

Liefiern nur periodische Strukturen scharfe Interferenzmuster ? (Röntgenbeugung an Fibonacci-Ketten bzw. Quasikristallen)

Volker Geist¹, Simon Brenner¹, Wolfgang Oehme²

¹IMKM, Fakultät für Chemie und Mineralogie der Universität Leipzig,
Scharnhorststr.20, 04275 Leipzig, geist@rz.uni-leipzig.de,

²Fakultät für Physik und Geowissenschaften, Bereich Didaktik der Physik,
Prager Str.36, 04317 Leipzig, oehme@physik.uni-leipzig.de
(Eingegangen: 12.04.2005; Angenommen: 06.02.2006)

Kurzfassung

Der Effekt der Beugung von Licht und anderer wellenartiger Strahlung wird oft mit der Existenz einer periodischen Struktur verknüpft und in diesem Kontext z.B. auch im Physikunterricht der Oberstufe behandelt. Seit den 80er Jahren sind jedoch die sogenannten Quasikristalle ins Gespräch gekommen. Trotz des Fehlens der für periodische Kristalle charakteristischen Translationssymmetrie zeigen diese Strukturen im Beugungsexperiment scharfe Interferenzmuster. Dieser Sachverhalt wird methodisch aufbereitet und an einem eindimensionalen Beispiel (Fibonacci-Kette) demonstriert und erläutert. Anliegen ist es, Physiklehrern einen Einblick in diese neueren Entwicklungen zu geben.

1. Einleitung

Der Effekt der Beugung elektromagnetischer Strahlung (Licht, Röntgenwellen) an **periodischen** räumlichen Strukturen (z.B. Lichtbeugung am Spalt, Röntgenbeugung an Kristallen) spielt eine wichtige Rolle im Physikunterricht der Oberstufe und wurde erst unlängst in dieser Zeitschrift erörtert [1]. In neuerer Zeit stellte man fest, dass auch **nichtperiodische** Strukturen (die sogenannten Quasikristalle [2]) scharfe Beugungsreflexe liefern können. Damit wurde die Frage nach der Bedeutung der Periodizität (Translationssymmetrie) neu aufgeworfen. Bis zur Entdeckung der Quasikristalle lautete die vorherrschende Meinung, dass die Translationssymmetrie eine unbedingt notwendige Voraussetzung für das Auftreten scharfer Beugungsreflexe ist. Das Anliegen dieses Artikels ist es, quasiperiodische Strukturen vorzustellen und an einem einfachen Beispiel die Entstehung der Beugungsmuster zu erläutern. Zunächst soll kurz auf den bekannten periodischen Fall eingegangen werden.

2. Röntgenbeugung an periodischen Strukturen

Die Entdeckung der Röntgenbeugung im Jahre 1912 durch Laue, Friedrich und Knipping erlaubte erstmals den Nachweis und die Untersuchung der atomaren Struktur kristalliner Festkörper. Damit begann eine bis heute anhaltende rasche Entwicklung unterschiedlicher Röntgenbeugungstechniken.

Unter der Beugung von Röntgenstrahlen an Kristallen versteht man die durch Streuung und Interferenz hervorgerufene Verstärkung der Röntgenstrahlung in ganz bestimmten Raumrichtungen. Durch Vermessung dieser Richtungen und der dazugehörigen Intensitäten kann man auf die jeweils vorliegende Kristallstruktur zurückschließen. Zwischen diesen scharfen Reflexen geht im Idealfall die Intensität auf Null zurück. Das ist eine Folge der Auslöschung aller Streuintensitäten zwischen den Maxima. Betrachtet man die Beugung in Richtung einer bestimmten Ebenenschar eines Kristalls (s. Abb.1), so findet man eine durch die Bragg-Gleichung begrenzte Zahl von Reflexen, da $n\lambda$ nicht größer als $2d$ werden darf (Es ist also auch möglich, dass überhaupt kein Reflex entstehen kann):

$$\sin\theta_B = n\lambda / 2d \quad (1)$$

Dieses Gesetz bestimmt den Einfallswinkel $\theta = \theta_B$, für den bei gegebener Wellenlänge λ und Ebenenabstand d eine Phasenverschiebung $n\lambda$ zwischen den reflektierten Wellen auftritt (Abb.1). Da n hier eine ganze Zahl ist, erhält man eine maximale Verstärkung der Wellen. Neben dem Hauptreflex ($n = 1$) können folglich auch Reflexe höherer Ordnung ($n = 2, 3, 4, \dots$) auftreten, solange (1) erfüllbar bleibt.

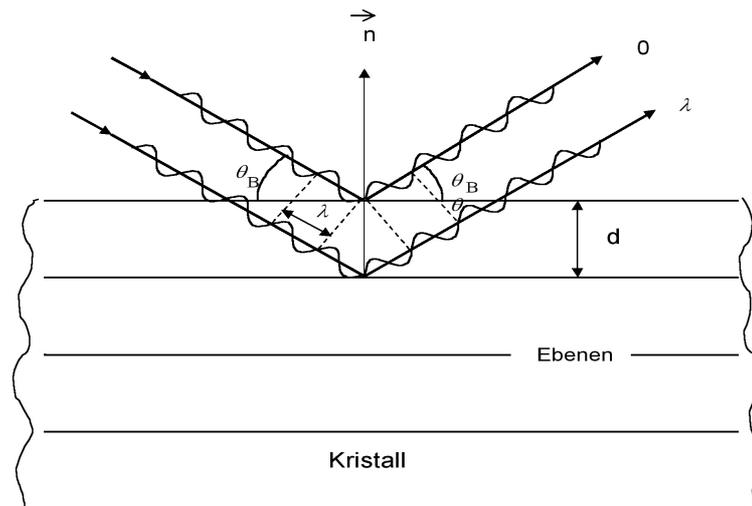
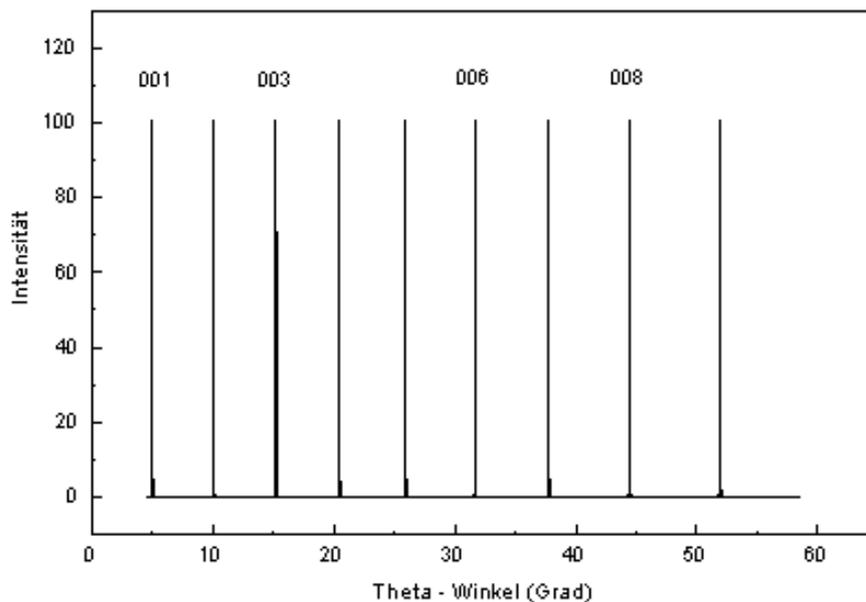


Abb.1: Schema der Reflexentstehung

Abb.2: Beugungsspektrum einer äquidistanten Schichtfolge ($d = 4$, $\lambda = 0.7$)
(Die Indizes kennzeichnen hier die Ordnung des Reflexes).

