{\parallel} \quad (3.38a)$$

$$\mathbf{b}^{\perp} = \Pi^{\perp}(\mathbf{b}^{(6)}) = \sum_{n=1}^6 m_n \Pi^{\perp}(\mathbf{t}_n^{(6)}) = \sum_{n=1}^6 m_n \mathbf{t}_n^{\perp} \quad (3.38b)$$

mit den orthogonalen Projektionen  $\mathbf{t}_n^{\parallel}$  und  $\mathbf{t}_n^{\perp}$  der Basisvektoren auf den physikalischen Raum  $E^{\parallel}$  bzw. den Orthogonalraum  $E^{\perp}$ .

Zudem stellt sich die Frage nach dem Verlauf der Dislokationslinie bei einer Schraubendislokation bzw. der eigentlichen Definition einer Schraubenversetzung im ikosaedrischen Quasikristall. Denn nachdem Dislokationen in ikosaedrischen Quasikristallen einen 6-dimensionalen Burgers-Vektor besitzen, die Dislokationslinie  $L^{\parallel}$

aber nur im physikalischen Raum  $E^{\parallel}$  festgelegt ist, lässt sich die entsprechende Definition für periodische Kristalle nicht ohne Weiteres übertragen. Würde man fordern, dass der 6-dimensionale Burgers-Vektor parallel zur eindimensionalen Dislokationslinie  $L^{\parallel} \in E^{\parallel}$  verläuft, so könnten Schraubenversetzungen in Quasikristallen nicht auftreten, da der Burgers-Vektor dann vollständig im physikalischen Raum  $E^{\parallel}$  verlaufen müsste und somit keinen phasonischen Anteil besitzen dürfte. Dies ist aufgrund der irrationalen Steigung des physikalischen Raumes gegenüber der Basis des 6-dimensionalen Hypergitters jedoch nicht möglich, wie in Kapitel 2.3 bereits erläutert wurde.

Es wurde laut [11] aber per Konvention eine 4-dimensionale Hyperlinie

$$L = L^{\parallel} \oplus E^{\perp} \quad (3.39)$$

eingeführt, welche den Versetzungskern im 6-dimensionalen Hyperraum darstellt. Somit können alle Dislokationen als Schraubendislokationen aufgefasst werden, deren 6-dimensionaler Burgers-Vektor  $\mathbf{b}^{(6)}$  parallel zu  $L$  verläuft. Dies ist wegen  $L \cap E^{\parallel} = L^{\parallel}$  und  $L \cap E^{\perp} = E^{\perp}$  immer dann der Fall, wenn dessen phononischer Anteil  $\mathbf{b}^{\parallel}$  parallel zu  $L^{\parallel}$  liegt. An den phasonischen Anteil  $\mathbf{b}^{\perp}$  werden keine weiteren Forderungen gestellt.

Die Dislokationslinie  $L^{\parallel}$  einer reinen Schraubenversetzung muss nun derart verlaufen, dass ihr Tangentialvektor an jedem beliebigen Punkt (bis auf einzelne Knickstellen) parallel zu einem möglichen Vektor  $\mathbf{b}^{\parallel}$  steht. Am einfachsten gestaltet es sich daher, gerade Schraubendislokationen zu betrachten, deren Versetzungskern auf folgende Weise beschrieben werden kann:

$$L^{\parallel} = \left\{ \mathbf{l} \in \mathbb{R}^3 \mid \mathbf{l} = \mathbf{a} + \alpha \mathbf{b}^{\parallel} \quad \forall \alpha \in \mathbb{R} \right\} \quad (3.40)$$

mit festem Aufpunkt  $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^3$ . Aus diesen lässt sich jede mögliche, reine Schraubenversetzung im ikosaedrischen Quasikristall stückweise zusammensetzen.

### 3.2.3 Charakterisierung des defektfreien ikosaedrischen Quasikristalls

Um einen Einblick in die Auswirkungen von Schraubendislokationen auf die Struktur ikosaedrischer Quasikristalle zu erhalten, werden im weiteren Verlauf dieses Kapitels drei Beispiele genauer analysiert. Dabei handelt es sich jeweils um gerade Schraubendislokationen, die parallel zu einer der drei Symmetrierichtungen des Quasikristalls verlaufen. Zu diesem Zweck werden auch verschiedene Schnitte durch den Quasikristall graphisch dargestellt. Ähnlich wie bei der Betrachtung periodisch bzw. quasiperiodisch gestapelter Schichten wird dafür jedoch nur über eine Teilmenge der reziproken Gittervektoren summiert. Wie schon in Kapitel 3.2.1 erwähnt beinhalten bereits die sechs Basisvektoren des reziproken Gitters und deren reflektierte Bilder die volle Symmetrie des Systems, sodass eine Summe über diese Teilmenge des reziproken Gitters ausreicht, um eine quasiperiodische Dichtefunktion ikosaedrischer Symmetrie zu erhalten. Gleichung (2.17) lässt sich dann mithilfe der Eulerschen Formel

$$\cos(x) = \frac{\exp(ix) + \exp(-ix)}{2}$$

umschreiben zu

$$\rho_{\mathbf{u},\mathbf{v}}(\mathbf{x}) = 2 \sum_{n=1}^6 |\rho_{\mathbf{g}_n^{\parallel}}| \cos(\mathbf{g}_n^{\parallel} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{g}_n^{\parallel} \cdot \mathbf{u} - \mathbf{g}_n^{\perp} \cdot \mathbf{v} + \phi_{\mathbf{g}_n^{\parallel},0}) \quad (3.41)$$

wobei erneut ausgenutzt wurde, dass wegen  $\rho_{\mathbf{u},\mathbf{v}}(\mathbf{x}) \in \mathbb{R} \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$  gilt  $\rho_{-\mathbf{G}^{\parallel}} = \overline{\rho_{\mathbf{G}^{\parallel}}}$  und somit auch  $|\rho_{-\mathbf{G}^{\parallel}}| = |\rho_{\mathbf{G}^{\parallel}}|$  und  $\phi_{-\mathbf{G}^{\parallel},0} = -\phi_{\mathbf{G}^{\parallel},0}$ . Die Abbildungen 3.9(a) bis (c) zeigen entsprechende Dichteplots von Schnitten senkrecht zur fünfzähligen, dreizähligen, und zweizähligen Symmetrierichtung mit  $\mathbf{u} = \mathbf{v} = \mathbf{0} = const$ . Sie gehören somit zu einem Quasikristall ohne Defekt. Es wurde zusätzlich angenommen, dass alle Fourierkoeffizienten den gleichen Betrag  $|\rho_{\mathbf{g}_n^{\parallel}}|$  besitzen und die Phase  $\phi_{\mathbf{g}_n^{\parallel},0}$  wurde o.B.d.A. auf 0 gesetzt. Dies wird auch bei allen noch folgenden Abbildungen in dieser Arbeit der Fall sein.

Ähnlich wie bei der Darstellung periodisch oder quasiperiodisch gestapelter Schichten zu einer vorgegebenen Dichtefunktion kann hier ebenfalls ein Schwellenwert gewählt werden, ab dem Gleichung (3.41) abgeschnitten wird, um eine mögliche Dekoration mit Gitterpunkten zu erhalten. Analog wurde auch in [22] vorgegangen, um zweidimensionale Quasikristalle zu visualisieren. Die Abbildungen 3.9(d) bis (f) zeigen beispielsweise die entsprechenden Muster zu den Dichteplots aus den Abbildungen 3.9(a) bis 3.9(c). Der Schwellenwert wurde auf  $\frac{2}{3}$  des Maximums gesetzt. Alle Bereiche, in denen die Dichte diesen Wert unterschreitet, sind hellblau eingefärbt. Die verbleibenden, dunkelgrau hervorgehobenen Gebiete stellen die Gitterpunkte dar.

Besonders in den dekorierten Abbildungen wird die Symmetrie der Schnittebenen deutlich. So lassen sich die Gitterpunkte in Abbildung 3.9(d) beispielsweise zu regelmäßigen Fünfecken unterschiedlicher Größe verbinden, deren Seitenverhältnisse dem goldenen Schnitt  $\tau$  entsprechen. Zur Veranschaulichung wurden in der Abbildung drei Paare solcher Fünfecke farblich gekennzeichnet. In ähnlicher Weise lassen sich in Abbildung 3.9(e) gleichseitige Dreiecke deren Seitenlängen im Verhältnis  $\tau$  stehen und in Abbildung 3.9(f) Strecken mit Längenverhältnis  $\tau$  finden.

