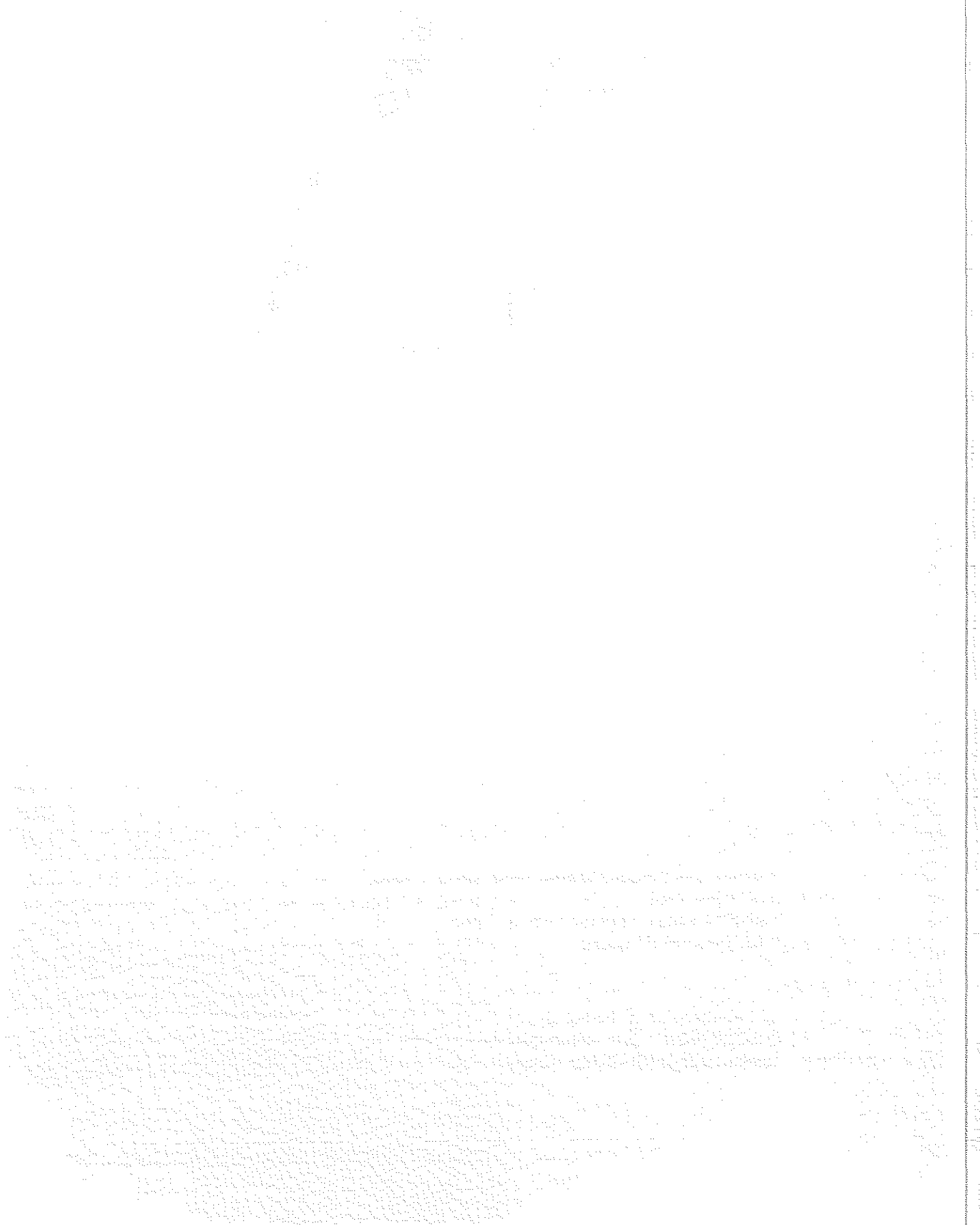


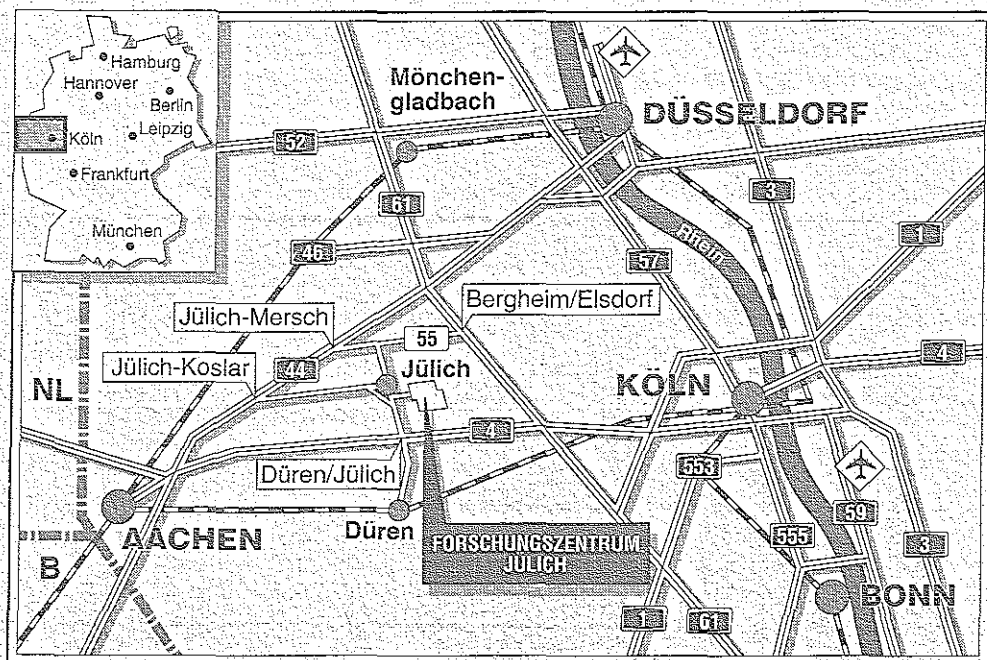
*Institut für Festkörperforschung*

**Elektronenmikroskopische  
Untersuchungen von Defekten in  
ikosaedrischen Quasikristallen**

Markus Wollgarten







**Berichte des Forschungszentrums Jülich ; 2865**

ISSN 0944-2952

Institut für Festkörperforschung Jül-2865

D 82 (Diss. RWTH Aachen)

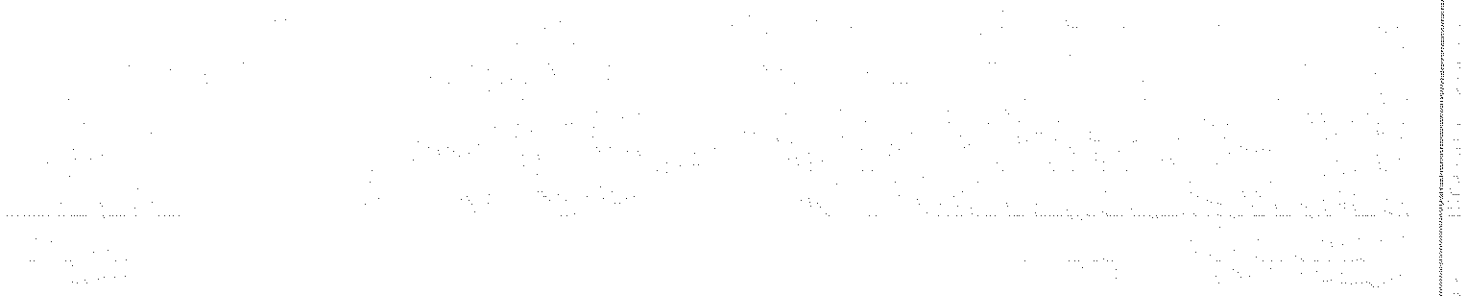
Zu beziehen durch: Forschungszentrum Jülich GmbH · Zentralbibliothek

D-52425 Jülich · Bundesrepublik Deutschland

Telefon: 024 61/61-61 02 · Telefax: 024 61/61-61 03 · Telex: 8 33 556-70 kfa d

# **Elektronenmikroskopische Untersuchungen von Defekten in ikosaedrischen Quasikristallen**

Markus Wollgarten





# INHALTSVERZEICHNIS

|          |                                                        |           |
|----------|--------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1</b> | <b>Einleitung</b>                                      | <b>1</b>  |
| <b>2</b> | <b>Eigenschaften von Quasikristallen</b>               | <b>3</b>  |
| 2.1      | Klassifikation nach Symmetrieeigenschaften             | 3         |
| 2.2      | Bekannte physikalische Eigenschaften                   | 7         |
| 2.3      | Elektrische Eigenschaften                              | 8         |
| 2.4      | Mechanische Eigenschaften                              | 9         |
| <b>3</b> | <b>Die Gitterstruktur der Quasikristalle</b>           | <b>11</b> |
| 3.1      | Das eindimensionale Quasigitter                        | 12        |
| 3.1.1    | Die Schnitt-und-Projektions-Methode                    | 16        |
| 3.2      | Das dreidimensionale Quasigitter                       | 25        |
| 3.3      | Ikosaedrisches Glas und Random Tiling Modell           | 29        |
| <b>4</b> | <b>Beugungsbilder quasiperiodischer Gitter</b>         | <b>31</b> |
| 4.1      | Beugung am eindimensionalen Quasigitter                | 31        |
| 4.1.1    | Reflexindizierung                                      | 33        |
| 4.2      | Das dreidimensionale reziproke Quasigitter             | 34        |
| 4.2.1    | Reflexindizierung                                      | 35        |
| <b>5</b> | <b>Defekte in quasiperiodischen Gittern</b>            | <b>39</b> |
| 5.1      | Defekte in eindimensionalen Quasigittern               | 39        |
| 5.2      | Defekte in dreidimensionalen Quasigittern              | 45        |
| 5.3      | Versetzungen in quasiperiodischen Gittern              | 46        |
| 5.4      | Experimentelle Resultate anderer Arbeitsgruppen        | 50        |
| <b>6</b> | <b>Kontrasttheorie für Defekte in Quasikristallen</b>  | <b>53</b> |
| 6.1      | Kontrast von Defekten in Kristallen                    | 53        |
| 6.2      | Kontrast von Versetzungen in Quasikristallen           | 55        |
| 6.3      | Ableitung der Auslöschbedingung                        | 55        |
| 6.4      | Die schwache und starke Auslöschbedingung (SEC u. WEC) | 57        |
| 6.4.1    | Experimentelle Unterscheidung der Auslöschbedingungen  | 57        |
| 6.4.2    | Interpretation der Auslöschbedingungen                 | 59        |

|           |                                                                  |            |
|-----------|------------------------------------------------------------------|------------|
| 6.4.3     | Defektanalyse . . . . .                                          | 59         |
| 6.4.4     | Die Lage der Reflexe für die SEC und die WEC . . . . .           | 61         |
| <b>7</b>  | <b>Untersuchte Legierungen und Probenherstellung</b>             | <b>67</b>  |
| 7.1       | Die Legierungssysteme AlCuFe und AlPdMn . . . . .                | 67         |
| 7.2       | Probenherstellung . . . . .                                      | 68         |
| 7.2.1     | Induktionsschmelzen . . . . .                                    | 68         |
| 7.2.2     | Czochralskizüchtung von AlPdMn-Einquasikristallen . . . . .      | 69         |
| 7.3       | Präparation für die Transmissionselektronenmikroskopie . . . . . | 74         |
| <b>8</b>  | <b>Resultate und Diskussionen</b>                                | <b>77</b>  |
| 8.1       | Versetzungsuntersuchungen in AlCuFe . . . . .                    | 77         |
| 8.1.1     | Experimentelle Ergebnisse . . . . .                              | 77         |
| 8.1.2     | Diskussion . . . . .                                             | 78         |
| 8.2       | Transmissionselektronenmikroskopie an AlPdMn . . . . .           | 83         |
| 8.2.1     | Experimentelle Ergebnisse . . . . .                              | 83         |
| 8.2.2     | Diskussion . . . . .                                             | 90         |
| 8.3       | Raumtemperatur-Verformungsexperimente an AlPdMn . . . . .        | 99         |
| 8.3.1     | Probenpräparation und Versuchsdurchführung . . . . .             | 99         |
| 8.3.2     | Experimentelle Resultate . . . . .                               | 99         |
| 8.3.3     | Diskussion . . . . .                                             | 104        |
| 8.4       | Hochtemperatur-Verformungsexperimente an AlPdMn . . . . .        | 109        |
| 8.4.1     | Probenpräparation und Versuchsdurchführung . . . . .             | 109        |
| 8.4.2     | Experimentelle Ergebnisse . . . . .                              | 111        |
| 8.4.3     | Diskussion . . . . .                                             | 119        |
| <b>9</b>  | <b>Übergreifende Diskussionsion</b>                              | <b>123</b> |
| <b>10</b> | <b>Zusammenfassung</b>                                           | <b>131</b> |
| <b>A</b>  | <b>Anhang</b>                                                    | <b>135</b> |
| A.1       | Quasikristall-Mathematik . . . . .                               | 135        |
| A.2       | Elektronenbeugung am Festkörper . . . . .                        | 139        |
| A.2.1     | Das reziproke Gitter . . . . .                                   | 141        |
| A.2.2     | Der Anregungsfehler . . . . .                                    | 143        |
| A.3       | Paarkorrelationsfunktion und Beugungsbild . . . . .              | 145        |
| A.4       | Das Rasterelektronenmikroskop . . . . .                          | 147        |
| A.4.1     | Aufbau und Funktion . . . . .                                    | 147        |
| A.4.2     | Abbildung und Kontrast . . . . .                                 | 147        |
| A.4.3     | Energiedispersive Röntgenanalyse . . . . .                       | 147        |

---

|                       |                                                                   |     |
|-----------------------|-------------------------------------------------------------------|-----|
| A.5                   | Das Transmissionselektronenmikroskop (TEM) . . . . .              | 150 |
| A.5.1                 | Aufbau und Funktion des TEM . . . . .                             | 150 |
| A.5.2                 | Kontrastentstehung im TEM . . . . .                               | 153 |
| A.6                   | Das Raster-TEM (STEM) . . . . .                                   | 155 |
| A.6.1                 | Aufbau und Funktion des STEM . . . . .                            | 155 |
| A.6.2                 | Kontrastentstehung, Ordnungszahlkontrast . . . . .                | 156 |
| A.6.3                 | Parallele Elektronen-Energieverlust-Spektroskopie (PEELS) . . . . | 156 |
| Abbildungsverzeichnis |                                                                   | 156 |
| Tabellenverzeichnis   |                                                                   | 161 |
| Literaturverzeichnis  |                                                                   | 163 |

## 1. Einleitung und Zielsetzung des Projekts

## 1.1. Zielsetzung und Zweck des Projekts

## 1.2. Projektziele und -aufgaben

## 1.3. Projektorganisation

## 1.4. Projektbudget

## 1.5.

## Kapitel 1

# EINLEITUNG

Neben den glasartigen und den periodischen, kristallin aufgebauten Festkörpern bilden die Quasikristalle einen dritten Ordnungszustand der Materie.

Alle bis heute bekannten quasikristallinen Phasen werden in metallischen Legierungen beobachtet. Ihr "Erkennungsmerkmal" sind Symmetrieeigenschaften, die aus kristallographischer Sicht verboten sind. In Beugungsexperimenten kann man je nach Legierung Beugungsbilder beobachten, die fünf-, acht-, zehn- oder zwölfzählige Symmetrien in der Reflexanordnung aufweisen. Die scharfen Beugungsreflexe erfordern einerseits eine geordnete Struktur, andererseits zeigte schon Kepler [101], daß solche Symmetrien unvereinbar mit periodischen Gittern sind.

Die meisten quasikristallinen Phasen sind thermodynamisch metastabil, d.h., sie wandeln sich bei Wärmebehandlung in kristalline Phasen um. Allerdings gibt es auch thermodynamisch stabile Phasen, wie zum Beispiel in den Systemen AlCuFe, AlCuRu und AlPdMn. Bei Untersuchungen an Quasikristallen mit Hilfe der Transmissionselektronenmikroskopie kann man gerade bei den stabilen Legierungen eine Reihe von Gitterbaufehlern beobachten.

Wie man aus Untersuchungen von kristallinen Stoffen weiß, sind Defekte eng mit den mechanischen Eigenschaften des Festkörpers verbunden. Neben den Versetzungen, die als Fehler während des Kristallwachstums im Gitter auftreten können, kennt man auch Defekte, die sich bei einer plastischen Verformung im Festkörper ausbilden, um die auftretenden Spannungen zu minimalisieren. Ob solche Zusammenhänge auch für Quasikristalle gelten, ist bis heute nicht bekannt und soll im Rahmen dieser Arbeit untersucht werden.

Um dies zu klären, ist es zunächst notwendig, Methoden zu entwickeln, die es erlauben, die in Quasikristallen auftretenden Defekte zu charakterisieren.

In dieser Arbeit wird zunächst eine Kontrasttheorie für Defekte in Quasikristallen entwickelt, die es ermöglicht, die Eigenschaften der Defekte mit Hilfe der Transmissionselektronenmikroskopie zu bestimmen. Dabei muß die nichtperiodische Gitterstruktur der Quasikristalle berücksichtigt werden. Dazu wird im ersten Teil der Arbeit eine Einführung in die Beschreibung solcher Gitter gegeben. Insbesondere wird erläutert, wie das dreidimensionale, quasiperiodische Gitter von sechsdimensionalen, periodischen Gittern abgeleitet werden kann. Nach der Berechnung der Beugungsbilder folgt dann eine einführende Beschreibung in die Theorie der Defekte in Quasikristallen. Versetzungen und ihrer Charakterisierung durch sechsdimensionale Burgersvektoren werden hier schwerpunktmäßig behandelt. In diesem Kapitel wird auch ein Überblick über die diesbezüglichen Resultate anderer Arbeitsgruppen gegeben.

Hierauf folgt die Ableitung der Kontrasttheorie. Die hier gefundenen und teilweise neuartigen Auslöschbedingungen für den Kontrast von Versetzungen in Quasikristallen

werden exemplarisch diskutiert. Dabei zeigt es sich, daß quantitative Aussagen über die Verzerrungsfelder der Defekte gewonnen werden können.

Der experimentelle Teil der Arbeit beinhaltet die Analyse von Defekten in Quasikristallen, die unter verschiedenen Bedingungen hergestellt worden sind. Untersuchungen von Defekten in langsam erstarrten AlCuFe- und AlPdMn-Quasikristallen zeigen, daß Versetzungen in Quasikristallen zu einer starken lokalen Umordnung der Elementarzellen führen und das Gitter vergleichsweise nur wenig verzerren. In AlPdMn werden erstmals plattenförmige Ausscheidungen beobachtet, an deren Rändern Fehlpassungsversetzungen auftreten. Die sechsdimensionale Burgersvektorrichtung dieser Versetzungen konnte mit der hier entwickelten Kontrasttheorie analysiert werden. Damit konnte zum ersten Mal eine vollständige Analyse der Burgersvektorrichtung durchgeführt werden. Darüberhinaus kann dieses Experiment als erfolgreicher Test der hier entwickelten Kontrasttheorie interpretiert werden.

Wie oben bereits angesprochen, war vor dieser Arbeit nicht bekannt, welche Zusammenhänge zwischen den mechanischen Eigenschaften und der Mikrostruktur der Quasikristalle existieren.

Grundvoraussetzung zur Untersuchung der plastischen Eigenschaften sind große *einquasikristalline* Proben. Im Rahmen dieser Arbeit ist es gelungen, AlPdMn-Einquasikristalle mit Abmessungen von mehreren Zentimetern mit Hilfe der Czochralskimethode zu züchten.

Diese wurden sowohl bei Raumtemperatur als auch bei 750°C verformt. Die anschließende Untersuchung im Transmissionselektronenmikroskop deutet darauf hin, daß die plastische Verformung bei Raumtemperatur über Mikrorißbildung und nachfolgende Abscherung erfolgt.

Die erstmalig an Einquasikristallen durchgeführten Hochtemperaturverformungsexperimente zeigen klar, daß ein Versetzungsmechanismus die tragende Rolle bei der plastischen Verformung spielt.

## EIGENSCHAFTEN VON QUASIKRISTALLEN

### 2.1 Klassifikation nach Symmetrieeigenschaften

1982 fand D. Shechtman bei der elektronenmikroskopischen Untersuchung einer durch schnelles Abkühlen hergestellten AlMn-Legierung ein Beugungsbild, bei dem die Reflexanordnung eine zehnzählige Rotationssymmetrie zeigt (Abb. 2.1) [22]. Die Intensitätsverteilung in Elektronenbeugungsbildern zeigt in erster Näherung einen Schnitt durch das Betragsquadrat der Fouriertransformierten der Paarkorrelationsfunktion bzw. durch das reziproke Gitter des untersuchten Materials (siehe Anhang A.2 und A.3). Besitzt diese Paarkorrelationsfunktion Symmetrien entlang ausgezeichneter Richtungen, so findet sich diese Eigenschaft auch im Elektronenbeugungsbild wieder (siehe Anhang A.3). Aufgrund der Friedelschen Regel beobachtet man aber nur geradzählige Rotationssymmetrien. Eine zweizählige Symmetrieachse führt zwar zu einem zweizähligen Beugungsbild, eine dreizählige Achse aber zu einem sechszähligen Beugungsmuster. Ein zehnzähliges Beugungsbild war nun sehr ungewöhnlich, da bei Festkörpern, die ein geordnetes und periodisches Gitter besitzen, nur zwei-, drei-, vier- und sechszählige Symmetrieachsen möglich sind ([101, 102]). Nur diese sind mit der Translationssymmetrie des Kristalls vereinbar (siehe Abb. 2.2). Alle anderen (bis dahin) bekannten festen Stoffe sind amorph und besitzen Paarkorrelationsfunktionen ohne ausgezeichnete Symmetrierichtungen mit Maxima bei den erlaubten Atomabständen. Im Beugungsbild, also näherungsweise das Betragsquadrat der Fouriertransformierten der Paarkorrelationsfunktion (Anhang A.3), beobachtet man daher *Beugungsringe*. Da Shechtman scharfe Reflexe beobachtete, konnte er sofort einen amorphen Festkörper ausschließen. Als naheliegende Erklärung bot sich zunächst die Verzwillingung geeignet aufgebauter Kristallite an [124, 125]. Diese Erklärung schied aber auch bald aus, da selbst kleinste Körner kristallographisch verbotene Beugungsbilder zeigten. Zudem konnten mit Hilfe der hochauflösenden Transmissionselektronenmikroskopie keine Zwillingskorngrenzen gefunden werden.

Weitere Experimente überzeugten D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias und J.W. Cahn, daß das beobachtete zehnzählige Beugungsbild zu einer fünfzähligen Symmetrierichtung des reziproken Gitters gehören muß: Durch Kippen der Probe im Mikroskop fand Shechtman neben dem zehnzähligen Muster noch weitere zwei- und sechszählige Beugungsbilder. Die Winkel zwischen diesen Beugungsbildern entsprechen genau denen, die man zwischen den Symmetrierichtungen eines Ikosaeders findet. Das zehnzählige Beugungsbild kann man den fünfzähligen Richtungen und das sechszählige den dreizähligen Zonenachsen zuordnen. Die Anordnung und die zugehörigen Beugungsbilder sind in Abbildung 2.3 dargestellt. Aus der Ikosaedersymmetrie leitet sich dann auch der Name für diese Festkörper ab: *ikosaedrische* Quasikristalle. Da die fünfzählige Symmetrieachse über den gesamten Raumwinkel insgesamt sechsmal auftritt, folgt sofort, daß eine solche Struktur nicht trans-

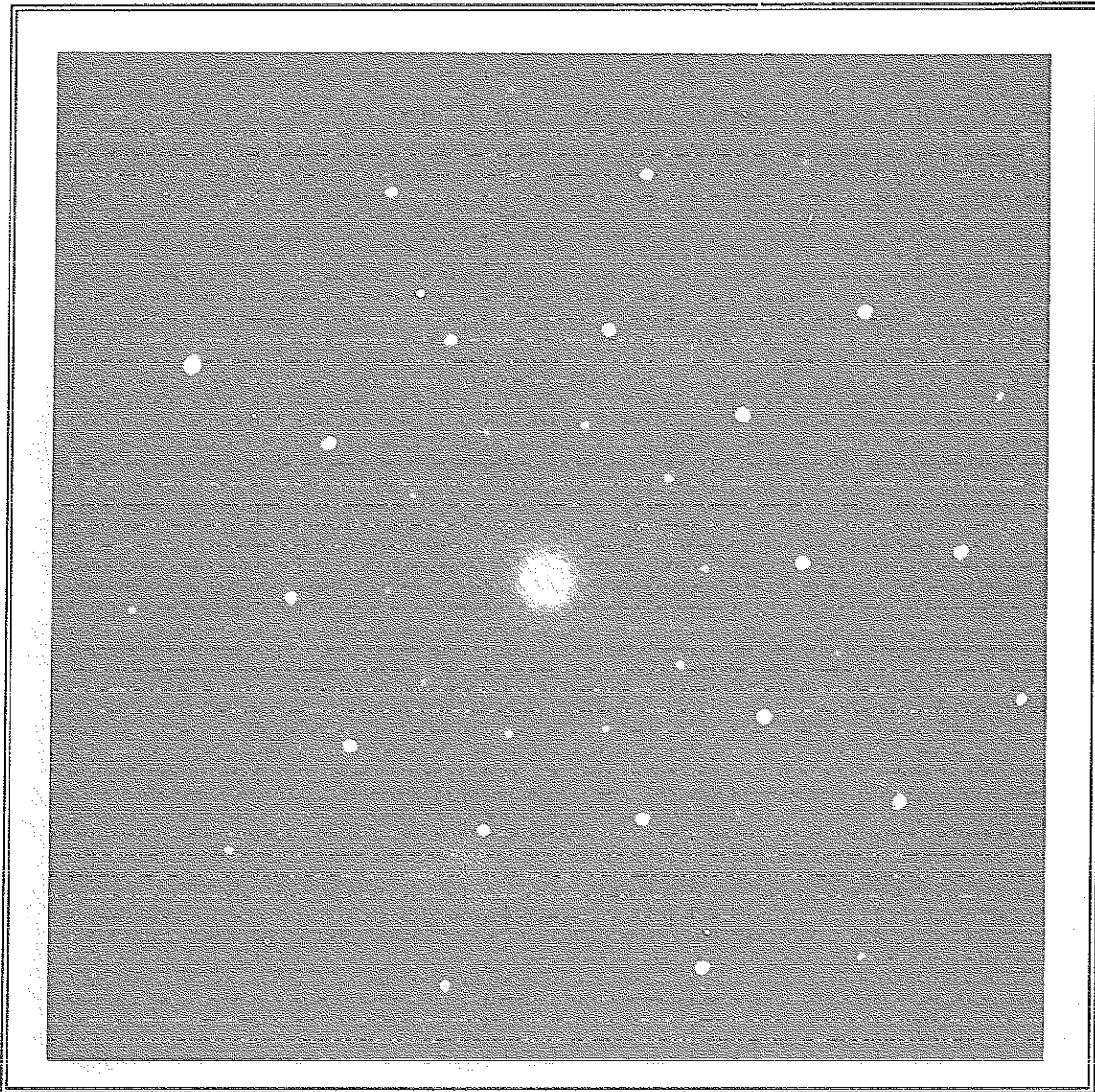


Abbildung 2.1: Typisches, an einer quasikristallinen  $\text{Al}_{84}\text{Mn}_{16}$  Legierung aufgenommenes, Elektronenbeugungsbild mit zehnzähliger Symmetrie.

lationsinvariant ist und daher auch nicht als Kristall bezeichnet werden kann. Die scharfen Reflexe lassen jedoch auf eine Ordnung des Gitters schließen. Dies ist ein Grund für die Bezeichnung Quasikristall.

Seit der Arbeit von Shechtman et al. [143] sind bis heute etwa 100 Legierungen entdeckt worden, die Quasikristalle bilden (für Übersichten siehe [154, 96]).

Neben den ikosaedrischen Quasikristallen, bei denen die Translationssymmetrie in jeder Raumrichtung fehlt, kennt man auch Verbindungen, die als quasikristallin bezeichnet werden und periodische Richtungen in ihrer Struktur aufweisen.

Man unterscheidet insgesamt drei Gruppen:

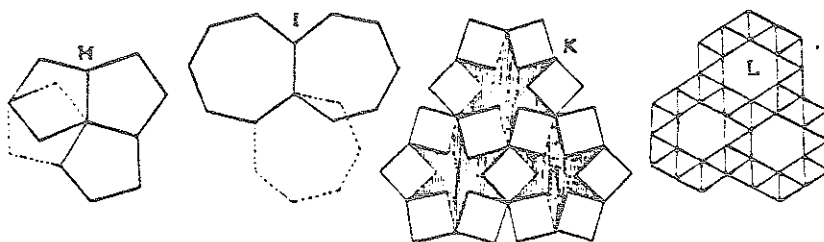
## XVIII. Propositio

Planum locum perfectissimè explent, Plana ejusdem figurae tantum tria, Trigoni seni, Tetragoni quaterni, Hexagoni terni.

10 Nam per XXXIII primi hujus, Trigoni angulus est 2 tertiae unius recti, sex ergò anguli senium Trigonorum, sunt 12 tertiae, id est, 4 integri. Vide D.

D.

Sic Tetragoni angulus est unus rectus, quatuor ergò quaternorum Tetragonorum anguli, faciunt quatuor rectos. Vide E. Sic Hexagoni angulus est octo sextae E. unius recti; tres ergò trium figurarum, faciunt 24 sextas, id est, 4 rectos, vide F. F. At Pentagoni angulus est minor Hexagonico; tres ergò sunt minores 4 rectis; tres ergò hiant. Idem est major Tetragonico: quatuor ergò Pentagonici sunt majores 4 rectis, ergò non capiuntur in uno loco plano, per XVI hujus. Hac de causa vide H, cum quarto Pentagono punctis signato. Sic Heptagoni, et omnium H. 20 majorum figurarum, angulus major est Hexagonico; tres ergò Heptagonici superant 4 rectos. Vide I, ubi duorum Heptagonorum partes in plano tegunt locum 1. eundem.



## XVIII. SATZ.

Der ebene Raum läßt sich aufs vollkommenste nur auf dreierlei Weise mit ein und derselben ebenen Figur ausfüllen: mit jeweils 6 Dreiecken, 4 Vierecken oder 3 Sechsecken.

Denn nach Buch I Satz XXXIII ist der Winkel des Dreiecks  $\frac{3}{2}$  Rechte; also sind die 6 Winkel von je 6 Dreiecken zusammen  $12\frac{1}{2}$  oder 4 Ganze. Siehe Figur D.

Ebenso ist der Viereckswinkel 1 Rechter; die 4 Winkel von je 4 Vierecken bilden also zusammen 4 Rechte; siehe Figur E. Ferner ist der Sechseckswinkel  $\frac{2}{3}$  Rechte; also bilden die 3 Winkel von je 3 solcher Figuren  $2\frac{2}{3}$  oder 4 Rechte; siehe Figur F. Der Fünfeckswinkel jedoch ist kleiner als der Sechseckswinkel; daher sind 3 kleiner als 4 Rechte, sie lassen also eine Lücke. Andererseits ist der Fünfeckswinkel größer als der Viereckswinkel; daher sind 4 Fünfeckswinkel größer als 4 Rechte, sie haben also um einen Punkt herum in der Ebene keinen Platz, nach Satz XVI. Siehe dazu Figur H, wo das vierte Fünfeck punktiert gezeichnet ist. In gleicher Weise ist der Winkel im Siebeneck und in allen größeren Figuren größer als der im Sechseck; also sind 3 Siebeneckswinkel zusammen

Abbildung 2.2: Auszug aus dem zweiten Buch der Harmonices Mundi von Joh. Kepler.

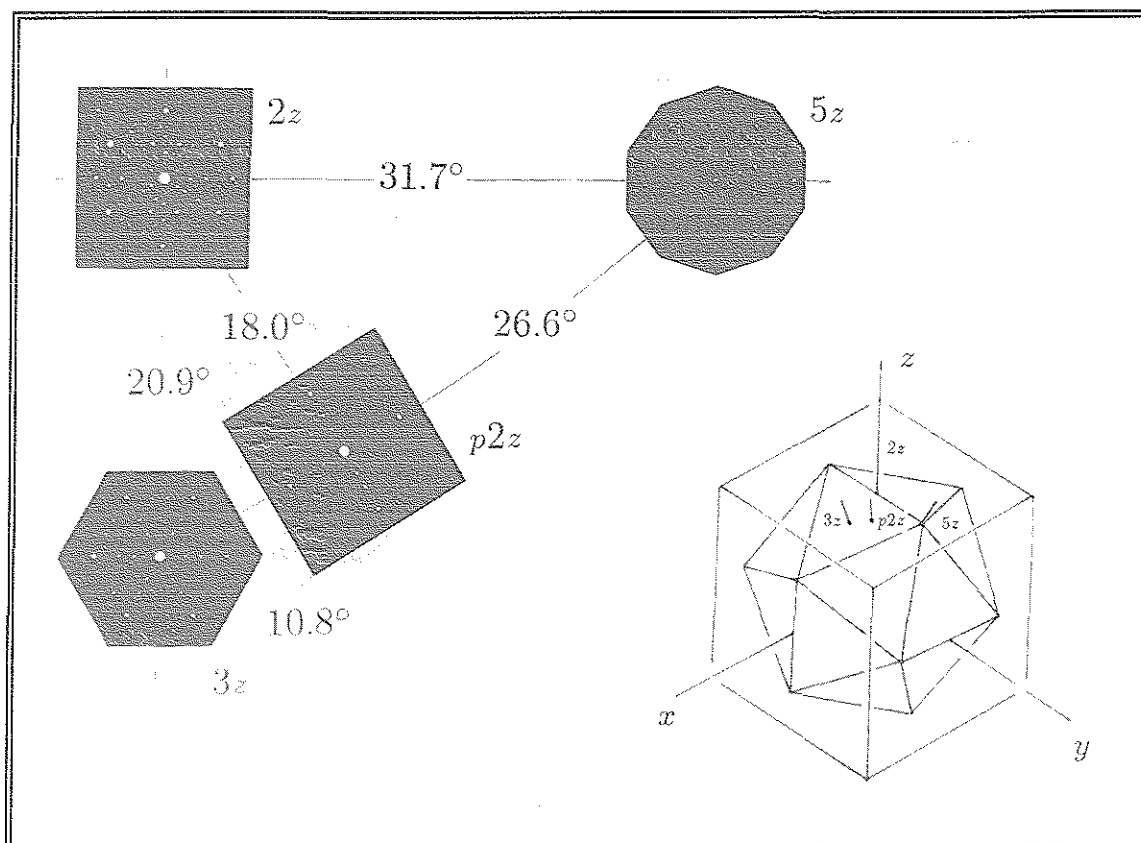


Abbildung 2.3: Die Symmetrieachsen des Ikosaeders mit den zugehörigen Beugungsbildern einer ikosaedrischen AlMn-Legierung.

Die erste Gruppe bilden die bereits beschriebenen ikosaedrischen Quasikristalle. Die bekanntesten Verbindungen sind hier:  $\text{Al}_{86}\text{Mn}_{14}$  [143],  $\text{AlMnSi}$  [68, 88],  $\text{Al}_6\text{CuLi}_3$  [138, 117],  $\text{Al}_{65}\text{Cu}_{20}\text{Fe}_{15}$  [159, 51],  $\text{Al}_{70}\text{Pd}_{20}\text{Mn}_{10}$  [162],  $\text{Al}_{65}\text{Cu}_{20}\text{Ru}_{15}$ ,  $\text{Al}_{65}\text{Cu}_{20}\text{Os}_{15}$  [160],  $\text{Ga}_{16}\text{Mg}_{32}\text{Zn}_{52}$  [123].

Die zweite Gruppe besitzt in ihrer Struktur eine periodische Richtung, entlang derer quasiperiodisch (s. Kapitel 3) aufgebaute Ebenen periodisch aufeinanderfolgen. Hier findet dann eine weitere Unterteilung in oktagonale, dekadonale und dodekadonale Quasikristalle statt. Die Bezeichnung leitet sich von der Symmetrie des reziproken Gitters entlang der periodischen Richtung ab. Diese Untergruppen können dann nochmals unterteilt werden, wenn man die Gitterkonstante entlang der periodischen Achse berücksichtigt.

Bei den acht- und zwölfzähligen gibt es relativ wenig Legierungen. Verbindungen mit achtzähliger Symmetrie:  $\text{V}_{15}\text{Ni}_{10}\text{Si}$ ,  $\text{Cr}_5\text{Ni}_3\text{Si}_2$  [170],  $\text{Mn}_4\text{Si}$  [25],  $\text{Mn}_{82}\text{Si}_{15}\text{Al}_3$  [171]. Verbindungen mit zwölfzähliger Symmetrie:  $\text{Cr}_{70.6}\text{Ni}_{29.4}$  [93],  $\text{V}_3\text{Ni}_2$ ,  $\text{V}_{15}\text{Ni}_{10}\text{Si}$  [30].

Die meisten Mitglieder dieser zweiten Gruppe bilden dekadonale Quasikristalle. Beispiele sind hier  $\text{Al}_{65}\text{Cu}_{20}\text{Co}_{15}$ ,  $\text{Al}_{65}\text{Co}_{20}\text{Ni}_{15}$ ,  $\text{Al}_{65}\text{Cu}_{20}\text{Mn}_{15}$  [74],  $\text{Al}_4\text{Mn}$  [12],  $\text{Al}_{70}\text{Pd}_{17}\text{Mn}_{13}$  [11].

Die dritte Gruppe bezeichnet man häufig als eindimensionale Quasikristalle, da hier

periodisch aufgebaute Ebenen quasiperiodisch gestapelt sind. Bekannte Systeme sind AlPd [28],  $\text{Al}_{80}\text{Ni}_{14}\text{Si}_6$ ,  $\text{Al}_{65}\text{Cu}_{20}\text{Mn}_{15}$ ,  $\text{Al}_{65}\text{Cu}_{20}\text{Co}_{15}$  [73].

Den Quasikristallen strukturell verwandt sind die sogenannten Approximanten. Hierbei handelt es sich um Legierungen, deren Struktur aus einer periodischen Aneinanderfügung von Bauelementen der zugehörigen quasikristallinen Phase erhalten werden kann (siehe Kapitel 3). Die Elementarzellen der Approximanten können mehrere tausend Atome enthalten.

Da die Approximanten innerhalb ihrer Elementarzellen der Struktur der Quasikristalle sehr ähnlich sind, benutzt man sie häufig als Modellsysteme zur Berechnung von physikalischen Eigenschaften, bei denen die Algorithmen auf periodische Randbedingungen angewiesen sind, wie zum Beispiel bei der Bestimmung der elektronischen Zustandsdichte (siehe 2.3).

## 2.2 Bekannte physikalische Eigenschaften

Das (zum Teil) völlige Fehlen einer Gitterperiodizität unterscheidet die Quasikristalle in ihrer Struktur deutlich von den kristallinen Stoffen. Bei der Untersuchung der physikalischen Eigenschaften der Quasikristalle kann man daher auch Ergebnisse erwarten, die sich von denen der kristallinen aber auch der amorphen Festkörper unterscheiden.

Bei den ersten Experimenten zur Untersuchung dieser Eigenschaften standen allerdings nur Proben zur Verfügung, bei denen die Quasikristallite Durchmesser von nur einigen Mikrometern besaßen. Viele der Legierungen, die Quasikristalle bilden, tun dies nur, wenn die Schmelze sehr schnell erstarrt. Gängige Herstellungsverfahren sind hier das Schmelzspinnen [146, 126, 143, 176], das Klatschkokillenverfahren [34] und das Verdüsen kleiner Schmelztröpfchen in einem Fallrohr [66]. Bei Abkühlraten von bis zu  $10^6 \text{ K s}^{-1}$  bleibt der Schmelze nur sehr wenig Zeit um große Körner zu bilden. Bei den zuerst entdeckten Quasikristallen, wie z.B. AlMn, bilden sich mit diesen Methoden zudem nur selten einphasige Proben. Die quasikristallinen Körner findet man häufig in einer kristallinen Matrix eingebettet. Da die meisten quasikristallinen Phasen zudem thermodynamisch metastabil sind, können die Körner auch nicht durch Wärmebehandlungsmethoden vergrößert werden. Für Untersuchungen im Transmissionselektronenmikroskop ist die Größe zwar ausreichend, für verlässliche Messungen von elektronischen, magnetischen und mechanischen Eigenschaften und auch zur Strukturbestimmung mittels Röntgen- und Neutronenstreuung sind größere, einphasige Proben wünschenswert.

In den letzten Jahren wurden Legierungssysteme entdeckt, die thermodynamisch stabile Quasikristalle bilden. Bei den ikosaedrischen Quasikristallen sind hier vor allem die Systeme AlLiCu, AlCuFe, AlCuRu und AlPdMn zu nennen, bei den dekalagonalen AlCuCo, AlCoNi und ebenfalls AlPdMn. Bei einigen liegt diese Stabilität nur in einem bestimmten Temperaturbereich und innerhalb enger Bereiche der Zusammensetzung vor. Erreichbare Korngrößen reichen von einigen Millimetern (AlCuRu, AlLiCu, AlCuCo) bis hin zu mehreren Zentimetern (ikosaedrisches AlPdMn). Die Quasikristalle dieser Legierungssysteme weisen zusätzlich eine hohe strukturelle Perfektion auf. Diese strukturelle Vollkommenheit hat ebenfalls einen großen Einfluß auf die Meßergebnisse. Gängige Herstellungsverfahren sind hier das einfache langsame Erstarren der Schmelze, sowie spezielle Methoden nach Bridgman und Czochralski. Diese Techniken werden im experimentellen Teil der Arbeit

erläutert, da sie zur Herstellung der in dieser Arbeit untersuchten Proben eingesetzt wurden. Als weitere Herstellungsmethoden sind noch das mechanische Legieren [141, 53], Aufdampfverfahren (z.B. sequentielles Aufdampfen bei hohen Temperaturen [10]) und die Ionenimplantation [21] zu nennen.

### 2.3 Elektrische Eigenschaften

Eine der erstaunlichsten Eigenschaften der Quasikristalle ist ihr sehr hoher elektrischer Widerstand. Obwohl diese Legierungen nur aus Metallen bestehen, wobei sehr häufig ein Aluminiumanteil von mehr 60 at% beobachtet werden kann, findet man spezifische Widerstände von  $10000 - 100000 \mu\Omega\text{cm}$  ( $T = 4\text{K}$ ) [14, 103, 110, 1]. Trägt man für verschiedene Quasikristalle die Leitfähigkeit bei  $T = 4\text{K}$  gegen die bei  $T = 300\text{K}$  auf, so findet sich ein linearer Zusammenhang. Danach sollte ein Quasikristall mit einer Leitfähigkeit von  $130 (\Omega\text{cm})^{-1}$  bei  $T = 300\text{K}$  ein isolierendes Verhalten bei  $T = 4\text{K}$  zeigen [110]. Die Leitfähigkeit der Quasikristalle befindet sich demnach in der Nähe eines Metall-Isolator-Übergangs.

Die Messungen der elektrischen Eigenschaften haben auch erste Anzeichen für Anisotropien aufgezeigt. Für zweidimensionale Quasikristalle erwartet man wegen der periodischen Schichtung quasiperiodisch aufgebauter Ebenen eine deutliche Richtungsabhängigkeit. Widerstandsmessungen an dekadagonalen AlCuCo- und AlCoNi-Quasikristallen zeigen hier auch einen deutlichen Effekt [192, 114, 191, 118, 144]. Die Temperaturabhängigkeit des Widerstandsverlauf zeigt entlang der zehnzähligen Richtung ein metallisches Verhalten, während bei der Messung in der quasiperiodischen Richtung eine Widerstandserhöhung mit abnehmender Temperatur beobachtet wird.

Die strukturelle Perfektion des Materials hat ebenfalls direkten Einfluß auf die elektrischen Eigenschaften. Reduziert man die Dichte der Defekte durch geeignete Wärmebehandlung, *erhöht* sich der Widerstand [103].

In einer Modellvorstellung erklärt man diese hohen Widerstände mit der Existenz einer Pseudolücke in der elektronischen Zustandsdichte in der Umgebung der Fermienergie. Diese Eigenschaft ergibt sich bei Berechnungen der elektronischen Zustandsdichte für verschiedene Approximanten der ikosaedrischen Phase in den Systemen AlZnMg und AlCuLi [70, 69]. Experimentell findet man mit Hilfe von Röntgenabsorptions- sowie Photoemissionsuntersuchungen Zustandsdichten von etwa einem Drittel des Wertes, den man bei Annahme eines näherungsweise freien Elektronengases erwarten würde [103]. Diese Pseudolücke steht im Einklang mit der Ansicht, daß Quasikristalle zu den Hume-Rothery-Phasen gehören.

Hume-Rothery-Phasen sind Legierungen, deren Struktur für einen gewissen Stöchiometriebereich stabil ist, wobei eine Grenze dieses Bereichs durch ein charakteristisches Valenzelektronen/Atom-Verhältnis ausgezeichnet ist. Diese  $e/a$ -Verhältnis folgt aus einer Legierungsstöchiometrie, bei der die Fermikugel gerade die Brillouinzone des Quasikristalls berührt. Die Brillouinzone wird durch das reziproke Gitter bestimmt und kann bei Quasikristallen, die ein im mathematischen Sinne dichtes Gitter besitzen, durch die zu den stärksten Beugungsreflexen gehörenden reziproken Gittervektoren festgelegt werden. Aus dem Kontakt der Fermikugel mit der Brillouinzone resultiert dann die Ausbildung einer Pseudolücke. Die Gesamtenergie des Elektronengases wird herabgesetzt, was zu einer

Stabilisierung des Quasikristalls beiträgt [61, 71, 69].

Dies hat eine interessante Konsequenz für eine etwaige technische Anwendung. Materialien wie etwa die Quasikristalle, bei denen die reduzierte Zustandsdichte bis in die Oberfläche reicht, weisen einen niedrigen Oberflächenspannungskoeffizienten auf. Dies hat wiederum zur Folge, daß die Oberfläche schlecht benetzt wird [134]. Naheliegende Anwendungen sind daher z.B. die Beschichtung von Kochgeschirr, wie Bratpfannen, um das Anbacken von Bratgut zu verhindern [48, 120, 121].

## 2.4. Mechanische Eigenschaften

In jüngster Zeit ist neben der Untersuchung der elektrischen Eigenschaften die Erforschung der mechanischen Eigenschaften zunehmend Ziel vieler Experimente.

Bereits kurze Zeit nach ihrer Entdeckung hat man versucht, die Härte der Quasikristalle zu bestimmen. Diese Ergebnisse beruhten aber vielfach auf Messungen an polykristallinem, mehrphasigem Material [31, 150, 166]. Für AlMn- und AlMnFe- Quasikristalle findet man Härten im Bereich von 200 – 400 HV<sup>†</sup> [142, 190, 130, 140]. Im Legierungssystem Al-CuLi wurden Härten von etwa 350 HV gemessen [13]. Köster et al. bestimmten die Härte von ikosaedrischen AlCuFe zu 995 HV und fanden Werte für die kristische Reißfähigkeit, die mit denen von Silizium oder keramischen Werkstoffen vergleichbar sind [106, 107].

Vergleichswerte kristalliner Stoffe: Cu 50 HV, hochfeste Al-Legierungen 185 HV, Si 1020 HV, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 1950 HV.

Mit der Entdeckung von thermodynamisch stabilen Quasikristallen waren dann Messungen an einphasigen und später auch an einkristallinen Proben möglich. An großen AlCuLi- Einquasikristallen hat man erstmals versucht, Anisotropien in ihren mechanischen Eigenschaften zu bestimmen. Dazu wurden neben anderen Experimenten Schallgeschwindigkeitsmessungen von verschiedenen Gruppen durchgeführt. Hier konnte kein Effekt gefunden werden [13, 133, 139]. Dies ist aufgrund der hohen Symmetrie der ikosaedrischen Phase auch nicht ungewöhnlich, da mit gruppentheoretischen Argumenten gezeigt werden kann, daß die Ikosaedersymmetrie zu einem elastisch isotropen Verhalten führt [99, 7, 115].

Bei den seit kurzer Zeit zur Verfügung stehenden einkristallinen AlPdMn-Quasikristallen konnten eine Richtungsabhängigkeit bei der Dämpfung von Schallwellen beobachtet werden. Deren Temperaturabhängigkeit ist für die Schallausbreitung entlang der zwei- und der fünfzähligen Achse unterschiedlich. Man erklärt dies mit einer richtungsabhängigen Aktivierungsenergie für die Phonon-Phason Kopplung (Eine Methode zur Konstruktion quasiperiodischer Gitter benutzt zwei Sorten von Elementarzellen, die nach bestimmten Aufbaueregeln zusammengefügt werden. Verletzungen dieser Aufbaueregeln bezeichnet man als Phasonen. Siehe auch Kapitel 5). Demnach sind Phasonensprünge (das ist die Diffusion einer Aufbauregelverletzung) entlang einer fünfzähligen Achse energetisch leichter als entlang einer zweizähligen Richtung [2].

Im Gegensatz zu den ikosaedrischen sollte bei dekalagonalen Quasikristallen ein deutlicher Effekt im elastischen Verhalten zu beobachten sein, da die periodische Achse die Symmetrie stark herabsetzt. Wie bereits im vorherigen Abschnitt beschrieben, zeigen sich

<sup>†</sup>Härte nach Vickers

in den elektronischen Eigenschaften deutliche Anisotropien. Doch bei den mechanischen Eigenschaften wie Härte und kritischer Rißzähigkeit zeigen sich nur kleine Unterschiede zwischen periodischer und quasiperiodischer Richtung [177, 175]. Allerdings konnte bei der Untersuchung des abrasiven Reibungskoeffizienten eine deutliche Anisotropie gefunden werden [177, 175].

Neuere Experimente befassen sich zunehmend mit der Erforschung der mechanischen Eigenschaften im Hinblick auf eine technologische Anwendung. Bei Beschichtungen aus AlCuFe-Quasikristallen auf kommerziellen Werkstoffen finden Dubois et al. Härten im Bereich von 1000 HV. Gegenüber gebräuchlichen normalkristallinen Aluminiumlegierungen erreicht man somit Steigerungen bis zu einem Faktor 10. Der Reibungskoeffizient liegt bei etwa der Hälfte des Wertes, der bei konventionellen Aluminiumlegierungen gefunden wird [48]. Diese Ritzversuche liefern auch weitere Evidenz für ein duktiles Verhalten der quasikristallinen Beschichtung, wie es bereits von Vollmer und Hornbogen [167], Schandel [140] und Wittmann [175] bei anderen quasikristallinen Legierungen beobachtet wurde.

Die Korrosionsbeständigkeit von quasikristallinen Legierungen wurde ebenfalls untersucht. Hier zeigen die Quasikristalle gegenüber kristallinen Aluminiumlegierungen eine ähnliche Beständigkeit [47, 119]. Verbesserungen gegenüber anderen Legierungen werden der Zusammensetzung, nicht aber der besonderen Struktur der Quasikristalle zugeschrieben.

Die Untersuchung der plastischen Eigenschaften von Quasikristallen mit Hilfe von Verformungsexperimenten stellt einen Schwerpunkt dieser Arbeit dar. Daher werden die hier relevanten Ergebnisse anderer Arbeitsgruppen bei der Diskussion der in dieser Arbeit erzielten Resultate vorgestellt.

### Kapitel 3

## DIE GITTERSTRUKTUR DER QUASIKRISTALLE

Die erste Frage, die sich nun stellt, lautet:

Wie kann man die Gitterstruktur der Quasikristalle beschreiben?

Kristalle können aufgrund ihrer Gitterperiodizität mit einer einzigen *Elementarzelle* beschrieben werden. Dies scheidet bei den Quasikristallen aus, da die beobachteten Symmetrien nicht mit einer Translationsinvarianz vereinbar sind. Dies bedeutet aber, daß diese Festkörper aperiodisch aufgebaut sein müssen. Damit stellt sich folgendes Problem:

Wieviel Bausteine braucht man mindestens, um den Raum (oder auch die Ebene) lückenlos und aperiodisch auszufüllen?

Die bekannteste Lösung solcher Parkettierungsprobleme wurde 1979, vor der Entdeckung der Quasikristalle, von R. Penrose vorgeschlagen [128]. Er fand zwei Polygone, mit denen man bei Beachtung bestimmter Aufbaueregeln die Ebene lückenlos und nicht periodisch ausfüllen kann. 1981 wurde von de Bruijn eine algebraische Ableitung des Penroseusters angegeben [43]. Einen Ausschnitt zeigt Abbildung 3.1. Es besteht aus zwei Sorten von Rauten, die beide gleiche Kantenlängen besitzen, aber sich durch ihren Öffnungswinkel unterscheiden. Eine besondere Eigenschaft dieses Musters ist seine

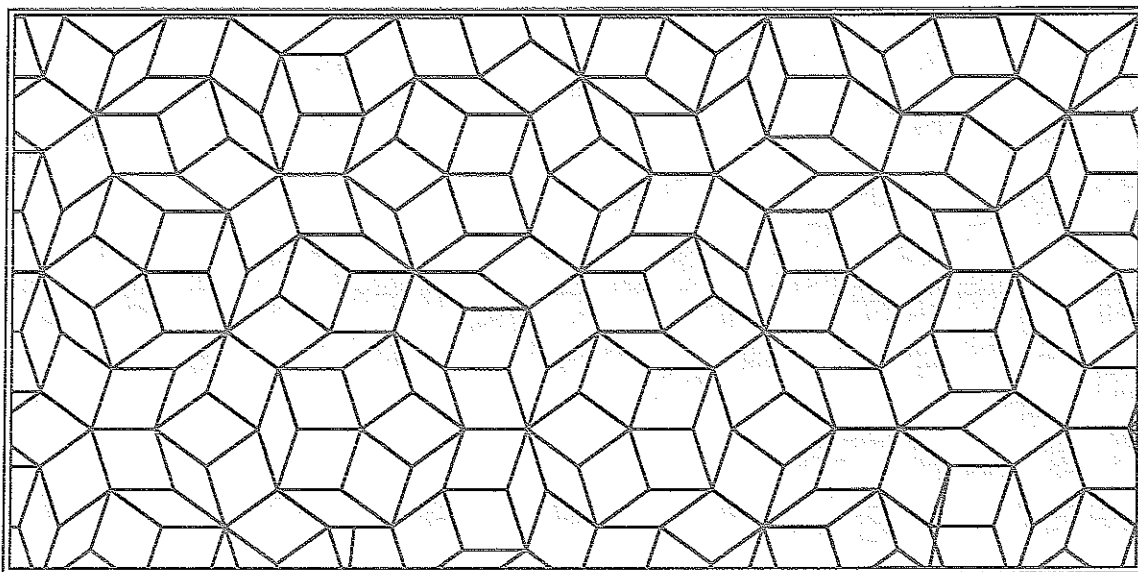


Abbildung 3.1: Das Penrosemuster.

Orientierungsordnung:

Sortiert man die Kanten des Musters nach Ihren Richtungen, so wird man nur Orientierungen finden, die auf die Ecken eines regelmäßigen Zehneckes zeigen. Dies ergibt sich aus den Öffnungswinkeln der Rauten. Der  $36^\circ$ -Winkel der schmalen Raute paßt zweimal in den  $72^\circ$ -Winkel der breiten Rauten. Dieser wiederum ergibt fünfmal aneinandergelegt  $360^\circ$ . Damit können nur Vielfache von  $36^\circ$  als Winkel zwischen den Kanten auftreten.

In einer 1984 veröffentlichten Arbeit entwickelten Kramer und Neri die Ideen de Bruijn's weiter und gaben erstmals Lösungen für dreidimensionale nicht periodische Parkettierungen an [108]. Eine dieser Parkettierungen stellt heute die Grundlage für die Beschreibung ikosaedrischer Quasikristalle dar. Wie das Penrosemuster besitzt sie zwei Elementarbausteine, ein dünnes und ein dickes Rhomboeder. Prinzipiell könnte die Konstruktion dieses Gitters auch mit Hilfe von Aufbaueregeln durchgeführt werden, Kramer und Neri fanden aber einen Weg, wie solche Strukturen direkt von anderen Gittern abgeleitet werden können (Netzmethode oder engl.: grid-method). Unabhängig wurden von Elser [57] und Duneau und Katz [49, 100] Methoden beschrieben, die ebenfalls die Konstruktion solcher Gitter ermöglichen (Streifenmethode oder engl.: strip-method).

Beide Formalismen sind äquivalent [64]. Allerdings ist es mit der Streifenmethode leichter, bestimmte Eigenschaften der Quasikristalle, insbesondere ihre Defekte, zu beschreiben. Daher soll im folgenden auch nur diese dargestellt werden.

Aus Gründen der Verständlichkeit wird zunächst die Konstruktion eines eindimensionalen quasiperiodischen Gitters beschrieben. Die eingeführten Methoden als auch die hier auftretenden Eigenschaften lassen sich dann ohne weiteres auf den dreidimensionalen Fall übertragen.

### 3.1 Das eindimensionale Quasigitter

Im Prinzip könnte man die Methoden zur Konstruktion quasiperiodischer Gitter unabhängig von den experimentellen Fakten einführen (so ist es auch tatsächlich geschehen). Zur Motivation soll hier aber erst noch ein kleiner Exkurs zur Dichtewellenbeschreibung gemacht werden, in dessen Verlauf dann auch einige grundlegenden Begriffe und Eigenschaften der Quasikristalle erläutert werden können.

Dazu betrachte man zunächst die Reflexe im zehnzähligen Elektronenbeugungsbild, das entlang einer fünfzähligen Achse einer ikosaedrischen AlPdMn-Legierung gewonnen wurde (Abbildung 3.2). Die Reflexe A und B bilden mit dem Ursprung O ein gleichschenkliges Dreieck mit einem Winkel von  $36^\circ$  bei O. Ein weiteres gleichschenkliges Dreieck bilden die Punkte O, A und C mit einem Winkel von  $108^\circ$  bei A. Die (senkrechte) Projektion der Strecke  $\overline{OA}$  auf  $\overline{OC}$  teilt diese in zwei gleiche Stücke auf. Setzt man nun  $\overline{OA} = \overline{OB} = 1$  so ist  $\overline{OC} = 2 \cos 36^\circ = 1.618 \dots = \tau$ .

Analysiert man das Bild weiter in diesem Sinne, so findet man, daß sich jede Reflexposition  $\vec{g}$  als Linearkombination von vier Vektoren  $\vec{e}_i$  angeben läßt:

$$\vec{g} = a_1 \vec{e}_1 + a_2 \vec{e}_2 + a_3 \vec{e}_3 + a_4 \vec{e}_4. \quad (3.1)$$

Mit den Vektoren:

$$\vec{e}_1 = \vec{e}_x \quad \vec{e}_2 = \tau \vec{e}_x$$

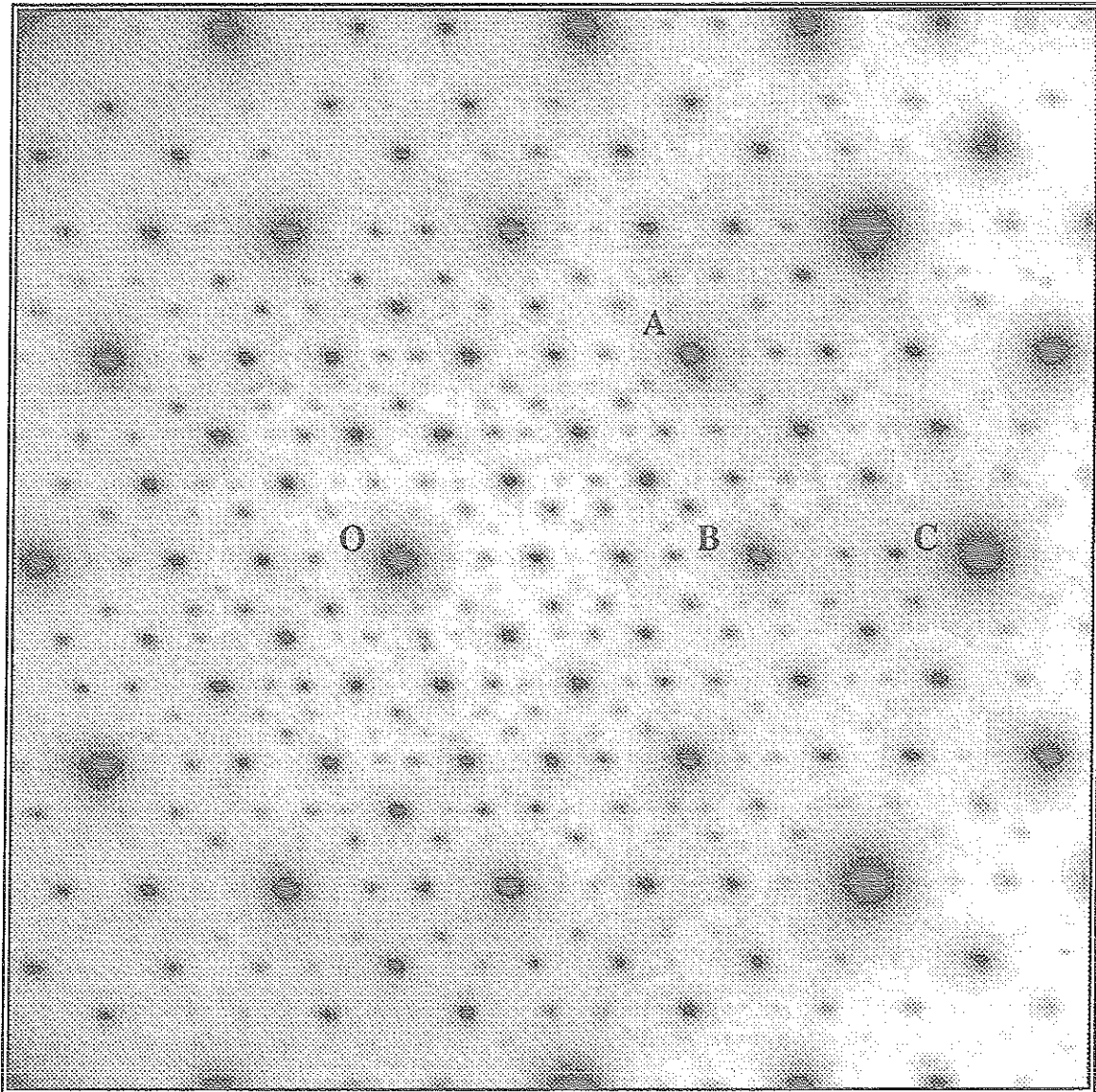


Abbildung 3.2: Negativdarstellung eines zehnzähligen Elektronenbeugungsbildes, gewonnen an einer ikosaedrischen AlPdMn-Legierung entlang einer fünfzähligen Symmetrieachse.

$$\vec{e}_3 = \vec{e}_y \quad \vec{e}_4 = \tau \vec{e}_y \quad (3.2)$$

und

$$\vec{e}_x \vec{e}_x = \vec{e}_y \vec{e}_y = 1 \quad \text{sowie} \quad \vec{e}_x \vec{e}_y = 0$$

Läßt man für die Koeffizienten  $a_i$  nur ganze Zahlen zu, so sind die vier Basisvektoren linear unabhängig, da  $\tau$  eine irrationale Zahl ist. Die Längen der parallelen Vektoren  $\vec{e}_1$  und  $\vec{e}_2$  bzw.  $\vec{e}_3$  und  $\vec{e}_4$  sind somit zueinander inkommensurabel.  $\tau$  nennt man auch die Zahl des goldenen Schnitts und berechnet sie gemäß  $\tau = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{5})$  [72, 76].

Im Rahmen einer Dichtewellentheorie beschreibt man die Masse- oder auch die Elek-

tronendichte einer Struktur mit Hilfe einer Fourierentwicklung der Dichtefunktion.

$$\rho(x) = \sum_{n=0}^{\infty} A^n \cos(2\pi \vec{k}^n \vec{x}). \quad (3.3)$$

Wie oben bereits erwähnt, ist die Intensitätsverteilung des Beugungsbildes in erster Näherung ein Schnitt durch das Betragsquadrat der Fouriertransformierten der Paarkorrelationsfunktion der untersuchten Struktur (Anhang A.2, A.3). Bestimmte Eigenschaften des Beugungsbildes eines Quasikristalls, müssen daher bei der Aufstellung der Fourierentwicklung berücksichtigt werden.

Aus der Beobachtung scharfer Beugungsreflexe in bestimmten Richtungen folgt sofort, daß in der realen Struktur entlang dieser Richtungen Verbindungsvektoren des Gitters liegen (Orientierungsordnung des Gitters!). In der Dichtewellebeschreibung bedeutet dies, daß einzelne Dichtewellen vergleichsweise große Amplituden  $A^n$  besitzen, während andere Wellen, deren Wellenvektoren  $\vec{k}^n$  zu den reziproken Gittervektoren der Reflexe mit geringer Intensität gehören, nur kleine Amplituden haben werden. Die Richtungen der zugehörigen Wellenvektoren müssen außerdem die Symmetrieeigenschaften der Beugungsbilder berücksichtigen. Die zueinander inkommensurablen Reflexabstände führen dann zu einem Ansatz für die Dichtewellen, der für jede Raumrichtung zwei zueinander inkommensurable Wellenlängen beinhaltet. In einer Dimension ergibt sich:

$$\rho(x) = \sum_{n=0}^{\infty} A^n \cos(2\pi k_1^n x + 2\pi \tau k_2^n x). \quad (3.4)$$

Eine solche (Dichte-)Funktion nennt man quasiperiodisch, da hier periodische Funktionen mit zueinander inkommensurablen Wellenlängen überlagert werden. Der Funktionsverlauf für  $A^0 = 2, A^1 = A^2 = 1$  und  $A^{n>2} = 0$ , sowie  $k_1^0 = k_2^0 = 0, k_1^1 = k_2^2 = 1$  und alle anderen  $k_1^{n/2} = 0$  ist in Abbildung 3.3 dargestellt.  $\rho(x)$  lautet in diesem Fall:

$$\rho(x) = 2 + \cos(2\pi x) + \cos(2\pi \tau x). \quad (3.5)$$

Diese Funktion läßt sich auch von einer periodischen Funktion ableiten. Betrachtet man zunächst die zweidimensionale Funktion

$$\tilde{\rho}(x, y) = 2 + \cos(2\pi x) + \cos(2\pi y), \quad (3.6)$$

so erhält man mit der Parameterisierung  $y = \tau x$  die Gleichung 3.5. Diese Parameterisierung entspricht einem Schnitt durch  $\tilde{\rho}(x, y)$ , wobei die Schnittgerade die Steigung  $\tau$  besitzt. Hierbei soll nochmal hervorgehoben werden, daß  $\tau$  irrational ist, denn erst dadurch wird der Verlauf von  $\rho(x)$  aperiodisch bzw. quasiperiodisch. In Abbildung 3.4 ist dies graphisch dargestellt. Nähert man den Wert von  $\tau$  durch einen Bruch ganzer Zahlen  $a/b$  an, so wird Gleichung 3.5 zu

$$\tilde{\rho}(x) = 2 + \cos(2\pi x) + \cos(2\pi \frac{a}{b} x). \quad (3.7)$$

Hier ist  $\tilde{\rho}(x)$  dann periodisch mit der Periodenlänge  $b$ , da

$$\tilde{\rho}(x + b) = 2 + \cos(2\pi (x + b)) + \cos(2\pi \frac{a}{b} (x + b)) = \tilde{\rho}(x). \quad (3.8)$$

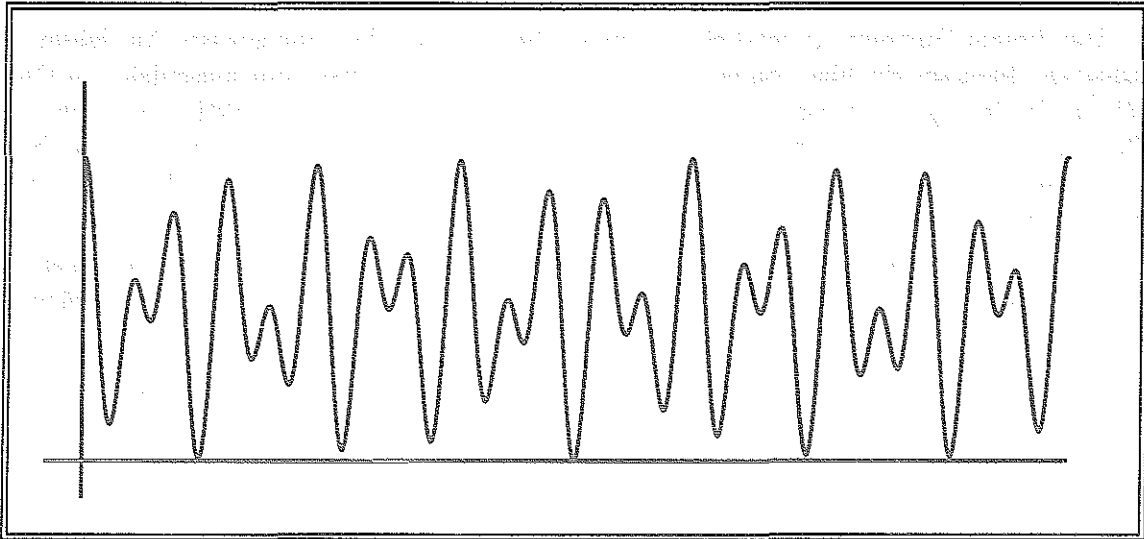


Abbildung 3.3: Verlauf der Funktion  $\rho(x) = 2 + \cos(2\pi x) + \cos(2\pi \tau x)$  im Intervall  $x = [0, 13]$ .

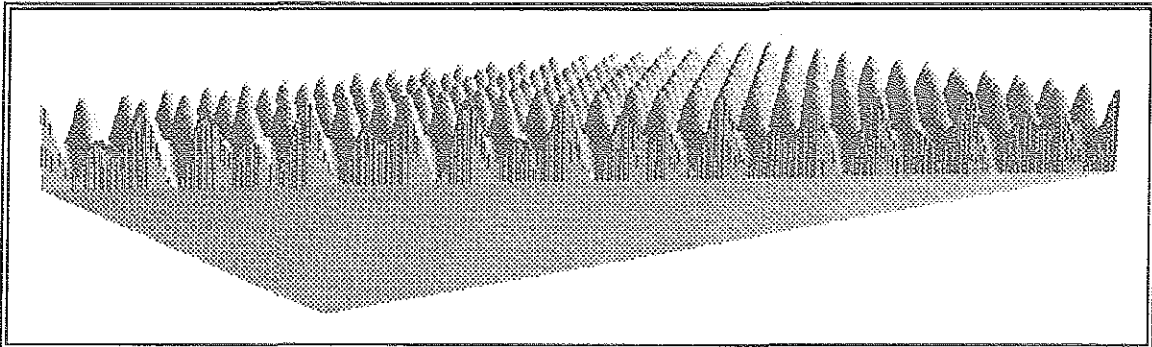


Abbildung 3.4: Schnitt durch die zweidimensionale Funktion  $\tilde{\rho}(x, y) = 2 + \cos(2\pi x) + \cos(2\pi y)$ . Die Steigung der Schnittgerade beträgt  $\tau$ .

Diese Beispiel zeigt, daß aperiodische Strukturen mit Hilfe eines Schnitts durch eine höherdimensionale, periodische Funktion gewonnen werden können [8].

Der kontinuierliche Verlauf von Gleichung 3.5 eignet sich natürlich nicht für die Beschreibung eines diskreten Gitters. Im Rahmen der Dichtewellentheorie würde man zur besseren Beschreibung eines quasiperiodischen Gitters weitere Dichtewellen in die Fouriersumme einfügen.

Soll die gerade beschriebene Schnittmethode weiterverfolgt werden, könnte man die "Hügellandschaft" in Abbildung 3.4 zunächst durch ein periodisches Punktgitter ersetzen. Aufgrund ihrer irrationalen Steigung trifft die Schnittgerade hier allerdings höchstens einen Gitterpunkt. Wenn die Schnittgerade durch zwei Gitterpunkte verläuft, ist die Steigung rational, da die Differenz der  $x$ - bzw.  $y$ -Koordinate durch ganze Zahlen gegeben ist. Man erhält dann ein periodisches Gitter (s.a. Gleichung 3.8).

Um diesem Dilemma zu entfliehen, müssen die Gitterpunkte eine gewisse Ausdehnung erhalten. Man spricht hier von einer *Dekoration* der Gitterpunkte mit ausgedehnten Objekten. In dem gerade vorgestellten Beispiel einer eindimensionalen Funktion, wurden die Punkte des zweidimensionalen Gitters mit einem durch Cosinus-Funktionen beschriebenen "Hügel" dekoriert. Das Gitter, durch das der Schnitt gelegt wird, bezeichnet man oft als Hypergitter.

Die "Schnitt-und-Projektions-Methode" (engl.: Cut and Project Method), welche erstmals von Katz und Duneau angegeben wurde [100], benutzt Dekorationen, die zu einem diskreten quasiperiodischen Gitter führen. Die folgende Beschreibung dieses Verfahrens bezieht sich auf eine Arbeit von D. Gratias[129], die diese Methode in sehr allgemeiner Form darstellt.

### 3.1.1 Die Schnitt-und-Projektions-Methode

Wie bereits angedeutet, beginnt man die Konstruktion eines eindimensionalen, quasiperiodischen Gitters mit einem zweidimensionalen, quadratischen Punktgitter (Hypergitter). Alle Positionen in diesem Hypergitter lassen sich als Linearkombination zweier orthogonaler Gittervektoren angeben:

$$\vec{h} = h_1 \vec{e}_1 + h_2 \vec{e}_2 = \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_1 a_0 \\ m_2 a_0 \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

$m_1, m_2$  sind ganze Zahlen, und  $a_0$  ist die Gitterkonstante. Das Hypergitter wird dann durch eine Summe von Delta-Distributionen<sup>†</sup> beschrieben:

$$\gamma_H(h_1, h_2) = \sum_{m_1, m_2 = -\infty}^{+\infty} \delta(h_1 - m_1 a_0) \delta(h_2 - m_2 a_0). \quad (3.10)$$

Im Laufe dieser Ableitung werden verschiedene Koordinatensysteme eingeführt. Um deutlich zumachen, welches gerade benutzt wird, werden die Funktionssymbole mit einem entsprechenden Index versehen. Der Index  $H$  bezeichnet das Koordinatensystem des Hypergitters.

Wie oben bereits erwähnt, muß das Hypergitter geeignet dekoriert werden, damit ein Schnitt mit irrationaler Steigung durch dieses Gitter nicht nur einen einzigen Gitterpunkt trifft. Man besetzt daher jeden Punkt des Hypergitters mit einer *atomaren Hyperfläche*. Im Fall des eindimensionalen Quasikristalls sind diese atomaren Hyperflächen *Linienstücke*, die auf den Gitterpunkten des Hypergitters plaziert werden. Dadurch erhält man bei einem eindimensionalen Schnitt nur *Schnittpunkte*. Für diese Dekoration führt man zunächst ein neues, ebenfalls orthogonales Koordinatensystem  $E_D$  ein (Abb. 3.5). Die Koordinaten  $t_1$  und  $t_2$  von  $E_D$  erhält man aus den Koordinaten des Hypergitters  $h_1$  und  $h_2$  durch eine Drehung um einen Winkel  $\theta$ :

$$\begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \end{pmatrix} \quad \text{oder kurz} \quad t_i = \sum_{j=1}^2 d_{ij} h_j \quad i = 1, 2. \quad (3.11)$$

<sup>†</sup> $\delta(x)$  bezeichnet im folgenden immer die Diracsche Delta-Distribution

Die Rücktransformation lautet dann:

$$h_i = \sum_{j=1}^2 \tilde{d}_{ij} t_j \quad i = 1, 2 \text{ und } d_{ij} = \tilde{d}_{ji}. \quad (3.12)$$

Die Dekoration in Form von Linien kann prinzipiell eine beliebige Form haben. Der Einfachheit halber sollen hier aber nur *Geradenstücke* benutzt werden. Der Übergang zu einem neuen, gedrehten Koordinatensystem, nämlich  $E_D$ , hat dann den Vorteil, daß die Funktion, welche die Hyperflächen beschreibt, in Terme aufgespalten werden kann, die jeweils nur von einer Koordinate abhängig sind. Dazu wählt man eine Achse des neuen Koordinatensystems parallel zu den Geradenstücken der Dekoration. Die Funktion, die die Dekoration beschreibt, lautet dann:

$$\Omega_D(t_1, t_2) = \delta(t_1) \omega_D(t_2), \quad (3.13)$$

mit der Kastenfunktion

$$\omega_D = \begin{cases} 1 & ; \quad |t_2| \leq \frac{v}{2} \\ 0 & ; \quad \text{sonst} \end{cases} \quad (3.14)$$

$v$  ist die Länge der atomaren Hyperfläche (des Geradenstücks).

Formell wird die Dekoration des Hypergitters ( $\gamma_H(h_1, h_2)$ ) mit  $\Omega_D(t_1, t_2)$  mittels einer Faltung durchgeführt. Zuvor wird  $\Omega_D(t_1, t_2)$  noch durch die Transformationsgleichungen 3.12 in das Hypergitterkoordinatensystem  $E_H$  transformiert. Der Ausdruck für das dekorierte Gitter,  $H_H(h_1, h_2)$ , ist dann:

$$\begin{aligned} H_H(h_1, h_2) &= \gamma_H(h_1, h_2) * \Omega_H(h_1, h_2)^\dagger \\ &= \int \gamma_H(\zeta_1, \zeta_2) \Omega_H(h_1 - \zeta_1, h_2 - \zeta_2) d\zeta_1 d\zeta_2 \\ &= \sum_{m_1, m_2} \delta\left(\sum_{j=1}^2 d_{1j}(h_j - m_j a_0)\right) \omega_H(h_1, h_2). \end{aligned} \quad (3.15)$$

wobei dann

$$\omega_H(h_1, h_2) = \begin{cases} 1 & ; \quad \left| \sum_{j=1}^2 d_{2j}(h_j - m_j a_0) \right| \leq \frac{v}{2} \\ 0 & ; \quad \text{sonst} \end{cases} \quad (3.16)$$

Ein Beispiel für ein solches dekoriertes Gitter ist in Abbildung 3.5 gezeigt. Durch dieses Gitter kann nun eine Schnittgerade gelegt werden, wobei diese zunächst in einer beliebigen Orientierung zum Koordinatensystem des Hypergitters,  $E_H$ , gewählt werden kann. Bestimmt wird die Richtung durch ein weiteres Koordinatensystem  $E_S$  mit den Koordinaten  $s_1$  und  $s_2$ . Die  $s_1$ -Achse wird als Schnittgerade gewählt (Abbildung 3.6). Wie  $E_D$  ist auch  $E_S$  durch eine Drehung mit dem Koordinatensystem  $E_H$  verknüpft:

$$s_i = \sum_{j=1}^2 c_{ij} h_j \quad i = 1, 2, \quad (3.17)$$

mit der Rücktransformation:

$$h_i = \sum_{j=1}^2 \tilde{c}_{ij} s_j \quad i = 1, 2 \text{ und } c_{ij} = \tilde{c}_{ji}. \quad (3.18)$$

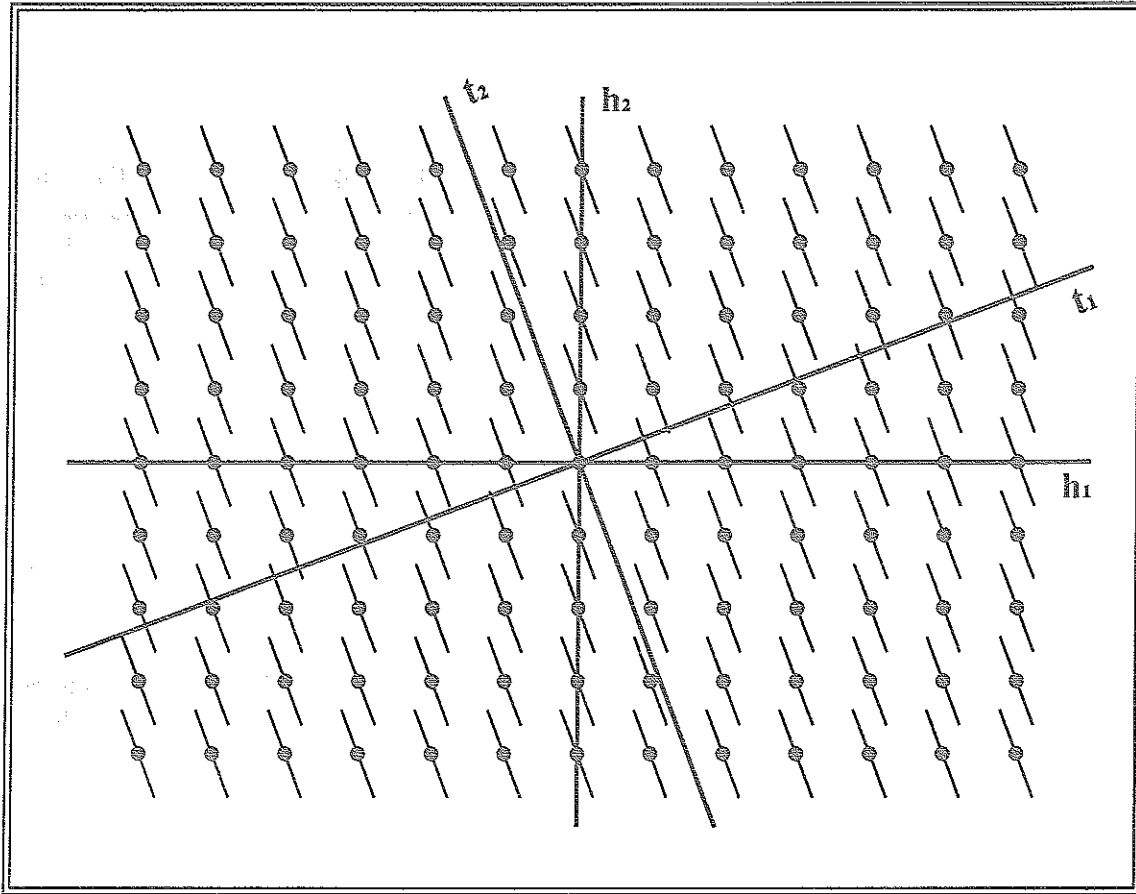


Abbildung 3.5: Beispiel für ein mit atomaren Hyperflächen dekoriertes zweidimensionales Gitter.

Den Schnitt mit der  $s_1$ -Achse beschreibt man dann formell durch eine Multiplikation des Ausdrucks für das dekorierte Gitter,  $H_S(s_1, s_2)$ , mit  $\delta(s_2)$  und anschließender Integration über  $s_2$ . Um den Schnitt durchzuführen, könnte man die Koordinate  $s_2$  auch einfach zu Null setzen. Die Darstellung mit der Delta-Distribution ist aber für die spätere Berechnung der Beugungsbilder von Vorteil und wird bereits hier eingeführt. Der Ausdruck für den Schnitt durch das dekorierte Hypergitter lautet also:

$$G_{1D}(s_1) = \int \gamma_S(\zeta_1, \zeta_2) \Omega_S(s_1 - \zeta_1, s_2 - \zeta_2) \delta(s_2) d\zeta_1 d\zeta_2 ds_2 \quad (3.19)$$

$$= \sum_{\{m_1, m_2\}} \delta\left(\sum_{j=1}^2 d_{1j}(\tilde{c}_{j1}s_1 - m_j a_0)\right) \omega_S(s_1, 0). \quad (3.20)$$

mit

$$\omega_S(s_1, 0) = \begin{cases} 1 & ; \quad \left| \sum_{j=1}^2 d_{2j}(\tilde{c}_{j1}s_1 - m_j a_0) \right| \leq \frac{v}{2} \\ 0 & ; \quad \text{sonst} \end{cases} \quad (3.21)$$

Schließlich werden in einem letzten Konstruktionsschritt die so gewonnenen Schnittpunkte nochmals auf eine weitere Gerade projiziert. Die Gerade, auf die projiziert wird, hat die

Koordinate  $x_{\parallel}$  und wird mit  $E_{\parallel}$  bezeichnet. Da die Gitterpunkte des physikalischen Quasikristalls in  $E_{\parallel}$  angegeben werden, bezeichnet man diese Gerade häufig als *physikalischen Raum* oder auch *parallelen Raum*. Die Bezeichnung "Raum" ist hier ein Vorgriff auf die Beschreibung eines dreidimensionalen Quasikristalls, bei der  $E_{\parallel}$  dann tatsächlich einen dreidimensionalen, und nicht wie hier eindimensionalen, Raum bezeichnet. Auch spricht man von Unterraum  $E_{\parallel}$ . Orthogonal zu  $E_{\parallel}$  liegt dann der Unterraum  $E_{\perp}$  oder auch *senkrechte Raum* mit der Koordinate  $x_{\perp}$ .