So ergeben sich zum Beispiel für eine gewählte Wellenlänge von $\lambda = 0.7$ und einen Ebenenabstand von $d = 4$ folgende Braggwinkel: 5.02, 10.08, 15.22, 20.49, 25.94..... (in Grad). Mit Hilfe des kleinen Rechenprogrammes „Bragg“ [3], das eine phasengerechte Addition der von den einzelnen Ebenen ausgehenden Streuwellen vollzieht, können die Röntgenspektren für diesen eindimensionalen Fall simuliert werden (Abb.2). (In diesem Programm wird die Fähigkeit der Ebenen, Röntgenstrahlen zu reflektieren (Streuvermögen), als feste

Größe betrachtet, im Gegensatz zu den realen Verhältnissen beim Kristallatom, wo dieser Wert sowohl vom Einfallswinkel θ als auch von der Wellenlänge λ abhängt).

Im nächsten Schritt betrachten wir eine Schichtfolge mit alternierenden Abständen, deren Verhältnis aber rational ist, also z.B. die Abstände $d' = 3$ und $d'' = 1$. Somit liegen die Ebenen bei 0, 3, 4, 7, 8 usw.

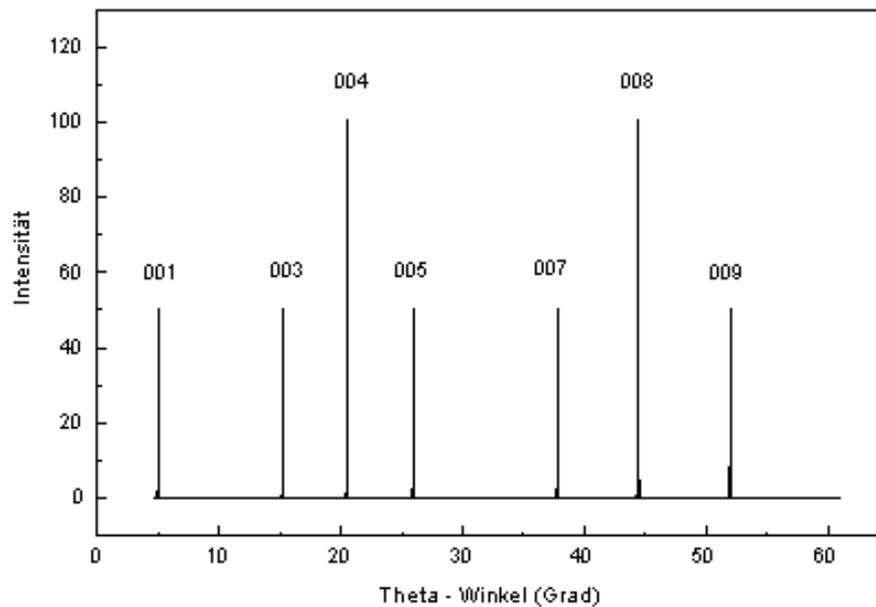


Abb.3: Beugungsspektrum einer alternierenden Schichtfolge ($d' = 3$, $d'' = 1$, $\lambda = 0.7$)

Der periodische Abstand beträgt auch hier vier ($d = d' + d''$). Wiederum treten neben dem Hauptreflex Reflexe höherer Ordnung auf. Dabei fällt auf, dass sich die Intensität der Reflexe unterscheidet und einige (002, 006..) ganz fehlen (Abb.3).

Dieses Verhalten lässt sich ebenfalls mit dem Bragg-Gesetz erklären: Die festgelegten Einfallswinkel θ_B bedingen für die an den Ebenen 0, 4, 8... reflektierten Wellen eine Phasendifferenz von genau $2\pi n$, also maximale Verstärkung der Wellen. Die Wirkung der bei 3, 7... eingeschobenen Ebenen führt dann aber zu den reduzierten Intensitäten, einige treten überhaupt nicht mehr auf (Auslöschung). Die Ursache liegt in der Phase von $\frac{3}{4} \cdot 2\pi n$ für die an der Ebene 3 reflektierten Wellen. Das bedeutet für $n = 1$ eine Phasenverschiebung von 270 Grad, somit wird die von Ebene 0 reflektierte Welle geschwächt. Für $n = 2 \Rightarrow 180$ Grad ergibt sich sogar Auslöschung, für $n = 3 \Rightarrow 90$ Grad wiederum Schwächung, für $n = 4 \Rightarrow 0$ Grad Verstärkung der an Ebene 0 gestreuten Wellen. Entsprechend wirkt die Ebene 7 auf die von 4 gestreute Welle.

Bei der Summierung der Partialwellen durch das Rechenprogramm ergibt sich dieses Bild (Abb.3) automatisch. Eine Berechnung der Intensität der einzelnen Reflexe ist mit Hilfe der sogenannten Strukturamplitude F möglich. Diese wird vollständig durch die Elementarzelle (kleinste periodische Einheit eines Kristalls) festgelegt und stellt, mathematisch gesehen, die Fouriertransformierte der

Kristallstruktur dar. Im Extremfall kann $F = 0$ sein, dann ist der Reflex ausgelöscht (vgl. Abb.3).

Die experimentelle Realisierung der Röntgenbeugung erfolgt mittels unterschiedlicher Techniken. Dabei muss man zwischen Einkristall – und Pulvermethoden unterscheiden, je nachdem ob die zu untersuchende kristalline Probe als großer Einkristall oder als Pulver (bestehend aus kleinen mikrometergrossen Kristallblöckchen (Kristalliten)) vorliegt.

So findet man z.B. in der Natur die chemische Verbindung SiO_2 (Quarz) sowohl in Form von Bergkristall als auch (und zwar öfter!) in Form von Sand. (Allerdings sind die Sandkörner für eine „gute Pulveraufnahme“ noch zu groß). Die Pulvermethoden spielen eine wichtige Rolle, da oft keine genügend großen Einkristalle mit entsprechender Qualität zur Verfügung stehen. In den letzten Jahren wurde viel an der Weiterentwicklung dieser Technik gearbeitet.

