

Electronic characterization of surface transformations on the icosahedral AlPdMn quasicrystal

Doctoral Thesis

Author(s):

Hensch, Andreas

Publication date:

2001

Permanent link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-004172277>

Rights / license:

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

Electronic characterization
of surface transformations
on the icosahedral AlPdMn quasicrystal

A dissertation submitted to the
SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY ZURICH

for the degree of
Doctor of Natural Sciences

presented by

ANDREAS HENSCH

Dipl. Phys. ETH

born on February 13, 1969

citizen of Zürich (ZH) and Niederbüren (SG)

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. M. Erbudak, examiner

Prof. Dr. D. Pescia, co-examiner

Prof. Dr. D. Vvedensky, co-examiner

Abstract

At the surface of the icosahedral bulk quasicrystal $\text{Al}_{70}\text{Pd}_{20}\text{Mn}_{10}$, either a cubic crystalline or a decagonal quasicrystalline surface phase can be induced by bombarding the sample with 1 keV Ar^+ ions at different temperatures. Upon annealing, the stoichiometry and the geometric arrangement of the icosahedral bulk is restored at the surface. The electronic and the atomic structure of these surface modifications as well as of the icosahedral bulk-terminated surface itself are studied with the aim to gain insight into the electronic mechanism stabilizing the atoms in an aperiodic, long-range ordered manner compatible with the icosahedral point-group symmetry ($\bar{5}3m$).

As a precondition to the exploration of the electronic properties, the induced surface phases are specified by secondary-electron imaging as well as low-energy electron diffraction, two complementary methods providing information about short- as well as long-range order in the atomic arrangement. Following the determination of the structural characteristics, the occupied density of electronic states is investigated by x-ray photoelectron spectroscopy. Information about the unoccupied density of states above the Fermi level as well as collective electron excitations then are accessed by electron-energy loss spectroscopy. Finally, Auger electron spectroscopy is applied to provide information on the electronic configuration localized at the individual atomic site of the three alloy constituents.

It is found that the Mn $3d$ electrons are located at the Fermi level for the cubic and the decagonal phase. Upon adopting the bulk-terminated icosahedral structure during annealing, the $3d$ band moves away from the Fermi level thus lowering the density of states around the Fermi level region. This localization of the $3d$ band must be the consequence of a complete band-filling and is in agreement with the observed pseudo gap in several quasicrystals. Pd with its fully occupied $4d$ band in all three surface structures acts as an inert filler in the alloy. The states at the Fermi level have Al $3p$ character as in the pure metal. The presence of Pd in the alloy induces appreciable d character at the Al site, which is observed at a binding energy of about 4.7 eV. These observations can be reconciled with the hybridization of Al $3sp$ electrons with the d states of Pd as well as Mn. By joining in these orbital bondings, the sp electrons lose their otherwise quasi-free character which is in accordance with the observed strong damping of multiple bulk- and surface-plasmon losses expected for Al-rich alloys. Since both, Pd and Mn, have a similar homogeneous orbital distribution of its binding-relevant electrons, Al must be responsible for the icosahedral structure of the quasicrystal.

Seite Leer /
Blank leaf

Zusammenfassung

An der Oberfläche des ikosaedrischen Quasikristalls $\text{Al}_{70}\text{Pd}_{20}\text{Mn}_{10}$ kann eine entweder kubisch kristalline oder dekadonal quasikristalline Oberflächenphase durch Bombardierung mit 1 keV Ar^+ -Ionen bei verschiedenen Temperaturen induziert werden. Durch Wärmebehandlung wird die Stöchiometrie und die geometrische Anordnung des ikosaedrischen Körpers wieder hergestellt. Die elektronische und die atomare Struktur sowohl von diesen Oberflächenmodifikationen als auch die der ikosaedrischen, durch den Körper bestimmten Oberfläche selbst, werden untersucht. Das Ziel dabei ist, einen Einblick in den Mechanismus zu gewinnen, der die Atome in einer aperiodischen, langreichweitigen Art und Weise, kompatibel mit der $(\bar{5}\bar{3}m)$ -Punktsymmetriegruppe, stabilisiert.

Als Voraussetzung für die Erforschung der elektronischen Eigenschaften werden die induzierten Oberflächenphasen mit der Abbildung von Sekundärelektronen und mit niederenergetischer Elektronenbeugung, zwei komplementäre Methoden, welche Information über kurzreichweitige wie auch langreichweitige Ordnung liefern, spezifiziert. Anschliessend an die Bestimmung der geometrischen Eigenschaften wird die besetzte Zustandsdichte der Elektronen mittels Röntgen-Photoemissionsspektroskopie erfasst. Information über die unbesetzte Zustandsdichte oberhalb des Fermi-Niveaus sowie über kollektive Elektronenanregungen wird mit Elektronen-Energieverlust-Spektroskopie gewonnen. Information über die Elektronenkonfiguration lokalisiert bei den einzelnen atomaren Komponenten liefert die Auger-Elektronenspektroskopie

Es wird beobachtet, dass die Mn $3d$ -Elektronen in der kubischen und in der dekadonalen Phase am Fermi-Niveau lokalisiert sind. Beim Annehmen der ikosaedrischen Struktur während dem Erhitzen bewegt sich das $3d$ -Band weg vom Fermi-Niveau und reduziert dabei die Zustandsdichte am Fermi-Niveau. Diese Lokalisierung des $3d$ -Bandes muss die Konsequenz einer kompletten Bandfüllung sein und ist in Übereinstimmung mit der beobachteten Pseudolücke in vielen Quasikristallen. Pd mit seinem vollständig besetzten $4d$ -Band in allen drei Oberflächenstrukturen agiert in der Legierung als inaktiver Füllstoff. Die Zustände am Fermi-Niveau haben Al $3p$ -Charakter analog zum reinen Metall. Die Anwesenheit von Pd in der Legierung induziert merklich d -Charakter am Ort von Al, gemessen bei einer Bindungsenergie von etwa 4.7 eV. Diese Beobachtungen stehen im Einklang mit der Hybridisierung von Al $3sp$ -Elektronen mit d -Zuständen von Pd wie auch Mn. Durch Teilnahme an diesen Orbitalbindungen verlieren die sp -Elektronen ihren sonst scheinfreien Charakter, was in Übereinstimmung mit der beobachteten starken Dämpfung von sonst üblichen multiplen Körper- und Oberflächenplasmonen in Al-reichen Legierungen steht. Da beide, Pd und Mn, eine ähnliche homogene or-

bitale Verteilung der bindungsrelevanten Elektronen aufweisen, muss Al für die ikosaedrische Struktur des Quasikristalles verantwortlich sein.