

# АТОМНАЯ ДИНАМИКА ДЕКАГОНАЛЬНОГО КВАЗИКРИСТАЛЛА $d$ -AlNiFe

*П. П. Паршин*<sup>a</sup>, *М. Г. Землянов*<sup>a\*</sup>, *Г. Х. Панова*<sup>a</sup>,  
*А. А. Шиков*<sup>a</sup>, *Р. А. Бранд*<sup>b</sup>, *Б. Грушко*<sup>c\*\*</sup>

<sup>a</sup>Российский научный центр «Курчатовский институт»  
123182, Москва, Россия

<sup>b</sup>Duisburg University  
D-47048, Duisburg, Germany

<sup>c</sup>Institute of Solid-State Research, Research center Julich  
D-52425, Julich, Germany

Поступила в редакцию 2 июня 2009 г.

С помощью метода изотопического контраста при неупругом рассеянии нейтронов экспериментально исследована атомная динамика декагонального квазикристалла  $Al_{71.3}Ni_{24}Fe_{4.7}$ . В результате непосредственно из экспериментальных данных, без привлечения модельных представлений, восстановлены парциальные спектры колебаний атомов Ni, Fe и Al и спектр тепловых колебаний сплава. Определены граничные энергии и положения основных особенностей спектров. Установлено, что в исследованном квазикристалле атомы никеля в среднем связаны слабее, чем атомы железа, а спектр колебаний атомов алюминия заметно жестче спектра чистого металла. Проводится сравнение полученных результатов для декагонального  $d$ -AlNiFe с ранее опубликованными данными для икосаэдрического квазикристалла  $i$ -AlCuFe.

PACS: 61.05.fg, 61.44.Br, 63.20.dd

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Со времени открытия в 1984 г. сплавов с некристаллической точечной симметрией [1], за которыми закрепилось название квазикристаллы, опубликовано огромное количество работ, посвященных исследованию необычной структуры и уникальных физико-химических свойств этих соединений. Интерес к таким исследованиям не ослабевает и диктуется, с одной стороны, широкими перспективами возможных практических применений квазикристаллических сплавов, а с другой стороны — желанием на микроскопическом уровне понять причины возникновения и условия стабильности квазикристаллического состояния. К настоящему времени наиболее полно исследованы структура и свойства квазикристаллических сплавов, принадлежащих к двум структур-

ным классам. Это, во-первых, квазикристаллы с икосаэдрической симметрией, основной отличительной особенностью которых является наличие оси симметрии 5-го порядка и в которых во всех трех пространственных измерениях реализуется квазипериодический дальний порядок [2]. Во-вторых, это декагональные квазикристаллы (с осью симметрии десятого порядка), структура которых устроена так, что вдоль оси десятого порядка имеется нормальная пространственная периодичность, как в обычном кристалле, а в плоскостях, перпендикулярных этой оси, реализуется двумерный квазипериодический порядок в расположении атомов [2]. Фактически эти системы демонстрируют смешанный периодический и квазипериодический способ пространственного расположения атомов с дальним порядком.

Вполне естественно ожидать, что необычное строение квазикристаллов обусловлено особенностями силового межатомного взаимодействия,

\*E-mail: zeml@issph.kiae.ru

\*\*B. Grushko

отличающими их от кристаллических металлических сплавов. Одним из способов выявления и изучения этих особенностей является экспериментальное исследование атомной динамики квазикристаллических сплавов. Наиболее полную и прямую информацию об атомной динамике твердых тел можно получить из исследований спектров тепловых колебаний, полученных методами нейтронной спектроскопии.

В стандартном эксперименте по неупругому рассеянию нейтронов квазикристаллами информация о спектре тепловых колебаний может быть получена только на уровне так называемого нейтронно-взвешенного спектра колебаний  $G(E)$ , который качественно передает основные особенности энергетического распределения тепловых колебаний, но не может претендовать на его количественное описание. Кроме того, из спектра  $G(E)$  невозможно извлечь информацию о колебаниях атомов различных химических элементов, которая исключительно важна для выяснения особенностей силового межатомного взаимодействия. Таким образом, получение детальной информации о спектрах колебаний как сплава в целом, так и атомов химических элементов, требует применения нестандартных подходов.