An dieser Stelle soll betont werden, daß der Quasikristall natürlich nur in einer Dimension (später dann in drei Dimensionen) real existiert. Die Verwendung von höherdimensionalen Gittern ist lediglich eine Konstruktionshilfe. Zudem lassen sich so verschiedene Eigenschaften der Quasikristalle, insbesondere deren Defekte, in einer systematischeren Art und Weise beschreiben (s. Kapitel 5).

Auch  $x_{\parallel}$  ( $= x_1$ ) und  $x_{\perp}$  ( $= x_2$ ) sind mit dem Koordinatensystem  $E_H$  durch eine Drehmatrix verbunden. Die Transformationsgleichungen lauten:

$$x_i = \sum_{j=1}^2 p_{ij} h_j \quad i = 1, 2, \quad (3.22)$$

und

$$h_i = \sum_{j=1}^2 \tilde{p}_{ij} x_j \quad i = 1, 2 \text{ und } p_{ij} = \tilde{p}_{ji}. \quad (3.23)$$

Diese Transformation wird hier aber nicht mehr explizit in Gleichung 3.20 eingesetzt, da dies für eine eindimensionale Punktfolge nur zu einer generellen Stauchung bzw. Streckung der Gitterabstände führt. Darüberhinaus können später einige Einschränkungen gemacht werden, in deren Folge diese Transformation praktisch wegfällt.

Doch soll zunächst erklärt werden, wie der Ausdruck 3.20 interpretiert werden kann. Er besteht aus zwei Termen, von denen der erste,

$$\delta\left(\sum_{j=1}^2 d_{1j} (\tilde{c}_{j1} s_1 - m_j a_0)\right),$$

nur Beiträge liefert, falls

$$\sum_{j=1}^2 d_{1j} (\tilde{c}_{j1} s_1 - m_j a_0) = 0. \quad (3.24)$$

Die Gesamtheit der Lösungen dieser Gleichung lautet:

$$s_1(m_1, m_2) = \frac{1}{\sum_{l=1}^2 d_{1l} \tilde{c}_{l1}} (d_{11} m_1 a_0 + d_{12} m_2 a_0). \quad (3.25)$$

Diese Gleichung beschreibt die Projektion sämtlicher Gitterpunkte des zweidimensionalen Hypergitters mit der Gitterkonstante  $a_0$  auf eine Gerade in diesem Gitter mit der Steigung  $d_{12}/d_{11}$  (Diese entspricht gerade der  $t_1$ -Achse von  $E_D$ ). Zusätzlich erfahren die Gitterabstände noch eine Stauchung oder Streckung um den Faktor  $\sum_{l=1}^2 d_{1l} \tilde{c}_{l1}$ . Das Verhältnis  $d_{12}/d_{11} = r_D$  bestimmt nun, ob das so erhaltene eindimensionale Gitter periodisch oder nichtperiodisch ist. Ist  $r_D$  rational, ergibt sich ein periodisches Punktgitter. Dies wird sofort einsichtig, wenn man den Projektionsvorgang als Schnitt durch ein dekoriertes Gitter

auffaßt. Für eine Projektion muß das zu projizierende Gitter mit unendlich langen Geraden dekoriert werden, die parallel zur Projektionsrichtung verlaufen. Die Schnittgerade ist dann mit der Geraden identisch, auf die projiziert wird. Wie oben gezeigt, ergibt ein Schnitt mit rationaler Steigung aber ein periodisches Gitter.

Ist  $r_D$  irrational, hat dies ein im mathematischen Sinne dichtes, eindimensionales Punktgitter zur Folge. Auch hier zeigt der Vergleich mit einem Schnitt, das was passiert. Dekoriert man wieder jeden Gitterpunkt mit einer unendlich langen Geraden, die parallel zur Projektionsrichtung, also senkrecht zur Projektionsgeraden verläuft, so ist die Steigung der Dekorationsgeraden ebenfalls irrational. D.h., außer ihrem Dekorationspunkt trifft die Gerade *keinen* weiteren Punkt im Hypergitter. Daher besteht das dekorierte Gitter aus einer im mathematischen Sinne dichten Schar paralleler Geraden.

Dies gilt dann auch für die Abfolge der Schnittpunkte entlang der Projektionsgeraden, also die Abfolge der projizierten Hypergitterpunkte. Da man hier beliebig kleine und damit unphysikalische Gitterabstände erhält, muß eine Auswahl vorgenommen werden.

Diese Auswahl wird nun durch den Schnitt getroffen, der in Gleichung 3.19 eingeführt wurde (nicht mit dem gerade beschriebenen Schnitt zu verwechseln) und durch den zweiten Term von 3.20 beschrieben wird. Er lautet für  $s_1$  gemäß Gleichung 3.25 und  $s_2 = 0$ :

$$\omega_S(m_1, m_2) = \begin{cases} 1 & ; \quad \left| \sum_{k=1}^2 d_{2k} (\tilde{c}_{k1} \frac{\sum_{j=1}^2 d_{1j} m_j a_0}{\sum_{l=1}^2 d_{1l} \tilde{c}_{l1}} - m_k a_0) \right| \leq \frac{v}{2} \\ 0 & ; \quad \text{sonst} \end{cases} \quad (3.26)$$

Der Term zwischen den Betragsstrichen läßt sich nun umschreiben zu

$$\frac{a_0}{\sum_{l=1}^2 d_{1l} \tilde{c}_{l1}} \sum_{j,k=1}^2 c_{1k} m_j (d_{2k} d_{1j} - d_{1k} d_{2j}). \quad (3.27)$$

Für  $k = j$  verschwindet die Summe, und man erhält für  $k \neq j$ :

$$\begin{aligned} & \frac{a_0}{\sum_{l=1}^2 d_{1l} \tilde{c}_{l1}} (c_{11} m_2 \overbrace{(d_{21} d_{12} - d_{11} d_{22})}^{=-1} + c_{12} m_1 \overbrace{(d_{22} d_{11} - d_{12} d_{21})}^{=1}) \\ &= \frac{-a_0}{\sum_{l=1}^2 d_{1l} \tilde{c}_{l1}} (c_{21} m_1 + c_{22} m_2). \end{aligned} \quad (3.28)$$

Hier wurde ausgenutzt, daß  $c_{ij}$  eine antisymmetrische Matrix ist. Damit vereinfacht sich  $\omega_S$  zu:

$$\omega_S(s_1, 0) = \begin{cases} 1 & ; \quad \left| \sum_{k=1}^2 c_{2k} m_k a_0 \right| \leq \frac{v}{2} \sum_{l=1}^2 d_{1l} \tilde{c}_{l1} \\ 0 & ; \quad \text{sonst} \end{cases} \quad (3.29)$$

Welche atomare Hyperfläche von der Schnittgeraden getroffen wird, stellt man in folgender Weise fest: nach Gleichung 3.29 werden durch die Funktion  $\omega_S$  zunächst alle Punkte  $(a_0 m_1, a_0 m_2)$  des Hypergitters auf die  $s_2$ -Achse des Schnittraums projiziert. Fallen diese dann in ein Fenster der Breite  $v \sum_{l=1}^2 d_{1l} \tilde{c}_{l1}$  um den Ursprung, ist der Wert von  $\Omega_S$  gleich Eins und der zum Koordiantentupel  $(a_0 m_1, a_0 m_2)$  zugehörige Schnittpunkt  $s_1(m_1, m_2)$  (s. 3.20) ein Punkt des eindimensionalen Quasikristallgitters.

Diese Wirkung von  $\omega_S$  kann man sich auch graphisch verdeutlichen. Anstatt alle Punkte  $(m_1, m_2)$  auf die  $s_2$  Achse zu projizieren und dann auszuwählen, kann man ebenso einen Streifen der Breite  $v' = v \sum_{l=1}^2 d_{1l} \tilde{c}_{l1}$  senkrecht zu  $s_2$  bzw. parallel zu  $s_1$  aus dem Hypergitter heraus schneiden (Abbildung 3.6). Alle Punkte des Hypergitters, die in diesem Streifen liegen, werden dann Punkte des eindimensionalen Quasikristalls. Wie man in der Abbildung 3.6 sehen kann, ist die Streifenbreite gerade durch die Projektion der atomaren Hyperfläche, die den Punkt  $(0,0)$  dekoriert, auf die  $s_2$ -Achse gegeben.

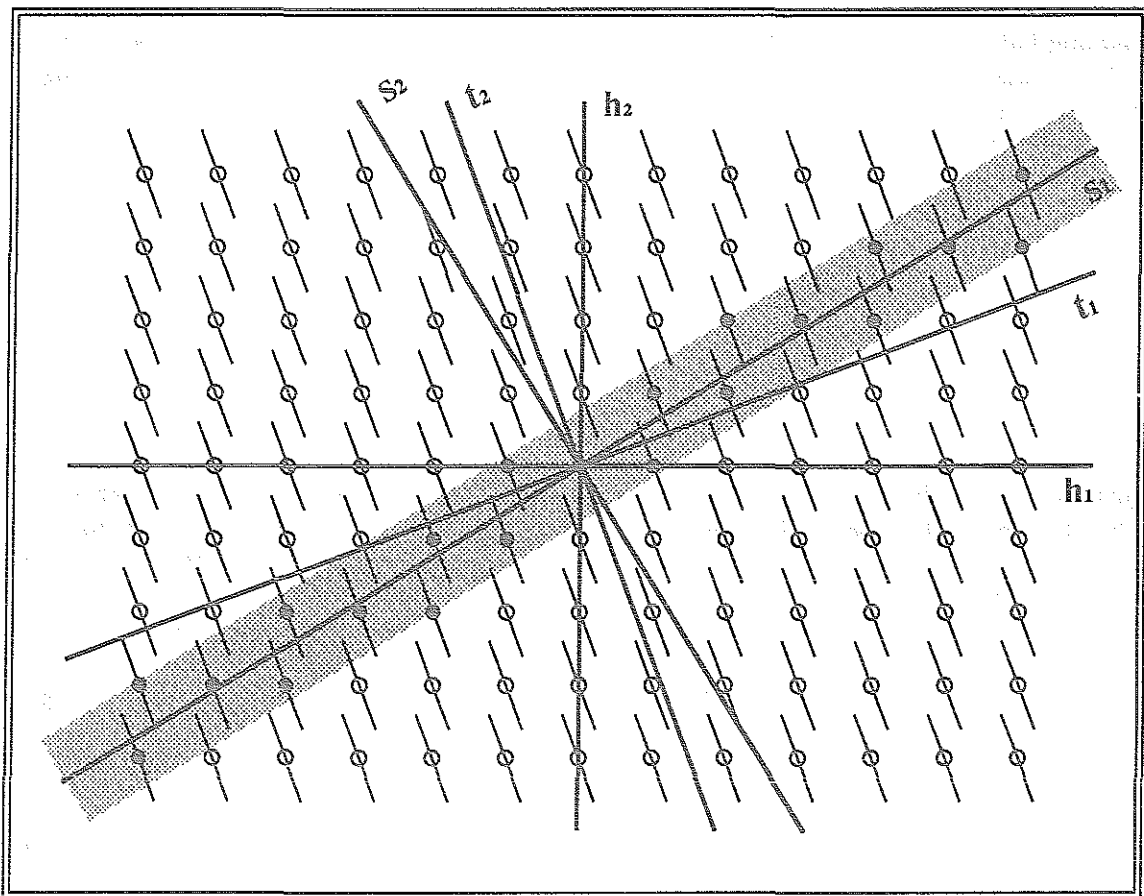


Abbildung 3.6: Graphische Interpretation der Wirkung von  $\omega_S$ . Die Funktion wählt alle Punkte des Hypergitters aus, die innerhalb eines zur  $s_1$ -Achse parallelen Streifens der Breite  $v$  liegen.

Die Steigung dieses Streifens bestimmt nun die Anordnung der Gitterpunkte. Ist die Steigung rational mit dem Wert  $p/q = r_S$  ( $p, q$  sind ganze Zahlen), so wird der Inhalt des Streifens und damit die Auswahl der Gitterpunkte periodisch mit der Periodenlänge  $\sqrt{p^2 + q^2}$ . In diesem Fall erhält man keinen Quasikristall, sondern ein einfaches periodisches Gitter. Ist  $r_S$  irrational, so ergibt sich ein quasiperiodisches Gitter.

Es existiere nun ein eindimensionaler Quasikristall  $QC^{1D}$ , für den die Steigung  $r_S$  den

irrationalen Wert  $r_S = r_{qc}^{1d}$  besitzt. Man nennt dann alle eindimensionalen Gitter, die den Wert von  $r_{qc}^{1d}$  durch einen Bruch ganzer Zahlen annähern, *rationale Approximanten*. Solche Approximanten werden auch in der Natur gefunden und besitzen sehr große Einheitszellen [3, 4]. Erste Versuche, die Struktur der Quasikristalle durch Zwillingsbildung zu erklären, benutzten praktisch solche Einheitszellen. Hauptverfechter ist hier L. Pauling, der sich aber nicht durchsetzen konnte [124, 23, 125].

Ein interessanter Sonderfall tritt für einen irrationalen Wert von  $r_S$  und ein rationales  $r_D$  auf. Durch den rationalen Wert von  $r_D$  erhält man zunächst, d.h., bevor man den Schnitt durchführt, ein *periodisches* Gitter. Da die Schnittgerade aber eine irrationale Steigung haben soll, wird durch den Schnitt eine aperiodische Auswahl aus Punkten eines eindimensionalen *periodischen* Gitters getroffen. Obwohl das so entstandene Gitter aperiodisch ist, stehen die auftretenden Gitterabstände zueinander in einem kommensurablen Längenverhältnis.

Der einfachsten Möglichkeit, einen Quasikristall zu konstruieren, liegen folgende Einschränkungen zugrunde:

$$d_{ij} = c_{ij} = p_{ij}, \quad (3.30)$$

$$p_{12}/p_{11} \text{ ist irrational,} \quad (3.31)$$

$$\begin{aligned} &\text{Der Wert } v \text{ ist von der Größe der projizierten Wigner-Seitz-Zelle} \\ &\text{des Hypergitters auf die } x_{\perp} \text{ (} s_2\text{-Achse).} \end{aligned} \quad (3.32)$$

Durch die erste Bedingung fallen die  $t_1$ -Achse des Dekorationsraums, die  $s_1$ -Achse des Schnittraums und die  $x_{\parallel}$ -Achse zusammen. Folglich sind auch die  $t_2$ -,  $s_2$ - und die  $x_{\perp}$ -Richtungen identisch. Die oben genannte, letzte Projektion (Gleichung 3.23) ist dadurch dann hinfällig geworden. Die zweite Bedingung sorgt dafür, daß das Gitter quasiperiodisch wird. Der analytische Ausdruck für das eindimensionale Quasigitter lautet dann:

$$\vec{x}_{\parallel}(m_1, m_2) = \sum_{\{m_1, m_2\}} \delta(x_{\parallel} - \sum_{j=1}^2 p_{1j} m_j a_0) \omega(x_{\parallel}, x_{\perp}) \quad (3.33)$$

mit

$$\omega(x_{\parallel}, x_{\perp}) = \begin{cases} 1 & ; \quad x_{\parallel} \text{ beliebig und } |x_{\perp}| \leq \frac{v}{2} \\ 0 & ; \quad \text{sonst} \end{cases} \quad (3.34)$$

Dabei ist zu beachten, daß die Gitterkoordinate  $x_{\parallel}(m_1, m_2) = \sum_{j=1}^2 p_{1j} m_j a_0$  durch die Transformationsmatrix  $p_{ij}$  eineindeutig mit der Koordinate  $x_{\perp}(m_1, m_2) = \sum_{j=1}^2 p_{2j} m_j a_0$  verknüpft ist.

Das gesamte Konstruktionsverfahren ist in Abbildung 3.7 noch einmal graphisch dargestellt. Zusammenfassend kann die Konstruktion dann folgendermaßen beschrieben werden. In einem quadratischen Punktgitter (Hypergitter) legt man zunächst ein neues orthogonales Koordinatensystem mit den Koordinaten  $x_{\parallel}$  und  $x_{\perp}$  fest. Die Steigung der  $x_{\parallel}$ -Achse im alten Koordinatensystem ist irrational. Dannach dekoriert man das Hypergitter mit Geradenstücken, die erstens parallel zur  $x_{\perp}$ -Achse verlaufen und zweitens eine Länge besitzen, die sich aus der Projektion der Wigner-Seitz-Zelle des Hypergitters auf die  $x_{\perp}$ -Achse ergibt. Alle Schnittpunkte der  $x_{\parallel}$ -Achse mit dem so dekorierten Gitter sind dann Punkte des eindimensionalen Quasikristallgitters. Alternativ kann man auch parallel zur

$x_{||}$ -Achse einen Streifen aus dem Hypergitter ausscheiden, der die Breite einer atomaren Hyperfläche besitzt und alle Hypergitterpunkte innerhalb des Streifens auf die  $x_{||}$ -Achse projizieren. Dies ergibt die gleiche Abfolge der Gitterpunkte. Wählt man die Steigung

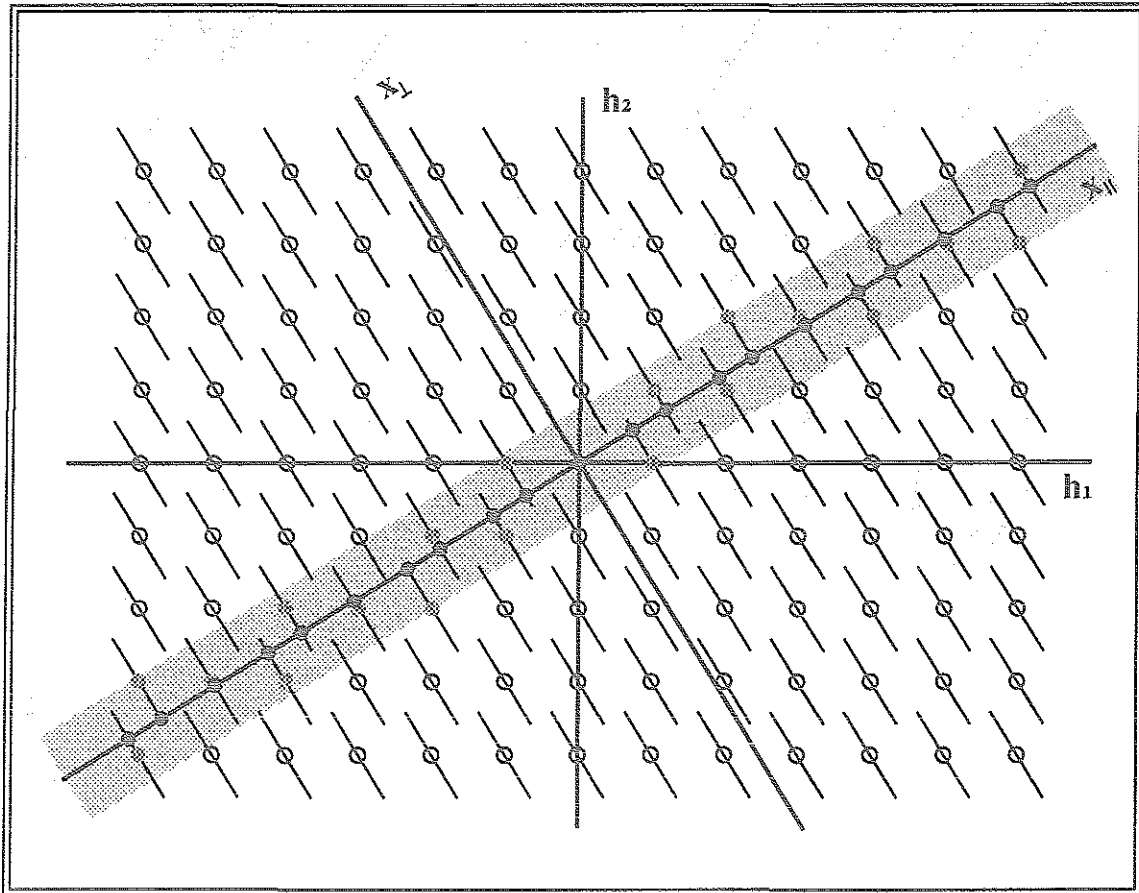


Abbildung 3.7: Konstruktion eines eindimensionalen Quasikristalls. Die Steigung  $r_s$  hat den Wert  $1/\tau$ .

des Gitters zu  $\tau$ , oder wie in den Abbildungen zu  $1/\tau$ , enthält das konstruierte Gitter zwei elementare Abstände, die zueinander im Längenverhältnis  $1 : \tau$  stehen. Dabei folgt auf einen kurzen Abstandsvektor immer ein langer und auf einen langen Vektor höchstens ein weiterer großer Abstand. Diese Anordnung ist als Fibonacci-Folge bekannt. Die Entwicklungsvorschrift dieser Folge lautet

$$f_{m+2} = f_{m+1} + f_m. \quad (3.35)$$

Assoziiert man die Abstände des Quasigitters mit den Folgeelementen und setzt  $f_0$  gleich einem kurzen und  $f_1$  gleich einem langen Abstand, so erhält man durch Aneinanderlegen (Addition) jeweils das nächste Element der Folge.

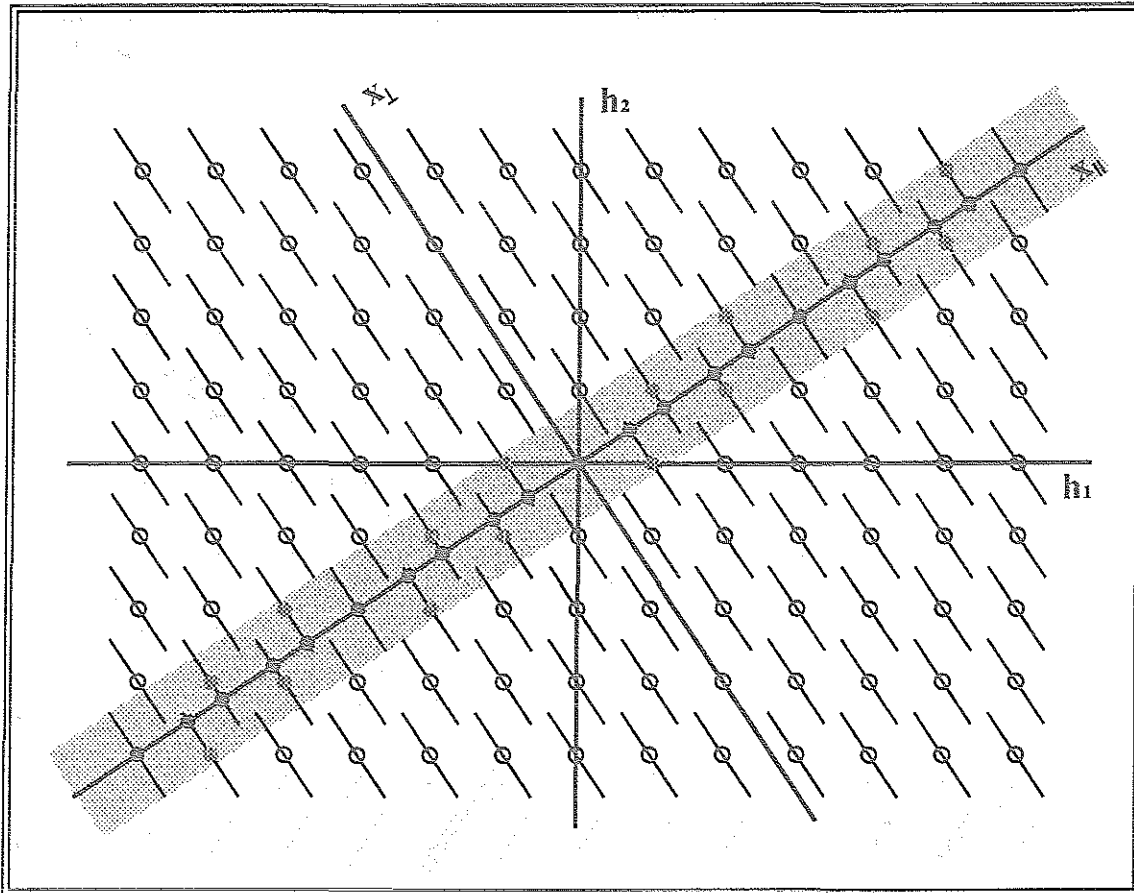


Abbildung 3.8: Konstruktion eines  $2/3$ -Approximanten. Die Steigung  $r_s$  hat den Wert  $2/3$ .

In Abbildung 3.8 ist schließlich ein Beispiel für einen rationalen Approximanten dargestellt. Die Steigung der Schnittgeraden beträgt hier  $2/3$ . Man spricht daher auch von einem  $2/3$ -Approximanten. Die Einheitszelle dieses Gitters erstreckt sich vom Ursprung bis zum Punkt  $(3,2)$  und beinhaltet die Abstandsfolge lang-kurz-lang-kurz-lang.

In der in Abbildung 3.7 gezeigte Konstruktion verläuft die Schnittgerade durch den Ursprung des Koordinatensystems. Prinzipiell kann sie auch parallel zu sich selbst verschoben werden. Das dann entstehende quasiperiodische Gitter ist mit seinen Eigenschaften aber mit dem ersten identisch. Man sagt, daß beide zur gleichen Isomorphieklasse gehören [145].

### 3.2 Das dreidimensionale Quasigitter

Der Formalismus zur Konstruktion eines dreidimensionalen Quasikristalls entspricht völlig dem für ein eindimensionales Gitter. Im Prinzip können alle Formeln übernommen werden, wenn man folgende Ersetzungen macht:

Das kubische Hypergitter ist nun sechsdimensional, so daß jeder Gitterpunkt durch sechs ganzzahlige Indizes beschrieben wird:

$$\vec{H} = a_0 (m_1, m_2, m_3, m_4, m_5, m_6) = a_0 (\vec{m}_1, \vec{m}_2). \quad (3.36)$$

$a_0$  ist die Gitterkonstante des hyperkubischen Gitters. Die Vektoren  $\vec{m}_1$  und  $\vec{m}_2$  fassen jeweils drei Indizes zusammen. Das Gitter wird dann durch ein Produkt von  $\delta$ -Funktionen beschrieben.

$$\Gamma(h_1, \dots, h_6) = \sum_{\{m_1, \dots, m_6\}} \delta(h_1 - m_1 a_0) \dots \delta(h_6 - m_6 a_0). \quad (3.37)$$

$a_0$  ist Gitterkonstante des sechsdimensionalen hyperkubischen Gitters. Die Transformationen werden anstatt durch  $2 \times 2$ - mit  $6 \times 6$ -Matrizen beschrieben. Dadurch werden die eindimensionalen Unterräume  $E_{\parallel}$  und  $E_{\perp}$  nun dreidimensional. Die Koeffizienten  $p_{ij}$  der  $2 \times 2$ -Matrizen werden durch  $3 \times 3$ -Untermatrizen  $P_{ij}$  ersetzt:

$$\begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} \\ p_{21} & p_{22} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} P_{11} & P_{12} \\ P_{21} & P_{22} \end{pmatrix}. \quad (3.38)$$

Für die Konstruktion eines ikosaedrischen Quasikristalls hat  $P$  folgende Form [24]:

$$P_{ij} = \frac{1}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 1 & \tau & 0 & -1 & \tau & 0 \\ \tau & 0 & 1 & \tau & 0 & -1 \\ 0 & 1 & \tau & 0 & -1 & \tau \\ \hline -\tau & 1 & 0 & \tau & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -\tau & 1 & 0 & \tau \\ 0 & -\tau & 1 & 0 & \tau & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.39)$$

Die Koordinaten in den dreidimensionalen Unterräumen  $E_{\parallel}$  und  $E_{\perp}$  erhält man dann durch:

$$\vec{x}_{\parallel}^i = \sum_{j=1}^2 P_{1j} \vec{m}_j a_0 \quad \text{und} \quad \vec{x}_{\perp}^i = \sum_{j=1}^2 P_{2j} \vec{m}_j a_0. \quad (3.40)$$

Die Koeffizienten von  $P_{ij}$  sind so gewählt, daß die sechs orthogonalen Basisvektoren des sechsdimensionalen Hypergitters in  $E_{\parallel}$  auf die sechs fünfzähligen Achsen des Ikosaeders projiziert werden. Die Dekoration des sechsdimensionalen Hypergitters erfolgt dann entsprechend mit dreidimensionalen Hyperflächen (Obwohl es sich um Körper handelt, ist es üblich, hier ebenfalls von Flächen zu sprechen, da der Begriff "Raum" bereits für den

sechsdimensionalen Raum des Hypergitters reserviert ist.). Damit kann der analytische Ausdruck für das ikosaedrische Quasigitter aufgeschrieben werden:

$$\begin{aligned}
 G_{3D}(\vec{x}_{||}) &= \int \Gamma(\vec{x}_{||}, \vec{x}_{\perp}) * \Lambda(\vec{x}_{||}, \vec{x}_{\perp}) \delta(\vec{x}_{\perp}) d\vec{x}_{\perp} \\
 &= \int \Gamma(\vec{x}_{||}, \vec{x}_{\perp}) * (\delta(\vec{x}_{||}) \lambda(\vec{x}_{||}, \vec{x}_{\perp})) \delta(\vec{x}_{\perp}) d\vec{x}_{\perp} \\
 &= \sum_{\{\vec{m}_1, \vec{m}_2\}} \delta(\vec{x}_{||} - \sum_{j=1}^2 P_{1j} \vec{m}_j a_0) \lambda(\vec{x}_{\perp}(\vec{m}_1, \vec{m}_2)).
 \end{aligned} \tag{3.41}$$

mit

$$\lambda(\vec{m}_1, \vec{m}_2) = \begin{cases} 1 & ; \sum_{j=1}^2 P_{2j} \vec{m}_j a_0 = \vec{x}_{\perp} \in V \\ 0 & ; \text{sonst} \end{cases} \tag{3.42}$$

$V$  bezeichnet die nun dreidimensionale atomare Hyperfläche. Alle *möglichen* Gitterpunkte  $\vec{x}_{||}^i$  werden durch die Projektion mittels der oberen Hälfte von  $P_{ij}$  in  $E_{||}$  erhalten.

$$\vec{x}_{||}^i = \sum_{j=1}^2 P_{1j} \vec{m}_j a_0 \tag{3.43}$$

Die Entscheidung, ob die projizierten Punkte  $\vec{x}_{||}^i$  tatsächlich Gitterpunkte werden sollen, wird durch die Funktion  $\lambda$  getroffen.  $\lambda$  projiziert den entsprechenden Hypergitterpunkt in den Unterraum  $E_{\perp}$  und stellt fest, ob dieser innerhalb der dreidimensionalen atomaren Hyperfläche  $V$  liegt. Diese Kontrolle ist äquivalent mit der Überprüfung, ob der Unterraum  $E_{||}$  eine atomare Hyperfläche im Unterraum  $E_{\perp}$  schneidet. Nur die Punkte, die innerhalb von  $V$  liegen, sind Mitglieder des dreidimensionalen Quasikristallgitters.

Im einfachsten Fall erhält man die atomare Hyperfläche durch die Projektion aller Gitterpunkte der sechsdimensionalen Wigner-Seitz-Zelle in  $E_{\perp}$ . Für das primitiv hyperkubische Gitter (bzgl. der Hypergittertypen s. u.) ergibt sich als begrenzender Körper ein Triakontaeder, ein durch dreißig gleichseitige Rauten gebildeter Körper (Abbildung 3.9). Betrachtet man reale Quasikristalle, spielt die atomare Hyperfläche eine große Rolle bei der Beschreibung der Struktur. Zum einen kann man deren Größe und Form variieren. Darüber hinaus kann man für einen Quasikristall mehrere, verschiedene atomare Hyperflächen einführen und mit ihnen verschiedene Elementspezies der Struktur verbinden [35, 16, 17].

Schneidet der physikalische Raum dann beispielsweise die Hyperfläche vom Typ  $X$ , liegt an dieser Stelle dann ein Atom der Sorte  $Y$ .

Bis hierhin wurde immer davon ausgegangen, daß das Hypergitter einfach hyperkubisch ist. Das bedeutet, daß die Indizes  $m_i$  der Hypergitterpunkte aus der Menge der ganzen Zahlen ohne Einschränkungen zu wählen sind. Theoretisch sind aber auch Übergitter denkbar, wie man sie auch bei den periodisch kristallinen Stoffen kennt, ohne daß das reziproke Gitter (s. Kapitel 4) seine Ikosaedersymmetrie verliert [135]. Analog zum dreidimensionalen flächenzentrierten Gitter gibt es auch ein sechsdimensionales F-Gitter. Man erhält es aus dem primitiv kubischen Gitter, indem man alle Gitterpunkte wegläßt, für die die Summe der Indizes nicht gerade ist. Das innenzentrierte I-Hypergitter wird durch alle Gitterpunkte gebildet, bei denen die Indizes alle gerade oder alle ungerade sind.

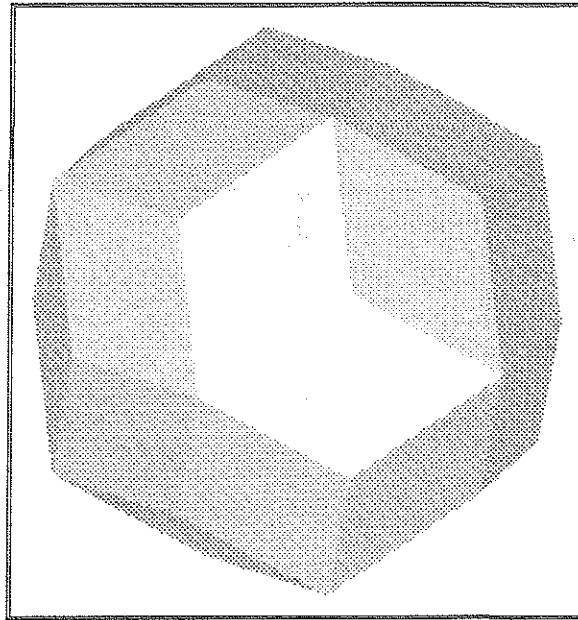


Abbildung 3.9: Das Triakontaeder ist die atomare Hyperfläche für die Konstruktion eines primitiven ikosaedrischen Quasikristallgitters. Es wird von dreißig gleichseitigen Rauten begrenzt und hat die gleichen Symmetrieeigenschaften wie das Ikosaeder.

Soweit bekannt, werden bei den real existierenden Quasikristallen nur zwei der drei Gitter realisiert. Dabei liegt den meisten Quasikristallen das primitiv kubische Hypergitter zugrunde. Das F-Hypergitter findet sich bei fast allen ternären und thermodynamisch stabilen quasikristallinen Legierungen [51, 45, 161, 94]. In Abbildung 3.10 ist ein ikosaedrisches Quasikristallgitter mit P-Hypergitter in der Projektion entlang verschiedener Zonenachsen abgebildet. Obwohl jegliche Periodizität fehlt, erkennt man doch eine gewisse Ordnung der Gitterpunkte in Säulen und Ebenen [109, 26, 27].

Nachdem die Konstruktion von ikosaedrischer Quasikristallgitter erläutert wurde, stellt sich nun die Frage, inwieweit diese Modelle die beobachteten Ergebnisse erklären können.

Eines der wichtigsten Experimente ist die Untersuchung der Beugungseigenschaften solcher Strukturen. Daher ist das nächste Kapitel der theoretischen Bestimmung der Beugungsbilder gewidmet (Kapitel 4). Es ist darüberhinaus auch Grundlage für die in dieser Arbeit entwickelten Kontrasttheorie zur Untersuchung von Defekten in Quasikristallen mit Hilfe der Transmissionselektronenmikroskopie.

Welche Defekte in Quasikristallgitter überhaupt möglich sind, und wie sie klassifiziert werden können, wird in Kapitel 5 untersucht.

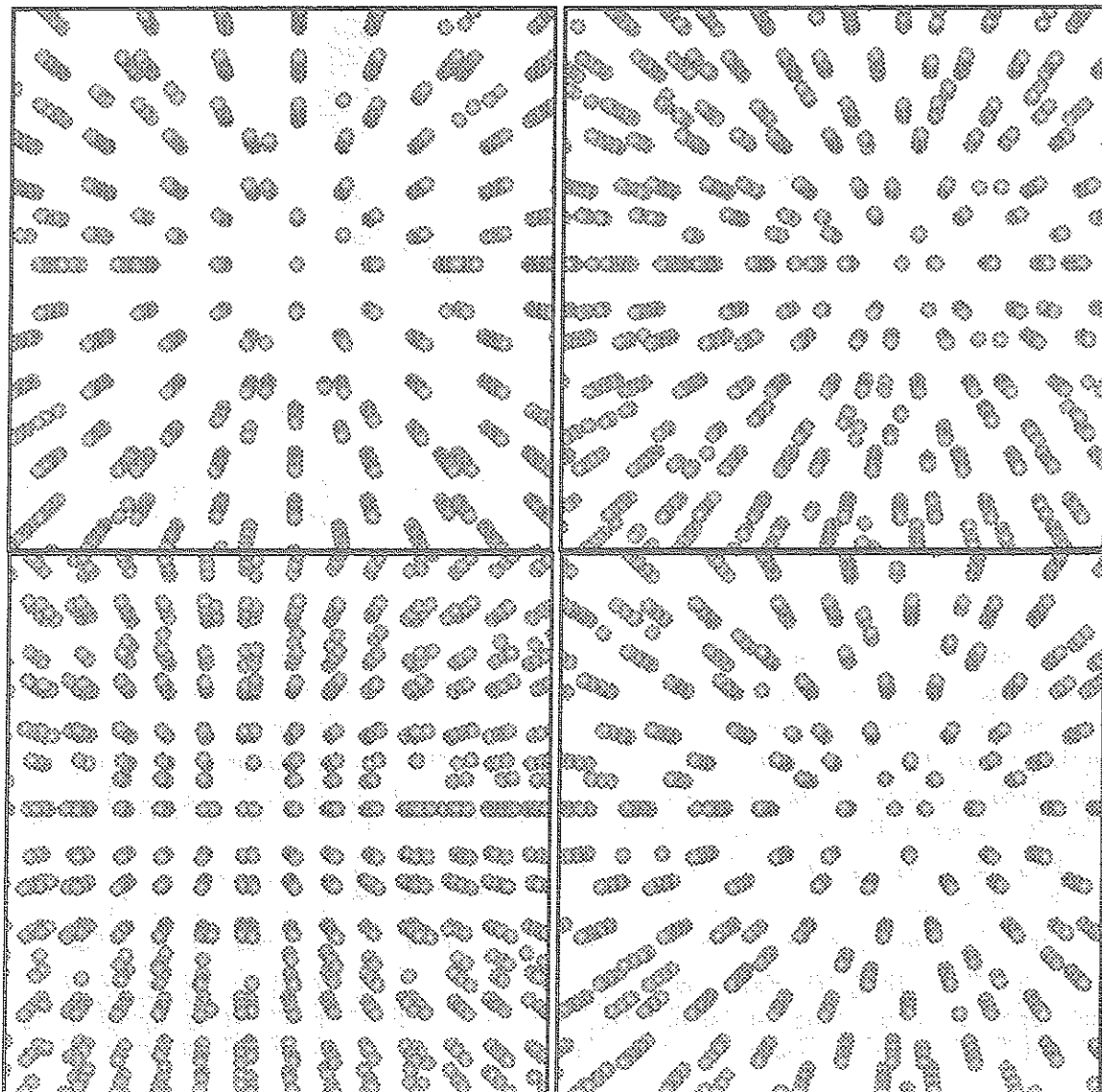


Abbildung 3.10: Perspektivische Ansichten eines ikosaedrischen Quasikristallgitters mit  $P$ -Hypergitter entlang einer zwei-, drei-, pseudozwei- und fünfzähligen Achse. Obwohl keine Periodizität vorhanden ist, erkennt man doch eine gewisse Ordnung der Gitterplätze in Säulen und Ebenen.

### 3.3 Ikosaedrisches Glas und Random Tiling Modell

Das hier vorgestellte Modell eines Quasikristalls bezeichnet man auch als das eines deterministischen Quasikristalls, da jede Position im dreidimensionalen Gitter durch die Festlegung von Dekoration und Schnittgerade bzw. Schnittraum bestimmt ist.

Neben diesem Modell gibt es noch zwei weitere Vorschläge zur Konstruktion von Strukturen, die versuchen die experimentellen Resultate (Beugungsexperimente, hochauflösende Elektronenmikroskopie, usw.) zu erklären.

Das erste ist das Modell eines ikosaedrischen Glases. Hier werden Atomagglomerate mit Ikosaedersymmetrie zusammengefügt. Die einzige Bedingung, vergleichbar den Aufbauregeln, ist, daß die Orientierung der Bindungen zwischen Atomagglomeraten erhalten bleibt. Dies reicht bereits aus, um in numerischen Simulationen die Beugungsbilder der ersten AlMn-Quasikristalle mit ihren endlichen Reflexbreiten zu erklären [149]. Allerdings zeigen ternäre Quasikristalle wie z.B. AlCuFe oder AlPdMn Reflexbreiten, die weit unterhalb dieser Vorhersagen liegen. Ein weiteres Problem ergibt sich aus der Tatsache, daß es mit ikosaedrischen Bausteinen nicht möglich ist, den Raum lückenlos auszufüllen. Ein solches Gitter enthält zwangsläufig Lücken oder Bausteine, die überlappen, was wiederum zu unphysikalischen Atomabständen führt.

Mit dem ikosaedrischen Glasmodell ist das Random-Tiling-Modell verwandt. Hier werden keine Atomagglomerate, sondern die elementaren Bausteine eines quasiperiodischen Gitters zusammengefügt. Die Aufbauregeln werden dabei gelockert. Im Prinzip kann ein Random-Tiling-Quasikristall mit der Schnitt- und Projektions-Methode erzeugt werden. Dazu variiert man die Steigung der Schnittgerade in zufälliger Weise um den Mittelwert des deterministischen Modells. Diese Vorgehensweise erzeugt dann einen Quasikristall, der sehr stark durch Aufbauregelverletzungen (Phasonen, s. Kapitel 5) gestört ist [77]. Auch dieses Modell führt zu scharfen Beugungsreflexen. Allerdings erwartet man in den Flanken der Reflexe diffuse Anteile [97, 153].

Diese Art des Aufbaus erhöht die Anzahl von Möglichkeiten, die Bausteine des Gitters aneinanderzufügen und somit die Unordnung im Quasikristall. Daraus ergibt sich eine Erhöhung der Entropie, welche als Argument für die Hochtemperaturstabilität der Quasikristalle ins Feld geführt wird. Außerdem läßt sich der Wachstumsprozeß eines Quasikristalls besser mit dem Random-Tiling-Modell als im Rahmen einer deterministischen Konstruktion [78, 58, 147] verstehen. Auf der anderen Seite sprechen die neueren Neutronenstreuexperimente aufgrund der beobachteten Reflexform wieder für ein deterministisches Modell [35].

Allen Analysen in dieser Arbeit liegt ein deterministisches Quasikristallgitter zugrunde.



## BEUGUNGSBILDER QUASIPERIODISCHER GITTER

Im Anhang A.2 wird gezeigt, daß sich die Intensitätsverteilung im Beugungsbild eines Festkörpers in kinematischer Näherung durch das Betragsquadrat der Fouriertransformierten der Struktur beschreiben läßt.

Diese Fouriertransformierte wird nun im folgenden berechnet. Zunächst wird der eindimensionale Fall behandelt, um danach die hier gewonnenen Ergebnisse auf das dreidimensionale Gitter zu übertragen.

### 4.1 Beugung am eindimensionalen Quasigitter

Im vorhergehenden Kapitel wurde die analytische Beschreibung eines eindimensionalen quasiperiodischen Gitters abgeleitet. Sie lautet für den Quasikristall (Gl. 3.19):

$$G_{1D}(x_{||}) = \int \gamma(x_{||}, x_{\perp}) * (\delta(x_{||})\omega(x_{\perp}))\delta(x_{\perp}) dx_{\perp} \quad (4.1)$$

wobei

$$\omega(x_{\perp}) = \begin{cases} 1 & ; \quad |x_{\perp}(m_1, m_2)| \leq \frac{v}{2} \\ 0 & ; \quad \text{sonst} \end{cases} \quad (4.2)$$

Der Ausdruck für die Fouriertransformierte von  $G_{1D}$  ist dann:

$$\hat{G}_{1D}(q_{||}) = \int \gamma(x_{||}, x_{\perp}) * (\delta(x_{||})\omega(x_{\perp}))\delta(x_{\perp}) dx_{\perp} e^{-2\pi i x_{||} q_{||}} dx_{||} \quad (4.3)$$

$q_{||}$  bezeichnet die zu  $x_{||}$  korrespondierende Koordinate des reziproken Raums. Nun ersetzt man noch den Term  $\delta(x_{\perp})$  durch die Integraldarstellung der  $\delta$ -Distribution und erhält so den Ausdruck für eine Fouriertransformation bezüglich  $x_{||}$  und  $x_{\perp}$ :

$$\hat{G}_{1D}(q_{||}) = \int \gamma(x_{||}, x_{\perp}) * \overbrace{(\delta(x_{||})\omega(x_{\perp}))}^{\Omega(x_{||}, x_{\perp})} e^{-2\pi i (x_{||} q_{||} + x_{\perp} q_{\perp})} dq_{\perp} dx_{||} dx_{\perp} \quad (4.4)$$

Unter Ausnutzung des Faltungssatzes kann die Lösung sofort hingeschrieben werden:

$$\hat{G}_{1D}(q_{||}) = \int \hat{\gamma}(q_{||}, q_{\perp}) \hat{\Omega}(q_{||}, q_{\perp}) dq_{\perp} \quad (4.5)$$

<sup>†</sup> bezeichnet hier die Fouriertransformierte der jeweiligen Funktionen.

$\gamma(x_{\parallel}, x_{\perp})$  ist der Ausdruck für das Hypergitter, demnach ist  $\hat{\gamma}(q_{\parallel}, q_{\perp})$  nichts anderes als das zugehörige reziproke (Hyper-)Gitter.

$$\begin{aligned}\gamma(x_{\parallel}, x_{\perp}) &= \sum_{\{m_1, m_2\}} \delta(x_{\parallel} - \sum_{i=1}^2 p_{1i} m_i a_0) \delta(x_{\perp} - \sum_{i=1}^2 p_{2i} m_i a_0) \Rightarrow \\ \hat{\gamma}(q_{\parallel}, q_{\perp}) &= \sum_{\{m_1, m_2\}} \delta(q_{\parallel} - \frac{\sum_{i=1}^2 p_{1i} m_i}{a_0}) \delta(q_{\perp} - \frac{\sum_{i=1}^2 p_{2i} m_i}{a_0})\end{aligned}\quad (4.6)$$

$\hat{\Omega}(q_{\parallel}, q_{\perp})$  läßt sich ebenfalls bestimmen:

$$\begin{aligned}\hat{\Omega}(q_{\parallel}, q_{\perp}) &= \int \delta(x_{\parallel}) \omega(x_{\perp}) e^{-2\pi i (q_{\parallel} x_{\parallel} + q_{\perp} x_{\perp})} dx_{\parallel} dx_{\perp} \\ &= 1 \cdot \hat{\omega}(q_{\perp}).\end{aligned}\quad (4.7)$$

$\hat{\omega}(q_{\perp})$  ist die Fouriertransformierte der atomaren Hyperfläche. Führt man die Integration über  $q_{\perp}$  aus, erhält man schließlich:

$$\hat{G}_{1D}(q_{\parallel}) = \sum_{\{m_1, m_2\}} \delta(q_{\parallel} - \sum_{i=1}^2 \frac{p_{1i} m_i}{a_0}) \hat{\omega}(\sum_{i=1}^2 \frac{p_{2i} m_i}{a_0}).\quad (4.8)$$

Zur Interpretation dieses Ausdruckes betrachte man zunächst den ersten Faktor innerhalb der Summe. Die  $\delta$ -Distribution beschreibt, ähnlich dem Ausdruck für das eindimensionale direkte Gitter (Gleichung 3.20), die Projektion sämtlicher Punkte des reziproken Hypergitters in den physikalischen Unterraum  $E_{\parallel}$ . Somit ist das reziproke Gitter eines eindimensionalen Quasikristalls ebenfalls ein Punktgitter. Da hier *alle* Punkte auf eine Gerade mit irrationaler Steigung projiziert werden, ist das reziproke Gitter dicht mit Punkten ausgefüllt.

Die Intensität der einzelnen Reflexe wird durch die Funktion  $\hat{\omega}$ , beziehungsweise ihr Betragsquadrat, gewichtet. Für die Konstruktion eines eindimensionalen Quasikristalls ist  $\omega(x_{\perp})$  nach Gleichung 3.29:

$$\omega(x_{\perp}) = \begin{cases} 1 & ; \quad |x_{\perp}(m_1, m_2)| \leq \frac{v}{2} \\ 0 & ; \quad \text{sonst} \end{cases}\quad (4.9)$$

Die Fouriertransformierte dieser Kastenfunktion ist [36]:

$$\hat{\omega}(q_{\perp}) = \frac{\sin \pi v q_{\perp}}{q_{\perp}}.\quad (4.10)$$

Das Betragsquadrat dieser Funktion ist in Abbildung 4.1 dargestellt. Man sieht am Kurvenverlauf, daß wesentliche Beiträge und damit hohe Intensitäten nur für kleine  $q_{\perp}$ -Werte auftreten. Das Argument von  $\omega$ ,  $q_{\perp}$ , ist durch die Lage des reziproken Hypergitterpunktes in  $E_{\perp}$  gegeben:

$$q_{\perp}(m_1, m_2) = \sum_{i=1}^2 \frac{p_{2i} m_i}{a_0}.\quad (4.11)$$

Damit erhält *jeder* reziproke Gitterpunkt ein Gewicht ungleich von Null, wenn man einmal

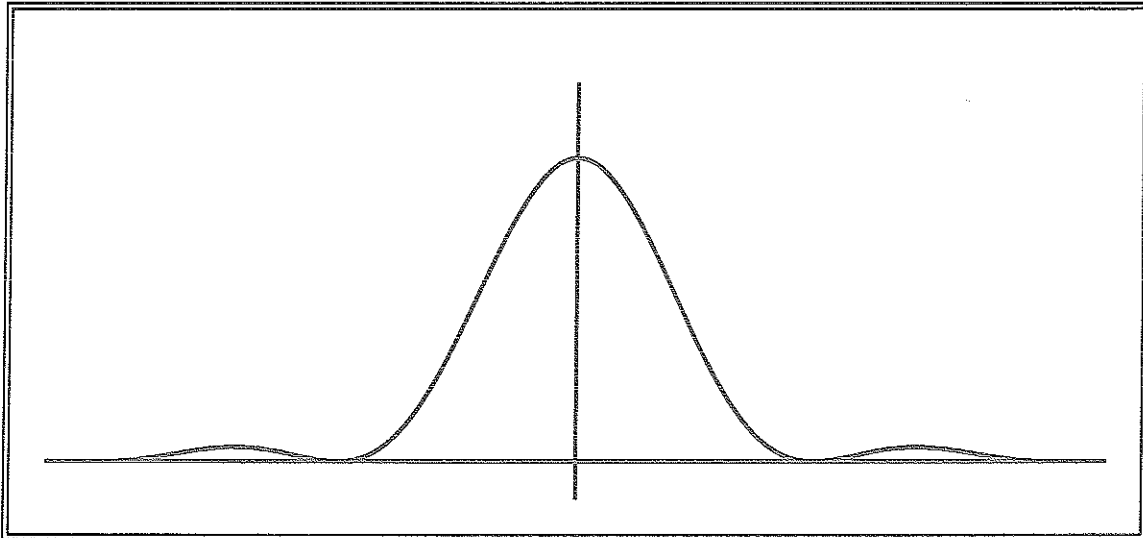


Abbildung 4.1: Qualitativer Verlauf des Betragsquadrates der Fouriertransformierten von  $\omega(x_{\perp})$ , symmetrisch um  $q_{\perp} = 0$  dargestellt.

von den Nullstellen dieser Funktion absieht. Andererseits fällt diese Intensität zu großen  $q_{\perp}$  schnell ab, so daß bei einer endlichen Empfindlichkeit der Beugungsexperimente nicht alle Reflexe nachgewiesen werden können. Man erhält daher kein dicht mit Reflexen besetztes Beugungsbild, sondern eine diskrete Verteilung von Reflexintensitäten.

Bei der Berechnung eines Beugungsdiagramms kann dies dadurch berücksichtigt werden, daß nur die Punkte des reziproken Hypergitters projiziert werden, die einen bestimmten, maximalen  $q_{\perp}$ -Wert nicht überschreiten und somit eine gewisse Mindestintensität besitzen. Es ist interessant festzustellen, daß die Variation der Reflexintensität bereits vor einer Dekoration des Gitters mit unterschiedlichen Atomen vorhanden ist. Bei periodischen Strukturen erhält man eine Variation der Reflexintensität erst durch eine Besetzung des Gitters durch die unterschiedlichen atomaren Streufaktoren der Elemente. Das unbesetzte, periodische Gitter liefert dagegen nur Beugungsbilder mit einheitlichen Reflexintensitäten.

#### 4.1.1 Reflexindizierung

Die Indizierung leitet sich direkt aus Gleichung 4.8 ab. Jeder Punkt des eindimensionalen reziproken Gitters kann eineindeutig einem Punkt im reziproken Hypergitter zugeordnet und durch ein Paar ganzer Zahlen,  $(m_1, m_2)$ , eindeutig bezeichnet werden.

$$\begin{aligned} q_{\parallel} &= (p_{11}m_1 + p_{12}m_2)/a_0 \\ &= \frac{1}{a_0\sqrt{2+\tau}}(m_1 + \tau m_2) \end{aligned} \quad (4.12)$$

Dies folgt für eine irrationalen Steigung  $\tau$  der Schnittgeraden.

## 4.2 Das dreidimensionale reziproke Quasigitter

Wie bei der Bestimmung des dreidimensionalen Quasikristallgitters können die hier abgeleiteten Gleichungen für das eindimensionale, reziproke Gitter sofort auf den dreidimensionalen Fall erweitert werden. Das direkte Gitter wird durch folgenden Ausdruck beschrieben (Gleichung 3.41):

$$G_{3D}(\vec{x}_{||}) = \int \Gamma(\vec{x}_{||}, \vec{x}_{\perp}) * (\delta(\vec{x}_{||}) \lambda(\vec{x}_{\perp})) \delta(\vec{x}_{\perp}) d\vec{x}_{\perp}, \quad (4.13)$$

mit

$$\lambda(\vec{x}_{\perp}) = \begin{cases} 1 & ; \quad \vec{x}_{\perp} = \sum_{j=1}^2 P_{2j} \vec{m}_j \in V \\ 0 & ; \quad \text{sonst} \end{cases} \quad (4.14)$$

Man erkennt sofort die formale Ähnlichkeit mit Gleichung 3.20. Daher ergibt sich auch formal die gleiche Herleitung des reziproken Gitters. Man muß nur die Skalare wie  $x_{||}$ ,  $q_{||}$ , ... durch die entsprechenden Vektoren  $\vec{x}_{||}$ ,  $\vec{q}_{||}$ , ... sowie die Projektionsmatrix ersetzen. Der Ausdruck für das dreidimensionale, reziproke Gitter lautet dann:

$$\hat{G}_{3D}(\vec{q}_{||}) = \sum_{\{\vec{m}_1, \vec{m}_2\}} \delta(\vec{q}_{||} - \sum_{i=1}^2 \frac{P_{1i} \vec{m}_i}{a_0}) \hat{\lambda}(\sum_{i=1}^2 \frac{P_{2i} \vec{m}_i}{a_0}). \quad (4.15)$$

Zunächst kann man auch hier feststellen, daß das reziproke Gitter des ikosaedrischen Quasikristalls ein Punktgitter ist. Wie im eindimensionalen Fall ist es aufgrund der irrationalen Projektionsmatrix dicht mit Reflexen ausgefüllt. Mit der Funktion  $\hat{\lambda}$  wird die Intensität der Beugungsreflexe bestimmt.  $\hat{\lambda}$  ist die Fouriertransformierte der atomaren Hyperfläche. Für den dreidimensionalen (primitiven) Quasikristall müßte man hier die Fouriertransformierte des Triakontaeders berechnen. Für die Darstellung der wichtigsten Effekte genügt es aber, das Triakontaeder durch eine entsprechend große Kugel (Radius =  $R_K$ ) anzunähern. D.h.,

$$\lambda(\vec{x}_{\perp}) = \begin{cases} 1 & ; \quad |\vec{x}_{\perp}| = |\sum_{j=1}^2 P_{2j} \vec{m}_j| \leq R_K \\ 0 & ; \quad \text{sonst} \end{cases} \quad (4.16)$$

Die Fouriertransformierte ist dann [18]:

$$\hat{\lambda}(\vec{q}_{\perp}) = \frac{4}{3} \pi \frac{\sin(2\pi R_K |\vec{q}_{\perp}|) - 2\pi R_K |\vec{q}_{\perp}| \cos(2\pi R_K |\vec{q}_{\perp}|)}{(2\pi |\vec{q}_{\perp}|)^3}. \quad (4.17)$$

Der Kurvenverlauf für das Betragsquadrat dieser Funktion ist in Abbildung 4.2 dargestellt. Wie für das eindimensionale reziproke Gitter findet man auch hier nun große Reflexintensitäten für kleine Beträge von  $\vec{q}_{\perp}$ , d.h., für die reziproken Hypergitterpunkte, deren Projektion in  $E_{\perp}$  nahe beim Ursprung liegt. Um das reziproke Gitter zu berechnen, wird man daher einen maximalen  $\vec{q}_{\perp}$ -Wert festlegen, um so der endlichen Nachweisempfindlichkeit in Beugungsexperimenten Rechnung zu tragen. Schnitte durch dieses Gitter ergeben schließlich die Amplitudenverteilung der Beugungsbilder eines ikosaedrischen Quasikristalls in kinematischer Näherung. Für die Hauptzonenachsen sind diese in Abbildung 4.3 dargestellt.

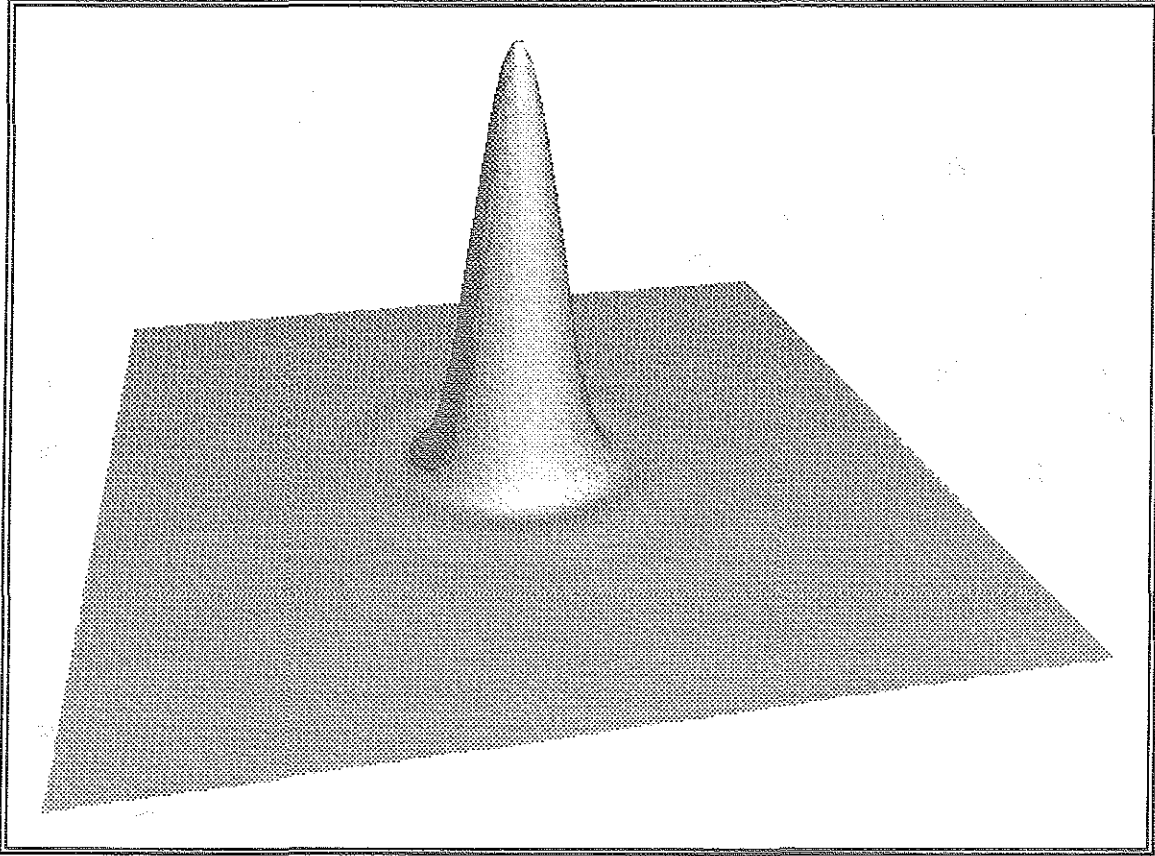


Abbildung 4.2: Schnitt durch das Betragsquadrat der Fouriertransformierten von  $\lambda(\vec{x}_\perp)$ . Das Bild zeigt die Werte höhenkodiert mit dem Zentrum des Bildes bei  $\vec{q}_\perp = (0, 0, 0)$ . Die  $z$ -Komponente von  $\vec{q}_\perp$  ist konstant Null.

#### 4.2.1 Reflexindizierung

Die Indizierung der Reflexe geht auf eine Arbeit von Cahn et al. zurück und ist durch die Form der Darstellung des dreidimensionalen reziproken Gitters (Gl. 4.15) festgelegt [24]. Durch die Projektionsmatrix  $P_{ij}$  wird jedem Punkt  $\vec{g}_\parallel$  im physikalischen, reziproken Gitter eineindeutig ein Punkt des reziproken Hypergitters zugeordnet. Unter Anwendung von  $P_{ij}$  (Gl. 3.39) ist seine Position in  $E_\parallel$  durch

$$\vec{g}_\parallel = \begin{pmatrix} H \\ K \\ L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (m_1 - m_4) + \tau(m_2 + m_5) \\ (m_3 - m_6) + \tau(m_1 + m_4) \\ (m_2 - m_5) + \tau(m_3 + m_6) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h + \tau h' \\ k + \tau k' \\ l + \tau l' \end{pmatrix} = (h/h', k/k', l/l') \quad (4.18)$$

gegeben. Dabei wird der gemeinsame Faktor  $1/a_0 \sqrt{2(2+\tau)}$  nicht mitgeschrieben. Um von der Indizierung in  $E_\parallel$  auf die Beschreibung im sechsdimensionalen Hypergitter zu

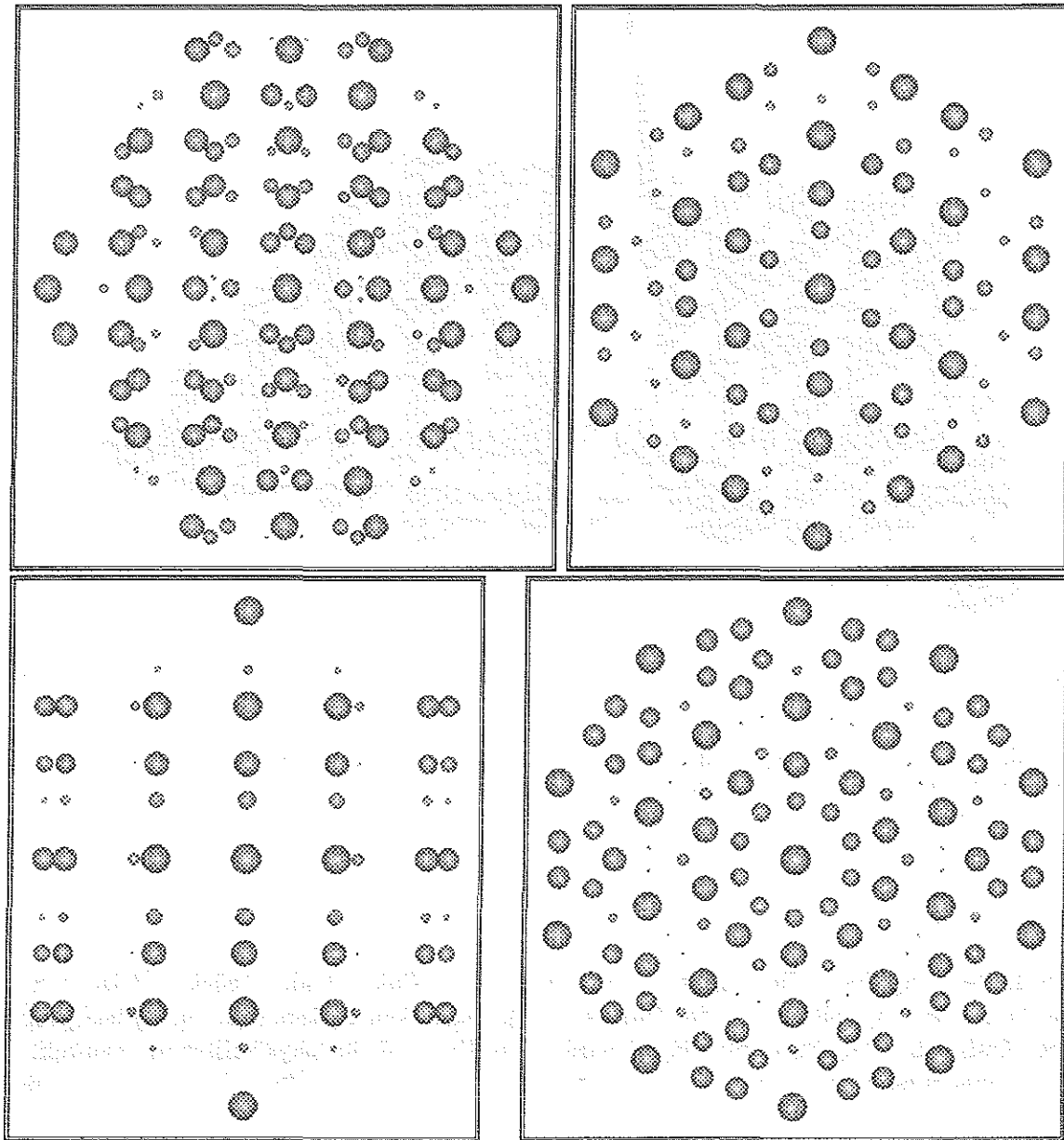


Abbildung 4.3: Ausschnitte aus berechneten Beugungsbildern eines ikosaedrischen Quasikristalls mit einem primitiv hyperkubischen Gitter entlang einer zweizähligen, dreizähligen, pseudozweizähligen und fünfzähligen Achse. Die Durchmesser der Reflexe sind proportional zur Intensität gewählt.

gelangen, benutzt man dann folgendes Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} m_1 &= \frac{1}{2}(h + k') & m_4 &= \frac{1}{2}(-h + k') \\ m_2 &= \frac{1}{2}(l + h') & m_5 &= \frac{1}{2}(-l + h') \\ m_3 &= \frac{1}{2}(k + l') & m_6 &= \frac{1}{2}(-k + l'). \end{aligned}$$

Im Anhang A.1 werden einige weitere nützliche Relationen für das Rechnen mit Indizierungsvektoren von Quasikristallen abgeleitet. Unterscheidet man nun noch zwischen den verschiedenen Hypergittertypen (P-, F-, I-Gitter), so ergeben sich Bedingungen für die Auswahl der Indizes im dreidimensionalen bzw. sechsdimensionalen reziproken Gitter. Dabei muß zunächst berücksichtigt werden, daß das zum direkten F-Gitter reziproke Gitter das I-Gitter ist (und umgekehrt). Das primitiv hyperkubische Gitter ist zu sich selbst reziprok. Diese Auswahlregeln sind in Tabelle 4.1 für die verschiedenen Gittertypen aufgelistet. Die aus diesen Auswahlregeln resultierenden Beugungsbilder sind für die zweizählige Zonenachse in Abbildung 4.4 gezeigt. Eine Unterscheidung der Hypergittertypen ist nur anhand von Überstrukturreflexen möglich, die bei den Beugungsbildern entlang der zweizähligen Zonenachsen auftreten. Andere Indizierungsmethoden findet man in [9, 56].

| Gittertyp                     | P-Gitter                            | F-Gitter                                                               | I-Gitter                                                                               |
|-------------------------------|-------------------------------------|------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------|
| HKL<br>3D rezipr.<br>Gitter   | $h+k'=2n$<br>$k+l'=2n$<br>$l+h'=2n$ | wie beim P- Gitter<br>zusätzlich noch<br>$h+k+l=2n$<br>$(h'+k'+l'=2n)$ | alle gerade<br>zusätzlich noch<br>$h+l+h'+k'=4n$<br>$h+k+l'+k'=4n$<br>$(l+k+h'+l'=4n)$ |
| $n_i$<br>6D rezipr.<br>Gitter | alle ganzen Zahlen                  | $\sum n_i = 2n$                                                        | alle gerade oder<br>alle ungerade                                                      |

Tabelle 4.1: Die Auswahlregeln für die Reflexe in Beugungsbildern von Quasikristallen mit verschiedenen reziproken Hypergittern [24].

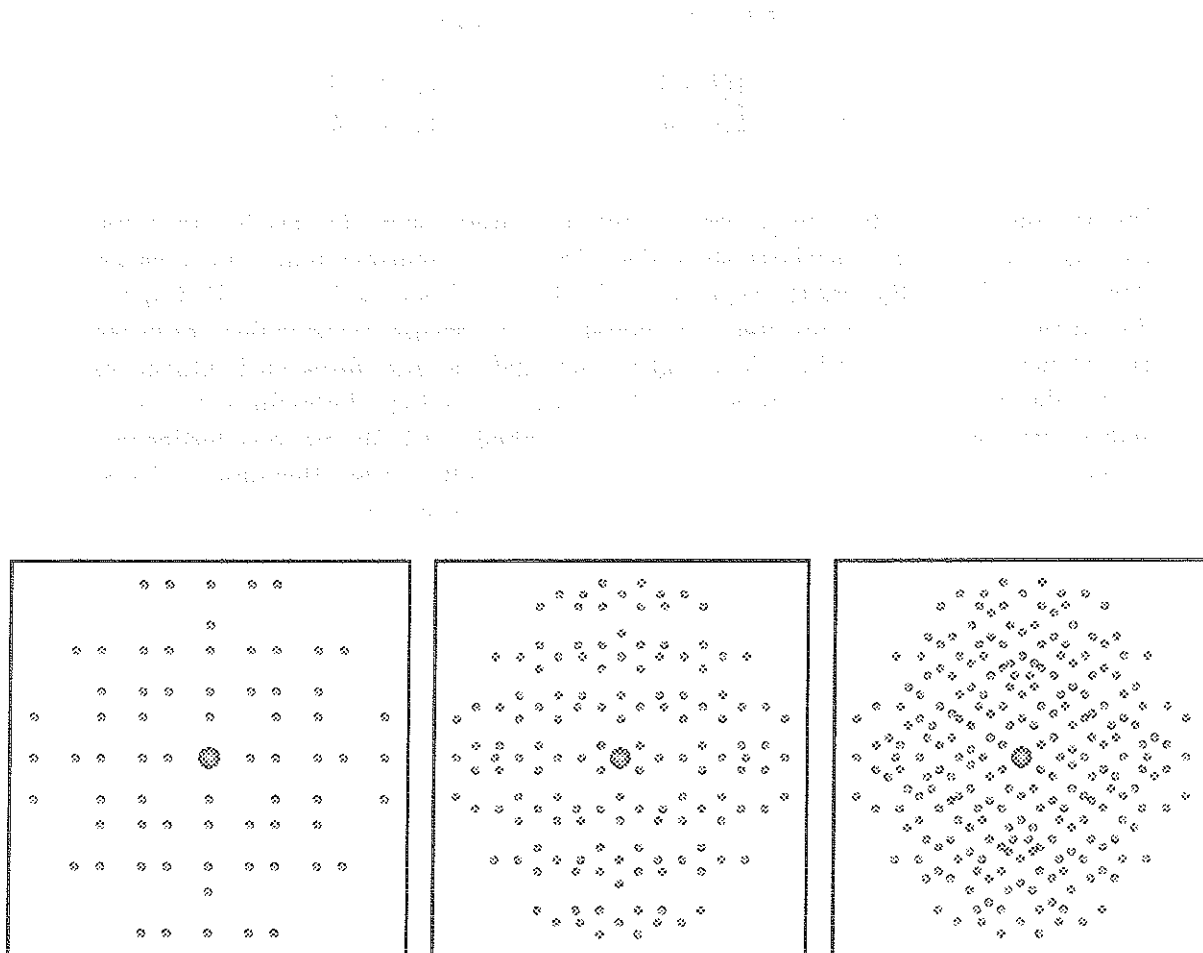


Abbildung 4.4: Positionen der Beugungsreflexe entlang einer zweizähligen Zonenachse für das direkte I-, P- und F-Hypergitter(v.l.n.r.). Eine Unterscheidung anhand von Überstrukturreflexen ist nur anhand der zweizähligen Zonenachsen möglich.

## DEFEKTE IN QUASIPERIODISCHEN GITTERN

Schon früh nach der Entdeckung der Quasikristalle wurde in theoretischen Arbeiten über mögliche Modelle auch untersucht, welche Defekte in einem Quasikristall denkbar sind [112, 145, 111]. Diese Untersuchungen benutzten zunächst die Dichtewellentheorie zur Beschreibung des Quasikristalls, später dann auch die in Kapitel 3 besprochenen Konstruktionsmethoden mit Hilfe von Gittern oder Netzen. Die letztgenannten Techniken sind anschaulicher, so daß auch in der folgenden Beschreibung auf sie zurückgegriffen wird. Die Ergebnisse und Schlußfolgerungen sind aber identisch mit denen, die im Rahmen einer Dichtewellentheorie erhalten werden [145].

Ausgangspunkt für die Konstruktion eines Quasikristallgitters sind, wie in Kapitel 3 beschrieben, perfekt aufgebaute, quadratische bzw. sechsdimensionale, hyperkubische Gitter. Die abgeleiteten Strukturen wird man daher als perfekt oder ungestört bezeichnen.

Bei Kristallen und auch bei Quasikristallen kann man als Defekt oder Störung nun all das bezeichnen, was lokal von einem idealen Aufbau abweicht. Bei den Kristallen gibt es aufgrund der dreidimensionalen Beschreibung drei Freiheitsgrade, um von der idealen Ordnung abzuweichen. Die Beschreibung von dreidimensionalen Quasikristallen beruht auf sechsdimensionalen Gittern. Folglich ergeben sich insgesamt sechs Freiheitsgrade für Abweichungen oder Störungen des idealen Aufbaus. Auch wenn der reale Quasikristall ein dreidimensionaler Festkörper ist, wird sich durch die größere Zahl der Freiheitsgrade eine stärkere Differenzierung möglicher Defekttypen ergeben. Allerdings ist es auch hier sinnvoll, die Beschreibung der Defekte am eindimensionalen Quasigitter einzuführen und die gewonnenen Erkenntnisse dann auf den dreidimensionalen Fall zu übertragen.

### 5.1 Defekte in eindimensionalen Quasigittern

Zur Beschreibung der Abweichungen betrachte man Abbildung 5.1. Die Verschiebung des Hypergitterpunktes  $P$  durch den Vektor  $\vec{U}$  aus seiner idealen Position  $\vec{X}$  wird in die Komponenten in den beiden Unterräumen  $u_{||}(x_{||}^P, x_{\perp}^P)$  und  $u_{\perp}(x_{||}^P, x_{\perp}^P)$  aufgeteilt. Die Position  $\vec{X}'$  im gestörten Hypergitter ergibt sich dann gemäß:

$$\vec{X}' = \vec{X} + \vec{U}(x_{||}, x_{\perp}). \quad (5.1)$$

Im folgenden soll folgende Konvention bei der Schreibweise der Skalare und Vektoren benutzt werden: Größen, die im Hypergitter (zwei- bzw. sechsdimensional) benutzt werden, werden mit großen Buchstaben bezeichnet. Alle kleingeschriebenen Symbole beziehen sich auf die Unterräume, wobei die Unterscheidung zwischen  $E_{||}$  und  $E_{\perp}$  durch die Indizes  $||$  und  $\perp$  erfolgt.

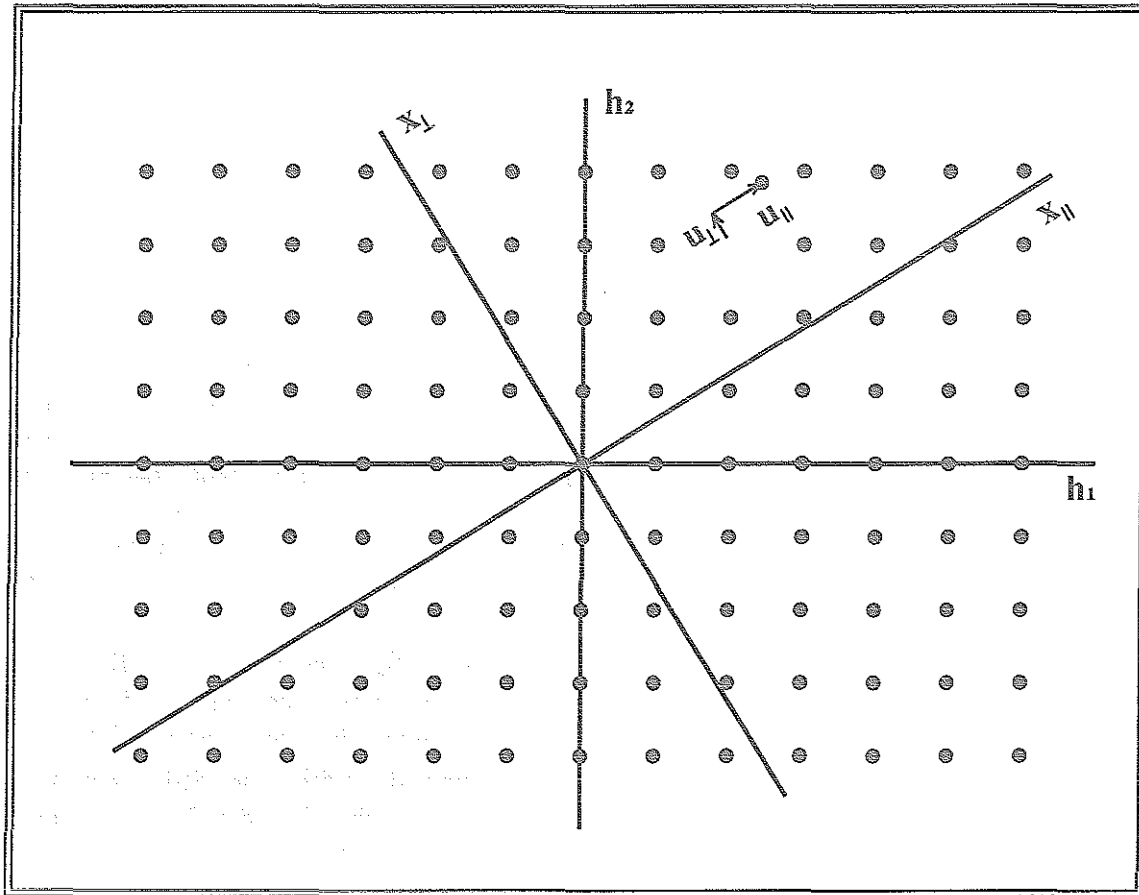


Abbildung 5.1: Das zweidimensionale Hypergitter mit einer Störung. Die Abweichung wird in ihre Komponenten in den beiden Unterräumen aufgeteilt.

Für die Positionen in den Unterräumen  $E_{||}$  und  $E_{\perp}$  gilt dann:

$$x_{||}' = x_{||} + u_{||}(x_{||}, x_{\perp}) \text{ und } x_{\perp}' = x_{\perp} + u_{\perp}(x_{||}, x_{\perp}). \quad (5.2)$$

Welche Auswirkungen haben nun die Verschiebungen im Übergitter auf die Positionen des eindimensionalen Quasigitters?

Der einfachste Fall einer Störung des Hypergitters ergibt sich für  $u_{||}(x_{||}, x_{\perp}) = \text{const.}$  und  $u_{\perp}(x_{||}, x_{\perp}) = 0$ . Behält man die im Kapitel 3 eingeführte Konstruktionsmethode bei, erhält man nun ein Gitter, das mit dem ungestörten Gitter bis auf eine Verschiebung *aller* Gitterpunkte um den Vektor  $u_{||}(x_{||}, x_{\perp})$  identisch ist (s. Abbildung 5.2).

Der entgegengesetzte Fall mit  $u_{||}(x_{||}, x_{\perp}) = 0$  und  $u_{\perp}(x_{||}, x_{\perp}) = \text{const.}$  ist etwas schwieriger zu interpretieren. Da hier die Gitterpunkte des Hypergitters senkrecht zur Schnittgerade verschoben werden, kann es passieren, daß einzelne atomaren Hyperflächen, die im ungestörten Gitter von der Schnittgeraden durchstoßen wurden, nun nicht mehr von ihr getroffen werden (und umgekehrt). So entsteht eine neue Anordnung der Punkte im eindimensionalen Gitter (s. Abbildung 5.3).

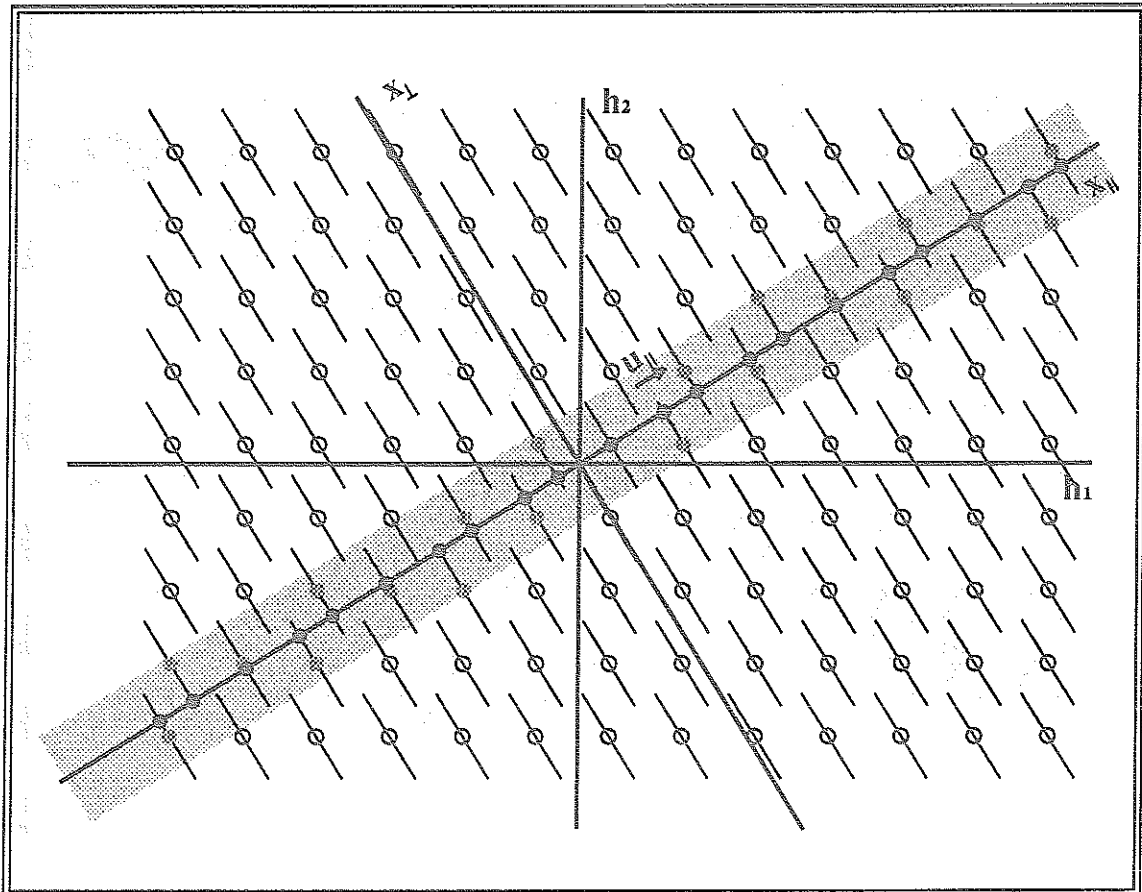


Abbildung 5.2: Veränderungen des Quasigitters bei konstanter Verschiebung entlang  $E_{||}$ . Vergleiche auch mit Abbildung 3.7.