Abb.4 zeigt als Beispiel das Beugungsspektrum eines Quarzpulvers. Im Gegensatz zur Darstellung in Abb.2 oder 3 tragen hier viele gegeneinander verkippte Kristallite gleichzeitig zum Spektrum bei. Dies führt zu einer Vielzahl von Reflexen die (mit ihren höheren Ordnungen) zu den einzelnen Orientierungen der Kristallite gehören. Die Reflexindizes kennzeichnen diese Orientierungen. Im realen Beugungsexperiment werden Reflexe durch drei Indizes charakterisiert, da jetzt drei räumliche Dimensionen vorliegen.

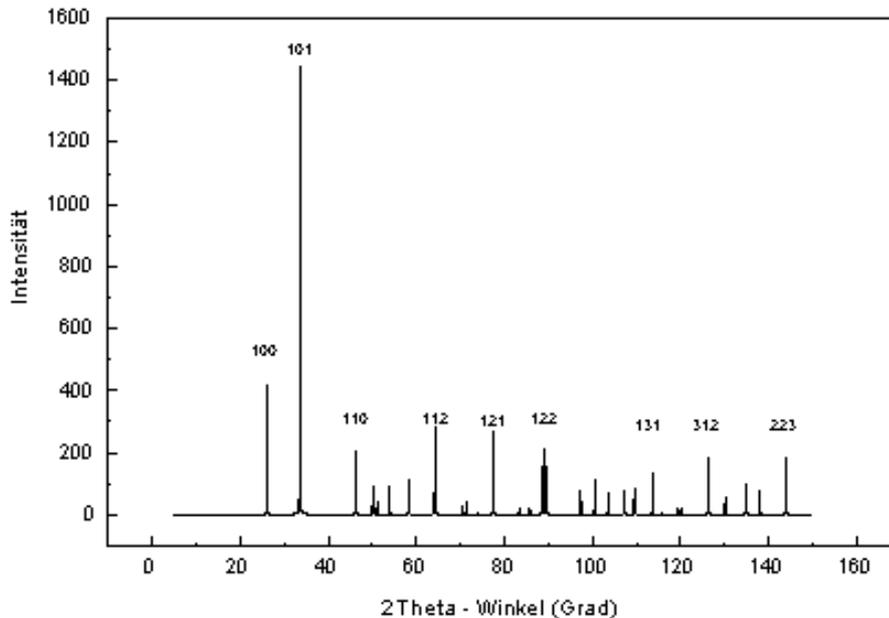


Abb.4: Beugungsspektrum eines Quarzpulvers berechnet für FeK α - Strahlung mit dem Programm „Powder Cell 2.1“ [4]

Untersucht man einen Einkristall, so muss man ihn in geeigneter Weise gegenüber dem einfallenden Röntgenstrahl drehen, um so „während“ der Bewegung ebenfalls viele Reflexe aufzunehmen. Diese Methode wird bei den sogenannten „Einkristall-Diffraktometern“ (z.B. Vierkreisdiffraktometer) realisiert. Diese Technik ist besonders für die Kristallstrukturanalyse geeignet. Eine große Rolle spielt heute z.B. die Strukturaufklärung biologischer Makromoleküle. Die Pulvermethoden sind mehr für die Analyse von Pulvern, die aus unterschiedlichen kristallinen Bestandteilen bestehen, sowie für die Gitterkonstantenbestimmung geeignet.

Neben diesen wichtigen Pulver- und Einkristallverfahren existieren noch eine Reihe anderer Untersuchungstechniken, die hier nur kurz genannt werden sollen:

- **Pulver:** Debye-Scherrer-Technik,
- **Einkristall:** Laue-Technik, Drehkristall-, Weissenberg- und Präzessionstechnik sowie das Kosselverfahren (vgl. Abb.5 und 6).

Für Beugungsexperimente an Kristallen eignet sich nicht nur Röntgenstrahlung, sondern jegliche Strahlung, deren Wellenlänge die Braggbedingung erfüllt. Dazu gehört neben den elektromagnetischen Wellen auch Teilchenstrahlung (hauptsäch-

lich Neutronen und Elektronen). Diese kann ja auf Grund des Dualismus auch Welleneigenschaften zeigen.

3. Merkwürdige Festkörper: Quasikristalle

Ganz anders liegen die Verhältnisse bei den sogenannten quasiperiodischen Kristallen (Quasikristalle, z.B.[2]). 1982 wurden von Dan Shechtman und seinen Mitarbeitern in Haifa / Israel recht ungewöhnliche „Kristalle“ entdeckt: Die Wissenschaftler erhielten von extrem schnell abgekühlten Al₆-Mn-Legierungen (etwa eine Million Grad pro Sekunde) scharfe Elektronenbeugungsaufnahmen mit fünfzähliger Symmetrie. Dieses Ergebnis wurde erst zwei Jahre später publiziert, da es mit den Erkenntnissen der klassischen Kristallographie unvereinbar war: Die für „normale“ Kristalle existierende Translationssymmetrie (periodische Wiederholung einer Elementarzelle) erlaubt nur 1-, 2-, 3-, 4- und 6-zählige Drehachsen. Das bedeutet z.B., dass man Flächen mit Fünf- oder Achtecken nicht lückenlos ausfüllen (parkettieren) kann, sondern dass dies nur mit gleichseitigen Drei-, Vier- oder Sechsecken möglich ist.

Inzwischen gibt es eine Vielzahl derartiger intermetallischer Quasikristalle. Dazu gehören z.B.: Al-Mn-, Al-Cu-Fe-, Al-Pd-Mn-, Al-Co-Ni- und Al-

Co-Cu-Legierungen (Abb.5). Die Probengröße der Einkristalle kann mehrere Millimeter erreichen, so dass zahlreiche Methoden zu ihrer Untersuchung eingesetzt werden können. Quasikristalle zeichnet z.B. eine große Härte und eine sehr kleine Wärme- und Stromleitfähigkeit aus. In der Natur hat man „quasikristalline“ Minerale bisher nicht gefunden.

Während klassische Kristalle durch die regelmäßige Wiederholung **einer** Elementarzelle gebildet werden, braucht man für die Beschreibung von Quasikristallen **zwei** Elementarbausteine, die quasiperiodisch angeordnet sind. Hier ist keine Translationssymmetrie mehr möglich. Gilt dies für alle Raumrichtungen, so spricht man von einem dreidimensionalen Quasikristall. Es existieren aber auch zwei- und sogar eindimensionale Quasikristalle. Auch hier handelt es sich um reale räumliche Gebilde, die Periodizität fehlt lediglich in zwei bzw. in einer Richtung.