В работах [3, 4] были опубликованы результаты такого исследования атомной динамики икосаэдрического квазикристалла  $i$ -AlCuFe. Применение техники изотопического контраста в неупругом рассеянии нейтронов позволило экспериментально, без привлечения каких-либо модельных представлений, получить парциальные спектры тепловых колебаний атомов алюминия, меди и железа, а также восстановить спектр тепловых возбуждений соединения в целом. На основе анализа этих данных была предложена физическая модель строения исследованного квазикристалла.

В данной работе выполнено экспериментальное исследование атомной динамики (на уровне парциальных спектров колебаний атомов химических элементов) сплава с составом  $Al_{71.3}Ni_{24}Fe_{4.7}$ , типичного представителя семейства декагональных квазикристаллов.

## 2. ЭКСПЕРИМЕНТ И ОБРАБОТКА ДАННЫХ

Для получения информации о парциальных спектрах тепловых колебаний атомов Al, Ni и Fe в декагональном квазикристалле использован метод изото-

пического контраста при неупругом рассеянии нейтронов [5]. Идея метода [6] основана на том, что сечения рассеяния нейтронов могут заметно различаться для разных изотопов одного и того же химического элемента. В этом случае возникает возможность выделить вклад данного химического элемента в экспериментально измеряемую функцию рассеяния нейтронов и таким образом получить информацию о парциальном спектральном распределении тепловых колебаний.

Из трех химических элементов, входящих в состав исследованного квазикристалла  $Al_{71.3}Ni_{24}Fe_{4.7}$ , железо и никель имеют изотопы с заметным различием сечений рассеяния нейтронов [7]:  $^{nat}Fe = 11.62$  б и  $^{57}Fe = 1.0$  б;  $^{nat}Ni = 18.5$  б и  $^{60}Ni = 0.99$  б. В связи с этим были синтезированы и использовались в эксперименте образцы с различными изотопными составами: А — образец с естественными смесями изотопов всех трех элементов, В — образец, синтезированный с изотопом  $^{60}Ni$ , С — образец, синтезированный с изотопом  $^{57}Fe$ .

Поскольку декагональная фаза в системе Al–Ni–Fe стабильна в узкой области составов и температур, для получения однофазного образца охлажденный сплав необходимо подвергнуть отжигу при температуре, отвечающей области стабильности декагональной фазы при данном составе с последующей закалкой в воду. Полученная таким образом декагональная структура стабильна при комнатной температуре. Условия синтеза, оптимальный состав образцов и процедура отжига были отработаны первоначально на материале с естественными смесями изотопов всех химических элементов, а затем те же условия были воспроизведены при синтезе изотопически обогащенных образцов. Исходные сплавы были получены методом индукционной плавки во взвешенном состоянии в атмосфере аргона в водоохлаждаемом медном тигле. Затем образцы отжигались в атмосфере аргона при  $T = 870^\circ C$  в течение 86 ч. Отожженные образцы были аттестованы методами рентгеновской порошковой дифракции и сканирующей электронной микроскопии. Оба метода подтвердили, что все синтезированные образцы однофазны, а их структура соответствует декагональному квазикристаллу.

Измерения неупругого рассеяния нейтронов проводились при комнатной температуре на спектрометре по времени пролета IN6 в институте Лауэ–Ланжевена. Кроме спектров нейтронов, рассеянных указанными выше образцами, были измерены спектры нейтронов, рассеянных стандартным образцом ванадия и контейнером образца,

сделанным из алюминия. Взаимная калибровка эффективности нейтронных детекторов, установленных под различными углами рассеяния, проводилась по интенсивности упругого некогерентного рассеяния нейтронов ванадием. При обработке измеренных спектров учитывалась энергетическая зависимость вероятности регистрации нейтрона детектором, а также ослабление пучка нейтронов за счет поглощения и рассеяния в образце. Дальнейшая обработка экспериментальных данных проводилась в некогерентном приближении [8], а необходимое для этого усреднение по фазовому пространству достигалось суммированием спектров, измеренных под разными углами рассеяния, с весовым множителем, равным синусу угла рассеяния. Энергия нейтронов в первичном пучке составляла 4.82 мэВ, что в сочетании с широким диапазоном углов рассеяния (10°–115°) обеспечивало достаточное усреднение данных по объему фазового пространства, даже при малых передачах энергии.

