



Doctoral Thesis

Quasicrystal structures from the crystallographic viewpoint

Author(s):

Gähler, Franz

Publication Date:

1988

Permanent Link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-000475442> →

Rights / License:

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

Diss. ETH No. 8414

Quasicrystal Structures from the Crystallographic Viewpoint

A dissertation submitted to the
SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY
ZURICH
for the degree of
Doctor of Natural Sciences

presented by
FRANZ GÄHLER
Dipl. Phys. ETH
born July 26, 1959
citizen of Urnäsch AR

accepted on the recommendation of
Prof. Dr. J. Fröhlich, examiner
Prof. Dr. T.M. Rice, co-examiner

1988

Zusammenfassung

Quasikristalle sind neuartige Phasen, die in schnell abgekühlten Metall-Legierungen vorkommen. Ihre wichtigste Eigenschaft ist, dass Ihre Fourier-Transformierte aus scharfen Bragg-Peaks besteht, deren Positionen und Intensitäten eine Punktsymmetrie haben, die mit einer dreidimensionalen periodischen Struktur nicht verträglich ist. Die Positionen der Bragg-Peaks eines Quasikristalls können jedoch alle als ganzzahlige Linearkombinationen von endlich vielen fundamentalen Wellenvektoren geschrieben werden; dies legt nahe, diese Strukturen als Schnitt durch eine höherdimensionale, periodische Struktur aufzufassen.

Im ersten Kapitel führen wir eine grosse Klasse diskreter Strukturen ein, deren Beugungsbilder die gewünschten Eigenschaften haben. Wir diskutieren verschiedene Eigenschaften dieser Strukturen. Insbesondere zeigen wir, dass sie fastperiodisch sind, wobei wir eine Definition der Fastperiodizität benützen, die von der durch Bohr für gleichmässig stetige Funktionen gegebenen abgeleitet ist, und die für diskrete Strukturen besonders geeignet ist. Ferner beleuchten wir den Zusammenhang zwischen den Intensitäten im Fourier-Spektrum und dem Konzept des lokalen Isomorphismus.

Als nächstes beginnen wir eine Untersuchung der Kristallographie der Quasikristalle. Kristallographische Konzepte können auf Quasikristalle angewandt werden aufgrund der Beziehung zu einer höherdimensionalen periodischen Struktur. Wir zeigen, wie Konzepte wie Bravais-Klassen, Punktgruppen und Raumgruppen für Quasikristalle definiert werden können, und diskutieren die experimentellen Auswirkungen dieser Symmetrien. In Kapitel zwei geben wir eine vollständige Liste der Bravais-Klassen für diejenigen Punktsymmetrien, die eine höherdimensionale periodische Struktur der Dimension höchstens sechs erfordern. In Kapitel drei leiten wir dann eine vollständige Liste der Punkt- und Raumgruppen her, die in die fünfdimensionalen Bravais-Klassen von Kapitel zwei fallen. Dies sind jene Raumgruppen, deren Punktgruppe im dreidimensionalen Raum $(2+1)$ -R-reduzibel ist. Für jede dieser Raumgruppen geben wir die nicht-primitiven Translationen und die charakteristischen Auslöschungsmuster im Fourier-Spektrum an.

In Kapitel vier sind verschiedene Methoden beschrieben, mit denen quasiperiodische "Tilings" erzeugt werden können. Nach einer kurzen Rekapitulation der klassischen Grid-Projektions-Methode führen wir eine Verallgemeinerung ein, die es erlaubt, Tilings mit beliebiger Punktsymmetrie (im Fourier-Raum) zu erzeugen mit Hilfe von Gittern, deren Dimension die minimale mit der geforderten Punktsymmetrie verträgliche ist. Ferner diskutieren wir eine hierarchische Konstruktionsmethode, die Stampfli eingeführt hat. Wir stellen die Beziehung zu anderen Konstruktionsmethoden her und beweisen damit, dass Stampfli's Tilings tatsächlich quasiperiodisch sind.