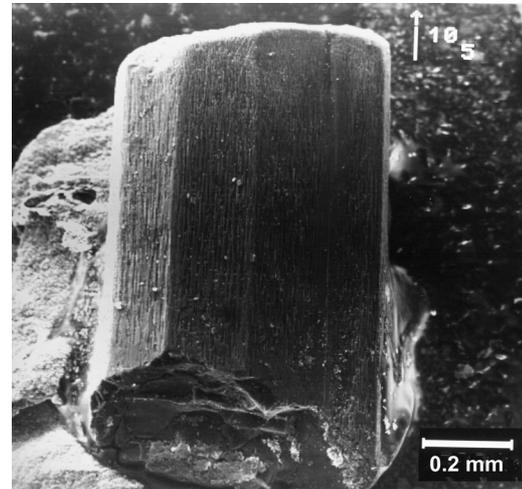
Die entsprechenden Elementarbausteine sind bei räumlichen Quasikristallen zwei unterschiedliche Rhomboeder (dreidimensionales Penrosemuster¹⁾), im zweidimensionalen Fall der Fläche zwei Rhomben (ebenes Penrosemuster), und bei einer Dimension eine sogenannte Fibonacci-Kette mit zwei unterschiedlichen Abständen (Abb.7). Bei all diesen „Bausteinen“ spielt die berühmte irrationale Zahl $\tau = (1 + \sqrt{5})/2 \equiv 2\cos 36^\circ = 1.618033\dots$, der sogenannte goldene Schnitt, eine wichtige Rolle. (Eine Strecke ist im goldenen Schnitt geteilt, wenn sich die Längen der größeren und kürzeren Teilstrecke wie $\tau : 1$ verhalten, bzw. wenn sich die kleinere Strecke so zur größeren verhält wie diese zur Gesamtstrecke). Bei der Fibonacci-Kette z.B. beträgt das Verhältnis der langen zu den kurzen Abständen τ und die spitzen Winkel der beiden Rhomben sind 36° bzw. 72° groß.

Diese Zahl τ ist von großer Bedeutung in Natur, Kunst und Wissenschaft. Besonders deutlich wird ihre Rolle beim regulären Fünfeck (Pentagramm), aber auch mit der Sommerfeldschen Feinstrukturkonstante, der Kopplungskonstanten der elektromagnetischen Wechselwirkung, wurde sie schon in Verbindung gebracht [11]. Weiterhin ist von Interesse, dass der goldene Schnitt in der Theorie dynamischer Systeme beim Übergang Ordnung \Rightarrow Chaos eine wichtige Rolle spielt, z.B [12].

Die konkrete Besetzung der Penrosemuster mit Atomen (Dekoration) würde dann die atomare Struktur liefern. Neben dem Penrosemuster sind auch andere Strukturmodelle (Glasmodell, Zufallsparkettierung ...) im Gespräch (z.B.[2]).

Man kann also zunächst zusammenfassen, dass Quasikristalle im Gegensatz zu den klassischen Kristallen in bestimmten oder in allen drei Richtungen keine Translationssymmetrie aufweisen. Des-

wegen dürfen „verbotene“ Zähligkeiten (5, 8, 10...) auftreten (Abb.5). Trotz dieser Merkwürdigkeiten zeigen diese Substanzen im Beugungsexperiment (Röntgen, Elektronen und Neutronen), wie schon erwähnt, scharfe Reflexe (Abb.6).



a)



b)

Abb.5: Rasterelektronenmikroskopische Aufnahme eines AlCoNi – Quasikristalls (a). Dieser zeigt eine zehnzählige Drehsymmetrie, wie das parallel zur Stirnfläche aufgenommene Beugungsbild (b) demonstriert. Hierbei wurde eine spezielle Röntgendiffraktionstechnik, der sogenannte Kosseloeffekt, z.B. [6], genutzt [8].

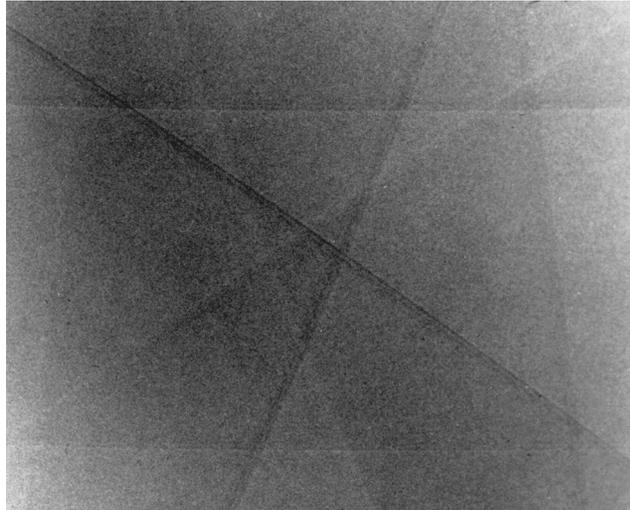


Abb.6: Diese Aufnahme demonstriert die Schärfe der Röntgeninterferenzen (hier Kossellinien) von Quasikristallen: Deutlich ist die Dublettaufspaltung $K\alpha_1$ und $K\alpha_2$ zu erkennen.

3.1 Die Fibonacci-Kette als eindimensionales Fernordnungsprinzip

Wie schon gesagt, stellt die **Fibonacci-Kette** das eindimensionale Beispiel einer quasiperiodischen Struktur dar. An ihr lässt sich relativ einfach das spezifische Beugungsverhalten der Quasikristalle veranschaulichen. Man bezeichnet als Fibonacci-Kette eine Folge von langen (L) und kurzen (S) Segmenten, deren Verhältnis $L : S = \tau$ beträgt und damit nicht mehr rational ist. Der Aufbau der Kette wird durch die Substitutionsvorschrift $S \Rightarrow L$ und $L \Rightarrow LS$ geregelt, dabei wird mit S begonnen:

Ebenenfolge Anzahl der Elemente

S	1
L	1
LS	2
LSL	3
LSLLS	5
LSLLSLSL	8

.....

Es handelt sich also hier um eine spezielle nichtperiodische Ordnung (quasiperiodisch), bei der aber trotzdem (wie bei den konventionellen Kristallen) die Positionen nach einer bestimmten nichtstochastischen Vorschrift zu ermitteln sind. Diese wichtige Eigenschaft eines Systems nennt man Fernordnung.

Die Zahl der Bausteine pro Zeile $0,1,1,2,3,5,8,\dots$ entspricht den sogenannten **Fibonacci-Zahlen**: Dabei ist jede Zahl f_n ab $n = 3$ die Summe ihrer zwei Vorgänger:

$$f_n = f_{n-1} + f_{n-2} \quad \text{wobei} \quad f_1 = 0 \quad \text{und} \quad f_2 = 1$$

Das Verhältnis zweier aufeinanderfolgender Fibonacci-Zahlen f_{n+1} / f_n strebt mit n gegen τ . Außerdem erhält man die Fibonacci - Zahlen auch als Näherungen des Kettenbruches von τ . Die Fibonacci-Zahlen charakterisieren z.B. die Blattstellungen an Pflanzen (z.B.[9]). Beide Begriffe (Fibonacci-Zahl und -Kette) gehen auf den großen Mathematiker Leonardo von Pisa zurück, der von 1170 – 1240 lebte. Man nannte ihn auch Fibonacci, d.h. Sohn des Bonaccio. Die Fibonacci - Zahlen führte er mit dem sogenannten Kaninchenproblem ein [12].