После учета всех экспериментальных поправок и усреднения по фазовому пространству восстанавливался нейтроновзвешенный спектр колебаний многоатомного соединения  $G(E)$ , который в однофононном приближении можно представить [9] как

$$G(E) = \sum_i \frac{c_i \sigma_i}{M_i} g_i(E) e^{-2W_i}. \quad (1)$$

Здесь  $c_i$  — атомная концентрация,  $\sigma_i$  — полное сечение рассеяния нейтронов,  $M_i$  — атомная масса,  $g_i(E)$  — парциальный спектр тепловых колебаний,  $2W_i = \langle u_i^2 \rangle Q^2$  — парциальный тепловой фактор Дебая–Уоллера,  $\langle u_i^2 \rangle$  — средний квадрат тепловых смещений для атомов  $i$ -го химического элемента, а  $Q^2$  — квадрат переданного в акте рассеяния импульса. Спектр тепловых колебаний соединения (фононный спектр) можно представить как

$$g(E) = \sum_i c_i g_i(E). \quad (2)$$

Суммирование во всех случаях проводится по всем атомам формульной единицы. Из соотношений (1) и (2) следует, что функция  $G(E)$  отличается от  $g(E)$  специфическим «нейтронным» множителем  $p_i = e^{-2W_i} c_i \sigma_i / M_i$ . Именно наличие этого множителя, с одной стороны, не позволяет восстановить истинный фононный спектр из данных по неупругому рассеянию нейтронов на многоатомном веществе, а с другой — открывает принципиальную возможность применения метода изотопического контраста для определения парциальных спектров колебаний атомов различных химических элементов.

Для учета фактора Дебая–Уоллера и вклада многофононных процессов рассеяния применялась специально разработанная итерационная процедура. На первой итерации предполагалось, что вклад процессов многофононного рассеяния пренебрежимо мал (однофононное приближение).

Парциальный спектр колебаний  $g_i(E)$  определен так, что площадь под ним равна единице [9]. Кроме того, если в первом приближении считать, что парциальные тепловые факторы невелики и не зависят от энергии, так что  $e^{-2W_i} \sim 1$ , то

$$\int G(E) dE = \sum_i \frac{c_i \sigma_i}{M_i}. \quad (3)$$

Соотношение (3) дает условие взаимной нормировки функций  $G(E)$ , полученных из данных по измерению спектров неупругого рассеяния нейтронов на образцах с разными изотопными составами. Эта нормировка, которую можно рассматривать как рассеивающую способность формульной единицы вещества в неупругом процессе, использовалась при обработке экспериментальных спектров на первой итерации.

Парциальные спектры колебаний атомов никеля, железа и алюминия в первом приближении были получены как разности функций  $G(E)$ , экспериментально измеренных для образцов с разными изотопными составами. При этом предполагалось, что сами парциальные спектры колебаний  $g_i(E)$  не зависят от изотопного состава образцов, что, по-видимому, оправдано, поскольку массы используемых изотопов различаются не более чем на несколько процентов.

По полученным в первом приближении парциальным спектрам колебаний  $g_i(E)$  в итерационной процедуре вычислялись величины средних тепловых смещений  $\langle u_i^2 \rangle$ , парциальные тепловые факторы  $W_i$  и парциальные вклады многофононного рассеяния нейтронов в функцию  $G(E)$ . При этом ограничались двух- и трехфононными процессами, поскольку при комнатной температуре вклад четырехфононных процессов заметно меньше статистической ошибки измерений.

Парциальные многофононные вклады от рассеяния нейтронов на атомах алюминия, никеля и железа, вычисленные на основе полученных в первом приближении  $g_i(E)$ , вычитались из измеренных экспериментально функций  $G(E)$  с учетом изотопного состава исследованных образцов. Далее весь процесс, начиная с нормировки функций  $G(E)$ , повторялся во второй итерации. Различие заключалось только в том, что теперь, поскольку на первой итерации для атомов всех химических элементов бы-