In Kapitel fünf beschreiben wir eine detaillierte Modellstruktur für Quasikristalle mit dodekagonaler Symmetrie. Diese Modellstruktur bestimmt alle Atompositionen und wurde von eng verwandten, periodischen Strukturen abgeleitet, die immer zusammen mit der quasikristallinen Phase auftreten. Diese Modellstruktur erlaubt es auch, die zuvor eingeführten kristallographischen Konzepte zu illustrieren. Wir bestimmen sowohl die Punkt- wie auch die Raumgruppe dieser Struktur. Die letztere ist kristallographisch interessant, da sie nicht-symmorph ist und eine Schraubachse sowie einen Satz von Gleitspiegelebenen aufweist. Dann berechnen wir Elektronenbeugungs-Bilder der Modell-Struktur für verschiedene Richtungen des einfallenden Strahls, wobei wir die für Elektronenbeugung wichtigen Mehrfachstreuungseffekte miteinbeziehen. Die berechneten Bilder zeigen eine gute Übereinstimmung mit experimentellen Resultaten. Wir verifizieren auch, dass die systematischen Auslöschungen mit denen der zuvor bestimmten Raumgruppe identisch sind.

Summary

Quasicrystals are novel phases of rapidly quenched metal alloys. Their main feature is that their Fourier spectrum consists of sharp Bragg peaks whose positions and intensities are invariant under a point symmetry which is incompatible with a three dimensional periodic structure. However, all the peak positions can be written as integer linear combinations of finitely many basic wave vectors. This fact allows to view these structures as intersections of physical space with a higher-dimensional periodic structure.

In chapter one, we introduce a broad class of discrete structures which produce diffraction patterns of the desired type. We discuss various properties of these structures. In particular, we show that they are almost periodic, where we have used a definition of almost periodicity which is an adaption of Bohr's definition suitable for discrete structures. Moreover we elucidate the connection between the intensities of the Fourier spectrum and the concept of local isomorphism.

Next, we start an investigation of the crystallography of quasicrystals. Crystallographic concepts can be applied to quasicrystals because of the connection of quasicrystals to higher-dimensional periodic structures. We show how Bravais classes, point groups and space groups can be defined for quasicrystals, and discuss the experimental consequences of these symmetries. In chapter two, we give a complete list of quasicrystal Bravais classes for those point symmetries which require a higherdimensional structure of dimension at most six. Then, in chapter three, we derive a complete list of point groups and space groups belonging to the five dimensional Bravais classes of chapter two. These are those space groups whose point group is in three dimensions $(2+1)$ -R-reducible. For these space groups, we give the non-primitive translations and the characteristic extinction patterns of the Fourier spectrum.

In chapter four, various construction methods for quasiperiodic tilings are described. After reviewing the classical grid-projection technique, we introduce a generalisation of it, which allows the generation of tilings with arbitrary point symmetry (in Fourier space) with the help of lattices whose dimension is the minimal one required by the point symmetry. Moreover, we discuss a hierarchic construction invented by Stampfli and relate it to other construction methods. Thereby we prove that the tilings produced by Stampfli's algorithm are indeed quasiperiodic.

In chapter five we introduce a detailed model structure for quasicrystals with dodecagonal symmetry. This model structure specifies all atomic positions and is derived from closely related periodic phases which always occur together with dodecagonal quasicrystals. Moreover, this model structure is particularly well suited to illustrate the crystallographic concepts introduced earlier. We derive the point group as well as the space group of this structure. The space group is of special

crystallographic interest, since it is a non-symmorphic one. It contains a screw axis as well as a set of glide mirror planes. We calculate the electron diffraction patterns of the model structure for various directions of the incident beam. This calculation includes multiple scattering effects, which are very important for electron diffraction. The calculated diffraction patterns agree very well with the experimentally observed ones. We verify that the systematic extinctions coincide with those predicted by the previous space group analysis.