Im allgemeinen werden beide Verzerrungsfelder örtlich variieren. Ist  $u_{||}$  lokal nicht konstant, erhält man bei einem konstanten  $u_{\perp}$  Stauchungen und/oder Streckungen im idealen Quasigitter. Diese Verzerrungen sind mit den Verschiebungen der Gitterpunkte in Kristallen durch Phononen vergleichbar. Darum werden sie häufig als phononenartig oder Phononenverzerrungen bezeichnet (engl.: phonon strain).

Läßt man nun  $u_{||}$  konstant und variiert  $u_{\perp}$ , kann lokal eine von der idealen Anordnung abweichende Abfolge der Gitterpunkte auftreten. Ein Beispiel findet sich in Abbildung 5.4. Die Verschiebung  $u_{\perp}$  führt hier im eindimensionalen Quasigitter zu einer Vertauschung eines kurzen mit einem langen Abstand. Während in Abbildung 3.7 die Abstandsfolge (von Ursprung in positive Richtung) kurz–lang–kurz–lang ist, lautet sie nun kurz–lang–lang–kurz. Dabei ist die Positionsänderung des vierten Gitterpunkts nicht kontinuierlich, wie bei der Phononenverzerrung, sondern besitzt einen festen, von Null verschiedenen, Wert. Einen solchen Wechsel bezeichnet man als Phason. Der Name Phason entstammt der Beschreibung der Quasikristalle mit Hilfe der Dichtewellentheorie. Änderungen der Phasenlage einzelner Dichtewellen führen hier zu ähnlichen Defekten in der Struktur [6, 5]. Wichtig ist hierbei, daß durch Phasonen im Prinzip keine neuen Bauelemente, also im

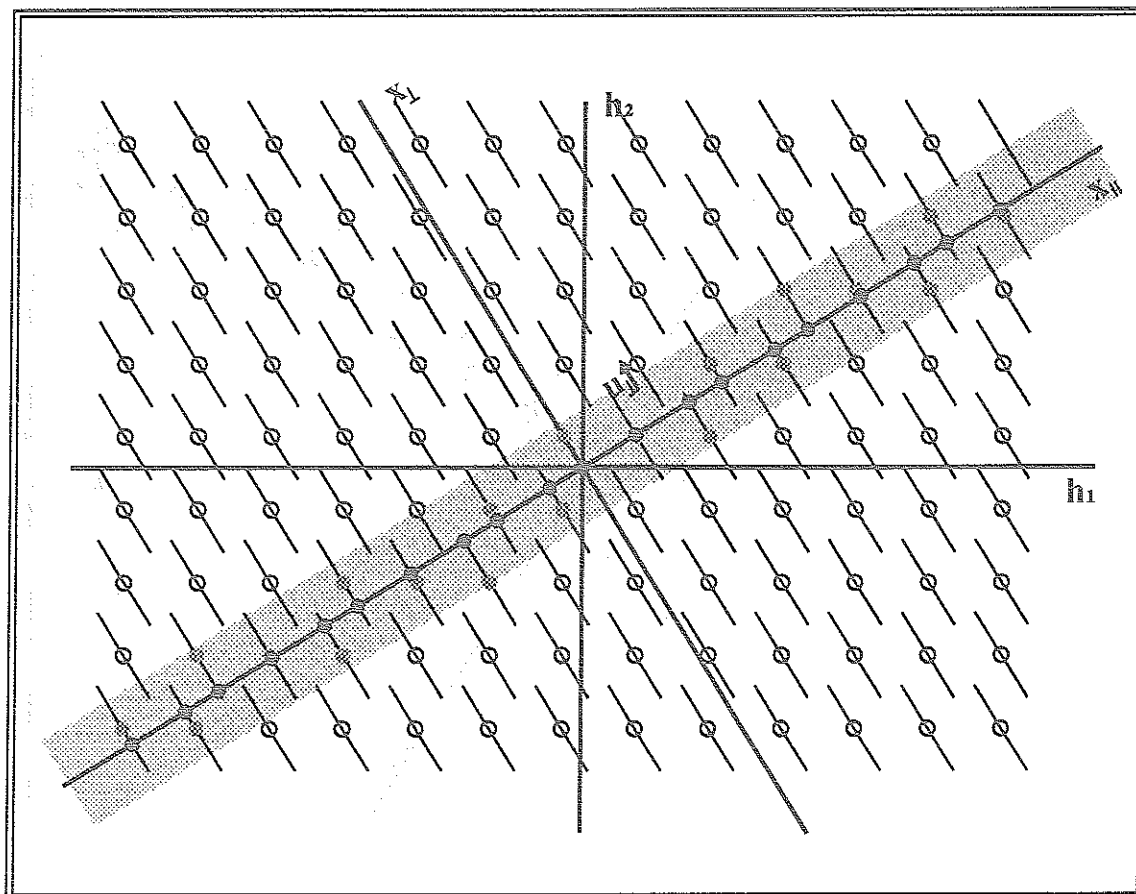


Abbildung 5.3: Veränderungen des Quasigitters bei konstanter Verschiebung entlang  $E_{\perp}$ . Vergleiche auch mit Abbildung 3.7.

eindimensionalen Fall keine neuen Abstände, in das Gitter eingebaut werden. Lediglich die Abfolge der Längsstücke wird verändert. Die Aufbauregeln werden verletzt und zwar um so mehr, je größer die lokale Verschiebung durch  $u_{\perp}(x_{\parallel})$  ist.

Bis zu diesem Punkt waren die Verzerrungsfelder im Hyperraum keinerlei Einschränkungen unterworfen. Insbesondere konnten diese Funktionen von beiden Raumrichtungen,  $x_{\parallel}$  und  $x_{\perp}$ , abhängig sein. Dies ist aber nicht sinnvoll, da man so keine eindeutige Beschreibung der Defekte in quasiperiodischen Gittern erhält. In Abbildung 5.5 wird dies illustriert. Die Punkte des Hypergitters sind hier nur innerhalb der markierten Vierecksebene in Richtung von  $x_{\perp}$  verschoben. Nun bestimmt die Lage der Schnittgeraden ob sich diese Störung auf das eindimensionale Quasigitter auswirkt.

Wie man sieht, können nur für die Schnittgerade (b) Fehler auftreten. Die Schnittgerade (a) führt zu einem idealen Quasigitter. Aus diesem resultierenden Gitter kann also nicht auf ein gestörtes Hypergitter zurückgeschlossen werden. Eine physikalisch sinnvolle Einschränkung ist es daher, eine Abhängigkeit der Verzerrungsfelder  $u_{\parallel}$  und  $u_{\perp}$  von  $x_{\perp}$  nicht zuzulassen. Die Verschiebungen selbst können aber in jede Richtung des Hypergitters wirken. Mit dieser Forderung wird die Konstruktion eines quasiperiodischen Gitters mit

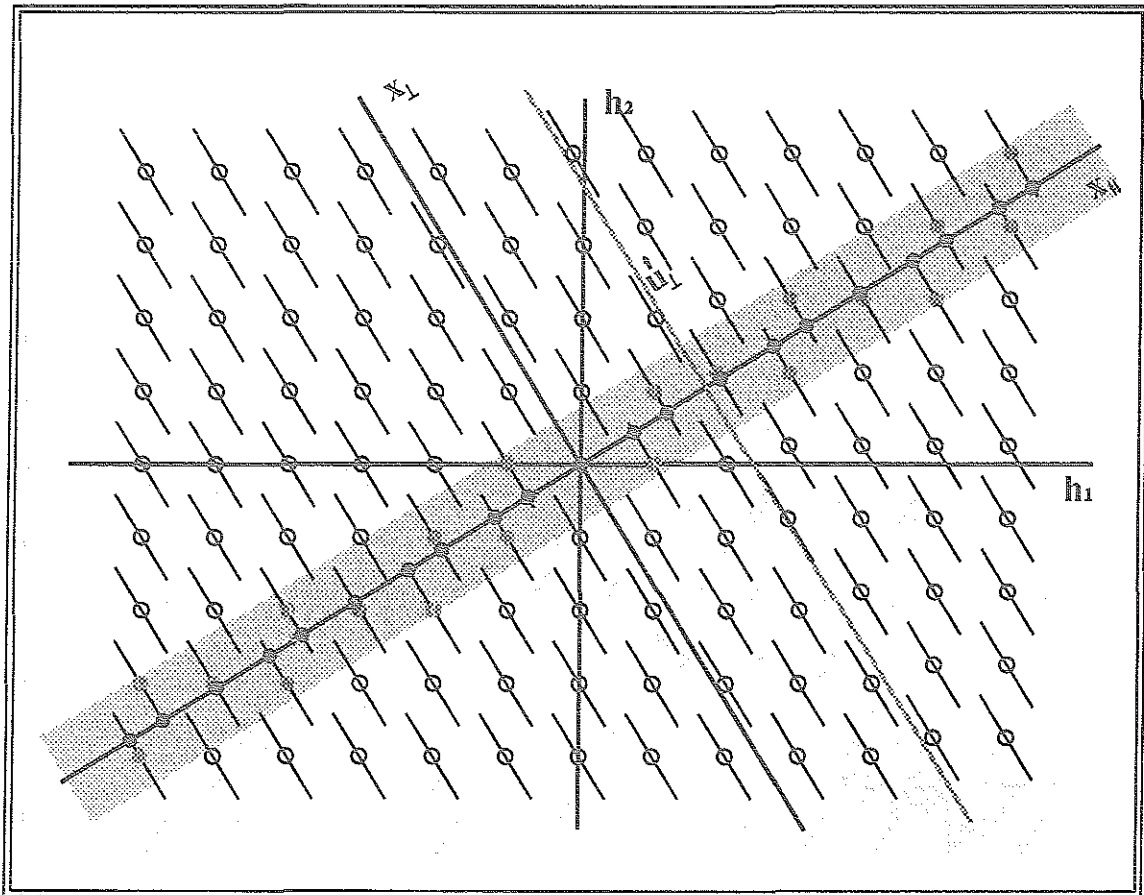


Abbildung 5.4: Ändert man lokal die Position der Hypergitterpunkte entlang der  $x_\perp$ -Richtung, treten Fehler im idealen Gitter auf. In diesem Beispiel sind die Hypergitterpunkte rechts der grauen Geraden entlang  $E_\perp$  verschoben. Dies führt dort zu einer Vertauschung in der Abstandsfolge (vergleiche mit Abbildung 3.7).

Defekten im wesentlichen nur noch von der Verschiebung der *Hypergitterpunkte* abhängig und nicht mehr von der Lage der Schnittgeraden.

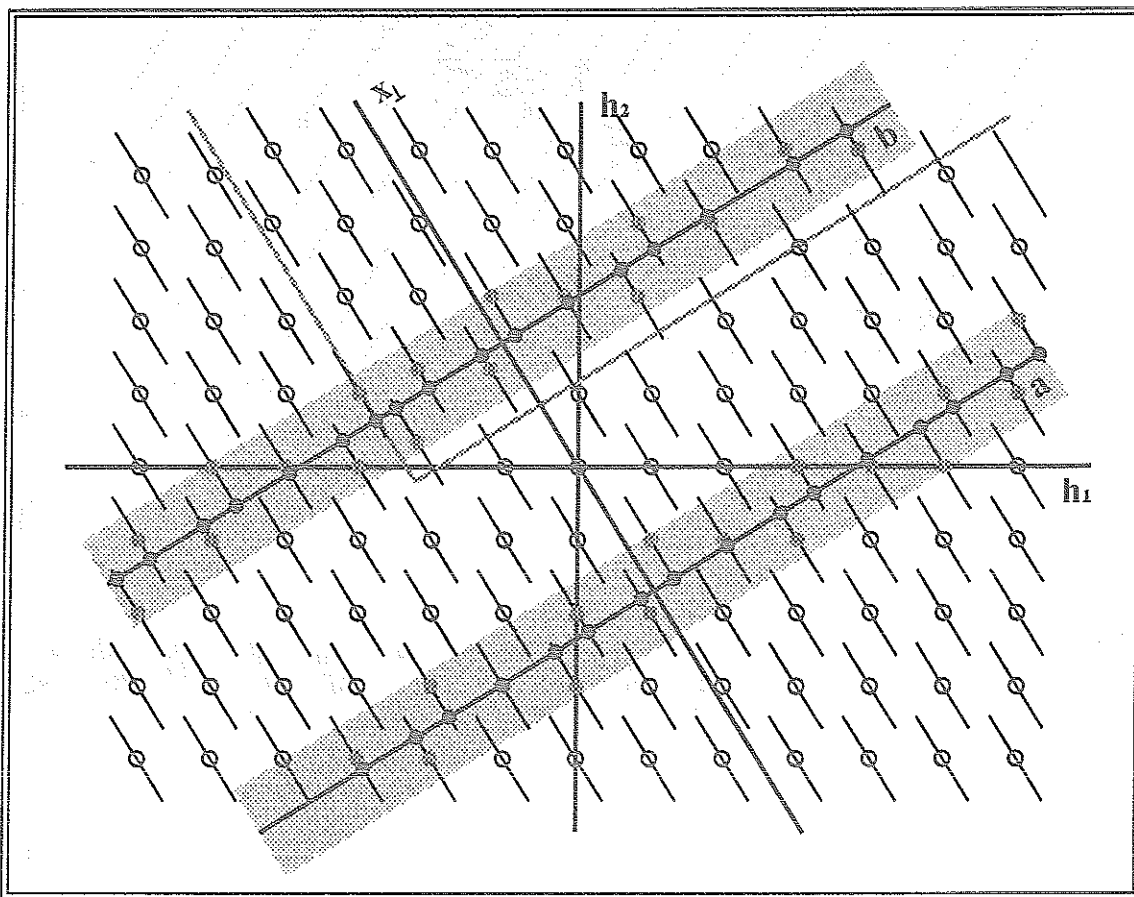


Abbildung 5.5: Sind die Verzerrungen  $u_{||}$  und  $u_{\perp}$  Funktionen auch von  $x_{\perp}$ , ist die Konstruktion des Quasigitters von der Lage der Schnittgeraden abhängig.

## 5.2 Defekte in dreidimensionalen Quasigittern

Für die Beschreibung von Defekten in dreidimensionalen Quasigittern wird ein sechsdimensionales Vektorfeld benutzt, das in zwei dreidimensionale Vektorfelder  $\vec{u}_{||}(\vec{x}_{||})$  und  $\vec{u}_{\perp}(\vec{x}_{||})$  innerhalb der beiden Unterräume  $E_{||}$  und  $E_{\perp}$  aufgeteilt werden kann.  $\vec{u}_{||}(\vec{x}_{||})$  beschreibt die phononenartigen Verzerrungen, wohingegen  $\vec{u}_{\perp}(\vec{x}_{||})$  Phasonenverzerrungen bzw. Verletzungen der Aufbauregeln im dreidimensionalen Gitter bewirkt.

Die Existenz von Phasonen in real existierenden Quasikristallen wird in elektronenmikroskopischen Hochauflösungsaufnahmen sichtbar. Abbildung 5.6 zeigt in einer hochauflösenden Gitterlinienabbildung ein Gebiet aus einem AlCuFe-Quasikristall.

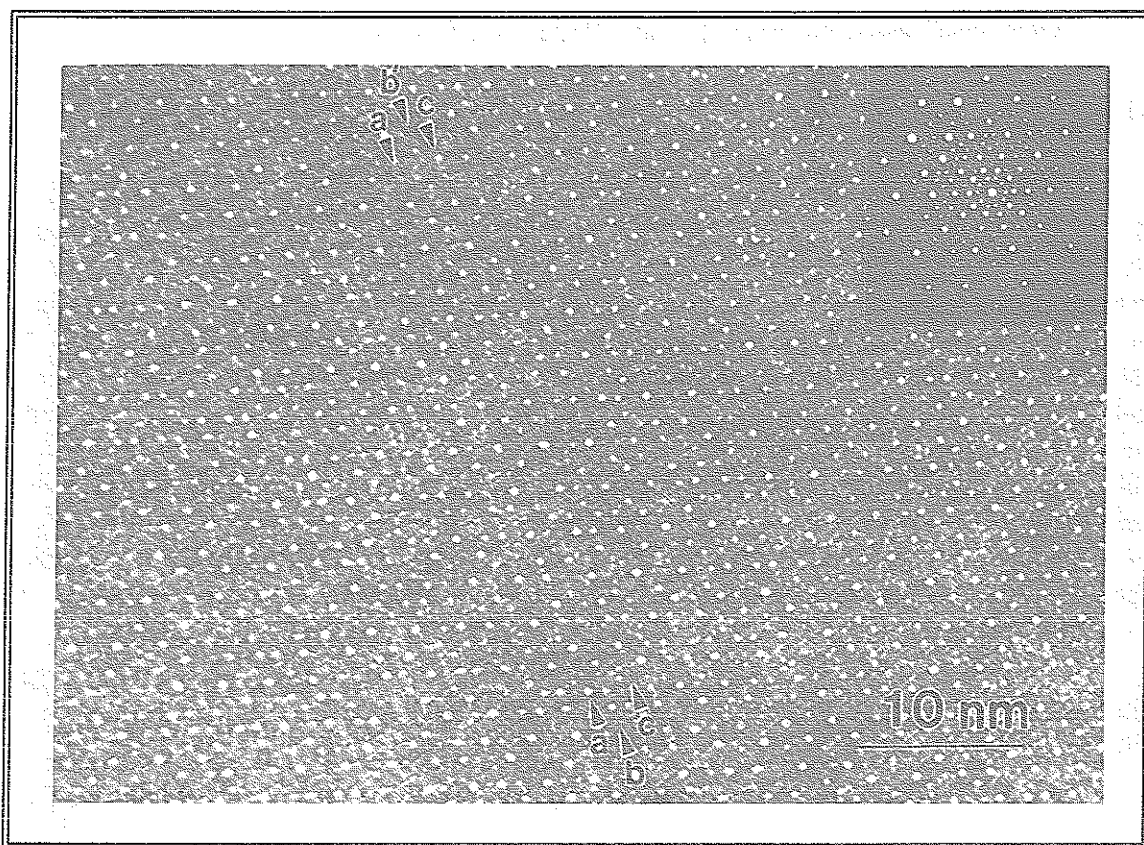


Abbildung 5.6: Elektronenmikroskopische Hochauflösungsaufnahme von Phasonen in  $\text{Al}_{63}\text{Cu}_{25}\text{Fe}_{12}$  entlang einer fünfzähligen Achse. Betrachtet man die Abbildung unter einem flachen Winkel, erkennt man, daß die Punktreihe (b) in der Mitte des Bildes aufhört und verschoben fortgesetzt wird.

In ungestörten Quasikristallbereichen liegen die Punkte auf durchgehenden Linien. Phasonenbehaftete Bereiche erkennt man daran, daß hier die Gitterlinien mehr oder we-

niger abrupt enden, um sich dann leicht versetzt fortzusetzen. Die durch (a), (b) und (c) markierten Reihen haben in der unteren Bildhälfte die Abstandsfolge kurz–lang. In der Mitte des Bildes endet Reihe (b) und setzt sich verschoben (b') fort. Die Abstandsfolge ist nun lang–kurz. Da die Phasenumordnungen im allgemeinen nicht so liegen, daß alle Wechsel der Gitterplätze entlang der Beobachtungsrichtung erfolgen, ist der Übergang von (b) nach (b') nicht abrupt, sondern erscheint aufgrund der Überlagerung von gestörten und ungestörten Bereichen fließend.

Phasonen wirken sich auch auf die Position der Reflexe von Beugungsbildern aus. Man kann zeigen, daß die Größe  $\Delta \vec{g}_{||}$  solcher Reflexverschiebungen proportional zum Verschiebungsfeld  $\vec{u}_{\perp}$  und zur Komponente des reziproken Gittervektors in  $E_{\perp}$ ,  $\vec{g}_{\perp}$ , ist [21, 75, 84, 116, 33]. D.h. Phasonenverzerrungen wirken sich zunächst auf die schwachen Beugungsreflexe aus, da diese große  $\vec{g}_{\perp}$  besitzen (s. a. Kapitel 4).

### 5.3 Versetzungen in quasiperiodischen Gittern

Mit Hilfe des Verschiebungsfeldes  $\vec{U}(\vec{x}_{||})$  ist es nun möglich, Versetzungen in quasiperiodischen Gittern zu erzeugen.

Die charakteristischen Größen zur Beschreibung eines solchen Defekts sind in kristallinen Gittern der Burgersvektor und die Linienrichtung [85]. Abbildung 5.7 zeigt eine Stufenversetzung in einem kubischen Kristallgitter entlang der Versetzungslinie. Die Versetzung wurde dadurch erzeugt, daß man aus dem ungestörten Gitter eine Halbebene entfernt und danach das Gitter wieder zusammengefügt hat (Abbildung 5.8). Das Ende der Halbebene legt dabei die Richtung der Versetzungslinie fest. In dem in Abbildung 5.7 gezeigten Beispiel verläuft sie senkrecht zur Papierebene. Diese Konstruktionsmethode bezeichnet man als Volterra-Prozeß [60, 15, 104]. Ein Umlauf um diese Versetzungslinie führt bei einer vorzeichenbehafteten Aufaddition aller durchlaufenen Gittervektoren auf einen von Null verschiedenen Vektor, den Burgersvektor. Führt man einen solchen Burgersumlauf nicht um die Versetzungslinie durch, findet man keinen Fehlvektor. In einem Abstand von der Versetzungslinie ist das Gitter nicht von einer perfekten Struktur zu unterscheiden.

Ist die Funktion  $\vec{u}(\vec{x})$ , die die Verzerrung beschreibt, bekannt, kann der Burgersvektor durch ein Linienintegral berechnet werden.  $C_f$  bezeichnet den Pfad, der beim Umlauf um die Versetzungslinie durchlaufen wird.

$$\vec{b} = \oint_{C_f} d\vec{u}(\vec{x}) \quad (5.3)$$

Die Schritte, die beim Volterra-Prozeß durchgeführt werden, sind im Prinzip nur für ein periodisches Gitter anwendbar. Daher kann diese Konstruktion zunächst nicht einfach auf den dreidimensionalen Quasikristall übertragen werden, da hier keine Gitterperiodizität vorliegt. Eine zum Volterra-Prozeß analoge Vorgehensweise für das dreidimensionale Quasigitter demonstriert die in Abbildung 5.9 gezeigte Anordnung der Gitterpunkte [15].

Hier sieht man das zweidimensionale Penrose-Muster. Periodisch angeordnete Linien, wie in der Projektion eines kubischen Gitters, sind hier nicht vorhanden. Aber als Analo-

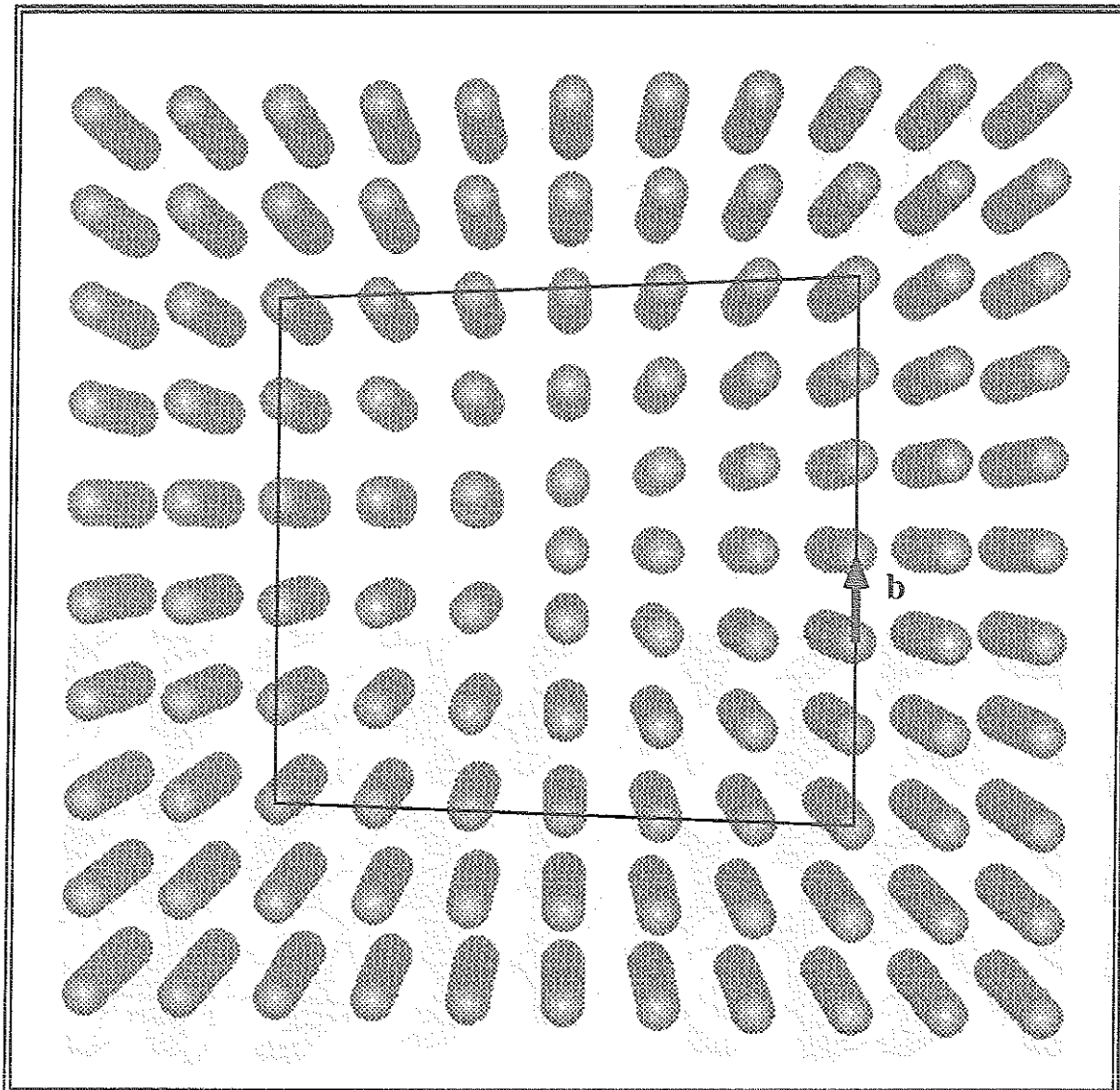


Abbildung 5.7: Stufenversetzung in einem periodischen, kubischen Gitter. Von rechts ist eine zusätzliche Halbebene in das Gitter eingeschoben. Die Versetzungslinie verläuft in der Mitte, parallel zur Blickrichtung.

gon dazu können im Penrosemuster die *Conway-Würmer* verstanden werden. Ein Conway-Wurm ist aus aneinandergrenzenden Rauten aufgebaut, die alle ein Kantenpaar gemeinsamer Orientierung besitzen. In einem dreidimensionalen Quasikristall entspricht einem solchen Wurm eine Platte aus aneinanderliegenden Rhomboedern.

Entfernt man jetzt auf einer Seite eines "Halbwurms" die Gitterpunkte (s. Abbildung 5.9), so läßt sich das Gitter mit leichten Verzerrungen wieder zusammenfügen. Aus dem Burgersumlauf ergibt sich der fehlende Kantenvektor als Burgersvektor.

Auf den ersten Blick erscheint diese Vorgehensweise sehr schlüssig. Dennoch kann man

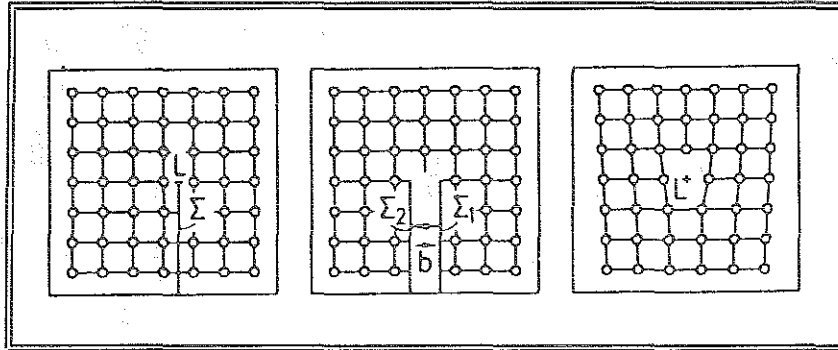


Abbildung 5.8: Der Volterraprozess zur Konstruktion einer Versetzung in einem quadratischen Gitter (aus [15]).

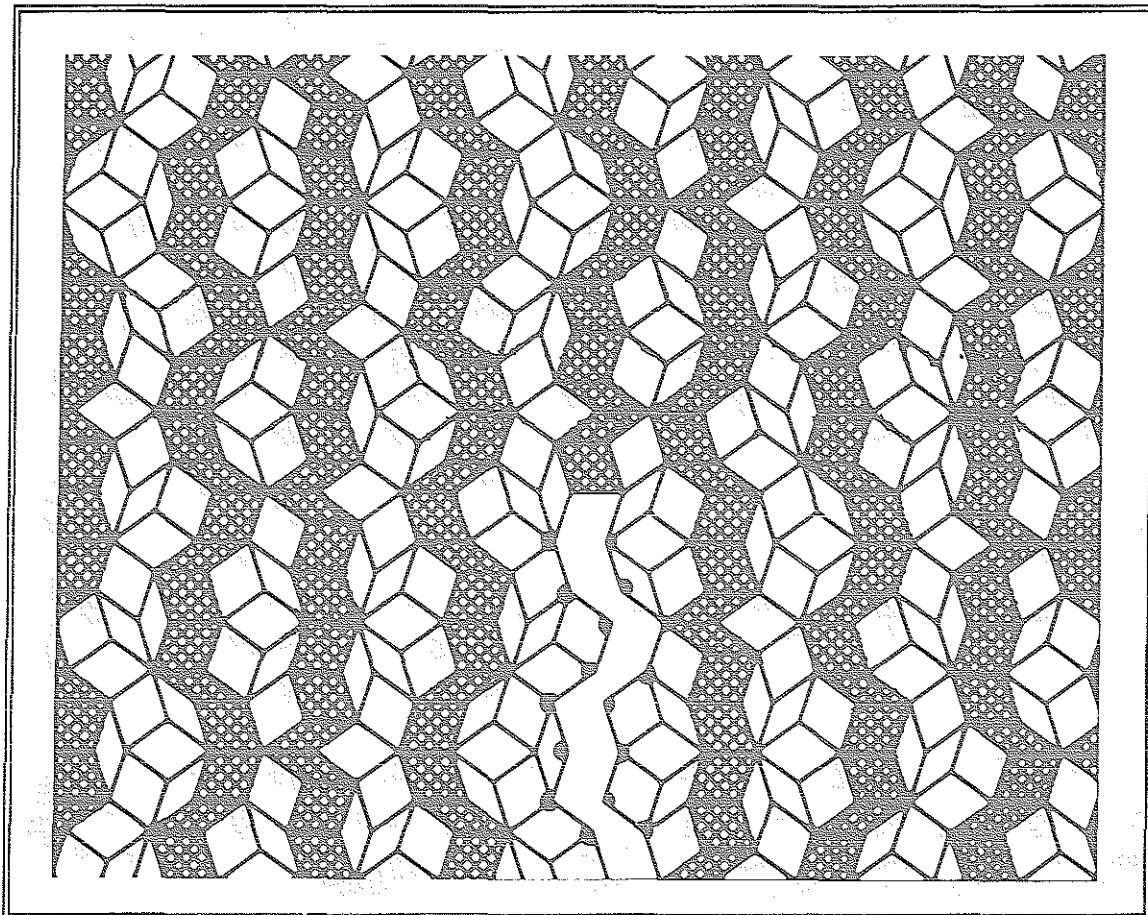


Abbildung 5.9: Volterrakonstruktion in einem zweidimensionalen, quasiperiodischen Gitter, dem Penrosemuster. Conway-Würmer sind schraffiert (aus [15]).

bei diesem Defekt nicht von einer Versetzung in Analogie zu einer Versetzung in einem Kristall sprechen. In einem zweidimensionalen periodischen Gitter ergibt sich durch den Volterra-Prozeß ein Punktdefekt, da nur die Bereiche in unmittelbarer Nähe der entfernten Halbgeraden vom idealen Aufbau abweichen. Dies ist aber für den hier im Quasikristall erzeugten Defekt nicht der Fall, da an allen Stellen wo Gitterpunkte durch die Volterra-Konstruktion entfernt wurden, nach dem Zusammenfügen nichterlaubte Gitterpunkt-konfigurationen auftreten, und das bis in beliebig große Entfernung vom eigentlichen Punktdefekt. Neben der Versetzung selbst wurde also noch ein Defekt, ähnlich einem Stapelfehler, eingebaut.

Da das Quasigitter von einem höherdimensionalen Gitter abgeleitet wird, bietet es sich an, auch die Versetzungen zunächst in dieses Gitter einzubauen. Dazu kann dann wieder der Volterra-Prozeß benutzt werden, d.h., man entfernt aus dem Hypergitter eine zusammenhängende Menge von Einheitszellen ('Halbebene') und fügt dann das Gitter wieder zusammen. Dadurch, daß man immer nur komplette Einheitszellen entfernt, konstruiert man so eine *vollständige* Versetzung, deren Burgersvektor ein Vektor des Hypergitters ist [15].

Das Hypergitter ist nur um den Versetzungskern stark gestört. Weiter davon entfernt relaxiert die Struktur, und für große Entfernungen ist sie dann nicht mehr von einem perfekten Gitter zu unterscheiden. Da das dreidimensionale Gitter einen (Aus-)Schnitt aus dem Hypergitter darstellt, wird sich auch hier die Störung auf einen endlichen Bereich des Gitters konzentrieren.

Durch folgendes Integral wird dann der Burgersvektor der Versetzung definiert:

$$\vec{B} = \oint_{C_r} d\vec{U}(\vec{x}_{||}) \quad (5.4)$$

Die Integrationsvorschrift fordert den Umlauf um die Versetzungslinie. Wie ist diese in einem Quasikristall festgelegt?

Die Versetzungslinie im physikalischen, dreidimensionalen Raum  $E_{||}$  ist ein eindimensionaler Defekt. Für einen periodischen Festkörper zeichnet diese Linie die Richtung aus, entlang derer sich das Verzerrungsfeld  $\vec{u}(\vec{x})$  nicht *ändert*. Überträgt man diese Bedingung auf die Versetzung in einem Quasikristall, folgt, daß hier die Versetzungslinie ein vierdimensionales Objekt ist. Es setzt sich zusammen aus dem gesamten senkrechten Raum  $E_{\perp}$  und der eigentlichen, eindimensionalen Versetzungslinie im physikalischen Raum  $E_{||}$ . Der Grund hierfür liegt in der funktionalen Abhängigkeit des Verzerrungsfeldes  $\vec{U}(\vec{x}_{||})$ . Da es nicht von der Koordinate  $\vec{x}_{\perp}$  abhängig ist, läßt jeder Pfad im Unterraum  $E_{\perp}$  das Verzerrungsfeld  $\vec{U}(\vec{x}_{||})$  konstant.

Den Burgersumlauf wird man daher wie in einer periodischen Struktur um die Versetzungslinie in  $E_{||}$  durchführen.

Die Beschreibung des Verzerrungsfeldes einer Versetzung mit einem Burgersvektor setzt voraus, daß praktisch nur eine Hauptrichtung der Gitterplatzverschiebungen vorliegt. In diesem Fall kann das Vektorfeld  $\vec{U}(\vec{x}_{||})$  in zwei Terme aufgespalten werden. Die Richtung wird durch den Burgersvektor beschrieben, die Amplitude der Verschiebung wird durch eine skalare Funktion  $\Phi(\vec{x}_{||})$  bestimmt. Dabei wird durch Definition des Burgersvektors in Gleichung 5.4 die Bedingung

$$\oint_{C_r} d\Phi(\vec{x}_{||}) = 1 \quad (5.5)$$

an diese skalare Funktion gestellt.

Für die Komponenten des Burgersvektors in den beiden Unterräumen  $E_{||}$  und  $E_{\perp}$  gilt entsprechend:

$$\vec{b}_{||} = \oint_{C_r} d\vec{u}_{||}(\vec{x}_{||}) \quad \text{mit} \quad \vec{u}_{||}(\vec{x}_{||}) = \vec{b}_{||} \phi_{||}(\vec{x}_{||}) \quad \text{wobei} \quad \oint_{C_r} d\phi_{||}(\vec{x}_{||}) = 1 \quad (5.6)$$

und

$$\vec{b}_{\perp} = \oint_{C_r} d\vec{u}_{\perp}(\vec{x}_{||}) \quad \text{mit} \quad \vec{u}_{\perp}(\vec{x}_{||}) = \vec{b}_{\perp} \phi_{\perp}(\vec{x}_{||}) \quad \text{wobei} \quad \oint_{C_r} d\phi_{\perp}(\vec{x}_{||}) = 1 \quad (5.7)$$

Weitere theoretische Arbeiten über Defekte und Versetzungen im speziellen bei Quasikristallen findet man in [65, 105, 111, 136].

## 5.4 Experimentelle Resultate anderer Arbeitsgruppen

Neben den Ergebnissen, die in dieser Arbeit beschrieben werden, wurden von anderen Arbeitsgruppen folgende Resultate veröffentlicht.

Erste Arbeiten zur Untersuchung von Defekten in Quasikristallen beschäftigten sich mit den Phasonen. Mit Hilfe der Röntgenstreuung untersuchten Budai et al. die von diesen Fehlern herrührenden Reflexverschiebungen in ikosaedrischen AlMn-Quasikristallen [21]. Eine Analyse der Abweichungen der Reflexe von ihren idealen Positionen zeigt, daß die Störungen im Quasikristallgitter mit Hilfe eines linear vom Ort abhängenden Phasonverzerrungsfeldes beschrieben werden können. Theoretische Arbeiten, die sich mit den Auswirkungen auf die Reflexpositionen und Reflexformen bei Streuexperimenten an gestörten Quasigittern beschäftigen, finden sich in [84, 145]. Dort werden unter Annahme verschiedener Gitterdefekte Gleichungen abgeleitet, die die Reflexverschiebung und Reflexbreite als Funktion der reziproken Gittervektoren  $\vec{g}_{||}$  und  $\vec{g}_{\perp}$  beschreiben. Röntgenstreuexperimente wurden auch an AlLiCu-Quasikristallen vorgenommen. Hier finden Heiney et al. Effekte wie sie auch bei AlMn-Quasikristallen beobachtet werden [75].

Erste Anzeichen für Versetzungen in Quasikristallen wurden in AlLiCu-Proben gefunden. Bei Untersuchungen im Transmissionselektronenmikroskop beobachteten Chen et al. Wolken von versetzungsähnlichen Kontrasten, konnten aber keine Auslöschung dieser Kontraste finden [29].

Hiraga und Hirabayashi [79] untersuchten AlMnSi-Quasikristalle mit Hilfe der hochauflösenden Elektronenmikroskopie. Sie machten Burgersumläufe in Gitterlinienbildern und interpretierten die ermittelten Fehlvektoren als Projektionen von Versetzungsburgersvektoren. Mit Hilfe von Fourierfiltermethoden untersuchten Wang et al. transmissionselektronenmikroskopische Hochauflösungsaufnahmen von AlMn-Quasikristallen [169]. Diese Bildverarbeitung führt zu Gitterlinienbildern, bei denen nur Linienscharen mit einer Periode auftreten; die Information über quasiperiodische Struktur geht hier verloren. Daher ist die Interpretation der hier auftretenden Bildmuster als Domänen aufgrund von phononen- und phasonenartigen Verzerrungsfeldern, sowie die Aussage, bei den beobachteten Linienaufspaltungen handle es sich um Versetzungen, nicht unumstritten.

Versetzungen in Quasikristallen, die im Transmissionselektronenmikroskop Kontrastauslöschungen zeigen, wurden erstmals von Zhang und Urban in dekadagonalen AlCuCo-Quasikristallen gefunden [193, 194]. In dieser Arbeit werden zwei verschiedene Typen

von Versetzungen beobachtet, die sich in ihrer Linienrichtung unterscheiden. Der erste Versetzungstyp (Typ A) hat eine Linienrichtung senkrecht zur zehnzähligen Achse des Quasikristalls. Der andere (Typ B) liegt mit seiner Linienrichtung etwa  $46^\circ$  von der zehnzähligen Achse entfernt. Hier konnte auch ein Burgersvektor bestimmt werden, der senkrecht zur zehnzähligen Achse verläuft.

Devaud-Rzepski et al., sowie Ebalard und Spaepen, beobachteten erstmals mit Hilfe der Transmissionselektronenmikroskopie Kontrastausschaltungen von Versetzungen in ikosaedrischen AlCuFe-Quasikristallen [44, 52]. Erste elektronenmikroskopische *Kontrastanalysen* wurden von Zhang, Wollgarten und Urban an Versetzungen in AlCuFe-Quasikristallen durchgeführt [195]. Die Ergebnisse werden in dieser Arbeit beschrieben (s. Kapitel 8.1).

Auch in dekalagonalen AlNiCo-Quasikristallen wurden Versetzungen entdeckt und analysiert [196, 185, 182, 184, 173, 183]. Bei der Untersuchung im Transmissionselektronenmikroskop finden sich Versetzungsnetzwerke mit Versetzungen, die Burgersvektoren mit Richtungen parallel oder senkrecht zur zehnzähligen Achse besitzen. Die Analyse dieser Versetzungen ist umstritten, da von den Autoren nur der Anteil des Verzerrungsfeldes im physikalischen Raum in die Untersuchung einbezogen wird (siehe hierzu auch Kapitel 9).

Neben Versetzungen konnte man auch andere Defekte nachweisen.

Zhang und Urban beobachteten Stapelfehlerkontraste in dekalagonalen AlCuCo-Quasikristallen [193, 194]. Diese Fehler sind nicht streng planar, sondern zeigen einen wellenförmigen Verlauf. Die Ränder dieser Defekte werden durch die oben beschriebenen Versetzungen vom Typ B beschrieben. Dai et al. sowie Yan und Wang untersuchten Stapelfehler in dekalagonalen AlCoNi-Quasikristallen [38, 183]. Hier konnten die Stapelfehlervektoren als auch die Normalen der Stapelfehlerebenen bestimmt werden.

Antiphasengrenzen in AlCuFe-Quasikristallen wurden erstmals von Devaud-Rzepski et al. beschrieben [45].

Zwillingskorngrenzen in ikosaedrischem AlCuFe wurden von Dai und Urban analysiert [41]. Hier findet man, daß der Normalenvektor der Korngrenze parallel zu einer fünfzähligen Richtung des Quasikristallgitters liegt. Um diesen Normalenvektor sind beide Körner um  $180^\circ$  gegeneinander verdreht.

Neben der Untersuchung mittels Beugungscontrast wurde kürzlich auch die konvergente Elektronenbeugung (CBED) benutzt, um Informationen über den Burgersvektor einer Quasikristallversetzung zu erhalten [172, 59, 39, 40]. Dabei nimmt man in Transmissionselektronenmikroskop Beugungsbilder mit stark konvergentem Strahl auf. Neben den Beugungsreflexen kann man dann dunkle Linien im Beugungsbild beobachten. Wird der Elektronenstrahl dabei auf einen Defekt in der Probe fokussiert, spalten diese Linien auf. Die Anzahl dieser Aufspaltung für eine bestimmte Linie wird durch den Burgersvektor bestimmt. Über diesen Effekt kann dann der Burgersvektor ermittelt werden. Beispiele für die Analyse von Versetzungen in periodischen Kristallen findet man im Buch von Tanaka et al. [152].

Da die Ergebnisse dieser CBED-Analysen sowie ein Teil der gerade vorgestellten Artikel im Zusammenhang mit den Experimenten dieser Arbeit stehen, wird auf sie in der zusammenfassenden Diskussion der Ergebnisse dieser Arbeit noch genauer eingegangen.

Es ist zu erwarten, dass die Eigenschaften der Quasiperiodischen Gitter in der Nähe der Übergangspunkte von einem Typ zum anderen stark von der Art der Defekte abhängen. In der Tat ist es bekannt, dass die Defekte in einem Quasiperiodischen Gitter die Eigenschaften des Systems stark beeinflussen können.

Die Defekte in einem Quasiperiodischen Gitter können in zwei Haupttypen unterteilt werden: in Punktdefekte und in Liniendefekte. Punktdefekte sind Defekte, die an einer einzigen Stelle im Gitter auftreten, während Liniendefekte Defekte sind, die entlang einer Linie im Gitter auftreten.

Ein Punktdefekt in einem Quasiperiodischen Gitter kann durch die Ersetzung eines Atoms durch ein anderes Atom entstehen. Ein Liniendefekt in einem Quasiperiodischen Gitter kann durch die Ersetzung einer Reihe von Atomen durch eine andere Reihe von Atomen entstehen. Die Defekte in einem Quasiperiodischen Gitter können die Eigenschaften des Systems stark beeinflussen, indem sie die Symmetrie des Systems brechen und die Eigenschaften des Systems ändern.

Die Defekte in einem Quasiperiodischen Gitter können die Eigenschaften des Systems stark beeinflussen, indem sie die Symmetrie des Systems brechen und die Eigenschaften des Systems ändern. Die Defekte in einem Quasiperiodischen Gitter können die Eigenschaften des Systems stark beeinflussen, indem sie die Symmetrie des Systems brechen und die Eigenschaften des Systems ändern. Die Defekte in einem Quasiperiodischen Gitter können die Eigenschaften des Systems stark beeinflussen, indem sie die Symmetrie des Systems brechen und die Eigenschaften des Systems ändern.

Die Defekte in einem Quasiperiodischen Gitter können die Eigenschaften des Systems stark beeinflussen, indem sie die Symmetrie des Systems brechen und die Eigenschaften des Systems ändern. Die Defekte in einem Quasiperiodischen Gitter können die Eigenschaften des Systems stark beeinflussen, indem sie die Symmetrie des Systems brechen und die Eigenschaften des Systems ändern. Die Defekte in einem Quasiperiodischen Gitter können die Eigenschaften des Systems stark beeinflussen, indem sie die Symmetrie des Systems brechen und die Eigenschaften des Systems ändern.

Die Defekte in einem Quasiperiodischen Gitter können die Eigenschaften des Systems stark beeinflussen, indem sie die Symmetrie des Systems brechen und die Eigenschaften des Systems ändern. Die Defekte in einem Quasiperiodischen Gitter können die Eigenschaften des Systems stark beeinflussen, indem sie die Symmetrie des Systems brechen und die Eigenschaften des Systems ändern. Die Defekte in einem Quasiperiodischen Gitter können die Eigenschaften des Systems stark beeinflussen, indem sie die Symmetrie des Systems brechen und die Eigenschaften des Systems ändern. Die Defekte in einem Quasiperiodischen Gitter können die Eigenschaften des Systems stark beeinflussen, indem sie die Symmetrie des Systems brechen und die Eigenschaften des Systems ändern.

Die Defekte in einem Quasiperiodischen Gitter können die Eigenschaften des Systems stark beeinflussen, indem sie die Symmetrie des Systems brechen und die Eigenschaften des Systems ändern. Die Defekte in einem Quasiperiodischen Gitter können die Eigenschaften des Systems stark beeinflussen, indem sie die Symmetrie des Systems brechen und die Eigenschaften des Systems ändern. Die Defekte in einem Quasiperiodischen Gitter können die Eigenschaften des Systems stark beeinflussen, indem sie die Symmetrie des Systems brechen und die Eigenschaften des Systems ändern.

Die Defekte in einem Quasiperiodischen Gitter können die Eigenschaften des Systems stark beeinflussen, indem sie die Symmetrie des Systems brechen und die Eigenschaften des Systems ändern. Die Defekte in einem Quasiperiodischen Gitter können die Eigenschaften des Systems stark beeinflussen, indem sie die Symmetrie des Systems brechen und die Eigenschaften des Systems ändern. Die Defekte in einem Quasiperiodischen Gitter können die Eigenschaften des Systems stark beeinflussen, indem sie die Symmetrie des Systems brechen und die Eigenschaften des Systems ändern.

## Kapitel 6

# KONTRASTTHEORIE FÜR DEFEKTE IN QUASIKRISTALLEN

## 6.1 Kontrast von Defekten in Kristallen

Im folgenden betrachten wir eine dünne Probe der Dicke  $t$ . Mit dieser Probe sei ein kartesisches Koordinatensystem verbunden, das seinen Ursprung in der Probenoberfläche besitzen soll und dessen  $z$ -Achse senkrecht zu dieser in die Probe weist. Die  $x$ - und  $y$ -Koordinaten liegen somit in der Probenebene (Abbildung 6.1). Die Probe sei so im Elek-

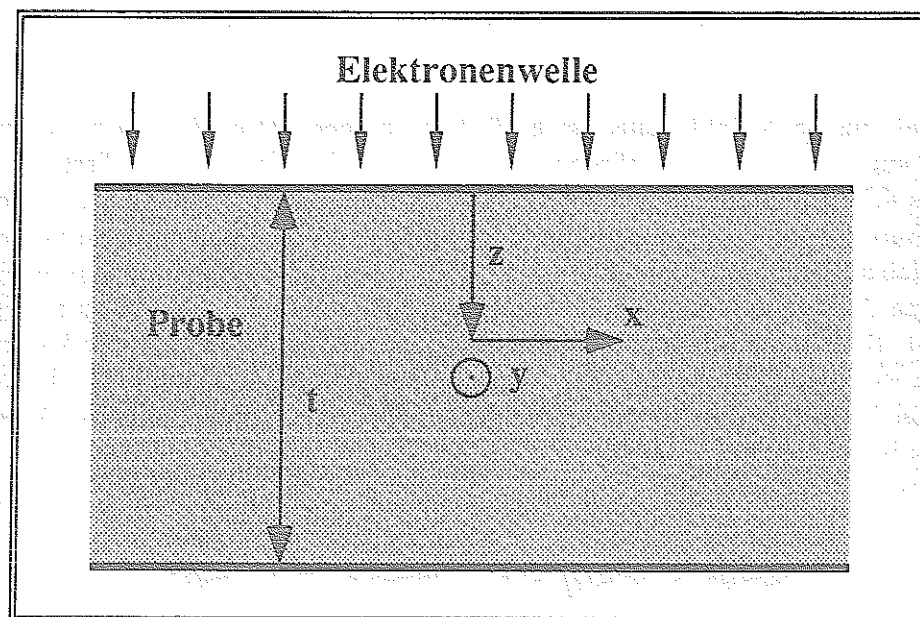


Abbildung 6.1: Wahl der Koordinaten bei der Säulennäherung.

tronenmikroskop orientiert, daß kinematische Zweistrahlbedingungen vorliegen. Somit ist neben dem Nullstrahl nur ein weiterer Beugungsreflex angeregt und seine Intensität sei wesentlich schwächer als die des Nullstrahls (s. Anhang A.2). Diese Bedingungen können durch den Anregungsfehler  $\vec{s}$  charakterisiert werden. In der Ewaldkonstruktion beschreibt er die Abweichung des abgelenkten Strahls  $\vec{k}$  vom reziproken Gittervektor  $\vec{g}$  senkrecht zum Nullstrahl  $\vec{k}_0$ :  $\vec{k} - \vec{k}_0 = \vec{g} + \vec{s}$  (s. Anhang A.2).

Unter diesen Bedingung wird der Kontrast der Probe durch die Amplitude  $\Phi_g$  der von den Atomen in Richtung  $k_g$  gestreuten Elektronenwellen bestimmt. Bildet man die Probe mit Hilfe des Nullstrahls (s. Anhang A.5.2) ab, so erscheinen alle Probenbereiche dunkel, die Elektronen nach  $k_g$  abbeugen. Das ist dann der Fall, wenn der Anregungsfehler  $\vec{s}$  gleich Null ist. D. h., die Braggbedingung ist erfüllt und die von den Atomen ausgehenden Kugelwellen addieren sich konstruktiv auf und tragen so zur Amplitude von  $\Phi_g$  bei.

Nun kann gezeigt werden, daß die Gesamtstreuamplitude an einem Punkt  $P(x_P, y_P, t)$  an der Unterseite der Probe, näherungsweise nur durch die Kugelwellen bestimmt wird, die von Probenatomen innerhalb einer schmalen Säule über dem Punkt  $P(x_P, y_P, t)$  ausgehen. Dies bezeichnet man als Säulennäherung [83, 82, 155, 132, 137]. Demnach ist die Streuamplitude  $\Phi_g$  an einem Punkt an der Probenunterseite durch die Eigenschaften der Probe innerhalb einer Säule über diesem Punkt  $P(x_P, y_P, t)$  bestimmt. Der Säulendurchmesser liegt in der Größenordnung  $2(t\lambda)^{\frac{1}{2}}$  ( $\lambda$ : deBroglie Wellenlänge der Elektronen), typischerweise 1 – 2 nm.

Die Streuamplitude  $\Phi_g$  des Beugungsvektors  $\vec{K} = \vec{k} - \vec{k}_0 = \vec{g} + \vec{s}$  (s. Anhang A.2) am Ort  $P(x_P, y_P, t)$  für ein Gitter mit Gitterplätzen bei  $\vec{x}'_j = \vec{x}_j + \vec{u}_j$  ist damit durch die folgende Summe über alle Atompositionen  $\vec{x}'_j$  in der Säule über  $P(x_P, y_P, t)$  gegeben:

$$\Phi_g = \sum_j e^{-2\pi i \vec{K} \vec{x}'_j} = \sum_j e^{-2\pi i \vec{K} \vec{x}_j} e^{-2\pi i \vec{K} \vec{u}_j}, \quad (6.1)$$

wobei der atomare Streufaktor hier der Einfachheit halber zu Eins gesetzt wird. Die Positionen der ungestörten Gitterpunkte werden mit  $\vec{x}_j$  beschrieben und der Wert des Verzerrungsfeldes  $\vec{u}(x, y, z)$  an dieser Stelle ist durch  $\vec{u}_j$  gegeben. Um nun mit der Säulennäherung den Wert von  $\Phi_g(x_P, y_P, t)$  zu berechnen, zerlegt man die Säule zunächst in kleine Zylinder, so daß die Änderung des Verzerrungsfeldes innerhalb dieses Zylinders vernachlässigt werden kann. Dies entspricht einer Zerlegung der Summe in Gleichung 6.1 in einzelne Untersummen. Da das Verzerrungsfeld in der Untersumme als näherungsweise konstant angenommen wird, läßt sich diese durch die Fouriertransformierte eines Gitters bestimmen, das an jeder Stelle um den für den untersuchten Zylinder gültigen Wert der Verzerrung verschoben ist.

Die Gesamtstreuamplitude ergibt sich dann durch Aufaddition aller Zylinderbeiträge [83]:

$$\Phi_g(x_P, y_P, t) \propto \int_0^t e^{-2\pi i (\vec{g} \vec{u}(x_P, y_P, z) + sz)} dz, \quad (6.2)$$

mit  $s = |\vec{s}|$  und der Annahme, daß das Skalarprodukt  $\vec{s} \vec{u}_j$  gegenüber den anderen Termen vernachlässigt werden kann.

Untersucht man nun die Probe mittels Beugungskontrast (s. Anhang A.5.2) wählt man  $\vec{s}$  ausreichend groß, so daß ungestörte Probenbereiche im Hellfeldbild hell erscheinen, da hier die Braggbedingung nicht erfüllt ist. Dunkler Beugungskontrast entsteht im Bereich des Defekts, wenn das Skalarprodukt  $\vec{g} \vec{u}$  einen hinreichend großen Wert erreicht, in dessen Folge der Phasenterm des Anregungsfehlers,  $-2\pi i s z$ , kompensiert werden kann, was schließlich zur Zunahme der Streuamplitude führt. Dieser Bereich erscheint dann dunkel.

Das bedeutet aber auch, daß gemäß Gleichung 6.2 Verzerrungen  $\vec{u}$  eines Defektes nicht zu sehen sind, sie sind außer Kontrast, falls überall  $\vec{g} \vec{u} = 0$ .

Diese Bedingung wird in kristallinen Festkörpern, selbst bei elastisch isotropen Kristallen, für eine beliebige Versetzung mit Burgersvektor  $\vec{b}$  und Linienrichtung  $\vec{l}$  in den seltensten Fällen *exakt* erfüllt [82]. Ausnahmen bilden reine Schrauben- bzw. Stufenversetzungen. Sie sind unsichtbar, falls der zur Abbildung benutzte reziproke Gittervektor  $\vec{g}$  senkrecht zu  $\vec{b}$  (Schraubenversetzung) bzw. senkrecht zu  $\vec{b}$  und parallel zu  $\vec{l}$  (Stufenversetzung) eingestellt wurde. Der Grund hierfür sind Verschiebungen der Gitterpositionen, die nicht parallel zum Burgersvektor liegen. Sie resultieren aus einer Relaxation des gestörten Gitters. Diese sind zwar klein, können aber dennoch zu *Restkontrast* führen. Wenn das Verzerrungsfeld aber im wesentlichen durch den Burgersvektor  $\vec{b}$  charakterisiert werden kann, ist es so, daß der Kontrast der Versetzung zumindest ein Minimum durchläuft, falls gilt

$$\vec{g}\vec{b} = 0. \quad (6.3)$$

Daher kann man die Gleichung 6.3 als Auslöschbedingung für den Kontrast von Versetzungen in Kristallen verwenden.

## 6.2 Kontrast von Versetzungen in Quasikristallen

Die in Gleichung 6.2 angegebene Bedingung läßt sich nun nicht einfach für die Untersuchung von Defekten in Quasikristallen übernehmen. Der Grund hierfür liegt in der Struktur der Defekte in Quasikristallen. Betrachtet man die Atome innerhalb einer Säule, so ist es sicherlich möglich, einen Teil der Verzerrungen durch einfache Verschiebung der Atome von ihren idealen Plätzen zu beschreiben. Das sind die Phononenverzerrungen, analog zu den Verzerrungen in einem gestörten, periodischen Gitter. Andererseits wird man Atompositionen finden, die sich nicht durch solche einfachen Verschiebungen erklären lassen. Sie rühren von Verletzungen der Aufbauregeln her und können auf Verschiebungen der Atome innerhalb des Unterraums  $E_{\perp}$  zurückgeführt werden (Phasonen-Verzerrungen).

Das sechsdimensionale Referenzgitter  $\Gamma$  soll daher nun auch benutzt werden, um eine den periodischen Festkörpern entsprechende Auslöschbedingung abzuleiten. Die Versetzung in  $\Gamma$  wird durch das Verzerrungsfeld  $\vec{U}$  mit den Komponenten in  $E_{\parallel}$  und  $E_{\perp}$ ,  $\vec{u}_{\parallel}$  und  $\vec{u}_{\perp}$  beschrieben. Mit diesem Verzerrungsfeld wird nun die Fouriertransformierte des Gitters in Analogie zu Gleichung 6.1 berechnet.

## 6.3 Ableitung der Auslöschbedingung

Das sechsdimensionale periodische hyperkubische Gitter wird beschrieben durch

$$\Gamma(\vec{x}_{\parallel}, \vec{x}_{\perp}) = \sum_j \delta(\vec{x}_{\parallel} - \vec{x}_{\parallel}^j) \delta(\vec{x}_{\perp} - \vec{x}_{\perp}^j) \quad (\text{Gl. 3.37}). \quad (6.4)$$

Wie in Abschnitt 3.2 gezeigt, läßt sich das dreidimensionale Quasikristallgitter durch folgenden Ausdruck beschreiben:

$$\int \Gamma(\vec{\zeta}_{\parallel}, \vec{\zeta}_{\perp}) A(\vec{x}_{\parallel} - \vec{\zeta}_{\parallel}, \vec{x}_{\perp} - \vec{\zeta}_{\perp}) \delta(\vec{x}_{\perp}) d\vec{\zeta}_{\parallel} d\vec{\zeta}_{\perp} d\vec{x}_{\perp} \quad (\text{Gl. 3.41}). \quad (6.5)$$

In einem gestörten Gitter werden die Koordinaten des idealen Gitters  $\vec{x}_{||}$  und  $\vec{x}_{\perp}$  in Gleichung 3.37 durch die Terme  $\vec{x}_{||} + \vec{u}_{||}(\vec{x}_{||})$  und  $\vec{x}_{\perp} + \vec{u}_{\perp}(\vec{x}_{||})$  ersetzt. Mit  $\delta(\vec{x}_{\perp}) = \int e^{-2\pi i \vec{q}_{\perp} \cdot \vec{x}_{\perp}} d\vec{q}_{\perp}$  lautet dann die Fouriertransformation bezüglich  $\vec{x}_{||}$  (s. Kapitel 4) <sup>†</sup>:

$$\int \Gamma(\vec{\zeta}_{||} + \vec{u}_{||}(\vec{\zeta}_{||}), \vec{\zeta}_{\perp} + \vec{u}_{\perp}(\vec{\zeta}_{||})) \Lambda(\vec{x}_{||} - (\vec{\zeta}_{||} + \vec{u}_{||}(\vec{\zeta}_{||})), \vec{x}_{\perp} - (\vec{\zeta}_{\perp} + \vec{u}_{\perp}(\vec{\zeta}_{||}))) e^{-2\pi i \vec{q}_{\perp} \cdot \vec{x}_{\perp}} d\vec{q}_{\perp} d\vec{\zeta}_{||} d\vec{\zeta}_{\perp} e^{-2\pi i \vec{q}_{||} \cdot \vec{x}_{||}} d\vec{x}_{||} d\vec{x}_{\perp}. \quad (6.6)$$

Integration bezüglich  $\vec{x}_{||}$  und  $\vec{x}_{\perp}$  liefert dann

$$\int \Lambda^*(\vec{q}_{||}, \vec{q}_{\perp}) e^{-2\pi i (\vec{q}_{||} \cdot \vec{\zeta}_{||} + \vec{q}_{\perp} \cdot \vec{\zeta}_{\perp})} \Gamma(\vec{\zeta}_{||} + \vec{u}_{||}(\vec{\zeta}_{||}), \vec{\zeta}_{\perp} + \vec{u}_{\perp}(\vec{\zeta}_{||})) d\vec{\zeta}_{||} d\vec{\zeta}_{\perp} d\vec{q}_{\perp}. \quad (6.7)$$

Berücksichtigt man nun, daß  $\Gamma$  eine Summe von  $\delta$ -Distributionen ist, führt die Integration bezüglich  $\vec{\zeta}_{||}$  und  $\vec{\zeta}_{\perp}$  auf folgenden Ausdruck:

$$\int \Lambda^*(\vec{q}_{||}, \vec{q}_{\perp}) \sum_j e^{-2\pi i (\vec{q}_{||} \cdot \vec{x}_{||}^j + \vec{q}_{\perp} \cdot \vec{x}_{\perp}^j)} e^{-2\pi i (\vec{q}_{||} \cdot \vec{u}_{||}(\vec{x}_{||}^j) + \vec{q}_{\perp} \cdot \vec{u}_{\perp}(\vec{x}_{||}^j))} d\vec{q}_{\perp}. \quad (6.8)$$

Dabei wird die aus der Säulennäherung stammende Näherung gemacht, daß die Werte der Verzerrungsfelder als konstant angenommen werden können. Dieser Ausdruck liefert nur Beiträge falls  $\vec{q}_{||} \cdot \vec{x}_{||}^j + \vec{q}_{\perp} \cdot \vec{x}_{\perp}^j = \vec{G} \cdot \vec{X}^j$  eine ganze Zahl ist. In diesem Fall ist  $\vec{G}$  ein Vektor des reziproken Hypergitters. Daher kann man die obige Gleichung umschreiben zu

$$\Lambda^*(\vec{g}_{||}, \vec{g}_{\perp}) \sum_j e^{-2\pi i (\vec{g}_{||} \cdot \vec{x}_{||}^j + \vec{g}_{\perp} \cdot \vec{x}_{\perp}^j)} e^{-2\pi i (\vec{g}_{||} \cdot \vec{u}_{||}(\vec{x}_{||}^j) + \vec{g}_{\perp} \cdot \vec{u}_{\perp}(\vec{x}_{||}^j))}. \quad (6.9)$$

Für  $\vec{u}_{||}(\vec{x}_{||}^j) = \vec{u}_{\perp}(\vec{x}_{||}^j) = 0$  ergibt das den in Kapitel 4 abgeleiteten Ausdruck für die Fouriertransformierte des ungestörten Quasikristallgitters. Demnach wird der Phasenfaktor in Gleichung 6.2 für die Analyse von Defekten in Quasikristallen durch

$$e^{-2\pi i \vec{G} \cdot \vec{U}} = e^{-2\pi i (\vec{g}_{||} \cdot \vec{u}_{||} + \vec{g}_{\perp} \cdot \vec{u}_{\perp})}. \quad (6.10)$$

ersetzt.  $\vec{G}$  ist der reziproke Gittervektor im sechsdimensionalen Hypergitter mit den Komponenten  $\vec{g}_{||}$  und  $\vec{g}_{\perp}$  in den Unterräumen  $E_{||}$  und  $E_{\perp}$ . Dabei soll nochmals hervorgehoben werden, daß diese Vektoren auf Grund der irrationalen Orientierung der Unterräume zum Hypergitter eindeutig einander zugeordnet werden können.

Gemäß Gleichungen 6.2 und 6.10 erwartet man Kontrastausslöschung, falls gilt:

$$\vec{G} \cdot \vec{U} = \vec{g}_{||} \cdot \vec{u}_{||} + \vec{g}_{\perp} \cdot \vec{u}_{\perp} = 0. \quad (6.11)$$

Diese Gleichung kann nun in zwei Fällen unterschieden werden. Im ersten ist nicht nur das sechsdimensionale Skalarprodukt Null, sondern auch die Skalarprodukte bezüglich der beiden Unterräume:

$$\vec{g}_{||} \cdot \vec{u}_{||} = \vec{g}_{\perp} \cdot \vec{u}_{\perp} = 0. \quad (6.12)$$

<sup>†</sup>Normierungsfaktoren werden auch hier wieder zu Eins gesetzt.

Dies wird als starke Auslöschbedingung (*strong contrast extinction condition*, SEC) bezeichnet. Im anderen Fall verschwindet nur das sechsdimensionale Skalarprodukt, wohingegen die Produkte in den Unterräumen ungleich von Null sind:

$$\vec{g}_{||}\vec{u}_{||} = -\vec{g}_{\perp}\vec{u}_{\perp} \neq 0. \quad (6.13)$$

Diese Bedingung soll als schwache Auslöschbedingung bezeichnet werden (*weak contrast extinction condition*, WEC).

Wie bereits angesprochen, kann nun nicht erwartet werden, daß diese Bedingungen in Quasikristallen von beliebigen Defekten erfüllt werden können, so daß eine komplette Kontrastauslöschung beobachtet werden kann. Daher wird im folgenden diskutiert, welche Kriterien ein Defektverzerrungsfeld besitzen muß, um diese Bedingungen im Experiment zu erfüllen.

## 6.4 Die schwache und starke Auslöschbedingung (SEC u. WEC)

### 6.4.1 Experimentelle Unterscheidung der Auslöschbedingungen

Beobachtet man in einem Experiment Kontrastauslöschung eines Defekts unter Verwendung eines Reflexes mit reziprokem Gittervektor  $\vec{g}_{||}^1$ , so ist Gleichung 6.11 erfüllt:

$$\vec{G}^1\vec{U} = \vec{g}_{||}^1\vec{u}_{||} + \vec{g}_{\perp}^1\vec{u}_{\perp} = 0 \quad (6.14)$$

Nun ist es *a priori* nicht möglich, zu entscheiden, ob hier dann die schwache oder die starke Auslöschbedingung beobachtet wurde. Man muß zunächst ein weiteres Beugungskontrastexperiment mit einem Reflex  $\vec{g}_{||}^2$  durchführen, der in der gleichen Reflexreihe<sup>†</sup> liegt wie der erste (Abbildung 6.2). Beobachtet man auch in diesem Fall Kontrastauslöschung, so ist Gleichung 6.11 wiederum erfüllt:

$$\vec{G}^2\vec{U} = \vec{g}_{||}^2\vec{u}_{||} + \vec{g}_{\perp}^2\vec{u}_{\perp} = 0 \quad (6.15)$$

In dem in Abbildung 6.2 gezeigten Beispiel ist  $\vec{g}_{||}^2 = \tau\vec{g}_{||}^1$  und dementsprechend  $\vec{g}_{\perp}^2 = -1/\tau\vec{g}_{\perp}^1$  (s. Anhang A.1). Dies, in Gleichung 6.15 eingesetzt, ergibt:

$$\tau\vec{g}_{||}^1\vec{u}_{||} - \frac{1}{\tau}\vec{g}_{\perp}^1\vec{u}_{\perp} = 0. \quad (6.16)$$

Damit können die Gleichungen 6.14 und 6.16 nur dann beide erfüllt werden, falls alle Skalarprodukte  $\vec{g}_{||}^i\vec{u}_{||}$  bzw.  $\vec{g}_{\perp}^i\vec{u}_{\perp}$  Null sind:

$$\vec{g}_{||}^1\vec{u}_{||} = \vec{g}_{\perp}^1\vec{u}_{\perp} = \vec{g}_{||}^2\vec{u}_{||} = \vec{g}_{\perp}^2\vec{u}_{\perp} = 0. \quad (6.17)$$

Dies kennzeichnet gerade die starke Auslöschbedingung: beobachtet man Kontrastauslöschung für einen Reflex innerhalb einer systematischen Reihe, so ist der Defekt auch für *alle* anderen Reflexe dieser Reihe außer Kontrast.

<sup>†</sup>Eine solche Reflexreihe, die durch den Ursprung des reziproken Gitters läuft, wird auch als systematische Reihe bezeichnet.

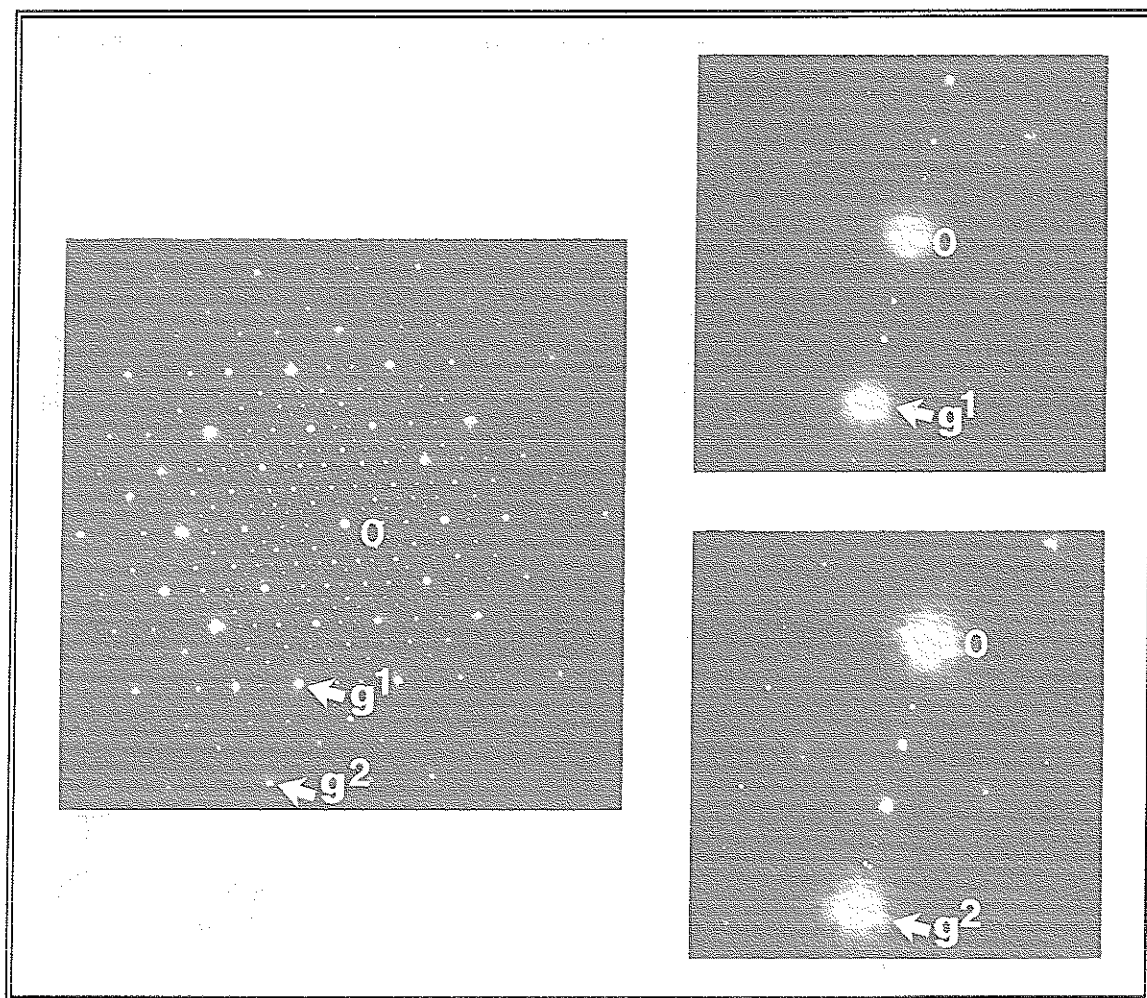


Abbildung 6.2: Auswahl der Reflexe  $\vec{g}_{\parallel}$  und  $\vec{g}_{\parallel}^2 = \tau \vec{g}_{\parallel}^1$  bei einem Beugungskontrastexperiment zur Analyse von Defekten in Quasikristallen. (a) Fünzfähiges Beugungsbild, (b) Zweistrahlfall mit  $\vec{g}_{\parallel}^1$  und (c) mit  $\vec{g}_{\parallel}^2$ .

Gleichung 6.14 läßt sich aber auch erfüllen, wenn die Skalarprodukte von Null verschieden sind ( $\vec{g}_{\parallel}^1 \vec{u}_{\parallel} = -\vec{g}_{\perp}^1 \vec{u}_{\perp} \neq 0$ ). Das ist die schwache Auslöschbedingung. In diesem Fall kann Gleichung 6.15 nicht mehr erfüllt werden, da dann mit  $\vec{g}_{\parallel}^2 = \tau \vec{g}_{\parallel}^1$  und  $\vec{g}_{\perp}^2 = \frac{-1}{\tau} \vec{g}_{\perp}^1$

$$\tau \vec{g}_{\parallel}^1 \vec{u}_{\parallel} - \frac{1}{\tau} \vec{g}_{\perp}^1 \vec{u}_{\perp} \neq 0 ! \quad (6.18)$$

Hier erwartet man, daß der Defekt wieder sichtbar ist. Damit ergibt sich ein neuartiges, aus der Struktur der Quasikristalle resultierendes, Kontrastphänomen, da der Defekt für einen Reflex innerhalb einer systematischen Reihe unsichtbar, aber für alle anderen sichtbar wird (für Einzelheiten siehe Abschnitt 6.4.4). Diese Eigenschaft ermöglicht dann auch die Unterscheidung zwischen starker und schwacher Auslöschbedingung.

## 6.4.2 Interpretation der Auslöschbedingungen

Um zu sehen, für welche Fälle die schwache Auslöschbedingung erfüllt werden kann, ist es günstig, Gleichung 6.11 in anderer Form aufzuschreiben:

$$\begin{aligned} \vec{g}_{||}\vec{u}_{||} &= -\vec{g}_{\perp}\vec{u}_{\perp} \\ \Leftrightarrow \vec{u}_{\perp}' &= c\vec{u}_{||}' \text{ mit } c = -\frac{|\vec{g}_{||}|}{|\vec{g}_{\perp}|}, \end{aligned} \quad (6.19)$$

Hier bezeichnen  $\vec{u}_{||}'$  und  $\vec{u}_{\perp}'$  die Komponenten von  $\vec{u}_{||}$  und  $\vec{u}_{\perp}$  parallel zu den benutzten reziproken Gittervektoren  $\vec{g}_{||}$  und  $\vec{g}_{\perp}$ . Beobachtet man die schwache Auslöschbedingung, so ist das Amplitudenverhältnis der Verzerrungsfelder in  $E_{||}$  und  $E_{\perp}$  gleich dem inversen Längenverhältnis der benutzten reziproken Gittervektoren. Damit lassen sich quantitative Aussagen über die Verzerrungsfelder gewinnen. Physikalisch kann die schwache Auslöschbedingung nur durch die besondere Struktur der Quasikristalle bzw. ihrer Defekte erklärt werden. Die Phasenverschiebungen der Elektronenwellen aufgrund des Defekts können in zwei Anteile aufgespalten werden. Der erste,  $2\pi i\vec{g}_{||}\vec{u}_{||}$ , rührt von den Phononenverzerrungen her, der zweite,  $2\pi i\vec{g}_{\perp}\vec{u}_{\perp}$ , wird durch die Phasonenverzerrungen verursacht. Bei der schwachen Auslöschbedingung sind diese Verzerrungen gerade so groß, daß sich die zugehörigen Phasenverschiebungen kompensieren.

Die Beobachtung der starken Auslöschbedingung erlaubt es, weitergehende Aussagen über die Verzerrungsfelder zu machen. Hier gilt

$$\vec{g}_{||}\vec{u}_{||} = 0 \text{ und } \vec{g}_{\perp}\vec{u}_{\perp} = 0 \quad (6.20)$$

Dies bedeutet, daß Verzerrungsfelder und reziproke Gittervektoren senkrecht zueinander stehen müssen, um diese Bedingung zu erfüllen. Dadurch wird die Wirkung der Verzerrungsfelder auf Ebenen eingeschränkt. Die zugehörigen Ebenennormalen sind parallel zu den reziproken Gittervektoren, entlang derer die Verzerrungsfelder verschwinden. Da dies die Verzerrungsfelder deutlicher als im Fall der schwachen Bedingung einschränkt, wurde der Name *starke* Auslöschbedingung gewählt.

## 6.4.3 Defektanalyse

Im folgenden wird nun an einem Experiment<sup>§</sup> erläutert, wie eine Defektanalyse durchgeführt werden kann, und welche Auslöschungen beobachtet werden können, falls man die Verzerrungsfelder immer weiter einschränkt, so daß sie am Ende durch einen einzigen sechsdimensionalen Richtungsvektor charakterisiert werden können. In diesem Fall wäre der Defekt eine vollständige Versetzung (s. Kapitel 5). Im ersten Teil des Experiments wird die starke Auslöschbedingung beobachtet. Wie oben bereits erläutert, sind dann die Verzerrungsfelder  $\vec{u}_{||}$  und  $\vec{u}_{\perp}$  auf Ebenen  $P_{||}^1$  und  $P_{\perp}^1$  in den jeweiligen Unterräumen  $E_{||}$  und  $E_{\perp}$  beschränkt. Findet man nun zwei verschiedene systematische Reihen  $i$  und  $j$ , für die die starke Bedingung erfüllt ist, so müssen die Komponenten des Verzerrungsfelds  $\vec{u}_{||}$  in beiden Ebenen  $P_{||}^i$  und  $P_{||}^j$ , d.h., parallel zu deren *Schnittlinie*, liegen. Die analoge Aussage

<sup>§</sup>Im experimentellen Teil wird gezeigt, daß dieses Experiment an realen Quasikristallen tatsächlich durchgeführt werden kann.

folgt für die Komponente  $\vec{u}_\perp$ . Sie ist parallel zur Schnittlinie von  $P_\perp^i$  mit  $P_\perp^j$ . Damit kann der hier analysierte Defekt als eine Versetzung identifiziert werden, da die Verzerrungsfelder in den beiden Unterräumen durch jeweils einen Richtungsvektor beschrieben werden (s. Kapitel 5). Die Stärke der Verzerrung wird durch ortsabhängige, skalare Funktionen  $\phi$  festgelegt:

$$\vec{u}_\parallel(\vec{x}_\parallel) = \vec{b}_\parallel \phi_\parallel(\vec{x}_\parallel) \quad (\text{Gl. 5.6}), \text{ und} \quad (6.21)$$

$$\vec{u}_\perp(\vec{x}_\parallel) = \vec{b}_\perp \phi_\perp(\vec{x}_\parallel) \quad (\text{Gl. 5.7}). \quad (6.22)$$

$\vec{b}_\parallel$  und  $\vec{b}_\perp$  sind die Burgersvektoren in den entsprechenden Unterräumen. Nach der Definition einer Versetzung in Quasikristallen wird an die skalaren Funktionen die Bedingung

$$\oint_C d\phi_\parallel = 1 \quad (\text{Gl. 5.6}) \quad (6.23)$$

und

$$\oint_C d\phi_\perp = 1 \quad (\text{Gl. 5.7}) \quad (6.24)$$

gestellt. Setzt man die Gleichungen 6.21 und 6.22 in Gleichung 6.12 ein, erhält man:

$$\vec{g}_\parallel \vec{b}_\parallel = 0 \quad \text{und} \quad \vec{g}_\perp \vec{b}_\perp = 0. \quad (6.25)$$

Diese beiden Gleichungen sind äquivalent, da ein verschwindendes Skalarprodukt zweier Vektoren in  $E_\parallel$  die gleiche Aussage für ihre Komponenten in  $E_\perp$  induziert (und umgekehrt, s. Anhang A.1). Damit ist die starke Auslöschbedingung das direkte Analogon zur Auslöschbedingung für Versetzungen in normalen Kristallen,  $\vec{g}\vec{b} = 0$ . Sie erlaubt es, die Richtungen der Burgersvektoren in den beiden Unterräumen eindeutig zu bestimmen. Allerdings ist es mit Hilfe der starken Auslöschbedingung nicht möglich, die Länge dieser Burgersvektoren zu ermitteln. Zwei der sechs Komponenten des sechsdimensionalen Burgersvektors bleiben unbestimmt.

Anders gesagt, legen die beiden Richtungsvektoren parallel zu den systematischen Reihen  $\vec{g}_\parallel^i$  und  $\vec{g}_\parallel^j$  sowie die zugehörigen Vektoren  $\vec{g}_\perp^i$  und  $\vec{g}_\perp^j$  einen vierdimensionalen Unterraum  $\Lambda^4$  in  $\Gamma$  fest<sup>¶</sup>. Gemäß Gleichung 6.25 ist dann die Lage aller möglichen Burgersvektoren auf einen zweidimensionalen Unterraum  $P^2$  senkrecht zu  $\Lambda^4$  beschränkt.

