



Doctoral Thesis

Structural and electronic properties of icosahedral and decagonal quasicrystals

Author(s):

Zurkirch, Manfred

Publication Date:

1997

Permanent Link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-001890790> →

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 Nr. 12444

**Structural and electronic properties
of
icosahedral and decagonal quasicrystals**

A dissertation submitted to the
SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY ZÜRICH

for the degree of
Doctor of Natural Sciences

presented by

MANFRED ZURKIRCH
Dipl. Phys. ETH
born on March 8th , 1970
citizen of Oberkirch, Luzern

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. D. Pescia
Prof. Dr. H.-U. Nissen
Prof. Dr. M. Erbudak

examiner
co-examiner
co-examiner

1997

Abstract

The atomic as well as the electronic structure of the two largest groups of quasicrystals is investigated by various experimental methods. As examples, one representative exhibiting fivefold symmetry, *i.e.*, $\text{Al}_{70}\text{Pd}_{20}\text{Mn}_{10}$, and the other displaying tenfold-symmetric properties, *i.e.*, $\text{Al}_{70}\text{Co}_{15}\text{Ni}_{15}$, have been selected. The geometrical structure of their building units, which are arranged in quasiperiodic tilings, has been determined by means of secondary-electron imaging. In particular, a new model for the basic symmetry unit of $\text{Al}_{70}\text{Co}_{15}\text{Ni}_{15}$ has been introduced consisting of atoms on the vertices of alternating pentagons and center-decorated decagons stacked in parallel vertical columns.

Further, a reversible phase transition at the surface of both alloys has been observed, that is, a sputtering-induced transformation from the quasicrystalline building blocks to the body-centered cubic structure, and the reverse transformation, upon annealing at 700 K, have been detected.

Surprisingly, X-ray photoelectron and electron-energy loss measurements on various surfaces reveal that no electronic properties exclusively characteristic of quasicrystals are present. As a matter of fact, collective oscillations like plasmons are more pronounced at the quasicrystalline surfaces than at the surfaces with cubic symmetry thus implying that rather than the geometrical arrangement of the atoms the composition at the surface is responsible for the observed phenomena. Core-level intensities and shifts in binding energy as well as the shape of the valence bands are often comparable to those of crystalline alloys with similar chemical composition.

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wird die elektronische und die atomare Struktur zweier Repräsentanten der zwei grössten Quasikristallgruppen untersucht. Als Proben wurden $\text{Al}_{70}\text{Pd}_{20}\text{Mn}_{10}$ als Vertreter der pentagonalen Quasikristalle und $\text{Al}_{70}\text{Co}_{15}\text{Ni}_{15}$ mit dekadagonalen Symmetrieeigenschaften gewählt. Die geometrische Struktur wurde mittels Abbildung von Sekundärelektronen bestimmt. Im Speziellen konnte für $\text{Al}_{70}\text{Pd}_{20}\text{Mn}_{10}$ eine bereits bekannte, auf sogenannten Mackay-Klustern basierende Struktur bestätigt werden. Dagegen musste für $\text{Al}_{70}\text{Co}_{15}\text{Ni}_{15}$ eine neue simple Struktureinheit entwickelt werden, um die experimentellen Befunde zu reproduzieren. Eine solche Einheit besteht aus einer Stapelung von scheibenförmigen Einheiten mit dem Umriss von Fünfecken und Zehnecken, die in einem bestimmten Grössenverhältnis zueinander stehen.

Auf beiden quasikristallinen Proben konnte eine reversible Phasenumwandlung beobachtet werden. Dabei wurde die Oberfläche durch Ionenbombardierung in eine kubisch raumzentrierte Struktur umgewandelt. Die chemische Zusammensetzung an der Oberfläche nach dieser Behandlung wies einen stark verminderten Aluminiumgehalt für beide Legierungen auf. Der quasikristalline Zustand konnte mittels Erhitzen auf 700 K, und durch die damit verbundene Diffusion von Aluminium an die Oberfläche wiederhergestellt werden.

Untersuchungen der elektronischen Bandstruktur mittels Photoemission und Elektronenverlustspektroskopie haben überraschenderweise keine Eigenschaften geliefert, die nur bei den Quasikristallen vorkommen. Im Gegenteil, kollektive Schwingungen (Plasmonen) treten sogar stärker zu Tage an der quasikristallinen Oberfläche, als bei jener mit kubischer Symmetrie. Daraus wird gefolgert, dass es nicht so sehr die geometrische

Struktur als vielmehr die chemische Zusammensetzung an der Oberfläche ist, die für die beobachteten Phänomene verantwortlich ist. Zudem sind energetische Verschiebungen von Kern-Niveaux und die spektrale Form des Valenzbandes häufig vergleichbar mit jenen von kristallinen Legierungen mit ähnlichen Zusammensetzungen.