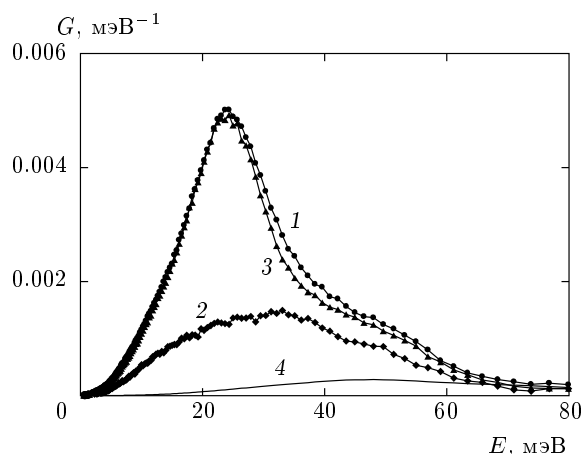


Рис. 1. Однофононные нейтронвзвешенные спектры тепловых колебаний декагонального квазикристалла  $d\text{-AlNiFe}$ , экспериментально измеренные на образцах с различными изотопными составами: 1 — образец А с естественными смесями изотопов всех химических элементов; 2 — образец В с изотопом  $^{60}\text{Ni}$ ; 3 — образец С с изотопом  $^{57}\text{Fe}$ ; 4 — вклад процессов многофононного рассеяния в функцию  $G(E)$  для образца А

ли найдены парциальные спектры колебаний  $g_i(E)$  и тепловые факторы  $W_i$ , для взаимной нормировки функций  $G(E)$  вместо формулы (3) использовалось более корректное выражение:

$$\int G(E) dE = \sum_i \frac{c_i \sigma_i}{M_i} \int g_i(E) e^{-2W_i} dE. \quad (4)$$

Различие величин многофононного вклада, полученных на второй и третьей итерациях, было не велико по сравнению со статистической погрешностью измерений, поэтому процесс вычисления однофононных  $G(E)$  был ограничен тремя итерациями. В результате выполнения описанной выше обработки для каждого из трех образцов  $d\text{-AlNiFe}$  были получены однофононные нейтронвзвешенные спектры колебаний  $G(E)$  (рис. 1). Для сравнения на рисунке показан вклад многофононного рассеяния нейтронов для образца с естественными смесями изотопов всех трех элементов.

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Спектры  $G(E)$ , представленные на рис. 1, существенно отличаются друг от друга, хотя отражают атомную динамику одного и того же вещества — декагонального квазикристалла с составом  $\text{Al}_{71.3}\text{Ni}_{24}\text{Fe}_{4.7}$ . Наблюдаемые различия спек-

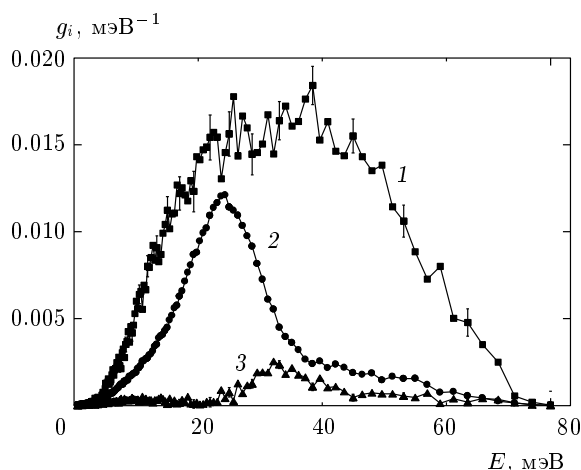


Рис. 2. Парциальные спектры тепловых колебаний атомов в декагональном квазикристалле  $d\text{-AlNiFe}$ : 1 — спектр алюминия; 2 — спектр никеля; 3 — спектр железа

тров обусловлены разным изотопным составом образцов и демонстрируют проявление изотопического контраста в неупругом рассеянии нейтронов. Действительно, образцы В и С содержат, соответственно, слабо рассеивающие изотопы никеля и железа, поэтому и спектры, измеренные на этих образцах, располагаются ниже спектра, полученного на образце А.