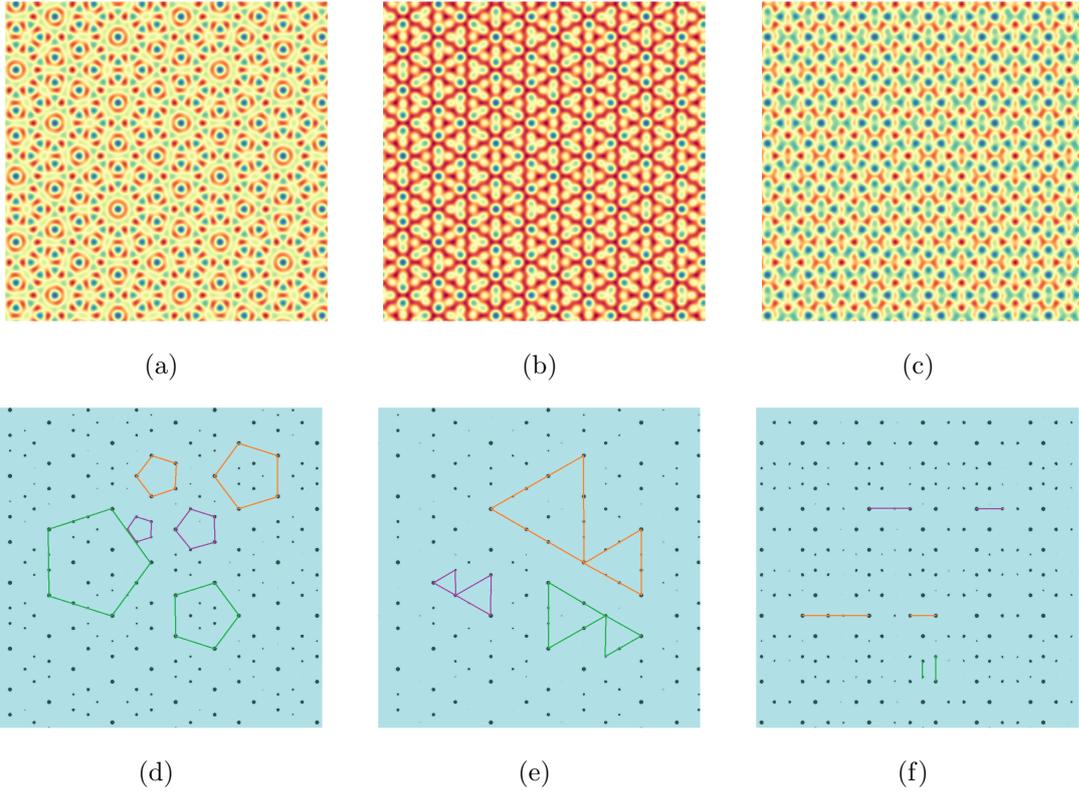


Abbildung 3.9: Schnitte durch den ikosaedrischen Quasikristall ohne Defekte: (a)-(c) zeigen jeweils einen Schnitt der Dichtefunktion (3.41) mit  $\mathbf{u} = \mathbf{v} = \mathbf{0}$  entlang einer Ebene senkrecht zu einer 5-, 3- bzw. 2-zähligen Drehachse; (d)-(f) zeigen dieselben Schnittebenen in dekoriierter Form. Dafür wurden alle Bereiche mit  $\rho_{\mathbf{u}=\mathbf{0},\mathbf{v}=\mathbf{0}}(\mathbf{x})/\rho_{max} > \frac{2}{3}$  in dunkelgrau hervorgehoben. Die Seitenlängen der gleichfarbigen regelmäßigen Fünfecke in (d) bzw. der gleichseitigen Dreiecke in (e) und die Längen der Strecken gleicher Farbe in (f) stehen jeweils im Verhältnis des goldenen Schnittes  $\tau$ .

### 3.2.4 Effekt einer Schraubendislokation auf die Struktur des ikosaedrischen Quasikristalls

Die Kristallmuster mit Dislokation werden nun durch Wahl eines geeigneten sechsdimensionalen Burgers-Vektors und Einsetzen der Verschiebungsfelder gemäß den Gleichungen (2.20) in (3.41) erzeugt. Um physikalisch sinnvolle Ergebnisse zu erhalten, sollte darauf geachtet werden, dass der Aufpunkt  $\mathbf{a}$  der Dislokationslinie nicht mit einem Gitterpunkt zusammenfällt. Bei der hier verwendeten Dichtefunktion sollte sie daher insbesondere nicht durch den Ursprung verlaufen.

Als erstes Beispiel wird an dieser Stelle eine Schraubendislokation betrachtet, deren Versetzungskern parallel zu einer fünfzähligen Drehachse des Quasikristalls verläuft. Es bietet sich daher beispielsweise an, den Burgers-Vektor so zu wählen, dass er einem Basisvektor des direkten Hypergitters entspricht. Damit ist sichergestellt, dass seine Projektion auf den physikalischen Raum parallel zu einer fünfzähligen Symmetrierichtung verläuft, wie sich auch anhand der Abbildung 3.8 erkennen lässt. Hier wird als Beispiel der Fall  $\mathbf{b} = \mathbf{t}_1$  genauer analysiert.

Um den Effekt dieser Dislokation auf die Quasikristallstruktur nachzuvollziehen ist es hilfreich, sich zunächst über den Aufbau des defektfreien Quasikristalls Klarheit zu verschaffen. Vor allem ist es dabei nützlich, die Ebenenstruktur entlang der Versetzungslinie genauer zu betrachten. Tatsächlich lassen sich die Gitterpunkte nämlich, ähnlich wie in periodischen Kristallen, zu Atomlagen zusammenfassen. Um dies zu veranschaulichen wurden in Abbildung 3.10(a) mehrere Schnitte durch den Quasikristall ohne Defekt überlagert. Sie verlaufen entlang der Mantelflächen von Zylindern unterschiedlicher Radien, deren Mittelachsen mit der späteren Position der Dislokationslinie zusammenfallen. Es lässt sich deutlich erkennen, dass die Gitterpunkte Schichten bilden, die orthogonal zum späteren Versetzungskern stehen. Diese Schichten sind quasiperiodisch angeordnet. Denn der Aufbau des Quasikristalls entlang der hier betrachteten Achse wird durch zwei unabhängige Längenskalen bestimmt. Diese werden durch die Beträge derjenigen Vektoren vorgegeben, die entlang dieser Symmetrierichtung verlaufen und sich gleichzeitig als ganzzahlige Linearkombinationen der Projektionen der Hyper-Gitter Basisvektoren des Quasikristalls  $\mathbf{t}_n^{\parallel}$  auf den physikalischen Raum darstellen lassen. Im hier behandelten Fall mit  $\mathbf{b} = \mathbf{t}_1$  sind das

$$\mathbf{t}_a^{\parallel} = \mathbf{t}_1^{\parallel} = \frac{t}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 1 \\ \tau \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad (3.42a)$$

$$\mathbf{t}_b^{\parallel} = \mathbf{t}_2^{\parallel} + \mathbf{t}_3^{\parallel} + \mathbf{t}_4^{\parallel} + \mathbf{t}_5^{\parallel} - \mathbf{t}_6^{\parallel} = \frac{t}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 2\tau - 1 \\ 2 + \tau \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.42b)$$

sowie alle möglichen, ganzzahligen Linearkombinationen aus diesen Vektoren. Die unabhängigen Längenskalen entlang dieser Richtung stehen damit im Verhältnis  $\frac{|\mathbf{t}_a^{\parallel}|}{|\mathbf{t}_b^{\parallel}|} = \frac{1}{\sqrt{5}}$ . Genau wie in Kapitel 3.1.4 lässt sich die Abfolge dieser Schichten anhand einer Dichtefunktion beschreiben. Die dafür benötigten Anteile der reziproken

Gittervektoren im physikalischen Raum sind

$$\mathbf{g}_a^{\parallel} = \mathbf{g}_1^{\parallel} = \frac{g}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 1 \\ \tau \\ 0 \end{pmatrix} \text{ und} \quad (3.43a)$$

$$\mathbf{g}_b^{\parallel} = \mathbf{g}_2^{\parallel} + \mathbf{g}_3^{\parallel} + \mathbf{g}_4^{\parallel} + \mathbf{g}_5^{\parallel} - \mathbf{g}_6^{\parallel} = \frac{g}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 2\tau - 1 \\ 2 + \tau \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.43b)$$

Eine entsprechende Dekoration mit Schichten ist in Abbildung 3.10(b) dargestellt. Auch hierbei handelt es sich um einen Schnitt entlang eines Zylindermantels. Der direkte Vergleich mit Abbildung 3.10(a) bestätigt, dass die Positionen der Atomlagen im Quasikristall richtig wiedergegeben werden.

