



Doctoral Thesis

Crystal - quasicrystal formations on Al-Co-Ni

Author(s):

Flückiger, Thomas

Publication Date:

2003

Permanent Link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-004636573> →

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](#).

Crystal – quasicrystal formations on Al-Co-Ni

A dissertation submitted to the
SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY ZURICH

for the degree of
Doctor of Natural Sciences

presented by

THOMAS FLÜCKIGER

Dipl. Phys. ETH

born on January 27, 1975

citizen of Auswil (BE)

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. M. Erbudak, examiner
Prof. Dr. A. Imamoglu, co-examiner
Dr. A.R. Kortan, co-examiner

Abstract

At the 10-fold symmetry surface of the decagonal $\text{Al}_{70}\text{Co}_{15}\text{Ni}_{15}$ quasicrystal, a ternary $\text{Al}_{50}(\text{CoNi})_{50}$ as well as a single-element Al structure is induced. The atomic structure of these two induced surface phases and the 10-fold symmetry surface are investigated with the goal to understand the interface and the structural registry between the crystalline structures and the quasicrystalline substrate. Additionally, total-energy calculation results of a crystal – quasicrystal interface are presented which aim at explaining the observed Al growth on the 10-fold symmetry surface of the decagonal $\text{Al}_{70}\text{Co}_{15}\text{Ni}_{15}$.

The atomic arrangement and chemical composition of all surface structures have been studied using low-energy electron diffraction, secondary-electron imaging and Auger electron spectroscopy. The cubic crystalline $\text{Al}_{50}(\text{CoNi})_{50}$ surface structure is induced by bombarding the sample with 1.5 keV Ar^+ ions at room temperature. This surface structure is found to be stabilized by the quasicrystalline bulk and furthermore a strong affinity between the crystalline and the quasicrystalline structure is observed. The crystalline overlayer is a mono-oriented body-centered cubic structure and is oriented with the [110] direction parallel to the 10-fold symmetry axis of the decagonal $\text{Al}_{70}\text{Co}_{15}\text{Ni}_{15}$ quasicrystal. Upon annealing, the stoichiometry and the atomic arrangement of the decagonal bulk is restored at the surface resulting in a reversible structural surface transformation. The investigations reveal that besides the periodically stacked planes along the 10-fold symmetry direction, the decagonal $\text{Al}_{70}\text{Co}_{15}\text{Ni}_{15}$ structure consists of inclined planes lying at $\theta = 29.6^\circ$ with respect to the 10-fold symmetry axis.

The single-element Al structure on the decagonal surface of the $\text{Al}_{70}\text{Co}_{15}\text{Ni}_{15}$ quasicrystal was induced by physical vapor deposition of Al at room temperature. It is found that Al atoms start clustering into islands above 0.5 MLs coverage as evidenced by their metallic character measured with Auger electron spectroscopy. With increasing thickness, the Al film evolves in its native face-centered cubic structure, in uniformly-sized, 35 Å large domain structures, with the densest packed surfaces, *i.e.*, the (111) planes, oriented parallel to the substrate surface. Within the plane, these domains are oriented along two sets of 10 discrete orientations. Within each set, the Al domains are rotated by 36° increments, whereas the two sets are displaced by approximately 2.5° relative to each other. The uniformly-sized Al clusters grow in a Volmer-Weber type epitaxy on the 10-fold symmetry

surface of the decagonal $\text{Al}_{70}\text{Co}_{15}\text{Ni}_{15}$ quasicrystal. The particular size selection of the nano-domains and their well defined orientations are explained with the help of a rigid-lattice atomistic model. The Al clusters nucleate inhomogeneously at particular positions where the total-energy for the crystal – quasicrystal interface is minimized. The incommensurability of the two structures causes the uniform size of the Al nano-clusters.

Zusammenfassung

Zwei kristalline Strukturen wurden an der Oberfläche des dekadagonalen $\text{Al}_{70}\text{Co}_{15}\text{Ni}_{15}$ Quasikristalls induziert. Bei den zwei Phasen, welche auf der senkrecht zu der 10-zähligen Rotationsachse liegenden Oberfläche des dekadagonalen Quasikristalls induziert wurden, handelte es sich um eine ternäre $\text{Al}_{50}(\text{CoNi})_{50}$ sowie um eine reine Al Struktur. Die atomare Anordnung der quasikristallinen Oberfläche und der induzierten kristallinen Phasen wurde untersucht. Als Motivation diente hierbei das Bestreben, die Grenzschicht und somit den Übergang zwischen kristallinen und quasikristallinen Strukturen zu verstehen. Darüber hinaus wurden im Rahmen dieser Dissertation Resultate von Energieberechnungen eines Modells der Grenzschicht zwischen kristalliner und quasikristalliner Struktur vorgestellt, welche das Al Wachstum auf der quasikristallinen Oberfläche zu erklären vermögen.