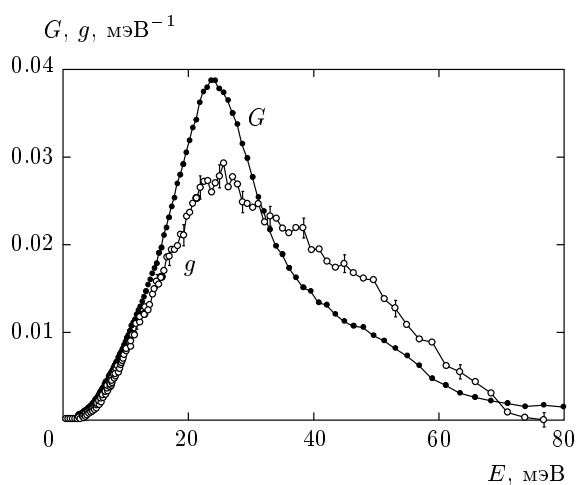
Парциальные спектры колебаний атомов никеля, железа и алюминия в декагональном  $\text{Al}_{71.3}\text{Ni}_{24}\text{Fe}_{4.7}$  (рис. 2) были получены по описанной выше процедуре как разности соответствующих функций  $G(E)$ . Площади под спектрами нормированы на атомную концентрацию соответствующего химического элемента. По парциальным спектрам рассчитаны интегральные параметры тепловых колебаний атомов различных химических элементов (табл. 1).

На основе парциальных спектров колебаний атомов всех химических элементов в соответствии с соотношением (2) был восстановлен спектр тепловых колебаний квазикристалла (фонный спектр)  $d\text{-AlNiFe}$  (рис. 3). Для сравнения на этом же рисунке приведен однофононный нейтронвзвешенный спектр, измеренный для образца А (площади под спектрами нормированы на единицу). Видно, что, как это и следует из соотношений (1), (2), нейтронвзвешенный спектр  $G(E)$  отнюдь не совпадает со спектром тепловых колебаний  $g(E)$  и, следовательно, не может быть использован при расчетах термодинамических и кинетических свойств сплава.

**Таблица 1.** Интегральные термодинамические параметры для декагонального квазикристалла  $d\text{-AlNiFe}$

| Атом | $\langle u^2 \rangle, 10^{-3} \text{ \AA}^2$ | $\langle E \rangle, \text{ мэВ}$ | $\langle B \rangle, \text{ Н/м}$ |
|------|--|----------------------------------|----------------------------------|
| Al   | $7.67 \pm 0.13$                              | $35.8 \pm 0.5$                   | $156 \pm 3$                      |
| Ni   | $5.08 \pm 0.05$                              | $28.3 \pm 0.2$                   | $215 \pm 2$                      |
| Fe   | $5.75 \pm 0.25$                              | $37.5 \pm 1.4$                   | $347 \pm 17$                     |

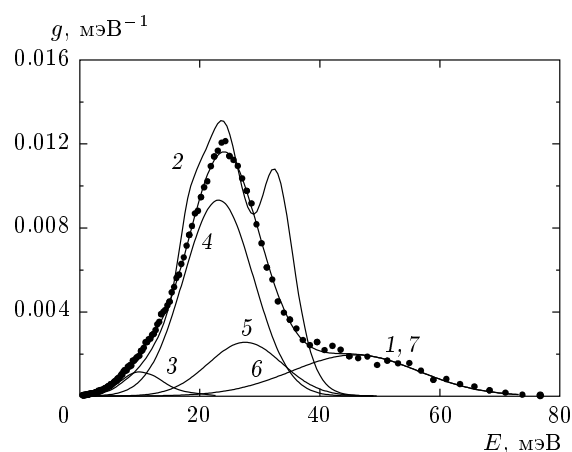
*Примечание.*  $\langle u_i^2 \rangle$  — средний квадрат тепловых смещений атомов при  $T = 300 \text{ К}$ ,  $\langle E \rangle$  — средняя по спектру энергия колебаний,  $\langle B \rangle \sim M \langle E^2 \rangle$  — средняя силовая константа связи.



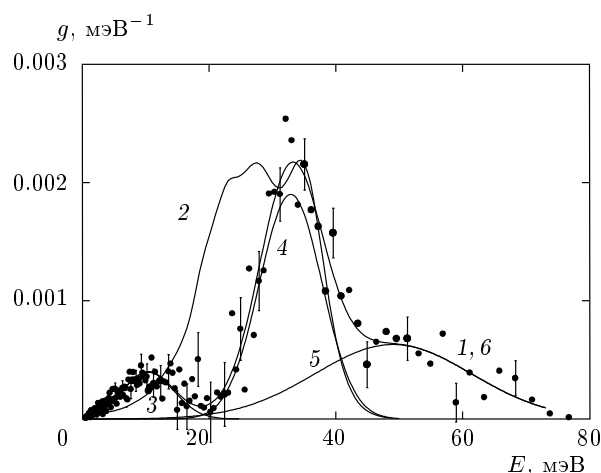
**Рис. 3.** Восстановленный спектр тепловых колебаний  $g(E)$  декагонального квазикристалла  $d\text{-AlNiFe}$ , нейтронно взвешенный спектр тепловых колебаний  $G(E)$  декагонального квазикристалла  $d\text{-AlNiFe}$ , экспериментально измеренный для образца А