Die entsprechende Anordnung der Schichten im Quasikristall mit Schraubendislokation ist in den Abbildungen 3.10(c) und (d) zu sehen. Abbildung 3.10(c) zeigt ebenso wie 3.10(a) eine Überlagerung mehrerer Schnitte entlang eines Zylindermantels um den Versetzungskern. Dass eine Deformation der Lagen vorliegt ist klar erkennbar. Zudem lässt sich erahnen, dass vertikale Sprünge innerhalb der Schichten auftreten. Dieser Effekt kann in Abbildung 3.10(d) noch deutlicher beobachtet werden. Hier wurde ein Plot der Atomschichten für den Quasikristall mit Dislokation nach denselben Methoden wie Abbildung 3.10(b) erstellt. Dafür werden auch die zugehörigen Orthogonalraum-Anteile zu den Vektoren  $\mathbf{g}_a^{\parallel}$  und  $\mathbf{g}_b^{\parallel}$  benötigt. Diese sind gegeben durch

$$\mathbf{g}_a^{\perp} = \mathbf{g}_1^{\perp} = \frac{g}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} -\tau \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.44a)$$

$$\mathbf{g}_b^{\perp} = \mathbf{g}_2^{\perp} + \mathbf{g}_3^{\perp} + \mathbf{g}_4^{\perp} + \mathbf{g}_5^{\perp} - \mathbf{g}_6^{\perp} = \frac{g}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 2 + \tau \\ 1 - 2\tau \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.44b)$$

Zur Erstellung des Plots wurde also eine Funktion der Form

$$\begin{aligned} \varrho(z, \theta) = & \cos \left[ |\mathbf{g}_a^{\parallel}|z - \mathbf{g}_a^{\parallel} \cdot \mathbf{u}(\theta) - \mathbf{g}_a^{\perp} \cdot \mathbf{v}(\theta) \right] \\ & + \cos \left[ |\mathbf{g}_b^{\parallel}|z - \mathbf{g}_b^{\parallel} \cdot \mathbf{u}(\theta) - \mathbf{g}_b^{\perp} \cdot \mathbf{v}(\theta) \right] \end{aligned} \quad (3.45)$$

verwendet und durch Wahl eines geeigneten Schwellenwertes mit Schichten dekoriert. Die  $z$ -Achse weist dabei in Richtung des Burgers-Vektors und verläuft somit parallel zur Dislokationslinie. Führt man die Skalarprodukte für den hier untersuchten Fall explizit aus, so vereinfacht sich (3.45) zu

$$\varrho(z, \theta) = \cos(|\mathbf{g}_a^{\parallel}|z - \theta) + \cos(|\mathbf{g}_b^{\parallel}|z). \quad (3.46)$$

Aus der  $2\pi$ -Periodizität des Kosinus folgt somit  $\varrho(z, \theta = 0) = \varrho(z, \theta = 2\pi)$ , was zumindest die Stetigkeit der Funktion entlang der Halbebene  $\theta = 0$  garantiert. Damit ist eine erste Voraussetzung für die Zulässigkeit der Wahl des Burgers-Vektors erfüllt. Dass die Schichten sich nach einem vollen Umlauf um den Versetzungskern

tatsächlich wieder miteinander verbinden, kann in Abbildung 3.10(d) anhand der hellblauen Streifen im Hintergrund überprüft werden, welche den Verlauf der Ebenen im defektfreien Quasikristall veranschaulichen. Denn wie sich darin erkennen lässt befinden sich alle Schichten bei  $\theta = 2\pi$  wieder in derselben Höhe wie eine anderen Schicht bei  $\theta = 0$ .

Die strukturelle Veränderung infolge der Schraubendislokation ist auch in Schnitten senkrecht zum Versetzungskern sichtbar. Die Abbildungen 3.11(a) bis (f) zeigen mehrere solcher Schnitte. Die Position des Versetzungskerns ist jeweils durch ein Kreuz gekennzeichnet. Die unter den Grafiken angegebenen  $z$ -Werte beziehen sich auf die  $z$ -Werten in Abbildung 3.10. Zum Vergleich ist in Abbildung 3.12 nochmals ein entsprechender Schnitt durch den defektfreien Kristall bei  $z = 0$  dargestellt. Darin ist auch der Winkel  $\theta$  aus den Diagrammen in Abbildung 3.10 eingezeichnet um nochmals den Verlauf der dort gezeigten Schnitte zu verdeutlichen.

Bei genauerer Betrachtung der Abbildungen 3.11(a) bis 3.11(f) lassen sich zwei Auffälligkeiten feststellen. Die erste besteht darin, dass sich der Bereich, in dem die Quasikristallschichten die dargestellte Schnittebene durchdringen mit zunehmendem  $z$ -Wert entlang des Winkels  $\theta$  um den Versetzungskern dreht. Die entsprechenden Winkel lassen sich auch direkt aus Abbildung 3.10(c) entnehmen. Diese Tatsache allein ist jedoch noch nicht bemerkenswert, da sie dem Verhalten periodischer Kristalle mit Schraubendislokation entspricht. Die zweite Beobachtung stellt dagegen eine Besonderheit dar. Es lassen sich nämlich auch Schnittebenen finden, die von keiner Schicht des Quasikristalls durchdrungen werden. Dies ist beispielsweise bei  $z = 0,25$  und  $z = 1$  (siehe Abbildung 3.11(b) und 3.11(e)) der Fall. Bei Vergleich mit Abbildung 3.10(c) oder 3.10(d) lässt sich feststellen, dass diese Schnitte gerade dort liegen, wo sich Sprünge in den Schichten des Quasikristalls befinden.

Analoge Ergebnisse erhält man bei der Untersuchung von Schraubendislokationen entlang einer dreizähligen und einer zweizähligen Drehachse. Für die dreizählige Richtung wurde der Burgers-Vektor auf  $\mathbf{b} = \mathbf{t}_1 + \mathbf{t}_2 + \mathbf{t}_3$  gesetzt. Auch in dieser Richtung lassen sich im defektfreien Kristall quasiperiodisch angeordnete Ebenen finden, in denen die Gitterpunkte angeordnet sind, wie sich auf Abbildung 3.13(a) erkennen lässt. Die beiden Längenskalen in dieser Richtung werden von den Beträgen der Vektoren

$$\mathbf{t}_a^{\parallel} = \mathbf{t}_1^{\parallel} + \mathbf{t}_2^{\parallel} + \mathbf{t}_3^{\parallel} = \frac{t}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 1+\tau \\ 1+\tau \\ 1+\tau \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad (3.47a)$$

$$\mathbf{t}_b^{\parallel} = \mathbf{t}_4^{\parallel} + \mathbf{t}_5^{\parallel} + \mathbf{t}_6^{\parallel} = \frac{t}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} \tau-1 \\ \tau-1 \\ \tau-1 \end{pmatrix} \quad (3.47b)$$

bestimmt, die im Verhältnis  $2 + \sqrt{5}$  stehen. Die Projektionen der zugehörigen reziproken Gittervektoren auf den physikalischen Raum bzw. auf den Orthogonalraum