Der Versuch wird fortgeführt, und in einem weiteren Beugungskontrastexperiment werde nun zusätzlich die schwache Auslöschbedingung beobachtet. Der benutzte reziproke Gittervektor sei  $\vec{g}_\parallel^w$  ( $\vec{g}_\perp^w$  liegt damit ebenfalls fest). Da es sich um die schwache Auslöschbedingung handelt, ist  $\vec{g}_\parallel^w$  ( $\vec{g}_\perp^w$ ) nicht parallel zu den Vektoren  $\vec{g}_\parallel^i$  ( $\vec{g}_\perp^i$ ), mit denen die starke Auslöschbedingung beobachtet wurde und damit nicht orthogonal zu dem bereits ermittelten Burgersvektor  $\vec{b}_\parallel$  ( $\vec{b}_\perp$ ). Setzt man Gleichungen 6.21 und 6.22 in Gleichung 6.11 ein, so ergibt sich:

$$\vec{g}_\parallel^w \vec{b}_\parallel \phi_\parallel(\vec{x}_\parallel) + \vec{g}_\perp^w \vec{b}_\perp \phi_\perp(\vec{x}_\parallel) = 0. \quad (6.26)$$

Hier sind die Skalarprodukte von Null verschieden, so daß diese Gleichung nur erfüllt werden kann, falls für alle  $\vec{x}_\parallel$  gilt, daß  $\phi_\parallel(\vec{x}_\parallel) = \phi_\perp(\vec{x}_\parallel)$ . Damit ergibt sich aus der Beobachtung der schwachen Auslöschbedingung, daß die Verzerrungsfelder in den beiden

<sup>¶</sup>Man beachte: auch wenn zwei Vektoren in einem Unterraum parallel liegen, bedeutet dies nicht notwendigerweise, daß die zugehörigen sechsdimensionalen Hypergittervektoren ebenfalls kollinear sind

Unterräumen die gleiche funktionale Abhängigkeit besitzen. Das erlaubt es, die Verzerrungsfelder aus den beiden Unterräumen zu einem sechsdimensionalen Verschiebungsfeld zusammenzufassen:

$$\vec{U} = \vec{B} \Phi(\vec{x}_{||}), \quad (6.27)$$

mit  $\Phi$  als skalarer Verschiebungsfunktion. Als Folge davon vereinfacht sich Gleichung 6.26 zu:

$$\vec{g}_{||}^w \vec{b}_{||} + \vec{g}_{\perp}^w \vec{b}_{\perp} = 0 \quad (6.28)$$

oder in der sechsdimensionalen Notation

$$\vec{G}^w \vec{B} = 0. \quad (6.29)$$

Diese Gleichung beschreibt nun eine fünfdimensionale Hyperfläche  $P^5$  senkrecht zum Vektor  $\vec{G}^k$ , innerhalb derer der Burgersvektor  $\vec{B}$  liegen muß. Andererseits legen die Experimente mit der starken Auslöschbedingung  $\vec{B}$  innerhalb der Hyperebene  $P^2$  fest. Der hierzu senkrechte Unterraum  $\Lambda^4$  liegt ganz in  $P^5$ , da jeder reziproke Gittervektor der starken Auslöschbedingung auch die Gleichung der schwachen Auslöschbedingung erfüllt. Daraus folgt, daß  $P^2$  nicht komplett in  $P^5$  enthalten sein kann. Da das Hypergitter die Dimension sechs hat, müssen sich  $P^2$  und  $P^5$  in einer Geraden schneiden, entlang derer der sechsdimensionale Burgersvektor liegt.

Mit anderen Worten erhält man durch 6.29 eine weitere Gleichung, mit der eine der zwei Unbekannten der Burgersvektorrichtung bestimmt werden kann. Die letzte Unbekannte ist die Länge des sechsdimensionalen Burgersvektors. Sie zu bestimmen, ist nicht möglich, da die starke als auch die schwache Auslöschbedingung eine Orthogonalitätsbeziehung darstellen und somit unabhängig von der Länge der eingehenden Vektoren sind.

#### 6.4.4 Die Lage der Reflexe für die SEC und die WEC

Nun kann umgekehrt die Frage gestellt werden:

Wenn man den Burgersvektor einer Versetzung kennt, wo liegen dann die Reflexe, mit denen der Versetzungskontrast ausgelöscht wird?

Für die starke Auslöschbedingung läßt sich die Frage leicht beantworten. Es sind dies alle reziproken Gittervektoren  $\vec{g}_{||}^s$  ( $\vec{g}_{||}^s$ ) senkrecht zu  $\vec{b}_{||}$  ( $\vec{b}_{\perp}$ ). Liegt der Burgersvektor beispielsweise parallel zur zweizähligen  $[0/0,0/0,0/2]$ -Richtung, so erwartet man Kontrastausschöpfung für jeden Reflex, der zu dem zweizähligen Beugungsbild dieser Symmetrierichtung gehört. In allen anderen Beugungsbildern ist es dann genau eine systematische Reihe, mit deren Reflexen Kontrastausschöpfung auftritt. Die Lage der Reflexe für die schwache Auslöschbedingung läßt sich durch folgende Überlegung bestimmen:

Wie oben bereits beschrieben, legt Gleichung 6.29 ein fünfdimensionales Untergitter  $\Lambda^5$  im sechsdimensionalen Hypergitter fest, in dem alle Vektoren liegen, die die schwache, aber auch die starke Auslöschbedingung erfüllen. Alle reziproken Vektoren der starken Bedingung liegen in einem vierdimensionalen Untergitter  $\Lambda^4$  innerhalb von  $\Lambda^5$ . Damit kann jeder Vektor der schwachen Bedingung als Summe zweier Vektoren aufgeschrieben werden, wobei der erste Vektor,  $\vec{G}^s$ , aus  $\Lambda^4$  stammt.

$$\vec{G}^w = \vec{G}^s + \vec{D} \quad (6.30)$$

$\vec{D}$  ist nicht notwendigerweise senkrecht zu allen Vektoren  $\vec{G}^s$ , weist aber aus  $\Lambda^4$  hinaus. Nun ist  $\vec{D}$  aber ein Vektor des sechsdimensionalen reziproken Gitters. Dieses Gitter ist periodisch, so daß jeder Vektor  $\vec{D}$  als ein ganzzahliges Vielfaches eines kürzesten Vektors  $\vec{D}^0$  geschrieben werden kann und somit  $\vec{G}^w = \vec{G}^s + n\vec{D}^0$ , bzw. in den dreidimensionalen Unterräumen

$$\begin{aligned}\vec{g}_{||}^w &= \vec{g}_{||}^s + n\vec{d}_{||}^0 \\ \vec{g}_{\perp}^w &= \vec{g}_{\perp}^s + n\vec{d}_{\perp}^0,\end{aligned}\tag{6.31}$$

wobei  $\vec{d}_{||}^0$  und  $\vec{d}_{\perp}^0$  die Komponenten von  $\vec{D}^0$  in den beiden Unterräumen bezeichnen. Die Reflexe der schwachen Auslöschbedingung liegen somit in parallel und periodisch zueinander angeordneten Ebenen innerhalb der reziproken Gitter in  $E_{||}$  und  $E_{\perp}$ . Diese Anordnung wird in Abbildung 6.3 verdeutlicht. In einer perspektivischen Sicht ist hier ein Teil des reziproken Gitters in  $E_{||}$  eines ikosaedrischen Quasikristalls dargestellt. Die Kugeln symbolisieren die Beugungsreflexe. Ihr Durchmesser entspricht der zugehörigen Reflexintensität in einem elektronenmikroskopischen Beugungsbild, das unter symmetrischen Lauebedingungen aufgenommen wurde. In diesem Beispiel liegen die Reflexe der starken Auslöschbedingung innerhalb einer zweizähligen Ebene, die mit  $DP^2$  bezeichnet ist. Eine fünfzählige Ebene  $DP^5$  schneidet diese entlang der Linie  $L_0$  durch den Ursprung des reziproken Gitters.

Die Reflexe der schwachen Bedingung liegen in Ebenen parallel zu  $DP^2$ , um das Vielfache von  $\vec{d}_{||}^0$  verschoben. Diese Ebenen schneiden  $DP^5$  entlang der Linien  $L_{\pm n}$ . D. h., in einem Beugungsbild findet man die Reflexe der schwachen Auslöschbedingung ebenfalls in Reflexreihen, nur daß diese *parallel* zur systematischen Reihe  $L_0$  der SEC-Reflexe verlaufen. Für ein gegebenes Beugungsbild wird der Abstand zwischen den Reihen durch  $\vec{d}_{||}^0$  und damit durch  $\vec{B}$  bestimmt.

Um diesen Effekt zu illustrieren, wurden die Positionen der SEC- und WEC-Reflexe unter Annahme eines Burgersvektors mit  $\vec{B} = (0, 2, \bar{1}, 0, \bar{2}, \bar{1})$  für verschiedene Beugungsbilder berechnet. Das Ergebnis ist in Abbildung 6.4 dargestellt und zeigt einen Quadranten der stereographischen Projektion der ikosaedrischen Symmetrieachsen mit den entsprechenden Beugungsbildern. Da der gewählte Burgersvektor parallel zur zweizähligen  $z$ -Richtung ist ( $\vec{b}_{||} = (0/0, 0/0, 4/\bar{2})$ ), ist ein Quadrant ausreichend. Die Reflexe, für die die starke Auslöschbedingung erfüllt ist, sind mit weißen Kreisen markiert. Graue Kreise stehen für die Reflexe der schwachen Auslöschbedingung. Für die "schwarzen Reflexe" ist die Versetzung sichtbar. Die schematische Darstellung zeigt nur die hellsten Reflexe, also die Reflexe, die auch in einem Beugungscontrastexperiment für einen Zweistrahlfall benutzt werden können. Mehr Reflexe zeigt das eingesetzte zweizählige Beugungsbild, aufgenommen an einem AlPdMn-Quasikristall. Die Reflexe sind entsprechend dem in der schematischen Darstellung mit  $DP_2$  bezeichneten Beugungsbild markiert. Das breite Pfeilpaar zeigt die systematische Reihe der Reflexe, die die starke Bedingung erfüllen würden, die anderen Pfeile markieren die Reihen der Reflexe, die der schwachen Auslöschbedingung genügen würden.

Damit läßt sich jetzt auch das oben bereits angesprochen neuartige Kontrastverhalten von Defekten in Quasikristallen verstehen. Vorausgesetzt, daß es sich bei dem Defekt um

eine Versetzung handelt, die mit einem sechsdimensionalen Burgersvektor charakterisiert werden kann, ergibt sich, daß deren Kontrast nur für einen Satz periodisch angeordneter Reflexe innerhalb einer systematischen Reihe ausgelöscht wird, während sie mit allen anderen Reflexen dieser Reihe sichtbar bleibt. Wie in den vorangehenden Abschnitten gezeigt wurde, gibt es, abhängig von den Eigenschaften der Defektverzerrungsfelder in einem Quasikristall, verschiedene Fälle, bei denen der Defektkontrast bei der Untersuchung mittels Beugungskontrastmethoden im Transmissionselektronenmikroskop verschwindet. Die beiden hier abgeleiteten Auslöschbedingungen erlauben es, einen Teil dieser Eigenschaften zu bestimmen. Wie weit dies möglich ist, ist in Tabelle 6.1 noch einmal aufgelistet.

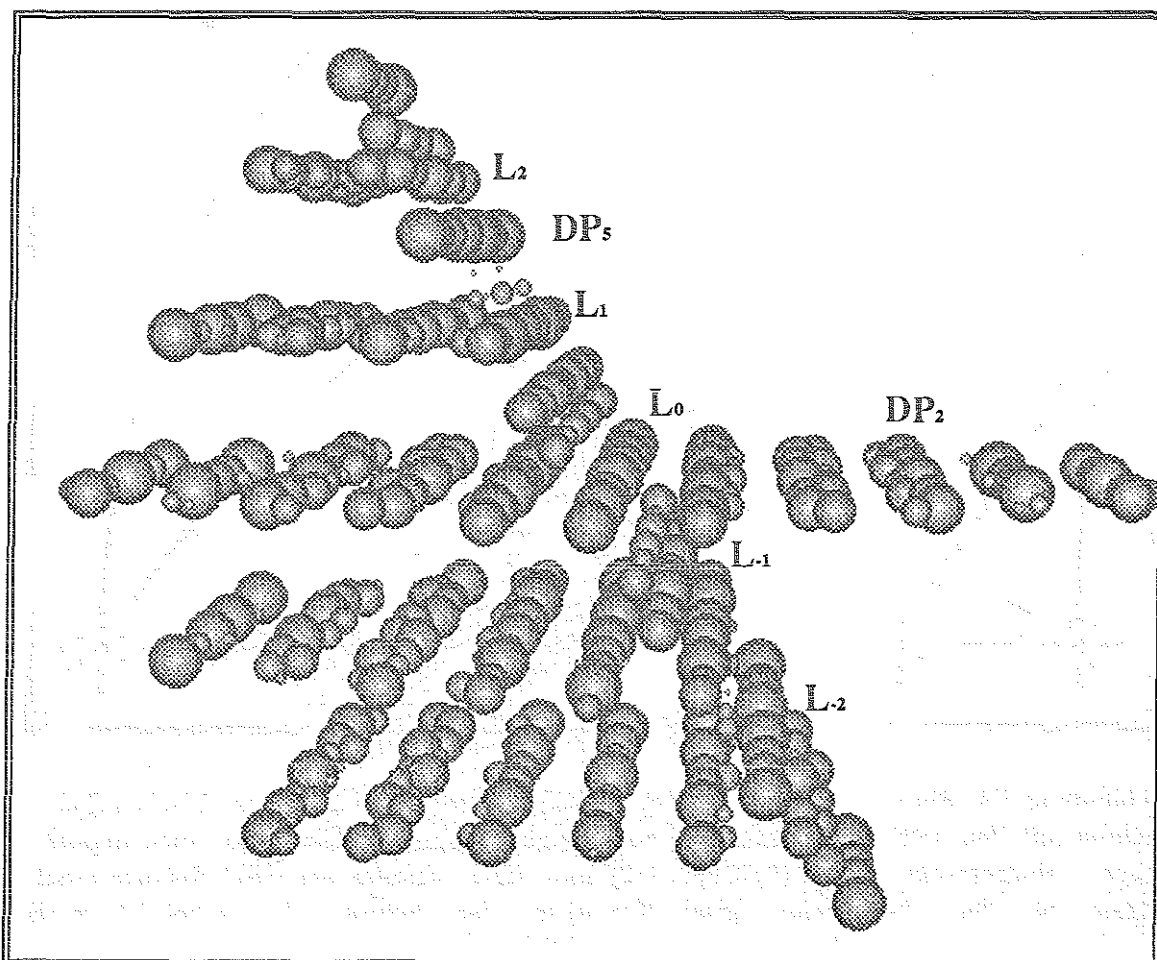


Abbildung 6.3: Perspektivische Darstellung des reziproken Gitters eines ikosaedrischen Quasikristalls. Gezeigt sind ein zwei- und ein fünfzähliges Beugungsbild.  $L_0$  bezeichnet eine systematische Reihe mit Reflexen der SEC. Die Reflexe der schwachen Bedingung liegen in den mit  $L_i$  ( $i = \pm 1, \pm 2, \dots$ ) bezeichneten Reihen.

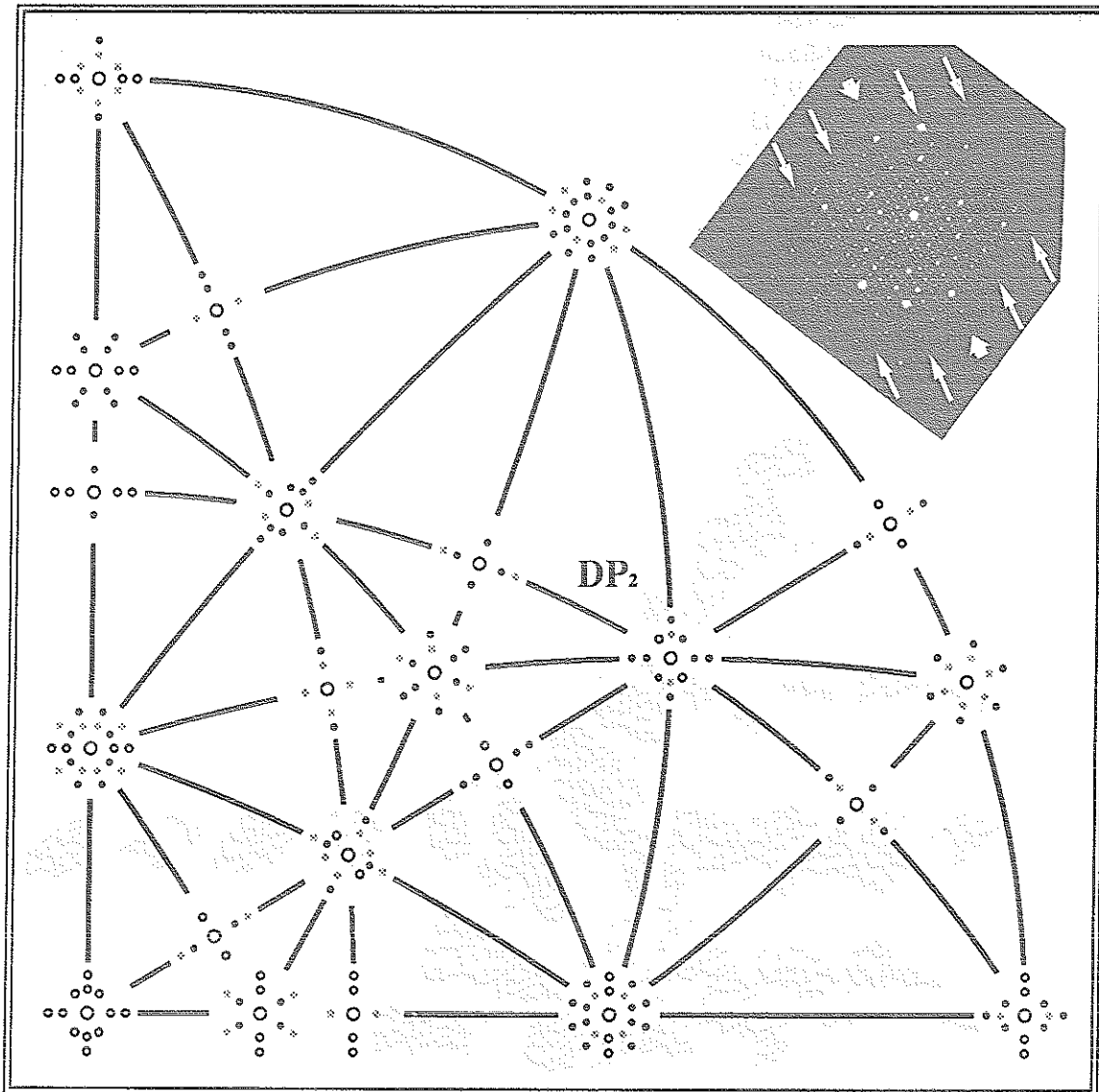


Abbildung 6.4: Ein Quadrant der stereographischen Projektion der ikosaedrischen Zonenachsen mit den hellsten Reflexen der zugehörigen Beugungsbilder. Für einen hypothetischen Burgersvektor  $\vec{b}_{\parallel} = (0/0, 0/0, 4/2)$  sind die Positionen der SEC-Reflexe (weiße Kreise) und der WEC-Reflexe (graue Kreise) markiert. Schwarze Kreise bezeichnen die Reflexe, für welche die Versetzung sichtbar bleibt. Für das mit  $DP_2$  bezeichnete Beugungsbild sind die Reflexreihen der WEC und SEC nochmals in einem experimentell gewonnenen Beugungsbild markiert.

| Defektyp                                                                      | Verschiebungsfelder                                                                                                                                | Auslöschbedingung                                                                          |
|-------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------|
| beliebig                                                                      | $\vec{u}_{  }(\vec{x}_{  })$<br>$\vec{u}_{\perp}(\vec{x}_{  })$                                                                                    | keine                                                                                      |
| Versetzung im allgemeinen                                                     | $\oint d\vec{u}_{  }(\vec{x}_{  }) = \vec{b}_{  }$<br>$\oint d\vec{u}_{\perp}(\vec{x}_{  }) = \vec{b}_{\perp}$                                     | keine<br>oder eventuell<br>$\vec{g}_{  }\vec{u}_{  } = -\vec{g}_{\perp}\vec{u}_{\perp}$    |
| Verschiebungsfelder<br>sind parallel zu den<br>Komponenten des Burgersvektors | $\vec{u}_{  }(\vec{x}_{  }) = \vec{b}_{  }\phi_{  }(\vec{x}_{  }),$<br>$\vec{u}_{\perp}(\vec{x}_{  }) = \vec{b}_{\perp}\phi_{\perp}(\vec{x}_{  })$ | $\vec{g}_{  }\vec{b}_{  } = 0$<br>( $\Leftrightarrow \vec{g}_{\perp}\vec{b}_{\perp} = 0$ ) |
| 6D-Burgersvektor                                                              | $\vec{u}_{  }(xp) = \vec{b}_{  }\Phi(\vec{x}_{  }),$<br>$\vec{u}_{\perp}(\vec{x}_{  }) = \vec{b}_{\perp}\Phi(\vec{x}_{  })$                        | $\vec{G}\vec{B} = 0$                                                                       |

Tabelle 6.1: Die Auslöschbedingungen für Gitterdefekte in ikosaedrischen Quasikristallen in Abhängigkeit von den Eigenschaften der Verschiebungsfelder.



## UNTERSUCHTE LEGIERUNGEN UND PROBENHERSTELLUNG

In diesem Kapitel werden die Legierungen vorgestellt, die in dieser Arbeit untersucht wurden. Weiter wird erläutert, auf welche Weise die quasikristallinen Proben hergestellt und wie die Präparation für die Untersuchung im Transmissionselektronenmikroskop erfolgte. Die in dieser Arbeit benutzten Mikroskope werden im Anhang A.5 in Aufbau und Funktion kurz beschrieben. Weitere, spezielle, nur einmal benutzte Techniken sind bei der Vorstellung der einzelnen Versuche aufgeführt.

### 7.1 Die Legierungssysteme AlCuFe und AlPdMn

Die ikosaedrische Modifikation von AlCuFe stellt derzeit neben AlPdMn die wichtigste Legierung bei den Quasikristallen dar. Erstmals beschrieben von Tsai et al. [160], war sie das erste bekannte System mit einem F-Hypergitter [51] (s. Kapitel 3).

Desweiteren wurden bei diesem Material erstmals verlässlich Versetzungen in einem ikosaedrischen Quasikristall beobachtet [52, 44, 195]. Durch geeignete Wärmebehandlungen ist es möglich, Einkristalle von einigen Millimetern Größe zu erhalten. Diese wurden zur Strukturanalyse mittels Neutronenstreuung benutzt [35].

Nach dem in Abbildung 7.1 abgebildeten Phasendiagramm existiert die perfekte ikosaedrische Phase für eine Zusammensetzung gemäß  $\text{Al}_{62}\text{Cu}_{25.5}\text{Fe}_{12.5}$ . Perfekte ikosaedrische Phase meint hier nicht, daß in diesem Material keine Versetzungen vorkommen, sondern der Name wurde zur Differenzierung verschiedener Phasen gewählt, die sich nur wenig von der perfekten unterscheiden. Dies sind zum einen Approximantenphasen, zum anderen kennt man hier auch Phasen, deren Reflexe Lorentzprofile statt, wie in der perfekten Phase Gaussprofile aufweisen. Die Unterscheidungsmerkmale können meist nur durch eine genaue Untersuchung der Beugungsbilder gefunden werden. Für eine ausführliche Übersicht siehe [67]. Für die in dieser Arbeit untersuchten Quasikristalle wurde die Zusammensetzung der perfekten Phase,  $\text{Al}_{62}\text{Cu}_{25.5}\text{Fe}_{12.5}$ , gewählt.

Das andere Legierungssystem, das zunehmend an Interesse gewinnt, ist AlPdMn. Die ikosaedrische Modifikation wurde ebenfalls von Tsai et al. entdeckt und ist thermodynamisch stabil für Zusammensetzungen um  $\text{Al}_{70.5}\text{Pd}_{21}\text{Mn}_{8.5}$  bis hin zur Raumtemperatur [160, 163, 46, 16]. Wie bei AlCuFe gibt es auch bei AlPdMn im Bereich um die ideale Zusammensetzung andere strukturell verwandte Phasen. Zum einen gibt es Modifikationen, bei denen die Überstruktur des Hypergitters nicht vorliegt. Sie tritt auf, falls der Pd-Gehalt zu Gunsten des Al-Anteils verringert wird. Erhöht man den Pd-Gehalt, so bildet sich die Überstruktur mit ihren charakteristischen Reflexen im Beugungsbild aus

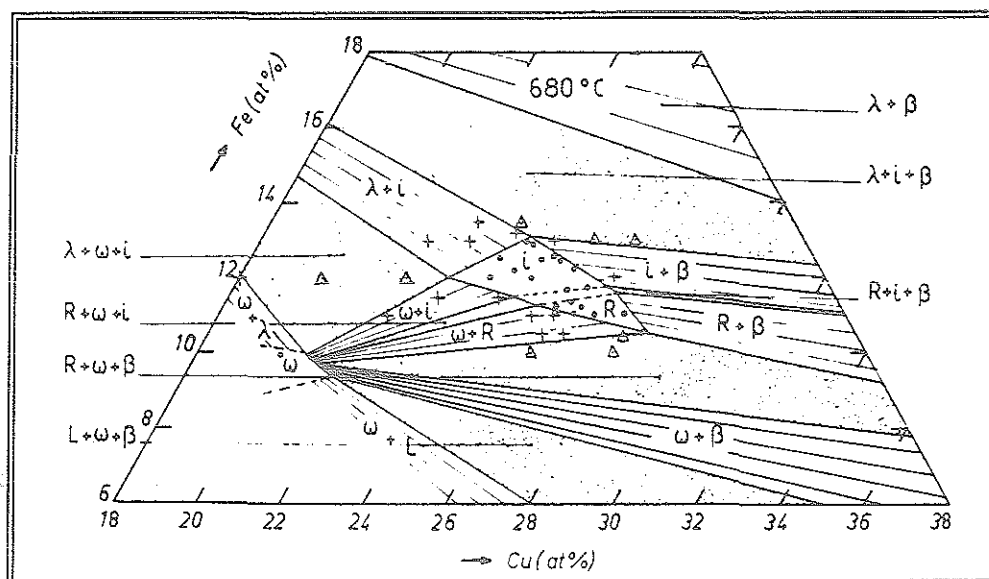


Abbildung 7.1: Phasendiagramm von AlCuFe bei  $T = 680^\circ\text{C}$ . Die perfekte ikosaedrische Phase ist mit  $i$  bezeichnet. Die anderen Buchstaben bezeichnen verwandte ikosaedrische oder kristalline Phasen (nach [67]).

[94, 162, 161].

Darüberhinaus bildet dieses Legierungssystem auch die dekanonale Phase in zwei Modifikationen. Für einen Al-Anteil von 70 at% findet man für einen Pd-Gehalt von mehr als 25 at% die dekanonale Phase mit 1.6 nm Periodenlänge [164], für weniger als 10 at% stellt sich die dekanonale Phase mit einer Periodenlänge von 1.2 nm ein [11, 81, 80, 164] (diese Arbeit, Kapitel 8.2). Diese verschiedenen Modifikationen sind in dem in Abbildung 7.2 gezeigten Phasendiagramm noch einmal zusammengefaßt. AlPdMn ist damit das erste Legierungssystem, das vier verschiedene quasikristalline Phasen ausbildet. Bis heute ist AlPdMn ebenfalls das einzige Legierungssystem, bei dem sich ikosaedrische Einkristalle von mehreren Zentimetern Größe herstellen lassen [188, 187, 42]. Damit ist es auch hier möglich, die Struktur mit Hilfe von Neutronen- und Röntgenstreuung zu bestimmen [16, 17, 98]. Solche Einkristalle werden in dieser Arbeit zur Untersuchung der plastischen Eigenschaften eingesetzt.

## 7.2 Probenherstellung

### 7.2.1 Induktionsschmelzen

Zunächst werden die einzelnen Substanzen (Reinheit mind. 99.99%) entsprechend der angestrebten Stöchiometrie abgewogen, insgesamt etwa 15-20 g.

Der Fehler bei der Einwaage liegt bei einem hundertstel Atomprozent und kann gegenüber Inhomogenitäten in der erstarrten Schmelze vernachlässigt werden. In einem Hochfrequenzinduktionsofen werden die Materialien unter Argonschutzgas (1 atm.) bei

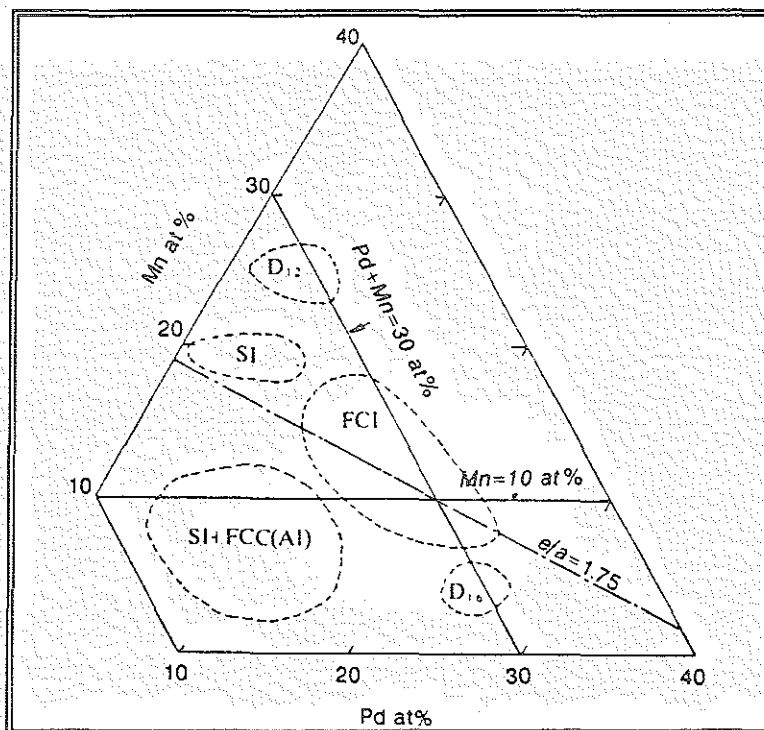


Abbildung 7.2: Das Phasendiagramm für das Legierungssystem AlPdMn im schnell abgeschreckten Zustand. SI: ikosaedrisch mit einfach kubischem Hypergitter; FCC: ikosaedrisch mit F-Hypergitter;  $D_{1.2}$  und  $D_{1.6}$  bezeichnen die dekadonalen Phasen mit ihren entsprechenden Periodenlängen.

einer Temperatur von ca.  $1100^{\circ}\text{C}$  in einem kalten Tiegel zusammengeschmolzen (Abbildung 7.3). Der Schmelzvorgang wird insgesamt dreimal wiederholt und die Probe jedesmal gedreht, um eine möglichst gute Homogenität zu erreichen. Nach Abschalten des Ofens erstarrt die Schmelze etwa innerhalb einer Minute.

### 7.2.2 Czochralskizüchtung von AlPdMn-Einquasikristallen

Der Aufbau einer Züchtungsapparatur nach Czochralski ist schematisch in Abbildung 7.4 dargestellt. Ein in einer rotierenden Hubspindel eingespannter Impfkristall wird zu Beginn der Züchtung in die Legierungsschmelze eingetaucht. Der Impfling ist mit einer bestimmten Zonenachse parallel zur Zugrichtung orientiert. Die Schmelze befindet sich in einem Aluminiumoxidtiegel. Dieser steht in einem Suszeptor, der über eine Hochfrequenzspule induktiv geheizt wird. Dieses indirekte Verfahren hat den Vorteil einer gleichmäßigeren Erwärmung der Schmelze. Wählt man Induktionsleistung und Ziehgeschwindigkeit in geeigneter Weise, so wächst der Quasikristall an der Phasengrenze fest/flüssig. Diese Phasengrenze liegt oberhalb der Schmelzenoberfläche, da sich ein Meniskus am Quasikristall ausbildet (Abbildung 7.5). Um eine gute Durchmischung der Schmelze zu erhalten und auch um Temperaturasymmetrien auszugleichen, werden Quasikristall und Tiegel gegensinnig gedreht. Die Temperatur der Schmelze und damit die zugeführte Heizleistung

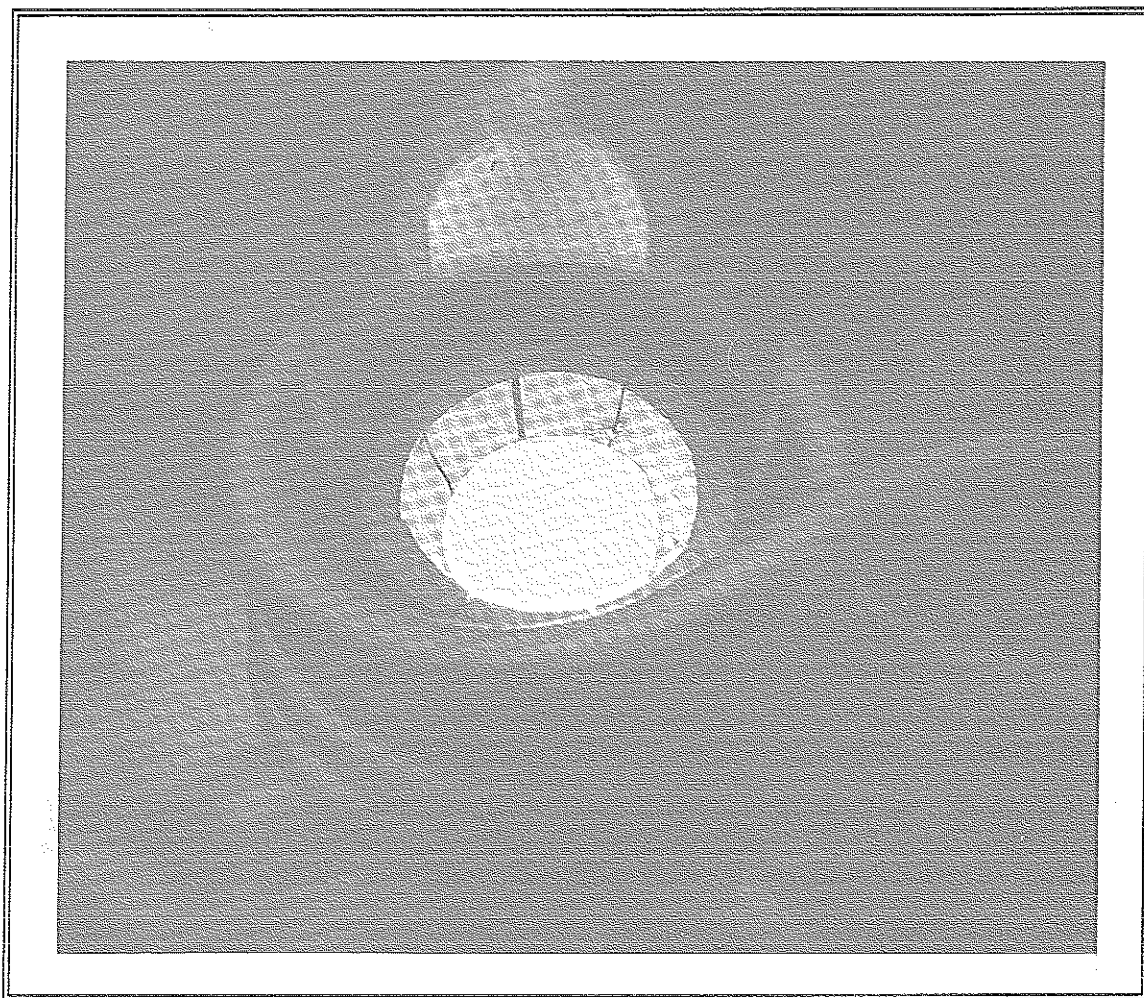


Abbildung 7.3: Hochfrequenzinduktionsofen zum Erschmelzen des Probenmaterials.

bestimmen den Durchmesser des wachsenden Quasikristalls. Zu Beginn der Züchtung wird ein schmaler Durchmesser angestrebt, um eine Keimauslese vorzunehmen. Dieser Dünnhals hat einen Durchmesser von ca. 1 mm. Danach läßt man den Durchmesser wieder auf ca. 8 – 10 mm anwachsen und zieht dann mit konstantem Radius einen bis zu 100 mm langen Quasikristall (Abbildung 7.6). Während der Züchtung muß die Temperatur der Schmelze sukzessiv erhöht werden, um die Strahlungsverluste durch den gezogenen Kristall auszugleichen.

Das Schmelzgut wird vor der Züchtung gemäß der angestrebten Stöchiometrie im Induktionsofen vorlegiert (s.o.). Je nach Durchmesser des verwendeten  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -Tiegels werden dazu 50 oder 75 g an Material eingewogen. Die Impfquasikristalle werden vornehmlich in zweizähliger Orientierung eingesetzt. Die Ziehgeschwindigkeit beträgt  $10 - 12 \text{ mm h}^{-1}$  bei einem Kammerdruck von  $10^{-6} - 10^{-7} \text{ mbar}$ . Kristall und Tiegel drehen sich jeweils mit 15 Umdreh./min gegeneinander.

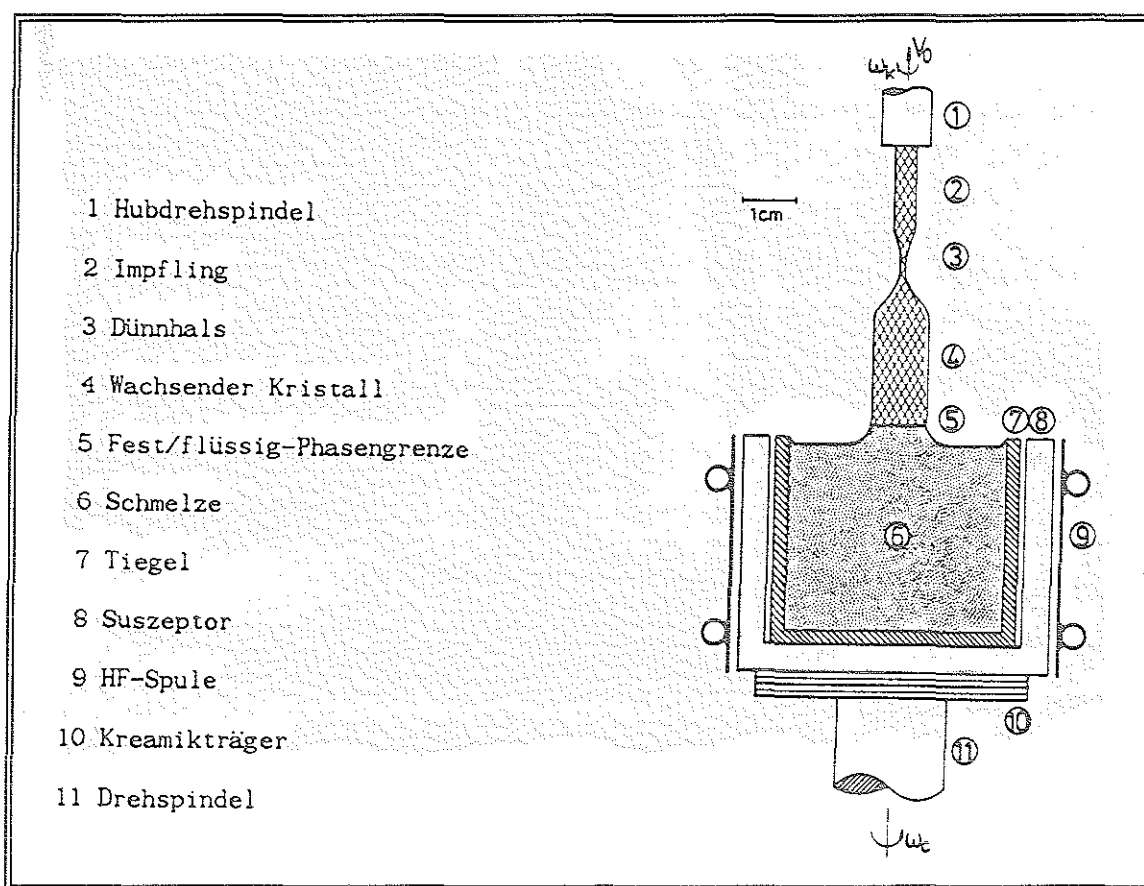


Abbildung 7.4: Schematische Darstellung einer Czochralskiapparatur. (aus [19])

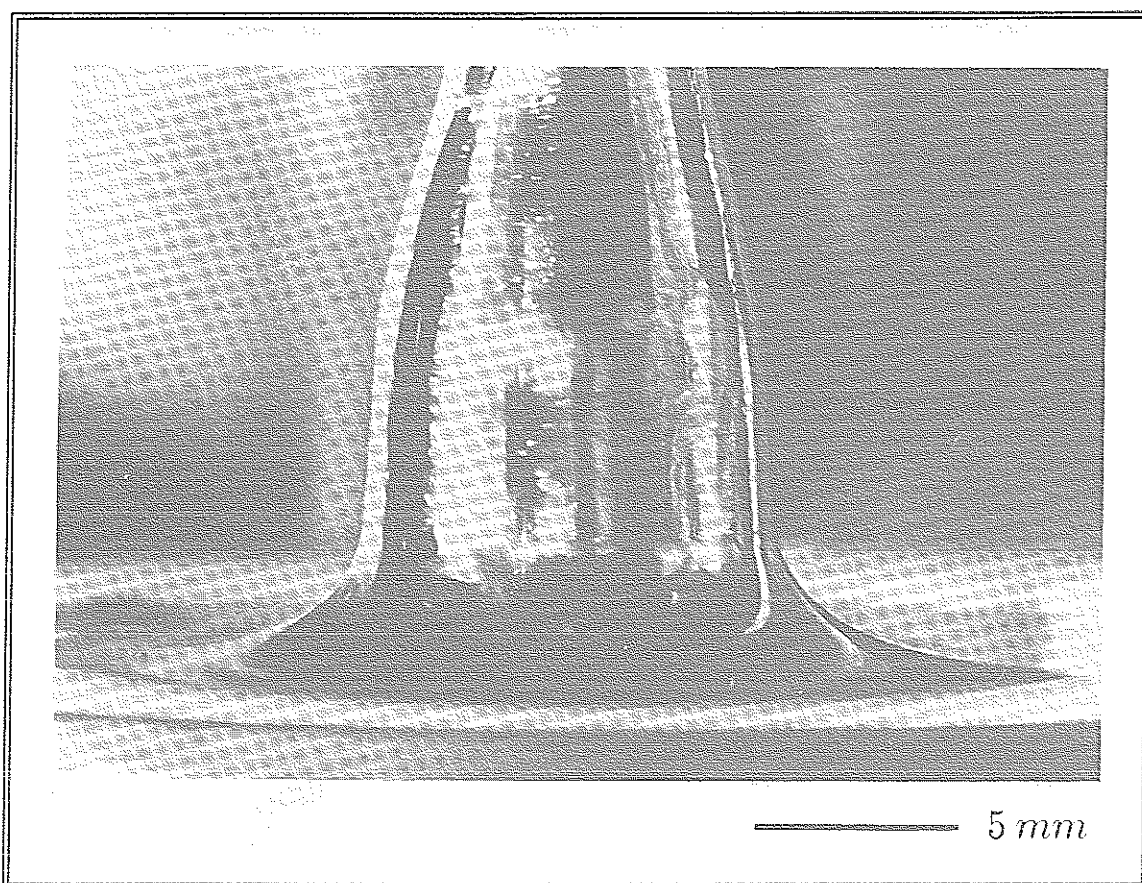


Abbildung 7.5: Züchtung eines AlPdMn-Einquasikristalls mit der Czochralskimethode. Der Schmelzenmeniskus ist deutlich zu erkennen.

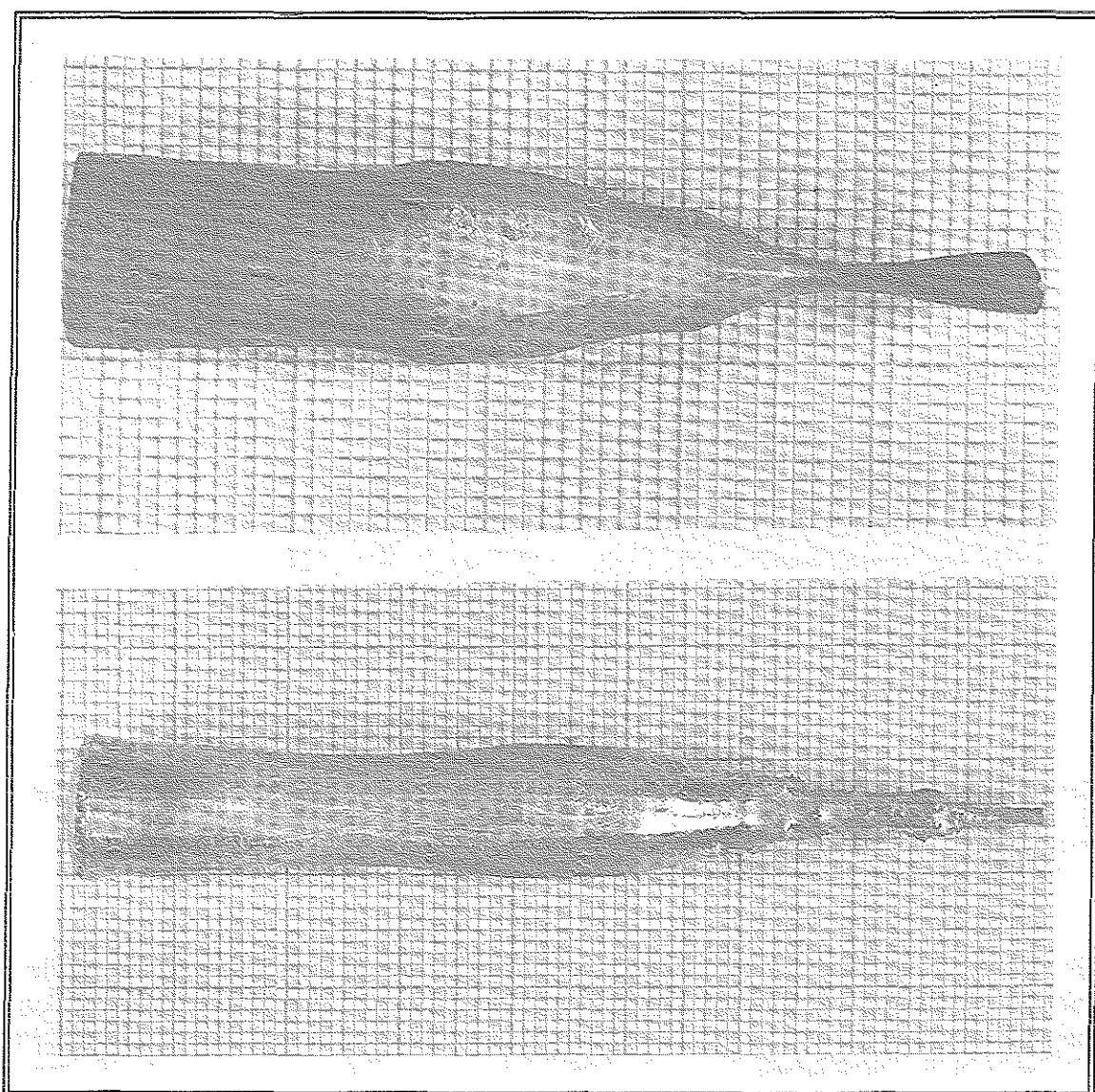


Abbildung 7.6: Mit der Czochralskimethode gezüchtete Einquasikristalle.

### 7.3 Probenpräparation für die Transmissionselektronenmikroskopie

Präparate für die Transmissionselektronenmikroskopie müssen sehr dünn sein, um eine gute Transparenz für Elektronen zu haben (typ. Dicken  $0.1\ \mu\text{m}$ ) [168]. Im nachfolgenden wird daher zunächst beschrieben, wie solche Proben aus dem Schmelzling, wie er im Induktionsofen hergestellt wird, gewonnen werden (Abb. 7.7). Der haselnußgroße Schmelz-

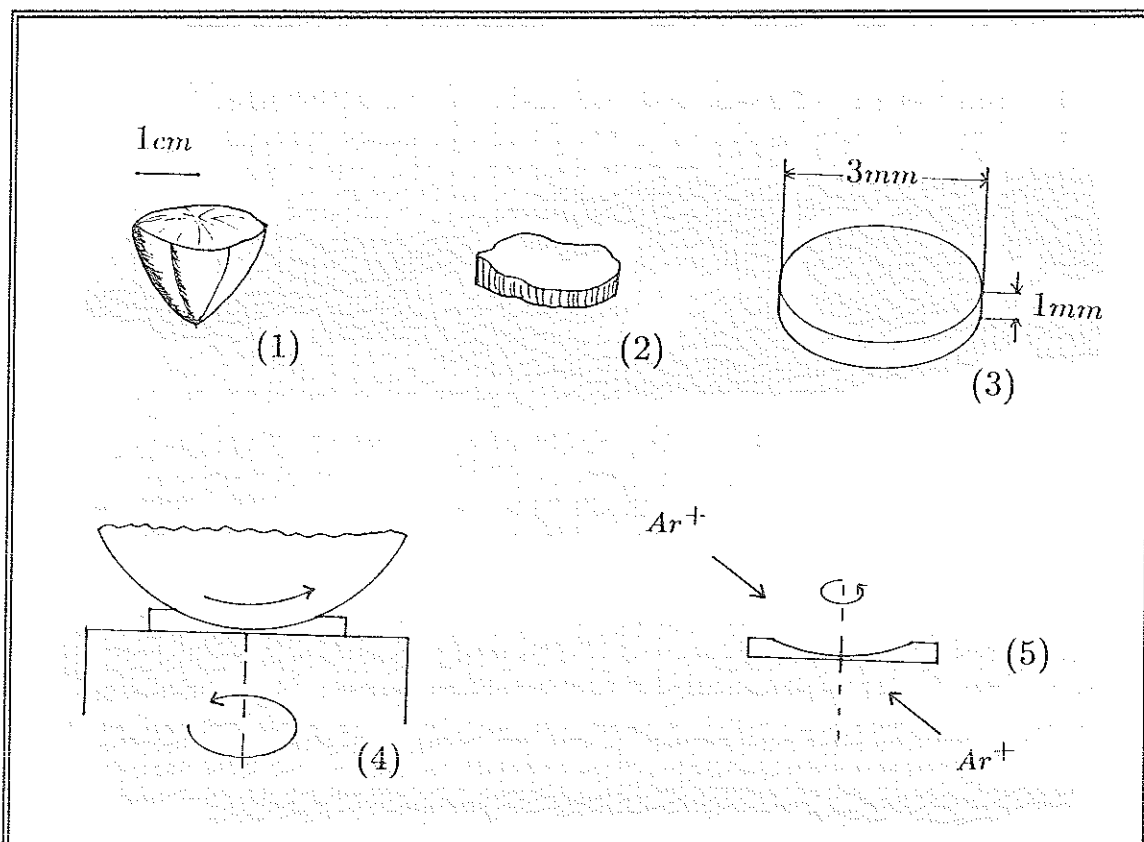


Abbildung 7.7: Die Schritte der Probenpräparation für die Elektronenmikroskopie

klumpen (1) wird zunächst in 3 mm starke Plättchen zersägt (2). Diese Stücke werden dann durch mechanisches Abschleifen auf eine Dicke von ca. 1 mm abgetragen (3). Aus diesen Folien werden mit einem Ultraschallschneider Scheibchen mit 3 mm Durchmesser ausgeschnitten. Diese lassen sich nach abgeschlossener Präparation direkt in den Probenhalter des Elektronenmikroskops einbauen.

Zur weiteren Bearbeitung wird die Probe mit einem speziellen Wachs auf einen kleinen Metallstempel geklebt. Dieser Stempel wird in einen GATAN-Schleifhalter eingesetzt und die Probe auf einer rotierenden Scheibe mit Schleifpapier verschiedener Körnungen auf

eine Dicke von ca.  $120\text{ }\mu\text{m}$  abgeschliffen. Abschließend wird die geschliffene Seite auf einer geeigneten Polierscheibe poliert.

Die Probe wird nun umgekehrt auf den Stempel geklebt und in die noch unbearbeitete Seite mit Hilfe eines Muldenschleifgerätes eine kalottenförmige Vertiefung eingeschliffen (4) ("Dimpeln"). An der tiefsten Stelle hat die Probe nun noch eine Dicke von etwa  $30\text{ }\mu\text{m}$ . Anschließend wird auch diese Seite mit einer Aluminiumoxidsuspension (Teilchengröße kleiner  $1\text{ }\mu\text{m}$ ) poliert. Durch die Politur reduziert sich die Rauigkeit beider Probenseiten auf etwa  $1\text{ }\mu\text{m}$ . Nun löst man die Probe vom Metallstempel ab und entfernt noch an ihr haftende Wachsreste mit Aceton.

Im letzten Präparationsschritt wird die Probe in einen speziellen Halter eingebaut. In einer GATAN-Ionenmühle werden beide Probenseiten mit Argonionen beschossen (5). Dabei stellt man über den Halter einen Wärmekontakt zu einem Flüssigstickstoffdewar her und kühlt so die Probe. Die Argonionen werden zunächst mit einer Energie von  $5\text{ keV}$  und unter einem Winkel von  $75^\circ$  gegen die Flächennormale auf die sich drehende Probe geschossen. Die Abtragsrate ist dabei auf der ganzen Probe etwa gleich, so daß die Probengeometrie, die durch Schleifen und Politur eingestellt wurde, im wesentlichen erhalten bleibt. So wandern die Mulde auf der einen und die plane Fläche auf der anderen Seite aufeinander zu und berühren sich nach einer gewissen Zeit. An dieser Stelle entsteht dann ein Loch mit einem keilförmigen Rand. Dieser Keil ist an seinem äußersten Rand elektronentransparent.

Hier zählt sich nun die Güte der vorausgegangenen Politur aus. Je geringer die Oberflächenrauigkeit der Probe ist, desto größer sind die Bereiche gleichförmiger Dicke und damit auch die Bereiche guter Elektronentransparenz.

Während des Abdünnvorganges wird ein Laserstrahl auf die Probe gerichtet. Beim Auftreten des Loches fällt das Licht auf einen optoelektronischen Schalter, der den Dünnungsvorgang dann unterbricht. Der Schaltpunkt kann vom Benutzer vorgewählt werden, um die gewünschte Lochgröße bestimmen zu können. Je nach anfänglicher Probendicke dauert das Dünnen zwischen 5 und 10 Stunden. Allerdings hat der Argonbeschuß an den Probtoberflächen eine Umwandlung der quasikristallinen in eine kristalline Phase zur Folge. Diese wird durch ein Nachdünnen mit  $3\text{-keV}$ -Ionen und  $80^\circ$  Einstrahlwinkel innerhalb von 3-4 Stunden entfernt.



## Kapitel 8

# EXPERIMENTELLE RESULTATE UND DISKUSSIONEN

In den folgenden Abschnitten werden die im Rahmen dieser Arbeit gefundenen experimentellen Resultate vorgestellt. Da verschiedene Fragestellungen untersucht wurden, erscheint es sinnvoll, die einzelnen Ergebnissen zunächst separat zu besprechen.

Im letzten Abschnitt werden dann die Zusammenhänge zwischen einzelnen Ergebnissen diskutiert.

## 8.1 Versetzungsuntersuchungen in AlCuFe

### 8.1.1 Experimentelle Ergebnisse

Bei dem hier untersuchten Material handelt es sich um langsam erstarrtes  $\text{Al}_{62}\text{Cu}_{25.5}\text{Fe}_{12.5}$ . Einzelheiten der Probenherstellung findet man im Kapitel 7.2.1.

Zunächst wurden Beugungsbilder an der Probe aufgenommen, um zu überprüfen, ob die perfekte ikosaedrische Phase von AlCuFe vorliegt. Hier konnten keine Abweichungen der Beugungsreflexe von ihren idealen Positionen festgestellt werden. Somit ist sichergestellt, daß keine Approximanten der ikosaedrischen Phase untersucht werden.

Abbildung 8.1(a) zeigt eine Hellfeldaufnahme von zwei Versetzungen. Der zugehörige reziproke Gittervektor ist  $\vec{g}_{\parallel}^1 = (3/5, 2/3, 1/2)$  (Indizierung nach Cahn et al. [24], s. a. Kapitel 4.2.1). In Abbildung 8.1(b) ist der gleiche Probenbereich zu sehen, nur wurde diesmal der Vektor  $\vec{g}_{\parallel}^2 = (0/0, \bar{2}/4, 0/0)$  benutzt. Nun sind beide Versetzungen nicht zu sehen. Um festzustellen, ob es sich in Abbildung 8.1(b) um die starke oder die schwache Bedingung handelt (Kapitel 6.4), wurde in Abbildung 8.1(c) der gleiche Probenbereich nochmals mit dem zu  $\vec{g}_{\parallel}^2$  parallelen reziproken Gittervektor  $\vec{g}_{\parallel}^3 = (0/0, \bar{4}/6, 0/0) = \tau \vec{g}_{\parallel}^2$  aufgenommen. Auch in diesem Fall sind beide Versetzungen außer Kontrast. Damit erfüllen  $\vec{g}_{\parallel}^2$  und  $\vec{g}_{\parallel}^3$  die starke Auslöschbedingung.

In Abbildung 8.2 sind nun Dunkelfeldaufnahmen dieser Versetzungen zu sehen. Die benutzten reziproken Gittervektoren liegen alle in einer systematischen Reihe, die verschieden von der in den Abbildungen 8.1(b) und (c) benutzten ist. In Abbildung 8.2(a) sind die Versetzungen sichtbar ( $\vec{g}_{\parallel}^4 = (\bar{2}/2, 0/0, 0/0)$ ). In 8.2(b) wurde der Vektor  $\vec{g}_{\parallel}^5 = \tau \vec{g}_{\parallel}^4$  benutzt. Hier kann nur ein schwacher Restkontrast beobachtet werden. Benutzt man  $\vec{g}_{\parallel}^6 = \tau^2 \vec{g}_{\parallel}^4$ , sind die Versetzungen wieder zu sehen (Abbildung 8.2(c)). Dieses Kontrastverhalten demonstriert die schwache Auslöschbedingung. Ein weiteres Beispiel für die starke und schwache Auslöschbedingung ist in den Abbildung 8.3, 8.4 und 8.5 aufgeführt.

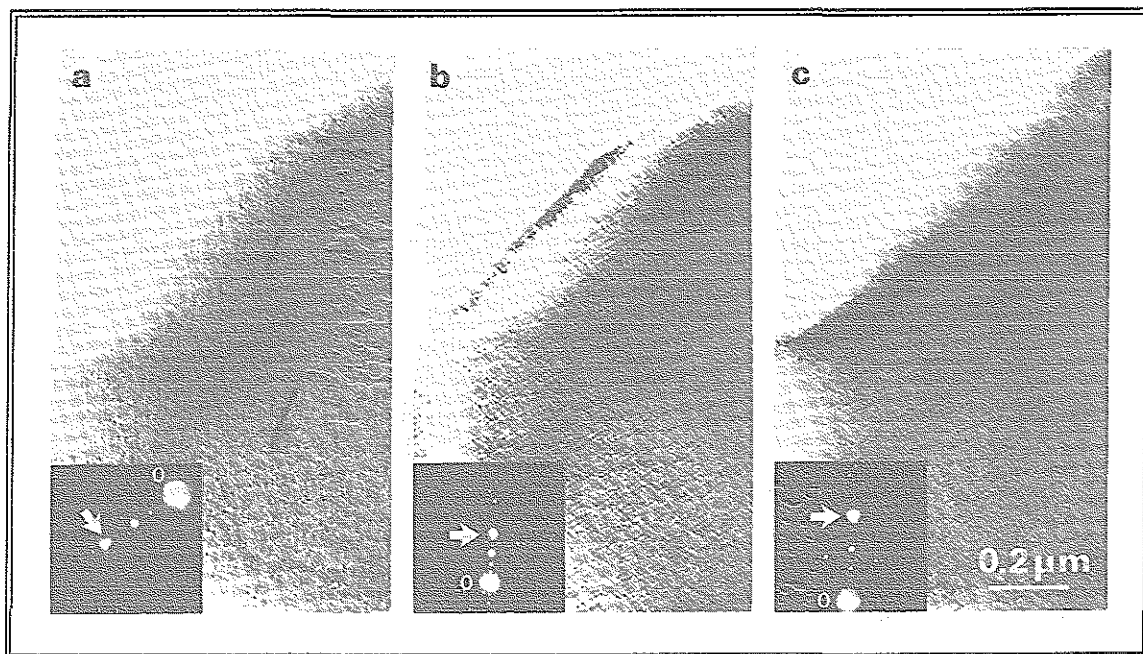


Abbildung 8.1: Hellfeldaufnahmen zweier Versetzungen, deren Kontrast die starke Auslöschbedingung erfüllt. (a) in Kontrast mit  $\vec{g}_{\parallel}^1 = (3/5, 2/3, 1/2)$ ; (b) außer Kontrast mit  $\vec{g}_{\parallel}^2 = (0/0, \bar{2}/4, 0/0)$  und (c)  $\vec{g}_{\parallel}^3 = (0/0, \bar{4}/6, 0/0) = \tau \vec{g}_{\parallel}^2$ . Die zugehörigen Abbildungsbedingungen sind in den eingesetzten Beugungsbildern zu sehen.

### 8.1.2 Diskussion

Diese hier erstmals vorgestellten Beobachtung sind der experimentelle Nachweis für die von der Theorie (Kapitel 6) vorhergesagte starke und schwache Auslöschbedingung.

Die Bilder in Abbildung 8.1 zeigen deutlich die starke Auslöschbedingung, so daß die Komponenten des Verzerrungsfeldes der Versetzung,  $\vec{u}_{\parallel}$  bzw.  $\vec{u}_{\perp}$ , senkrecht zu den reziproken Gittervektoren  $\vec{g}_{\parallel}^2$  und  $\vec{g}_{\parallel}^3$  bzw.  $\vec{g}_{\perp}^2$  und  $\vec{g}_{\perp}^3$  liegen müssen. In  $E_{\parallel}$  bzw.  $E_{\perp}$  liegen diese reziproken Vektoren parallel zu zweizähligen Richtungen des ikosaedrischen Quasikristalls.

Darüberhinaus konnte die schwache Auslöschbedingung für diese Versetzungen nachgewiesen werden. Setzt man die zugehörigen reziproken Gittervektoren  $\vec{g}_{\parallel}^5$  und  $\vec{g}_{\perp}^5$  in Gleichung 6.19 ein findet man

$$c = -\frac{|\vec{g}_{\parallel}^5|}{|\vec{g}_{\perp}^5|} = \frac{2 + 4\tau}{2\tau - 4} \approx -11. \quad (8.1)$$

Dies bedeutet, daß die Amplitude des Verzerrungsfeldes entlang der  $(0/2, 0/0, 0/0)$ -Richtung in  $E_{\parallel}$  etwa elfmal kleiner ist als entlang der entsprechenden zweizähligen Richtung in  $E_{\perp}$  [181].

Dies untermauert die Vermutung, daß der Einbau von Phasonenfehlern in ein quasiperiodisches Gitter energetisch günstiger ist, als phononenartige Defekte einzufügen [104]. Eine qualitative Begründung dieser Vermutung liefert die folgende Überlegung.

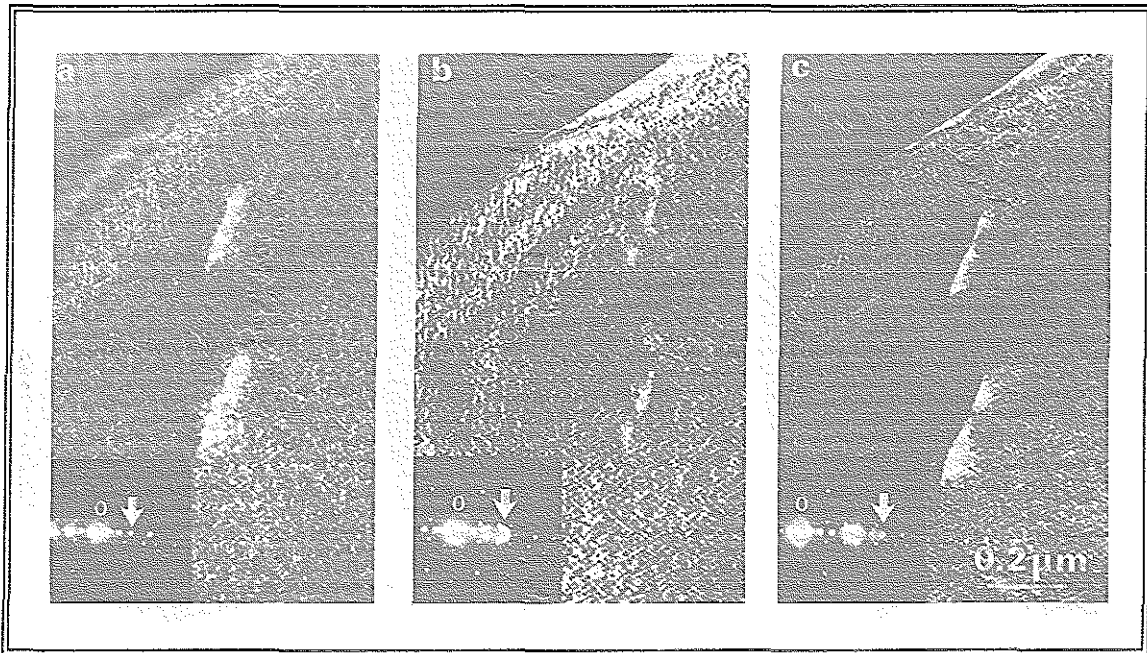


Abbildung 8.2: Dunkelfeldaufnahmen der Versetzungen aus Abbildung 8.1, deren Kontrast nun die schwache Auslöschbedingung erfüllt. (a) in Kontrast mit  $\vec{g}_{||}^4 = (\bar{2}/\bar{2}, 0/0, 0/0)$ ; (b) schwacher Restkontrast mit  $\vec{g}_{||}^5 = (\bar{2}/\bar{4}, 0/0, 0/0) = \tau \vec{g}_{||}^4$  und (c) wieder in Kontrast mit  $\vec{g}_{||}^6 = (\bar{4}/\bar{6}, 0/0, 0/0) = \tau^2 \vec{g}_{||}^4$ . Die zugehörigen Abbildungsbedingungen sind in den eingesetzten Beugungsbildern zu sehen.

Gitterverzerrungen aufgrund der Phononenkomponente des sechsdimensionalen Verschiebungsfeldes führen zu elastischen Verspannungen des Gitters. Wie in kristallinen Gittern (s. [85]) wird der Energieaufwand solcher Verspannungen proportional zum Betragsquadrat,  $|\vec{b}_{||}|^2$ , der zugehörigen Burgersvektorkomponente sein. Die Phasonenkomponente des sechsdimensionalen Verschiebungsfeldes führt zur lokalen Umordnung des Gitters. Für ein eindimensionales Gitter, besteht diese Umordnung in einer Vertauschung der Abstandsfolge lang-kurz nach kurz-lang (s. Kapitel 5, Abbildung 5.4). Die nächste Umgebung des mittleren Gitterplatzes hat sich dabei aber nicht geändert, die beiden nächsten Nachbarn haben praktisch nur ihre Abstände vertauscht. Wären diese Plätze mit identischen Atomen besetzt, würde die Energie des Gitters nicht geändert. Änderungen in den Gitterabständen treten frühestens bei den übernächsten Nachbarn auf. Damit wird sich die Gitterenergie nur geringfügig gegenüber der idealen Konfiguration ändern. Da die Zahl der Umordnungen proportional zur Amplitude der Phasonenkomponente  $\vec{b}_{\perp}$  ist, wird der Energieaufwand durch die Aufbauregelverletzungen nicht so schnell ansteigen, wie der aufgrund der phononenartigen Defekte ( $\propto |\vec{b}_{||}|^2$ ).

Der in Abbildung 8.2(b) sichtbare Restkontrast kann zwei Ursachen haben.

Erstens ist es in Quasikristallen aufgrund der dichten Reflexanordnung grundsätzlich schwierig, einen Zweistrahlfall einzustellen. Oft sind schwache Reflexe ebenfalls leicht angeregt, die ihrerseits zu einem Versetzungscontrast führen können.

Die andere Möglichkeit liegt in der Natur der Verzerrungsfelder selbst. Sie können von



Abbildung 8.3: Hellfeldaufnahmen einer weiteren Versetzung. Hier ist keine Auslöschbedingung erfüllt. ((a) in Kontrast mit  $\vec{g}_{||} = (\bar{2}/4, 0/0, 0/0)$ ; (b) in Kontrast mit  $(\bar{4}/\bar{6}, 0/0, 0/0)$ ).

einer idealisierten Form abweichen, so daß Gleichung 6.19 nur näherungsweise und/oder nicht an jedem Ort erfüllt werden kann. Abweichung von einer idealisierten Form meint hier, daß neben Verzerrungen entlang des Burgersvektors das Gitter auch entlang anderer Richtung verzerrt sein kann, beispielsweise aufgrund einer Relaxation der Gitterspannungen. Dies kann dann zu Restkontrasten führen, da für diese Anteile des Verzerrungsfeldes die Auslöschbedingung nicht erfüllt ist.

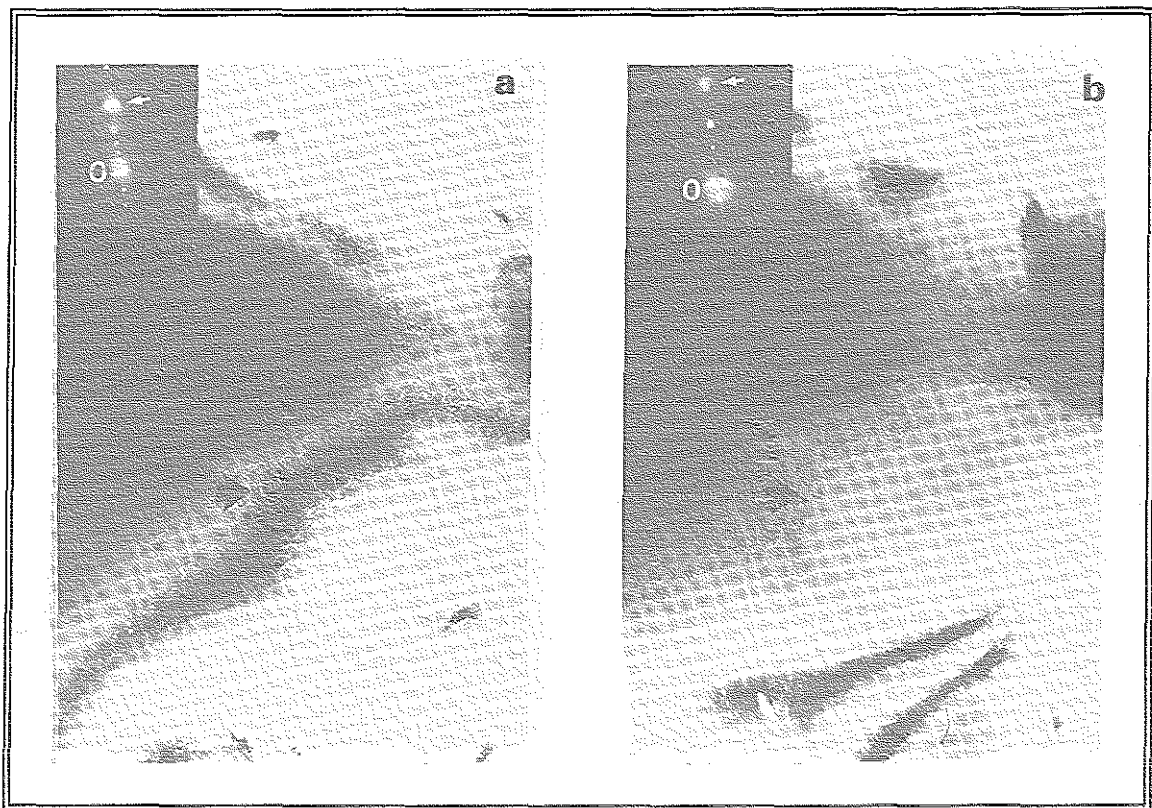


Abbildung 8.4: Hellfeldaufnahmen einer weiteren Versetzung aus Abbildung 8.3, deren Kontrast ebenfalls die starke Auslöschbedingung erfüllt. (a) außer Kontrast mit  $\vec{g}_{||} = (\bar{1}/\bar{1}, \bar{2}/\bar{3}, 1/2)$ ; (b) außer Kontrast mit  $\vec{g}_{||} = (\bar{1}/\bar{2}, \bar{3}/\bar{5}, 2/3)$ .

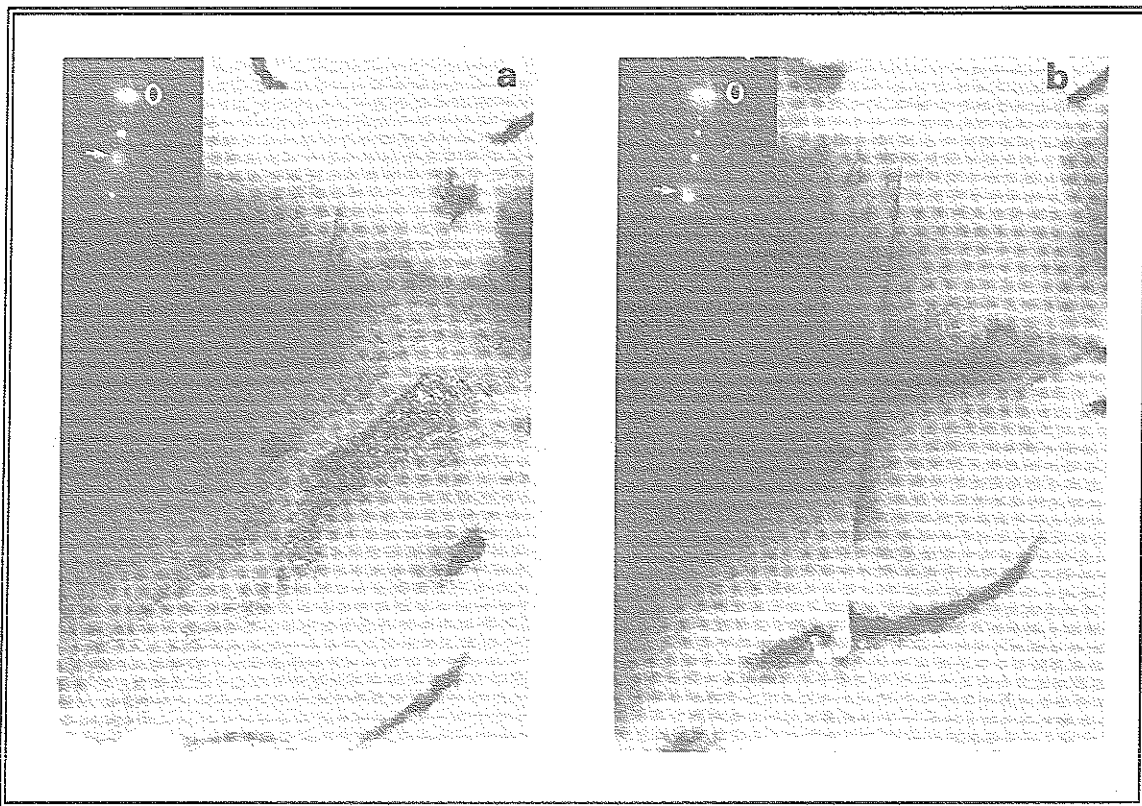


Abbildung 8.5: Hellfeldaufnahmen der Versetzung aus Abbildung 8.3, deren Kontrast ebenfalls die schwache Auslöschbedingung erfüllt. (a) außer Kontrast mit  $\vec{g}_{\parallel} = (0/0, 2/4, 0/0)$ ; (b) in Kontrast mit  $\vec{g}_{\parallel} = (0/0, 4/6, 0/0)$ .

## 8.2 Transmissionselektronenmikroskopische Untersuchungen an langsam erstarrtem AlPdMn

### 8.2.1 Experimentelle Ergebnisse

Die hier untersuchten Proben wurden im Induktionsofen hergestellt. Einzelheiten zum Herstellungsverfahren finden sich im Kapitel 7.2.1. Die Zusammensetzung gemäß der Einwaage ist  $\text{Al}_{70}\text{Pd}_{20}\text{Mn}_{10}$ .

Um zu überprüfen, ob die untersuchten Proben aus der ikosaedrischen Phase bestehen, wurden Beugungsbilder entlang verschiedener Zonenachsen aufgenommen. Abbildung 8.6 zeigt Aufnahmen entlang der zwei-, drei- und fünfzähligen Symmetrieachse. Es können

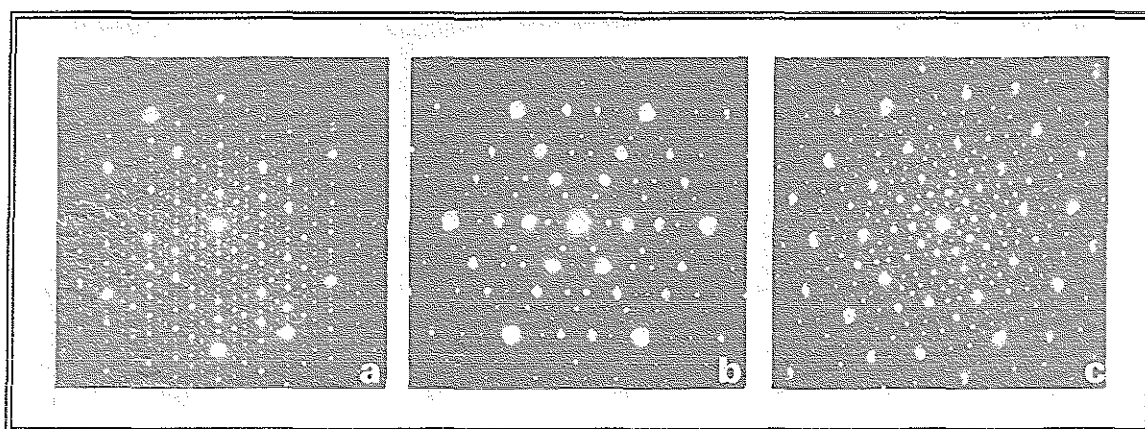


Abbildung 8.6: Beugungsbilder entlang der zwei- drei- und fünfzähligen Zonenachse aufgenommen an langsam erstarrten  $\text{Al}_{70}\text{Pd}_{20}\text{Mn}_{10}$  Quasikristallen.

keine signifikanten Abweichungen der Reflexe von ihren idealen Positionen festgestellt werden. Die auftretenden Zusatzreflexe bei den hellen Reflexen rühren von einer Bedeckung der Probe mit einer anderen Phase her. Diese Deckschicht entsteht bei längerer Untersuchung im Mikroskop durch Strahlenschädigung der hochenergetischen Elektronen (Diese Untersuchung wurden im JEOL 4000FX Transmissinselektronenmikroskop bei einer Elektronenenergie von 400 keV durchgeführt.)

Abbildung 8.7 zeigt die typische Morphologie der erstarrten Schmelze. Durch Aufnahme von Bildern unter verschiedenen Beobachtungsrichtungen kann man zeigen, daß es sich bei den hier sichtbaren nadel- und bandförmigen Objekten um verschiedene Projektionen lamellarer Strukturen handelt. Abbildung 8.8 zeigt eine Helfeldaufnahme, bei der die plättchenförmige Struktur deutlich erkennbar ist. Die Plattennormale liegt parallel zum Abbildungsvektor, der hier parallel zu einer fünfzähligen Richtung gewählt wurde. Die Ebenennormalen dieser Lamellen sind parallel zu jeweils einer der sechs fünfzähligen Richtungen der ikosaedrischen Matrix. Abbildung 8.9 und 8.10 zeigt eine einzelne

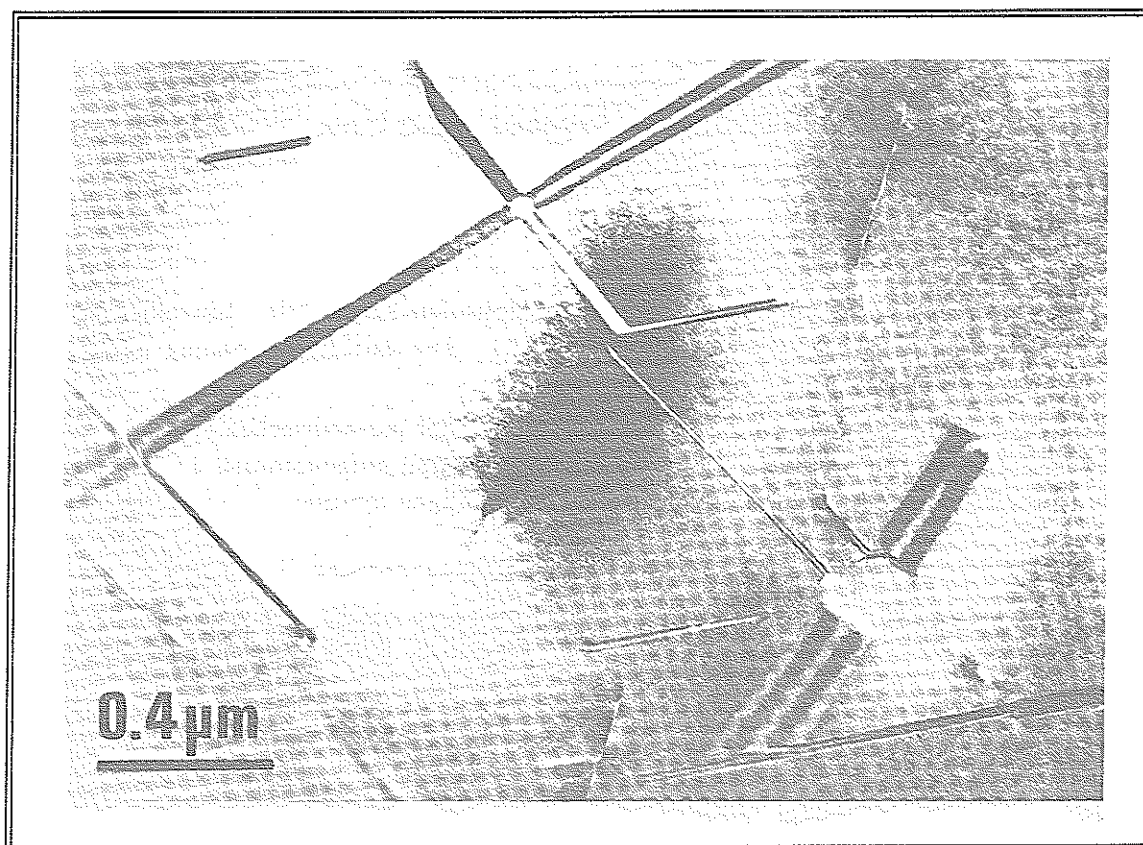


Abbildung 8.7: Hellfeldaufnahme bei niedriger Vergrößerung. Aufgenommen in einem langsam erstarrten  $\text{Al}_{70}\text{Pd}_{20}\text{Mn}_{10}$  Quasikristall. Sie zeigt die typische Morphologie der Probe.

Lamelle im Beugungskontrast unter verschiedenen Abbildungsbedingungen. In Abbildung 8.9(a) wurde der Reflex  $\vec{g}_{||}^1 = (0/0, 1/2, \bar{2}/\bar{3})$  benutzt. Hier beobachtet man bei der Lamelle einen Streifenkontrast. Für die Aufnahme in Abbildung 8.9(b) wurde der Reflex  $\vec{g}_{||}^2 = (2/3, 1/2, 3/5)$  angeregt. Nun ist der Streifenkontrast verschwunden und linienhafte Kontraste, denen von Versetzungen ähnlich, werden am Lamellenrand sichtbar.

Die weiteren Bilder in den Abbildungen 8.9 und 8.10 sind nun Teil einer systematischen Kontrastanalyse. Die Ergebnisse der gesamten Analyse sind in Tabelle 8.1 zusammengestellt. Die im theoretischen Teil dieser Arbeit (Kapitel 6) vorhergesagten Auslöschbedingungen konnten mehrfach beobachtet werden. Dies ist zum einen die starke Auslöschbedingung. Hier verschwindet der Versetzungskontrast für alle Reflexe innerhalb einer systematischen Reihe (s. Kapitel 6.4.3). Ein Beispiel hierfür geben die Abbildungen 8.9 (c) und (d) für den rechten und den linken Defekt. daß die benutzten Reflexe aus einer systematischen Reihe stammen, zeigen die eingesetzten Beugungsbilder.