Экспериментально полученные парциальные спектры тепловых колебаний атомов всех химических элементов могут служить основой для более адекватного выбора параметров потенциалов межатомного взаимодействия при проведении модельных расчетов [10] структуры и атомной динамики таких сложных соединений, как квазикристаллы.

В декагональном квазикристалле парциальные спектры тепловых колебаний атомов никеля и железа (рис. 4, 5) сосредоточены в основном вблизи энергий соответственно 24 и 33 мэВ и имеют заметные «хвосты» со стороны высоких энергий. Спектр колебаний атомов никеля заметно мягче спектра колебаний атомов железа при практически равных

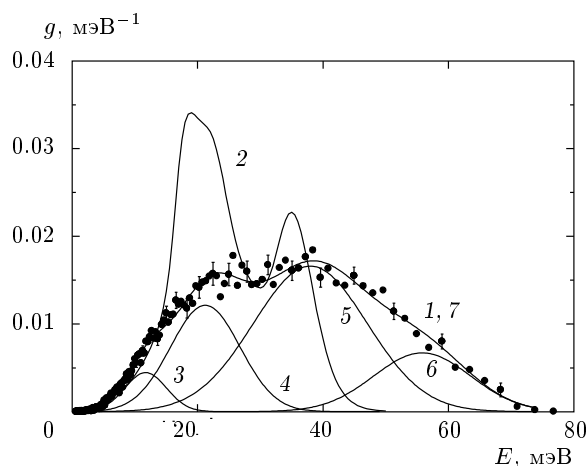


**Рис. 4.** Парциальный спектр тепловых колебаний атомов никеля в декагональном квазикристалле  $d\text{-AlNiFe}$ : 1 — спектр, восстановленный из экспериментальных данных, 2 — фононный спектр ГЦК-никеля (по данным [11]), 3, 4, 5, 6 — функции Гаусса, аппроксимирующие четыре полосы в спектре колебаний атомов никеля, 7 — сумма четырех функций Гаусса



**Рис. 5.** Парциальный спектр тепловых колебаний атомов железа в декагональном квазикристалле  $d\text{-AlNiFe}$ : 1 — спектр, восстановленный из экспериментальных данных, 2 — фононный спектр ОЦК-железа (по данным [12]), 3, 4, 5 — функции Гаусса, аппроксимирующие три полосы в спектре колебаний атомов никеля, 6 — сумма трех функций Гаусса

атомных массах. Из этих наблюдений следует, что в структуре исследованного квазикристалла атомы никеля и железа распределены по большому количеству позиций с различным силовым взаимодей-



**Рис. 6.** Парциальный спектр тепловых колебаний атомов алюминия в декагональном квазикристалле  $d\text{-AlNiFe}$ : 1 — спектр, восстановленный из экспериментальных данных, 2 — фононный спектр ГЦК-алюминия (по данным [13]), 3, 4, 5, 6 — функции Гаусса, аппроксимирующие четыре полосы в спектре колебаний атомов алюминия, 7 — сумма четырех функций Гаусса

ствием. Атомы никеля в структуре квазикристалла в среднем связаны слабее, чем атомы железа (см. табл. 1), следовательно, по крайней мере, часть атомов никеля и железа занимает разные позиции с существенно различающимися силовыми связями. Наличие хвостов, расположенных примерно в одинаковых энергетических диапазонах, позволяет предположить, что другая часть атомов никеля и железа находится в одинаковых позициях, с точки зрения силового межатомного взаимодействия.

На рис. 4–6 приведены также фононные спектры кристаллических никеля, железа и алюминия, полученные путем свертки опубликованных расчетных спектров [11–13] с аппаратной функцией спектрометра IN6.