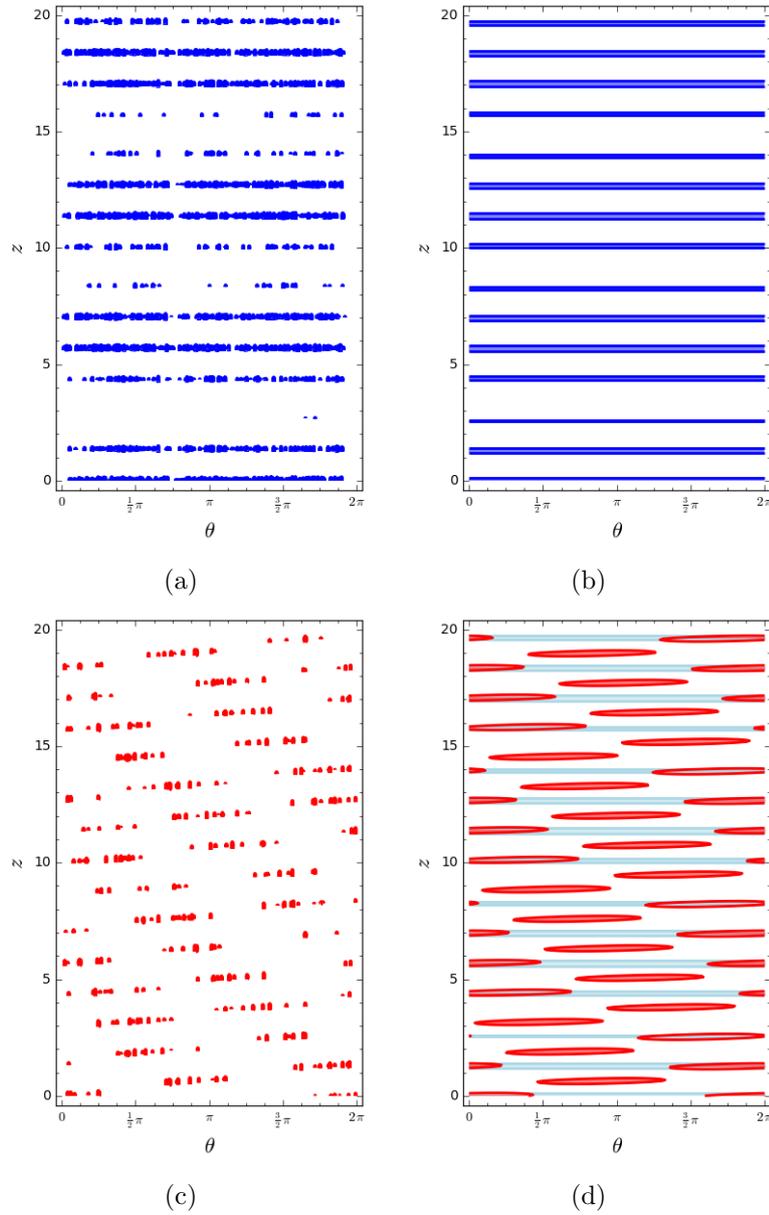


Abbildung 3.10: Anordnung der Gitterpunkte des ikosaedrischen Quasikristalls in Schichten entlang einer fünzfähligen Achse: Die  $z$ -Achse verläuft parallel zur fünzfähligen Symmetrierichtung und ist in Vielfachen von  $t$  skaliert. Der Polariswinkel  $\theta$  ist in Bogenmaß angegeben. Die Abbildungen (a) und (b) veranschaulichen die Ebenenstruktur des Quasikristalls ohne Defekt. (c) und (d) gehören zu einem Quasikristall mit Schraubendislokation zum Burgers-Vektor  $\mathbf{b} = \mathbf{t}_1$ . In (d) ist zusätzlich der Aufbau des defektfreien Quasikristalls in hellblau angedeutet. Das Koordinatensystem wurde hier so gewählt, dass die  $z$ -Achse mit dem Versetzungskern zusammenfällt. Die Abbildungen (a) und (c) sind durch Überlagerung mehrerer Schnitte zu unterschiedlichen Radien entstanden, wohingegen (b) und (d) mithilfe von Gleichung (3.45) erzeugt wurden.

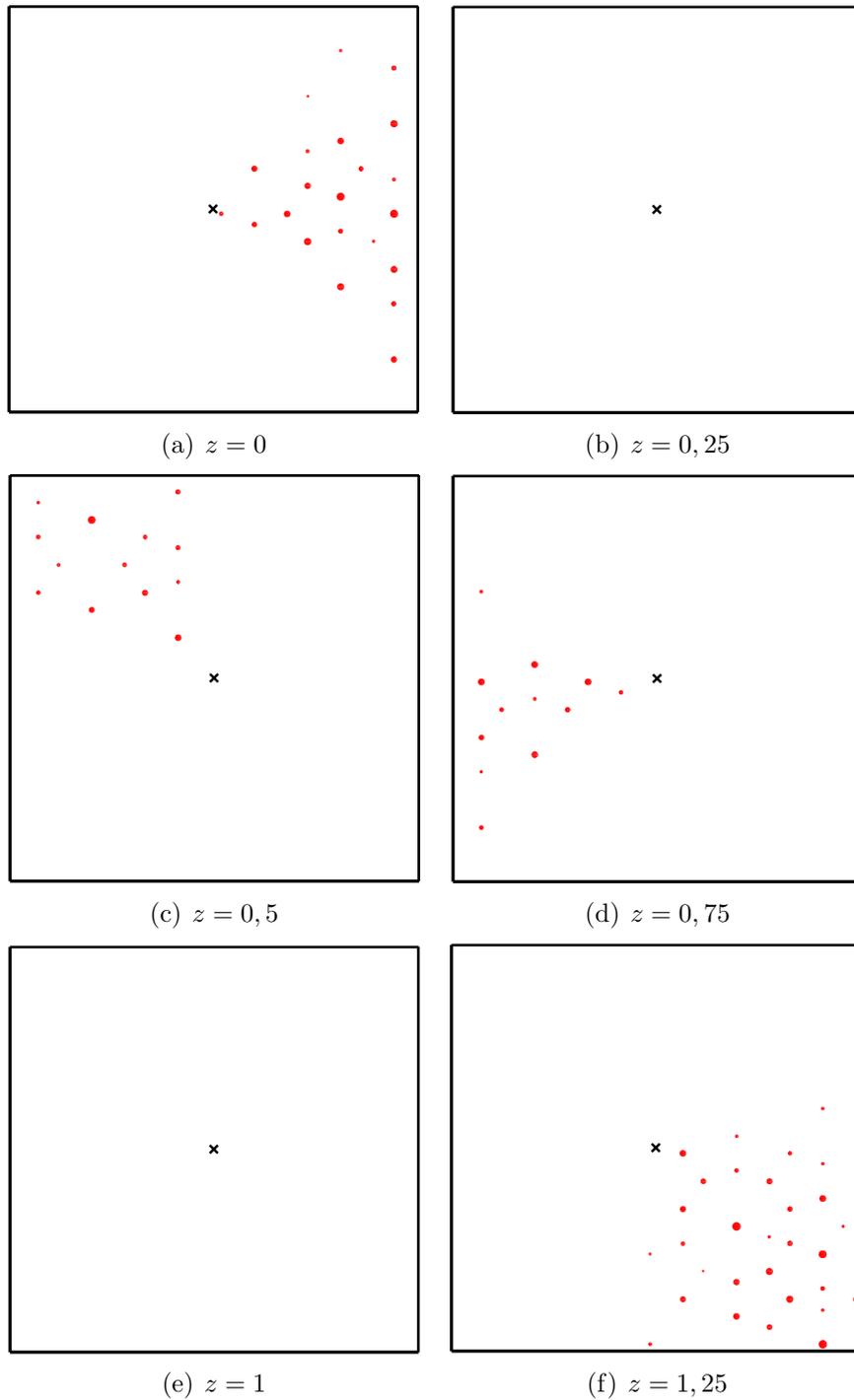


Abbildung 3.11: Schnitte durch einen ikosaedrischen Quasikristall mit einer Schraubendislokation, deren Dislokationslinie parallel zu einer fünfzähligen Symmetrierichtung verläuft: Der Versetzungskern steht senkrecht zu den dargestellten Schnittebenen. Der Schnittpunkt des Versetzungskerns mit der gezeigten Ebene ist in jeder Abbildung durch ein Kreuz gekennzeichnet. Die  $z$ -Werte beziehen sich jeweils auf die korrespondierende Koordinate in Abbildung 3.10. Es wurde derselbe Burgersvektor wie für die Abbildungen 3.10(c) und (d) verwendet.

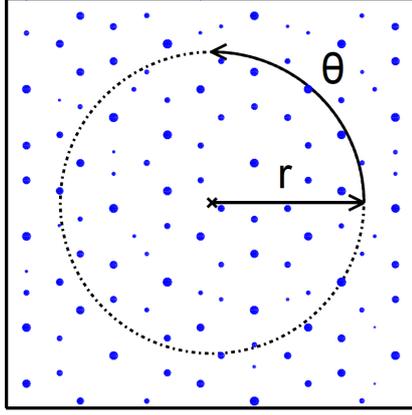


Abbildung 3.12: Schnitt durch den ikosaedrischen Quasikristall ohne Defekt senkrecht zu einer fünfzähligen Drehachse: Das Kreuz kennzeichnet den Schnittpunkt mit der  $z$ -Achse aus Abbildung 3.10(d). Die hier dargestellte Schnittebene liegt bei  $z = 0$ . Die Schnitte aus Abbildung 3.10(d) schneiden diese wiederum entlang von Kreislinien. Der mögliche Verlauf einer solchen Kreislinie mit Radius  $r$  sowie der Winkel  $\theta$  wurden ebenfalls eingezeichnet.

ergeben sich somit zu

$$\mathbf{g}_a^{\parallel} = \mathbf{g}_1^{\parallel} + \mathbf{g}_2^{\parallel} + \mathbf{g}_3^{\parallel} = \frac{g}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 1+\tau \\ 1+\tau \\ 1+\tau \end{pmatrix} \quad (3.48a)$$

$$\mathbf{g}_a^{\perp} = \mathbf{g}_1^{\perp} + \mathbf{g}_2^{\perp} + \mathbf{g}_3^{\perp} = \frac{g}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 1-\tau \\ 1-\tau \\ 1-\tau \end{pmatrix} \quad (3.48b)$$

und

$$\mathbf{g}_b^{\parallel} = \mathbf{g}_4^{\parallel} + \mathbf{g}_5^{\parallel} + \mathbf{g}_6^{\parallel} = \frac{g}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} \tau-1 \\ \tau-1 \\ \tau-1 \end{pmatrix} \quad (3.49a)$$

$$\mathbf{g}_b^{\perp} = \mathbf{g}_4^{\perp} + \mathbf{g}_5^{\perp} + \mathbf{g}_6^{\perp} = \frac{g}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} \tau+1 \\ \tau+1 \\ \tau+1 \end{pmatrix}. \quad (3.49b)$$