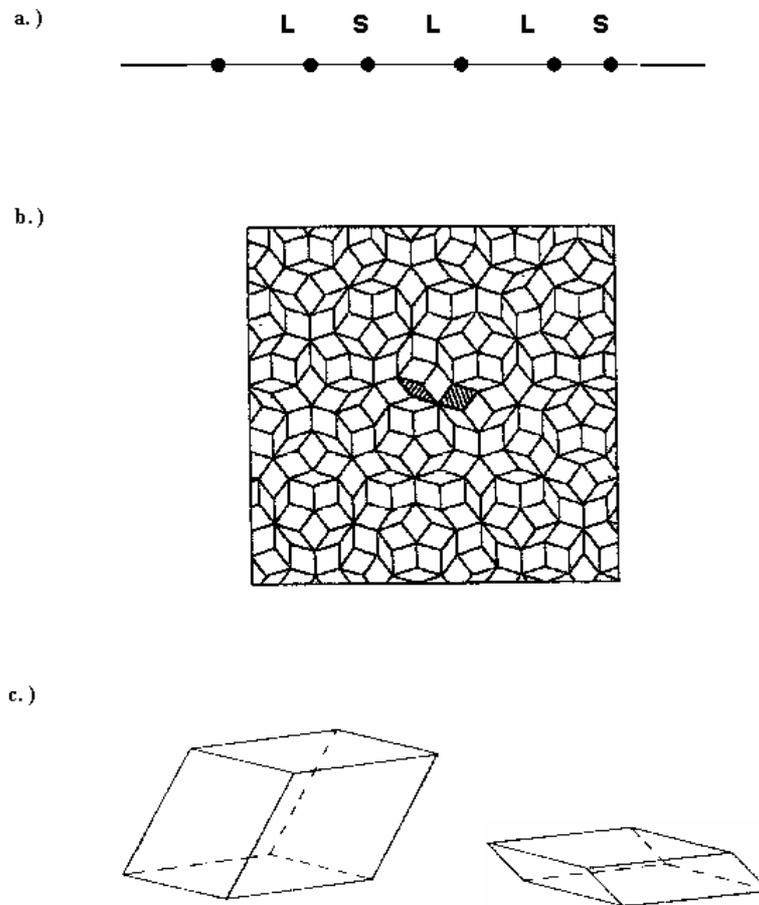


Abb.7: Fibonacci-Kette (n = 5), zweidimensionales Penrosemuster und die zwei Bausteine (Rhomboeder) eines dreidimensionalen quasiperiodischen Gitters

Eine wichtige Eigenschaft der Fibonaccikette ist ihre **Selbstähnlichkeit bzw. Skaleninvarianz** (Deflation und Inflation der Kette). Sie ergibt sich aus folgenden mathematischen Eigenschaften der Zahl τ und hängt direkt mit der Definition des Goldenen Schnittes zusammen:

$$\tau^2 = \tau + 1 \quad \text{und} \quad \tau^{-1} = \tau - 1$$

Betrachtet man z.B. die Deflation einer Kette aus drei Segmenten (hierbei möge $L = \tau$ und $S = 1$ betragen, s. Abb.8), so kann man bei fester Kettenlänge die Ersetzung

$$L \Rightarrow L'S' \quad \text{und} \quad S \Rightarrow L'$$

durchführen. Nun besitzt das neue L' -Segment die Länge 1 und S' die Länge $\tau - 1 \equiv 1/\tau = 0.618\dots$. Das heißt, beide ursprünglichen Längen (τ und 1) wurden mit $1/\tau$ multipliziert. Dabei bleibt das Ver-

hältnis τ natürlich erhalten. Der nächste Deflationsschritt wäre dann die Multiplikation mit $1/\tau^2$ ($L = \tau$ und $S = 1$; $L' = 1$ und $S' = 1/\tau$; $L'' = 1/\tau$ und $S'' = 1/\tau^2$ usw.). Somit ist eine immer feinere Teilung (Skalierung) der Kette möglich.

Natürlich existiert auch der umgekehrte Prozess (Inflation):

$$L \Rightarrow S' \quad \text{und} \quad LS \Rightarrow L'$$

Hier tritt eine Multiplikation mit τ auf, und die Beziehung $\tau^2 = \tau + 1$ spielt eine Rolle.

$$(L = \tau \text{ und } S = 1, L' = \tau + 1 = \tau^2 \text{ und } S' = \tau, \dots\dots)$$

Ein weiteres Beispiel für skaleninvarianten Verhalten ist die berühmte Mandelbrotmenge.

Neben dieser Eigenschaft der Selbstähnlichkeit ist die Fibonacci-Kette durch eine weitere Eigentümlichkeit gekennzeichnet: Man kann diese Kette als **Projektion eines zweidimensionalen periodischen Gitters** erhalten (s. Abb.9)

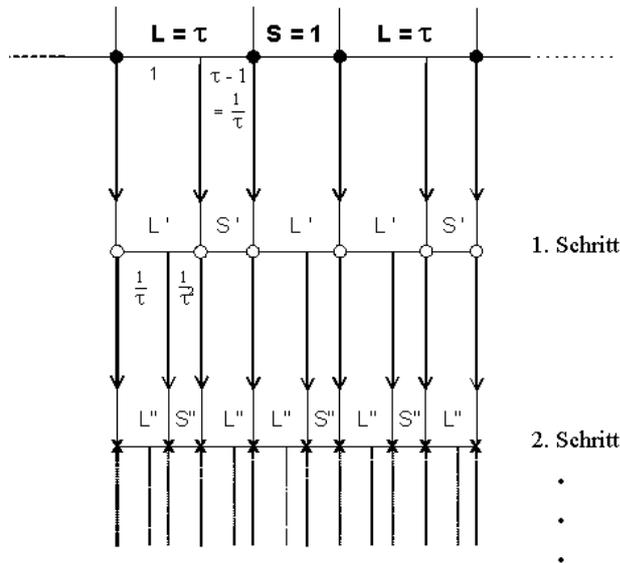


Abb.8: Deflation der Fibonacci-Kette

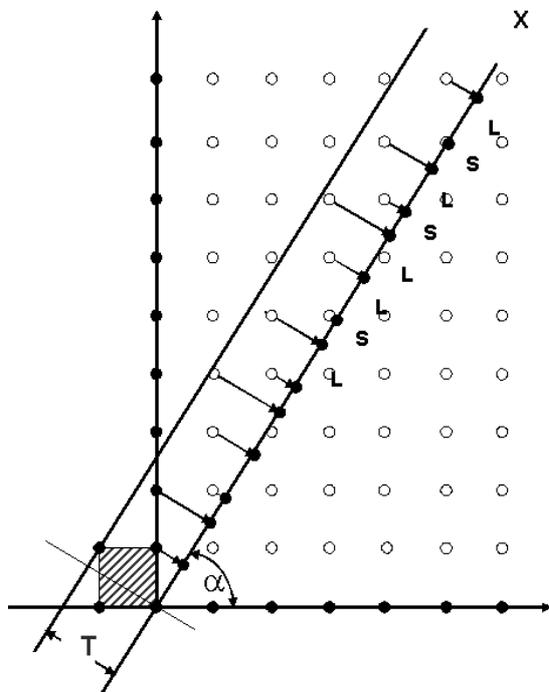


Abb.9: Projektionsmethode (Zeichnung nach [13])