Die zweite Auslöschbedingung ist die schwache. Hier ist die Versetzung nur für einen Reflex der systematischen Reihe außer Kontrast, während sie mit den anderen Reflexen dieser Reihe wieder sichtbar ist (s. Kapitel 6.4.3). In den Abbildung 8.10 (e) und (f) findet sich dann ein entsprechendes Beispiel der schwachen Auslöschbedingung für den

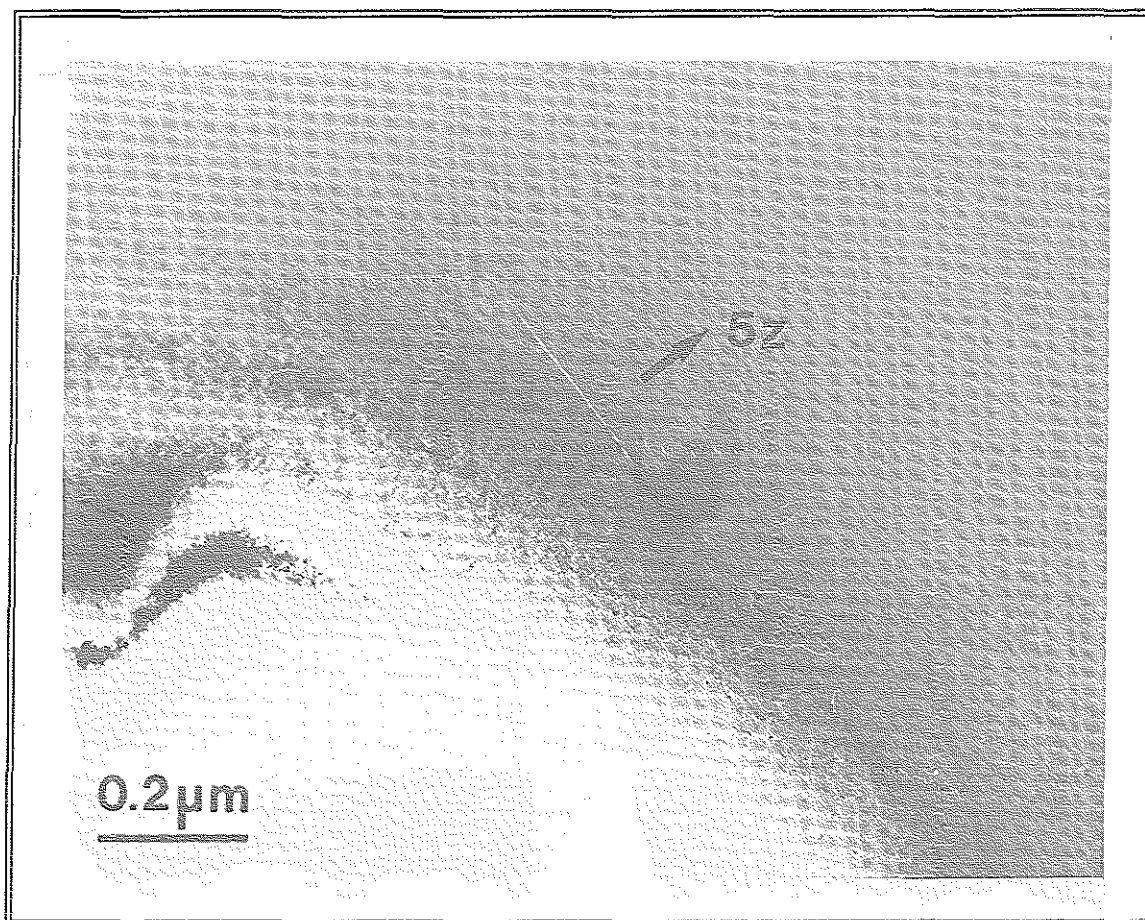


Abbildung 8.8: Hellfeldaufnahme, aufgenommen in einem langsam erstarrten AlPdMn-Quasikristall. Man erkennt deutlich die lamellare Struktur des Objekts.

rechten Defekt. Der linke Defekt demonstriert ein weiteres Mal die SEC. In den Abbildungen 8.10 (g) und (h) ist es genau umgekehrt: WEC für den linken und SEC für den rechten Defekt.

Abbildung 8.11 zeigt eine andere Lamelle in einer hochauflösenden Gitterabbildung. Die Habitusebene ist parallel zur Beobachtungsrichtung, so daß man genau auf die Kante der Lamelle schaut. Die Beobachtungsrichtung selbst ist parallel zu einer pseudozweizähligen  $[0/1, 1/0, 0/0]$ -Richtung der ikosaedrischen Matrix.

Diese Richtungen findet man in einem Abstand von  $18^\circ$  zwischen zwei benachbarten zweizähligen Symmetrierichtungen. Die beiden  $(1/0, 0/\bar{1}, 0/0)$ -Grenzflächen sind atomar scharf. Betrachtet man Abbildung 8.11 unter einem flachen Winkel entlang der Grenzflächen, erkennt man eine periodische Abfolge der Gitterebenen innerhalb der Lamelle (Abbildung 8.12 oben). Dagegen verlaufen die Gitterlinien ungestört durch die Lamelle, wenn das Bild entlang der fünfzähligen Richtung, also parallel zur Ebenennormale betrachtet wird (Abbildung 8.12 unten). Die Dicke der Lamelle beträgt 2.4 nm. Der gleiche Wert wurde auch für die in Abbildungen 8.9 und 8.10 gezeigte Lamelle gefunden.

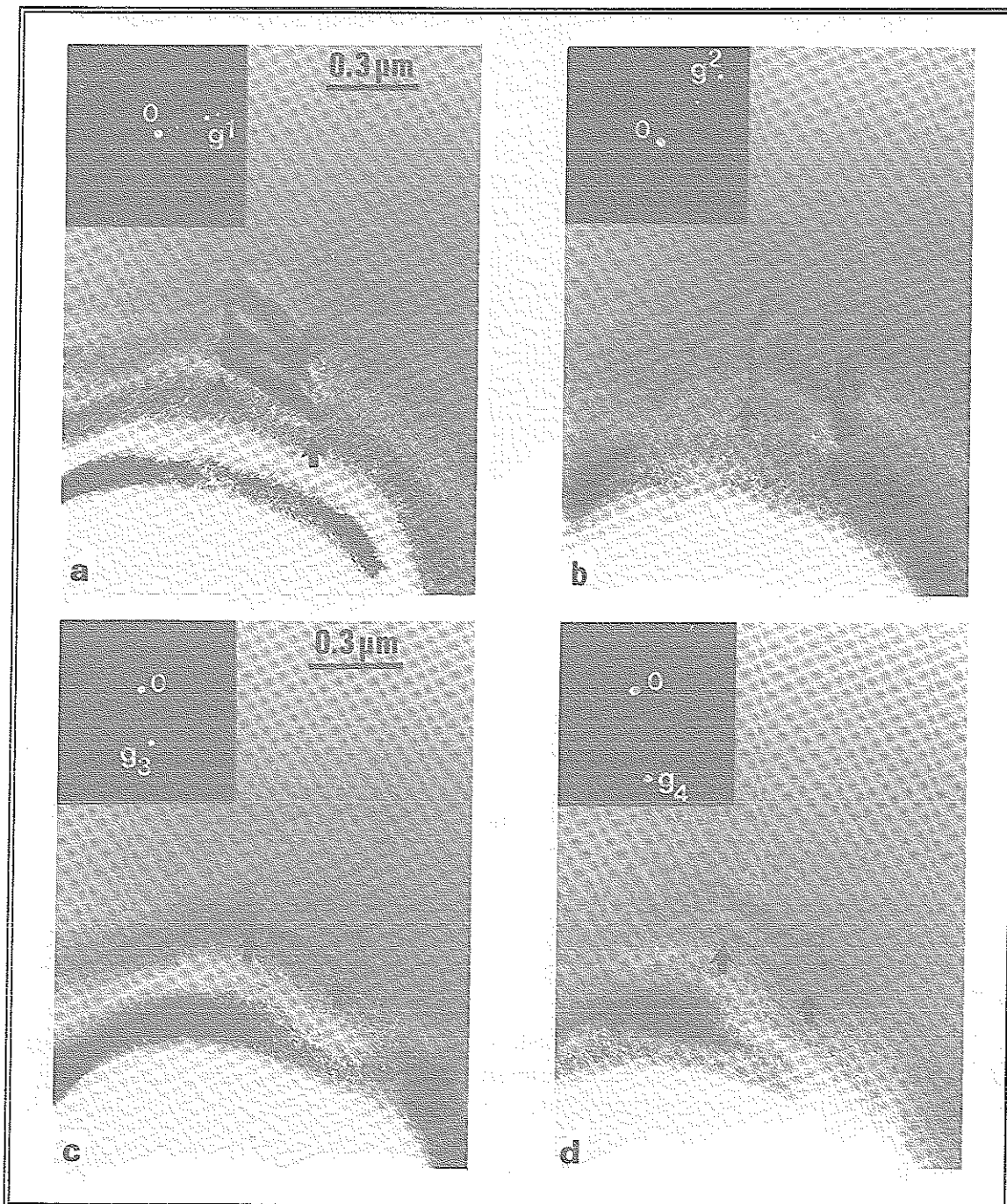


Abbildung 8.9: Hellfeldaufnahmen einer Lamelle unter verschiedenen Abbildungsbedingungen. Je nach Beugungsvektor ändert sich der Kontrast der Versetzungslinien. Die benutzten Beugungsreflexe sind zusammen mit den beobachteten Kontrasten in Tabelle 8.1 aufgelistet (Fortsetzung im nächsten Bild).

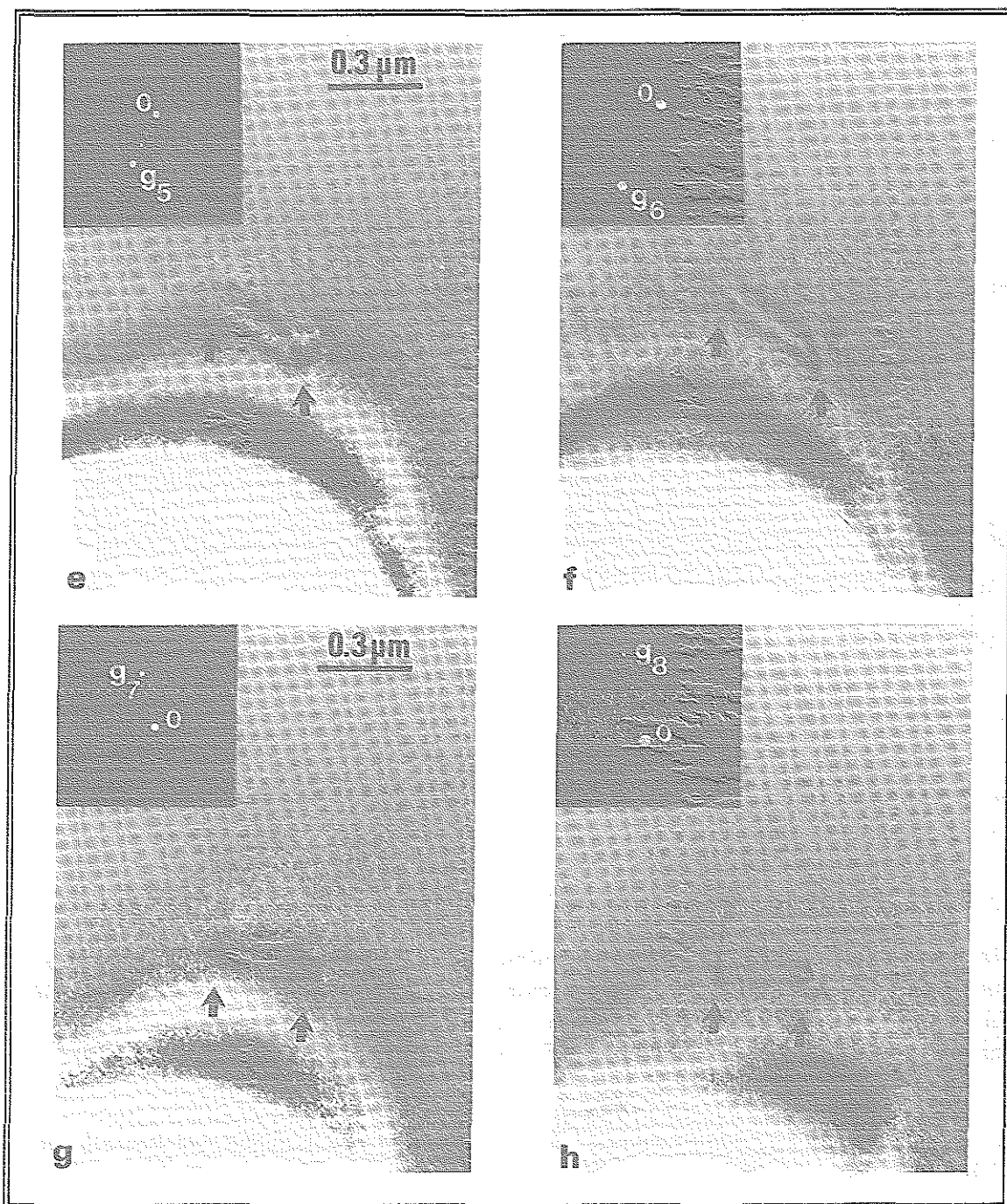


Abbildung 8.10: Hellfeldaufnahmen einer Lamelle unter verschiedenen Abbildungsbedingungen. Je nach Beugungsvektor ändert sich der Kontrast der Versetzungslinien. Die benutzten Beugungsreflexe sind zusammen mit den beobachteten Kontrasten in Tabelle 8.1 aufgelistet (Fortsetzung des vorhergehenden Bildes).

| Reflex $\vec{g}_{  } =$<br>(h/h', k/k', l/l')                 | linker Defekt |     |     | rechter Defekt |     |     | Abb. 2 |
|---------------------------------------------------------------|---------------|-----|-----|----------------|-----|-----|--------|
|                                                               | Kontrast      | SEC | WEC | Kontrast       | SEC | WEC |        |
| (0/0, 1/2, $\bar{2}/\bar{3}$ )                                | Streifen      | ?   | ?   | Streifen       | ?   | ?   | (a)    |
| ( $\bar{2}/\bar{3}$ , $\bar{1}/\bar{2}$ , $\bar{1}/\bar{1}$ ) | nein          | -   | +   | nein           | +   | -   | (g)    |
| ( $\bar{3}/\bar{5}$ , $\bar{2}/\bar{3}$ , $\bar{1}/\bar{2}$ ) | ja            | -   | -   | nein           | +   | -   | (h)    |
| ( $\bar{1}/\bar{2}$ , $\bar{1}/\bar{1}$ , $\bar{2}/\bar{3}$ ) | nein          | -   | +   | nein           | -   | +   | -      |
| ( $\bar{2}/\bar{3}$ , $\bar{1}/\bar{2}$ , $\bar{3}/\bar{5}$ ) | ja            | -   | -   | ja             | -   | -   | (b)    |
| (2/4, 0/0, 0/0)                                               | nein          | +   | -   | nein           | +   | -   | (c)    |
| (4/6, 0/0, 0/0)                                               | nein          | +   | -   | nein           | +   | -   | (d)    |
| (2/3, $\bar{1}/\bar{2}$ , $\bar{1}/\bar{1}$ )                 | nein          | +   | -   | nein           | -   | +   | (e)    |
| (3/5, $\bar{2}/\bar{3}$ , $\bar{1}/\bar{2}$ )                 | nein          | +   | -   | ja             | -   | -   | (f)    |
| (1/1, $\bar{2}/\bar{3}$ , $\bar{1}/\bar{2}$ )                 | nein          | +   | -   | ja             | -   | -   | -      |
| (1/2, $\bar{3}/\bar{5}$ , $\bar{2}/\bar{3}$ )                 | nein          | +   | -   | ja             | -   | -   | -      |
| ( $\bar{1}/\bar{1}$ , $\bar{2}/\bar{3}$ , $\bar{1}/\bar{2}$ ) | nein          | +   | -   | ja             | -   | -   | -      |
| ( $\bar{1}/\bar{2}$ , $\bar{3}/\bar{5}$ , $\bar{2}/\bar{3}$ ) | nein          | +   | -   | ja             | -   | -   | -      |

Tabelle 8.1: Liste der für die Kontrastanalyse verwendeten Reflexe (1. Spalte). In der 2. und 5. Spalte sind die beobachteten Kontraste aufgeführt. Die Art der Auslöschbedingung ist in den Spalten 3,4,6 und 7 aufgelistet. Für einen Teil der Reflexe findet man die zugehörigen Bilder in den Abbildungen 8.9 und 8.10.

Abbildung 8.13 zeigt ein Hochauflösungsbild einer weiteren Lamelle. Die Betrachtungsrichtung ist jetzt parallel zu einer zweizähligen  $[0/0, 0/0, 0/2]$ -Richtung der ikosaedrischen Matrix. Wiederum schaut man direkt auf die Kante der Lamelle. Auch in diesem Bild stellt man fest, daß die Lamelle parallel zur Ebenennormale periodisch aufgebaut ist. In Abbildung 8.14 sind die entsprechenden Ansichten bei Betrachtung unter einem flachen Winkel dargestellt. Die weißen Bildpunkte sind in zwei Motiven angeordnet (in Abbildung 8.13 durch schwarze Linien markiert), die über eine Gleitspiegelung ineinander übergeführt werden können. Das Motivpaar ist 1.2 nm dick und wiederholt sich einmal, so daß die Gesamtdicke der Lamelle wiederum 2.4 nm beträgt.

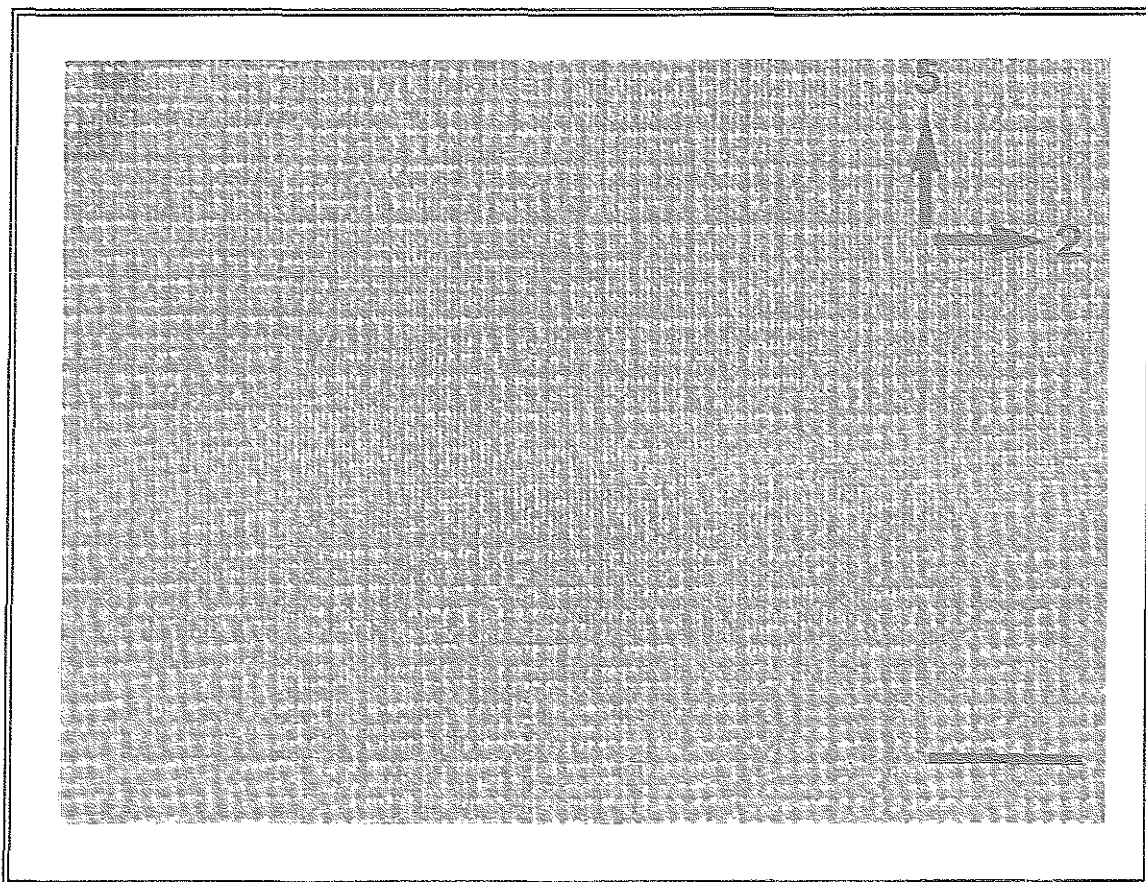


Abbildung 8.11: Hochaufgelöste Gitterlinienabbildung entlang einer Lamelle. Der Elektronenstrahl ist parallel zu einer  $[0/1, 1/0, 0/0]$ -Richtung der ikosaedrischen Matrix. Die wichtigsten Symmetrierichtungen sind durch Pfeile markiert (Maßstabsstrich entspr. 5 nm).

Aus den bis hierhin vorgestellten Ergebnissen ist nicht zu ermitteln, ob es sich bei der Lamelle um einen strukturellen Defekt in der ikosaedrischen Phase (wie z.B. ein Stapelfehler oder eine Zwillingskorngrenze) handelt, oder ob ein Einschluß einer anderen kristallinen oder quasikristallinen Phase vorliegt. Aus diesem Grund wurde die Lamelle mit Hilfe der Ordnungszahlkontrast-Abbildung (Z-Kontrast) untersucht. Des weiteren konnten Elektronen-Energie-Verlustspektren an Lamelle und umgebender Matrix aufgenommen werden. Diese Resultate entstanden im Rahmen einer Zusammenarbeit mit Herrn Dr. H. Lakner an der Universität Duisburg mit einem Rastertransmissionselektronenmikroskop.

Ein Z-Kontrastbild ist in Abbildung 8.15 zu sehen. Die Lamelle hebt sich dunkel von der sie umgebenden Matrix ab, was auf einen kleineren mittleren Z-Wert der Lamelle hindeutet. Um diesen Befund zu quantifizieren wurden anschließend EELS-Spektren an Lamelle und Matrix aufgenommen. Diese Spektren werden in Abbildung 8.16 gezeigt. Eine Analyse der in den Spektren beobachteten Maxima bei den charakteristischen Verlustenergien von Palladium und Mangan mittels Standardmethoden [55] liefert das Er-

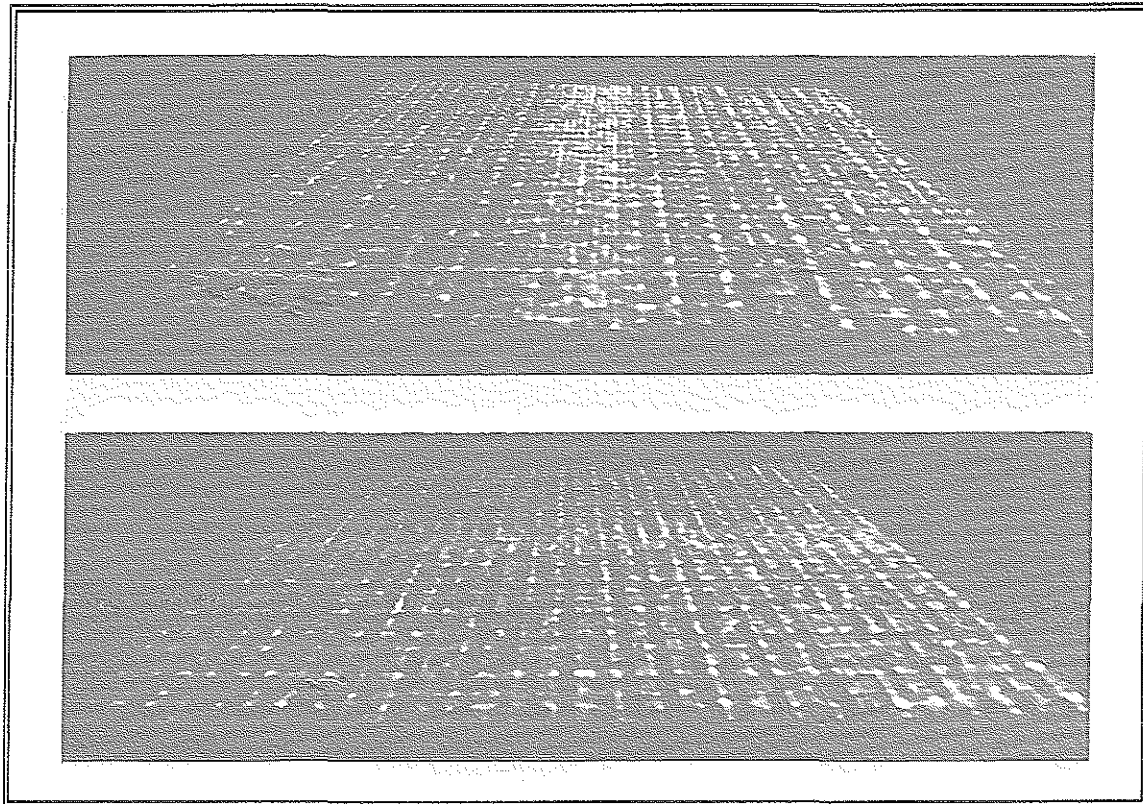


Abbildung 8.12: Perspektivische Darstellung von Abbildung 8.11. Oben: Blickrichtung entlang der Lamelle; unten: Blickrichtung senkrecht zur Lamelle.

gebnis, daß in der Lamelle im Vergleich zur Matrix der Palladiumgehalt  $67(\pm 13)\%$  und der Mangananteil  $200(\pm 50)\%$  beträgt. Die Zusammensetzung der Matrix wurde vorher im Rasterelektronenmikroskop mittels energiedispersiven Röntgenanalyse bestimmt. Die Summenformel lautet hier  $\text{Al}_{74}\text{Pd}_{16}\text{Mn}_{10}$ . Berücksichtigt man die Konzentrationverhältnisse aus den EELS-Messungen, findet man für die Lamelle eine Zusammensetzung von  $\text{Al}_{69}\text{Pd}_{11}\text{Mn}_{20}$ .

### 8.2.2 Diskussion

Die hier vorgestellten Ergebnisse zeigen, daß es sich bei den Lamellen um Einschlüsse einer Phase handelt, die sich in Zusammensetzung und Struktur von der ikosaedrischen Matrix unterscheidet.

Die Hochauflösungsbilder belegen, daß die Struktur entlang der Habitusebenen normale periodisch aufgebaut ist, wobei die Periodenlänge  $1.2\text{ nm}$  beträgt. Die Habitusebene selbst ist parallel zu einer der fünfzähligen Ebenen der ikosaedrischen Matrix und quasiperiodisch aufgebaut.

Es ist bekannt, daß die  $\text{AlPdMn}$ -Legierung verschiedene quasikristalline Phasen bildet. Beeli et al. untersuchten diese Legierung bei einer Zusammensetzung von  $\text{Al}_{70.5}\text{Pd}_{13}\text{Mn}_{16.5}$  und beobachteten hier die dekadonale Phase [11]. Die in [11] dokumentierte Periodizitäts-

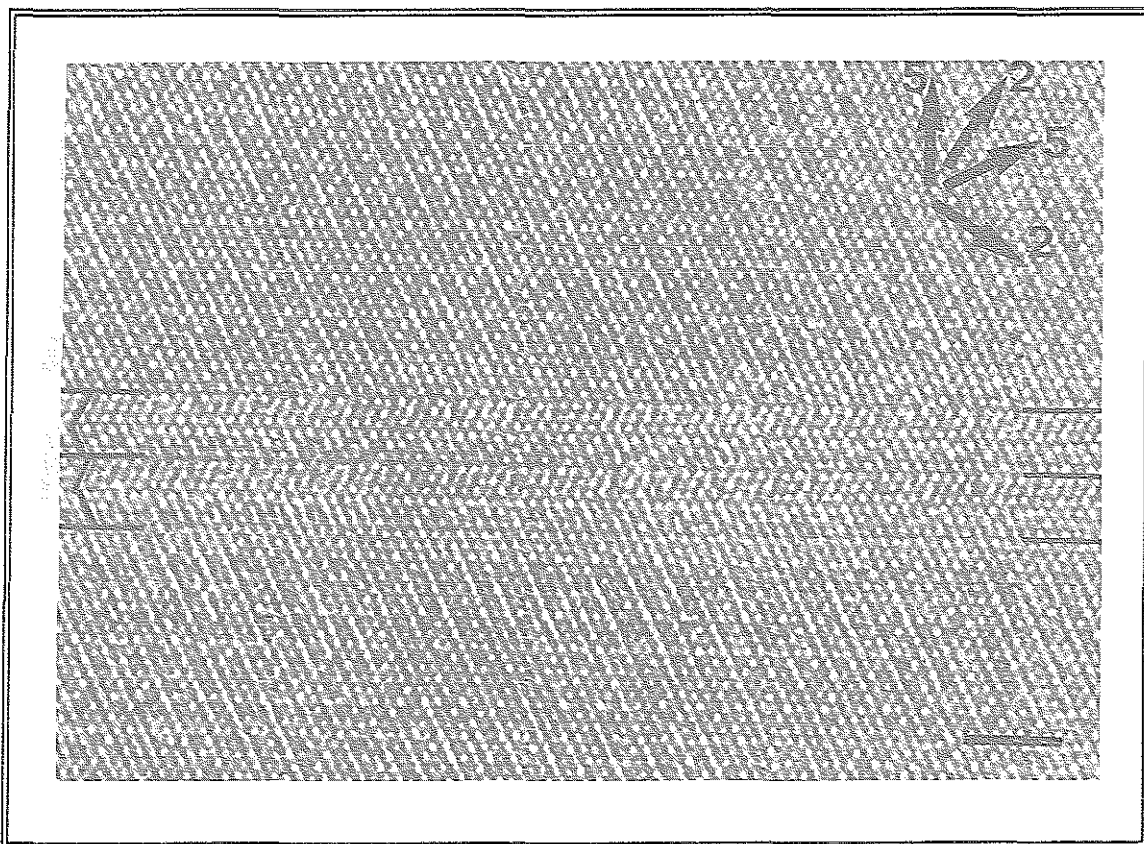


Abbildung 8.13: Hochauflöste Gitterlinienabbildung entlang einer Lamelle. Der Elektronenstrahl ist parallel zu einer  $[0/0, 0/0, 0/2]$ -Richtung der ikosaedrischen Matrix. Die wichtigsten Symmetrierichtungen sind durch Pfeile markiert (Maßstabsstrich entspr. 2 nm).

länge entlang der zehnzähligen Achse entspricht dem in dieser Arbeit gefundenen Wert von 1.2 nm.

Daher kann hier die Schlußfolgerung gezogen werden, daß es sich bei den Lamellen um plattenförmige Einschlüsse der dekalonalen AlPdMn-Phase handelt. In dieser Arbeit wurde die Zusammensetzung der Lamellen durch EELS- und EDX-Messungen zu  $\text{Al}_{69}\text{Pd}_{11}\text{Mn}_{20}$  bestimmt und stimmt somit nicht ganz mit der von Belli und Mitarbeitern veröffentlichten Summenformel überein, was auf die Meßunsicherheit der EELS-Experimente zurückgeführt werden kann. Die für die dekalonale Phase charakteristische Reduktion des Palladiumgehalts zugunsten des Mangananteils bei gleichbleibendem Aluminiumanteil ist allerdings deutlich erkennbar.

Die zehnzählige Achse der dekalonalen Phase ist identisch mit der Habitusebenennormalen und liegt parallel zu einer der fünfzähligen Zonenachsen der ikosaedrischen Matrix. Folglich treffen an der Grenzfläche Ebenen aufeinander, die ausschließlich zwei- und pseudozweizählige Symmetrieachsen enthalten. Vergleicht man die Richtungen der ikosaedrischen Zonenachsen mit denen der dekalonalen Symmetrieachsen, erweist es sich als sinnvoll, daß die zehn zweizähligen Achsen der ikosaedrischen Matrix mit den zehn

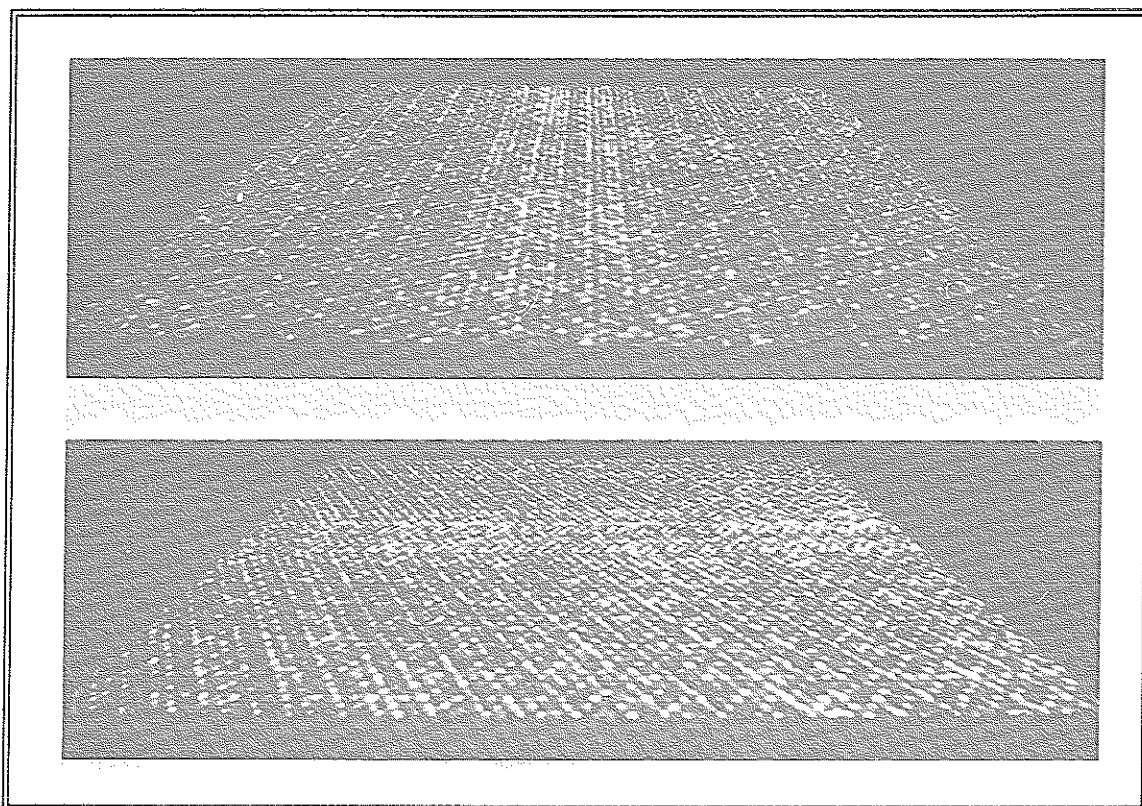


Abbildung 8.14: Perspektivische Darstellung von Abbildung 8.13. Oben: Blickrichtung entlang der Lamelle; unten: Blickrichtung senkrecht zur Lamelle.

dekagonalen, zweizähligen A2D-Richtungen zusammenfallen (die Bezeichnung der dekalonalen Achsen geht auf eine Arbeit von Fung et al. zurück [62]). Die zehn dekalonalen A2P-Richtungen liegen dann parallel zu zehn pseudozweizähligen Richtungen der ikosaedrischen Matrix.

Diese Orientierungsbeziehung ist in Abbildung 8.17 graphisch dargestellt. Dieser Sachverhalt wird durch einen Vergleich der Hochauflösungsbilder mit den zugehörigen Beugungsbildern untermauert. In der Argumentation wird dabei ausgenutzt, daß die Symmetrieelemente der realen Struktur, wie man sie in den Hochauflösungsbildern der Abbildungen 8.11 und 8.13 beobachten kann, in gleicher Weise in den zugehörigen Beugungsbildern auftreten müssen.

In Abbildung 8.13 sieht man das Matrixgitter entlang einer zweizähligen Richtung. Die Gitterebenen der Lamelle liegen hier parallel zu den Kanten eines Sechsecks. Dies ist andererseits die elementare Form der Reflexanordnung im A2D-Beugungsbild der dekalonalen Phase (s. Abbildung 8.17). In Abbildung 8.11 zeigen die Gitterebenen des Einschlusses eine rechtwinklige Anordnung, die sich dann auch im zugehörigen Beugungsbild entlang der A2P-Richtung wiederfindet. Diese Orientierungsbeziehung weist zusammen mit dem atomar scharfen Übergang an den Grenzflächen auf eine hohe strukturelle Ähnlichkeit der dekalonalen und ikosaedrischen Phasen im AlPdMn-System hin.

An den Kanten der Lamellen tritt eine Fehlpassung zwischen dem quasiperiodischen

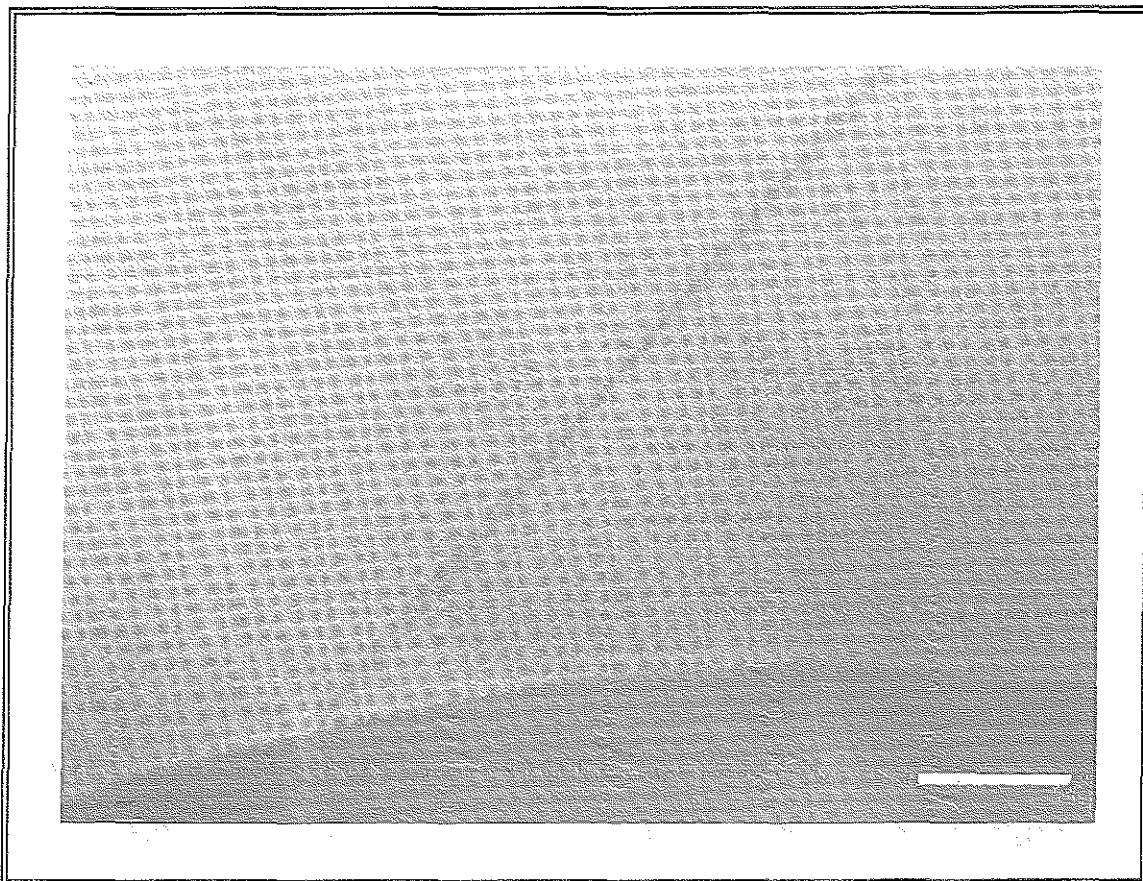


Abbildung 8.15: Z-Kontrastaufnahme einer Lamelle, deren Ebenennormale hier in der Bildebene liegt. Die Lamelle erscheint dunkler als die umgebende Matrix, d.h. sie besitzt einen kleineren mittleren Z-Wert (Maßstabsstrich entspr. 50 nm).

Gitter der ikosaedrischen Phase und der periodischen Struktur entlang der zehnzähligen Achse der dekalagonalen Phase auf. Diese Fehlpassung führt zu einer Verspannung des Gitters, die mittels Beugungskontrastmethoden beobachtet werden kann (Abbildungen 8.9 und 8.10). Diese linienhaften Kontraste resultieren zwar aus einer Verspannung des Gitters, andererseits markieren sie Phasengrenzen, so daß man hier nicht von Versetzungen im eigentlichen Sinne sprechen kann. Das Kontrastverhalten selbst deutet aber darauf hin, daß die Spannungsfelder denen von Versetzungen recht ähnlich sind. Im folgenden werden diese Defekte deshalb als Versetzungen bezeichnet.

Die beobachteten Kontrastauslöschungen werden nun mittels der in Kapitel 6.4.3 abgeleiteten Kontrasttheorie analysiert. Wie dort gezeigt ist, erlaubt es die Beobachtung von starken Auslöschbedingungen, die Hauptrichtungen der Spannungsfelder im physikalischen Raum  $E_{||}$  und orthogonalem Raum  $E_{\perp}$  abzuleiten.

Dies kann zum einen auf graphische Weise durchgeführt werden, indem man zunächst die Richtungen der reziproken Gittervektoren, für die die starke Auslöschbedingung beobachtet wurde, in eine stereographische Projektion einträgt. Die starke Bedingung besagt nun nichts anderes, als daß die Verschiebungen des Gitters senkrecht zu diesen reziproken

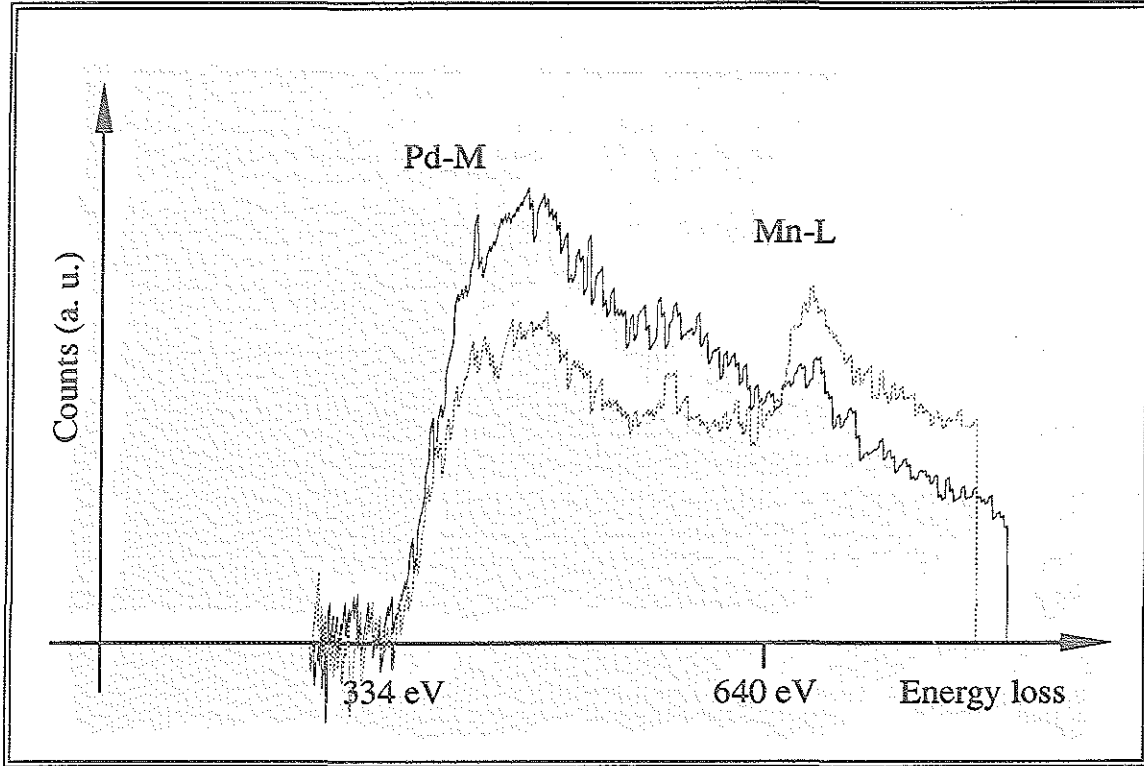


Abbildung 8.16: EELS-Spektren aufgenommen an der Lamelle (gestrichelte Linie) und der Matrix (durchgezogene Linie). Die jeweilige Maxima der Kurven können der Pd  $M_{4,5}$  und der Mn  $L_{2,3}$  Kante zugeordnet werden.

Gittervektoren liegen müssen, d.h. in den Ebenen senkrecht zu diesen Richtungen. Zeichnet man nun auch diese in die stereographische Projektion ein, so ergibt sich der Hauptverschiebungsvektor durch die Schnittgerade der einzelnen Ebenen. In Abbildung 8.18 ist diese Konstruktion ausgeführt. Für die linke Versetzung ergibt sich so, daß die Hauptkomponenten ihres Verschiebungsfeldes  $\vec{u}_{||}^l$  in  $E_{||}$  parallel zur  $[0/0, 1/0, 0/1]$ -Richtung liegt. Die Hauptkomponente des Verschiebungsfeldes  $\vec{u}_{||}^r$  der rechten Versetzung ist parallel zu  $[0/0, \bar{1}/0, 0/1]$ . Eine entsprechende Analyse für die Verschiebungsfelder im orthogonalen Raum ergibt  $\vec{u}_{\perp}^l \parallel [0/0, 0/\bar{1}, 1/0]$  und  $\vec{u}_{\perp}^r \parallel [0/0, 0/1, 1/0]$ . Alle diese Richtungen sind fünfzählig, wobei keine davon parallel zur Ebenennormalen  $\vec{n} \parallel [1/0, 0/\bar{1}, 0/0]$  liegt.

Eine andere Möglichkeit, die Richtungen der Verschiebungsfelder zu bestimmen, besteht in der Lösung des Gleichungssystems, das durch die Skalarprodukte der starken Auslöschbedingungen gegeben wird.

$$\vec{g}_{||}^i \vec{u}_{||} = 0 \quad (8.2)$$

Zur Analyse der linken Versetzung sind die reziproken Gittervektoren 3,4,5 und 6, für die rechte Versetzung die Vektoren 7,8,3 und 4 für die reziproken Gittervektoren  $\vec{g}_{||}^i$  aus Tabelle 8.1 einzusetzen. Benutzt man die sechsdimensionale Darstellung der reziproken Gittervektoren (für die Umrechnung siehe Anhang A.1), ergeben sich für die linke und

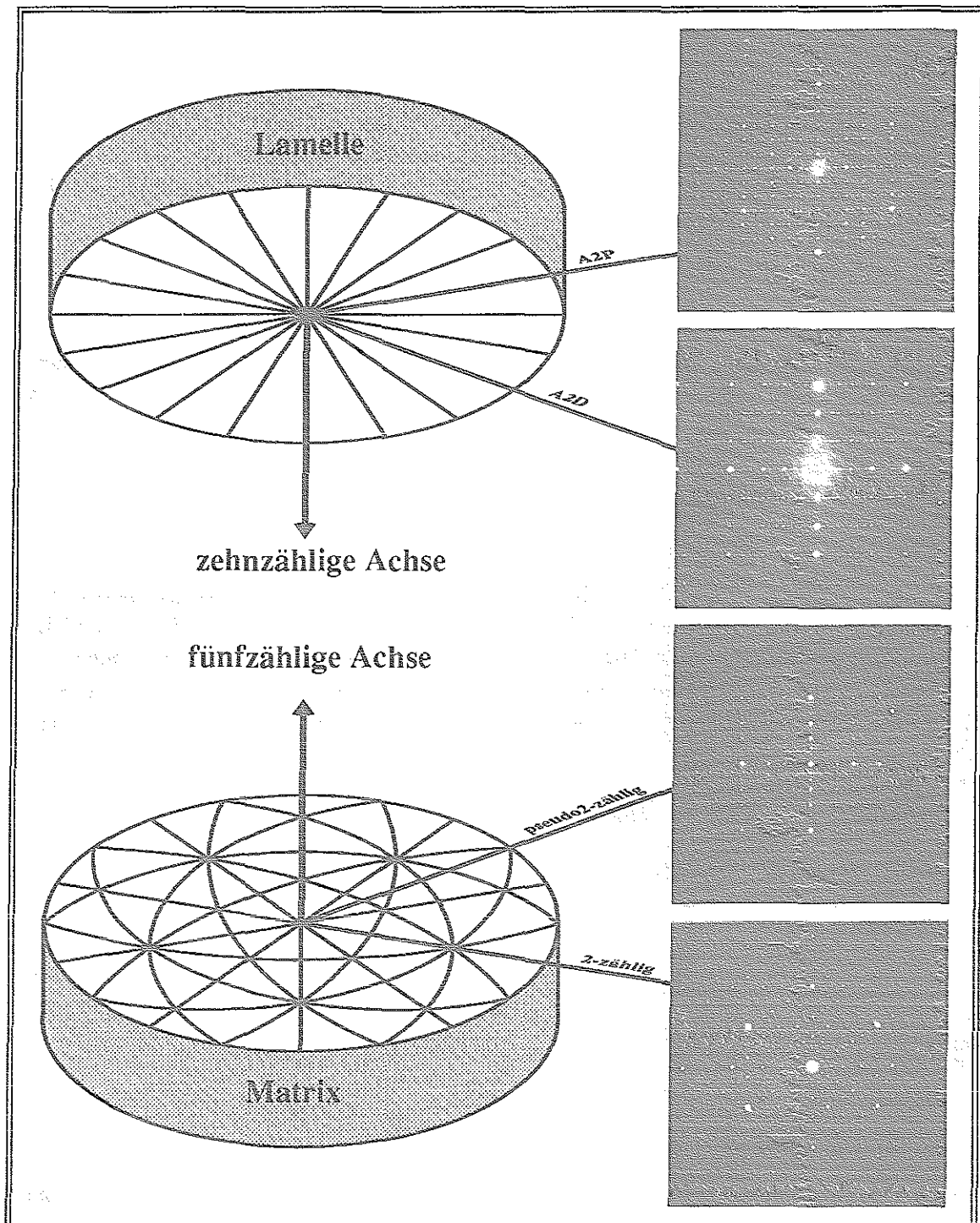


Abbildung 8.17: Schematische Darstellung der Orientierungsbeziehung zwischen der ikosaedrischen Matrix und den dekadonen Lamellen. Beugungsbilder die entlang der verschiedenen zweizähligen Achsen sind ebenfalls dargestellt (für die dekadonale Phase aus [11].

rechte Versetzung die folgenden homogenen Gleichungssysteme:

| linker Defekt                                                        | rechter Defekt                                                                         |       |
|----------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------|-------|
| $\vec{G}^3 \vec{U}^l = (1, 2, 0, \bar{1}, 2, 0) \cdot \vec{U}^l = 0$ | $\vec{G}^7 \vec{U}^r = (\bar{2}, \bar{2}, \bar{1}, 0, \bar{1}, 0) \cdot \vec{U}^r = 0$ |       |
| $\vec{G}^4 \vec{U}^l = (2, 3, 0, \bar{2}, 3, 0) \cdot \vec{U}^l = 0$ | $\vec{G}^8 \vec{U}^r = (\bar{3}, \bar{3}, \bar{2}, 0, \bar{2}, 0) \cdot \vec{U}^r = 0$ | (8.3) |
| $\vec{G}^5 \vec{U}^l = (0, 2, 0, \bar{2}, 1, 1) \cdot \vec{U}^l = 0$ | $\vec{G}^3 \vec{U}^r = (1, 2, 0, \bar{1}, 2, 0) \cdot \vec{U}^r = 0$                   |       |
| $\vec{G}^6 \vec{U}^l = (0, 3, 0, \bar{3}, 2, 2) \cdot \vec{U}^l = 0$ | $\vec{G}^4 \vec{U}^r = (2, 3, 0, \bar{2}, 3, 0) \cdot \vec{U}^r = 0$                   |       |

Da nur vier Gleichungen für sechs Unbekannte aufgestellt werden können, enthält jeder Lösungsvektor jeweils zwei unbestimmte Parameter. Die Lösungen dieser Gleichungssysteme lauten dann:

$$\begin{aligned}
 \vec{U}^l &= (\bar{q}, \bar{q}, q, \bar{q}, q, \bar{p}) \\
 \text{und} \\
 \vec{U}^r &= (r, \bar{r}, \bar{r}, r, r, s).
 \end{aligned} \tag{8.4}$$

Obwohl für den linken Defekt mehr als vier Auslöschungen der starken Bedingung beobachtet wurden, bringt dies keine weitere Erhöhung der Gleichungsanzahl, da die zusätzlichen Gleichungen nicht linear unabhängig von den bereits aufgestellten vier Gleichungen sind.

Für jeden Defekt beschränken diese Vektoren das Hauptverzerrungsfeld auf eine zweidimensionale Ebene innerhalb des sechsdimensionalen Hypergitters. Eine der jeweils zwei Unbekannten kann jedoch noch eliminiert werden, da für jeden Defekt zusätzlich die schwache Auslöschbedingung beobachtet wurde.

Hier ergeben sich dann die Gleichungen:

| linker Defekt                      | rechter Defekt                      |       |
|------------------------------------|-------------------------------------|-------|
| $\vec{G}^2 \vec{U}^l = 3q - p = 0$ | $\vec{G}^5 \vec{U}^r = -3r + s = 0$ | (8.5) |
| $\Leftrightarrow p = 3q$           | $\Leftrightarrow s = 3r$            |       |

Damit erhält man dann

| linker Defekt                                             | rechter Defekt                                  |       |
|-----------------------------------------------------------|-------------------------------------------------|-------|
| $\vec{U}^l = q(\bar{1}, \bar{1}, 3, \bar{1}, 1, \bar{1})$ | $\vec{U}^r = r(1, \bar{1}, \bar{1}, 1, 1, 3)$   |       |
| $\vec{u}_{  }^l = q(0/0, 4/\bar{2}, \bar{2}/2)$           | $\vec{u}_{  }^r = q(0/0, \bar{4}/2, \bar{2}/2)$ | (8.6) |
| $\vec{u}_{\perp}^l = q(0/0, \bar{2}/\bar{4}, 2/2)$        | $\vec{u}_{\perp}^r = q(0/0, 2/4, 2/2)$          |       |

Wie in Kapitel 6.4.3 gezeigt wird, kann aus der Beobachtung zweier erfüllter starker und einer schwachen Auslöschbedingung geschlossen werden, daß das Verzerrungsfeld des untersuchten Gitterfehlers entlang einer Vorzugsrichtung im sechsdimensionalen Hypergitter

wirkt. Diese Kontrastphänomene treten bei den hier untersuchten Defekten auf, so daß hier die Verzerrungsfelder durch einen Vektor, entsprechend dem Burgersvektor einer Versetzung, charakterisiert werden können. Dies ist das erste Mal, daß die Burgersvektorrichtung von Versetzungen in ikosaedrischen Quasikristallen vollständig bestimmt werden konnte [179, 180].

Berechnet man das Amplitudenverhältnis der Verzerrungsfelder in den Unterräumen  $E_{||}$  und  $E_{\perp}$ , so findet man

$$c^l = c^r = \frac{\vec{u}_{\perp}^r}{\vec{u}_{||}^r} = \sqrt{\frac{28 + 44\tau}{28 - 16\tau}} \simeq 7. \quad (8.7)$$

Das bedeutet, daß die Amplitude des Verzerrungsfeldes in  $E_{\perp}$  wesentlich größer ist als die Komponente in  $E_{||}$ . Somit erscheint es energetisch günstiger, phasonenartige Defekte einzubauen, als das Gitter durch Verzerrungen im  $E_{||}$  zu stören. Dieses Verhältnis liegt in der gleichen Größenordnung wie der bei den Versetzungsanalysen in ikosaedrischen AlCuFe-Quasikristallen gefundene Wert (Kapitel 8.1).

Desweiteren steht dieses Ergebnis im Einklang mit den Untersuchungen, die Menguy et al. an solchen Ausscheidungen durchgeführt haben [122]. In einer zeitgleich veröffentlichten Arbeit untersuchten sie die Beugungsbilder der ikosaedrischen Phase in der Nähe der Ausscheidungen und konnten aus den Verschiebungen der Reflexe aus ihren idealen Positionen zwei Matrizen bestimmen, die diese Verschiebungen in linearer Abhängigkeit beschreiben. Dabei hat es sich herausgestellt, daß die phasonenartigen Verzerrungen ebenfalls klein gegenüber den phasonenartigen sind und parallel zu einer zweizähligen Achse verlaufen (die genaue Richtung ist in jener Arbeit nicht angegeben). Man beachte, daß die Summe der in dieser Arbeit gefundenen Burgersvektoren in  $E_{||}$  ebenfalls parallel zu einer zweizähligen Achse verläuft. Die Matrizen in jener Arbeit beschreiben nur die Verzerrungen senkrecht zu einer der zweizähligen Achsen, die innerhalb der Grenzflächenebene liegen. Die Bestimmung eines linearen und dreidimensionalen Verzerrungsfeldes ist auf der Basis der bereits bestimmten Matrizen nicht möglich. Die Autoren vermuten einen komplexeren Verlauf der Verzerrungsfelder, zum Beispiel mit Phasonen-Ringen, ähnlich Versetzungsringen.

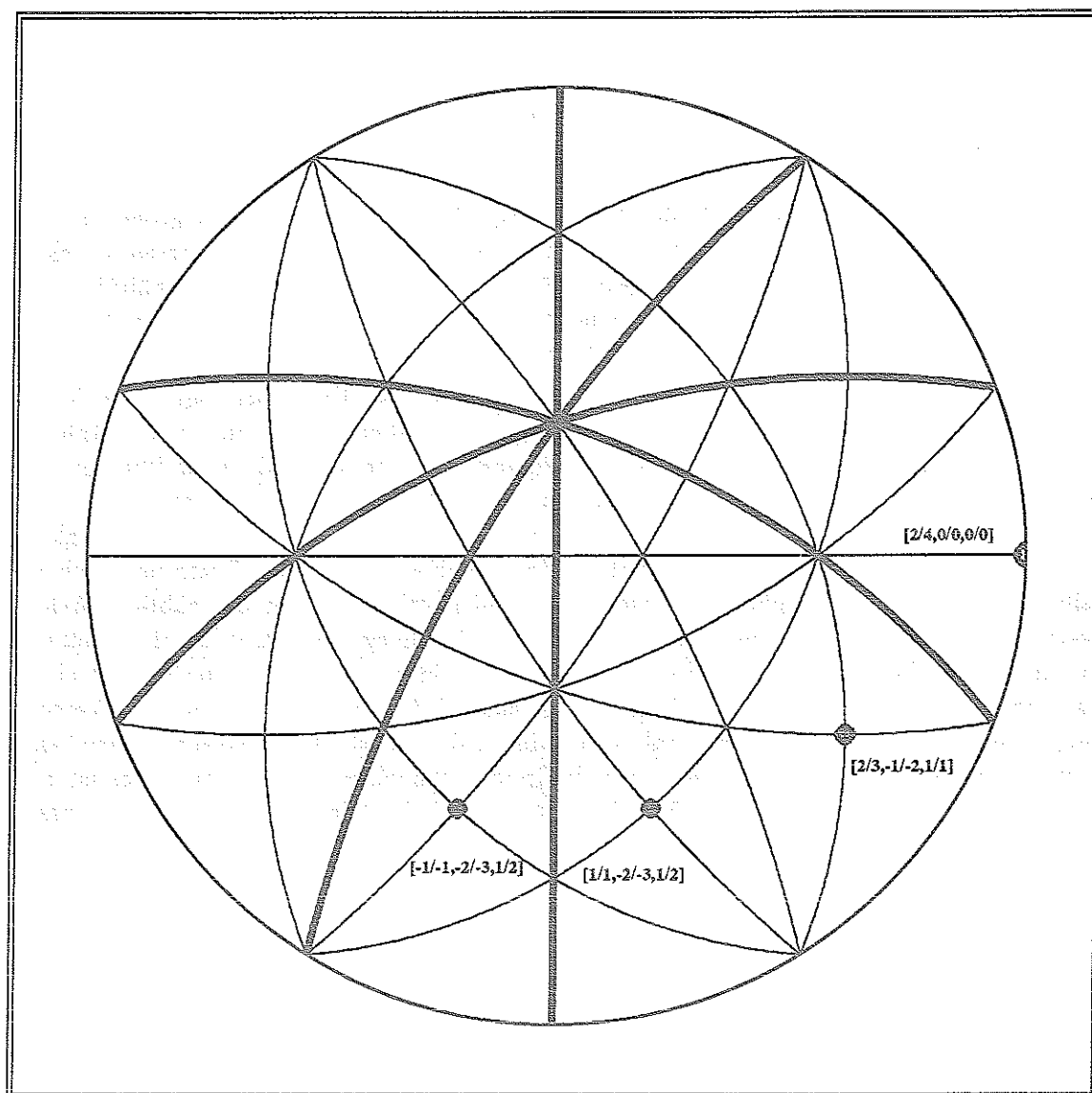


Abbildung 8.18: Die Richtungen der reziproken Gittervektoren  $\vec{g}_{||}^i$  in  $E_{||}$ , für die die starke Bedingung bei der linken Versetzung erfüllt ist, eingetragen in eine stereographische Projektion der ikosaedrischen Symmetrieachsen. Die dazu senkrechten Ebenen sind fett eingezeichnet. Ihr Schnittpunkt bestimmt die Hauptrichtung des Verschiebungsfeldes.

Das folgende Experiment als auch die darauffolgend vorgestellten Untersuchungen befassen sich mit der Untersuchung der plastischen Eigenschaften von ikosaedrischen Quasikristallen. Um die dabei im Gitter auftretenden Effekte zu untersuchen, benötigt man große einquasikristalline Proben. Solche Proben standen bislang nicht zur Verfügung. Daher stellt die erstmals von Yokoyama et al. [187] berichtete und auch im Rahmen dieser Arbeit erfolgreich durchgeführte Czochralskizüchtung einen großen Fortschritt in der Probenpräparation dar.

### 8.3 Raumtemperatur-Verformungsexperimente an AlPdMn-Einquasikristallen

#### 8.3.1 Probenpräparation und Versuchsdurchführung

Aus einem mit der Czochralskimethode hergestellten Einquasikristall werden zunächst Platten mit den Abmessungen  $8 \times 8 \times 2 \text{ mm}^3$  ausgesägt. Die Probe wurde zuvor so orientiert, daß der Normalenvektor der großen Plattenfläche parallel zu einer zweizähligen Richtung des Quasikristalls liegt. Anschließend werden diese Flächen geschliffen und poliert.

Mit einem Mikroindenter (Modell Leitz Durimet) werden nun bei Raumtemperatur parallel angeordnete Gräben eingeritzt. Die Probe ist dazu auf einem Kreutztisch fixiert und wird bei aufgesetztem Prüfkörper mit Hilfe einer Mikrometerschraube manuell verfahren. Das Prüfungsgewicht beträgt hierfür 100 g. Bei dem Prüfkörper handelt es sich um einen nach Vickers geschliffenen Diamanten, dessen Flächen um 45 Grad zur Zugrichtung gedreht liegen. Die Ziehgeschwindigkeit beträgt etwa  $50 - 100 \mu\text{ms}^{-1}$ . Die Furchen haben einen Abstand von  $100 \mu\text{m}$  und liegen ebenfalls parallel zu einer zweizähligen Richtung des Quasikristalls.

Ebenso wurde mit diesem Gerät die Härte der Legierung bestimmt (Prüfungsgewicht dazu: 50 g).

Nachdem etwa 40 Furchen eingebracht sind, werden zwei derart vorbereitete Platten mit den geritzten Seiten aufeinandergeklebt.

Aus diesem Paket sägt man nun 1 mm starke Scheiben, so daß deren Normalenvektor zu der Furchenrichtung parallel ist. Da diese Richtung mit der Beobachtungsrichtung im Transmissionselektronenmikroskop zusammenfällt, sieht man die Gräben hier dann im Querschnitt.

Mit einem Ultraschallschneider werden aus diesen Plättchen dann Proben mit 3 mm Durchmesser ausgestanzt, wobei die Klebnaht durch die Mitte der Scheibe läuft. Daran anschließend werden diese Proben wie im Kapitel 7.3 beschrieben für eine Untersuchung im Transmissionselektronenmikroskop vorbereitet (Schleifen, Dimpeln, Ionendünnen).

#### 8.3.2 Experimentelle Resultate

Die Auswertung von 20 Prüfkörpereindrücken ergibt eine Härte von  $775 \pm 40 \text{ HV}$ .

Abbildungen 8.19 und 8.20 zeigen Aufnahmen, die mit einem Rasterelektronenmikroskop an den geritzten Platten gewonnen wurden, bevor diese zusammengeklebt worden

waren. Die Breite der Gräben liegt bei etwa  $20\ \mu\text{m}$ . Berücksichtigt man die Neigung der

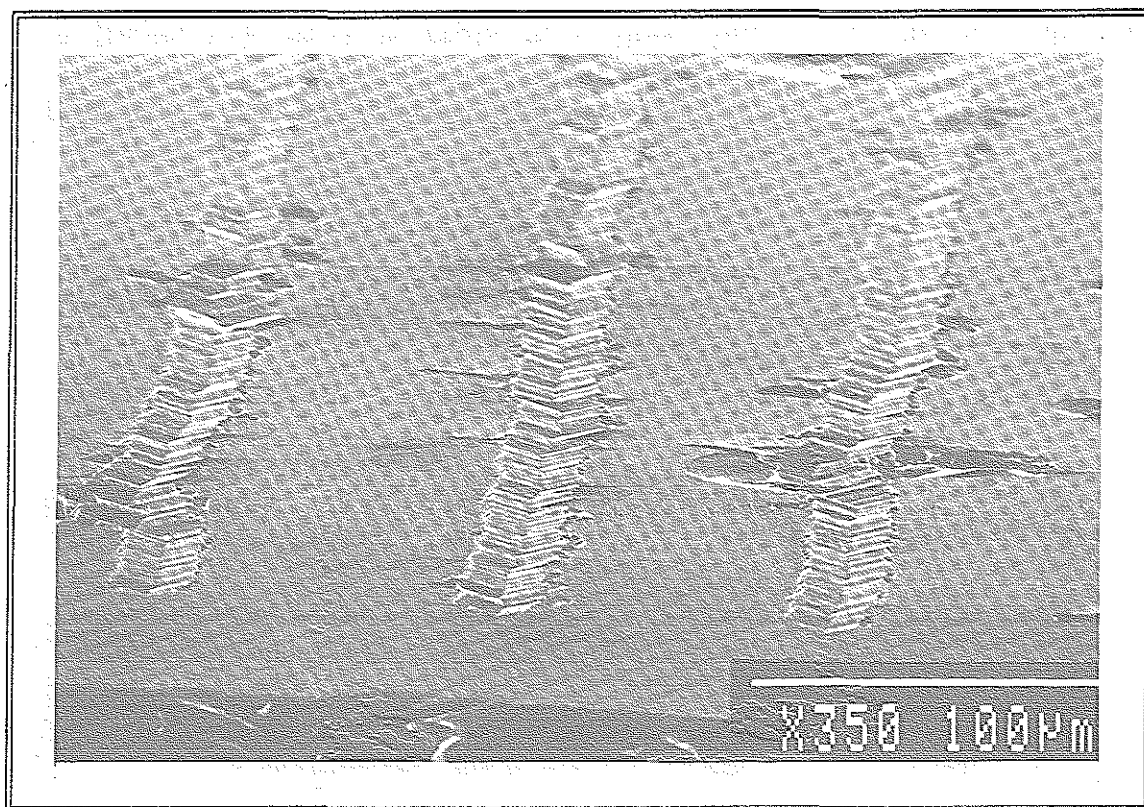


Abbildung 8.19: Rasterelektronenmikroskopische Aufnahme von Gräben auf der Oberfläche eines AlPdMn-Einphasikristalls, die mit Hilfe eines Mikrohärteprüfgerätes eingebracht wurden.

Prüfkörperflächen und bedenkt, daß nur zwei dieser vier Flächen Kontakt mit der Probe haben, kann der Druck auf die Probe zu etwa 9 GPa abgeschätzt werden.

Diese Aufnahmen zeigen, daß hier das Mikropflügen [63] ein wesentlicher makroskopischer Verformungsmechanismus ist. Das Probenmaterial wird zur Seite weggedrückt, ohne daß dabei Risse entstehen (duktile Verformung). Allerdings kann auch ein Materialabtrag in Form von feinen Splintern beobachtet werden, der auf Sprödbbruch zurückgeführt werden muß. Die Folgen eines solchen Verschleißes sind in Abbildung 8.20 am Beginn der Ritzspur als muschelförmiger Ausbruch auf der rechten Grabenseite sichtbar.

Die nächsten Bilder zeigen transmissionselektronenmikroskopische Aufnahmen. Abbildung 8.21 zeigt die Querschnittsprobe bei niedriger Vergrößerungen. Man erkennt deutlich die Lage und die Form der Gräben.

In den Abbildungen 8.22 (a)–(c) sind nun Beugungsbilder zu sehen, die an Bereichen neben und direkt in einer Furche aufgenommen worden sind. Während die Probe neben den Gräben ein ungestörtes Beugungsbild in zweizähliger Orientierung liefert, zeigen die

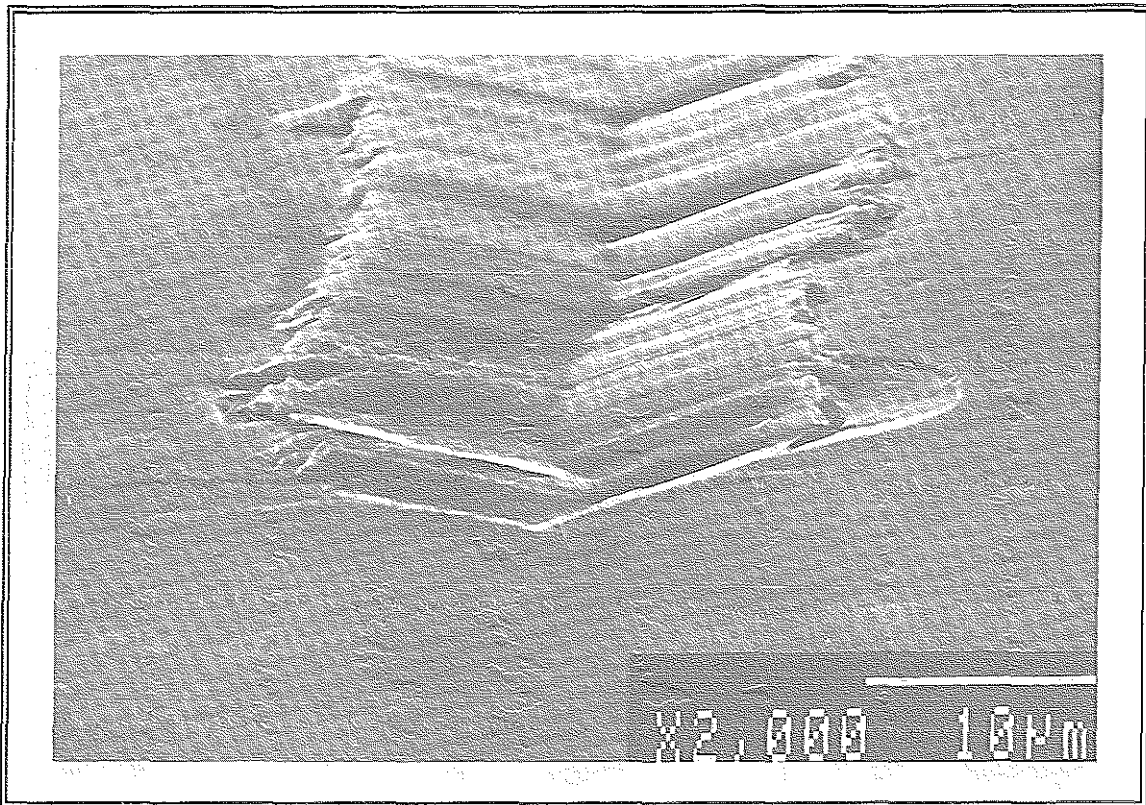


Abbildung 8.20: Detailaufnahme einer Ritzspur aus Abbildung 8.19. Mikropflügen ist hier als ein Verformungsmechanismus erkennbar.

anderen Bilder, daß die Struktur im Bereich der Ritzspuren stark gestört sein muß. Die Reflexe sind radial über mehrere Winkelgrade ausgeschmiert.

Abbildung 8.23 zeigt eine Hellfeldaufnahme, die innerhalb eines Grabens gewonnen wurde. Bei den durch die Probe laufenden Bändern aus dunklen Linien handelt es sich um Biegekonturen [132, 54]. Diese kreuzen sich mitunter, und aus der Symmetrie dieser Kreuzungspunkte können die Pole abgeleitet werden, die sich an dieser Probenstelle in symmetrischer Laueorientierung befinden. In Abbildung 8.23 finden sich ein pseudzweizähliker ( $1\text{ }\mu\text{m}$  über der Bildmitte) und ein dreizähliger Pol (Bildmitte). Unter Berücksichtigung der Ikosaedersymmetrie liegen diese normalerweise  $10.8^\circ$  auseinander. Daraus kann auf eine Verbiegung der Probe um diesen Betrag innerhalb eines Mikrometers geschlossen werden.

An einigen Stellen sind die Biegekonturen unterbrochen und verlaufen dann versetzt weiter. Bei der Kontur, die die beiden Pole verbindet, beträgt dieser Versatz gerade eine Bandbreite. Die äußeren Biegekonturen eines Bandes können auf Reflexe vom Typ  $(0/0,0/0,4/6)$  zurückgeführt werden. Bei der benutzten Elektronenenergie von  $200\text{ keV}$  entspricht dieser Versatz dann einer abrupten Verkipfung der Probe um etwa  $3^\circ$ .

Abbildung 8.24 zeigt ein weiteres Hellfeldbild aus einem Furchenbereich. Auffällig sind hier die über einen größeren Bereich auftretenden dunklen Kontraste in Form von kurzen, breiten Linien. Bei einer systematischen Untersuchung des Beugungskontrastes konnten

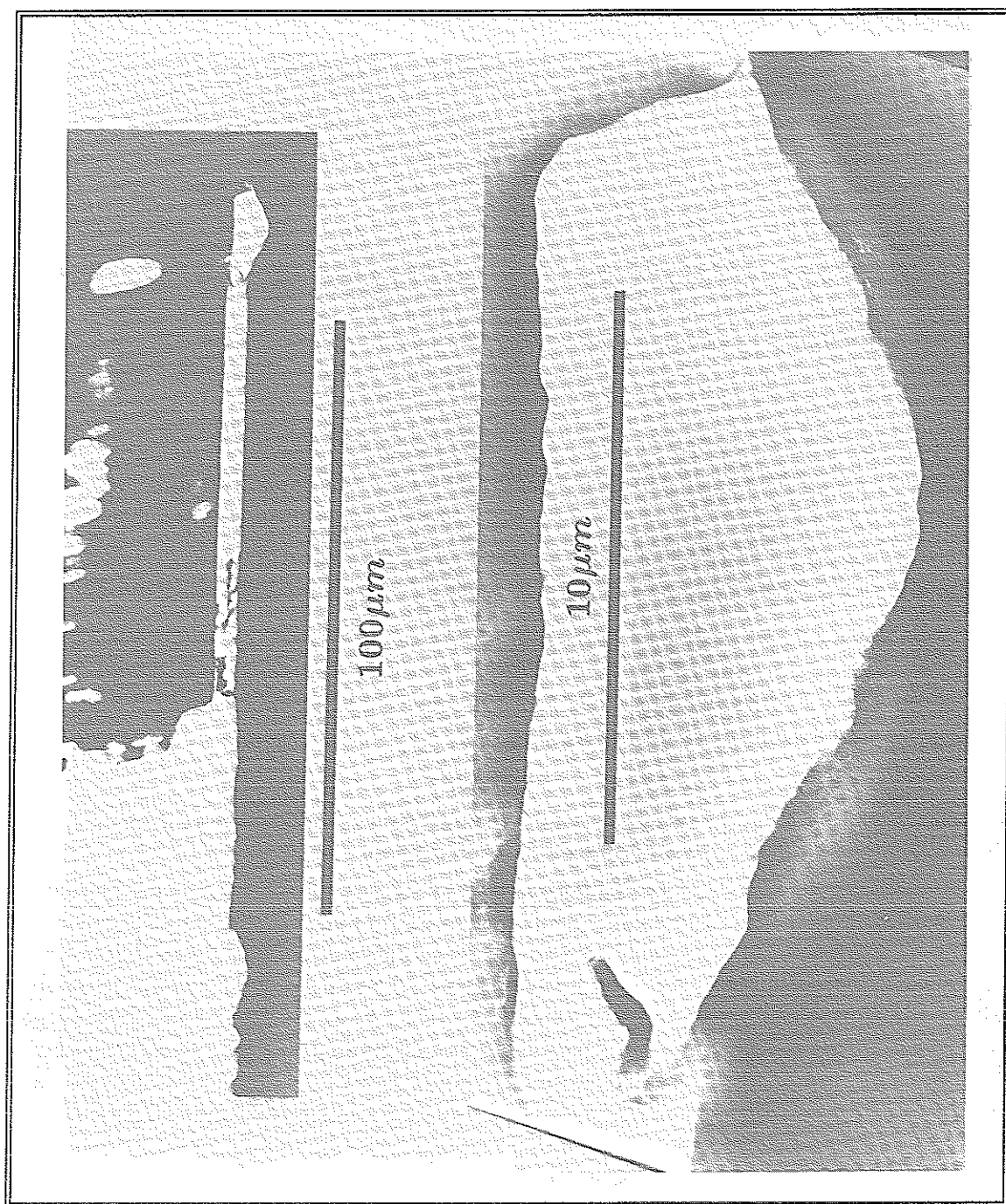


Abbildung 8.21: Elektronenmikroskopische Querschnittsaufnahmen von Ritzspuren in einem AlPdMn-Einphasenkristall. Im oberen Bild sind in der unteren Probenhälfte zwei Gräben sichtbar. Der rechte ist im unteren Bild nochmals vergrößert abgebildet.

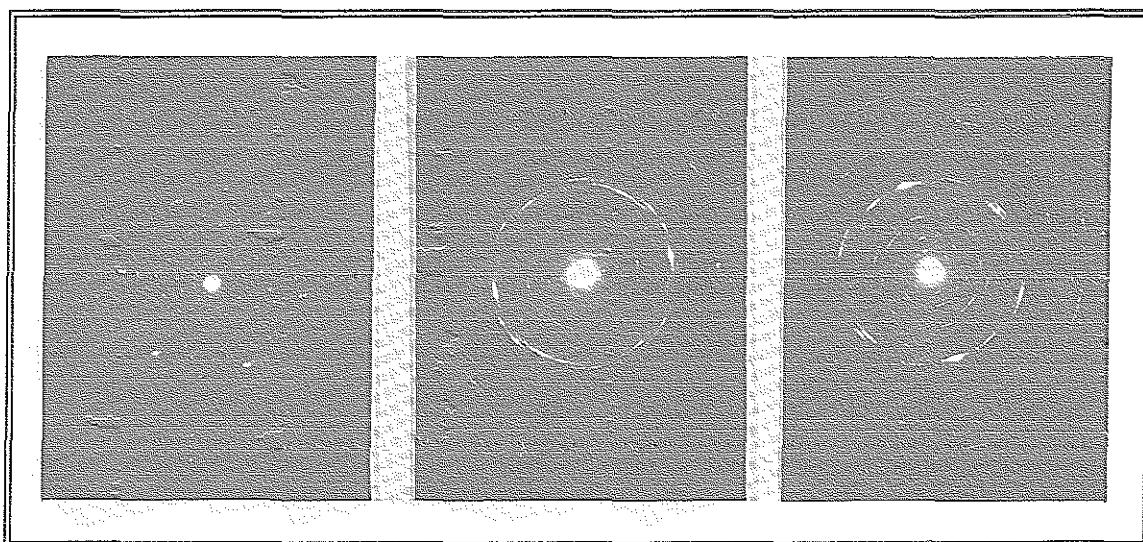


Abbildung 8.22: Elektronenbeugungsbilder aufgenommen neben einem Graben (links) und direkt im Grabenbereich, (Mitte) und (rechts). Das linke Beugungsbild zeigt eine ungestörte zweizählige Orientierung

keine charakteristischen Auslöschungen gefunden werden, so daß es sich hier nicht um Versetzungen handelt.

Durch Kippen der Probe kann allerdings gezeigt werden, daß sich diese Kontraste innerhalb von Ebenen anordnen. Der untere Teil von Abbildung 8.24 zeigt nun eine solche Ebene mit Blick auf ihre Kante. Deutlich erkennt man feine Risse in der Probe. Diese Risse sind nur wenige 100 Nanometer lang, und obwohl sie alle in etwa einer Ebene liegen, sind sie nicht alle miteinander verbunden. Jeder einzelne Riß ist zudem nicht gerade, sondern zeigt einen leicht geschwungenen Verlauf. An den Rißufern zeigen die deutlich gewundenen Biegekonturen, wie stark die Probe verspannt ist [165].

Auch konnten an anderen Stellen keine Versetzungen in der Probe gefunden werden. Diese Aussage beschränkt sich auf die ikosaedrische Phase in der Probe. Abbildung 8.25 zeigt eine Hellfeldaufnahme, die ebenfalls in der Nähe einer Ritzspur aufgenommen wurde. Hier sind eine große Zahl von Versetzungen deutlich sichtbar. Der Streifenkontrast der von jeder Versetzung ausgeht kann als Gleitspur interpretiert werden und deutet auf eine Bewegung der Versetzungen in der Proben hin. Dieser Probenbereich ist aber *nicht* quaskristallin. Ein in diesem Bereich aufgenommenes Beugungsbild (Abbildung 8.26) zeigt klar eine periodische Anordnung der Beugungsreflexe. Diese kristallinen Ausscheidungen treten in geringer Häufigkeit ( $< 5\%$ ) in der mit der Czochralskimethode gezüchteten Kristallen auf. Daß die Ritzspur gerade in der Nähe einer solchen Ausscheidung vorbeiläuft, kann somit als zufällig gelten. Das Beugungsbild wurde nicht im Detail analysiert, aber es dürfte sich hier um einen Approximanten der ikosaedrischen oder der dekadonalen Phase handeln.