Auch hier lässt sich durch geeignete Dekoration der Funktion (3.45) die  $z$ -Position der einzelnen Schichten in Abhängigkeit des Winkels  $\theta$  bestimmen. Mit  $\mathbf{u}(\theta) = \mathbf{v}(\theta) = \mathbf{0}$  erhält man die Ebenenstruktur des Quasikristalls ohne Defekt, welche in Abbildung 3.13(b) dargestellt ist. Durch das Einsetzen von Verschiebungsfeldern der Form (2.20) vereinfacht sich Gleichung (3.45) für den hier gewählten Burgers-Vektor zu

$$\varrho(z, \theta) = \cos(|\mathbf{g}_a^{\parallel}|z - 3\theta) + \cos(|\mathbf{g}_b^{\parallel}|z) \quad (3.50)$$

und es gilt offensichtlich  $\varrho(z, \theta = 0) = \varrho(z, \theta = 2\pi)$ , was wiederum die Stetigkeit der Funktion entlang der Halbebene  $\theta = 0$  garantiert. Gleichung (3.50) führt zu einer Anordnung der Schichten, wie sie in Abbildung 3.13(d) veranschaulicht ist. Auch

hier lässt sich erkennen, dass die Schraubendislokation neben einer Verformung der Schichten infolge der winkelabhängigen Variation des phononischen Verschiebungsfeldes zu Sprüngen in den Ebenen führt, die vom phasonischen Verschiebungsfeld hervorgerufen werden. Diese ermöglichen nach einem vollen Umlauf von  $2\pi$  um den Versetzungskern einen stetigen Übergang der Schichten ineinander.

Die Schnitte senkrecht zur Dislokationslinie, welche in den Abbildungen 3.14(a) bis (f) zu sehen sind, bestätigen diese Ergebnisse. Zum Vergleich ist in Abbildung 3.15 zusätzlich ein Schnitt durch den defektfreien Quasikristall entlang der Ebene  $z = 0$  dargestellt. Der schraubenartige Aufbau des Quasikristalls mit Dislokation spiegelt sich in der  $z$ -abhängigen Drehung der Bereiche, in denen die Schichten die dargestellten Ebenen schneiden, wider. Die vertikalen Sprünge zeigen sich in der Existenz von Schnittebenen, die von keiner Quasikristallschicht durchdrungen werden. Dies entspricht den Resultaten für die fünfzählige Symmetrierichtung.

Die Abbildungen 3.16 und 3.17 zeigen, dass sich auch Schraubenversetzungen entlang einer zweizähligen Achse ähnlich auf die Kristallstruktur auswirken. Hier wurde der Burgers-Vektor auf  $\mathbf{b} = \mathbf{t}_1 + \mathbf{t}_4$  gesetzt. Die für die Anordnung der Schichten entlang dieser Richtung relevanten Vektoren sind somit gegeben durch

$$\mathbf{t}_a^\parallel = \mathbf{t}_1^\parallel + \mathbf{t}_4^\parallel = \frac{t}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 0 \\ 2\tau \\ 0 \end{pmatrix} \text{ sowie} \quad (3.51a)$$

$$\mathbf{t}_b^\parallel = \mathbf{t}_3^\parallel - \mathbf{t}_6^\parallel = \frac{t}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.51b)$$

deren Beträge im Verhältnis  $\tau$  stehen. Dementsprechend wurden zur Erstellung der Abbildungen 3.16(b) und 3.16(d) die Projektionen der reziproken Gittervektoren

$$\mathbf{g}_a^\parallel = \mathbf{g}_1^\parallel + \mathbf{g}_4^\parallel = \frac{g}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 0 \\ 2\tau \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.52a)$$

$$\mathbf{g}_a^\perp = \mathbf{g}_1^\perp + \mathbf{g}_4^\perp = \frac{g}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.52b)$$

$$\mathbf{g}_b^\parallel = \mathbf{g}_3^\parallel - \mathbf{g}_6^\parallel = \frac{g}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ und} \quad (3.53a)$$

$$\mathbf{g}_b^\perp = \mathbf{g}_3^\perp - \mathbf{g}_6^\perp = \frac{g}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 0 \\ -2\tau \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.53b)$$

verwendet. Führt man die Skalarprodukte in Gleichung (3.45) für den Kristall mit Schraubendislokation entlang der zweizähligen Achse aus, so erhält man die Funktion

$$\varrho(z, \theta) = \cos(|\mathbf{g}_a^\parallel|z - 2\theta) + \cos(|\mathbf{g}_b^\parallel|z), \quad (3.54)$$

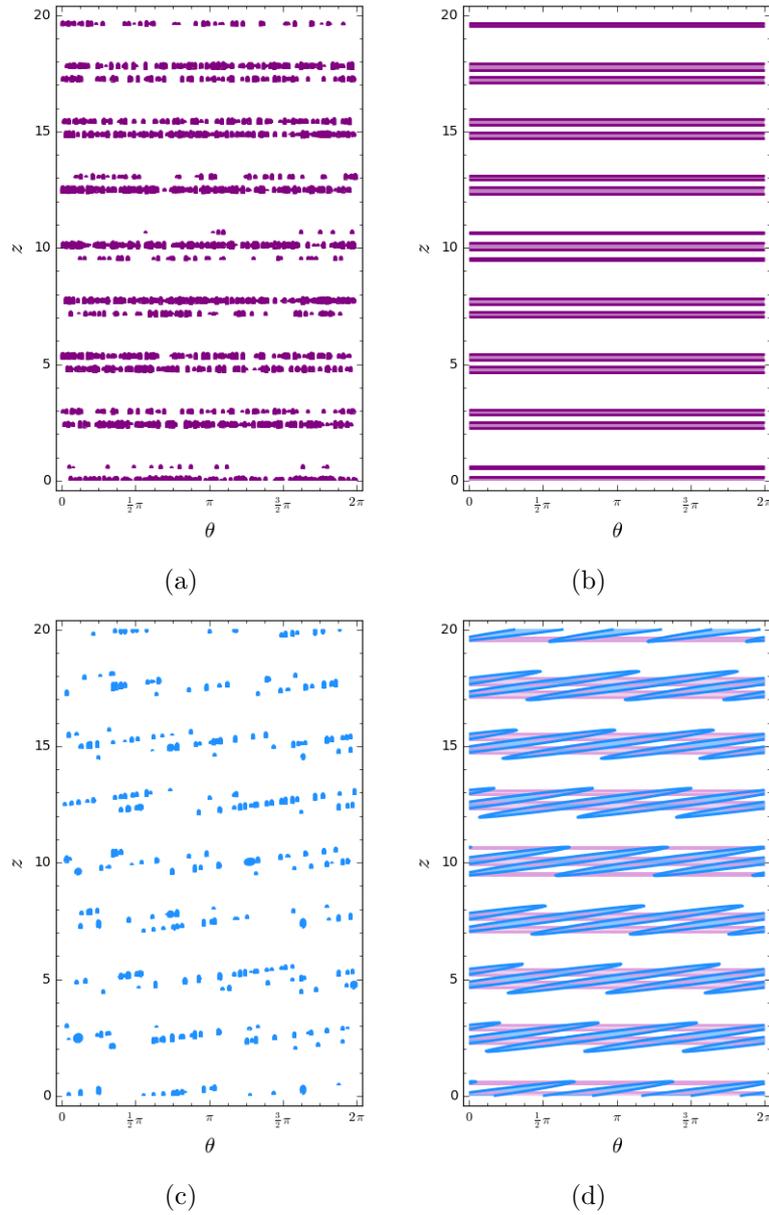


Abbildung 3.13: Anordnung der Gitterpunkte des ikosaedrischen Quasikristalls in Schichten entlang einer dreizähligen Achse: Die  $z$ -Achse verläuft parallel zur dreizähligen Symmetrierichtung und ist in Vielfachen von  $t$  skaliert. Der Polarwinkel  $\theta$  ist in Bogenmaß angegeben. Die Abbildungen (a) und (b) veranschaulichen die Ebenenstruktur des Quasikristalls ohne Defekt. (c) und (d) gehören zu einem Quasikristall mit Schraubendislokation zum Burgers-Vektor  $\mathbf{b} = \mathbf{t}_1 + \mathbf{t}_2 + \mathbf{t}_3$ . In (d) ist zusätzlich der Aufbau des defektfreien Quasikristalls in hellem violett angedeutet. Das Koordinatensystem wurde hier so gewählt, dass die  $z$ -Achse mit dem Versetzungskern zusammenfällt. Die Abbildungen (a) und (c) sind durch Überlagerung mehrerer Schnitte zu unterschiedlichen Radien entstanden, wohingegen (b) und (d) mithilfe von Gleichung (3.45) erzeugt wurden.