Legt man durch den Nullpunkt einer zweidimensionalen periodischen Struktur eine Gerade X mit dem Anstieg τ ($\tau = \tan \alpha$) und projiziert alle in einem Streifen der Breite T liegenden Gitterpunkte auf diese Gerade, so erhält man auch auf diese Weise die quasiperiodische Fibonacci-Kette. (Die Breite T wird durch die Größe der periodischen Elementarzelle bestimmt).

Dieses Beispiel demonstriert anschaulich einen allgemeinen Sachverhalt über die höherdimensionale periodische Entsprechung der Quasikristalle: In unserem Fall erhält man mittels Projektion aus einem periodischen zweidimensionalen „Original“ ein eindimensionales quasiperiodisches Gitter (Fibonacci-Kette). Allgemein bedeutet das, dass einem quasiperiodischen Gitter ein periodisches Gitter in einem höherdimensionalen Raum entspricht. So gehören zu dreidimensionalen Quasikristallen sechsdimensionale periodische Strukturen. Diese beiden Eigenschaften der Fibonacci - Kette (Selbstähnlichkeit und höherdimensionale periodische Entsprechung) spiegeln sich signifikant in ihrem Beugungsverhalten wider.

3.2 Simulation und direkte Berechnung der Beugungseffekte

Wie schon erwähnt, besteht eine einfache und auch anschauliche Möglichkeit, das Beugungsverhalten von Quasikristallen zu studieren darin, die Interferenzbildung an einer Schichtfolge mit den Abständen der Fibonacci-Kette zu simulieren. Es ist auch möglich, sich den atomaren Aufbau der zwei- und dreidimensionalen Quasikristalle aus mehr oder weniger „buckligen“ Schichten vorzustellen, deren Anordnung durch eine Fibonacci-Sequenz bestimmt wird. Diese Schichten verhalten sich zueinander nicht translationssymmetrisch, d.h. man kann die Schichten nicht deckungsgleich aufeinander abbilden [7,8].

Betrachten wir nun die Beugung an einer Ebenenfolge, die durch das Gesetz der Fibonacci-Kette bestimmt wird (Abb.9). Eine eventuell vorhandene Struktur der Schichten soll keine Rolle spielen.

Abb.11 zeigt das simulierte Reflexsystem. Sofort fällt, im Gegensatz zum periodischen Fall, die hohe Reflexdichte auf. Im Prinzip gibt es keinen leeren Raum mehr zwischen den Linien. Dass man dennoch einzelne Reflexe gut voneinander unterscheiden kann, liegt allein an ihrer sehr unterschiedlichen Intensität (Derartige Spektren erhielt man auch im „echten“ Röntgenbeugungsexperiment an nach dem Fibonacci-Prinzip angeordneten MBE-Schichten ²⁾ (z.B.[14])).