Полученные для квазикристалла парциальные спектры тепловых колебаний атомов никеля и железа (рис. 4, 5) заметно отличаются от спектров металлических ГЦК-Ni и ОЦК-Fe. Средние по спектрам энергии колебаний атомов этих элементов в квазикристалле выше (см. табл. 1) и, соответственно, в среднем никель и железо связаны в декагональном квазикристалле сильнее, чем в чистых металлах. Парциальный спектр тепловых колебаний атомов Al в декагональном квазикристалле (рис. 6) также существенно отличается от спектра тепловых колебаний ГЦК-алюминия. В частности, граничная энергия спектра колебаний атомов алюминия в квази-

**Таблица 2.** Положения максимумов функций Гаусса, аппроксимирующих парциальные спектры колебаний атомов Al, Ni и Fe в декагональном квазикристалле  $d\text{-AlNiFe}$

| АТОМ | $E_1$ , мэВ      | $E_2$ , мэВ      | $E_3$ , мэВ      | $E_4$ , мэВ    |
|------|------------------|------------------|------------------|----------------|
| Al   | $11.71 \pm 0.05$ | $21.21 \pm 0.04$ | $37.97 \pm 0.06$ | $55.8 \pm 0.1$ |
| Ni   | $10.77 \pm 0.02$ | $23.13 \pm 0.09$ | $27.57 \pm 0.07$ | $45.9 \pm 0.1$ |
| Fe   | $10.4 \pm 0.1$   | —                | $32.9 \pm 0.1$   | $49.0 \pm 0.5$ |

кристалле ( $E_{cut} \approx 70$  мэВ) заметно выше граничной энергии металлического алюминия ( $E_{cut} = 40$  мэВ). Таким образом, в исследованном квазикристалле для атомов алюминия реализуются более жесткие силовые связи, чем это имеет место в кристаллическом алюминии.

В парциальных спектрах тепловых колебаний атомов никеля, железа и алюминия (рис. 4–6) наблюдаются максимумы, расположенные в широком интервале энергий. Каждый из этих спектров, подобно тому, как это сделано в работе [4], был аппроксимирован суперпозицией минимально возможного числа функций Гаусса:

$$A \exp(-(E - E_c)^2/D^2),$$

где  $A$ ,  $E_c$  и  $D$  — подгоночные параметры. Подгонка параметров функций Гаусса (5) проводилась методом наименьших квадратов по критерию  $\chi^2$ .

Результаты такого разделения экспериментально измеренных спектров на спектральные полосы приведены на рис. 4–6, на которых видно, что спектры колебаний никеля и алюминия состоят из четырех полос, а спектр колебаний железа — из трех. Обращает на себя внимание тот факт, что энергетические положения первых двух спектральных полос в парциальных спектрах колебаний атомов никеля и алюминия довольно близки (табл. 2). Близки также и положения широких четвертой полосы в спектре колебаний атомов никеля и третьей полосы в спектре атомов железа (табл. 2).

Целесообразно сравнить эти данные с ранее полученными результатами для икосаэдрического квазикристалла  $i\text{-AlCuFe}$  [4]. Как было установлено для  $i\text{-AlCuFe}$ , положения полос колебаний атомов железа соотносятся с положениями двух полос колебаний алюминия в отношении, близком к корню из обратного отношения масс ( $E_{Fe}/E_{Al} \approx 0.7 \approx \sqrt{M_{Al} - M_{Fe}}$ ). Следовательно, в случае  $i\text{-AlCuFe}$  между атомами алюминия и железа имеется си-

ловая связь, хорошо описываемая простейшей моделью взаимодействия ближайших соседей. В декагональном квазикристалле подобного соотношения энергий колебаний атомов алюминия и железа не наблюдается (табл. 2). Есть и другое различие: в икосаэдрическом квазикристалле энергетические положения четырех спектральных полос в парциальных спектрах колебаний атомов меди и алюминия с хорошей точностью совпадали [4], а в случае декагонального — близки энергии только двух первых полос. Более того, соотношение энергий третьих полос в спектре колебаний никеля ( $E_3 = 27.57$  мэВ) и алюминия ( $E_3 = 37.97$  мэВ)  $E_{Ni}/E_{Al} = 0.73 \sim \sqrt{M_{Al}/M_{Ni}} = 0.68$  близко к корню из соотношения масс этих атомов. Следовательно, можно предположить, что часть атомов никеля, подобно тому, как это имеет место для атомов железа в *i*-AlCuFe, образует жесткую силовую связь с ближайшими атомами алюминия.