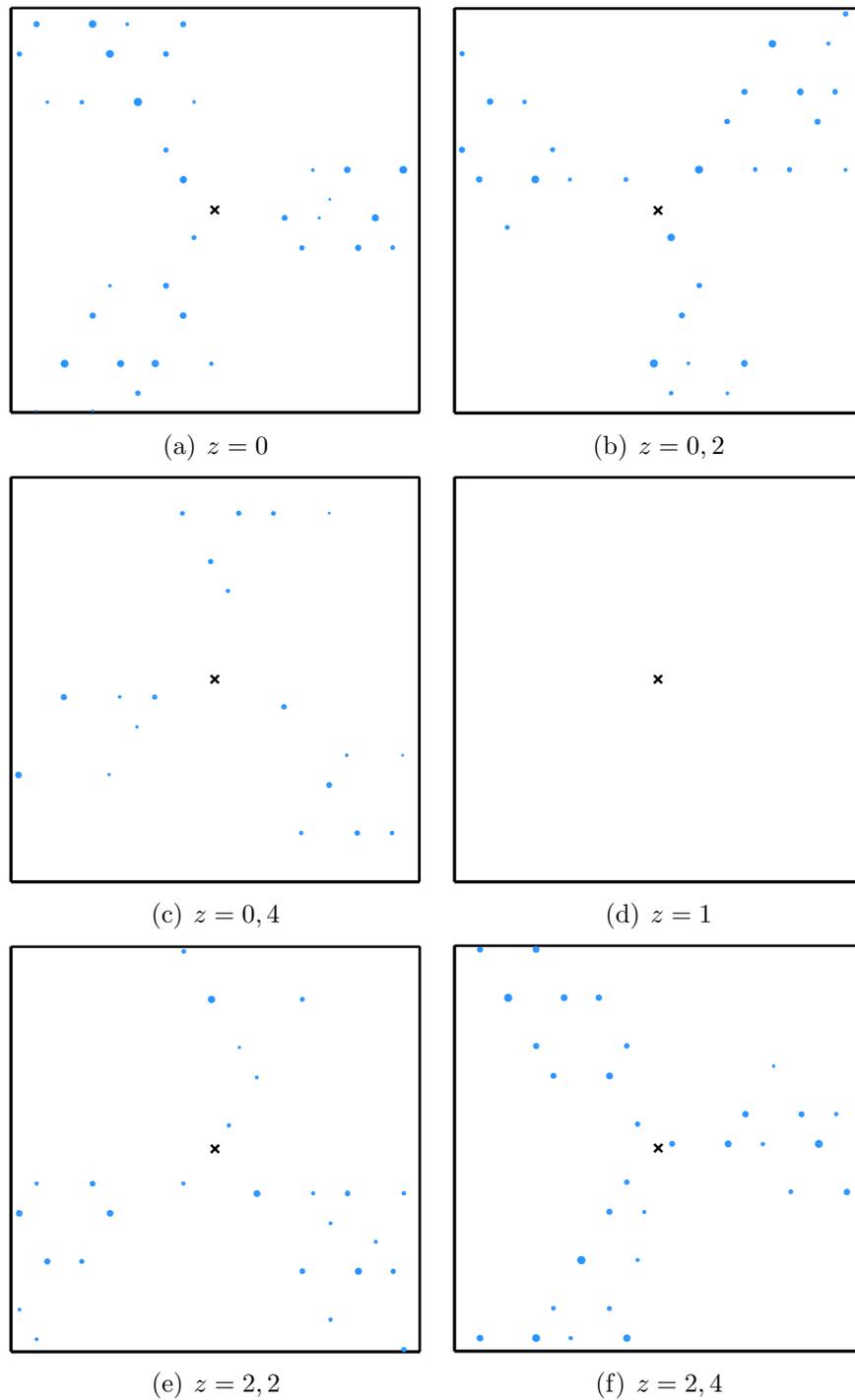


Abbildung 3.14: Schnitte durch einen ikosaedrischen Quasikristall mit einer Schraubendislokation, deren Dislokationslinie parallel zu einer dreizähligen Symmetrierichtung verläuft: Der Versetzungskern steht senkrecht zu den dargestellten Schnittebenen. Der Schnittpunkt des Versetzungskerns mit der gezeigten Ebene ist in jeder Abbildung durch ein Kreuz gekennzeichnet. Die  $z$ -Werte beziehen sich auf die korrespondierende Koordinate in Abbildung 3.13. Es wurde derselbe Burgers-Vektor wie für die Abbildungen 3.13(c) und (d) verwendet.

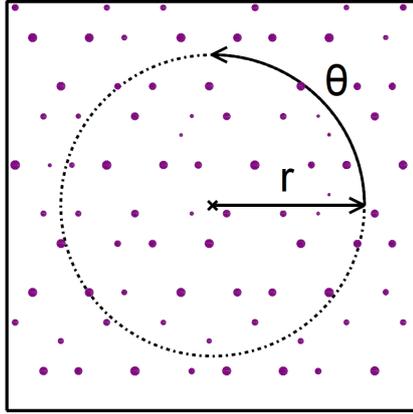


Abbildung 3.15: Schnitt durch den ikosaedrischen Quasikristall ohne Defekt senkrecht zu einer dreizähligen Drehachse: Das Kreuz kennzeichnet den Schnittpunkt mit der  $z$ -Achse aus Abbildung 3.13. Die hier dargestellte Schnittebene liegt bei  $z = 0$ . Die Schnitte aus Abbildung 3.13 schneiden diese wiederum entlang von Kreislinien. Der mögliche Verlauf einer solchen Kreislinie mit Radius  $r$  sowie der Winkel  $\theta$  wurden ebenfalls eingezeichnet.

welche ebenfalls die Bedingung  $\rho(z, \theta = 0) = \rho(z, \theta = 2\pi)$  erfüllt.

Alle drei Beispiele haben also gezeigt, dass bei geeigneter Wahl des Burgers-Vektors ein defektfreies Zusammenfügen des Quasikristalls nach einem vollen Umlauf um den Versetzungskern einer Schraubendislokation möglich ist. Aufgrund der Quasiperiodizität des Systems kann dies jedoch nicht, wie in periodischen Kristallen, durch einfaches, schraubenförmiges Wachstum erreicht werden, sondern es müssen zusätzliche Sprünge in den Schichten aus Gitterpunkten entstehen. Die Ursache dieser Sprünge liegt im phasonischen Anteil des Verschiebungsfeldes.

Abschließend sei noch darauf hingewiesen, dass der Wahl eines geeigneten Schwellenwertes zur Erstellung der dekorierten Plots genau wie in Kapitel 3.1.4 besondere Beachtung beigemessen werden sollte. Dies bezieht sich jedoch weniger auf mögliche Überlappungen oder übermäßig große horizontale Abstände im Bereich der vertikalen Sprünge der Quasikristallschichten, sondern vielmehr auf die Sichtbarkeit der strukturellen Auswirkungen der Schraubendislokation auf den Quasikristall in den erzeugten Grafiken. Denn wie beispielsweise in den Abbildungen 3.13(c) und (d) zu sehen ist, können die Schichten mitunter sehr geringe Abstände besitzen, was, bei einer zu niedrigen Wahl des Schwellenwertes, zu deren Verschmelzen führen kann. Auch die Sprünge können auf diese Weise verschwinden. Dies gilt nicht nur für die zylinderförmigen Schnitte parallel zum Versetzungskern, sondern auch für die dazu senkrechten Schnitte, wie sie in Abbildung 3.11, 3.14 und 3.17 zu sehen sind. Tatsächlich wurde der Schwellenwert für diese Darstellungen so hoch angesetzt, dass die Gitterpunkte zur besseren Sichtbarkeit etwas vergrößert werden mussten. Dafür wurde der Schwerpunkt jedes Gitterpunktes ermittelt und mit einer Markierung versehen, deren Größe proportional zu dessen ursprünglicher Fläche ist.