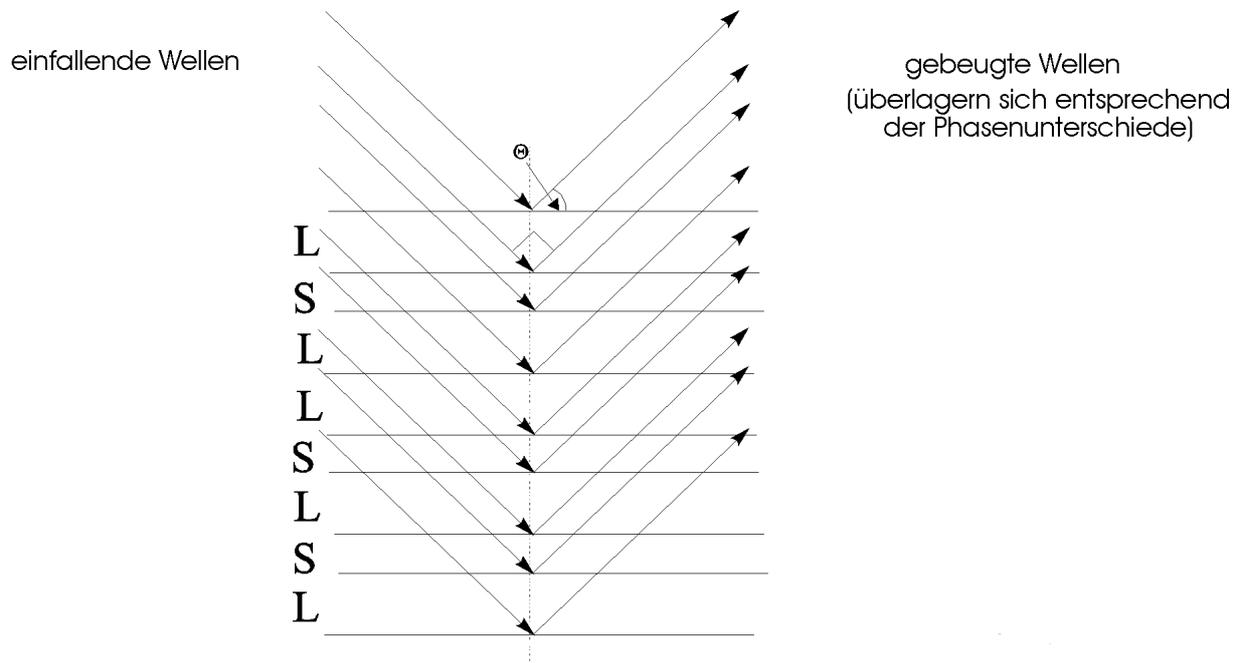


Abb.10: Schema der Reflexüberlagerung an einer Fibonacci-Kette

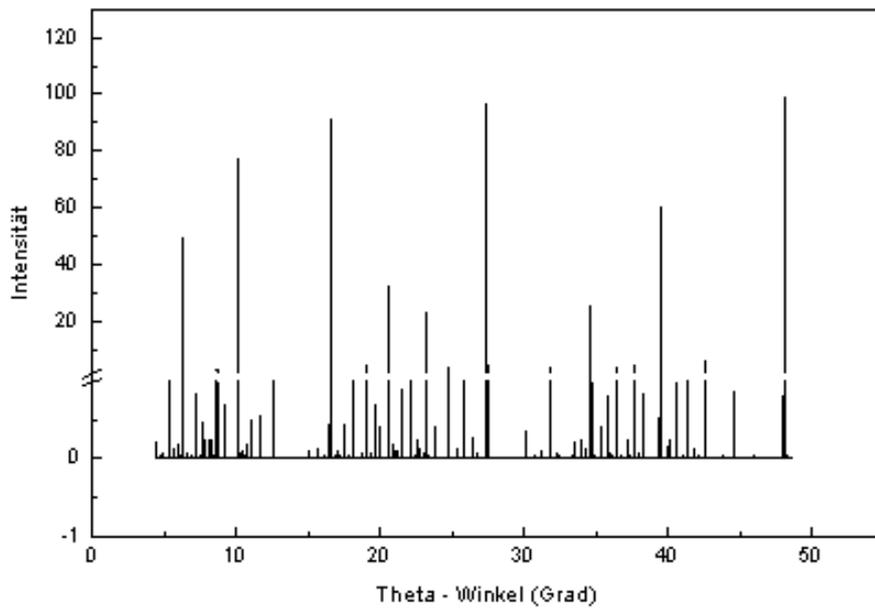


Abb.11: Beugungsspektrum einer Fibonacci-Kette ($S=1, L=\tau, \lambda=0.3$)

Neben der Simulation ist auch hier, wie im periodischen Fall, eine Berechnung der Intensität der Reflexe (mit den Indizes „mn“) mit Hilfe der Struk-

turamplitude möglich. Diese ergibt sich für die Fibonaccikette zu [7]:

$$\mathbf{F}_{mn} = \frac{\sin [\pi S(\tau m - n) / \bar{d} \tau]}{[\pi S(\tau m - n) / \bar{d} \tau]} \cdot \exp \{[i\pi (\tau - 2)(m\tau - n)] / (\tau + 2)\} \quad (2)$$

$$\text{wobei } \mathbf{I}_{mn} \sim |\mathbf{F}_{mn}|^2 ,$$

\bar{d} stellt den sogenannten mittleren Abstand in der Fibonacci-Kette dar und die Intensität \mathbf{I}_{mn} des Reflexes ist proportional zum Betragsquadrat von \mathbf{F}_{mn} . Da in einer Fibonacci-Kette die L-Elemente τ -mal häufiger vorkommen als die S-Elemente (z.B. darf L nebeneinander stehen, S aber nicht), ergibt sich der mittlere Abstand in der Kette zu

$$\bar{d} = (S + \tau L) / (1 + \tau) \approx 1.382 S \quad (3)$$

Reflexe sind für alle ganzen Zahlen (m, n) erlaubt. Es fällt auf, dass hier zwei Indizes, m und n, auftreten, obwohl wir ein eindimensionales Problem haben. In diesem Fakt spiegelt sich die Tatsache wider, dass zum einen zwei Abstände vorliegen und dass man zum anderen die Fibonacci-Kette als Projektion eines zweidimensionalen periodischen Gitters erhalten kann.

Starke Reflexe treten dann auf, wenn $(\tau m - n)$ klein ist, also wenn n/m in der Nähe von τ liegt. Dies ist bei benachbarten Fibonacci-Zahlen der Fall: (1,1), (2,1), (3,2), (5,3),.....

Tab.1 zeigt die mittels (2) für eine Reihe von Reflexen (m, n) berechneten Intensitäten. Außerdem sind auch die durch Simulation erhaltenen Intensitäten angegeben. Es lässt sich weiter zeigen (reziprokes Gitter), dass man den einzelnen Reflexen d-Werte zuordnen kann, die Elemente der (de- bzw. inflatierten) Fibonacci-Kette darstellen.

Entnimmt man nun aus der Simulation die Braggwinkel θ_B , so kann man mit der Bragg-Gleichung

$$\Delta\lambda = n\lambda = 2d \sin\theta_B$$

die tatsächlichen Phasenverschiebungen $\Delta\lambda = n\lambda$ berechnen. Die d-Werte der Fibonacci-Kette sind bekannt (Abb.12).

Tabelle 2 zeigt nun am Beispiel ausgewählter Reflexe, dass im Fall der Fibonacci-Kette überhaupt

Reflexindizes (mn)	Intensität (ber.)	Intensität (sim.)
35	100	100
23	96	98
12	93	92
46	88	87
47	85	84
11	79	78
24	68	68
34	62	61
01	50	50
22	34	32
13	23	23
10	11	11

Tab.1: Berechnete und simulierte Intensitäten einer Reihe starker Reflexe. Einige ausgewählte Braggwinkel findet man in Tab.2

keine Phasenverschiebungen $\Delta\lambda$ auftreten, die durch ganzzahlige Vielfache von λ beschrieben werden können, d.h. n ist hier keine ganze Zahl mehr. Dies steht völlig im Gegensatz zu den periodischen Strukturen. Allerdings stellen sich bei den intensiven Reflexen solche Winkel ein, für die die n-Werte sowohl für die S- als auch für die L-Abstände dicht bei ganzen Zahlen liegen (dabei jeweils von der „anderen“ Seite). Für Intensitäten größer als 50 sind diese benachbarten Zahlen 1, 2, 3, 5, 8 wiederum Fibonacci-Zahlen. Mit abneh-

mender Intensität der Reflexe nimmt die Abweichung von den ganzen Zahlen zu. Die höhere Reflexdichte hängt eben auch damit zusammen, dass

im „erlaubten“ Winkelbereich natürlich mehr gebrochene als ganze Zahlen vorkommen.

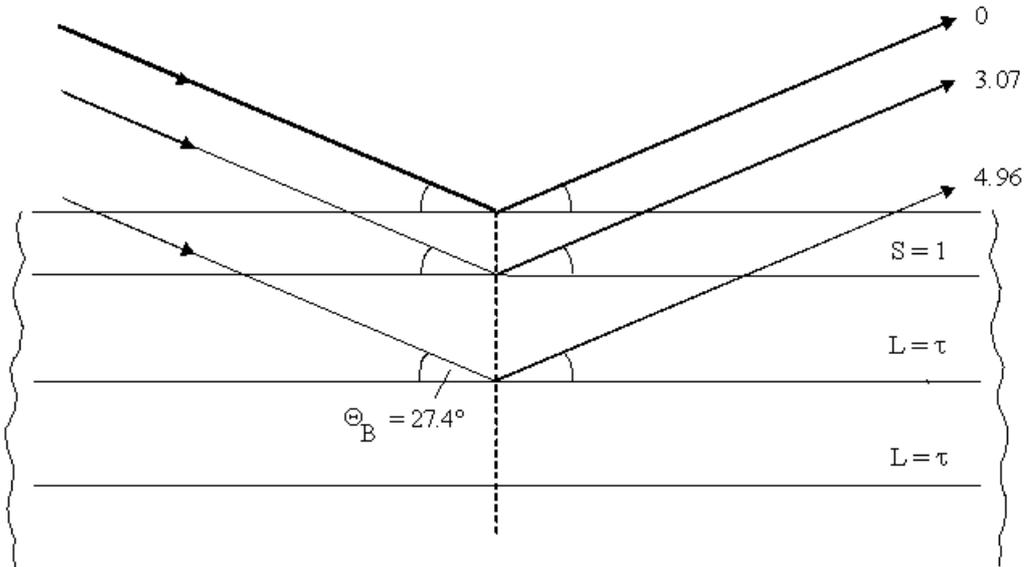


Abb.12: Schematische Beugung an den zwei Gliedern der Fibonacci – Kette für den Reflex „23“ ($\lambda = 0.3$).