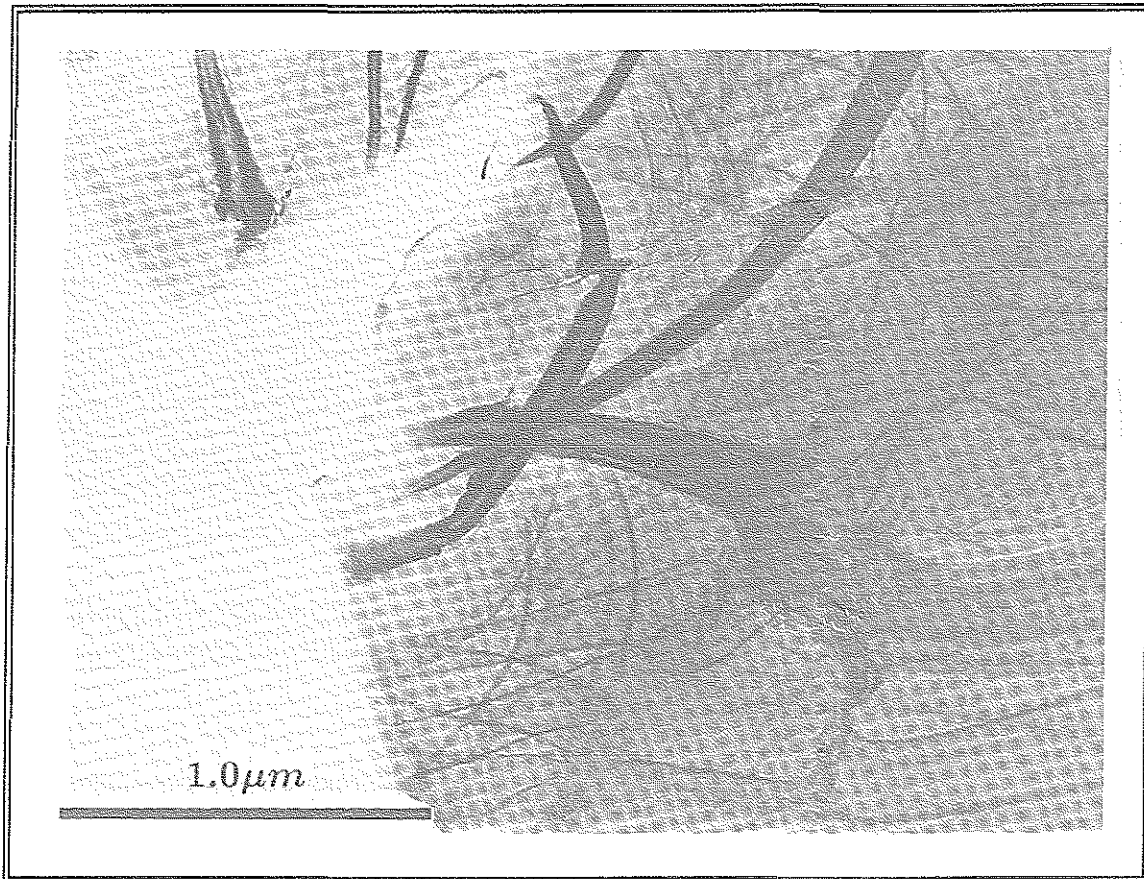


Abbildung 8.23: Hellfeldaufnahme, aufgenommen in einem Graben. Die durch die Probe laufenden Linien sind Biegekonturen, die auf drastische Orientierungsänderungen innerhalb der Probe hindeuten.

### 8.3.3 Diskussion

Die Härte von 775 HV liegt in einem für Quasikristalle typischen Rahmen (siehe Kapitel 2.4).

Wie bereits bei früheren Untersuchungen an anderen Systemen gezeigt werden konnte [167, 140, 48, 175], zeigen Quasikristalle duktilen Verformungsverhalten bei hoher Härte. Diese Aussage kann aufgrund der hier gewonnenen Ergebnisse zum Teil auch für quasikristallines AlPdMn getroffen werden. Allerdings wurde auch Spröddbruch beobachtet. Aufgrund der einfachen Versuchsanordnung ist dies sicherlich als ein qualitatives Ergebnis zu werten und muß durch weitere Untersuchungen differenziert werden. Dabei sollten als Versuchsparameter die Ziehgeschwindigkeit und das Auflagegewicht des Prüfkörpers variiert werden, um zu überprüfen, welche Auswirkungen sie auf den makroskopischen Verformungsmechanismus haben.

Bei der Untersuchung im Elektronenmikroskop wurden keine Versetzungen in der ikosaedrischen Phase gefunden.

Dieses Ergebnis steht zunächst im Widerspruch zu der kürzlich erschienenen Arbeit von

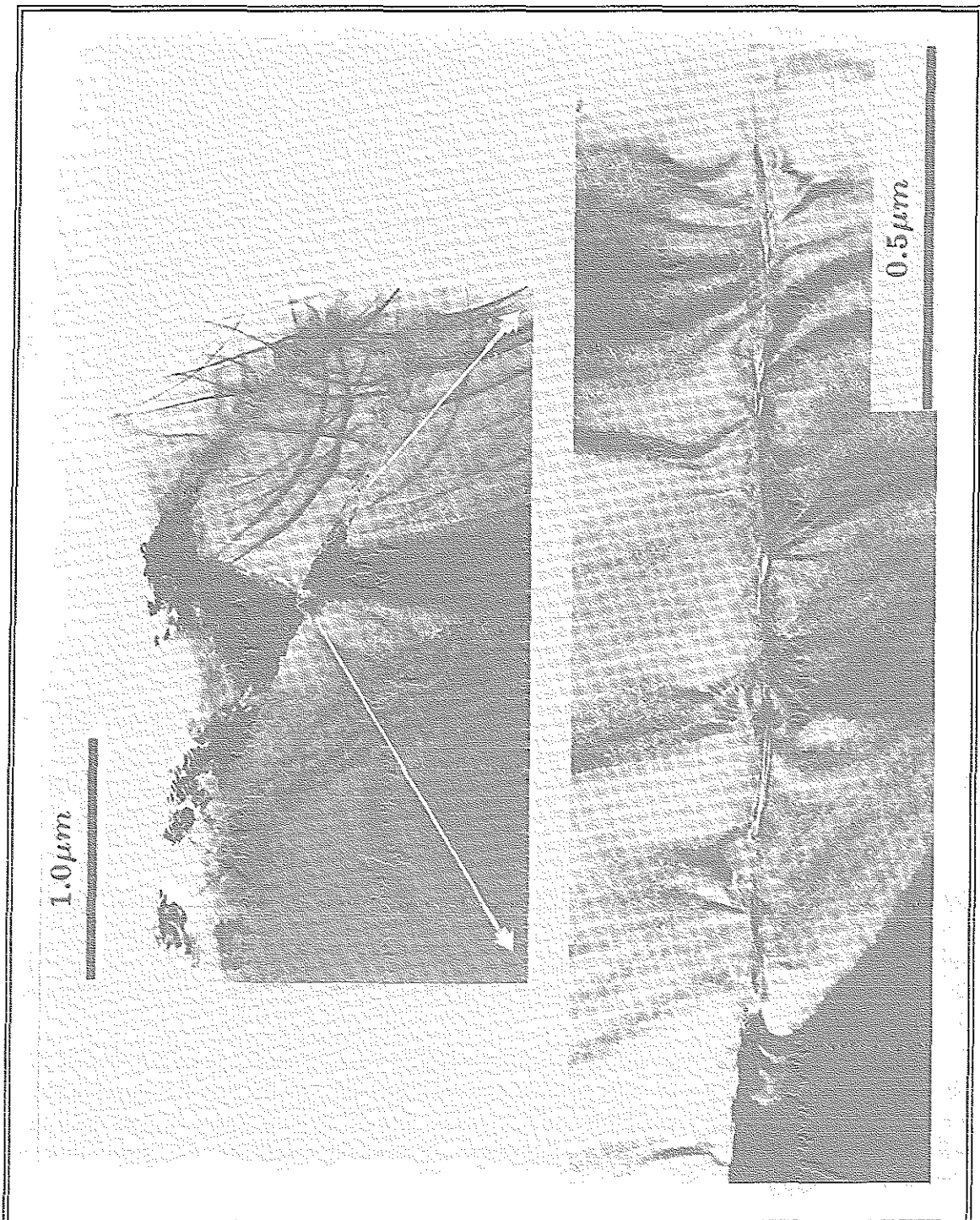
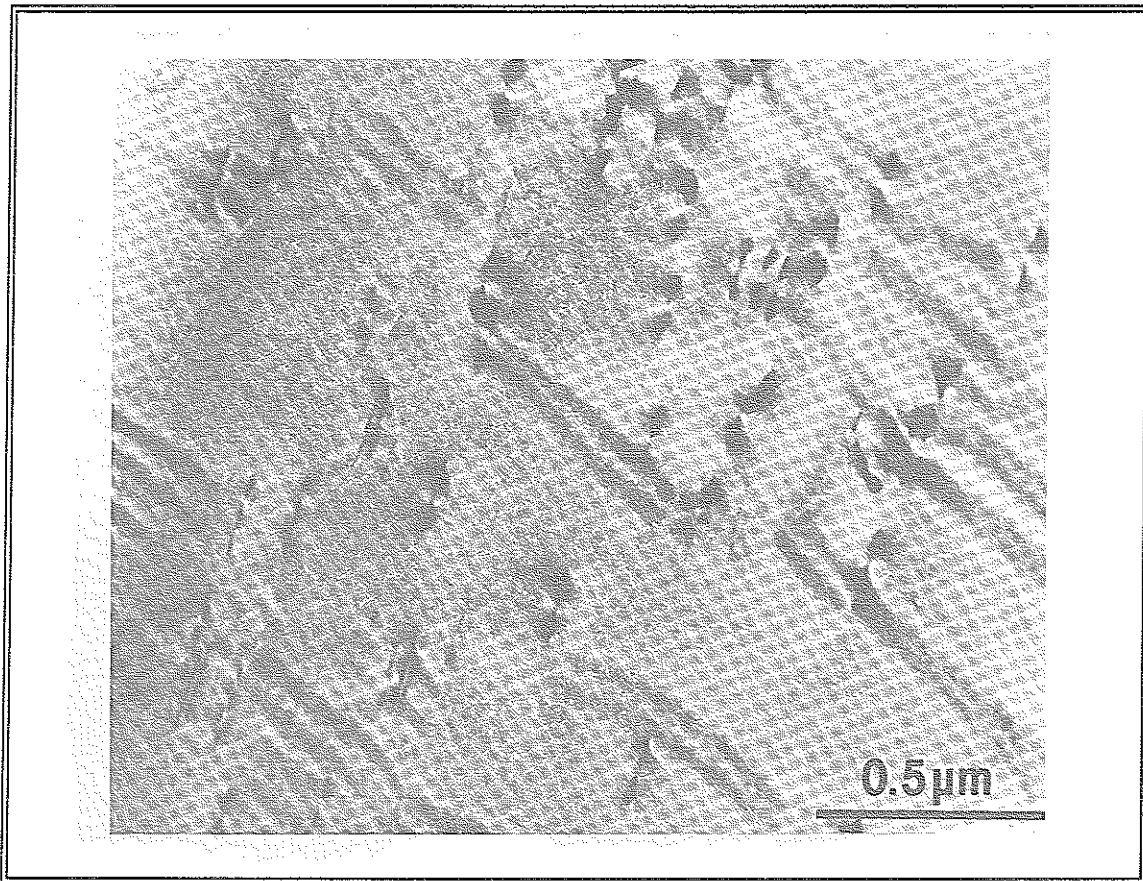


Abbildung 8.24: Hellfeldaufnahme, aufgenommen in einem Graben. Auffällig sind die über weite Bereiche auftretenden Kontraste. Diese sind in Ebenen angeordnet. Das untere Bild zeigt eine solche Ebene von der Seite. Deutlich sind feine Risse zu erkennen.



*Abbildung 8.25: Hellfeldaufnahme, aufgenommen in der Nähe einer Ritzfurche. Deutlich erkennt man eine große Zahl von Versetzungen mit anschließenden Gleitspuren.*

Takeuchi et al. [151], in der von Versetzungsbeobachtungen in quasikristallinen AlPdMn berichtet wird. Diese Versetzungen wurden in der Nähe von Eindrücken gefunden, die mit einem Mikroindenter bei Raumtemperatur in die Probe eingebracht worden waren. Die veröffentlichte Aufnahme zeigt Versetzungen mit Kontrasten, die mit einer Gleitung der Versetzungen erklärt werden.

Vergleicht man die in der Veröffentlichung abgebildeten Versetzungen mit denen der Abbildung 8.25, so stellt man eine frappierende Ähnlichkeit der Kontraste einschließlich der Gleitspuren fest. Beugungsbilder sind in jener Arbeit nicht gezeigt, so daß doch ein gewisser Zweifel an der dortigen Interpretation angebracht erscheint, die Versetzungen würden in der quasikristallinen Phase vorliegen.

Die genaue Versuchsdurchführung ist dort ebenfalls nicht beschrieben, allerdings besteht in der Belastungsgeometrie ein wesentlicher Unterschied zwischen jener Arbeit und dem hier beschriebenen Experiment.

Bei einem Härteeindruck wird die Probe hauptsächlich komprimiert und statisch belastet. Bei einem Ritzversuch wird die Probe nicht nur gestaucht, sondern durch die Bewegung des Prüfkörpers ebenfalls hohen Scherbelastungen ausgesetzt. Diese Belastungen

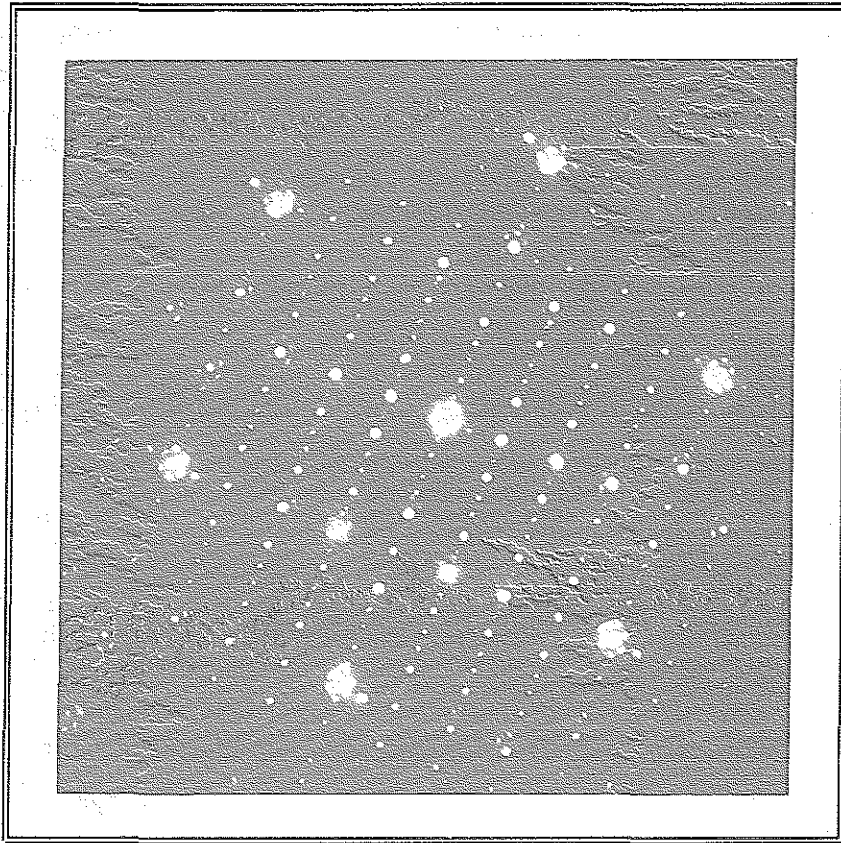


Abbildung 8.26: Beugungsbild, aufgenommen in dem in Abbildung 8.25 gezeigten Bereich. Die periodische Anordnung der Beugungreflexe identifiziert diese Phase als kristallin.

führen bei duktilen Materialien zu dem auch hier beobachteten Mikropflügen. Es zeigt sich aber auch, daß ein Teil dieser Kräfte außerdem durch Spröbruch abgebaut wird. Die unterschiedliche Versuchsgeometrie könnte ein Grund dafür sein, daß in dieser Arbeit keine Versetzungen beobachtet werden konnten. Stattdessen werden hier Mikrorisse gefunden. Suzuki et al. beobachteten solche Mikrorisse bei *in-situ*-Verformungsexperimenten im Transmissionselektronenmikroskop in AlMn-Quasikristallen [150], ebenfalls bei Raumtemperatur durchgeführt. Auch konnten bei der Untersuchung von Härteeindrücken in AlCuFe-Quasikristallen im Transmissionselektronenmikroskop keine Anzeichen für eine Versetzungsbildung gefunden werden [165].

Mikrorisse findet man auch in umwandlungsverstärkten keramischen Werkstoffen. Hier werden  $\text{ZrO}_2$ -Teilchen in einer keramischen Matrix dispergiert, welche bei Abkühlung eine Phasenumwandlung von der tetragonalen zur monoklinen Modifikation durchlaufen. Diese Transformation ist mit einer Volumenänderungen verbunden, die zur Ausbildung von Mikrorissen führt. Bei einer Belastung können diese vorhandenen und die dann auch zusätzlich entstehenden Risse einen Teil der Bruchenergie aufnehmen und so den Wert der Bruchspannung erhöhen [32].

Mit der in dieser Arbeit beobachteten Mikrorißbildung findet eine Unterteilung der Probe in einzelne Körner statt, die gegeneinander um einige Grad verkippt sind. Diese

Subkornbildung kann in den Beugungsbildern in der radialen Reflexaufweitung und bei den Hellfelddbildern entlang der Biegekonturen in deren Versatz beobachtet werden. Durch diese Subkornbildung wird das Abgleiten über Korngrenzen als weiterer Verformungsmechanismus ermöglicht. Findet diese Gleitung so statt, daß die Subkörner nach der Bewegung wieder direkten Kontakt miteinander haben, kann dies zu einem kalten Verschweißen der Subkörner führen. Dies würden dann auch erklären, daß das Material trotz der Reißbildung nicht völlig auseinanderfällt.

Anzeichen für eine solche Verfestigung liefern die Biegekonturen in der Nähe der Mikrorisse. Ihr Auftreten und ihr darüberhinaus deutlich gewundener Verlauf zeigen, daß die Subkörner in ihren Korngrenzen unter mechanischen Spannungen stehen. Das bedeutet aber, daß die Mikrorisse nicht durchgängig sein können und die Probenbereiche hier festen Kontakt miteinander haben. Diese Verbindung verhindert die Relaxation der Spannungen an den Korngrenzen.

Die hier beobachtete Mikrorißbildung stellt demnach neben der von Takeuchi et al. gefundenen (aber zweifelhaften) Versetzungsbildung einen weiteren Mechanismus der plastischen Verformung der Quasikristalle bei Raumtemperatur dar. Wie im folgenden Kapitel noch erläutert wird, ist die plastische Verformung bei Quasikristallen ein deutlich thermisch aktivierter Prozeß, bei dem sich Versetzungen in hoher Dichte bilden.

Auf der anderen Seite stellt die Mikrorißbildung und in deren Folge das Abgleiten über Korngrenzen ebenfalls einen sehr effektiven Weg dar, angreifende Spannungen abzubauen. Da dieser Mechanismus bereits bei Raumtemperatur beobachtet wird, kann vermutet werden, daß die Schwellenenergien für Mikrorißbildung deutlich unter der Bildungsenergie für Versetzungen liegt.

Welchen Einfluß die Dynamik des Verformungsexperiments auf den Verformungsmechanismus hat, wurde noch nicht untersucht. Allerdings kann auch hier angenommen werden, daß bei einer schnellen Belastung der Quasikristall eher mit Mikrorißbildung reagiert, als daß er Versetzungen bildet.

## 8.4 Hochtemperatur-Verformungsexperimente an AlPdMn-Einphasikristallen

### 8.4.1 Probenpräparation und Versuchsdurchführung

Aus den mit der Czochralskimethode gezogenen Einphasikristallen werden zunächst kleine Quader mit einer Grundfläche von  $3 \times 3 \text{ mm}^2$  herausgesägt. Der Quasikristall wird zuvor mit Hilfe einer Lauekamera so orientiert, daß die lange Quaderachse parallel zu einer zweizähligen Zonenachse liegt. Die Länge der Quader beträgt zwischen 5 und 7 mm. Alle Flächen werden vor der Verformung geschliffen und poliert (Abbildung 8.27). Für die

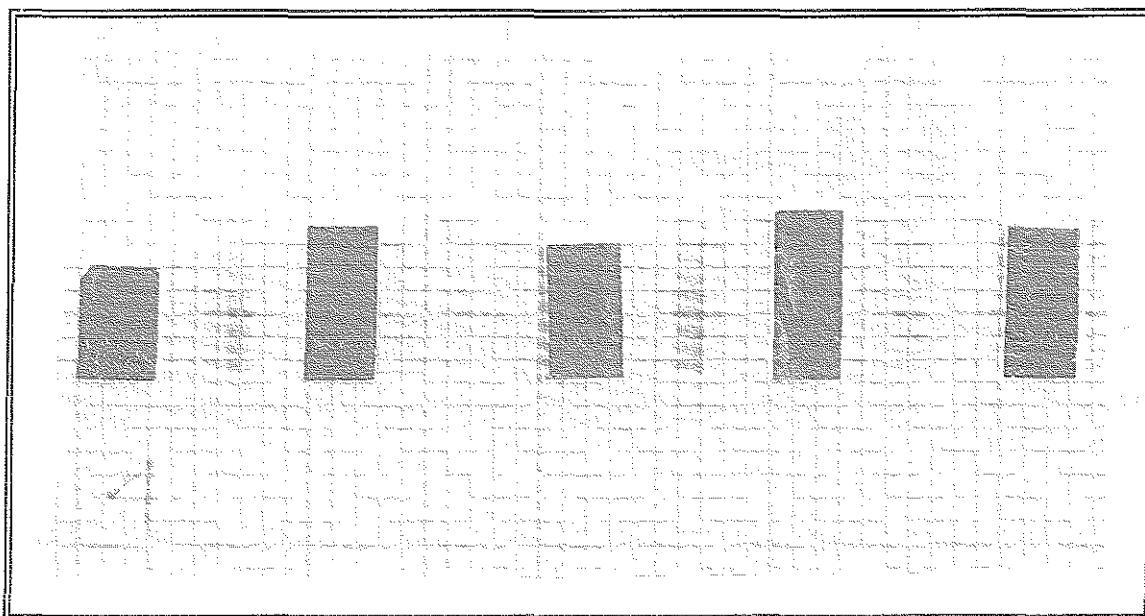


Abbildung 8.27: Für Verformungsexperimente vorbereitete quaderförmige AlPdMn-Einphasikristalle mit geschliffenen und polierten Flächen.

Verformungsexperimente wird eine Instron Universalprüfmaschine, Modell 1122, eingesetzt [91]. Deren Aufbau ist schematisch in Abbildung 8.28 dargestellt. Die zu verformende Probe befindet sich zwischen zwei Aluminiumoxidkeramikstempeln, von denen der untere fest mit dem Auflagerblock verbunden ist. Der obere Stempel ist an einer Lastmeßdose befestigt, die ihrerseits am Querhaupt der Maschine angebracht ist. Das Querhaupt kann nach unten verfahren und so die Probe verformt werden. Um den Probenbereich ist ein Rohrfen installiert, mit dem die Probe auf Temperaturen bis zu  $900^\circ\text{C}$  erwärmt werden kann. Die Lager der Stempel sind wassergekühlt. Die Temperatur der Probe wird während des Versuchs über zwei neben der Probe angeordneten Thermoelementen gemessen.

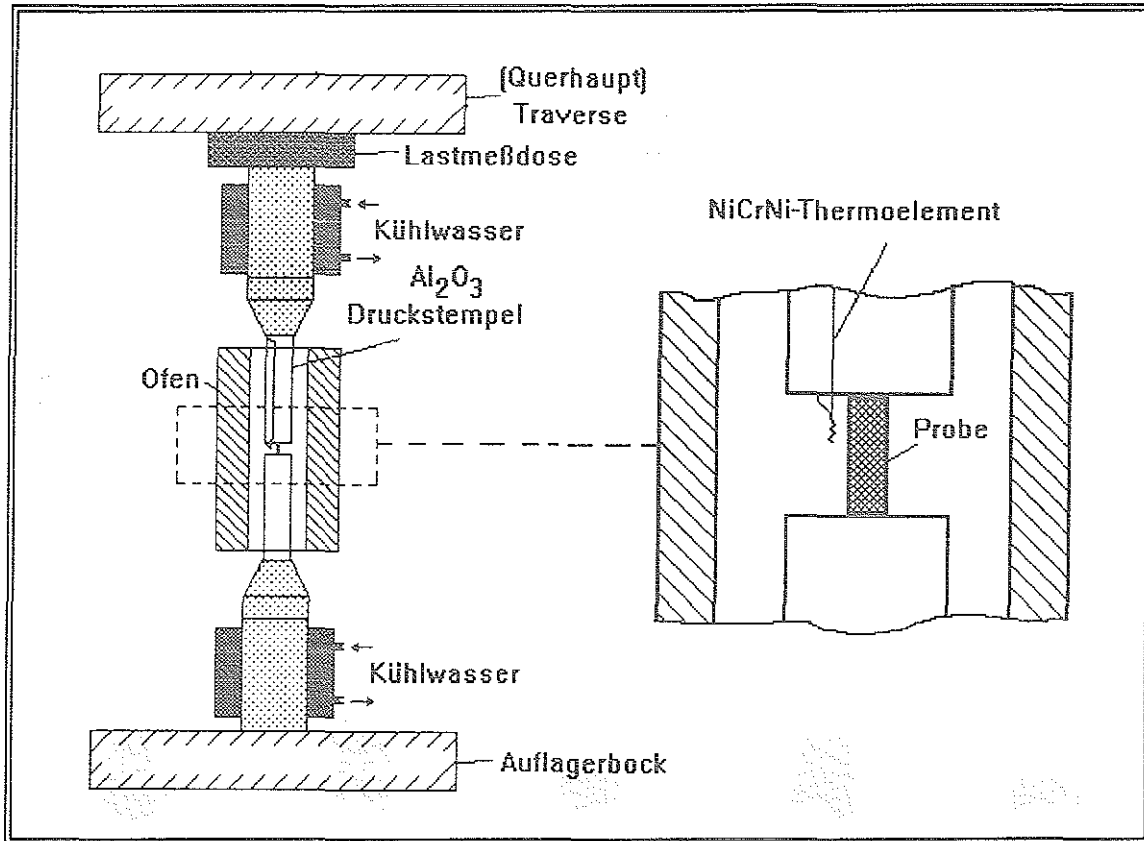


Abbildung 8.28: Schematische Darstellung der verwendeten Verformungsapparatur, Instron 1122 [113].

Alle Verformungsexperimente werden mit einer konstanter Traversengeschwindigkeit von  $v = 0.05 \text{ mm min}^{-1}$  durchgeführt und die Kraft  $F$  auf die Probe über die Zeit gemessen. Bei der Bestimmung der wahren Stauchung der Probe muß berücksichtigt werden, daß die Verformungsmaschine selbst einen Teil der Last  $F$  aufnimmt und sich verbiegt. Ohne Probe mißt man eine lastabhängige Verformung  $\Delta l_m$  der Maschine, die in erster Näherung durch folgende lineare Beziehung beschrieben werden kann:

$$\Delta l_m = \frac{F}{\alpha} = \frac{F}{10.67 \cdot 10^6 \text{ Nm}^{-1}} \quad (\text{bei } T = 750^\circ\text{C}). \quad (8.8)$$

Die auf die Ausgangslänge  $l_0$  bezogene relative Stauchung der Probe ist dann:

$$\epsilon_0(t) = \frac{l_0 - (l(t) - F(t) \alpha^{-1})}{l_0}. \quad (8.9)$$

Physikalisch sinnvoller ist die Angabe der auf die momentane Länge  $l(t)$  bezogene wahre Stauchung der Probe [87]:

$$\epsilon_w = -\ln\left(\frac{l(t) - F \alpha^{-1}}{l_0}\right). \quad (8.10)$$

Der *wahre* Druck auf die Probe ergibt sich dann gemäß:

$$\sigma_w(t) = \frac{F(t)}{A_0 l_0} (l(t) - F(t) \alpha^{-1}) \quad (8.11)$$

$A_0$  ist die Auflagefläche der Probe zu Beginn des Versuchs. Diese nimmt bei Annahme der Volumenerhaltung mit abnehmender Probenlänge zu. Die Präparation der verformten Proben (Abbildung 8.29) geschieht entsprechend der Beschreibung in Kapitel 7.3. Allerdings werden die verformten Quader zunächst in ein Kupferröhrchen eingesetzt, das

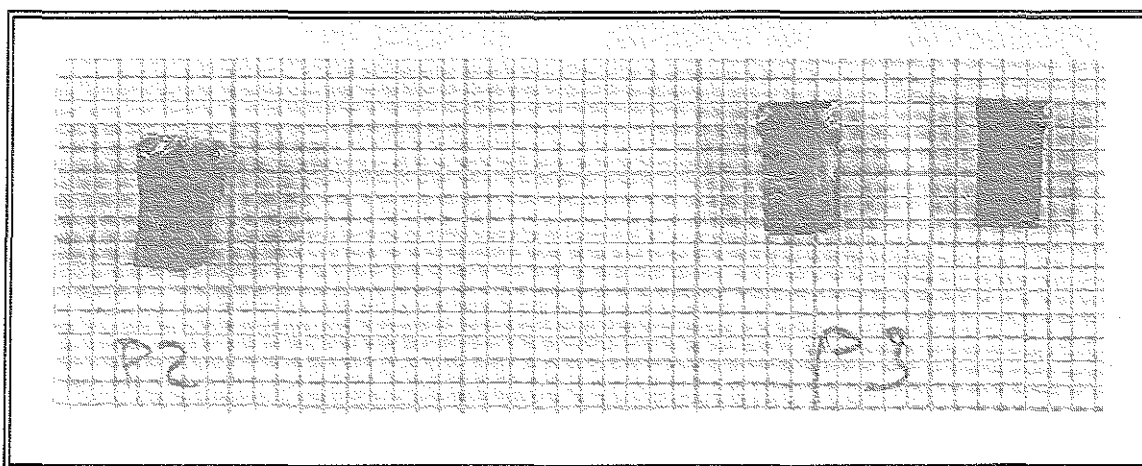


Abbildung 8.29: Verformte ALPdMn-Einquasikristalle.

dann mit Epoxdharz ausgegossen wird. Dadurch erreicht man eine Stabilisierung des Probenmaterials, welche das Auseinanderbrechen bei den nachfolgenden Präparationsschritten verhindert. Anschließend wird das Röhrchen mit der eingebetteten Probe in Scheiben zersägt (Abbildung 8.30). Die nachfolgenden Präparationschritte (Zersägen, Schleifen, Dimpeln, Ionendünnen) sind oben beschrieben.

#### 8.4.2 Experimentelle Ergebnisse

Abbildung 8.31 zeigt Elektronenbeugungsbilder entlang der zwei- und fünfzähligen Zonenachse, aufgenommen an einer unbehandelten, (a) und (b), sowie an einer verformten ALPdMn- Probe (c) und (d). Die unbehandelte Probe zeigt Beugungsbilder, bei denen nur minimale Abweichungen der Reflexe von ihren idealen Positionen beobachtet werden können. Dies beweist die hohe strukturelle Qualität des Ausgangsmaterials. In (c) und (d) sind die entsprechenden Beugungsbilder von einer verformten Probe zu sehen. Auch diese zeigen im Prinzip die Ikosaedersymmetrie der Probe, so daß davon ausgegangen werden kann, daß die Wärmebehandlung keinen Einfluß auf die Struktur gehabt hat. Diese Beobachtung steht im Einklang mit dem Gleichgewichtsphasendiagramm von ALPdMn, nachdem ALPdMn mit einem Mangananteil von 9 at% bis zum Schmelzpunkt bei  $T = 850^\circ\text{C}$  thermodynamisch stabil ist [187]. Eine genauere Betrachtung zeigt jedoch

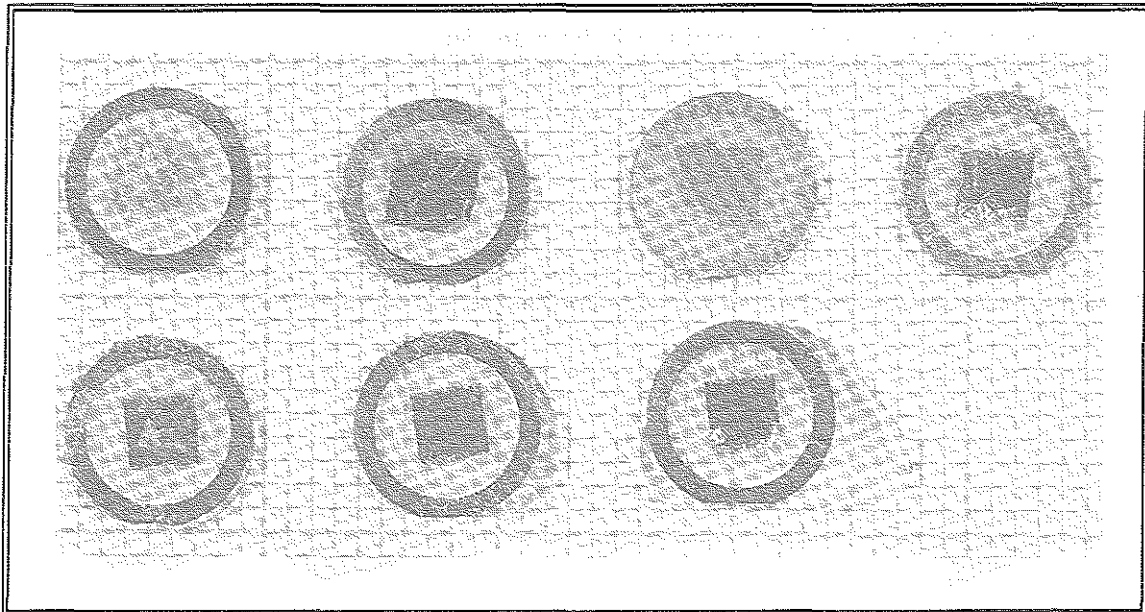


Abbildung 8.30: Nach der Verformung werden die AlPdMn-Einheitskristalle eingebettet und in dünne Scheiben zersägt.

Abweichungen der Reflexe mit schwacher und mittlerer Intensität von ihren idealen Positionen. Dies ist ein Hinweis auf eine erhöhte Dichte von Phasonendefekten (s. Kapitel 5), welche durch die Verformung erzeugt wurden.

Das Diagramm in Abbildung 8.32 zeigt die wahre Spannung aufgetragen über der wahren Dehnung [87] bei Verformung einer AlPdMn-Probe. Die Verformungstemperatur betrug  $T = 759^\circ\text{C}$ . Im elastischen Bereich bis etwa 200 MPa ergibt sich ein Elastizitätsmodul von etwa 100 GPa. Nach dem Erreichen einer oberen Streckgrenze von 370 MPa fällt die Spannung dann kontinuierlich ab, ohne daß ein Minimum erreicht wird. Bis zur maximalen Verformung von 25% wird keine untere Streckgrenze erreicht. Der Kurvenverlauf ähnelt dem, der bereits bei der Verformung von  $\text{Al}_{63}\text{Cu}_{25}\text{Fe}_{12}$  gemessen wurde [20]. Allerdings liegt der in dieser Arbeit gefundene Wert der oberen Streckgrenze um einen Faktor zwei über dem dort gefundenen Wert.

In Abbildungen 8.33 und 8.34 bzw. 8.35 sind typische Gebiete aus der getemperten und der verformten Probe zu sehen. Die Versetzungen die in den Bildern sichtbar sind, liegen bis auf sehr wenige Ausnahmen alle in den Proben und nicht in etwaigen, durch die Ionendünnung hervorgerufenen kristallinen Deckschichten. Dies ist durch die Aufnahme von Stereobildern überprüft worden. Um die Anzahl der Versetzungen in den verschiedenen Probentypen miteinander vergleichen zu können, wurden nach folgender Methode die Versetzungsdichten bestimmt. Zunächst zählt man in einem möglichst großen Gebiet der Probe (typischerweise einige  $\mu\text{m}^2$ ) die Anzahl der Durchstoßpunkte der Versetzungen durch die Probenoberflächen. Danach wird der flächeninhalt des untersuchten Bereichs ausgemessen. Dazu überträgt man dessen flächenumriß auf Transparentpapier und schneidet diese Fläche aus. Bei bekannter Papierdichte kann dann der Flächeninhalt aus dem

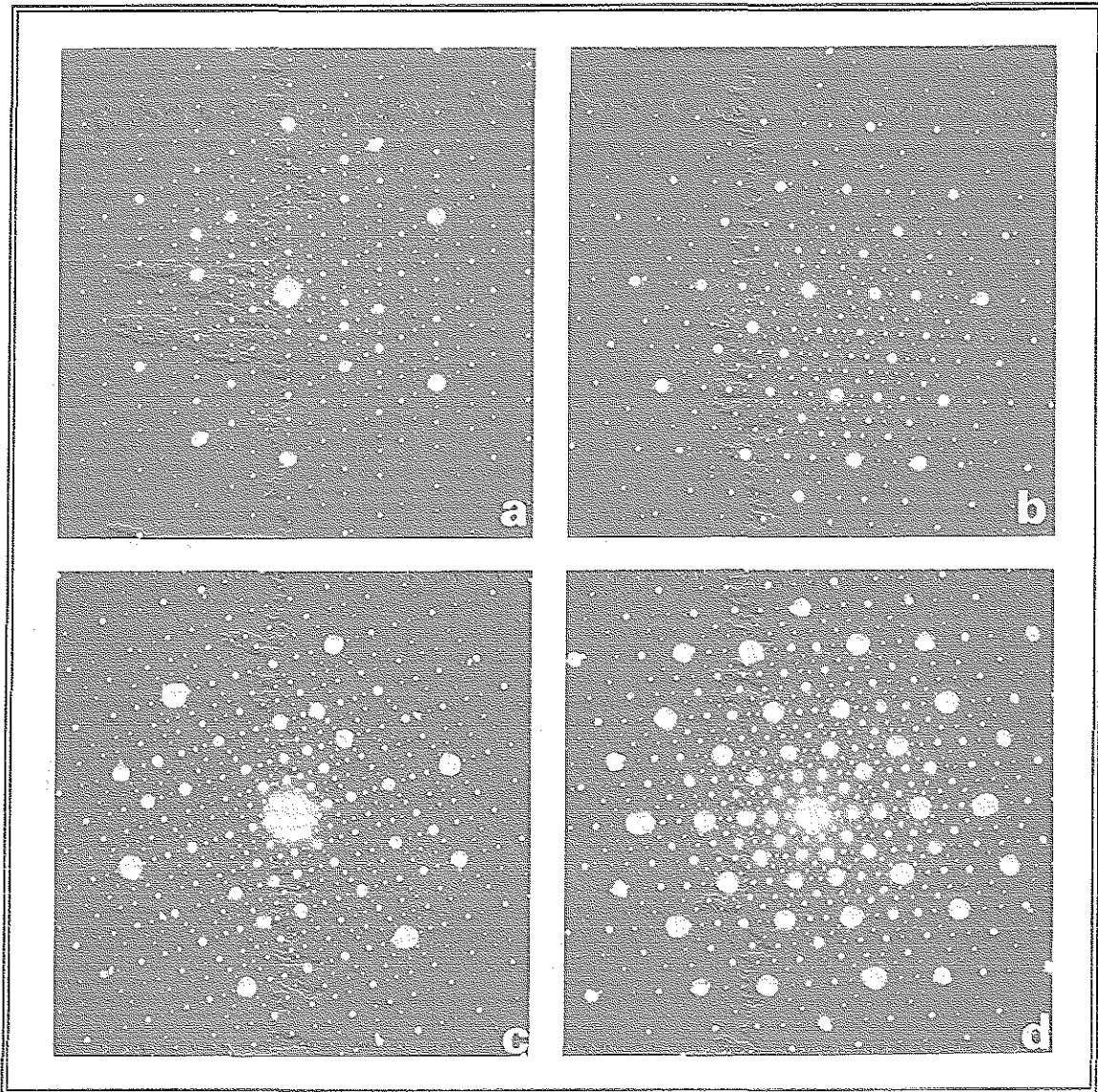


Abbildung 8.31: Elektronenbeugungsbilder entlang der Hauptzonenachsen gewonnen an einer unbehandelten, (a) und (b), sowie an einer verformten AlPdMn-Probe, (c) und (d).

Gewicht der Fläche berechnet werden. Die Versetzungsdichte ist dann gegeben durch:

$$\rho = \frac{\text{Anzahl der Durchstoßpunkte}}{2 \text{ Flächeninhalt}} \quad (8.12)$$

Diese Methode liefert zufriedenstellende Ergebnisse für Versetzungsdichten bis zu  $10^9 \text{ cm}^{-1}$  und einer möglichst isotropen Verteilung der Linienrichtungen. Folgende Versetzungsdichten wurden für die verschiedenen Proben typen ermittelt:

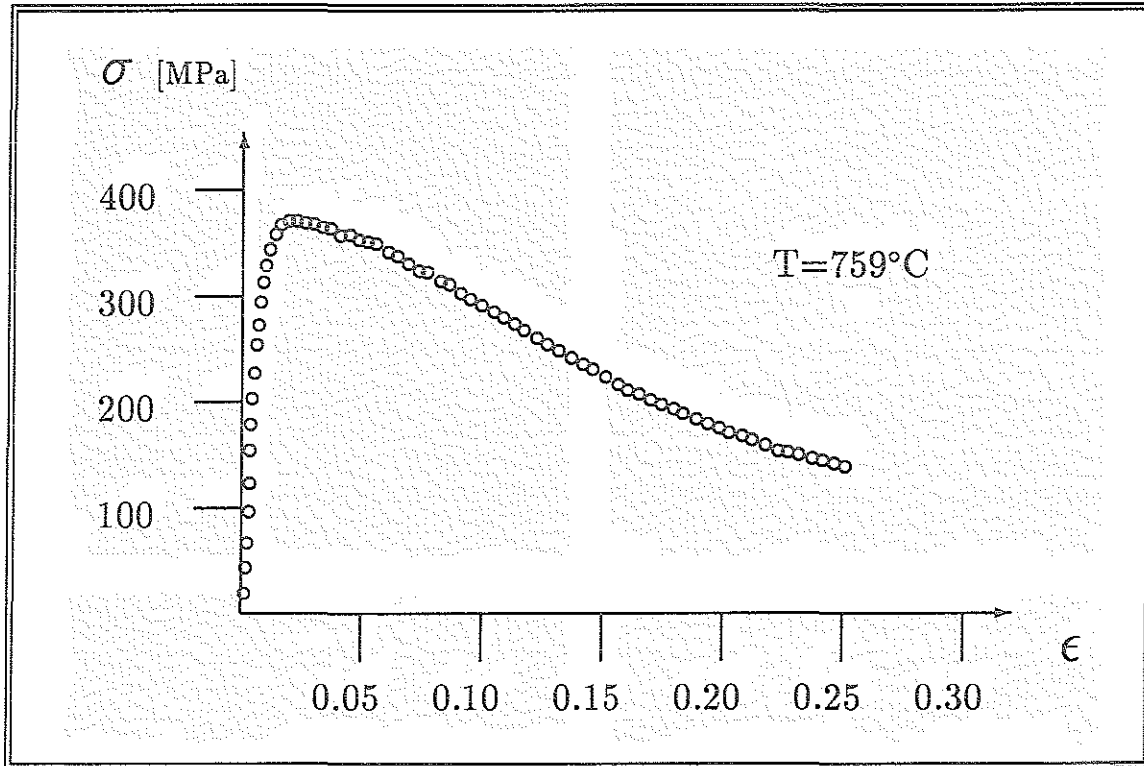


Abbildung 8.32: Wahre Spannung über wahrer Dehnung für eine ikosaedrische AlPdMn-Probe bei  $T = 750^\circ\text{C}$ .

| Probentyp      | Versetzungsdichte |
|----------------|-------------------|
| unbehandelt    | $9 \cdot 10^6$    |
| wärmebehandelt | $1.5 \cdot 10^6$  |
| verformt       | $7 \cdot 10^8$    |

Wie bereits in den vorhergehenden Kapiteln wurden auch hier die Versetzungen in der verformten Probe mittels Beugungskontrast abgebildet, um eine Analyse der Verzerrungsfelder durchzuführen. Ein Beispiel für ein solches Experiment ist in Abbildung 8.36 zu sehen. Zur Abbildung wurden folgende reziproken Gittervektoren eingesetzt: (a)  $\vec{g}_{||} = (1/1, \bar{2}/\bar{3}, \bar{1}/\bar{2})$ , (b)  $\vec{g}_{||} = (1/2, \bar{3}/\bar{5}, 2/\bar{3})$ , (c)  $\vec{g}_{||} = (2/3, \bar{1}/\bar{2}, \bar{1}/\bar{1})$ , (d)  $\vec{g}_{||} = (3/5, \bar{2}/\bar{3}, \bar{1}/\bar{2})$ , (e)  $\vec{g}_{||} = (0/0, 2/4, 0/0)$ , (f)  $\vec{g}_{||} = (0/0, 4/6, 0/0)$ . In Abbildung 8.36 sind einige Versetzungen sichtbar und durch Pfeile markiert. In (b) und (c) bzw. (d) und (e) sieht man das gleiche Gebiet, nur wurden hier zur Abbildung jeweils andere reziproke Gittervektoren benutzt. Die Längen der Vektoren sind für jedes Reflexpaar über den Faktor  $\tau$  miteinander verknüpft. Beide Typen von Auslöschbedingung können hier beobachtet werden. In den Abbildungen 8.36 (b) und (c) ist die untere, rechte Versetzung in beiden Fällen außer Kontrast (vgl. Abbildung 8.36 (a)). Dies ist somit ein Beispiel für die starke Auslöschbe-

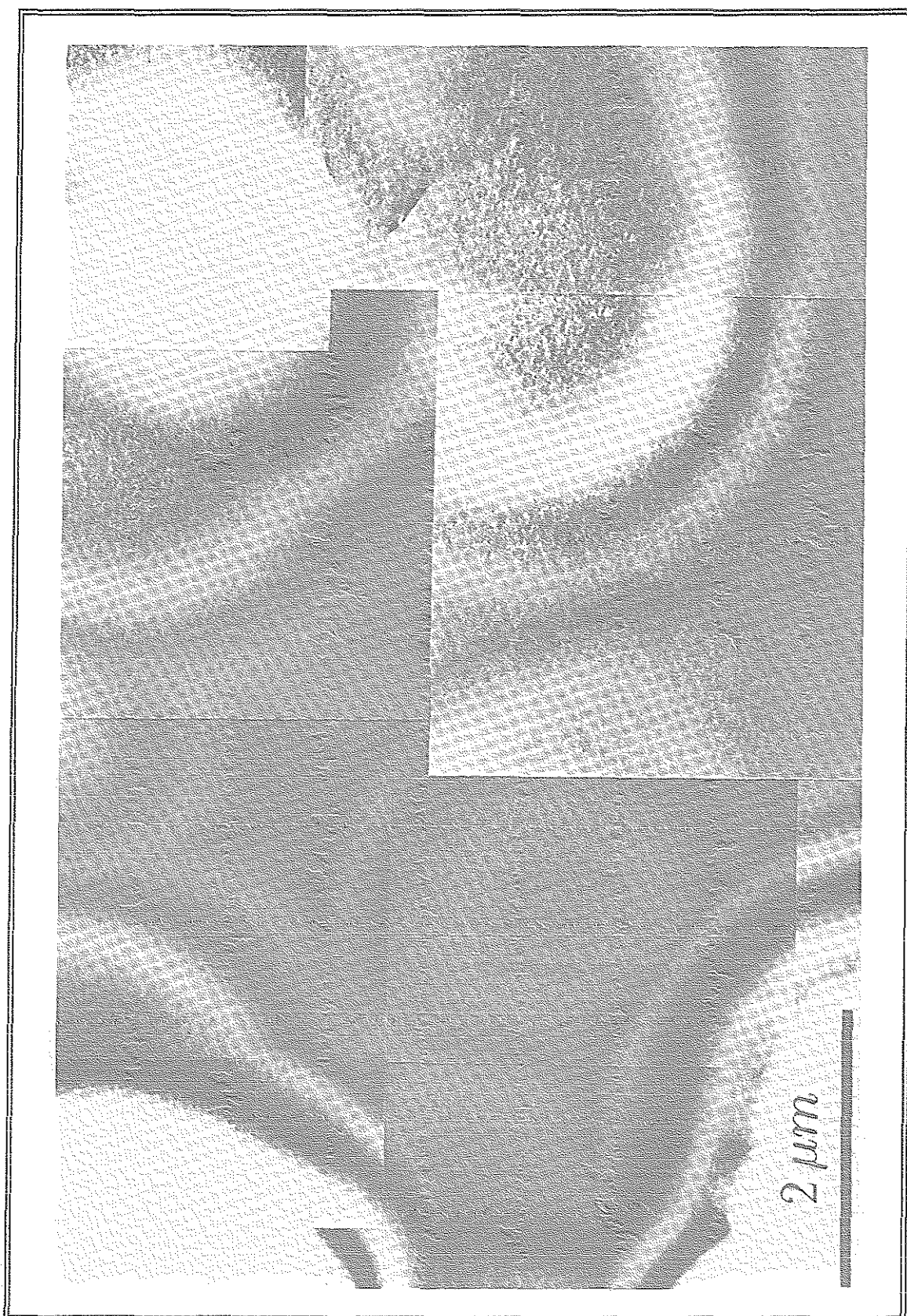


Abbildung 8.33: Aus vielen Einzelbildern zusammengesetzte Hellfeldaufnahme eines Gebietes aus einer wärmebehandelten Probe.

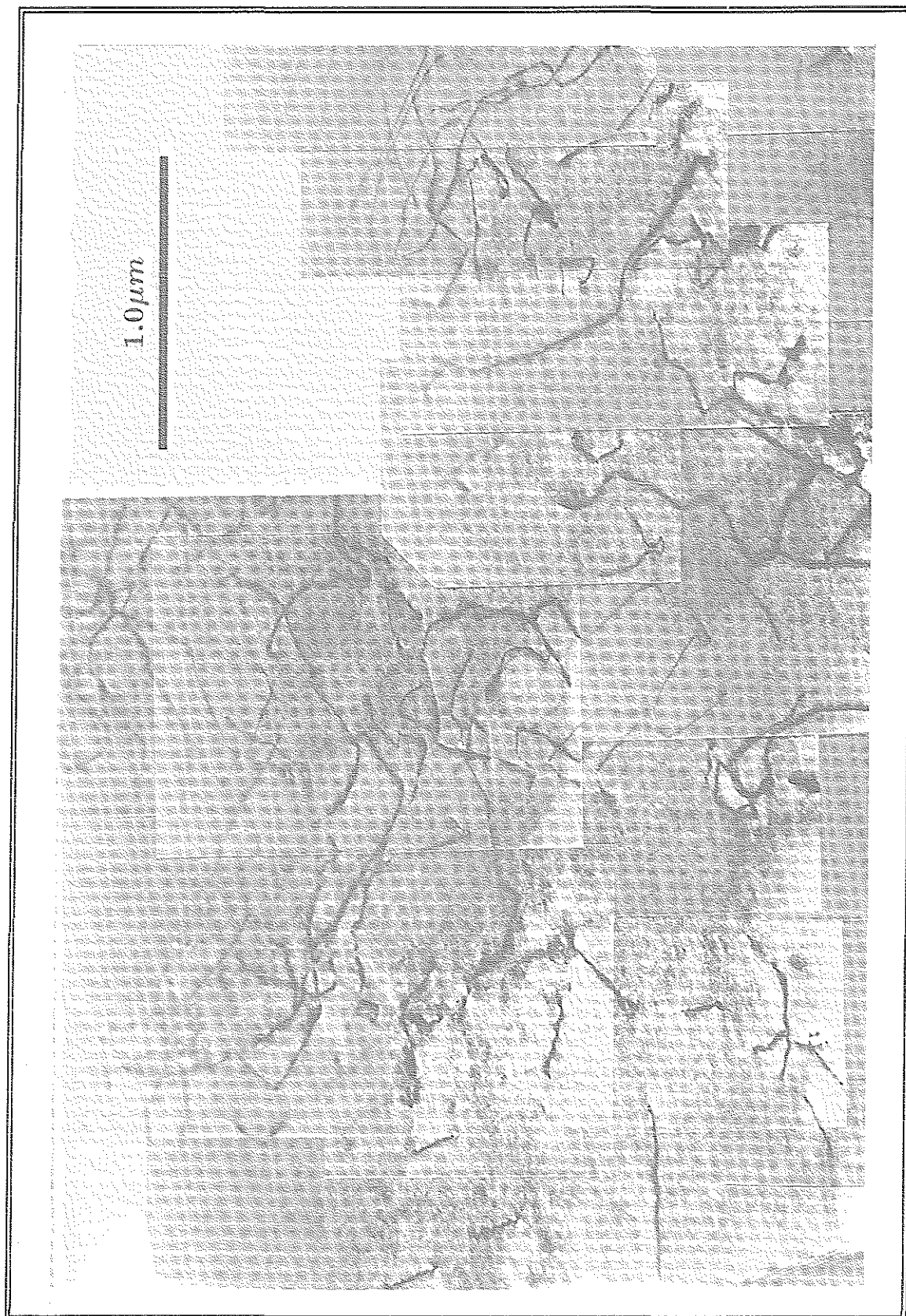


Abbildung 8.34: Aus vielen Einzelbildern zusammengesetzte Hellfeldaufnahme eines Gebietes aus einer verformten Probe.



Abbildung 8.35: Aus vielen Einzelbildern zusammengesetzte Hellfeldaufnahme eines Gebietes aus einer verformten Probe.



Abbildung 8.36: Hellfeldaufnahmen eines Gebietes in einer verformten Probe. Die zur Abbildung benutzten reziproken Gittervektoren sind im Text aufgeführt. (b) und (c) demonstrieren die starke, (d) und (e) die schwache Auslöschbedingung.

dingung (Kapitel 6). In den Abbildungen 8.36 (d) und (e) erfüllt diese Versetzung die schwache Auslöschbedingung. In einigen Fällen beobachtet man allerdings auch Kontrast, bei denen es sich nicht eindeutig entscheiden läßt, ob sich die Versetzung jetzt in oder außer Kontrast befindet. Darüberhinaus ist es hier (im Gegensatz zu den im vorhergehenden Kapitel beschriebenen Fehlpassungsversetzungen im gleichen Materialsystem) nicht gelungen, für ein und dieselbe Versetzung zweimal die starke und einmal die schwache Auslöschbedingung zu beobachten. Vielmehr ähnelt das Kontrastverhalten mehr dem, wie es für Versetzungen im AlCuFe beobachtet wurde (Kapitel 8.1). D. h., auch hier werden häufig Restkontraste beobachtet, bei denen es sich nicht entscheiden läßt, ob der Versetzungskontrast nun ausgelöscht ist oder nicht.

#### 8.4.3 Diskussion

Von theoretischer Seite weiß man bis heute sehr wenig über die Form der Verzerrungsfelder in Quasikristallen, so daß von daher eine Unterscheidung zwischen echtem Restkontrast und mehr zufälligen Kontrastvariationen nicht möglich ist. Um diesem Dilemma zu entfliehen, wurde versucht, möglichst viele Beugungskontrastbilder von einer Versetzung aufzunehmen. Da zu einer eindeutigen Analyse im Idealfall nur fünf Auslöschungen beobachtet werden müssen, erhält man hier viele redundante Informationen, die dann (hoffentlich) eventuelle Uneindeutigkeiten beseitigen können.

Um die große Zahl der Bilder auswerten zu können, wurde ein entsprechendes Computerprogramm geschrieben und zur Analyse eingesetzt. In diesem Programm wird zunächst davon ausgegangen, daß es sich bei dem untersuchten Defekt um eine perfekte Versetzung handelt. Damit kann das Verzerrungsfeld durch einen einzigen Burgersvektor charakterisiert werden. In einer Schleife werden dann alle Burgersvektoren des F-Hypergitters, deren Indizes im Bereich von  $-13$  bis  $+13$  liegen, durchlaufen. Aus diesen wählt das Programm allerdings nur die Vektoren aus, deren Komponente im physikalischen Raum kleiner oder gleich  $1\text{ nm}$  ist. Größere Werte für  $\vec{b}_{\parallel}$  zuzulassen, ist physikalisch nicht sinnvoll, da die typischen Atomabstände in Quasikristallen nur einige Ångström betragen. Die im Experiment benutzten reziproken Gittervektoren sind in einem Feld abgespeichert, so daß das Programm für jeden dieser Vektoren überprüfen kann, ob eine der beiden Auslöschbedingungen für den jeweiligen Burgersvektor erfüllt ist, also ob die Versetzung sichtbar sein sollte oder nicht. In einem weiteren Feld sind nun die Kontraste abgelegt, die für eine Versetzung experimentell beobachtet wurden.

Durch einen Vergleich zwischen berechnetem und beobachtetem Kontrast kann dann der Grad der Übereinstimmung ermittelt werden. Den Bildern, bei denen eine eindeutige Festlegung des Kontrasts nicht möglich war, ordnet das Programm den berechneten Kontrast zu, so daß hier Rechnung und Experiment übereinstimmen. Insgesamt wurden zur Analyse 53 Bilder von sechs Versetzungen unter verschiedenen Kontrastbedingungen aufgenommen und analysiert. Dabei konnte in fünf Fällen eine Übereinstimmung von mindestens 96% erreicht werden, wenn die Burgersvektoren parallel zu zweizähligen oder fünfzähligen Richtungen des Quasikristalls gewählt werden. Ein Beispiel für eine solche Auswertung findet sich in Tabelle 8.2. Die erste Spalte enthält die verwendeten reziproken Gittervektoren, die nächsten drei Spalten zeigen die Werte, die sich bei der Berechnung der Skalarprodukte der Auslöschbedingungen für den Burgersvektor mit  $\vec{b}_{\parallel} = (-4/2, -2/0, -2/2)$  ergeben. Die letzte dieser Spalten sagt den Kontrast voraus, der für diese Versetzung beobachtet

| i  | $\vec{g}_{  }$        | $\vec{g}_{  } \cdot \vec{b}_{  }$ | $\vec{g}_{\perp} \cdot \vec{b}_{\perp}$ | $\vec{G} \cdot \vec{B}$ | n    |
|----|-----------------------|-----------------------------------|-----------------------------------------|-------------------------|------|
| 1  | (1/2, -2/3, 0/0)      | 1.45                              | 0.55                                    | 2.00                    | 1.0  |
| 2  | (-2/-3, -1/-2, -1/-1) | 1.45                              | 0.55                                    | 2.00                    | 1.0  |
| 3  | (-3/-5, -2/-3, -1/-2) | 2.34                              | -0.33                                   | 2.01                    | 1.0  |
| 4  | (-1/-2, 2/3, 0/0)     | -1.44                             | -0.54                                   | -1.98                   | 1.0  |
| 5  | (2/3, 1/2, 1/1)       | -1.44                             | -0.54                                   | -1.98                   | 1.0  |
| 6  | (3/5, 2/3, 1/2)       | -2.33                             | 0.34                                    | -1.99                   | 1.0  |
| 7  | (-2/-3, 1/2, -1/-1)   | -0.88                             | 0.89                                    | 0.01                    | 0.0  |
| 8  | (2/3, -1/-2, 1/1)     | 0.89                              | -0.88                                   | 0.01                    | 0.0  |
| 9  | (2/3, 0/0, 1/2)       | 0.00                              | 0.00                                    | 0.00                    | 0.0  |
| 10 | (-2/-3, 0/0, -1/-2)   | 0.00                              | 0.00                                    | 0.00                    | 0.0  |
| 11 | (1/1, 2/3, 1/2)       | -1.44                             | -0.54                                   | -1.98                   | 0.5  |
| 12 | (-1/-1, -2/-3, -1/-2) | 1.45                              | 0.55                                    | 2.00                    | ~0.0 |
| 13 | (1/2, 3/5, 2/3)       | -2.33                             | 0.34                                    | -1.99                   | 1.0  |
| 14 | (-1/-2, -3/-5, -2/-3) | 2.34                              | -0.33                                   | 2.01                    | 1.0  |
| 15 | (2/4, 0/0, 0/0)       | -0.88                             | 0.89                                    | 0.01                    | 0.0  |
| 16 | (-2/-4, 0/0, 0/0)     | 0.89                              | -0.88                                   | 0.01                    | 0.0  |
| 17 | (4/6, 0/0, 0/0)       | -1.44                             | -0.54                                   | -1.98                   | 1.0  |
| 18 | (-4/-6, 0/0, 0/0)     | 1.45                              | 0.55                                    | 2.00                    | 1.0  |
| 19 | (-1/-2, -2/-3, 0/0)   | 2.34                              | -0.33                                   | 2.01                    | 1.0  |
| 20 | (1/2, 2/3, 0/0)       | -2.33                             | 0.34                                    | -1.99                   | 1.0  |
| 21 | (0/0, 2/4, 0/0)       | -2.33                             | 0.34                                    | -1.99                   | ~0.0 |
| 22 | (0/0, -2/-4, 0/0)     | 2.34                              | -0.33                                   | 2.01                    | 1.0  |
| 23 | (0/0, 4/6, 0/0)       | -3.78                             | -0.20                                   | -3.98                   | 1.0  |
| 24 | (0/0, -4/-6, 0/0)     | 3.79                              | 0.21                                    | 4.00                    | 1.0  |
| 25 | (1/1, -2/-3, -1/-2)   | 0.89                              | -0.88                                   | 0.01                    | 0.0  |
| 26 | (-1/-1, 2/3, 1/2)     | -0.88                             | 0.89                                    | 0.01                    | 0.0  |
| 27 | (1/2, -3/-5, -2/-3)   | 1.45                              | 0.55                                    | 2.00                    | 1.0  |
| 28 | (-1/-2, 3/5, 2/3)     | -1.44                             | -0.54                                   | -1.98                   | 0.5  |
| 29 | (2/3, -1/-2, -1/-1)   | 0.00                              | 0.00                                    | 0.00                    | 0.0  |
| 30 | (-2/-3, 1/2, 1/1)     | 0.00                              | 0.00                                    | 0.00                    | 0.0  |
| 31 | (3/5, -2/-3, -1/-2)   | 0.00                              | 0.00                                    | 0.00                    | 0.0  |
| 32 | (-3/-5, 2/3, 1/2)     | 0.00                              | 0.00                                    | 0.00                    | 0.0  |
| 33 | (1/1, -2/-3, 1/2)     | 2.34                              | -0.33                                   | 2.01                    | 0.5  |
| 34 | (-1/-1, 2/3, -1/-2)   | -2.33                             | 0.34                                    | -1.99                   | 1.0  |
| 35 | (1/2, -3/-5, 2/3)     | 3.79                              | 0.21                                    | 4.00                    | 1.0  |
| 36 | (-1/-2, 3/5, -2/-3)   | -3.78                             | -0.20                                   | -3.98                   | 1.0  |
| 37 | (1/1, 2/3, -1/-2)     | -2.88                             | -1.10                                   | -3.98                   | 1.0  |
| 38 | (-1/-1, -2/-3, 1/2)   | 2.89                              | 1.11                                    | 4.00                    | 1.0  |
| 39 | (1/2, 3/5, -2/-3)     | -4.67                             | 0.68                                    | -3.99                   | 1.0  |
| 40 | (-1/-2, -3/-5, 2/3)   | 4.68                              | -0.67                                   | 4.01                    | 1.0  |
| 41 | (-2/-3, -1/-2, 1/1)   | 2.34                              | -0.33                                   | 2.01                    | 1.0  |
| 42 | (2/3, 1/2, -1/-1)     | -2.33                             | 0.34                                    | -1.99                   | 1.0  |
| 43 | (3/5, 2/3, -1/-2)     | -3.78                             | -0.20                                   | -3.98                   | 1.0  |
| 44 | (-3/-5, -2/-3, 1/2)   | 3.79                              | 0.21                                    | 4.00                    | 1.0  |
| 45 | (1/2, -1/-1, 2/3)     | 1.45                              | 0.55                                    | 2.00                    | 1.0  |
| 46 | (-1/-2, 1/1, -2/-3)   | -1.44                             | -0.54                                   | -1.98                   | 1.0  |
| 47 | (2/3, -1/-2, 3/5)     | 2.34                              | -0.33                                   | 2.01                    | 1.0  |
| 48 | (-2/-3, 1/2, -3/-5)   | -2.33                             | 0.34                                    | -1.99                   | 1.0  |
| 49 | (1/2, 1/1, 2/3)       | 0.00                              | 0.00                                    | 0.00                    | 0.0  |
| 50 | (-1/-2, -1/-1, -2/-3) | 0.00                              | 0.00                                    | 0.00                    | 0.0  |
| 51 | (2/3, 1/2, 3/5)       | 0.00                              | 0.00                                    | 0.00                    | 0.0  |
| 52 | (-2/-3, -1/-2, -3/-5) | 0.00                              | 0.00                                    | 0.00                    | 0.0  |
| 53 | (-3/-5, -2/-3, 1/2)   | 3.79                              | 0.21                                    | 4.00                    | 1.0  |

Tabelle 8.2: Computeranalyse der Kontraste einer Versetzung in einer verformten AlPdMn-Probe. In 96.23% aller Fälle findet man eine Übereinstimmung zwischen Experiment und Rechnung.  $\vec{b}_{||} = (-4/2, -2/0, -2/2)$  ist parallel zu einer zweizähligen Richtung.

werden sollte. Dabei bedeutet der Wert Null keinen Kontrast. Ein Wert ungleich Null besagt, daß die Versetzung in diesem Fall zu sehen sein sollte. Die letzte Spalte enthält die experimentell beobachteten Kontraste. Der Wert 0.5 bezeichnet dabei die Bilder, bei denen eine Entscheidung zwischen Auslöschung und "in Kontrast" nicht möglich ist. Die Fälle der Nichtübereinstimmung sind mit einem geschwungenen Pfeil markiert.

Dreizählige Richtungen führten in allen Fällen zu einer extrem schlechten Übereinstimmung, so daß diese Burgersvektorrichtung mit großer Sicherheit ausgeschlossen werden kann.

Die Bewegung einer Versetzung durch einen Quasikristall ist nicht so einfach zu erklären, wie in kristallinen Materialien. Zwar besitzt auch ein Quasikristall eine Ebenenstruktur [109, 26, 27], aber die Struktur eines Defekts wird nicht nur durch Verzerrungen des Gitters, sondern auch durch Umordnung der Gitterbausteine bestimmt. Tatsächlich kann man dies auch in Simulationen zum plastischen Verhalten von Quasikristallen beobachten. Trebin und Mitarbeiter berechneten in Computereperimenten die Reaktion eines zweidimensionalen Quasikristalls auf eine angreifende Scherkraft. Es zeigt sich, daß sich ab einer gewissen Belastung Versetzungen bilden, die durch den Kristall wandern und einen Pfad aus Phasonendefekten hinterlassen [158]. In den hier untersuchten Proben deuten die Verschiebungen der Beugungsreflexe von ihren idealen Positionen darauf hin, daß der Quasikristall nach der Verformung zusätzlich zur erhöhten Versetzungsdichte eine hohe Dichte von Phasonendefekten aufweist.

Versetzungsbewegung in Quasikristallen wird also durch zwei Prozesse getragen. Zum einen durch eine Verspannung des Gitters, wie in periodischen Kristallen, zum anderen durch Diffusion der Atome. Atomare Diffusion ist ein Vorgang, der stark von der Temperatur abhängig sein sollte. Dies wird durch einige experimentelle Resultate bestätigt.

Die Analyse von Quasikristallen, die bei Raumtemperatur verformt wurden, hat, sieht man einmal von der Arbeit von Takeuchi und Hashimoto [151] (siehe hierzu Kapitel 8.3) ab, keinerlei Hinweise auf einen Versetzungsmechanismus ergeben. Auch zeigen neuerliche Verformungsexperimente anderer Gruppen, daß eine starke plastische Verformung erst bei relativ hohen Temperaturen einsetzt [144, 20, 186].

Zum Schluß dieser Diskussion sollen noch zwei Artikel kommentiert werden, die sich ebenfalls mit dem plastischen Verhalten von Quasikristallen beschäftigen und in denen angeblich Anhaltspunkte für einen Versetzungsmechanismus aufgezeigt werden.

Yu et al. verformten die ikosaedrische T2-Phase von  $\text{AlLiCu}$  bei Raumtemperatur um nur 3% und beobachteten Versetzungen im Transmissionselektronenmikroskop. Bemerkenswerter Weise haben es die Autoren versäumt, das Ausgangsmaterial zu untersuchen, weshalb sie am Ende ihres Artikels auch einräumen müssen (Zitat):

"Which leaves uncertain whether these dislocations originate from the deformation or whether they arise already from the crystal growth." [189].

Yan und Wang führten eine Wärmebehandlung an dekalagonalen  $\text{Al}_{70}\text{Co}_{15}\text{Ni}_{15}$ -Quasikristallen bei  $T = 800^\circ\text{C}$  durch und zerbrachen ihr Material durch (Zitat) "rapid striking" in undefinierter und nicht reproduzierbarer Art und Weise. Anschließend wurden die Proben im Transmissionselektronenmikroskop untersucht und verschiedene Defekte beobachtet [183, 173]. Auch hier wurden keine Untersuchungen an unverformtem Material

durchgeführt. Darüberhinaus wurden auch keine Proben untersucht, die nur der Wärmebehandlung ausgesetzt waren. In diesem Zusammenhang müssen dann Arbeiten, unter anderem von den selben Autoren verfaßt, zitiert werden, in denen das gleiche Material im nichtdeformierten Zustand untersucht und *ebenfalls* eine Reihe verschiedener Defekte mit hoher Dichte beobachtet wurden [38, 185, 182, 184].

## ÜBERGREIFENDE DISKUSSION

Die vorliegende Arbeit befaßt sich vorwiegend mit der Untersuchung von Versetzungen in verschiedenen quasikristallinen Legierungen mit Hilfe der Transmissionselektronenmikroskopie. Die Materialien, die untersucht wurden, weisen dabei unterschiedliche Herstellungshistorien auf.

Zum einen wurden langsam abgekühlte ikosaedrische AlCuFe- und AlPdMn-Proben untersucht, zum anderen thermisch behandelte und plastisch verformte Einquasikristalle aus dem System AlPdMn, ebenfalls ikosaedrisch.

Die im theoretischen Teil dieser Arbeit entwickelte Kontrasttheorie konnte bei allen Systemen angewandt werden. Die hierbei erzielten Ergebnisse können in zwei Gruppen gegliedert werden.

Die erste Gruppe umfaßt die Untersuchungen an Versetzungen in langsam abgekühlten AlPdMn-Quasikristallen. Hier wurden die an den Rändern von dekalagonalen AlPdMn-Ausscheidungen liegenden Fehlpassungsversetzungen untersucht. Diese Versetzungen zeigen das Kontrastverhalten, wie es im Rahmen der kinematischen Kontrasttheorie (Kapitel 6) für perfekte und vollständige Versetzungen in einem ikosaedrischen Quasikristall vorhergesagt werden kann. In reproduzierbarer Art und Weise findet sich ein Burgersvektor, der im physikalischen Raum (und im orthogonalen Raum) parallel zu einer fünfzähligen Achse des ikosaedrischen Quasikristalls liegt. Die Längenbestimmung des Burgersvektors ist im Rahmen dieser kinematischen Kontrasttheorie nicht durchführbar. Allerdings erlaubt sie es, das Längenverhältnis der Burgersvektorkomponenten  $\vec{b}_{\parallel}$  zu  $\vec{b}_{\perp}$  zu bestimmen. Hier zeigt es sich, daß die Komponente im orthogonalen Raum um einen Faktor sieben größer ist als der zugehörige Vektorbetrag im physikalischen Raum.

Grundsätzlich zeigen diese Experimente, daß die in dieser Arbeit abgeleitete Kontrasttheorie funktioniert. Bildet man eine bereits analysierte Fehlpassungsversetzung, d.h. der Burgersvektor ist bekannt, mit weiteren Zweistrahlfällen ab, dann liefert die Kontrasttheorie immer eine korrekte Vorhersage darüber, ob die Versetzung in dem betreffenden Fall zu sehen ist oder nicht.

Die andere Gruppe beinhaltet die Versetzungen in ikosaedrischem AlCuFe und plastisch verformten AlPdMn-Quasikristallen. Die Durchführung der Kontrastanalyse zeigt hier keine so eindeutigen Ergebnisse, wie sie für die oben genannten Fehlpassungsversetzungen erhalten werden.

Bei den Versetzungen in AlCuFe kann im allgemeinen die starke Bedingung nur für eine systematische Reihe eindeutig beobachtet werden. Diese Reflexreihe liegt parallel zu einer zweizähligen Richtung. Damit kann die Hauptkomponente der Verzerrungsfelder in beiden Unterräumen nur auf eine Ebene senkrecht zu dieser zweizähligen Richtung festgelegt werden. Beugungskontrastaufnahmen mit anderen Reflexen zeigen Restkontraste. Wie

in Kapitel 6 dargestellt, können diese Restkontraste ihren Ursprung in einer komplexeren Form der Verzerrungsfelder haben. Sicherlich ist es nicht gerechtfertigt die Schwierigkeiten bei der Analyse, durch eine unzureichende Kontrasttheorie zu erklären. Die Experimente an den Fehlpassungsversetzungen bestätigen diese Theorie sehr gut, so daß hier der Grund doch eher in einer komplexeren Form der Verzerrungsfelder gesucht werden muß.

Ein ähnliches Bild zeigt sich bei den Versetzungen, die nach einer plastischen Verformung in AlPdMn-Quasikristallen gefunden wurden. Auch hier ist eine eindeutige Bestimmung nicht möglich. Selbst die Untersuchung mit einer großen Anzahl von Beugungsreflexen, die bei einer idealen Versetzung zu einer Fülle redundanter Informationen führen würde, brachte hier keinen vollen Erfolg.

Die Auswertung dieser Experimente zeigt jedoch die Tendenz, daß der Burgersvektor wahrscheinlich parallel zu einer der zwei- oder fünfzähligen Richtungen des Quasikristalls liegen wird. Dieses Ergebnis wird durch eine kürzlich von Dai et al. veröffentlichte Arbeit unterstützt [40]. Hier wurde anhand der Aufspaltung von HOLZ<sup>†</sup>-Linien der Burgersvektor als parallel zu einer zweizähligen Richtung liegend bestimmt.

Dennoch muß auch bei diesen Versetzungen noch genauer untersucht werden, welche Form die Verzerrungsfelder in den beiden Unterräumen haben. Beispielsweise ist noch nicht untersucht worden (theoretisch und experimentell), wie weit sich die Verzerrungsfelder in ikosaedrischen Quasikristallen vom Versetzungskern in das Gitter erstrecken. Es kann vermutet werden, daß die Verzerrungsfelder der Fehlpassungsversetzungen durch die Ausscheidungen stark lokalisiert werden, und es deshalb zu dem beobachteten Kontrastverhalten kommt. Dies ist für separate Versetzungen sicherlich nicht der Fall. Vielmehr muß davon ausgegangen werden, daß die phasonenartigen Defekte aufgrund ihres diffusiven Charakters sich in einer Wolke um den Versetzungskern ausbreiten, die über die Ausdehnung der phononenartigen Verzerrungen hinausreicht. Durch Computersimulationen kann dies zumindest für zweidimensionale quasiperiodische Systeme bestätigt werden [158].

Allerdings gibt es auch eine Gemeinsamkeit zwischen den Fehlpassungsversetzungen und den gerade beschriebenen Defekten. Durch Analyse der schwachen Auslöschbedingung kann auch bei den letztgenannten Defekten klar gezeigt werden, daß die Amplitude der Verzerrungsfelder im orthogonalen Raum etwa eine Größenordnung stärker ist als die entsprechende Komponente im physikalischen Raum. Das bedeutet aber, daß der Einbau von topologischen Fehlern, also auch eine chemische Unordnung, in Quasikristallen energetisch günstiger ist, als das Gitter durch phononenartige Defekte zu verzerren.

Überhaupt stellt die schwache Auslöschbedingung ein wichtiges Instrument zur Untersuchung der Verzerrungsfelder insbesondere bei der Bestimmung des Burgersvektors dar, was von einigen anderen Arbeitsgruppen [172, 182, 184] leider nicht erkannt wird. Dies soll im folgenden an einer von Dai veröffentlichten Arbeit [39] exemplarisch diskutiert werden. Dort wird anhand der HOLZ-Linienaufspaltung eine Analyse von Versetzungen in AlCuFe durchgeführt.

Doch zunächst einige der folgenden Diskussion dienliche Vorbemerkungen.

Es sollen nur vollständige Versetzungen betrachtet werden. Es läßt sich dann zeigen, daß der zugehörige Burgersvektor (als ein Vektor des Hypergitters) Komponenten in den beiden Unterräumen besitzt ( $\vec{b}_{\parallel}$  bzw.  $\vec{b}_{\perp}$ ), die immer eine endliche Länge besitzen.

<sup>†</sup>Higher Order Laue Zone, s. a. Kapitel 5.4

Dazu projiziert man einen Vektor  $\vec{X} = a_0 (m_1, m_2, m_3, m_4, m_5, m_6)$  mit den Koeffizienten  $m_i$  aus den ganzen Zahlen und endlicher Länge in die beiden Unterräume  $E_{||}$  und  $E_{\perp}$  (s. Kapitel A.1) und erhält so:

$$\vec{x}_{||} = \frac{a_0}{c} \begin{pmatrix} (m_1 - m_4) + \tau(m_2 + m_5) \\ (m_3 - m_6) + \tau(m_1 + m_4) \\ (m_2 - m_5) + \tau(m_3 + m_6) \end{pmatrix}, \quad \vec{x}_{\perp} = \frac{a_0}{c} \begin{pmatrix} (m_2 + m_5) - \tau(m_1 - m_4) \\ (m_1 + m_4) - \tau(m_3 - m_6) \\ (m_3 + m_6) - \tau(m_2 - m_5) \end{pmatrix},$$

mit  $a_0$  als Hypergitterkonstante und  $c = \sqrt{2(2+\tau)}$ . Fordert man nun  $|\vec{x}_{\perp}| = 0$ , so impliziert dies  $m_k + m_{k+3} = 0$  und  $m_k - m_{k+3} = 0$  ( $k = 1, 2, 3$ ), da  $\tau$  eine irrationale Zahl ist. Damit sind aber die Koeffizienten  $m_i = 0$ , so daß  $|\vec{x}_{||}|$  ebenfalls verschwindet, was im Widerspruch zur Annahme  $|\vec{X}| \neq 0$  steht.

Wie in den vorhergehenden Kapiteln an mehreren Beispielen gezeigt wurde, können Versetzungen mittels Beugungskontrast abgebildet werden. Im Kapitel 6 wurde abgeleitet, daß der Versetzungskontrast verschwindet, falls die Bedingung

$$\vec{g}_{||} \vec{b}_{||} + \vec{g}_{\perp} \vec{b}_{\perp} = 0 \quad (9.1)$$

erfüllt ist.  $\vec{g}_{||}$  und  $\vec{g}_{\perp}$  bezeichnen wiederum die Komponenten des reziproken Gittervektors in den Unterräumen  $E_{||}$  bzw.  $E_{\perp}$ . Hierbei soll nun vor allem die schwache Auslöschbedingung,  $\vec{g}_{||} \vec{b}_{||} = -\vec{g}_{\perp} \vec{b}_{\perp} \neq 0$  (Kapitel 6.4), herausgestellt werden, da es gerade hier offensichtlich ist, daß *a priori* der Einfluß der Phasonenkomponente  $\vec{b}_{\perp}$  nicht vernachlässigt werden kann.

In der von den Dai veröffentlichten Arbeit [39] wird allerdings nur ein Teil der Gleichung 9.1 benutzt, um die Anzahl der Aufspaltungen von HOLZ-Linien zu berechnen. Diese Higer-Order-Laue-Zone-Linien treten auf, wenn man im Transmissionselektronenmikroskop Beugungsbilder mit stark konvergentem Elektronenstrahl aufnimmt und diesen auf den Defekt fokussiert (Siehe auch [152]). In kristallinen Materialien bestimmt man die Anzahl der Aufspaltungen nach  $n = |\vec{g} \vec{b}|$ . Gemäß den Ausführungen von Dai kann man bei quasikristallinen Stoffen die Anzahl der Aufspaltungen allein durch die Phasenverschiebung aufgrund der phononenartigen Verzerrungen des Gitters bestimmen. Unter Vernachlässigung des Phasonenterms erhält er:

$$n = |\vec{g}_{||} \vec{b}_{||}|.$$

Die Auswertung seiner experimentellen Resultate unter Zuhilfenahme dieser Gleichung führt ihn zu der Schlußfolgerung, daß aufgrund der Übereinstimmung seine *ad hoc* gemachte Annahme bezüglich des Phasonenterms gerechtfertigt ist. Desweiteren kann er nur die Größe des Vektors in  $E_{||}$  angeben.  $\vec{b}_{\perp}$  bleibt unbestimmt.

In den folgenden Absätzen soll aber gezeigt werden,

- daß die Vernachlässigung des Phasonenterms eine unzulässige Vereinfachungen darstellt;
- daß durch eine Berücksichtigung der Phasonenkomponente die von Dai gefundenen Ergebnisse sogar besser erklärt werden;

- daß *beide* Komponenten des Verzerrungsfeldes eindeutig bestimmt werden können, falls die Phasonenkomponente der Phasenverschiebung mitbetrachtet wird.

Dai berichtet, daß mittels konventioneller Beugungskontrastmethoden die Richtung des Burgersvektors in  $E_{||}$  als parallel zur  $[1/\bar{1}, 0/1, \bar{1}/0]$ -Richtung bestimmt werden konnte.

Eine solche Analyse verlangt die Beobachtung von zwei starken Auslöschbedingungen (siehe Kapitel 6.4.3).

Bei den hier vorgestellten Experimenten an AlCuFe-Quasikristallen stellt sich diese Forderung als praktisch nicht nachweisbar heraus. Daher ist es um so bedauerlicher, daß die entsprechenden Bilder von Dai nicht veröffentlicht worden sind.

Weil aber ebenfalls keine besondere Kontrastphänome wie Stapelfehlerkontraste oder die Aufspaltung von Versetzungslinien von Dai erwähnt werden, soll nun von der Annahme ausgegangen werden, daß es sich um eine vollständige und perfekte Versetzung handelt, bei der  $\vec{b}_{||}$  parallel zur  $[1/\bar{1}, 0/1, \bar{1}/0]$ -Richtung verläuft.

Nun kann jeder (Burgers-) Vektor, der parallel zu einer bestimmten Richtung in  $E_{||}$  verläuft, als Linearkombination zweier paralleler Vektoren mit inkommensurabilem Längenverhältnis dargestellt werden:

Im Falle der zweizähligen  $[1/\bar{1}, 0/1, \bar{1}/0]$ -Richtung findet sich

$$\vec{b}_{||} = p \frac{a_0}{c} (1/\bar{1}, 0/1, \bar{1}/0) + q \frac{a_0}{c} (\bar{1}/0, 1/1, 0/\bar{1}) \quad (9.2)$$

$$\vec{b}_{\perp} = p \frac{a_0}{c} (\bar{1}/\bar{1}, 1/0, 0/1) + q \frac{a_0}{c} (0/1, 1/\bar{1}, \bar{1}/0). \quad (9.3)$$

Der sechsdimensionale Burgersvektor lautet dann:

$$\vec{B} = a_0(p, \bar{p}, 0, q, 0, \bar{q}) \quad (9.4)$$

Setzt man für  $p$  und  $q$  ganze Zahlen ein, so erhält man alle Vektoren des F-Hypergitters, deren Projektion parallel zu dieser zweizähligen Richtung verläuft. Berücksichtigt man nun noch die Gitterkonstante für AlCuFe  $a_0 = 6.31 \text{ \AA}$  [35] können für beliebige  $p$  und  $q$  und die von Dai angegebenen reziproken Gittervektoren die Werte von  $|\vec{g}_{||}^i \vec{b}_{||}(p, q)|$ ,  $|\vec{g}_{\perp}^i \vec{b}_{\perp}(p, q)|$  und  $|\vec{g}_{||}^i \vec{b}_{||}(p, q) + \vec{g}_{\perp}^i \vec{b}_{\perp}(p, q)|$  berechnet werden. In Tabelle 9.1 und 9.2 sind zwei Beispiele aufgelistet. In Tabelle 9.1 wurde  $p = \pm 1$ ,  $q = \mp 1$  und in Tabelle 9.2  $p = \pm 12$ ,  $q = \mp 7$  gewählt. Zum Vergleich sind die Komponenten der reziproken Gittervektoren so wie die Anzahl der von Dai beobachteten HOLZ-Linienaufspaltungen aufgelistet. Die Indizes der reziproken Gittervektoren wurden hier von dem Indizierungsschema Elfers [56] in die Notation nach Cahn et al. [24] umgeschrieben.

Vergleicht man die Werte von  $|\vec{g}_{||}^i \vec{b}_{||}(p, q)|$  mit der Anzahl der Aufspaltungen ergibt sich in *beiden* Tabellen eine gute Übereinstimmung. Jedoch in Tabelle 9.2 haben sich die Beträge für die Phasenverschiebungen,  $|\vec{g}_{\perp}^i \vec{b}_{\perp}(p, q)|$ , gegenüber Tabelle 9.1 verzehnfacht!