Des Weiteren sollte noch erwähnt werden, dass die Anteile des Schwellenwertes am jeweiligen Maximum der Dichtefunktion für die überlagerten Zylinderschnitte durch den Quasikristall und die zugehörigen Darstellungen der Schichtstruktur

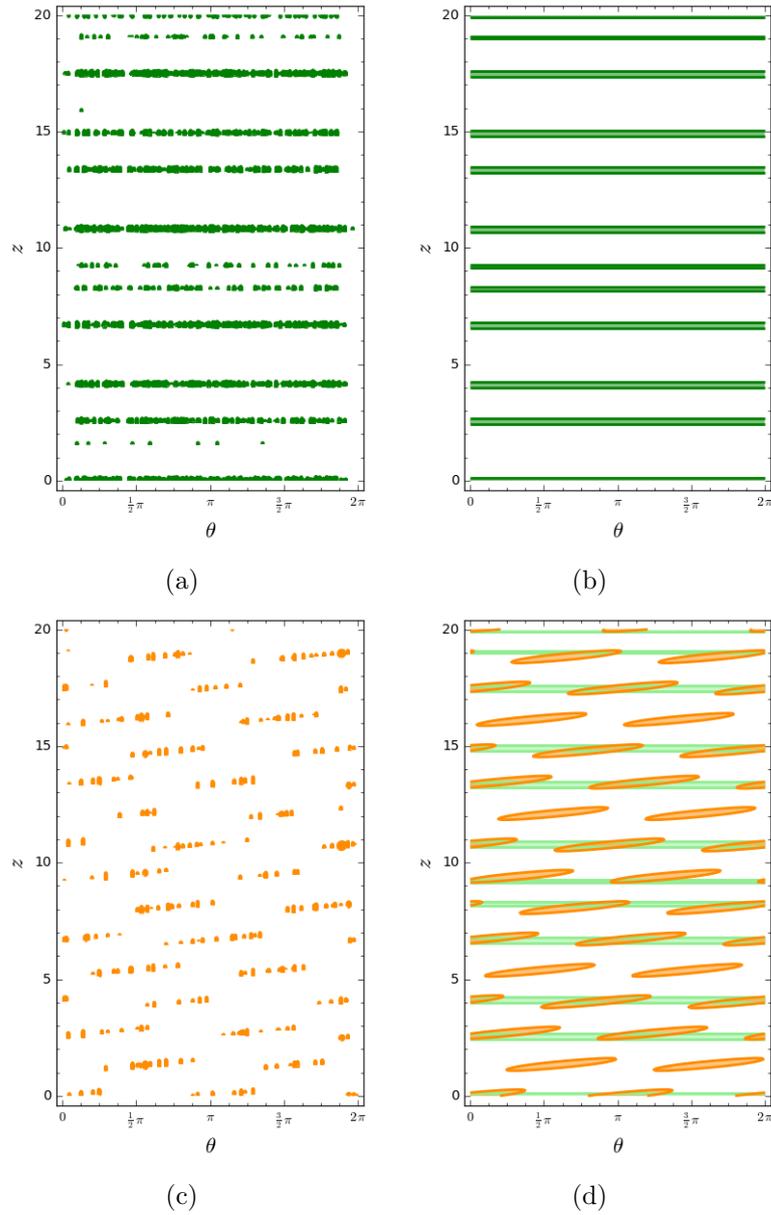


Abbildung 3.16: Anordnung der Gitterpunkte des ikosaedrischen Quasikristalls in Schichten entlang einer zweizähligen Achse: Die  $z$ -Achse verläuft parallel zur zweizähligen Symmetrierichtung und ist in Vielfachen von  $t$  skaliert. Der Polarwinkel  $\theta$  ist in Bogenmaß angegeben. Die Abbildungen (a) und (b) veranschaulichen die Ebenenstruktur des Quasikristalls ohne Defekt. (c) und (d) gehören zu einem Quasikristall mit Schraubendislokation zum Burgers-Vektor  $\mathbf{b} = \mathbf{t}_1 + \mathbf{t}_4$ . In (d) ist zusätzlich der Aufbau des defektfreien Quasikristalls in hellgrün angedeutet. Das Koordinatensystem wurde hier so gewählt, dass die  $z$ -Achse mit dem Versetzungskern zusammenfällt. Die Abbildungen (a) und (c) sind durch Überlagerung mehrerer Schnitte zu unterschiedlichen Radien entstanden, wohingegen (b) und (d) mithilfe von Gleichung (3.45) erzeugt wurden.

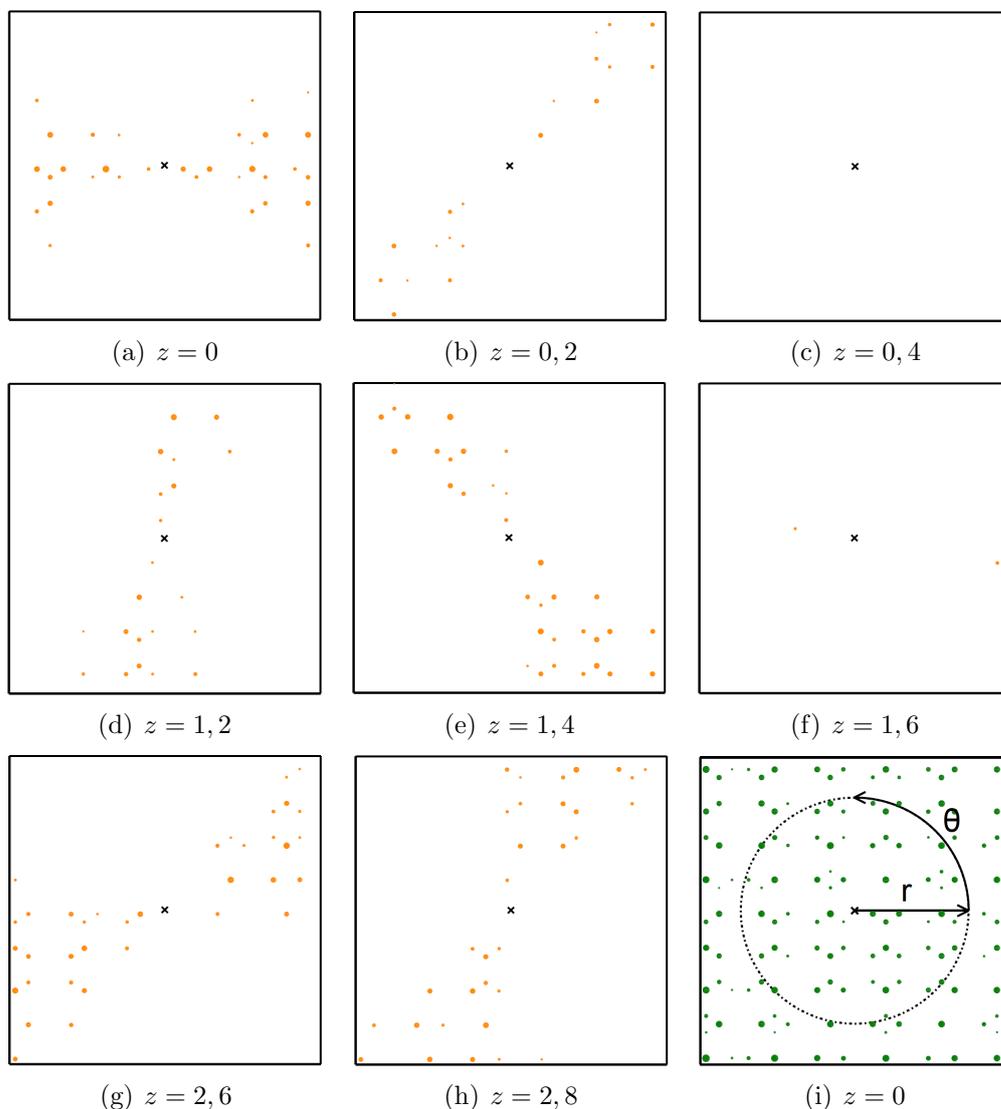


Abbildung 3.17: Schnitte durch den ikosaedrischen Quasikristall senkrecht zu einer zweizähligen Drehachse: Die Abbildungen (a)-(h) zeigen Schnitte durch einen ikosaedrischen Quasikristall mit einer Schraubendislokation, deren Dislokationslinie parallel zu dieser Drehachse verläuft. Der Schnittpunkt des Versetzungskerns mit der gezeigten Ebene ist in jeder Abbildung durch ein Kreuz gekennzeichnet. Es wurde derselbe Burgers-Vektor wie für die Abbildungen 3.16(c) und (d) verwendet. Abbildung (i) zeigt eine entsprechende Schnittebene durch den defektfreien Quasikristall. Die Schnitte aus Abbildung 3.16 schneiden diese wiederum entlang von Kreislinien. Der mögliche Verlauf einer solchen Kreislinie mit Radius  $r$  sowie der Winkel  $\theta$  wurden ebenfalls eingezeichnet.

anhand von Gleichung (3.45) einander nicht in allen Fällen exakt entsprechen. Für manche der Abbildungen wurden die Werte leicht angepasst um eine bessere Übereinstimmung der Muster zu erzielen. Eine direkte Entsprechung der auftretenden Schichten konnte jedoch nicht immer erzielt werden, wie der Vergleich zwischen Abbildung 3.16(a) und 3.16(b) zeigt. Denn in ersterer tritt beispielsweise eine Ebene bei  $z \approx 1,6$  auf, welche sich in letzterer nicht wiederfindet. Diese Feststellungen sollen nochmals vor Augen führen, dass die in diesem Kapitel erstellten Grafiken ausschließlich einer qualitativen Visualisierung dienen. Denn für die Wahl der Schwellenwerte existieren keinerlei quantitative Standards, sodass sie als grundsätzlich willkürlich angesehen werden kann.