I	nm	θ_B (°)	n	
			S = 1	(L = τ)
100	35	48.08	4.96	(8.025)
98	23	27.4	3.07	(4.96)
92	12	16.5	1.89	(3.07)
78	11	10.14	1.17	(1.89)
50	01	6.23	0.72	(1.17)
23	13	23.12	2.62	(4.24)
.....				
06	25	42.6	4.51	(7.3)

Tab.2: Phasenverschiebung **n** (in λ -Einheiten), berechnet für die per Simulation erhaltenen Braggwinkel unterschiedlicher Reflexe.



	L	S	L	L	S	L	S	L
n (I = 98)	4.96	8.03	12.99	17.95	21.02	25.98	29.05	34.01
n (I = 23)	4.24	6.86	11.10	15.34	17.96	22.20	24.82	29.06

Tab.3: Abhängigkeit der aufsummierten Phasenverschiebung **n** von der Länge der Fibonacci-Kette, gegeben für den starken Reflex „23“ (I=98) und den schwächeren „13“ (I=23).

Tabelle 3 zeigt, wie sich bei Berücksichtigung einer wachsenden Zahl von Kettengliedern die resultierenden **n**-Werte verhalten. Die absoluten Abweichungen von ganzen Zahlen ändern sich kaum.

Somit ergibt sich, dass der „Verzicht“ auf die Translationsymmetrie mit einer nur noch näherungsweise Erfüllung des Bragg-Gesetzes verbunden ist. Aber auch unter diesen Bedingungen kommt es zum Auftreten scharfer Beugungsreflexe. Es zeigt sich, dass die Existenz einer Translationsymmetrie keine unbedingte Voraussetzung für das Auftreten scharfer Reflexe ist, sondern den Charakter eines hinreichenden Kriteriums trägt.

4. Schlussbemerkung

Bis zur Entdeckung der Quasikristalle und der Erklärung ihres Beugungsverhaltens wurden Kristalle über ihre Translationssymmetrie definiert. Man sah sich aber nun gezwungen, die Kristalldefinition zu erweitern, um die Quasikristalle ebenfalls in die Kristallfamilie aufnehmen zu können. (Man kann natürlich die Translationssymmetrie „bewahren“, indem man das unanschaulichere Bild der höherdimensionalen Räume einbezieht. Allerdings spielt sich der physikalische Prozess der Röntgenbeugung in dem uns gewohnten Raum-Zeit-Kontinuum ab). Als Kristalle könnte man nun fortan alle Festkörper bezeichnen, die bei einer geeigneten Bestrahlung scharfe Braggreflexe liefern. Diese Definition wäre so zu deuten, dass alle Festkörper, die eine irgendwie geartete Fernordnung aufweisen, als Kristalle bezeichnet werden. Diese Fernordnung schließt die Translationssymmetrie herkömmlicher Kristalle als auch die Fernordnung, die für Quasi-

kristalle typisch ist, mit ein. Vielleicht tauchen ja eines Tages Festkörper auf,

deren Struktur durch eine weitere Art Fernordnung bestimmt wird. Diese müssten dann - wie die konventionellen Kristalle und Quasikristalle - die typischen Beugungsmuster mit scharfen Interferenzmaxima aufweisen.

5. Literatur

- [1] Sommer, W., Grebe-Ellis, J., Vogt, J.: *Zur Beugung*“ *Phydid* 2/3(2004) 67-86
- [2] Stephens, P. W.; Goldman, A. I.: *Spektrum der Wissenschaft* 6 (1991) 48
- [3] Brenner, S.: Programm „BRAGG“ Universität Leipzig 1994
- [4] Kraus, W., Nolze, G.: Programm „Powder Cell 2.1“ (<http://www.bam.de/de/service/publikationen/software.htm>)
- [5] Penrose, R.: *Bull. Inst. Math. Appl.* 10 (1974) 266
- [6] Ardenne, M. v.; Musiol, G.; Reball, S.: *Effekte der Physik*, Harri Deutsch Verlag 1997, S.136 -138
- [7] Janot, C.: *Quasicrystals*, Clarendon Press Oxford 1992, S.24-25, 171
- [8] Schetelich, Ch.; Geist, V.: *phys. stat. sol. (a)* 136 (1993), 284
- [9] Hargittai, I. u. M.: *Symmetrie*, Rowohlt 1998, S.207
- [10] Dudley, W.: *Die Macht der Zahl*, Birkhäuser 1999, S. 269 ff
- [11] Gronemeier, K.-H.; Kranz, O.: *Physik in der Schule* 37(1999), Heft 4, 277
- [12] Beutelspacher, A.; Petri, B.: *Der goldene Schnitt*, Spektrum Akademischer Verlag 1996, S.105
- [13] Urban, *Phys. Bl.* 42 (1986), 11, 373
- [14] Mikulik, P.; Holy, V.; Kubena, J.; Ploog, K.: *Acta Crystallography A* 51 (1995) 825

Fußnoten:

- 1) Roger Penrose: Oxforder Mathematiker und Physiker. Entwickelte schon Jahre vor der Entdeckung der Quasikristalle das sogenannte Penrosemuster, das eine nichtperiodische Ausfüllung einer Ebene mit zwei Arten von Rhomben darstellt. Dieses Muster besitzt eine lokale fünfzählige Drehsymmetrie [2]. R.Penrose war mit M.Escher befreundet. Roger Penrose ist auch durch seine Arbeiten zu astrophysikalischen Problemen bekannt. So arbeitete er mit Stephen Hawkins über kosmische Singularitäten. Weiterhin beschäftigt er sich mit der Vereinigung von Quantenmechanik und Gravitationstheorie (Quantengravitation).
- 2) „Molecular Beam Epitaxie“, dabei werden dünne Schichten einer Substanz auf einem Substrat abgeschieden. Die abzuscheidenden Atome oder Atomgruppen werden durch organische Moleküle zum Anlagerungsort transportiert.