Die atomare Struktur und chemische Zusammensetzung der dekadagonalen Oberfläche, sowie der zwei darauf induzierten kristallinen Phasen wurden mittels niederenergetischer Elektronenbeugung, Abbildung von Sekundärelektronen sowie Auger-Elektronenspektroskopie untersucht. Bei der ternären kristallinen $\text{Al}_{50}(\text{CoNi})_{50}$ Phase handelte es sich um eine kubisch-raumzentrierte Struktur. Es wurde eine Stabilisierung dieser Phase durch den Quasikristall, sowie eine grosse Affinität zwischen kristalliner und quasikristalliner Struktur beobachtet. Die Orientierung des kubisch-raumzentrierten $\text{Al}_{50}(\text{CoNi})_{50}$ ist dadurch bestimmt, dass die [110] Richtung der kubischen Phase mit der 10-zähligen Rotationsachse der dekadagonalen Phase zusammenfällt. Die kubische $\text{Al}_{50}(\text{CoNi})_{50}$ Phase wurde durch Beschuss der dekadagonalen Oberfläche mit 1.5 keV Ar^+ -Ionen bei Raumtemperatur, wodurch die Zusammensetzung und deshalb auch die Oberflächenstruktur des dekadagonalen $\text{Al}_{70}\text{Co}_{15}\text{Ni}_{15}$ zerstört wurde, induziert. Durch anschliessende Wärmebehandlung wurde die Zusammensetzung sowie die atomare Anordnung der dekadagonalen Oberfläche wiederhergestellt, was zu einer reversiblen strukturellen Transformation an der Oberfläche führte. Es wurde gezeigt, dass neben den periodisch angeordneten Ebenen entlang der 10-zähligen Rotationsachse auch noch geneigte Netzebenen in der dekadagonalen $\text{Al}_{70}\text{Co}_{15}\text{Ni}_{15}$ Struktur existieren, welche in einem Winkel von $\theta = 29.6^\circ$ bezüglich der 10-zähligen Rotationsachse liegen.

Die kristalline Al Phase entstand durch das Ablagern von verdampftem Al auf der dekadagonalen Oberfläche des $\text{Al}_{70}\text{Co}_{15}\text{Ni}_{15}$ Quasikristalls bei Raumtemperatur. Hierbei wurde die Ausbildung von Al Domänen beobachtet, welche bei einem Be-

deckungsgrad von mehr als 50 % einsetzte. Dies konnte aufgrund des metallischen Charakters dieser Domänen durch Auger-Elektronenspektroskopie nachgewiesen werden. Mit zunehmender Dicke der Al Schicht wurde das Auftreten einer kubisch-flächenzentrierten Al Struktur in 35 Å grossen Domänen beobachtet. Diese Domänen sind in zwei Gruppen 10 diskreter Orientierungen unterteilt, welche sämtlich mit ihren dichtest gepackten Oberflächen parallel zu der dekadagonalen Oberfläche ausgerichtet sind. Innerhalb jeder Gruppe sind hierbei die Al Domänen in 36° Winkelschritten zueinander angeordnet, wogegen die zwei Gruppen um etwa 2.5° zueinander verdreht sind. Die einheitlich grossen Al Domänen sind Volmer-Weber artig auf der dekadagonalen Oberfläche des $\text{Al}_{70}\text{Co}_{15}\text{Ni}_{15}$ Quasikristalls gewachsen. Die besondere Grössenauswahl und die wohldefinierte Orientierung der Nanodomänen sind mit Hilfe eines starren Gitter-Atom-Modells erklärt. Die Al Domänen wachsen inhomogen an speziellen Stellen der quasikristallinen Oberfläche wo die totale Energie des kristallinen-quasikristallinen Grenzschichtensystems minimal ist. Die Unvereinbarkeit der kristallinen und der quasikristallinen Struktur verursacht die einheitlich grossen Al Nanodomänen.