Die Anzahl der Tupel  $(p, q)$ , bei denen die Skalarprodukte  $|\vec{g}_{||}^i \vec{b}_{||}(p, q)|$  mit den beobachteten Aufspaltungen übereinstimmen, ist unendlich groß, aber die zugehörigen Werte von  $|\vec{g}_{\perp}^i \vec{b}_{\perp}(p, q)|$  ändern sich für jedes Paar  $(p, q)$ . Der Grund hierfür liegt in einer Längenänderung von  $|\vec{b}_{\perp}|$ , bei der sich der Wert von  $|\vec{b}_{||}|$  praktisch nicht ändert. Dieser Sachverhalt ist in Tabelle 9.3 anhand von zehn Beispielen dargestellt. Für jedes Zahlenpaar, bei dem der zugehörige Burgersvektor zu einer vollständigen Übereinstimmung zwischen berechneten

| i | $\vec{g}_{  }^i$ [39]              | $ \vec{g}_{  }^i \vec{b}_{  } $ | $ \vec{g}_{\perp}^i \vec{b}_{\perp} $ | $ \vec{g}_{  }^i \vec{b}_{  } + \vec{g}_{\perp}^i \vec{b}_{\perp} $ | n [39] |
|---|------------------------------------|---------------------------------|---------------------------------------|---------------------------------------------------------------------|--------|
| 1 | (4/6, 4/6, 0/0)                    | 1.17                            | 0.17                                  | 1.00                                                                | 1      |
| 2 | (4/6, $\bar{1}/2$ , 2/3)           | 1.89                            | 0.11                                  | 2.00                                                                | 2      |
| 3 | (0/0, 5/8, $\bar{2}/3$ )           | 3.07                            | 0.07                                  | 3.00                                                                | 3      |
| 4 | ( $\bar{2}/3$ , 5/8, $\bar{3}/5$ ) | 3.79                            | 0.21                                  | 4.00                                                                | 4      |
| 5 | ( $\bar{5}/8$ , $\bar{2}/3$ , 0/0) | 0.00                            | 0.00                                  | 0.00                                                                | 0      |
| 6 | ( $\bar{2}/3$ , $\bar{4}/6$ , 1/2) | 1.89                            | 0.11                                  | 2.00                                                                | 2      |
| 7 | (3/5, 3/5, $\bar{3}/5$ )           | 1.89                            | 0.11                                  | 2.00                                                                | 2      |
| 8 | (5/8, $\bar{2}/3$ , 0/0)           | 1.89                            | 0.11                                  | 2.00                                                                | 2      |
| 9 | ( $\bar{3}/5$ , 3/5, $\bar{3}/5$ ) | 3.07                            | 0.07                                  | 3.00                                                                | 3      |

Tabelle 9.1: Berechnete Phasenverschiebungen aufgrund der phononen- und phasonenartigen Verzerrungen (Vielfache von  $2\pi$ ) mit  $\vec{b}_{||} = \frac{a_0}{c}(p - q/\bar{p}, q/p + q, \bar{p}/\bar{q})$ ,  $\vec{b}_{\perp} = \frac{a_0}{c}(\bar{p}/q - p, p + q/\bar{q}, \bar{q}/p)$ ,  $p = \pm 1$  und  $q = \mp 1$  für die von Dai angegebenen reziproken Gittervektoren.

und experimentell beobachteten Aufspaltungen führt (nur Phononanteil!), sind die Werte von  $|\vec{b}_{||}|$  und  $|\vec{b}_{\perp}|$  aufgelistet. Diese Beispiele bestätigen auf der einen Seite zwar den von Dai [39] gefundenen Wert für  $|\vec{b}_{||}|$ , demonstrieren aber andererseits, daß die Schlußfolgerung,  $\vec{b}_{\perp}$  zu vernachlässigen, nicht gerechtfertigt ist.

Neben den Werten von  $|\vec{g}_{||}^i \vec{b}_{||}(p, q)|$  und  $|\vec{g}_{\perp}^i \vec{b}_{\perp}(p, q)|$  sind in den Tabellen 9.1 und 9.2 auch die Werte von  $|\vec{g}_{||}^i \vec{b}_{||}(p, q) + \vec{g}_{\perp}^i \vec{b}_{\perp}(p, q)|$  aufgelistet. Während in Tabelle 9.2 fast alle Werte von den beobachteten abweichen, findet sich in Tabelle 9.1 eine vollständige Übereinstimmung.

Darüberhinaus kann gezeigt werden, daß die Kombination  $p = \pm 1$  und  $q = \mp 1$  das einzige Zahlenpaar ist, daß zu einer vollständigen Übereinstimmung führt.

Dazu berechnet man das *vollständige* Skalarprodukt für die beiden ersten reziproken Gittervektoren, wobei die Werte von  $p$  und  $q$  zunächst offengelassen werden, und setzt das Ergebnis mit der Anzahl der beobachteten HOLZ-Linienaufspaltungen gleich:

$$|2p + 3q| = 1 \Leftrightarrow p = \frac{1}{2} - \frac{3}{2}q \text{ und } p = -\frac{1}{2} - \frac{3}{2}q \quad (9.5)$$

$$|-3p - 5q| = 2 \Leftrightarrow p = \frac{2}{3} - \frac{5}{3}q \text{ und } p = -\frac{2}{3} - \frac{5}{3}q. \quad (9.6)$$

| i | $\vec{g}_{  }^i$ [39]                          | $ \vec{g}_{  }^i \vec{b}_{  } $ | $ \vec{g}_{\perp}^i \vec{b}_{\perp} $ | $ \vec{g}_{  }^i \vec{b}_{  } + \vec{g}_{\perp}^i \vec{b}_{\perp} $ | n [39] |
|---|------------------------------------------------|---------------------------------|---------------------------------------|---------------------------------------------------------------------|--------|
| 1 | (4/6, 4/6, 0/0)                                | 1.28                            | 1.72                                  | 3.00                                                                | 1      |
| 2 | (4/6, $\bar{1}/\bar{2}$ , 2/3)                 | 2.07                            | 1.07                                  | 1.00                                                                | 2      |
| 3 | (0/0, 5/8, $\bar{2}/\bar{3}$ )                 | 3.34                            | 0.66                                  | 4.00                                                                | 3      |
| 4 | ( $\bar{2}/\bar{3}$ , 5/8, $\bar{3}/\bar{5}$ ) | 4.13                            | 2.13                                  | 2.00                                                                | 4      |
| 5 | ( $\bar{5}/\bar{8}$ , $\bar{2}/\bar{3}$ , 0/0) | 0.00                            | 0.00                                  | 0.00                                                                | 0      |
| 6 | ( $\bar{2}/\bar{3}$ , $\bar{4}/\bar{6}$ , 1/2) | 2.07                            | 1.07                                  | 1.00                                                                | 2      |
| 7 | (3/5, 3/5, $\bar{3}/\bar{5}$ )                 | 2.07                            | 1.07                                  | 1.00                                                                | 2      |
| 8 | (5/8, $\bar{2}/\bar{3}$ , 0/0)                 | 2.07                            | 1.07                                  | 1.00                                                                | 2      |
| 9 | ( $\bar{3}/\bar{5}$ , 3/5, $\bar{3}/\bar{5}$ ) | 3.34                            | 0.66                                  | 4.00                                                                | 3      |

Tabelle 9.2: Berechnete Phasenverschiebungen aufgrund der phononen- und phasonenartigen Verzerrungen (Vielfache von  $2\pi$ ) wie in Tabelle 9.1 aber mit  $p = \pm 12$  und  $q = \mp 7$  für die von Dai angegebenen reziproken Gittervektoren.

| p        | q        | $ \vec{b}_{  } $ | $ \vec{b}_{\perp} $ | p        | q        | $ \vec{b}_{  } $ | $ \vec{b}_{\perp} $ |
|----------|----------|------------------|---------------------|----------|----------|------------------|---------------------|
| $\pm 1$  | $\mp 1$  | 2.90Å            | 12.28Å              | $\pm 35$ | $\mp 22$ | 2.80Å            | 368.90Å             |
| $\pm 12$ | $\mp 7$  | 3.16Å            | 123.93Å             | $\pm 43$ | $\mp 27$ | 3.22Å            | 453.08Å             |
| $\pm 20$ | $\mp 12$ | 2.74Å            | 208.11Å             | $\pm 46$ | $\mp 28$ | 3.26Å            | 480.54Å             |
| $\pm 22$ | $\mp 14$ | 3.06Å            | 232.68Å             | $\pm 54$ | $\mp 33$ | 2.84Å            | 564.73Å             |
| $\pm 33$ | $\mp 20$ | 3.00Å            | 344.33Å             | $\pm 56$ | $\mp 35$ | 2.96Å            | 589.29Å             |

Tabelle 9.3: Die Werte von  $|\vec{b}_{||}|$  und  $|\vec{b}_{\perp}|$  für zehn Zahlenpaare  $(p, q)$  berechnet mit den in Tabelle 9.1 angegebenen Gittervektoren. Für jedes Beispiel stimmen die Werte von  $|\vec{b}_{||} \vec{g}_{||}^i|$  mit den von Dai beobachteten Aufspaltungszahlen überein.

Diese Gleichungen beschreiben zwei Sätze parallel verlaufender Geraden. Im Prinzip gibt es nun drei Möglichkeiten, wie diese Geraden zu einander angeordnet sein können.

- Die Geraden verlaufen parallel. Somit hat das Gleichungssystem keine Lösung und der Burgersvektor kann nicht eindeutig bestimmt werden.
- Die Geraden sind paarweise identisch. Damit erhält man unendlich viele Lösungen für  $p$  und  $q$ . Der Burgersvektor ist, solange man nicht weitere Gleichungen betrachtet, beliebig.
- Die Geraden bilden ein Parallelogramm. In diesem Fall gibt es genau vier Lösungen für  $p$  und  $q$ . Beschränkt man sich auf Werte von  $p > 0$ , ergeben sich zwei Lösungen.

Die Gleichungen 9.5 und 9.6 beschreiben den dritten Fall.

Die Anzahl der Lösungen reduziert sich dann auf eine, wenn weitere Gleichungen berücksichtigt werden. Daher ist eine eindeutige Bestimmung von  $|\vec{b}_{||}|$  und  $|\vec{b}_{\perp}|$  durchführbar.

Aus Tabelle 9.3 ergibt sich für  $p = \pm 1$  und  $q = \mp 1$ , daß  $|\vec{b}_{||}| = 2.90 \text{ \AA}$  und  $|\vec{b}_{\perp}| = 12.28 \text{ \AA}$ . Es ist offensichtlich, daß die Phasonenkomponente nicht nur nicht vernachlässigt werden darf, sondern die Phononenkomponente sogar um einen Faktor vier übersteigt. Dies wiederum bestätigt die in dieser Arbeit gefundenen Relationen zwischen den Amplituden der Verzerrungsfelder in den beiden Unterräumen  $E_{||}$  und  $E_{\perp}$ .

Die Ergebnisse der vorliegenden Studie zeigen, dass die Wahrnehmung von Gewalt in der Familie von verschiedenen Faktoren beeinflusst wird, die in der folgenden Tabelle zusammengefasst sind.

Die Ergebnisse der vorliegenden Studie zeigen, dass die Wahrnehmung von Gewalt in der Familie von verschiedenen Faktoren beeinflusst wird, die in der folgenden Tabelle zusammengefasst sind.

Die Ergebnisse der vorliegenden Studie zeigen, dass die Wahrnehmung von Gewalt in der Familie von verschiedenen Faktoren beeinflusst wird, die in der folgenden Tabelle zusammengefasst sind.

Die Ergebnisse der vorliegenden Studie zeigen, dass die Wahrnehmung von Gewalt in der Familie von verschiedenen Faktoren beeinflusst wird, die in der folgenden Tabelle zusammengefasst sind.

Die Ergebnisse der vorliegenden Studie zeigen, dass die Wahrnehmung von Gewalt in der Familie von verschiedenen Faktoren beeinflusst wird, die in der folgenden Tabelle zusammengefasst sind.

Die Ergebnisse der vorliegenden Studie zeigen, dass die Wahrnehmung von Gewalt in der Familie von verschiedenen Faktoren beeinflusst wird, die in der folgenden Tabelle zusammengefasst sind.

Die Ergebnisse der vorliegenden Studie zeigen, dass die Wahrnehmung von Gewalt in der Familie von verschiedenen Faktoren beeinflusst wird, die in der folgenden Tabelle zusammengefasst sind.

Die Ergebnisse der vorliegenden Studie zeigen, dass die Wahrnehmung von Gewalt in der Familie von verschiedenen Faktoren beeinflusst wird, die in der folgenden Tabelle zusammengefasst sind.

## Kapitel 10

# ZUSAMMENFASSUNG

Diese Arbeit befaßt sich mit der Untersuchung von Defekten in ikosaedrischen Quasikristallen mit Hilfe von verschiedenen, elektronenmikroskopischen Methoden.

Nach einem einleitenden Kapitel über die Entdeckung und verschiedene physikalische Eigenschaften der Quasikristalle wird beschrieben, wie man das Gitter und die Beugungsbilder von Quasikristallen berechnen kann. Dabei wird erklärt, daß sich ikosaedrische Quasigitter von sechsdimensionalen, periodischen Gittern ableiten lassen. Der sechsdimensionale Raum wird dabei in zwei dreidimensionale, zueinander orthogonale Unterräume unterteilt. Im ersten, dem physikalischen Raum  $E_{||}$ , entsteht das dreidimensionale Gitter. Der zweite Unterraum wird als Orthogonalraum  $E_{\perp}$  bezeichnet und dient als Konstruktionshilfe.

Daran anschließend wird eine Einführung in die Theorie der Defekte von quasiperiodischen Gittern gegeben. Es zeigt sich, daß die Defekte durch Verzerrungsfelder in einem sechsdimensionalen Gitter,  $\vec{U}(\vec{x}_{||})$ , und in den Unterräumen  $E_{||}$ ,  $\vec{u}_{||}(\vec{x}_{||})$ , und  $E_{\perp}$ ,  $\vec{u}_{\perp}(\vec{x}_{||})$ , charakterisiert werden können.

In dem nun folgenden Teil wird im Rahmen einer kinematischen Kontrasttheorie und unter Berücksichtigung der Säulennäherung abgeleitet, unter welchen Abbildungsbedingungen Defekte im Transmissionselektronenmikroskop zu sehen sind.

Die wichtigsten Ergebnisse sind hier:

Im Gegensatz zur Analyse von Defekten in periodischen Gittern finden sich *zwei* verschiedene Auslöschbedingungen.

Die erste ist das direkte Analogon zur Auslöschbedingung für die Untersuchung von Defekten in Kristallen. Der Defekt ist nicht zu sehen, falls unter Zweistrahlbedingungen der zugehörige reziproke Gittervektor senkrecht zum Verzerrungsfeld steht:  $\vec{g}\vec{u} = 0$ . Bei der Analyse von Versetzungen in Quasikristallen lautet sie:  $\vec{g}_{||}\vec{u}_{||} = 0$  und  $\vec{g}_{\perp}\vec{u}_{\perp} = 0$ . Der zweite Term ergibt sich aus der Beschreibung ikosaedrischer, quasiperiodischer Gitter mit Hilfe von sechsdimensionalen periodischen Gittern. Diese Auslöschbedingung soll als starke Auslöschbedingung bezeichnet werden. Im Experiment erkennt man diese Bedingung daran, daß der Defektkontrast mit *allen* Reflexen einer systematischen Reihe verschwindet. Durch Beobachtung zweier starker Auslöschbedingungen kann die Richtung der Verzerrungsfelder innerhalb der Unterräume  $E_{||}$  und  $E_{\perp}$  festgelegt werden.

Die zweite Auslöschbedingung lautet:  $\vec{g}_{||}\vec{u}_{||} + \vec{g}_{\perp}\vec{u}_{\perp} = 0$  mit  $\vec{g}_{||}\vec{u}_{||} \neq 0$ . Dies ist ein neuartiger Effekt, der aus der Verwendung höherdimensionaler, periodischer Gitter für die Beschreibung quasiperiodischer Gitter und deren Defekte resultiert. Hier stehen die reziproken Gittervektoren nicht senkrecht zu den Verzerrungsfeldern. Dennoch verschwindet der Versetzungskontrast, da sich die durch die Verzerrungsfelder induzierten Phasenverschiebungen des Elektronenstrahls genau kompensieren. Dieses Phänomen soll schwache

Auslöschbedingung genannt werden. Hier ist es so, daß innerhalb einer systematischen Reihe nur *ein* reziproker Gittervektor (und ganzzahlige Vielfache davon) zur Auslöschung des Versetzungskontrastes führt. Durch die Beobachtung der schwachen Auslöschbedingung ist es möglich, quantitative Angaben über das Größenverhältnis der Verzerrungsfelder zueinander zu machen. Hat man die Richtung der Verzerrungsfelder durch Beobachtung der starken Auslöschbedingung festlegen können, ermöglicht die Beobachtung der schwachen Auslöschbedingung die Bestimmung eines sechsdimensionalen Burgersvektors.

Nach diesem theoretischen Teil schließen sich die experimentellen Untersuchungen an. Folgende Resultate wurden gewonnen:

In langsam erstarrten AlCuFe-Quasikristallen wurde der Kontrast von Versetzungen untersucht und es wurden erstmalig quantitative Resultate erzielt. Die Analyse mit Hilfe der oben abgeleiteten Kontrasttheorie zeigt, daß die Hauptkomponente der Verzerrungsfelder senkrecht zu einer zweizähligen Richtung des Quasikristalls liegt. Da die starke Auslöschbedingung bei jeder Versetzung nur einmal beobachtet werden konnte, ist es nicht möglich die Verzerrungsfelder durch einen Richtungsvektor zu charakterisieren. Allerdings zeigt die Beobachtung der schwachen Auslöschbedingung, daß entlang einer zweizähligen Richtung die Verzerrungsfeldkomponente im Orthogonalraum eine Zehnerpotenz größer ist als die Komponente im physikalischen Raum.

In langsam erstarrten, ikosaedrischen  $\text{Al}_{70}\text{Pd}_{20}\text{Mn}_{10}$ -Quasikristallen wurden plattenförmige Einschlüsse gefunden, die als Ausscheidungen der dekalagonalen  $\text{Al}_{70}\text{Pd}_{20}\text{Mn}_{10}$ -Phase identifiziert werden konnten. An den Rändern dieser Ausscheidungen finden sich Fehlpassungsversetzungen, die mit Hilfe der starken und schwachen Auslöschbedingung analysiert wurden. Dabei zeigte es sich, daß die Burgersvektoren in den beiden Unterräumen parallel zu fünfzähligen Richtungen der ikosaedrischen Matrix verlaufen. Bei diesen Versetzungen war es erstmals möglich, eine vollständige Analyse der sechsdimensionalen Burgersvektorrichtung durchzuführen, was zudem als Bestätigung der im theoretischen Teil dieser Arbeit vorhergesagten Kontrastphänomene verstanden werden kann.

Die beiden letzten Experimente befassen sich mit dem Zusammenhang von mechanischen und mikroskopischen Eigenschaften der Quasikristalle. Hier wird untersucht, ob ein Versetzungsmechanismus mit den plastischen Eigenschaften verbunden ist.

Dazu wurden erstmalig Verformungsexperimente bei Raumtemperatur als auch bei hohen Temperaturen an Einkuasikristallen des Systems AlPdMn durchgeführt und die Proben anschließend im Transmissionselektronenmikroskop untersucht.

Die Grundlage für diese Experimente bildet die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführte Züchtung von großen Einkuasikristallen (ca. 8 cm lang und 1 cm im Durchmesser) mit Hilfe der Czochralskimethode.

Bei Raumtemperatur wurden in polierte Platten dieses Materials mit einem Mikrohärtprüfgerät Furchen eingeritzt und der Quasikristall so plastisch verformt. Im Rasterelektronenmikroskop konnten als makroskopische Verformungsmechanismen sowohl Mikropflügen als auch Sprödbbruch festgestellt werden. Anschließend wurden diese Furchen im Querschnitt präpariert und im Transmissionselektronenmikroskop untersucht. Es konnten keine Versetzungen gefunden werden. Stattdessen wurden Mikrorisse und eine Unterteilung der einkuasikristallinen Probe in gegeneinander verkippte Subkörner entdeckt. Diese Mikrorißbildung wird zusammen mit einer Korngrenzenableitung als ein mikroskopischer Verformungsmechanismus bei Raumtemperatur vorgeschlagen.

In einem weiteren Verformungsexperiment wurden die plastischen Eigenschaften bei hoher Temperatur untersucht. Dazu wurden in einer Verformungsmaschine kleine, einquasikristalline Quader bei einer Temperatur von  $750^{\circ}\text{C}$  in einem Druckversuch verformt und anschließend im Transmissionselektronenmikroskop analysiert. Bemerkenswert ist der deutliche Abfall der Verformungskurve nach Erreichen der oberen Streckgrenzen bei etwa 400 MPa und das Fehlen einer unteren Streckgrenze bis zu einer Verformung von mehr als 25%.

Die erstmalig durchgeführte Analyse solcher verformter Einquasikristalle im Elektronenmikroskop belegt ganz deutlich die Bildung von Versetzungen. In verformten Proben finden sich Versetzungsdichten, die um drei Größenordnungen über den in unverformten Vergleichsproben bestimmten Werten liegen.

Eine Analyse der Versetzungskontraste führte zu den Ergebnissen, wie sie auch schon für die Defekte in langsam erstarrten AlCuFe-Quasikristallen gefunden wurden. D.h., eine Bestimmung eines Burgersvektors mit Hilfe der Kontrastexperimente ist nicht eindeutig möglich. Dies kann aber nicht auf eine unzureichende Theorie zur Interpretation der bei Versetzungen auftretenden Kontraste zurückgeführt werden, da diese Theorie bei der Analyse der Fehlpassungsversetzungen in AlPdMn sehr gut bestätigt werden konnte. Vielmehr bedeutet dies für die Verzerrungsfelder, daß die mit ihnen verbundenen Verschiebungen unter Umständen mit Hilfe von mehreren Vektoren charakterisiert werden müssen. Dabei deutet die statistische Auswertung der Experimente darauf hin, daß Verzerrungen entlang zwei- und fünfzähliger Richtungen die auftretenden Verschiebungen am besten beschreiben.

Die vorliegende Arbeit ist eine Untersuchung der Auswirkungen der Einführung der neuen Steuerreform auf die Einkommensteuer in der Bundesrepublik Deutschland. Die Ergebnisse zeigen, dass die Einführung der neuen Steuerreform zu einer Verringerung der Einkommensteuer führt. Dies ist vor allem auf die Einführung der neuen Steuerbefreiungen und die Erhöhung der Freibeträge zurückzuführen. Die Ergebnisse zeigen auch, dass die Einführung der neuen Steuerreform zu einer Verringerung der Einkommensteuer führt, die in der Bundesrepublik Deutschland. Die Ergebnisse zeigen auch, dass die Einführung der neuen Steuerreform zu einer Verringerung der Einkommensteuer führt, die in der Bundesrepublik Deutschland.

Die Ergebnisse zeigen auch, dass die Einführung der neuen Steuerreform zu einer Verringerung der Einkommensteuer führt, die in der Bundesrepublik Deutschland. Die Ergebnisse zeigen auch, dass die Einführung der neuen Steuerreform zu einer Verringerung der Einkommensteuer führt, die in der Bundesrepublik Deutschland. Die Ergebnisse zeigen auch, dass die Einführung der neuen Steuerreform zu einer Verringerung der Einkommensteuer führt, die in der Bundesrepublik Deutschland.

Die Ergebnisse zeigen auch, dass die Einführung der neuen Steuerreform zu einer Verringerung der Einkommensteuer führt, die in der Bundesrepublik Deutschland. Die Ergebnisse zeigen auch, dass die Einführung der neuen Steuerreform zu einer Verringerung der Einkommensteuer führt, die in der Bundesrepublik Deutschland. Die Ergebnisse zeigen auch, dass die Einführung der neuen Steuerreform zu einer Verringerung der Einkommensteuer führt, die in der Bundesrepublik Deutschland. Die Ergebnisse zeigen auch, dass die Einführung der neuen Steuerreform zu einer Verringerung der Einkommensteuer führt, die in der Bundesrepublik Deutschland.

## ANHANG

### A.1 Quasikristall-Mathematik

Im folgenden werden einige wichtige Relationen für das Rechnen mit Vektoren, die bei der Konstruktion quasiperiodischer Gitter bzw. deren Beugungsbilder verwendet werden, abgeleitet.

Die Position eines Gitterpunktes im Quasigitter kann auf zweierlei Art und Weise beschrieben werden.

Zum einen kann man die Koordinaten des sechsdimensionalen Gitterpunktes  $\vec{X}$  angeben, der bei der Projektionsmethode zu einem Gitterpunkt des dreidimensionalen Gitters wird:

$$\vec{X} = \begin{pmatrix} m_1 \\ m_2 \\ m_3 \\ m_4 \\ m_5 \\ m_6 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.1})$$

Die Gitterkonstante  $a_0$  des sechsdimensionalen Gitters ist hier zu eins gesetzt. Um die Koordinaten des Gitterpunktes im dreidimensionalen Quasigitter zu bestimmen, wendet man auf  $X_6$  die Transformationsmatrix  $M$  an [24]:

$$M\vec{X} = \frac{1}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} 1 & \tau & 0 & -1 & \tau & 0 \\ \tau & 0 & 1 & \tau & 0 & -1 \\ 0 & 1 & \tau & 0 & -1 & \tau \\ -\tau & 1 & 0 & \tau & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -\tau & 1 & 0 & \tau \\ 0 & -\tau & 1 & 0 & \tau & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_1 \\ m_2 \\ m_3 \\ m_4 \\ m_5 \\ m_6 \end{pmatrix} \quad (\text{A.2})$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} (m_1 - m_4) + \tau(m_2 + m_5) \\ (m_3 - m_6) + \tau(m_1 + m_4) \\ (m_2 - m_5) + \tau(m_3 + m_6) \\ (m_2 + m_5) - \tau(m_1 - m_4) \\ (m_1 + m_4) - \tau(m_3 - m_6) \\ (m_3 + m_6) - \tau(m_2 - m_5) \end{pmatrix}. \quad (\text{A.3})$$

Dieser Vektor wird in zwei Komponenten aufgeteilt. Die oberen drei Koordinaten be-

schreiben die Lage im Unterraum  $E_{||}$ , die unteren drei die Position im Unterraum  $E_{\perp}$ :

$$\vec{x}_{||} = \frac{1}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} (m_1 - m_4) + \tau(m_2 + m_5) \\ (m_3 - m_6) + \tau(m_1 + m_4) \\ (m_2 - m_5) + \tau(m_3 + m_6) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} h + \tau h' \\ k + \tau k' \\ l + \tau l' \end{pmatrix} \quad (\text{A.4})$$

und

$$\vec{x}_{\perp} = \frac{1}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} (m_2 + m_5) - \tau(m_1 - m_4) \\ (m_1 + m_4) - \tau(m_3 - m_6) \\ (m_3 + m_6) - \tau(m_2 - m_5) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2(2+\tau)}} \begin{pmatrix} h' - \tau h \\ k' - \tau k \\ l' - \tau l \end{pmatrix}. \quad (\text{A.5})$$

Diese Vektoren werden dann geschrieben als:

$$\vec{x}_{||} = (h/h', k/k', l/l') \text{ bzw. } \vec{x}_{\perp} = (h'/\bar{h}, k'/\bar{k}, l'/\bar{l}), \quad (\text{A.6})$$

dabei wird der konstante Vorfaktor  $\frac{1}{\sqrt{2(2+\tau)}}$  nicht mitgeschrieben. Dieser soll auch im folgenden der Übersichtlichkeit halber weggelassen werden.

Die umgekehrte Transformation lautet:

$$\begin{aligned} m_1 &= \frac{1}{2}(h + k') & m_2 &= \frac{1}{2}(l + h') \\ m_3 &= \frac{1}{2}(k + l') & m_4 &= \frac{1}{2}(-h + k') \\ m_5 &= \frac{1}{2}(-l + h') & m_6 &= \frac{1}{2}(-k + l'). \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

An dieser Schreibweise der Vektoren  $\vec{x}_{||}$  und  $\vec{x}_{\perp}$  erkennt man, daß zwischen beiden eine eindeutige Beziehung besteht.

Damit kann nun folgende Eigenschaft gezeigt werden:

$$\vec{g}_{||}' = \tau \vec{g}_{||} \Leftrightarrow \vec{g}_{\perp}' = -1/\tau \vec{g}_{\perp} \quad (\text{A.8})$$

$$\vec{g}_{||}' = \tau \begin{pmatrix} h + \tau h' \\ k + \tau k' \\ l + \tau l' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h' + \tau(h + h') \\ k' + \tau(k + k') \\ l' + \tau(l + l') \end{pmatrix}. \quad (\text{A.9})$$

Dabei wurde die Beziehung  $\tau^2 = \tau + 1$  ausgenutzt. Der zugehörige Vektor  $\vec{g}'_o$  lautet dann:

$$\vec{g}_{\perp}' = \begin{pmatrix} (h + h') - \tau h \\ (k + k') - \tau k \\ (l + l') - \tau l \end{pmatrix}. \quad (\text{A.10})$$

Multipliziert man  $\vec{g}_{\perp}'$  mit  $-1/\tau$  erhält man:

$$-1/\tau \vec{g}_{\perp}' = \begin{pmatrix} -(h + h')/\tau + h \\ -(k + k')/\tau + k \\ -(l + l')/\tau + l \end{pmatrix}. \quad (\text{A.11})$$

Nun gilt  $\tau^{-1} = \tau - 1$ , und daraus folgt:

$$-1/\tau \vec{g}_{\perp}' = \begin{pmatrix} h' - \tau h \\ k' - \tau k \\ l' - \tau l \end{pmatrix} = \vec{g}_{\perp} \quad (\text{q.e.d.}). \quad (\text{A.12})$$

Eine weitere, wichtige Relation ist:

$$\vec{b}_{||} \vec{g}_{||} = 0 \Leftrightarrow \vec{b}_{\perp} \vec{g}_{\perp} = 0. \quad (\text{A.13})$$

Die Vektoren  $\vec{g}_{||}$  und  $\vec{b}_{||}$  lassen sich schreiben als:

$$\vec{b}_{||} = \begin{pmatrix} h_b + \tau h'_b \\ k_b + \tau k'_b \\ l_b + \tau l'_b \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \vec{g}_{||} = \begin{pmatrix} h_g + \tau h'_g \\ k_g + \tau k'_g \\ l_g + \tau l'_g \end{pmatrix}. \quad (\text{A.14})$$

Daraus folgt für das Skalarprodukt  $\vec{b}_{||} \vec{g}_{||} = 0$ :

$$\begin{aligned} \vec{b}_{||} \vec{g}_{||} &= 0 \\ &= h_b h_g + \tau^2 h'_b h'_g + \tau(h'_b h_g + h_b h'_g) + \\ &\quad k_b k_g + \tau^2 k'_b k'_g + \tau(k'_b k_g + k_b k'_g) + \\ &\quad l_b l_g + \tau^2 l'_b l'_g + \tau(l'_b l_g + l_b l'_g) \\ &= h_b h_g + h'_b h'_g + \tau(h'_b h_g + h_b h'_g) + \\ &\quad k_b k_g + k'_b k'_g + \tau(k'_b k_g + k_b k'_g) + \\ &\quad l_b l_g + l'_b l'_g + \tau(l'_b l_g + l_b l'_g). \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Aus Gleichung (A.15) folgt dann:

$$0 = h_b h_g + h'_b h'_g + k_b k_g + k'_b k'_g + l_b l_g + l'_b l'_g \quad (\text{A.16})$$

und

$$0 = h'_b h'_g + h'_b h_g + h_b h'_g + k'_b k'_g + k'_b k_g + k_b k'_g + l'_b l'_g + l'_b l_g + l_b l'_g. \quad (\text{A.17})$$

Schreibt man nun das Skalarprodukt der zugehörigen Vektoren  $\vec{g}_{\perp}$  und  $\vec{b}_{\perp}$  mit Hilfe von Gl. (A.4) und Gl. (A.5) aus, so ergibt sich mit Gl. (A.16) und Gl. (A.17):

$$\begin{aligned} \vec{b}_{\perp} \vec{g}_{\perp} &= h'_b h'_g + \tau^2 h_b h_g - \tau(h_b h'_g + h'_b h_g) + \\ &\quad k'_b k'_g + \tau^2 k_b k_g - \tau(k_b k'_g + k'_b k_g) + \\ &\quad l'_b l'_g + \tau^2 l_b l_g - \tau(l_b l'_g + l'_b l_g) \\ &= \underbrace{h_b h_g + h'_b h'_g}_{=0 \text{ aus Gl. (A.16)}} + \tau(h_b h_g - h'_b h_g - h_b h'_g) + \\ &\quad \underbrace{k_b k_g + k'_b k'_g}_{=0 \text{ aus Gl. (A.16)}} + \tau(k_b k_g - k'_b k_g - k_b k'_g) + \\ &\quad \underbrace{l_b l_g + l'_b l'_g}_{=0 \text{ aus Gl. (A.16)}} + \tau(l_b l_g - l'_b l_g - l_b l'_g) \\ &\quad \underbrace{\tau(-h'_b h'_g - h'_b h_g - h_b h'_g)}_{\text{Gl. (A.16)}} + \\ &\quad \underbrace{\tau(-k'_b k'_g - k'_b k_g - k_b k'_g)}_{\text{Gl. (A.16)}} + \\ &\quad \underbrace{\tau(-l'_b l'_g - l'_b l_g - l_b l'_g)}_{\text{Gl. (A.17)}} \stackrel{\text{Gl. (A.17)}}{=} 0. \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Der Beweis für den umgekehrten Schluß erfolgt entsprechend.

Verschwundet das Skalarprodukt zweier Vektoren in den beiden Unterräumen  $E_{||}$  und  $E_{\perp}$ , so gilt das natürlich auch für den zugehörigen Vektor im sechsdimensionalen Hypergitter:

$$\vec{g}_{||} \vec{b}_{||} = 0 (\Leftrightarrow \vec{g}_{\perp} \vec{b}_{\perp} = 0) \Rightarrow \vec{G} \vec{B} = 0. \quad (\text{A.19})$$

Die umgekehrte Folgerung ist im allgemeinen *nicht* möglich! Das ist der Grund für eine Unterscheidung zwischen einer starken und einer schwachen Auslöschbedingung.

## A.2 Elektronenbeugung am Festkörper

Die Elektronenstreuung kann mit folgendem Modell beschrieben werden [86]:

Der zu untersuchende Festkörper werde mit einer ebenen Welle mit dem Wellenvektor  $|\vec{k}_0| = 1/\lambda$  bestrahlt (Abb. A.1). Die Welle am Ort  $\vec{r}$  des Streuzentrums und zur Zeit  $t$

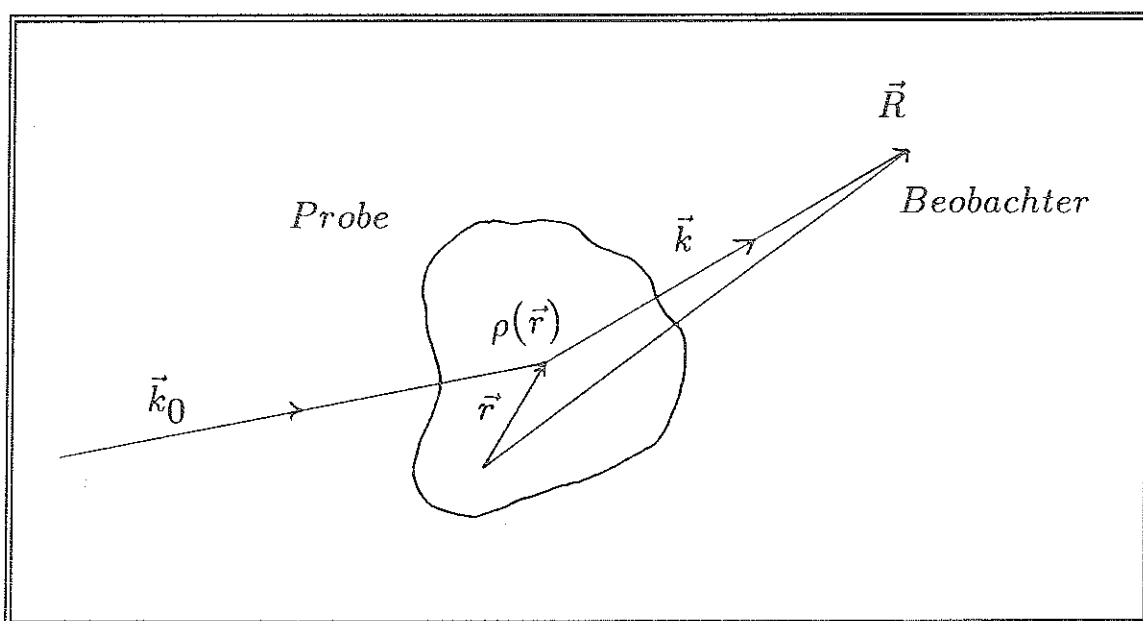


Abbildung A.1: Lage und Orientierung der bei der Untersuchung der kinematischen Elektronenbeugung benutzten Vektoren in Bezug auf Probe und Beobachter.

kann dann durch

$$A_p(\vec{r}, t) = A_0 e^{-2\pi i \vec{k}_0 \vec{r} + i\omega t} \quad (\text{A.20})$$

beschrieben werden. Die Zeitabhängigkeit von  $A_p$  soll im folgenden aber nicht berücksichtigt werden, da im Experiment ohnehin nur zeitliche Mittelwerte beobachtet werden.

Die einfallenden Wellen regen nun den streuenden Körper an den sogenannten Streuzentren zur Emission von Kugelwellen an, deren Amplitude und Phasenlage relativ zur anregenden Strahlung durch die im allgemeinen komplexe Streudichte  $\rho(\vec{r})$  bestimmt wird. Das streuende Atomgitter soll als starr angenommen werden, so daß  $\rho(\vec{r})$  zeitunabhängig ist. Insgesamt sollen die einfallenden Wellen nur einmal gestreut werden. Diese Annahme der Einfachstreuung bezeichnet man als kinematische Näherung und entspricht der 1. Bornschen Approximation in der quantenmechanischen Beschreibung des Streuprozesses. Diese Annahme ist berechtigt für die Streuung von Neutronen und Röntgenstrahlung, gilt aber auch für Elektronen hoher Energie, wie sie in der Elektronenmikroskopie benutzt werden.

Die Amplitude der Kugelwelle am Ort  $\vec{R}$  des Beobachters ist:

$$A_b = A_p(\vec{r}) \rho(\vec{r}) e^{-2\pi i \vec{k} \cdot |\vec{R} - \vec{r}|} \frac{1}{|\vec{R} - \vec{r}|}. \quad (\text{A.21})$$

Der Vektor  $\vec{k}$  zeigt hier aber in die Richtung von  $\vec{R} - \vec{r}$ . Somit kann  $A_b$  umgeschrieben werden zu

$$A_b = A_p(\vec{r}) \rho(\vec{r}) e^{-2\pi i \vec{k} \cdot (\vec{R} - \vec{r})} \frac{1}{|\vec{R} - \vec{r}|}. \quad (\text{A.22})$$

Im Experiment können die Entfernungen  $\vec{r}$  in der Probe gegenüber dem Abstand  $\vec{R}$  zum Beobachter vernachlässigt werden, d.h.,

$$|\vec{R} - \vec{r}| \simeq |\vec{R}| = R. \quad (\text{A.23})$$

Damit wird Gleichung (A.22) zu

$$A_b = A_p(\vec{r}) \rho(\vec{r}) \frac{1}{R} e^{-2\pi i \vec{k} \cdot (\vec{R} - \vec{r})}, \quad (\text{A.24})$$

bzw. mit Gleichung (A.20)

$$A_b = A_0 e^{-2\pi i \vec{k} \cdot \vec{R}} \frac{1}{R} \rho(\vec{r}) e^{+2\pi i \vec{r} \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0)}. \quad (\text{A.25})$$

Für feste Beobachtungsbedingungen, d.h., Ort  $\vec{R}$  und Richtung  $\vec{k}$  ändern sich nicht, ist der erste Teil der rechten Gleichungsseite eine Konstante:

$$A_b = \text{const} \cdot \rho(\vec{r}) e^{+2\pi i \vec{r} \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0)}. \quad (\text{A.26})$$

Den Strukturfaktor  $F_s(\vec{K})$ , d.h. die Gesamtstreuamplitude in Richtung von  $\vec{k}$ , erhält man durch die phasenrichtige Aufintegration aller Kugelwellen:

$$F_s(\vec{K}) \propto \int \rho(\vec{r}) e^{+2\pi i \vec{r} \cdot \vec{K}} d\vec{r}, \quad (\text{A.27})$$

wobei  $\vec{K} = \vec{k} - \vec{k}_0$  als Streuvektor bezeichnet wird. Da im Beugungsexperiment nicht Amplitude *und* Phase, sondern nur die Intensität der gestreuten Wellen beobachtet werden kann, muß für einen Vergleich mit experimentellen Ergebnissen noch das Betragsquadrat von  $F_s(\vec{K})$  berechnet werden:

$$I(\vec{K}) \propto |F_s(\vec{K})|^2 \propto \left| \int \rho(\vec{r}) e^{2\pi i \vec{K} \cdot \vec{r}} d\vec{r} \right|^2 = |\mathcal{F}(\rho(\vec{r}))|^2. \quad (\text{A.28})$$

Hier sieht man nun, daß in kinematischer Näherung die Intensitätsverteilung der Streustrahlung  $I(\vec{K})$  durch das Betragsquadrat der Fouriertransformierten der Streudichte  $\rho(\vec{r})$  bezüglich des Streuvektors  $\vec{K}$  berechnet werden kann. Für ein Gitter mit einer diskreten Verteilung der Streudichte geht der Strukturfaktor über in eine Summe über alle Gitterplätze  $\vec{r}^j$  mit den atomaren Streudichten  $f^j$ :

$$F_s(\vec{K}) \propto \sum_j f^j e^{2\pi i \vec{r}^j \cdot \vec{K}} \quad (\text{A.29})$$

## A.2.1 Das reziproke Gitter

Die abgeleitete Formel für die Streuamplitude kann nun benutzt werden, um das reziproke Gitter zu definieren. Die Funktionen  $F_s(\vec{K})$  bzw.  $I(\vec{K})$  werden nur für die Vektoren  $\vec{K}$  Beiträge liefern, für die gilt:

$$\vec{K}\vec{r} = (\vec{k} - \vec{k}_0)\vec{r} = m \quad \text{mit } m \in \mathbb{Z}. \quad (\text{A.30})$$

Die Orte  $\vec{K}$ , an denen diese Bedingung erfüllt ist, bilden dann *per definitionem* die Punkte des reziproken Gitters. Nun ist die Anzahl der möglichen Vektoren  $\vec{K}$ , die diese Bedingung erfüllen können, unendlich groß. Für die Beschreibung des reziproken Gitters reicht es aber aus, wenn man aus der Menge der Vektoren  $\vec{K}$  einen Satz linear unabhängiger Vektoren  $\vec{g}_i$  herausnimmt, die dann eine Basis des reziproken Gitters bilden:

$$\vec{K} = \sum_i a_i \vec{g}_i \quad \text{mit } a_i \in \mathbb{Z}. \quad (\text{A.31})$$

Damit ist es dann möglich, jeden reziproken Gitterpunkt durch einen Satz ganzer Zahlen, das sind die Koeffizienten  $a_i$ , eindeutig zu indizieren. Ein Beispiel:

Für ein periodisches Punktgitter in zwei Dimensionen mit den Gitterkonstanten  $d_x$  und  $d_y$  wird die Streudichte durch eine Summe von Deltafunktionen beschrieben:

$$\rho(x, y) = \sum_{m, n} \delta(x - md_x) \delta(y - nd_y) \quad \text{mit } m, n \in \mathbb{Z}. \quad (\text{A.32})$$

Die Streuamplitude einer Welle mit dem Streuvektor  $(\vec{k}_x, \vec{k}_y)$ , die an einem solchen Gitter gestreut wird, kann nach Gl. (A.27) berechnet werden und ist wiederum eine Summe von Deltafunktionen. Dieser Ausdruck beschreibt das zu  $\rho(\vec{k}_x, \vec{k}_y)$  reziproke Gitter:

$$F_s(k_x, k_y) = \sum \delta(k_x - m/d_x) \delta(k_y - n/d_y). \quad (\text{A.33})$$

Die Vektoren, die hier das reziproke Gitter aufspannen, sind also:

$$\vec{g}_1 = 1/d_x \vec{e}_x \quad \text{und} \quad \vec{g}_2 = 1/d_y \vec{e}_y. \quad (\text{A.34})$$

Daß das reziproke Gitter ebenfalls ein *Punktgitter* ist, gilt strenggenommen nur unter der idealisierten Annahme eines unendlich großen Realgitters. Die endliche Ausdehnung der im Experiment untersuchten Probe berücksichtigt man bei der Bestimmung des reziproken Gitters, indem man den Ausdruck für die Streudichte (Gl. (A.32)) mit einer Funktion  $W(\vec{x})$  multipliziert.  $W(\vec{x})$  hat den Wert eins für alle  $\vec{x}$ , die innerhalb der Probe liegen. Sonst liefert  $W(\vec{x})$  den Wert Null. Bei der Berechnung der Streuamplitude wird nun durch die Fouriertransformation aus der Multiplikation der Streudichte mit  $W(\vec{x})$  eine Faltung der beiden entsprechenden Fouriertransformierten  $W^*$  und  $\rho^*$ .

Wertet man das Faltungsintegral unter der Annahme eines punktförmigen Realgitters aus, so erhält man ein Gitter, dessen Aufbau dem des idealen reziproken Gitters gleicht, nur sind die Gitterpunkte jetzt ausgedehnt. Die Form dieser Ausdehnung wird durch Fouriertransformierte der Funktion  $W(\vec{x})$  bestimmt. Generell kann man sagen, daß die reziproken Gitterpunkte um so stärker in einer Richtung ausgedehnt sind, je geringer die Ausdehnung der Probe in dieser Richtung ist.

Ist das reziproke Gitter erst einmal bestimmt, kann eine einfache Regel angegeben werden, in welchen Richtungen  $\vec{k}$  bei gegebenem  $\vec{k}_0$  die Streuamplitude von Null verschieden ist. Der Definition des reziproken Gitters entsprechend ist dies für die Streuvektoren  $\vec{K}$  der Fall, die gerade einen reziproken Gittervektor darstellen:

$$\vec{K} = \vec{k} - \vec{k}_0 = \vec{g} \quad (\text{Bragggleichung}). \quad (\text{A.35})$$

Der Einfachheit halber soll dies wiederum an einem zweidimensionalen periodischen Punktgitter illustriert werden (Abb. A.2). Dazu legt man zunächst den Wellenvektor der einfallenden Welle  $\vec{k}_0$  mit seiner Spitze an den Ursprung des reziproken Gitters.

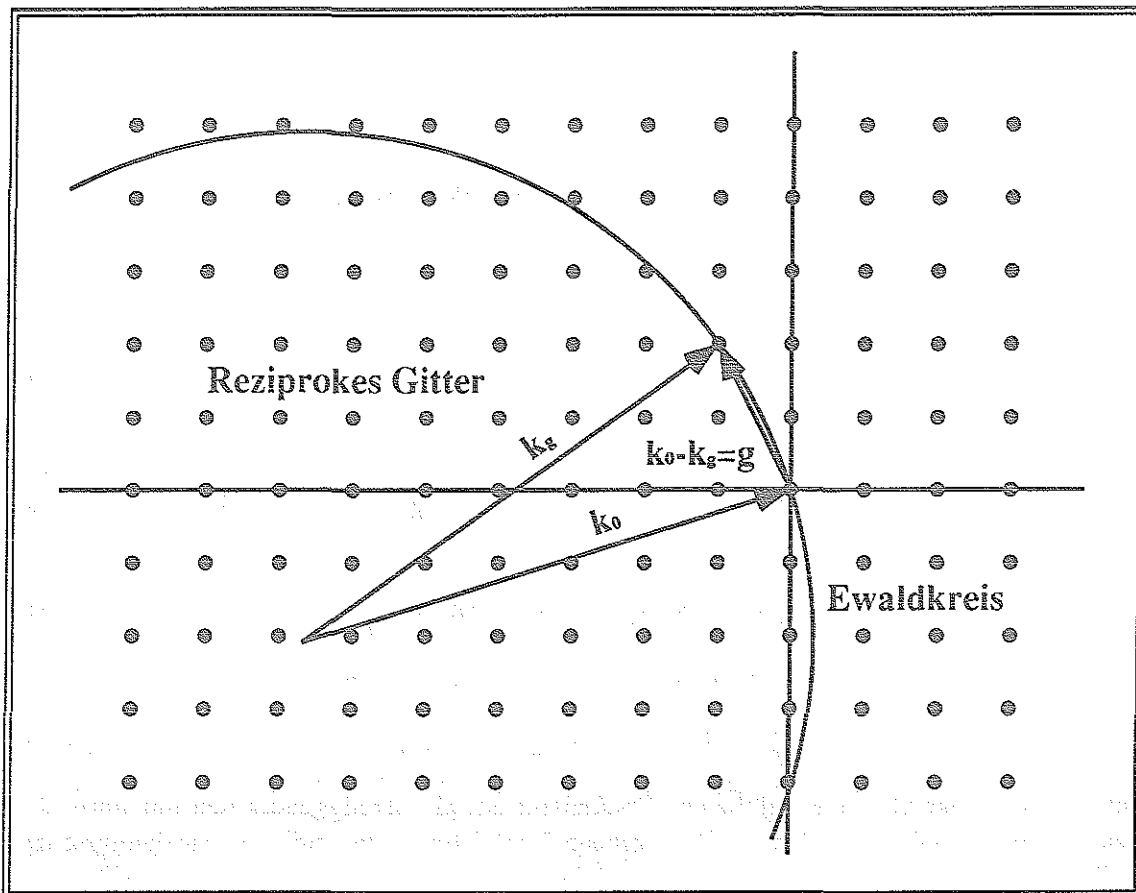


Abbildung A.2: Die Ewaldkonstruktion.

lenden Welle  $\vec{k}_0$  mit seiner Spitze an den Ursprung des reziproken Gitters. Da die Streuung elastisch erfolgt, gilt  $|\vec{k}| = |\vec{k}_0|$ . Damit liegen alle Vektoren  $\vec{K} = \vec{k} - \vec{k}_0$  auf einem Kreis mit Radius  $|\vec{k}_0|$ . Schneidet nun dieser Ewaldsche Kreis (in drei Dimensionen ist es eine Kugel) einen Punkt  $\vec{g}$  des reziproken Gitters, so ist die Bedingung  $\vec{g} = \vec{k} - \vec{k}_0$  erfüllt und die Kugelwellen werden für diesen Streuvektor konstruktiv interferieren, so daß man im Beugungsbild einen Reflex beobachtet.

Da nun die Wellenlänge der in der Elektronenmikroskopie verwendeten Strahlung sehr viel kleiner ist als die im Festkörper typischerweise auftretenden Distanzen, ist umgekehrt der Radius der Ewaldkugel sehr groß gegenüber den Abständen der reziproken Gitterpunkte ( $\lambda = 2.5 \cdot 10^{-2} \text{ \AA}$  bei 200 keV Elektronenenergie). Deshalb kann für kleine Streuvektoren  $\vec{K}$  der Schnitt des reziproken Gitters mit der Ewaldkugel durch einen Schnitt mit einer Ebene, die senkrecht zum Wellenvektor  $\vec{k}_0$  der einfallenden Strahlung liegt, angenähert werden.

### A.2.2 Der Anregungsfehler

Schneidet für einen gegebenen Vektor  $\vec{k}_0$  die Ewaldkugel einen reziproken Gitterpunkt nicht exakt, kann man auf Grund der endlichen Ausdehnung der reziproken Gitterpunkte erwarten, daß in Richtung von  $\vec{k}$  dennoch Elektronen gestreut werden. Diese Abweichung von der exakten Erfüllung der Braggschen Gleichung wird durch den Anregungsfehler  $\vec{s}$  beschrieben:

$$\vec{k} - \vec{k}_0 = \vec{g} + \vec{s}. \quad (\text{A.36})$$

Dabei gilt für  $s$  folgende Vorzeichenkonvention:  $s$  ist größer Null, falls der reziproke Git-

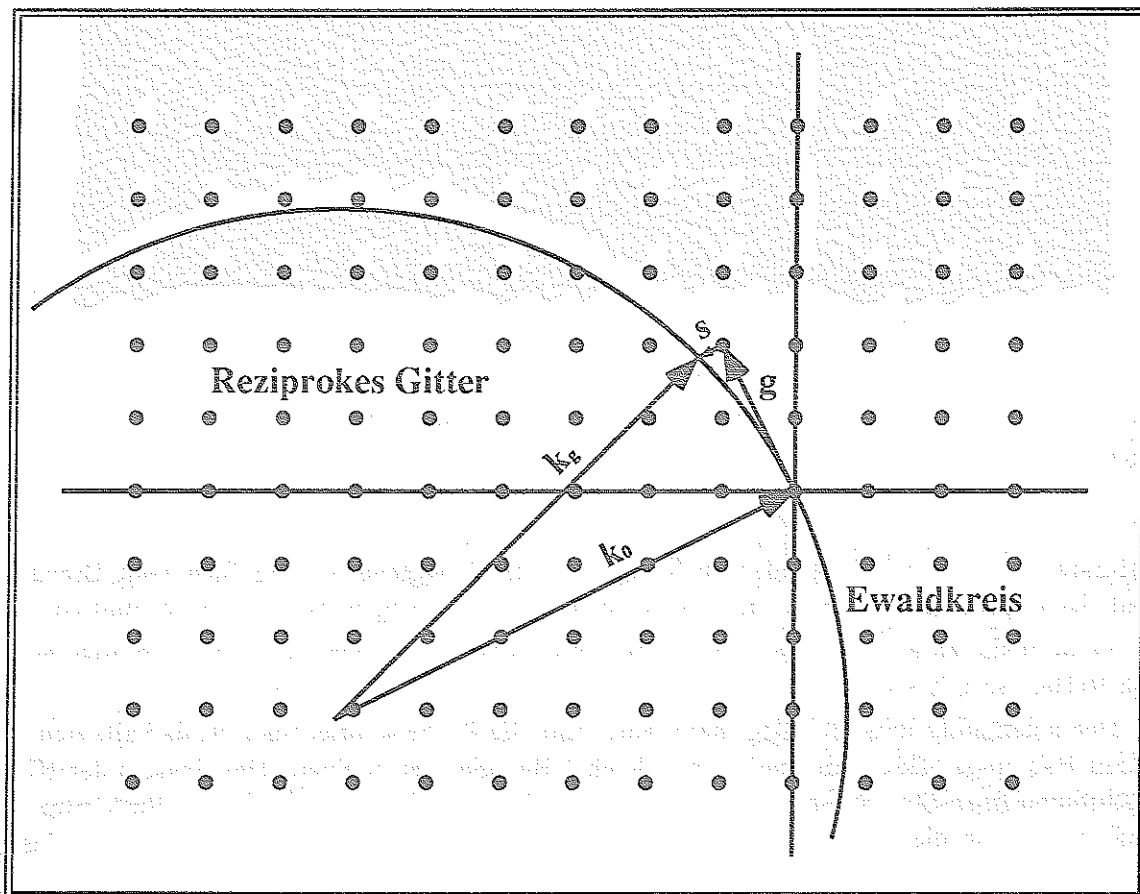


Abbildung A.3: Der Anregungsfehler  $\vec{s}$ .

terpunkt innerhalb der Ewaldkugel liegt.

Vorzeichen und Größe von  $\bar{s}$  lassen sich mit Hilfe der Kikuchi-Linien bestimmen. Der Anregungsfehler ist Null, wenn die zugehörige helle Kikuchi-Linie [132] genau durch den zugehörigen Reflex verläuft (Abb. A.4). Die dunkle Linie läuft dann durch den

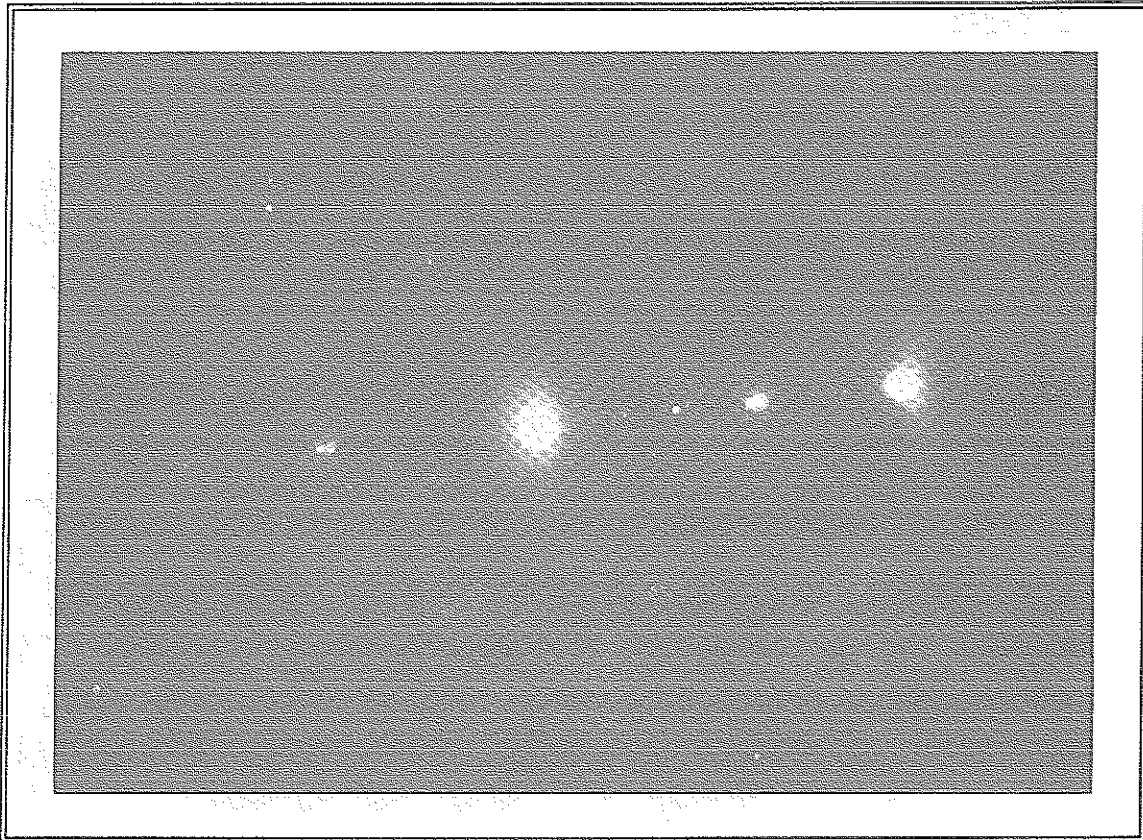


Abbildung A.4: Beugungsbild mit Kikuchilinen. Die Kikuchilinie verläuft außerhalb vom Beugungsreflex. Darum ist hier der Anregungsfehler  $s$  größer Null.

Primärstrahl. Man spricht hier auch von exakter Bragglage oder einfach vom Bragg-Fall. Ist in diesem Fall nur ein Reflex betroffen, liegt der sogenannte Zweistrahlfall vor.

Verläuft die zu einem Reflex gehörende Linie zwischen Primärstrahl und dem angeregten Reflex, so gilt  $s < 0$ .

Der sogenannte Laue-Fall liegt dann vor, wenn die Probe so orientiert ist, daß alle sichtbaren Beugungsreflexe mit annähernd gleicher Helligkeit erscheinen. Das System der Kikuchilinen liegt dann symmetrisch um den Primärstrahl. Diese Orientierung liegt immer dann vor, wenn die Probe mit einer ihrer Symmetrierichtungen parallel zum einfallenden Elektronenstrahl liegt.

### A.3 Paarkorrelationsfunktion und Beugungsbild

Die beobachteten Intensitäten der gebeugten Elektronenwellen lassen sich in kinematischer Näherung durch das Betragsquadrat der Fouriertransformierten der die Struktur beschreibenden Dichtefunktion berechnen [36]:

$$I(\vec{K}) \propto |\mathcal{F}(\rho(\vec{r}))|^2 \quad (\text{A.37})$$

Umgekehrt kann aber durch eine Rücktransformation der Intensitätsverteilung nicht auf die Dichtefunktion  $\rho(\vec{r})$  zurückgerechnet werden, da nur die Intensitäten, aber nicht die Phasen der abgebeugten Wellen, beobachtet werden können. Führt man dennoch eine Fouriertransformation der Intensitätsverteilung durch, so erhält man:

$$\mathcal{F}^{-1}(I(\vec{K})) = \mathcal{F}^{-1}\{\mathcal{F}(\rho(\vec{r}))^* \mathcal{F}(\rho(\vec{r}))\} \quad (\text{A.38})$$

$$= \rho(\vec{r})^* * \rho(-\vec{r}) \quad (\text{A.39})$$

$$= \int \rho(\vec{R}) \rho(\vec{r} + \vec{R}) d\vec{R} = P(\vec{r}). \quad (\text{A.40})$$

Diese Funktion  $P(\vec{r})$  liefert genau dann Beiträge, falls der Vektor  $\vec{r}$  Punkte in der Dichteverteilung verbindet, die beide große Dichtewerte besitzen. Mit anderen Worten ist der Wert von  $P(\vec{r})$  ein Maß dafür, mit welcher Wahrscheinlichkeit in einer bestimmten Richtung  $\vec{r}/|\vec{r}|$  und einem bestimmten Abstand  $r$  Materie in der Struktur erwartet werden kann. Eine Funktion mit diesen Eigenschaften nennt man Paarkorrelationsfunktion.

Wichtig bei dieser Betrachtung ist, daß die Symmetrieeigenschaften der Funktion  $P(\vec{r})$  identisch mit den Eigenschaften der Beugungsbilder sind. Sie werden durch die Fouriertransformation nicht verändert, so daß  $P(\vec{r})$  z.B. auch fünfzählige Symmetrierichtungen besitzen kann.

the following conditions are satisfied:

- (i)  $\mathcal{A}$  is a  $\mathbb{K}$ -algebra;
- (ii)  $\mathcal{A}$  is a  $\mathbb{K}$ -module;
- (iii)  $\mathcal{A}$  is a  $\mathbb{K}$ -module;

where  $\mathbb{K}$  is a field.

Let  $\mathcal{A}$  be a  $\mathbb{K}$ -algebra. Then  $\mathcal{A}$  is a  $\mathbb{K}$ -module. Let  $\mathcal{A}$  be a  $\mathbb{K}$ -module. Then  $\mathcal{A}$  is a  $\mathbb{K}$ -module. Let  $\mathcal{A}$  be a  $\mathbb{K}$ -module. Then  $\mathcal{A}$  is a  $\mathbb{K}$ -module.

Let  $\mathcal{A}$  be a  $\mathbb{K}$ -algebra. Then  $\mathcal{A}$  is a  $\mathbb{K}$ -module. Let  $\mathcal{A}$  be a  $\mathbb{K}$ -module. Then  $\mathcal{A}$  is a  $\mathbb{K}$ -module.

Let  $\mathcal{A}$  be a  $\mathbb{K}$ -algebra. Then  $\mathcal{A}$  is a  $\mathbb{K}$ -module. Let  $\mathcal{A}$  be a  $\mathbb{K}$ -module. Then  $\mathcal{A}$  is a  $\mathbb{K}$ -module.

Let  $\mathcal{A}$  be a  $\mathbb{K}$ -algebra. Then  $\mathcal{A}$  is a  $\mathbb{K}$ -module. Let  $\mathcal{A}$  be a  $\mathbb{K}$ -module. Then  $\mathcal{A}$  is a  $\mathbb{K}$ -module. Let  $\mathcal{A}$  be a  $\mathbb{K}$ -module. Then  $\mathcal{A}$  is a  $\mathbb{K}$ -module. Let  $\mathcal{A}$  be a  $\mathbb{K}$ -module. Then  $\mathcal{A}$  is a  $\mathbb{K}$ -module.

Let  $\mathcal{A}$  be a  $\mathbb{K}$ -algebra. Then  $\mathcal{A}$  is a  $\mathbb{K}$ -module. Let  $\mathcal{A}$  be a  $\mathbb{K}$ -module. Then  $\mathcal{A}$  is a  $\mathbb{K}$ -module. Let  $\mathcal{A}$  be a  $\mathbb{K}$ -module. Then  $\mathcal{A}$  is a  $\mathbb{K}$ -module.

146

## A.4 Das Rasterelektronenmikroskop

### A.4.1 Aufbau und Funktion

Der Aufbau des in dieser Arbeit benutzten Rasterelektronenmikroskops JEOL 840A ist schematisch in Abbildung A.5 dargestellt. Die evakuierte Mikroskopsäule besteht im wesentlichen aus drei Teilen: Elektronenquelle, Linsensystem und Probenkammer.

Aus einer Kathode werden thermisch Elektronen freigesetzt und auf eine Energie von 20 keV beschleunigt. Das nachfolgende System von Kondensor- und Objektivlinsen fokussiert die Elektronen in Form eines feinen Strahls auf die Probe. Durch weitere Spulen ist es dabei möglich, die Probe mit dem Elektronenstrahl abzurastern. In der Probenoberfläche lösen die Elektronen verschiedene Prozesse aus, deren Wechselwirkungsprodukte (Elektronen bzw. elektromagnetische Strahlung) detektiert werden können.

Synchron zur Bewegung des Elektronenstrahls auf der Probe wird der Bildschirm eines Monitors abgerastert. Die Intensität des schreibenden Elektronenstrahls wird durch die Signalstärke des jeweils detektierten Wechselwirkungsprodukts bestimmt. Die Vergrößerung des so erzeugten Bildes wird durch das Verhältnis von Seitenlänge des abgerasterten Bereichs zur Seitenlänge des Bildschirms bestimmt.

### A.4.2 Abbildung und Kontrast

Im Standardbetrieb des Rasterelektronenmikroskops werden die Sekundärelektronen detektiert [131]. Diese Elektronen entstehen durch inelastische Wechselwirkung der Strahl- oder Primärelektronen mit Atomen in der Probe. Die Sekundärelektronen besitzen Energien kleiner als 50 eV, so daß sie leicht durch geringe elektrische Felder abgelenkt und durch einen Proportionalzähler nachgewiesen werden können. Elastisch gestreute Elektronen werden aufgrund ihrer hohen Energie durch die hier benutzten elektrischen Felder nur wenig abgelenkt und daher nicht detektiert.

Aufgrund ihrer geringen Energie und der damit verbundenen kleinen Weglänge im Material stammen die Sekundärelektronen aus einem Bereich, der nur sehr wenig in die Probe hineinreicht. Die Ausbeute ist damit im wesentlichen proportional zur Strahlfläche auf der Probe. D. h., bei senkrechtem Einfall ist sie klein und steigt für abnehmenden Einfallswinkel  $\alpha$  mit  $1/\cos \alpha$  an. Die Topographie der Probe, also die Neigung der Probenoberfläche zum Elektronenstrahl, bestimmt so die Ausbeute an Sekundärelektronen. Der Kontrast, der so entsteht, ähnelt in gewisser Weise dem Kontrast, den man bei einer Beleuchtung der Probe mit Licht von der Seite erwarten würde.

### A.4.3 Energiedispersive Röntgenanalyse

Durch den Beschuß mit Elektronen emittiert die Probe neben der Bremsstrahlung das für jedes Element charakteristische Röntgenspektrum. Ein solches Spektrum ist für einen AlPdMn-Quasikristall, der mit der Czochralskimethode hergestellt wurde, in Abbildung A.6 gezeigt. Die Röntgenstrahlen werden im Mikroskop mit Hilfe eines Li-gedrifteten Siliziumsperrschichtzählers nachgewiesen [131] und mit einem computerunterstützten Vielkanalanalysators ausgewertet (Firma Tracor). Im gemessenen Spektrum können dann

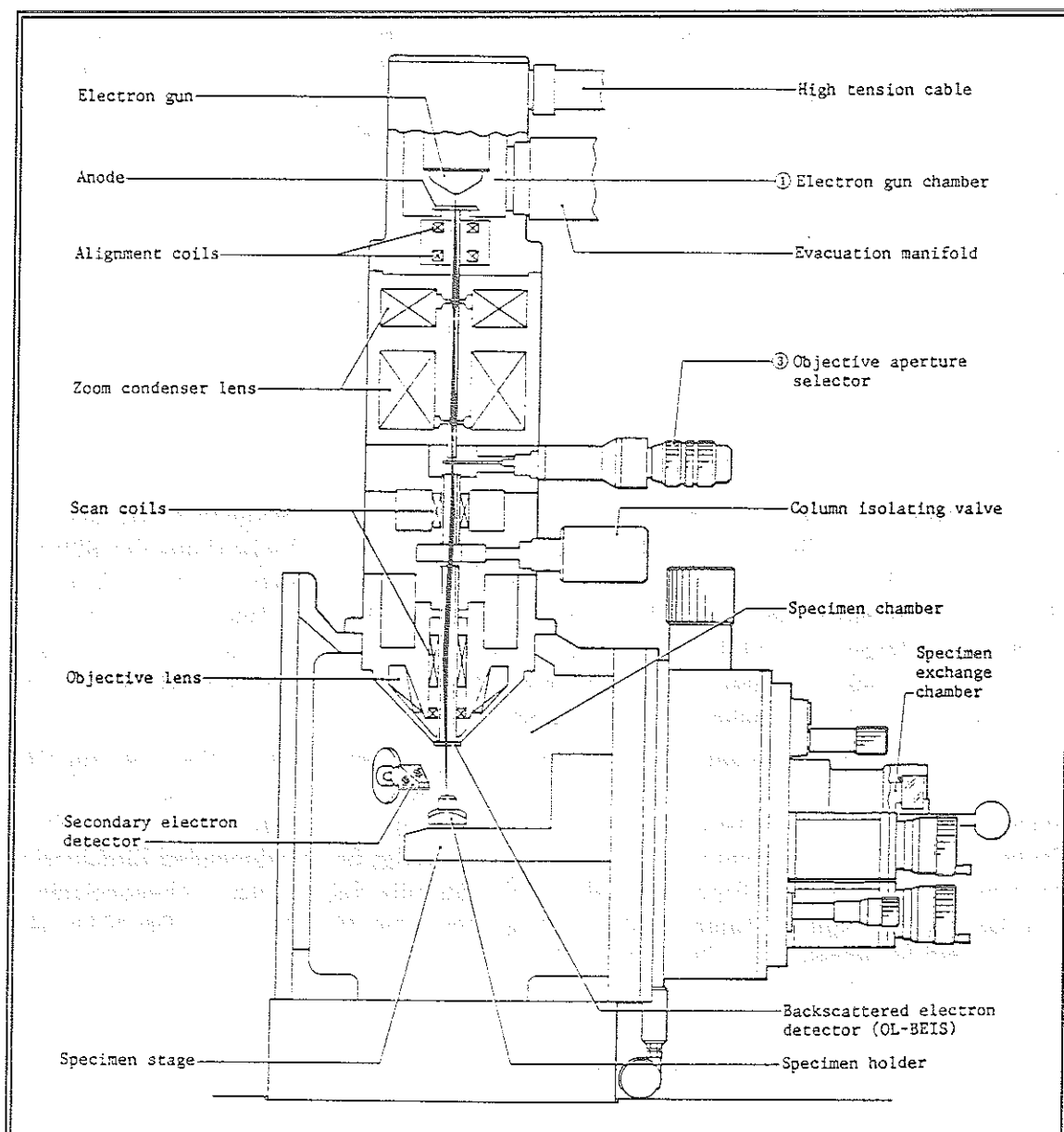


Abbildung A.5: Schematischer Aufbau eines Rasterelektronenmikroskops (aus [90])

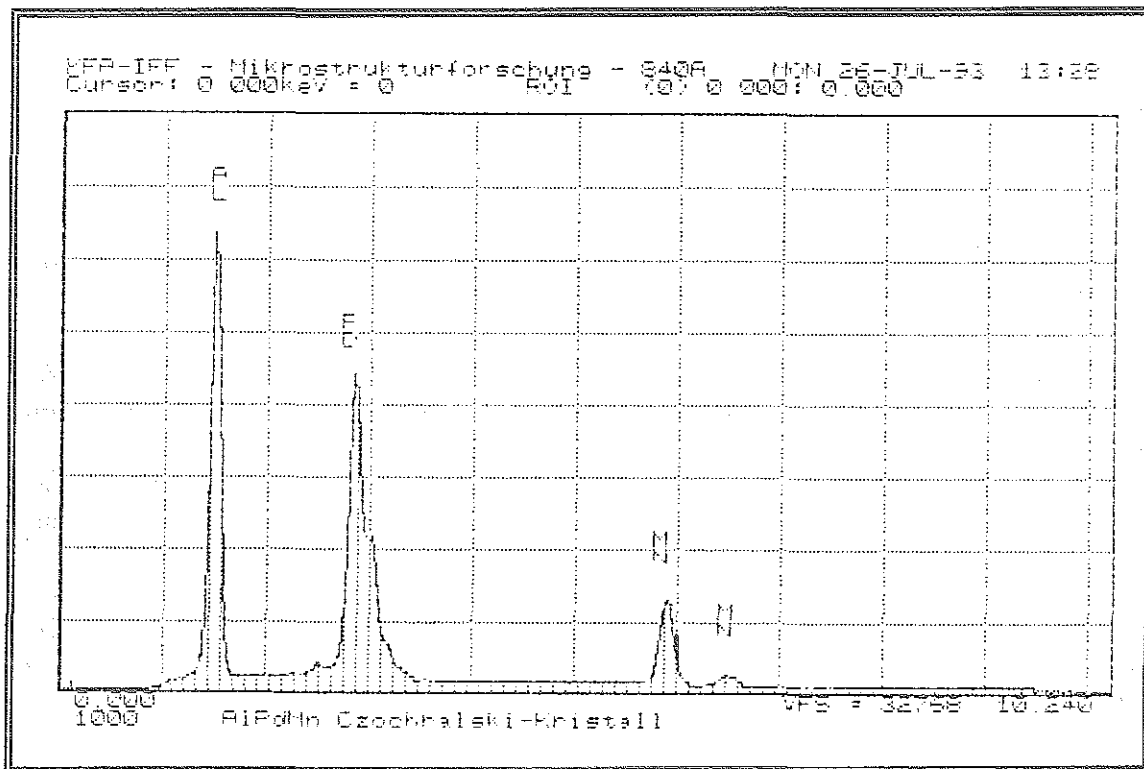


Abbildung A.6: Charakteristisches Röntgenspektrum, aufgenommen an einem AlPdMn-Quasikristall. Die Auswertung des Spektrums ergibt eine Zusammensetzung von  $Al_{72.3}Pd_{18.7}Mn_{9.0}$ .

zunächst die in der Probe vorkommenden Elemente mit Hilfe eines Computerprogramms identifiziert werden. Sind die Elemente in der Probe bekannt, kann eine quantitative Analyse erfolgen [92].

## A.5 Das Transmissionselektronenmikroskop (TEM)

### A.5.1 Aufbau und Funktion des TEM

Die prinzipielle Funktionsweise eines Elektronenmikroskopes gleicht der des Lichtmikroskopes. Dort wird ebenfalls mit Hilfe eines Linsensystems ein stark vergrößertes Bild des zu untersuchenden Objektes erzeugt.

Die maximale Auflösung, die mit Licht erreicht werden kann, wird durch die Wellenlänge der verwendeten Strahlung ( $\lambda_{\text{Licht}} \simeq 0.5 \mu\text{m}$ ) begrenzt. Eine Verbesserung kann hier nur durch die Verwendung kürzerer Wellenlängen erzielt werden. Dies scheitert allerdings am Fehlen geeigneter optischer Bauelemente für höherenergetische elektromagnetische Strahlung. Einen Ausweg stellt die Verwendung von Teilchenstrahlen dar. Nach de Broglie besitzen Teilchen ebenfalls eine Wellennatur. Die Materienwellenlänge hängt hierbei von Teilchenmasse und Energie ab. Für Elektronen mit einer Energie von 200 keV beträgt sie  $2.51 \cdot 10^{-12} \text{ m}$ . Da sich Elektronenwellen mit elektrischen und magnetischen Feldern beeinflussen lassen, ist hier eine Möglichkeit zum Aufbau eines abbildenden Systems gegeben. In der Elektronenmikroskopie benutzt man Magnetfelder, die durch geeignete elektrische Spulen erzeugt werden [132].

Der Aufbau des in dieser Arbeit benutzten Transmissionselektronenmikroskopes vom Typ JEOL 2000EX zeigt Abb. A.7 [89]. Die prinzipielle Funktionsweise soll im folgenden kurz erläutert werden. Alle an der Bildentstehung beteiligten Teile des Mikroskops befinden sich in einer evakuierten Säule (Druck  $10^{-7} \text{ mbar}$ ). Am oberen Ende werden aus einer Keramik-Kathode (Material Lanthanhexaborid ( $\text{LaB}_6$ )) durch Glühemission Elektronen freigesetzt und mit diesen durch einen Wehneltzylinder ein feiner Elektronenstrahl erzeugt. Dieser wird anschließend durch eine auf 200 kV vorgespannte Anode beschleunigt. Durch das nachfolgende System von Kondensorlinsen ist es dann möglich, die Beleuchtung der Probe durch die Elektronen zwischen parallelem und konvergentem Strahlverlauf einzustellen.

Die Probe selbst befindet sich in einem speziellen Halter, der es ermöglicht, sie um zwei senkrecht zueinander stehende Achsen innerhalb gewisser Grenzen zu drehen und so unterschiedliche Orientierungen der Probe zum Elektronenstrahl einzustellen.

Nachdem die Elektronenstrahlen die Probe durchlaufen haben, passieren sie das Magnetfeld der Objektivlinse. Beim Durchgang durch die Probe wird ein Teil der einfallenden Strahlung abgelenkt.

Die abgelenkten und die direkt transmittierten Elektronen laufen dann in der hinteren Objektivlinsenbrennebene zum Beugungsbild zusammen.

An dieser Stelle befindet sich die Objektivaperturblende, mit der bei Bedarf ein Teil der Strahlen ausgeblendet werden kann. Hinter dieser Blende liegt das erste vergrößerte Zwischenbild der Probe.

Nun kann zwischen zwei Abbildungsmodi unterschieden werden (Abb. A.8).

Zum einen kann das erste Zwischenbild mit Hilfe der Zwischenlinse weitervergrößert werden. Das endgültige Bild wird dann durch die nachfolgende Projektionslinse erzeugt. Diese bildet das zweite Zwischenbild auf einem Leuchtschirm ab, auf dem der Benutzer

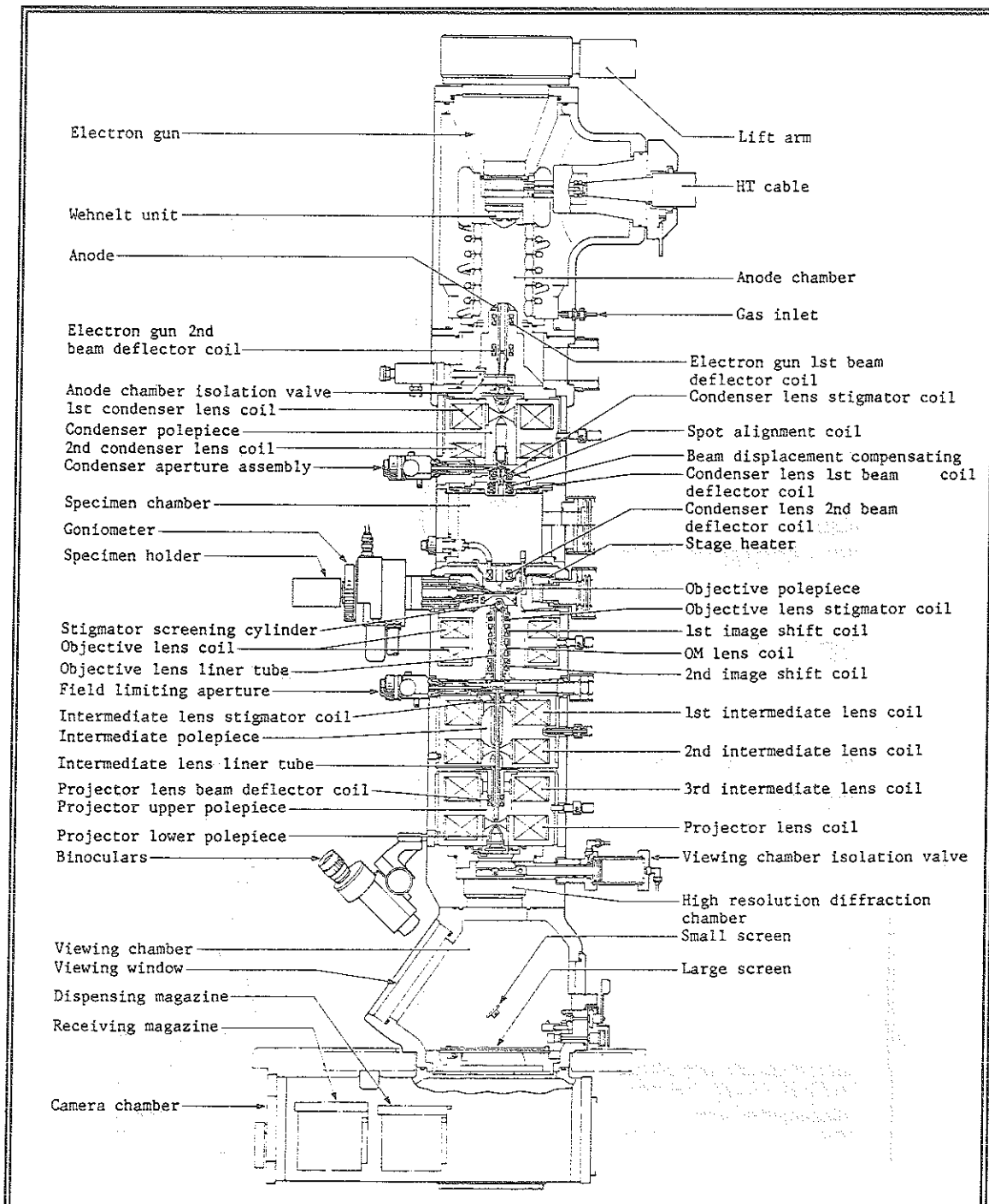


Abbildung A.7: Aufrißzeichnung eines Transmissionselektronenmikroskopes vom Typ JEOL 2000EX [89].