# Kapitel 4

## Zusammenfassung und Ausblick

Zuletzt sollen hier noch die wichtigsten Ergebnisse zusammengefasst und auf mögliche weitergehende Untersuchungen von Schraubendislokationen in dreidimensionalen Quasikristallen hingewiesen werden. Rekapituliert man die wichtigsten Inhalte dieser Arbeit, so lassen sich folgende Punkte festhalten:

Wie in Kapitel 3.1 gezeigt wurde führen Schraubendislokationen in quasiperiodisch gestapelten Schichten neben einem schraubenförmigen Wachstum, welches vom phononischen Anteil des Verschiebungsfeldes hervorgerufen wird, zu vertikalen Sprüngen in den Schichten unter gewissen Polarwinkeln  $\theta$  um den Versetzungskern. Diese werden vom phasonischen Verschiebungsfeld verursacht und stellen einen Unterschied zum Verhalten periodisch gestapelter Schichten dar. Trotz der Quasiperiodizität der Anordnung ist damit ein Zusammenfügen der einzelnen Lagen nach einem vollen Umlauf um den Versetzungskern möglich. Diese Erkenntnisse wurden anhand von zwei Betrachtungsweisen, nämlich der direkten Beschreibung als Ebenenschar sowie durch Dekoration einer geeigneten Dichtefunktion, bestätigt und mithilfe graphischer Darstellungen von Schnitten durch das Modellsystem veranschaulicht.

Weiterhin wurden in Kapitel 3.2 die Auswirkungen von Schraubendislokationen auf die Struktur ikosaedrischer Quasikristalle untersucht. Als Modellsystem diente dabei eine Dichtefunktion ikosaedrischer Symmetrie, deren Konstruktion mithilfe eines sechsdimensionalen kubischen Hyper-Gitters erfolgte. Beispielhaft wurden drei Schraubendislokationen entlang unterschiedlicher Symmetrieachsen des Quasikristalls genauer analysiert. Dafür wurde zunächst die Ebenenstruktur entlang der jeweiligen Drehachse im defektfreien Kristall extrahiert, welche eine quasiperiodische Anordnung aufweist und somit vereinfacht als Stapel quasiperiodischer Schichten angesehen werden kann. Tatsächlich zeigte sich beim Einbringen einer Schraubendislokation dasselbe Verhalten, wie es schon in Kapitel 3.1 beobachtet wurde. Die schraubenförmige Struktur sowie die vertikalen Sprünge konnten zudem durch Plots von Schnittebenen senkrecht zum Versetzungskern durch den ikosaedrischen Quasikristall nachgewiesen werden.

Diese Arbeit beschränkt sich jedoch ausschließlich auf die theoretische und qualitative Beschreibung der Effekte, welche Schraubendislokationen auf die Struktur ikosaedrischer Quasikristalle haben können. Dabei wurde von stark vereinfachten Modellen, wie etwa dem bloßen Auftreten gerader, reiner Schraubendislokationen

ausgegangen. Zudem wurden weitere interessante Aspekte, wie zum Beispiel die Betrachtung der hervorgerufenen Spannung im Material oder die Interaktion mehrerer Schraubenversetzungen, die Aufschluss über die tatsächliche Stabilität und das Verhalten von Schraubendislokationen sowie deren Einfluss auf die physikalischen Eigenschaften des Quaikristalls geben könnten, außer Acht gelassen. Um diesbezüglich weitere Erkenntnisse zu erlangen, bieten sich Simulationen an. Zudem könnte ein Vergleich mit experimentellen Ergebnissen und deren Analyse weitere wichtige Erkenntnisse bringen.

# Literaturverzeichnis

- [1] *Lexikon der Physik: Burgers-Vektor*, <http://www.spektrum.de/lexikon/physik/burgers-vektor/2112>, besucht: 12.06.2017, (o.V.).
- [2] *Lexikon der Physik: Versetzung*, <http://www.spektrum.de/lexikon/physik/versetzung/15195>, besucht: 31.07.2017, (o.V.).
- [3] J. Bohsung, R.W. Haase, A. Katz, P. Kramer, R. Penrose, M. Senechal und H. R. Trebin, *Introduction to the mathematics of quasicrystals*, Academic Press, Inc., San Diego, 1989.
- [4] Walter Borchartd-Ott, *Kristallographie - Eine Einführung für Naturwissenschaftler*, 7. Aufl., Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2009.
- [5] John W. Cahn, Dan Shechtman und Denis Gratias, *Indexing of icosahedral quasiperiodic crystals*, J. Mater. Res. **1** (1986), 13–26.
- [6] Gerd Czycholl, *Theoretische Festkörperphysik - Von den klassischen Modellen zu modernen Forschungsthemen*, 3. Aufl., Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2008.
- [7] Michael Engel, *Zur Geometrie von Phasonen und Versetzungen in Quasikristallen und ihren Approximanten*, 2004, Diplomarbeit; Universität Stuttgart - Institut für Theoretische und Angewandte Physik.
- [8] Ann Fernholm, *Crystals of golden proportions*, [http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/chemistry/laureates/2011/popular-chemistryprize2011.pdf](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2011/popular-chemistryprize2011.pdf), besucht: 10.06.2017.
- [9] Michael Feuerbacher, *Dislocations in icosahedral quasicrystals*, Chem. Soc. Rev. **41** (2012), 6745–6759.
- [10] Kenji Hiraga und Makoto Hirabayashi, *Dislocations in an Al-Mn-Si Icosahedral Quasicrystal Observed by High-Resolution Electron Microscopy*, Japanese Journal of Applied Physics **26** (1987), L155–L158.
- [11] Maurice Kléman, *Unconventional properties of dislocations in quasicrystals*, Czechoslovak Journal of Physics **45** (1995), 935–946.
- [12] Dov Levine und Paul J. Steinhardt, *Quasicrystals. I. Definition and structure*, Physical Review B **34** (1986), 596–616.

- [13] D. Levine, T. C. Lubensky, S. Ostlund, S. Ramaswamy, P. J. Steinhardt und J. Toner, *Elasticity and Dislocations in Pentagonal and Icosahedral Quasicrystals*, Physical Review Letters **54** (1985), 1520–1523.
- [14] Sven Lidin, *The Discovery of Quasicrystals*, [http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/chemistry/laureates/2011/advanced-chemistryprize2011.pdf](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2011/advanced-chemistryprize2011.pdf), besucht: 10.06.2017.
- [15] Patrick J. McNally, *Techniques: 3D imaging of crystal defects*, Nature **496** (2013), 37–38.
- [16] David R. Nelson und B. I. Halperin, *Dislocation-mediated melting in two dimensions*, Physical Review B **19** (1979), 2457–2484.
- [17] M. Ricker, J. Bachteler und H. R. Trebin, *Elastic theory of icosahedral quasicrystals - application to straight dislocations*, The European Physical Journal B **23** (2001), 351–363.
- [18] Matthias Sandbrink, *Tailored Colloidal Quasicrystals*, 2014, Dissertation: Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf - Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät.
- [19] Matthias Sandbrink und Michael Schmiedeberg, *Course of dislocation lines in templated three-dimensional colloidal quasicrystals*, Physical Review B **90** (2014), 064108.
- [20] Marjorie Senechal, *Quasicrystals and geometry*, Cambridge University Press, Cambridge, 1995.
- [21] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias und J. W. Cahn, *Metallic Phase with Long-Range Orientational Order and No Translational Symmetry*, Physical Review Letters **53** (1984), 1951–1953.
- [22] Joshua E. S. Socolar, T. C. Lubensky und Paul J. Steinhardt, *Phonons, phasons and dislocations in quasicrystals*, Physical Review B **34** (1986), 3345–3360.
- [23] Joshua E. S. Socolar und Paul J. Steinhardt, *Quasicrystals. II. Unit-cell configurations*, Physical Review B **34** (1986), 617–647.
- [24] Hans Rainer Trebin (Hrsg.), *Quasicrystals: Structure and Physical Properties*, Wiley-VHC, Weinheim, 2003.



# Erklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst und ausschließlich die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe. Zudem erkläre ich, dass alle Stellen, die dem Wortlaut oder dem Sinne nach anderen Werken entnommen sind, durch Angabe der Quellen als Entlehnungen kenntlich gemacht wurden und dass diese Arbeit in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner anderen Prüfungsbehörde vorgelegt wurde.

---

Ort, Datum

---

Unterschrift