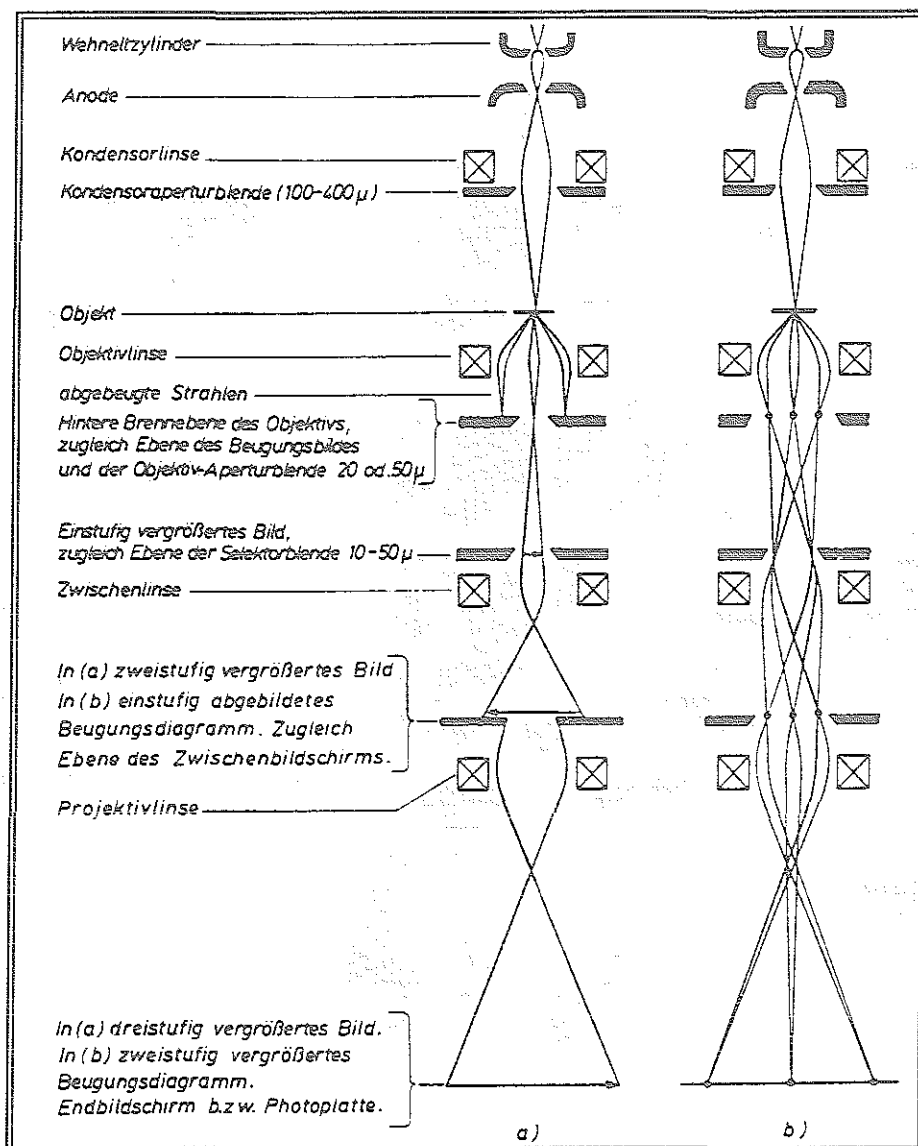


Abbildung A.8: Die verschiedenen Abbildungsmodi in der Transmissionselektronenmikroskopie. Links: die Abbildung der Probe mit dem Nullstrahl (Hellfeldabbildung). Rechts: die Abbildung des Beugungsbildes [168].

das vergrößerte Bild der Probe betrachten kann. Der Leuchtschirm kann hochgeklappt werden, um das Bild mit einer Videokamera oder einer Filmkamera aufzuzeichnen.

Im anderen Fall wird das Beugungsbild abgebildet. Dazu wird der Linsenstrom der Zwischenlinse verkleinert und so deren Brennweite vergrößert. Die Objektebene der Zwischenlinse liegt nun in der hinteren Brennebene der Objektivlinse, so daß jetzt das Beugungsbild auf dem Leuchtschirm abgebildet wird. Je nach Brennweite der Projektionslinse erscheint das Beugungsbild unterschiedlich stark vergrößert. Das Maß für die Vergrößerung ist die Kameralänge. Sie gibt den durch die Linsenvergrößerungen und Mikroskopgeometrie erzeugten scheinbaren Abstand Probe-Kamera an. Aus Kameralänge und dem Abstand einzelner Beugungsreflexe zum Reflex der ungebeugten Elektronen (Nullstrahl) lassen sich dann die Ablenkungswinkel der betreffenden Elektronenstrahlen berechnen.

Um kleinere Bereiche der Probe mit der Elektronenbeugung zu untersuchen, können in die Bildebene der Objektivlinse zusätzlich verschieden große Selektorblenden zur Feinbereichsbeugung eingeschwenkt werden. Diese Blenden lassen nur Elektronen aus einem ausgewählten Probenbereich passieren, so daß die im Beugungsbild enthaltenen Informationen nur aus diesem speziellen Probenteil stammen.

Die weiteren in der Aufrißzeichnung sichtbaren Spulen dienen zum einen der Korrektur des Linsenastigmatismus. Desweiteren sollen sie die Bilddrehung so weit wie möglich kompensieren. Die Elektronenbahnen erfahren nämlich beim Durchgang durch die Spulen neben der Ablenkung auch eine Drehung ihrer Bahn um die optische Achse. Diese führt zu einer von Vergrößerung bzw. Kameralänge abhängigen Drehung von Probenbild bzw. Beugungsbild. Da die Kompensation nicht vollständig erfolgt, muß sie für jede benutzte Kombination von Vergrößerung und Kameralänge bestimmt und in der Auswertung berücksichtigt werden. Für das benutzte Mikroskop wurden diese Daten von M. Lentzen ermittelt und freundlicherweise zur Verfügung gestellt.

Bei den in dieser Arbeit benutzten Transmissionselektronenmikroskopen handelt es sich um Geräte vom Typ JEOL 2000EX, JEOL 4000FX und JEOL 4000EX mit Beschleunigungsspannungen von 200 bzw. 400 kV.

### A.5.2 Kontrastentstehung im TEM

#### Beugungskontrast

Das eine in der Elektronenmikroskopie zur Kontrasterzeugung benutzte Phänomen ist die Beugung der Elektronen.

Probenbereiche, die die Elektronen abbeugen, vermindern die Intensität des Nullstrahls. Wählt man nun eine Objektivblende, die nur die ungebeugten Elektronen passieren läßt, wird das Bild der Probe nur durch gerade diese "Nullstrahlelektronen" erzeugt (Abb. A.8). Die nichtstreuenden Bereiche im Bild erscheinen dann hell. Diese Art der Abbildung wird Hellfeldabbildung genannt. Entsprechend spricht man von Dunkelfeldabbildung, wenn einer der abgebeugten Strahlen zur Abbildung benutzt wird. Bei kristallinen und auch bei quasikristallinen Präparaten kann man, in Abhängigkeit von der Probenorientierung zum Strahl, drei Fälle der Kontrastentstehung unterscheiden.

Wichtig für die Analyse von Gitterstörungen ist der sogenannte Zweistrahlfall (s.a. Kapitel 6.4.3). Hier ist die Bragggleichung für genau einen reziproken Gittervektor erfüllt.

Im Beugungsbild beobachtet man neben dem Nullstrahl im wesentlichen nur einen stark angeregten Reflex.

### Hochauflösende Gitterlinienabbildung

Der gerade beschriebene Beugungscontrast wird für Untersuchungen mit kleiner und mittlerer Vergrößerung (5000–100000fach) verwendet. Bei hohen Vergrößerungen benutzt man die hochauflösende Gitterlinienabbildung [95, 156, 148].

In diesem Fall orientiert man die Probe im Mikroskop zunächst so, daß ein symmetrischer Lauefall vorliegt. Hier ist die Braggbedingung für mehrere Vektoren des reziproken Gitters gleichzeitig erfüllt. Dies ist immer dann der Fall, wenn der Elektronenstrahl parallel zu einer der Symmetrierichtungen des Kristalls bzw. Quasikristalls verläuft. Man beobachtet ein symmetrisches Beugungsbild. Die Objektiveblende wird so gewählt, daß neben dem Nullstrahl weitere gebeugte Strahlen die Blende ebenfalls passieren können. Das Bild der Probe entsteht dann durch eine Überlagerung all dieser Elektronenwellen.

In einer wellenoptischen Formulierung des Abbildungsprozesse kann die hochauflösende Transmissionselektronenmikroskopie durch eine zweifache Fouriertransformation der an der Probenunterseite austretenden Elektronenwellenfunktion beschrieben werden. Die erste Transformation stellt das Beugungsbild in der Brennebene der Objektiveblende dar (s. a. Anhang A.2). Die Intensitätsverteilung des eigentlichen Bildes der Probe ist schließlich das Betragsquadrat der inversen Fouriertransformation des Beugungsbildes.

Aus diesem Bild der Probe kann aber nur in ganz seltenen Fällen direkt auf die atomare Struktur der Probe zurückgeschlossen werden. Aufgrund ihrer sphärischen Aberration prägt die Objektiveblende jedem gebeugten Elektronenstrahl eine bestimmte Phasenverschiebung auf. Diese Phasenverschiebung ist vom Beugungsvektor abhängig und kann zudem durch eine Defokussierung der Objektiveblende beeinflußt werden. Außerdem wird durch die Objektiveblende ein Teil der gebeugten Strahlen ausgeblendet. Desweiteren besitzt der Elektronenstrahl eine gewisse Energieverteilung. In einem Lichtmikroskop würde man von einer nicht monochromatischen Beleuchtung sprechen. Alle diese Effekte kann man mit einer Kontrasttransferfunktion beschreiben. Sie ändert die Phasen im Beugungsbild, so daß im allgemeinen das Bild der Proben *nicht* durch die Amplitudenverteilung der Austrittswellenfunktion der Probe beschrieben wird.

Beim Durchgang der Elektronen durch die Probe müssen Effekte wie Wechselwirkung der Strahlen miteinander und Absorption berücksichtigt werden. Dies führt dazu, daß sich bei gleicher Struktur und Mikroskopparametern das Bild bei einer Variation der Dicke deutlich ändern kann.

Für eine quantitative Strukturanalyse auf atomarer Basis ist es daher notwendig, die im Experiment erhaltenen Bilder mit den Ergebnissen einer elektronenoptischen Bildsimulation zu vergleichen und durch Variation von Simulationsparametern und Modell eine Übereinstimmung zu finden [95, 148, 156].

In dieser Arbeit wird die hochauflösende Transmissionselektronenmikroskopie eingesetzt, um Symmetrien und Gitterperiodizitäten der Probe zu untersuchen. Diese Eigenschaften werden durch den Abbildungsvorgang nicht verändert, so daß sie direkt aus den Bildern ermittelt werden können.

## A.6 Das Raster-TEM (STEM)

### A.6.1 Aufbau und Funktion des STEM

Der Aufbau eines Rastertransmissionselektronenmikroskopes entspricht im wesentlichen dem eines normalen Transmissionselektronenmikroskopes (Abbildung A.9). In einem kon-

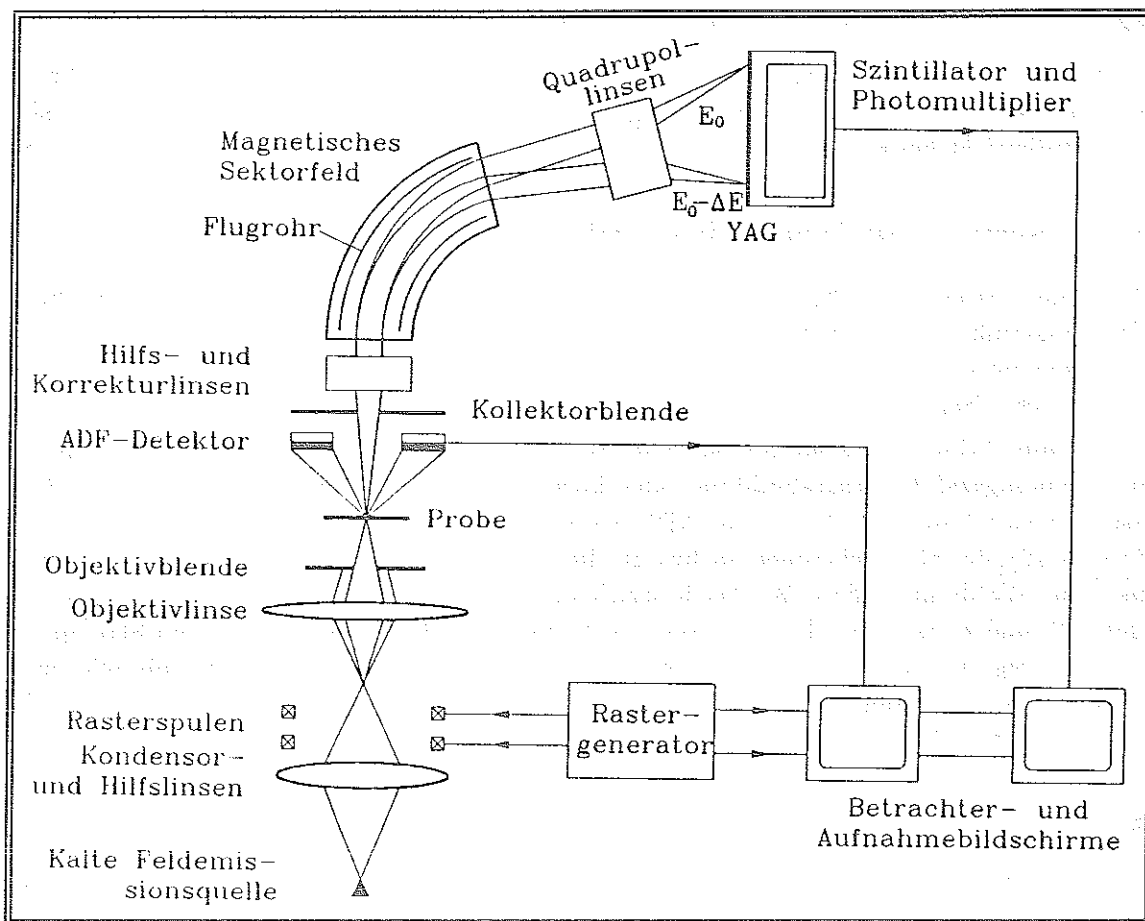


Abbildung A.9: Schematische Darstellung des Aufbaus eines Rastertransmissionselektronenmikroskops mit Ordnungszahlkontrastabbildung und Elektronenenergieverlustspektroskopie.

ventionellen Transmissionselektronenmikroskop wird die Objektivlinse mit dem nachfolgenden System aus Zwischen- und Projektionslinse benutzt, um ein stark vergrößertes Bild der Probe zu erzeugen. In einem Rastertransmissionselektronenmikroskop wird dieser Strahlengang umgekehrt, um zur Erzielung einer hohen lateralen Auflösung ein stark verkleinertes Bild der Elektronenquelle auf der Probe zu erzeugen. Die Begründung für eine solche Vorgehensweise liefert das *Reziprozitätstheorem*. Danach kann man Elektronenquelle und Bilddetektor vertauschen, solange diese als nahezu punktförmig angenommen werden können. Der Strahlengang bleibt dabei unverändert.

Über ein System von Kondensorlinsen, an deren Ende sich die Objektivlinse befindet, wird also der Strahl auf die Probe fokussiert und dabei auf einen Durchmesser von 2–3 Å verkleinert (Abbildung A.9). Neben diesen, den Elektronenstrahl abbildenden Linsen, befinden sich vor der Objektivlinse noch Spulen, mit deren Hilfe der Elektronenstrahl über die Probe geführt werden kann. Hinter der Probe werden die Elektronen mit verschiedenen Detektoren registriert. Das Detektorsignal wird dann zur Helligkeitsmodulation des synchron zur Rasterbewegung laufenden Schreibstrahls eines Monitors benutzt (wie beim Rasterelektronenmikroskop, s. a. Anhang A.4).

Im Gegensatz zu einem konventionellem Elektronenmikroskop benutzt man als Elektronenquelle eine kalte Feldemissionsquelle [37]. Damit ist es möglich, einen Elektronenstrahl hoher Intensität bei gleichzeitig kleiner Strahlkonvergenz zu erzeugen.

### A.6.2 Kontrastentstehung, Ordnungszahlkontrast

Prinzipiell lassen sich aufgrund des Reziprozitätstheorems in einem Rastertransmissions-elektronenmikroskop alle Abbildungsmodi benutzen, die auch in einem konventionellen Elektronenmikroskop möglich sind. Deren technische Realisierung wird zum Beispiel in [157] beschrieben.

In dieser Arbeit wurde ein Rastertransmissionselektronenmikroskop vom Typ VG HB501 zur Ordnungszahlkontrastabbildung oder kurz *Z*-Kontrast-Abbildung eingesetzt. Hier befindet sich hinter der Probe ein ADF-Detektor (Annular Dark Field Detector, Abbildung A.10), der alle Elektronen nachweist, die in das Winkelintervall  $[\beta_{min}, \beta_{max}]$  gestreut werden. Wählt man diese Winkel hinreichend groß (50 – 200 mrad), so tragen nur die elastisch und quasielastisch gestreuten Elektronen zum Bildsignal bei. Deren Streuquerschnitt steigt mit wachsender Ordnungszahl *Z* an, so daß Probenbereiche mit schweren Atomen im Bild heller erscheinen werden als Gebiete, in den die Atome mit kleinere *Z*-Werte besitzen [127, 174].

### A.6.3 Parallele Elektronen-Energieverlust-Spektroskopie (PEELS)

Beim Durchgang durch die Probe kann der monoenergetische Elektronenstrahl durch inelastische Wechselwirkung mit den Schalenelektronen der Probe Energieverluste erleiden.

Diese Energieverluste haben für jedes Element charakteristische Werte und können daher für eine Analyse des Probenmaterials benutzt werden. Dazu werden die transmittierten Elektronen nach ihren Energieverlusten mit Hilfe eines magnetischen Selektorfeldes räumlich getrennt und auf einen YAG-Kristall abgebildet (Abbildung A.9). Die dort entstehenden Lichtquanten werden dann mit einem ortsauflösenden Photodiodenarray nachgewiesen. Jede Photodiode liefert gleichzeitig das Signal für einen bestimmten Energieverlust. Daher spricht man von Parallel-EELS. Die Daten werden mit einem Computer aufgenommen und können mit den dort verfügbaren Programmen qualitativ und quantitativ ausgewertet werden [55].

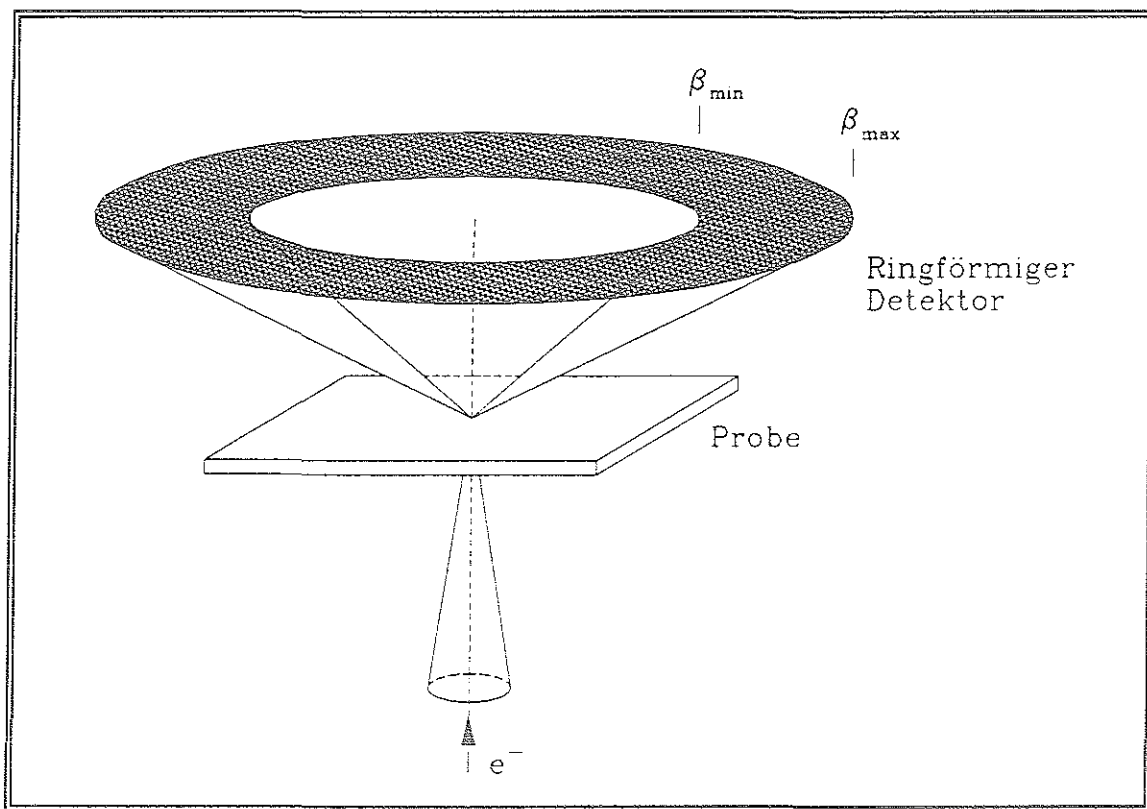


Abbildung A.10: Schematische Darstellung der Elektronendetektion mit Hilfe eines ringförmigen Detektors zur Ordnungszahlkontrastabbildung.



## ABBILDUNGSVERZEICHNIS

|      |                                                                                                                 |    |
|------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 2.1  | AlMn, zehnzähliges Beugungsbild . . . . .                                                                       | 4  |
| 2.2  | Joh. Kepler, Auszug aus <i>Harmonices Mundi</i> . . . . .                                                       | 5  |
| 2.3  | Symmetrierichtung des Ikosaeders mit den zugehörigen Beugungsbildern von AlMn . . . . .                         | 6  |
| 3.1  | Das Penrosemuster . . . . .                                                                                     | 11 |
| 3.2  | Zehnzähliges Elektronenbeugungsbild . . . . .                                                                   | 13 |
| 3.3  | Quasiperiodische Funktion . . . . .                                                                             | 15 |
| 3.4  | Schnitt durch eine zweidimensionale periodische Funktion . . . . .                                              | 15 |
| 3.5  | Mit atomaren Hyperflächen dekoriertes Gitter . . . . .                                                          | 18 |
| 3.6  | Die Wirkung der Funktion $\omega_S$ . . . . .                                                                   | 21 |
| 3.7  | Konstruktion eines eindimensionalen Quasikristalls . . . . .                                                    | 23 |
| 3.8  | 2/3-Approximant . . . . .                                                                                       | 24 |
| 3.9  | Das Triakontaeder . . . . .                                                                                     | 27 |
| 3.10 | Gitterprojektionen eines ikosaedrischen Quasikristalls . . . . .                                                | 28 |
| 4.1  | Betragsquadrat der Fouriertransformierten von $\omega(x_\perp)$ . . . . .                                       | 33 |
| 4.2  | Schnitt durch das Betragsquadrat der Fouriertransformierten von $\lambda(x_\perp)$ . . . . .                    | 35 |
| 4.3  | Simulierte Beugungsbilder für einen Quasikristall mit P-Hypergitter . . . . .                                   | 36 |
| 4.4  | Beugungsreflexpositionen entlang einer zweizähligen Zonenachse für die verschiedenen Hypergittertypen . . . . . | 38 |
| 5.1  | Beschreibung eines Fehlers im Hypergitter . . . . .                                                             | 40 |
| 5.2  | Veränderungen des Quasigitters bei konstanten Verschiebungsfeldern . . . . .                                    | 41 |
| 5.3  | Veränderungen des Quasigitters bei konstanten Verschiebungsfeldern . . . . .                                    | 42 |
| 5.4  | Phasonensprung in einem eindimensionalen Quasigitter . . . . .                                                  | 43 |
| 5.5  | Zur funktionalen Abhängigkeit der Verschiebungsfelder . . . . .                                                 | 44 |
| 5.6  | Phasonen in einem AlCuFe-Quasikristall . . . . .                                                                | 45 |
| 5.7  | Stufenversetzung in einem kubischen Gitter . . . . .                                                            | 47 |
| 5.8  | Der Volterra-Prozeß in einem quadratischen Gitter . . . . .                                                     | 48 |
| 5.9  | Volterrakonstruktion in einem dreidimensionalen Quasigitter . . . . .                                           | 48 |
| 6.1  | Wahl der Koordinaten bei der Säulennäherung . . . . .                                                           | 53 |
| 6.2  | Reflexauswahl bei Beugungskontrastexperimenten . . . . .                                                        | 58 |

|      |                                                                                                                     |     |
|------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 6.3  | SEC- und WEC-Reflexe im reziproken Gitter . . . . .                                                                 | 63  |
| 6.4  | Schematische Darstellung der Positionen von SEC- und WEC-Reflexen in<br>verschiedenen Beugungsbildern . . . . .     | 64  |
| 7.1  | Phasendiagramm von AlCuFe . . . . .                                                                                 | 68  |
| 7.2  | Phasendiagramm für AlPdMn . . . . .                                                                                 | 69  |
| 7.3  | Hochfrequenzinduktionsofen . . . . .                                                                                | 70  |
| 7.4  | Czochralskiapparatur . . . . .                                                                                      | 71  |
| 7.5  | Züchtung eines AlPdMn-Einquasikristalls . . . . .                                                                   | 72  |
| 7.6  | Mit der Czochralskimethode gezüchtete Einquasikristalle . . . . .                                                   | 73  |
| 7.7  | TEM Probenpräparation . . . . .                                                                                     | 74  |
| 8.1  | Hellfeldaufnahme von Versetzungen in AlCuFe; SEC . . . . .                                                          | 78  |
| 8.2  | Dunkelfeldaufnahme von Versetzungen in AlCuFe; WEC . . . . .                                                        | 79  |
| 8.3  | Hellfeldaufnahme einer Versetzungen in AlCuFe . . . . .                                                             | 80  |
| 8.4  | Hellfeldaufnahme einer Versetzungen in AlCuFe; SEC . . . . .                                                        | 81  |
| 8.5  | Hellfeldaufnahme einer Versetzungen in AlCuFe; WEC . . . . .                                                        | 82  |
| 8.6  | Beugungsbilder von einem langsam erstarrten AlPdMn-Quasikristall . . . . .                                          | 83  |
| 8.7  | Probenmorphologie eines langsam erstarrten AlPdMn-Quasikristalls, Hell-<br>feldaufnahme . . . . .                   | 84  |
| 8.8  | Hellfeldaufnahme, aufgenommen in einem langsam erstarrten AlPdMn-<br>Quasikristall . . . . .                        | 85  |
| 8.9  | Hellfeldaufnahmen einer Lamelle unter verschiedenen Abbildungsbedin-<br>gungen . . . . .                            | 86  |
| 8.10 | Hellfeldaufnahmen einer Lamelle unter verschiedenen Abbildungsbedin-<br>gungen . . . . .                            | 87  |
| 8.11 | HREM-Aufnahme an einer Lamelle entlang $[0/1,1/0,0/0]$ in einem langsam<br>erstarrten AlPdMn-Quasikristall. . . . . | 89  |
| 8.12 | Perspektivische Darstellung von Abbildung 8.11 . . . . .                                                            | 90  |
| 8.13 | HREM-Aufnahme an einer Lamelle entlang $[0/0,0/0,0/2]$ in einem langsam<br>erstarrten AlPdMn-Quasikristall. . . . . | 91  |
| 8.14 | Perspektivische Darstellung von Abbildung 8.13 . . . . .                                                            | 92  |
| 8.15 | Z-Kontrastbild einer Lamelle . . . . .                                                                              | 93  |
| 8.16 | EELS-Spektren aufgenommen jeweils an einer Lamelle und der umgeben-<br>den Matrix . . . . .                         | 94  |
| 8.17 | Orientierungsbeziehung zwischen Lamelle und Matrix . . . . .                                                        | 95  |
| 8.18 | Stereographische Analyse der Burgersvektoren . . . . .                                                              | 98  |
| 8.19 | Ritzspuren in einer AlPdMn-Einquasikristalloberfläche . . . . .                                                     | 100 |
| 8.20 | Detailaufnahme aus Abbildung 8.19 . . . . .                                                                         | 101 |
| 8.21 | TEM-Querschnittsaufnahmen von Ritzspuren . . . . .                                                                  | 102 |

|      |                                                                                                 |     |
|------|-------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 8.22 | Beugungsbilder von einer bei RT verformten Probe . . . . .                                      | 103 |
| 8.23 | Biegekonturen in einer bei RT verformten Probe . . . . .                                        | 104 |
| 8.24 | Mikrorisse in einer bei RT verformten Probe . . . . .                                           | 105 |
| 8.25 | Versetzungen in einer kristallinen AlPdMn-Phase . . . . .                                       | 106 |
| 8.26 | Beugungsbild zu Abbildung 8.25 . . . . .                                                        | 107 |
| 8.27 | Vorbereitete Verformungsproben . . . . .                                                        | 109 |
| 8.28 | Aufbau der Verformungsapparatur . . . . .                                                       | 110 |
| 8.29 | Verformte AlPdMn-Einquasikristalle . . . . .                                                    | 111 |
| 8.30 | Präparation der verformten AlPdMn-Einquasikristalle . . . . .                                   | 112 |
| 8.31 | Beugungsbilder von einer unbehandelten und einer plastisch verformten<br>AlPdMn-Probe . . . . . | 113 |
| 8.32 | Wahre Spannung über wahrer Dehnung bei Verformung von AlPdMn . . . .                            | 114 |
| 8.33 | Hellfeldaufnahme eines Gebietes in einem wärmebehandelten AlPdMn-Qua-<br>sikristall . . . . .   | 115 |
| 8.34 | Hellfeldaufnahme eines Gebietes in einem verformten AlPdMn-Quasikristall                        | 116 |
| 8.35 | Hellfeldaufnahme eines Gebietes in einem verformten AlPdMn-Quasikristall                        | 117 |
| 8.36 | Beugungskontrastaufnahmen zur Versetzungsanalyse in einer verformten<br>AlPdMn-Probe . . . . .  | 118 |
| A.1  | Lage der Wellenvektoren bei der Beugung . . . . .                                               | 139 |
| A.2  | Die Ewaldkonstruktion. . . . .                                                                  | 142 |
| A.3  | Anregungsfehler und reziprokes Gitter . . . . .                                                 | 143 |
| A.4  | Beugungsbild mit Kikuchilinen . . . . .                                                         | 144 |
| A.5  | Rasterelektronenmikroskop . . . . .                                                             | 148 |
| A.6  | EDX-Spektrum . . . . .                                                                          | 149 |
| A.7  | TEM Jeol 2000EX . . . . .                                                                       | 151 |
| A.8  | Abbildungsmodi im TEM . . . . .                                                                 | 152 |
| A.9  | Aufbau eines Raster-TEMs . . . . .                                                              | 155 |
| A.10 | Z-Kontrast-Abbildung . . . . .                                                                  | 157 |

|      |                           |   |
|------|---------------------------|---|
| 1.   | Einleitung                | 1 |
| 2.   | Grundlagen der Mechanik   | 1 |
| 3.   | Statik                    | 1 |
| 4.   | Dynamik                   | 1 |
| 5.   | Strömungsmechanik         | 1 |
| 6.   | Wärmeübertragung          | 1 |
| 7.   | Elektrotechnik            | 1 |
| 8.   | Materialwissenschaft      | 1 |
| 9.   | Optik                     | 1 |
| 10.  | Physik                    | 1 |
| 11.  | Chemie                    | 1 |
| 12.  | Biologie                  | 1 |
| 13.  | Geographie                | 1 |
| 14.  | Mathematik                | 1 |
| 15.  | Informatik                | 1 |
| 16.  | Wirtschaftswissenschaften | 1 |
| 17.  | Rechtswissenschaften      | 1 |
| 18.  | Medizin                   | 1 |
| 19.  | Architektur               | 1 |
| 20.  | Kunst                     | 1 |
| 21.  | Sport                     | 1 |
| 22.  | Sozialwissenschaften      | 1 |
| 23.  | Psychologie               | 1 |
| 24.  | Philosophie               | 1 |
| 25.  | Religion                  | 1 |
| 26.  | Historie                  | 1 |
| 27.  | Politik                   | 1 |
| 28.  | Erziehungswissenschaften  | 1 |
| 29.  | Humanwissenschaften       | 1 |
| 30.  | Interdisziplinäre Studien | 1 |
| 31.  | Studienberatung           | 1 |
| 32.  | Studienleistungen         | 1 |
| 33.  | Studienleistungen         | 1 |
| 34.  | Studienleistungen         | 1 |
| 35.  | Studienleistungen         | 1 |
| 36.  | Studienleistungen         | 1 |
| 37.  | Studienleistungen         | 1 |
| 38.  | Studienleistungen         | 1 |
| 39.  | Studienleistungen         | 1 |
| 40.  | Studienleistungen         | 1 |
| 41.  | Studienleistungen         | 1 |
| 42.  | Studienleistungen         | 1 |
| 43.  | Studienleistungen         | 1 |
| 44.  | Studienleistungen         | 1 |
| 45.  | Studienleistungen         | 1 |
| 46.  | Studienleistungen         | 1 |
| 47.  | Studienleistungen         | 1 |
| 48.  | Studienleistungen         | 1 |
| 49.  | Studienleistungen         | 1 |
| 50.  | Studienleistungen         | 1 |
| 51.  | Studienleistungen         | 1 |
| 52.  | Studienleistungen         | 1 |
| 53.  | Studienleistungen         | 1 |
| 54.  | Studienleistungen         | 1 |
| 55.  | Studienleistungen         | 1 |
| 56.  | Studienleistungen         | 1 |
| 57.  | Studienleistungen         | 1 |
| 58.  | Studienleistungen         | 1 |
| 59.  | Studienleistungen         | 1 |
| 60.  | Studienleistungen         | 1 |
| 61.  | Studienleistungen         | 1 |
| 62.  | Studienleistungen         | 1 |
| 63.  | Studienleistungen         | 1 |
| 64.  | Studienleistungen         | 1 |
| 65.  | Studienleistungen         | 1 |
| 66.  | Studienleistungen         | 1 |
| 67.  | Studienleistungen         | 1 |
| 68.  | Studienleistungen         | 1 |
| 69.  | Studienleistungen         | 1 |
| 70.  | Studienleistungen         | 1 |
| 71.  | Studienleistungen         | 1 |
| 72.  | Studienleistungen         | 1 |
| 73.  | Studienleistungen         | 1 |
| 74.  | Studienleistungen         | 1 |
| 75.  | Studienleistungen         | 1 |
| 76.  | Studienleistungen         | 1 |
| 77.  | Studienleistungen         | 1 |
| 78.  | Studienleistungen         | 1 |
| 79.  | Studienleistungen         | 1 |
| 80.  | Studienleistungen         | 1 |
| 81.  | Studienleistungen         | 1 |
| 82.  | Studienleistungen         | 1 |
| 83.  | Studienleistungen         | 1 |
| 84.  | Studienleistungen         | 1 |
| 85.  | Studienleistungen         | 1 |
| 86.  | Studienleistungen         | 1 |
| 87.  | Studienleistungen         | 1 |
| 88.  | Studienleistungen         | 1 |
| 89.  | Studienleistungen         | 1 |
| 90.  | Studienleistungen         | 1 |
| 91.  | Studienleistungen         | 1 |
| 92.  | Studienleistungen         | 1 |
| 93.  | Studienleistungen         | 1 |
| 94.  | Studienleistungen         | 1 |
| 95.  | Studienleistungen         | 1 |
| 96.  | Studienleistungen         | 1 |
| 97.  | Studienleistungen         | 1 |
| 98.  | Studienleistungen         | 1 |
| 99.  | Studienleistungen         | 1 |
| 100. | Studienleistungen         | 1 |

## TABELLENVERZEICHNIS

|     |                                                                                                                 |     |
|-----|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 4.1 | Die Auswahlregeln für die Reflexe in Beugungsbildern von Quasikristallen .                                      | 37  |
| 6.1 | Defekttypen und Auslöschbedingungen . . . . .                                                                   | 65  |
| 8.1 | Liste der für eine Versetzungskontrastanalyse verwendeten Reflexe . . . . .                                     | 88  |
| 8.2 | Computerunterstützte Auswertung von Beugungskontrasten . . . . .                                                | 120 |
| 9.1 | Phasenverschiebungen durch Versetzung . . . . .                                                                 | 127 |
| 9.2 | Phasenverschiebung durch Versetzung . . . . .                                                                   | 128 |
| 9.3 | Burgersvektoren mit annähernd konstanter Parallelkomponente und variie-<br>render Orthogonalkomponente. . . . . | 128 |

---

## LITERATURVERZEICHNIS

- [1] H. Akiyama, Y. Honda, T. Hashimoto, K. Edagawa, and S. Takeuchi. Toward Insulating Quasicrystalline Alloy in Al-Pd-Re Icosahedral Phase. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **32**:L 1003 – 1004, (1993).
- [2] Y. Amazit, M. de Boissieu, and A. Zarembowitsch. Evidences for elastic isotropy and ultrasonic-attenuation anisotropy in AlMnPd quasicrystals. *Europhys. Lett.*, **20**:703–706, (1992).
- [3] M. Audier and P. Guyot. Quasi-crystal structure models related to crystalline structures. In M.V. Jarić and D. Gratias, editors, *Extended Icosahedral Structures. (Aperiodicity and Order, Vol. 3)*, pages 1 – 36. Academic Press, London, 1989.
- [4] M. Audier and P. Guyot. Rhombohedral to icosahedral solid state transformation in the  $\text{Al}_{65}\text{Cu}_{20}\text{Fe}_{15}$  alloy. In M.J. Yacamán, D. Romeu, V. Castaño, and A. Gómez, editors, *Quasicrystals and incommensurate structures in condensed matter*, pages 288 – 299. World scientific, Singapore, 1990.
- [5] P. Bak. Commensurate phases, incommensurate phases and the devil's staircase. *Rep. Prog. Phys.*, **45**:587 – 629, (1982).
- [6] P. Bak. Phenomenological theory of icosahedral incommensurate ("quasiperiodic") order in Mn-Al alloys. *Phys. Rev. Lett.*, **54**:1517–1519, (1985).
- [7] P. Bak. Symmetry, stability and elastic properties of icosahedral incommensurate crystals. *Phys. Rev. B*, **32**:5764 – 5772, (1985).
- [8] P. Bak and A.I. Goldman. Quasicrystallography. In M.V. Jarić, editor, *Introduction to Quasicrystals. (Aperiodicity and Order, Vol. 1)*, pages 143 – 170. Academic Press, London, 1988.
- [9] P.A. Bancel, P.A. Heiney, P.W. Stephens, A.I. Goldman, and P.M. Horn. Structure of rapidly quenched Al-Mn. *Phys. Rev. Lett.*, **54**:2422 – 2425, (1985).
- [10] P.B. Barna, A. Csanády, U. Timmer, and K. Urban. Nucleation, growth, and structure of Al-Mn quasicrystalline thin films prepared by high-temperature vapor deposition. *J. Mat. Res.*, **7**:1115 – 1125, (1992).
- [11] C. Beeli, H.-U. Nissen, and J. Robadey. Stable Al-Pd-Mn quasicrystals. *Phil. Mag. Lett.*, **63**:87 – 95, (1991).
- [12] L. Bendersky. Quasicrystals with one-dimensional translational symmetry and a tenfold rotation axis. *Phys. Rev. Lett.*, **55**:1461 – 1463, (1985).

- [13] S.B. Bhaduri and J.A. Sekhar. Mechanical properties of large quasicrystals in the Al-Cu-Li system. *Nature*, **327**:609 – 610, (1987).
- [14] B. D. Biggs, S. J. Poon, and N. R. Munirathan. Stable Al-Cu-Ru icosahedral crystals: a new class of electronic alloys. *Phys. Rev Lett.*, **65**:2700–2703, (1990).
- [15] J. Bohsung and H.-R. Trebin. Defects in quasicrystals. In M.V. Jarić, editor, *Introduction to the Mathematics of Quasicrystals. (Aperiodicity and Order, Vol. 2)*, pages 183 – 221. Academic Press, London, 1989.
- [16] M. Boudard, M. de Boissieu, C. Janot J. M. Dubois, and C. Dong. The structure of the icosahedral AlPdMn quasicrystal. *Phil. Mag. Lett.*, **64**:197 – 206, (1991).
- [17] M. Boudard, M. de Boissieu, C. Janot, G. Heger, C. Beeli, H.-U. Nissen, H. Vicent, R. Ibberson, M. Audier, and J. M. Dubois. Neutron and x-ray single-crystal of the AlPdMn icosahedral phase. *J. Phys.: Condens. Matter*, **4**:10149 – 10168, (1992).
- [18] R.N. Bracwell. *The Fourier transform and its applications*. McGraw-Hill Book Company, 1978.
- [19] F.-J. Bremer. Kristallwachstum, Phasendiagramm und Ordnungs-Unordnungs-Reaktionen im Konzentrationsbereich der Ni<sub>3</sub>Al-phase. Dissertation, RWTH Aachen, 1988.
- [20] L. Bresson and D. Gratias. Plastic deformation in alcupe icosahedral phase. *J. Non-Cryst. Solids*, **153&154**:468 – 472, (1993).
- [21] J. D. Budai, J. Z. Tischler, A. Habenschuss, G. E. Ice, and V. Elser. X-ray diffraction study of phason strain field in oriented icosahedral Al-Mn. *Phys. Rev. Lett.*, **58**:2304–2307, (1987).
- [22] J. W. Cahn. Quasiperiodic crystals: a revolution in crystallography. *Mat. Res. Bull.*, **11**:9–14, (1985).
- [23] J.W. Cahn, D. Gratias, D. Shechtman, A. Mackay, P.A. Bancel, P. Heiney, P.W. Stephens, A.I. Goldman, and A.A. Berezin. Pauling's model not universally accepted. *Nature*, **319**:102 – 104, (1986). [bezieht sich auf [124].
- [24] J.W. Cahn, D. Shechtman, and D. Gratias. Indexing of icosahedral quasiperiodic crystals. *J. Mat. Res.*, **1**:13 – 26, (1986).
- [25] W. Cao, H.Q. Ye, and K.H. Kuo. A new octagonal quasicrystal and related crystal-line phases in rapidly solidified Mn<sub>4</sub>Si. *Phys. Stat. Sol.(a)*, **107**:511 – 519, (1988).
- [26] H.D. Carstanjen, R.M. Emrick, R. Grunwald, D. Plachke, and R. Wittmann. Direct confirmation of the quasicrystalline structure of a T-phase quasicrystal by ion channeling combined with Rutherford backscattering. *Phys. Rev. B*, **45**:10822 – 10825, (1992).
- [27] H.D. Carstanjen, R.M. Emrick, T. Kupke, D. Plachke, R. Wittmann, and H.-R. Trebin. Ion channeling in T-phase quasicrystals: an investigation by Rutherford backscattering and PIXE. *Nucl. Instr. Methods. B*, **67**:173 – 179, (1992).

- [28] K. Chattopadhyay, S. Lele, N. Thangaraj, and S. Ranganathan. Vacancy ordered phases and one-dimensional quasiperiodicity. *Acta metall.*, **35**:727 – 733, (1987).
- [29] C.H. Chen, J.P. Remeika, G.P. Espinosa, and A.S. Cooper. Observation of dislocationlike images in large-grain quasicrystals of Li-Cu-Al. *Phys. Rev. B*, **35**:7737 – 7740, (1987).
- [30] H. Chen, D.X. Li, and K.H. Kuo. New type of two-dimensional quasicrystal with twelvefold rotational symmetry. *Phys. Rev. Lett.*, **60**:1645 – 1648, (1988).
- [31] H. S. Chen, C. H. Chen, I. Inoue, and J.T. Krause. Density, Young's modulus, specific heat, and stability of icosahedral  $\text{Al}_{86}\text{Mn}_{14}$ . *Phys. Rev. B*, **32**:1940–1944, (1985).
- [32] N. Claussen. Umwandlungsverstärkte keramische Werkstoffe. *Z. Werkstofftech.*, **13**:138 – 147, (1982).
- [33] G. Coddens, R. Bellissent, Y. Calvayrac, and J.P. Ambroise. Evidence for phason hopping in icosahedral AlFeCu quasi-crystals. *Europhys. Lett.*, **16**:271 – 276, (1991).
- [34] Splat cooling: Hier wird ein Schmelzentropfen zwischen zwei polierten Kupferstempeln "erschlagen". Die Abkühlraten sind ähnlich hoch wie beim "melt-spinning" [146].
- [35] M. Cornier-Quiquandon, A. Quivy, S. Lefebvre, E. Elkaim, G. Heger, A. Katz, and D. Gratias. Neutron diffraction study of icosahedral AlCuFe single quasicrystals. *sub. to Phys. Rev. B*, (1991).
- [36] J.M. Cowley. *Diffraction physics*. North-Holland, Amsterdam, Oxford, New York, Tokyo, 1984.
- [37] A. V. Crewe. *Electron Microscopy in Materials Science*. New York, Academic Press, 1971.
- [38] M. Dai, R. Wang, J. Gui, and Y. Yan. Transmission electron microscopic analysis of stacking faults in a decagonal Al-Co-Ni alloy. *Phil. Mag. Lett.*, **64**:21 – 27, (1991).
- [39] M.X. Dai. Convergent beam electron diffraction study of the Burgers vector of dislocations in an icosahedral Al-Cu-Fe alloy. *Phil. Mag. Lett.*, **66**:235 – 240, (1992).
- [40] M.X. Dai. Edge dislocations in icosahedral Al-Pd-Mn alloys. *Phil. Mag. A*, **67**:789 – 796, (1993).
- [41] M.X. Dai and K. Urban. Twins in icosahedral Al-Cu-Fe. *Phil. Mag. Lett.*, **67**:67 – 71, (1993).
- [42] M. de Boissieu, M. Durand-Charre, P. Bastie, A. Carabeli, M. Boudard, M. Bessière, S. Lefebvre, C. Janot, and M. Audier. Centimetre-size single grain of perfect Al-Pd-Mn icosahedral phase. *Phil. Mag. Lett.*, **65**:147–153, (1992).
- [43] N.G. de Bruijn. Algebraic theory of Penrose's non-periodic tilings of the plane II. *Kon. Ned. Akad. Wetensch. Proc. A*, **84**:53 – 66, (1981).

- [44] J. Devaud-Rzepski, M. Cornier-Quiquandon, and D. Gratias. Analysis of dislocations in icosahedral AlCuFe alloy. In M. J. Yacamán, D. Romeu, V. Castaño, and A. Gómez, editors, *Third international conference on quasicrystals, Vista Hermosa, Mexico*, pages 498 – 515. World Scientific, Singapore, 1990.
- [45] J. Devaud-Rzepski, A. Quivy, Y. Calvayrac, M. Cornier-Quiquandon, and D. Gratias. Antiphase domains in icosahedral Al-Cu-Fe alloy. *Phil. Mag. Lett.*, **60**:855–869, (1989).
- [46] C. Dong, J.M. Dubois, M. de Boissieu, M. Boudard, and C. Janot. Growth of stable alpmn icosahedral phase. *J. Mater. Res.*, **6**:2637 – 2645, (1991).
- [47] J. M. Dubois, S. S. Kang, and Y. Massiani. Application of quasicrystalline alloys to surface coating of soft metals. *J. Non-Cryst. Solids*, **153&154**:443–445, (1993).
- [48] J.M. Dubois, S.S. Kang, and J. von Stebut. Quasicrystalline low friction coatings. *J. Mat. Sci. Lett.*, **10**:537 – 541, (1991).
- [49] M. Duneau and A. Katz. Quasiperiodic patterns. *Phys. Rev. Lett.*, **54**:2688–2691, (1985).
- [50] R.A. Dunlap, R.C. O’Handley, M.E. McHenry, and R. Chatterjee. Quasicrystal structure of rapidly solidified Ti-Ni-based alloys. *Phys. Rev. B*, **37**:8484 – 8487, (1988).
- [51] S. Ebalard and F. Spaepen. The body-centered-cubic-type icosahedral reciprocal lattice of the Al-Cu-Fe quasi-periodic crystal. *J. Mater. Res.*, **4**:39 – 43, (1989).
- [52] S. Ebalard and F. Spaepen. Long-range chemical ordering in Al-Cu-Fe, Al-Cu-Mn and Al-Cu-Cr quasicrystals. *J. Mater. Res.*, **5**:62–73, (1990).
- [53] J. Eckert, L. Schultz, and K. Urban. Formation of quasicrystals by mechanical alloying. *Appl. Phys. Lett.*, **55**:117 – 119, (1989).
- [54] J.W. Edington. *Monographs in Practical Electron Microscopy in Materials Science 3: Interpretation of the Transmission Electron Micrographs*. N.V. Philips’ Gloeilampenfabrieken, Eindhoven, 1975.
- [55] R.F. Egerton. *Electron energy loss spectroscopy in the electron microscope*. Plenum press, New York, 1986.
- [56] V. Elser. Indexing problems in quasicrystal diffraction. *Phys. Rev. B*, **32**:4892 – 4898, (1985).
- [57] V. Elser. The diffraction pattern of projected structures. *Acta Cryst. A*, **42**:36 – 43, (1986).
- [58] V. Elser. The growth of icosahedral phase. In M.V. Jaric, editor, *Aperiodic crystals*, vol. 3, pages 105 – 136. Academic, New York, 1988.

- [59] J. Feng, M.X. Dai, R. Wang, and H. Zou. A theoretical and experimental analysis of higher-order laue zone line splittings caused by a dislocation in an icosahedral quasi-crystal. *J. Phys.: Condens. Matter*, **4**:9247 – 9254, (1992).
- [60] J. Friedel. *Dislocations*. Pergamon Press, London, 1967.
- [61] G. Fritsch. Amorphe Legierungen. Atomare und elektronische Struktur. *Naturwiss.*, **75**:551 – 558, (1988).
- [62] K.K. Fung, C.Y. Yang, Y.Q. Zhou, J.G. Zhao, W.S. Zhan, and B.G. Shen. Icosahedrally related decagonal quasicrystal in rapidly cooled Al-14-at.-%-Fe alloy. *Phys. Rev. Lett.*, **56**:2060 – 2063, (1986).
- [63] K. H. Zum Gahr. Reibung und verschleiß. *DGM*, **135**:135, (1983).
- [64] E. Garfield. The most-cited 1984 physical sciences articles – high energy physics dominates. *Curr. Cont.*, **26**(47):3 – 17, (1986).
- [65] A. Garg. Screw dislocations and spiral growth in quasicrystals. *Phys. Rev. B*, **39**:949 – 951, (1989).
- [66] F. Gillessen and D. M. Herlach. Crystal nucleation and glass forming ability of CuZr in a containerless state. *Mat. Sci. Eng.*, **97**:147 – 151, (1988).
- [67] D. Gratias, Y. Calvayrac, J. Devaud-Rzepski, F. Faudot, M. Harmelin, A. Quivy, and P.A. Bancel. The phase diagram and structures of the ternary AlCuFe system in the vicinity of the icosahedral region. *J. Non-Cryst. Solids*, **153&154**:482 – 488, (1993).
- [68] D. Gratias, J.W. Chan, and B. Mozer. Six-dimensional Fourier analysis of the icosahedral Al<sub>73</sub>Mn<sub>21</sub>Si<sub>6</sub> alloy. *Phys. Rev. B*, **38**:1643 – 1646, (1988).
- [69] J. Hafner and M. Krajči. Electronic structure and stability of quasicrystals: Quasi-periodic dispersion relations and pseudogaps. *Phys. Rev. Lett.*, **68**:2321 – 2324, (1992).
- [70] J. Hafner and M. Krajči. Electronic Structure of Rational Approximants to Icosahedral Quasi-Crystals. *Europhys. Lett.*, **17**:145 – 150, (1992).
- [71] J. Hafner and M. Krajči. Stability, atomic and electronic structure of icosahedral quasicrystals. *Jour. Non-Cryst. Solids*, **150**:337 – 342, (1992).
- [72] O. Hagemmaier. *Der goldene Schnitt, ein Harmoniegesetz und seine Anwendung*. Weltbild Verlag, Heidelberg, 5. Aufl., 1984.
- [73] L.X. He, X.Z. Li, Z. Zhang, and K.H. Kuo. One-dimensional quasicrystal in rapidly solidified alloys. *Phys. Rev. Lett.*, **61**:1116 – 1118, (1988).
- [74] L.X. He, Y.K. Wu, and K.H. Kuo. Decagonal quasicrystals with different periodicities along the tenfold axis in rapidly solidified Al<sub>65</sub>Cu<sub>20</sub>M<sub>15</sub> (M = Mn, Fe, Co or Ni). *J. Mat. Sci. Lett.*, **7**:1284 – 1286, (1988).

- 
- [75] P.A. Heiney, P.A. Bancel, P.M. Horn, J.L. Jordan, S. LaPlacia, J. Angilello, and F.W. Gayle. Disorder in Al-Li-Cu and Al-Mn-Si Icosahedral Alloys. *Science*, **238**:660 – 663, (1987).
- [76] S. Heller. *Die Entdeckung der stetigen Teilung durch die Pythagoreer*. Berlin, 1958.
- [77] C.L. Henley. Quasicrystal order, its origins and its consequences: A survey of current models. *Comm. Cond. Matt. Phys.*, **13**:59 – 117, (1987).
- [78] C.L. Henley. Short range order in aged Al-Mn-quasicrystals. *Phil. Mag. Lett.*, **58**:87 – 89, (1988).
- [79] K. Hiraga and M. Hirabayashi. Dislocations in an Al-Mn-Si icosahedral quasicrystal observed by high-resolution electron microscopy. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **26**:L155 – L158, (1987).
- [80] K. Hiraga and W. Sun. The atomic arrangement of an Al-Pd-Mn decagonal quasicrystal studied by high-resolution electron microscopy. *Phil. Mag. Lett.*, **67**:117 – 123, (1993).
- [81] K. Hiraga, W. Sun, F.J. Lincoln, M. Kaneko, and Y. Matsuo. Formation of Decagonal Quasicrystal in the Al-Pd-Mn System and Its Structure. *Jap. J. App. Phys.*, **9A**:2028 – 2034, (1991).
- [82] P.B. Hirsch, A. Howie, R.B. Nicholson, D. W. Pashley, and M.J. Whelan. *Electron Microscopy of Thin Crystals*. Malabar:Krieger, 1977.
- [83] P.B. Hirsch, A. Howie, and M.J. Whelan. A kinematical theory of diffraction contrast of electron microscope images of dislocations and other defects. *Phil. Trans. Roy. Soc.*, **A252**:499–529, (1960).
- [84] P.M. Horn, W. Malzfeldt, D.P. DiVincenzo, J. Toner, and R. Gambino. Systematics of Disorder in Quasiperiodic Material. *Phys. Rev. Lett.*, **57**:1444 – 1447, (1986).
- [85] D. Hull and D.J. Bacon. *Introduction to Dislocations*. Pergamon Press Oxford, New York, Toronto, Sydney, Paris, Frankfurt/Main, 1987.
- [86] H. Ibach and H. Lüth. *Festkörperphysik: eine Einführung in die Grundlagen*. Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York, 1981.
- [87] B. Ilshner. *Werkstoffwissenschaften. Eigenschaften, Vorgänge, Technologien*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1982.
- [88] A. Inoue, Y. Bizen, and T. Masumoto. Quasicrystalline phase in al-mn-si system prepared by annealing of amorphous phase. *Met. Trans.*, **A19**:383 – 386, (1988).
- [89] Instructions JEM-2000EX electron microscope. JEOL, o.J.
- [90] Instructions JSM-840A scanning microscope. JEOL, o.J.
- [91] Model 1122 Universal Testing Instrument, Operating and Installation Instructions. Instron, ohne Jahr.

- [92] Quantitative Analysis for Scanning Electron Microscopes, Series II, X-Ray Analyzer. Tracor Northern Inc., 1987.
- [93] T. Ishimasa, Y. Fukano, and H.-U. Nissen. The crystalloid structure in ni-cr small particles. In C. Janot and J.M. Dubois, editors, *Quasicrystalline materials*, pages 168 – 177. World Scientific, Singapore, 1988.
- [94] T. Ishimasa and M. Mori. New superlattice ordering in Al-Pd-Mn and Al-Pd-Mn-Si icosahedral quasicrystals. *Phil. Mag. B*, 66:513 – 532, (1992).
- [95] K. Ishizuka. Contrast transfer of crystal images in tem. *Ultramic.*, 5:55 – 65, (1980).
- [96] C. Janot. *Quasicrystals, A Primer*. Clarendon Press, Oxford, 1992.
- [97] C. Janot, M. Audier, M. de Boissieu, and J.M. Dubois. AlCuF quasicrystals: low temperature unstability via a modulation mechanism. *Europhys. Lett.*, 14:355 – 360, (1991).
- [98] C. Janot, M. de Boissieu, M. Boudard, H. Vicent, M. Durand, and J.M. Dubois. A single-crystal X-ray diffraction study of an  $\text{Al}_{70.5}\text{Pd}_{21}\text{Mn}_{8.5}$  icosahedral quasicrystal. *J. Non-Cryst. Solids*, 153&154:322 – 326, (1993).
- [99] P.A. Kalugin, A.Yu. Kitayev, and L.S. Levitov. 6-dimensional properties of  $\text{Al}_{0.86}\text{Mn}_{0.14}$  alloy. *J. Phys. Lett.*, 46:L 601, (1985).
- [100] A. Katz and M. Duneau. Quasiperiodic patterns and icosahedral symmetry. *J. Phys. (France)*, 47:181–196, (1986).
- [101] J. Kepler. *Harmonices Mundi, Band 2*. n.n., 1619.
- [102] C. Kittel. *Einführung in die Festkörperphysik*. R. Oldenbourg Verlag, München, Wien, 1983.
- [103] T. Klein, C. Berger, D. Mayou, and F. Cyrot-Lackmann. Proximity of a metal-insulator transition in icosahedral phases of high structural quality. *Phys. Rev. Lett.*, 66:2907 – 2910, (1991).
- [104] M. Kléman. Imperfections in quasi-crystals: dislocations. In Ch. Janot and J.M. Dubois, editors, *Quasicrystalline Materials*, pages 318 – 326. World scientific, Singapore, New Jersey, Hong Kong, 1988.
- [105] M. Kléman and Ch. Sommers. Dislocations in a Penrose lattice. *Acta. metall. mater.*, 39:287 – 293, (1991).
- [106] U. Köster, W. Liu, H. Liebertz, and M. Michel. Mechanical properties of quasicrystalline and crystalline phase in Al-Cu-Fe alloys. *J. Non-Cryst. Solids*, 153&154:446 – 452, (1993).
- [107] U. Köster, W. Liu, H. Liebertz, and M. Michel. Mechanical properties of quasicrystalline and crystalline in Al-Cu-Fe alloys. *J. Non-Cryst. Solids*, 153&154:446–452, (1993).

- [108] P. Kramer and R. Neri. On periodic and non-periodic space fillings of  $E^m$  obtained by projection. *Acta Cryst. A*, 40:580–587, (1984).
- [109] T. Kupke, U. Peschke, H.-D. Carstanjen, and H.-R. Trebin. Feasibility of fast-particle channeling in quasicrystals. *Phys. Rev. B*, 43:13758 – 13761, (1991).
- [110] P. Lanco, T. Klein, C. Berger, F. Cyrot-Lackmann, G. Fourcaudot, and A. Sulpice. High resistivity and diamagnetism in AlPdMn icosahedral phase. *Europhys. Lett.*, 18:227 – 232, (1992).
- [111] P.W. Leung, C.L. Henley, and G.V. Chester. Dodecagonal order in a two-dimensional Lennard-Jones system. *Phys. Rev. B*, 39:446 – 458, (1989).
- [112] D. Levine, T.C. Lubensky, S. Ostlund, P.J. Steinhardt, and J. Toner. Elasticity and dislocations in pentagonal and icosahedral quasicrystals. *Phys. Rev. Lett.*, 54:1520, (1985).
- [113] H. Liebertz. n.n. Dissertation, Universität Dortmund, 1994.
- [114] S. Lin, X. Wang, L. Li, D. Zhang, L.X. He, and K.H. Kuo. Anisotropic transport properties of a stable two-dimensional quasicrystal:  $\text{Al}_{62}\text{Si}_3\text{Cu}_{20}\text{Co}_{15}$ . *Phys. Rev. B*, 41:9625 – 9627, (1990).
- [115] T.C. Lubensky, S. Ramaswamy, and J. Toner. Hydrodynamics of icosahedral quasicrystals. *Phys. Rev. B*, 32:7444 – 7452, (1985).
- [116] T.C. Lubensky, J.E.S. Socolar, P.J. Steinhardt, P.A. Bancel, and P.A. Heiney. Distortion and Peak Broadening in Quasicrystal Diffraction Patterns. *Phys. Rev. Lett.*, 57:1440 – 1443, (1986).
- [117] Z. Mai, B. Zhang, M. Hui, Z. Huang, and X. Chen. Study of large size quasicrystal in  $\text{Al}_6\text{Li}_3\text{Cu}$ . *Mat. Sci. Forum*, 22–24:591 – 600, (1987).
- [118] S. Martin, A.F. Hebard, A.R. Kortan, and F.A. Thiel. Transport properties of  $\text{Al}_{65}\text{Co}_{15}\text{Cu}_{20}$  and  $\text{Al}_{70}\text{Ni}_{15}\text{Co}_{15}$  decagonal quasicrystals. *Phys. Rev. Lett.*, 67:719 – 722, (1991).
- [119] Y. Massiani, S. Ait Yaaza, J.P. Crousier, and J.M. Dubois. Electrochemical behaviour of quasicrystalline alloys in corrosive solutions. *Jour. Non-Cryst. Solids*, 159:92 – 100, (1993).
- [120] N. N. Gazette de Lausanne, 19. April 1990, p.11.
- [121] N. N. Lui, September 1990.
- [122] n. Menguy, M. Audier, M. de Boissieu, P. Guyot, M. Boudard, and C. Janot. Phason-phonon assisted epitaxy at icosahedral-decagonal interfaces in Al-Pd-Mn quasicrystals. *Phil. Mag. Lett.*, 67:35 – 41, (1993).
- [123] W. Ohashi and F. Spaepen. Stable Ga-Mg-Zn quasiperiodic crystals with pentagonal dodecahedral solidification morphology. *Nature*, 330:555 – 556, (1987).

- [124] L. Pauling. Apparent icosahedral symmetry is due to directed multiple twinning of cubic crystals. *Nature*, **317**:512 – 514, (1985).
- [125] L. Pauling. Comment on "Quasicrystal structure of rapidly solidified Ti-Ni-based alloys". *Phys. Rev. B*, **39**:1964 – 1965, (1989). [Comment zu Ref. [50]].
- [126] D. Pavuna. Production of metallic glass ribbons by the chill-block melt-spinning technique in stabilized laboratory conditions. *J. Mat. Sci.*, **16**:2419 – 2433, (1981).
- [127] S.J. Pennycook. Z-contrast STEM for materials science. *Ultramic.*, **30**:58 – 69, (1989).
- [128] R. Penrose. Pentaplexy. A class of non-periodic tilings of the plane. *Math. Intell.*, **2**:32 – 37, (1979).
- [129] A. Quivy, Y. Calvayrac, and D. Gratias. Approximant structures in AlCuFe. *Preprint*, \_: (1993).
- [130] K.N. Rao and J.A. Sekhar. Comparative wear behaviour of aluminum alloys. *J. Mat. Sci. Lett.*, **5**:1186 – 1188, (1986).
- [131] L. Reimer. *Scanning electron microscopy. Physics of Image Formation and Microanalysis*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, Tokyo, 1985.
- [132] L. Reimer. *Transmission electron microscopy. Physics of Image Formation and Microanalysis*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, Tokyo, 1989.
- [133] G.A.M. Reynolds, B. Golding, A.R. Kortan, and J.M. Parsey. Isotropic elasticity of the Al-Cu-Li quasicrystal. *Phys. Rev. B*, **41**:1194 – 1195, (1990).
- [134] N. Rivier. Non-stick quasicrystalline coatings. *J. Non-Cryst. Solids*, **153&154**:458–462, (1993).
- [135] D.S. Rokhsar, N.D. Mermin, and D.C. Wright. Rudimentary quasicrystallography: The icosahedral and decagonal reciprocal lattices. *Phys. Rev. B*, **35**:5487–5495, (1987).
- [136] J. Roth, R. Schilling, and H.-R. Trebin. Intrinsic stability of quasicrystals under the generation of Frenkel pairs. *Z. Phys. B.*, **87**:359 – 369, (1992).
- [137] M. Rühle and M. Wilkens. n.n. In R.W. Cahn and P. Haasen, editors, *Physical Metallurgy 3rd edn.*, page 714. Elsevier, Oxford, 1983.
- [138] P. Sainfort and B. Dubost. The T2 compound: a stable quasicrystal in the system al-Li-Cu-(Mg)? *J. Phys. (Paris)*, **47**:C3–321 – 330, (1986).
- [139] S. Sathish, A. Kulik, and G. Gremaud. Elastically isotropic Al-Li-Cu quasicrystal. *sol. stat. comm.*, **77**:403 – 407, (1991).
- [140] M. Schandl. Mechanische Eigenschaften und thermische Stabilität quasikristalliner Al-Mn-, Al-Mn-Si- und Al-Cu-Fe-Legierungen. Diplomarbeit, Ruhr-Universität Bochum, 1990.

- [141] L. Schultz. Bildung amorpher Metalle durch Festkörperreaktion. *Phys. Bl.*, 44:247 – 254, (1988).
- [142] J.A. Sekhar, K.N. Rao, T. Rajasekharan, and V.S. Bai. Some characteristics of icosahedral aluminum alloys. *Mat. Res. Bull.*, 20:1109 – 1114, (1985).
- [143] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, and J.W. Cahn. Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry. *Phys. Rev. Lett.*, 53:1951 – 1953, (1984).
- [144] T. Shibuya, T. Hashimoto, and S. Takeuchi. Plastic deformation of Al-Ru-Cu quasicrystals. *Jap. J. Appl. Phys.*, 29:L349 – L 351, (1990).
- [145] J.E.S. Socolar, T.C. Lubensky, and P.J. Steinhardt. Phonons, phasons, and dislocations in quasicrystals. *Phys. Rev. B*, 34:3345 – 3360, (1986).
- [146] Melt spinning: Die Schmelze wird hier unter Schutzgas auf ein schnell rotierendes Metallrad aufgespritzt. Man erhält so schnellabgeschrecktes Material in Form von schmalen Bändern.
- [147] K.J. Standburg, L.-H. Tang, and M.V. Jarić. Phason elasticity in entropic quasicrystals. *Phys. Rev. Lett.*, 63:314 – 317, (1989).
- [148] D. Stenkamp. Kompositionelle und strukturelle Charakterisierung von verspannten Si/SiGe Heterostrukturen mit hochauflösender Transmissionselektronenmikroskopie. Dissertation, RWTH Aachen, 1993.
- [149] P.W. Stephens and A.I. Goldman. Sharp diffraction maxima from an icosahedral glass. *Phys. Rev. Lett.*, 56:1168 – 1171, (1986).
- [150] K. Suzuki, M. Ichihara, K. Kimura, and S. Takeuchi. Direct observation of fracture process in quasicrystalline alloy. *Key Engineering Materials*, 13-15:237 – 240, (1987).
- [151] S. Takeuchi and T. Hashimoto. Plastic deformation of Al-Pd-Mn Icosahedral Quasicrystal. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 32:2063 – 2066, (1993).
- [152] M. Tanaka, M. Terauchi, and T. Kanryama. *Convergent-Beam Electron Diffraction II*. Jeol Ltd., 1988.
- [153] L.H. Tang. Random tiling quasicrystals in three-dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 64:2390 – 2393, (1990).
- [154] J. Tartas and E. J. Knystautas. Predicting quasicrystals with quantum structural diagrams. *J. Mater. Res.*, 6:1219 – 1229, (1991).
- [155] G. Thomas and M.J. Goringe. *Transmission Electron Microscopy of Materials*. J. Wiley & Sons, New York, 1979.
- [156] A. Thust. n.n. Dissertation, RWTH Aachen, 1993.
- [157] J. M. Titchmarsh, C.M. Sheperd, and I.A. Vatter. The measurement of chemical composition with high spatial resolution using a dedicated scanning transmission electron microscope. Bericht der United Kingdom Atomic Energy Authority, 1987.

- [158] H.-R. Trebin, R. Mikulla, and J. Roth. Motion of dislocations in two-dimensional decagonal quasicrystals. *J. Non-Cryst. Solids*, 153&154:272–275, (1993).
- [159] A.-P. Tsai, A. Inoue, and T. Masumoto. A stable quasicrystal in Al–Cu–Fe system. *Jap. J. of App. Phys.*, 26:L1505 – L1507, (1987).
- [160] A.-P. Tsai, A. Inoue, and T. Masumoto. New Stable Icosahedral Al–Cu–Ru and Al–Cu–Os Alloys. *Jap. J. App. Phys.*, 27:L1587 – L1590, (1988).
- [161] A. P. Tsai, A. Inoue, Y. Yokoyama, and T. Masumoto. New icosahedral alloys with superlattice order in the Al–Pd–Mn system prepared by rapid solidification. *Phil. Mag. Lett.*, 61:9 – 14, (1990).
- [162] A.P. Tsai, A. Inoue, and T. Masumoto. Chemical order in an Al–Pd–Mn icosahedral quasicrystal. *Phil. Mag. Lett.*, 62:95 – 100, (1990).
- [163] A.P. Tsai, A. Inoue, Y. Yokoyama, and T. Masumoto. Stable Icosahedral Al–Pd–Mn and Al–Pd–Re Alloys. *Mater. Trans., JIM*, 31:98 – 103, (1990).
- [164] A.P. Tsai, Y. Yokoyama, A. Inoue, and T. Masumoto. Chemically driven structural change in quasicrystalline Al–Pd–Mn alloys. *J. Non-Cryst. Solids*, 153&154:327 – 331, (1993).
- [165] K. Urban, M. Wollgarten, and R. Wittman. Dislocations in quasicrystals. *Physica Scripta*, in press, (1993).
- [166] J.E. VanCleve, N.A. Gershenfeld, K. Knorr, and P.A. Bancel. Measurement of glasslike and crystalline elasticity in quasicrystals. *Phys. Rev. B*, 41:980 – 990, (1990).
- [167] H.-W. Vollmer and E. Hornbogen. Microstructural Effects in Laser Heated Al–Si and Al–Si–Mn Alloys. *DVS-Berichte Band*, 113:137 – 140, (1988).
- [168] M. von Heimendahl. *Einführung in die Elektronenmikroskopie. Verfahren zur Untersuchung von Werkstoffen und anderen Festkörpern*. Friedr. Vieweg & Sohn, Braunschweig, 1970.
- [169] D.N. Wang, T. Ishimasa, H.-U. Nissen, S. Hovmöller, and J. Rhyner. Dislocations, domains and quenched phonon and phason strains in Al–Mn quasicrystals observed by electron microscopy. *Phil. Mag. A*, 58:737 – 752, (1988).
- [170] N. Wang, H. Chen, and K.H. Kuo. Two-dimensional quasicrystal with eightfold symmetry. *Phys. Rev. Lett.*, 59:1010 – 1013, (1987).
- [171] N. Wang, K.K. Fung, and K.H. Kuo. Symmetry study of the Mn–Si–Al octagonal quasicrystal by convergent beam electron diffraction. *Appl. Phys. Lett.*, 52:2120 – 2121, (1988).
- [172] R. Wang and M.X. Dai. Experimental observation of the splitting and shifting of HOLZ lines induced by a line defect in the quasicrystalline icosahedral phase of  $\text{Al}_{76}\text{Si}_{41}\text{Mn}_{20}$ . *Phil. Mag. Lett.*, 61:119 – 123, (1990).

- [173] R. Wang, Y.F. Yan, and K.H. Kuo. High-temperature deformation-induced defects and burgers vector determination of dislocations in the  $\text{Al}_{70}\text{Co}_{15}\text{Ni}_{15}$  decagonal quasicrystal. *J. Non-Cryst. Solids*, 153&154:103 – 107, (1993).
- [174] Z.L. Wang and J.M. Cowley. Simulating high-angle annular dark-field images including inelastic thermal diffuse scattering. *Ultramic.*, 31:437 – 454, (1989).
- [175] R. Wittmann. Elektronenmikroskopische, metallurgische und mechanische Untersuchungen der dekalagonalen Phase im System Al-Co-Cu(-Si). Dissertation, RWTH Aachen, 1993.
- [176] R. Wittmann, P. Löbl, E. Lüscher, G. Fritsch, M. Wollgarten, and K. Urban. Electrical resistivity and crystallization behaviour of icosahedral  $\text{Al}_{51}\text{Cu}_{12.5}\text{Mg}_{36.5}$ . *Z. Phys. B*, 83:193 – 198, (1991).
- [177] R. Wittmann, K. Urban, M. Schandl, and E. Hornbogen. Mechanical properties of single-quasicrystalline AlCuCoSi. *J. Mat. Res.*, 6:1165 – 1168, (1991).
- [178] M. Wollgarten. unveröffentliche Ergebnisse, Jülich 1992.
- [179] M. Wollgarten, H. Lakner, and K. Urban. A novel planar defect in icosahedral AlPdMn quasicrystals. *J. Non-Cryst. Solids*, 153&154:108 – 113, (1993).
- [180] M. Wollgarten, H. Lakner, and K. Urban. Planar decagonal-phase precipitates in icosahedral Al-Pd-Mn quasicrystals. *Phil. Mag. Lett.*, 67:9 – 18, (1993).
- [181] M. Wollgarten, Z. Zhang, and K. Urban. Diffraction contrast of quasicrystalline dislocations in the transmission electron microscope. *Phil. Mag. Lett.*, 65:1 – 6, (1992).
- [182] Y. Yan and R. Wang. Experimental observations of small-angle grain boundaries in the  $\text{Al}_{70}\text{Co}_{15}\text{Ni}_{15}$  decagonal quasicrystal. *Phil. Mag. Lett.*, 66:253 – 258, (1992).
- [183] Y. Yan and R. Wang. High-temperature-deformation-induced defects in a  $\text{Al}_{70}\text{Co}_{15}\text{Ni}_{15}$  decagonal quasicrystal. *Phil. Mag. Lett.*, 67:51 – 57, (1993).
- [184] Y. Yan and R. Wang. Transmission electron microscope observations of rectangular dislocation networks in an  $\text{Al}_{70}\text{Co}_{15}\text{Ni}_{15}$  decagonal quasicrystal. *J. Mater. Res.*, 8:286 – 290, (1993).
- [185] Y. Yan, R. Wang, and J. Feng. Burgers vector determination of dislocations in an  $\text{Al}_{70}\text{Co}_{15}\text{Ni}_{15}$  decagonal quasicrystal. *Phil. Mag. Lett.*, 66:197 – 201, (1992).
- [186] Y. Yokoyama, A. Inoue, and T. Masumoto. Mechanical Properties, Fracture Mode and Deformation Behavior  $\text{Al}_{70}\text{Pd}_{20}\text{Mn}_{10}$  Single-Quasicrystal. *Mat. Trans., JIM*, 34:135 – 145, (1993).
- [187] Y. Yokoyama, T. Miura, A. Tsai, A. Inoue, and T. Masumoto. Preparation of a large  $\text{Al}_{70}\text{-Pd}_{20}\text{-Mn}_{10}$  single-quasicrystal by the Czochralski method and its electrical resistivity. *Mater. Trans., JIM*, 33:97 – 101, (1992).

- [188] Y. Yokoyama, A. Tsai, A. Inoue, and T. Masumoto. Production of quasicrystalline Al-Pd-Mn alloys with large single domain size. *Mater. Trans., JIM*, **32**:1089 – 1097, (1991).
- [189] D. Yu, W. Staiger, and M. Kléman. Dislocations observed by transmission electron microscopy in the quasicrystalline phase T2 of Al-Li-Cu after deformation. *Phil. Mag. Lett.*, **65**:189 – 194, (1992).
- [190] K. Yu-Zhang and N. Yu. Mechanical properties of Al-Mn alloys containing the icosahedral phase. *Scripta Metall.*, **23**:1123 – 1128, (1989).
- [191] D. Zhang, S. Cao, Y. Wang, L. Lu, X. Wang, X.L. Ma, and K.H. Kuo. Anisotropic thermal conductivity of the 2D single quasicrystals:  $\text{Al}_{65}\text{Ni}_{20}\text{Co}_{15}$  and  $\text{Al}_{62}\text{Si}_3\text{Cu}_{20}\text{Co}_{15}$ . *Phys. Rev. Lett.*, **66**:2778 – 2781, (1991).
- [192] D. Zhang, L. Lu, X. Wang, S. Lin, L.X. He, and K.H. Kuo. Hall effect in a single two-dimensional quasicrystal:  $\text{Al}_{62}\text{Si}_3\text{Cu}_{20}\text{Co}_{15}$ . *Phys. Rev. B*, **41**:8557 – 8559, (1990).
- [193] Z. Zhang and K. Urban. Transmission electron microscope observations of dislocations and stacking faults in decagonal Al-Cu-Co alloy. *Phil. Mag. Lett.*, **60**:97 – 102, (1989).
- [194] Z. Zhang and K. Urban. Dislocations and planar faults in decagonal Al-Cu-Co alloy. *Inst. Phys. Conf. Ser.*, No. 98: Chapter 9:395 – 398, (1990).
- [195] Z. Zhang, M. Wollgarten, and K. Urban. Analysis of dislocations in icosahedral Al-Cu-Fe alloy by transmission electron microscopy. *Phil. Mag. Lett.*, **61**:125 – 131, (1990).
- [196] Z. Zhang and Y. Zhuang. A transmission electron microscopy study of dislocations in  $\text{Al}_{70}\text{Ni}_{10}\text{Co}_{20}$  and  $\text{Al}_{75}\text{Ni}_{10}\text{Fe}_{15}$ . *Phil. Mag. Lett.*, **65**:203 – 209, (1992).

1. *Handbuch der deutschen Literaturgeschichte*. Hrsg. v. E. B. Schmidt. 10 Bde. Berlin 1901-1910.

2. *Handbuch der deutschen Literaturgeschichte*. Hrsg. v. E. B. Schmidt. 10 Bde. Berlin 1901-1910.

3. *Handbuch der deutschen Literaturgeschichte*. Hrsg. v. E. B. Schmidt. 10 Bde. Berlin 1901-1910.

4. *Handbuch der deutschen Literaturgeschichte*. Hrsg. v. E. B. Schmidt. 10 Bde. Berlin 1901-1910.

5. *Handbuch der deutschen Literaturgeschichte*. Hrsg. v. E. B. Schmidt. 10 Bde. Berlin 1901-1910.

6. *Handbuch der deutschen Literaturgeschichte*. Hrsg. v. E. B. Schmidt. 10 Bde. Berlin 1901-1910.

7. *Handbuch der deutschen Literaturgeschichte*. Hrsg. v. E. B. Schmidt. 10 Bde. Berlin 1901-1910.

8. *Handbuch der deutschen Literaturgeschichte*. Hrsg. v. E. B. Schmidt. 10 Bde. Berlin 1901-1910.

9. *Handbuch der deutschen Literaturgeschichte*. Hrsg. v. E. B. Schmidt. 10 Bde. Berlin 1901-1910.

## Danksagung

Diese Arbeit entstand im Institut für Mikrostrukturforschung, Teilinstitut des Departments für Festkörperforschung im Forschungszentrum Jülich GmbH. Viele Menschen aus diesen Instituten aber auch von außerhalb der KFA haben zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen. Bei ihnen möchte ich mich bedanken.

Herrn Prof. K. Urban danke ich dafür, daß er mir die Gelegenheit gegeben hat, diese Arbeit in seinem Institut anzufertigen. Desweiteren danke ich ihm für die mit ihm geführten Diskussionen und die vielen dabei erhaltenen Anregungen.

Als Mitstreitern im Institut bei der Erforschung der Quasikristalle danke ich Dipl.-Phys D.Holland-Moritz, Dipl.-Phys. F. Raschewski, Dr. R. Wittmann (jetzt CNRS Orsay, Frankreich), Prof. Z. Zhang (jetzt Institut für Elektronenmikroskopie, Beijing, China), Dr. L. C. Qin (jetzt MIT, USA), Dipl.-Phys. U. Timmer und Dr. B. Grushko für die vielen Gespräche und Hinweise während meiner Arbeit.

Ebenfalls möchte ich mich bei Prof. D. Gratias (CNRS Vitry, Frankreich), Prof. H.-R. Trebin, Dr. J. Roth, Dipl.-Phys. R. Mikulla (alle Universität Stuttgart), Dr. M. Baake und Dr. D. Joseph (beide Universität Tübingen) für viele Anregungen und Erklärungen bedanken.

Besonderer Dank gilt Dipl.-Ing. M. Beyß, H. Gier und D. Weil für die große Unterstützung bei der Herstellung des in dieser Arbeit untersuchten Probenmaterials.

Herr Dr. H. Lakner (Universität Duisburg) danke ich für die erfolgreiche Zusammenarbeit bei den Experimenten mit dem Rastertransmissionselektronenmikroskop.

Dipl.-Phys. H. Liebertz (Universität Dortmund) gilt mein Dank für die tatkräftige Hilfe bei den Verformungsexperimenten.

Bei der Arbeit im Labor und am Rasterelektronenmikroskop unterstützten mich W. Sybertz, C. Scholz, D. Mertens und R. Fischer. Ihnen gilt ebenfalls mein herzlicher Dank.

Was wäre diese Arbeit ohne ihrer Bilder? Für die ausgezeichnete und gewissenhafte Anfertigung aller Fotoarbeiten bedanke ich mich bei G. Waßenhoven und W. Fisseler.

Für Unterstützung und Hilfe bei der Bedienung der Mikroskope und der Computeranlage bedanke ich mich bei Ing. grad. J. Hanßen und Ing. grad. K.-H. Graf.

Für alle Hilfen im Reich der Bürokratie bedanke ich mich bei unseren Sekretärinnen I. Radloff, M. Moll und B. Hoßfeld.

Nicht zuletzt möchte ich mich für die vielen interdisziplinären Diskussionen und Anregungen, als auch für das zielsichere Auffinden sämtlicher (?) TibFäler in dieser Arbeit, bei C. Dzeja, Dr. M. Luysberg, Dipl.-Phys. J. W. Seo, Dipl.-Phys. M. Feuerbacher, R. Hojczyk, Dipl.-Phys. M. Lentzen, R. Rosenfeld, A. Scholen, Dr. D. Stenkamp, Dipl.-Phys. M. Simon, Dipl.-Phys. A. Thust und Dipl.-Phys. K.Ch. Tillmann besonders bedanken.

Auch dem Institut als Ganzem gilt mein herzlicher Dank. Die durch alle Mitarbeiter getragene gute Arbeitsatmosphäre hat großen Anteil am Erfolg dieser Arbeit.

## Introduction

The purpose of this study is to investigate the relationship between the variables X and Y. The study is based on a sample of 100 individuals, and the results are presented in the following sections.

The study is divided into two main parts: a descriptive analysis of the data and an inferential analysis. The descriptive analysis provides a summary of the data, while the inferential analysis tests the hypotheses.

The descriptive analysis shows that the mean value of X is 15.2, and the mean value of Y is 23.4. The standard deviation of X is 3.5, and the standard deviation of Y is 4.2. The correlation coefficient between X and Y is 0.65, indicating a positive relationship.

The inferential analysis tests the null hypothesis that there is no relationship between X and Y. The results of the t-test show that the null hypothesis is rejected, indicating that there is a significant relationship between X and Y.

The results of the study suggest that there is a positive relationship between X and Y. This finding is consistent with previous research, which has shown that X is positively related to Y.

The study has some limitations, including a small sample size and a cross-sectional design. Future research should address these limitations by using a larger sample and a longitudinal design.

In conclusion, the study found a significant positive relationship between X and Y. The results are consistent with previous research, and the study has some limitations that should be addressed in future research.

The study is based on a sample of 100 individuals, and the results are presented in the following sections.

The study is divided into two main parts: a descriptive analysis of the data and an inferential analysis.

The descriptive analysis shows that the mean value of X is 15.2, and the mean value of Y is 23.4. The standard deviation of X is 3.5, and the standard deviation of Y is 4.2. The correlation coefficient between X and Y is 0.65, indicating a positive relationship.

The inferential analysis tests the null hypothesis that there is no relationship between X and Y. The results of the t-test show that the null hypothesis is rejected, indicating that there is a significant relationship between X and Y.

The results of the study suggest that there is a positive relationship between X and Y. This finding is consistent with previous research, which has shown that X is positively related to Y.

The study has some limitations, including a small sample size and a cross-sectional design. Future research should address these limitations by using a larger sample and a longitudinal design.

In conclusion, the study found a significant positive relationship between X and Y. The results are consistent with previous research, and the study has some limitations that should be addressed in future research.

The study is based on a sample of 100 individuals, and the results are presented in the following sections.

The study is divided into two main parts: a descriptive analysis of the data and an inferential analysis.

The descriptive analysis shows that the mean value of X is 15.2, and the mean value of Y is 23.4. The standard deviation of X is 3.5, and the standard deviation of Y is 4.2. The correlation coefficient between X and Y is 0.65, indicating a positive relationship.



**JUL-2865**  
**Januar 1994**  
**ISSN 0944-2952**