Нам неизвестны экспериментальные или расчетные данные об электронном строении декагонального сплава AlNiFe, однако можно предположить, что в этом случае, как и в *i*-AlCuFe, вблизи уровня Ферми имеет место сильное перекрытие *s*-, *p*-состояний электронов алюминия с *d*-состояниями электронов железа. Это приводит к хорошо известному для квазикристаллов эффекту *s,p-d*-гибридизации волновых функций электронов [14]. Часть валентных электронов алюминия уходит для заполнения *d*-зоны железа. Железо при этом выступает как элемент с эффективной отрицательной валентностью и образует жесткую ковалентную связь с алюминием [15]. По своему электронному строению атомы железа и никеля очень схожи между собой и существенно отличаются от атомов меди. Железо и никель имеют одинаковые внешние *4s*-оболочки, а различаются только заселенности внутренних *d*-уровней. Следует ожидать, что и в квазикристалле электронные спектры этих металлов сходны. Косвенным подтверждением этому могут служить экспериментальные данные об электронном строении родственного декагонального квазикристалла *d*-AlNiCo [16], из которых следует, что парциальные распределения электронов в валентной зоне практически одинаковы для *3d-4s*-электронов никеля и *3d-4s*-электронов кобальта. Следовательно, можно ожидать сходного взаимодействия атомов железа и никеля с алюминием. В этом случае часть атомов никеля, наряду с атомами железа, участвует в создании ковалентной связи с алюминием. С этих позиций находит естественное объяснение существенное ужесточение

спектра тепловых колебаний атомов алюминия по сравнению как со спектром кристаллического ГЦК-алюминия [13], так и со спектром колебаний алюминия в икосаэдрическом кристалле [4].

Анализ полученных данных позволяет предположить, что строение декагонального квазикристалла существенно отличается от модели, предложенной для икосаэдрического [4]. Одно различие связано, по-видимому, с тем, что в случае декагонального квазикристалла имеется пространственная периодичность вдоль оси 10-го порядка. Наличие этой периодичности включает дальнее действие межатомных сил по одному пространственному измерению и, следовательно, модель взаимодействия только ближайших соседей вдоль оси 10-го порядка уже не применима. Второе различие заключается в той роли, которую играют атомы никеля. Часть из них, в отличие от меди в *i*-AlCuFe, занимает такие же позиции, как и атомы железа и, судя по всему, наравне с железом активно участвует в усилении жесткого каркаса, составленного из атомов алюминия, никеля и железа. Другая же часть атомов никеля ведет себя подобно меди в *i*-AlCuFe.

Совокупность полученных экспериментальных результатов по парциальным спектрам колебаний атомов никеля, железа и алюминия в декагональном квазикристалле *d*-AlNiFe согласуется с такой физической моделью его строения. Имеется каркас из кластеров, образованных, в основном, атомами алюминия, существенно модифицированный и усиленный жесткими ковалентными связями с атомами железа и частью атомов никеля. Стабильность этой системы (с точки зрения правила Юм-Розери [17]) обеспечивается другой частью атомов никеля, которые отдают свои электроны в зону проводимости и занимают в структуре такие позиции, чтобы оказать минимальное влияние на силовое взаимодействие, сформировавшееся в жестком каркасе Al-Fe-Ni.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Экспериментально, методом изотопического контраста при неупругом рассеянии нейтронов, получены парциальные спектры тепловых колебаний атомов Ni, Fe и Al в декагональном квазикристалле с составом  $Al_{71.3}Ni_{24}Fe_{4.7}$ , а на их основе и спектр тепловых колебаний сплава.

Установлено, что как парциальные спектры тепловых колебаний атомов алюминия, никеля и железа, так и спектр колебаний сплава в целом, заметно жестче соответствующих спектров, ранее из-

меренных для икосаэдрического квазикристалла в системе Al–Cu–Fe [3]. Спектральные распределения тепловых колебаний атомов в декагональном квазикристалле существенно отличаются от фоновых спектров соответствующих металлов. В частности, граничная энергия колебаний атомов алюминия в квазикристалле составляет 70 мэВ, тогда как в ГЦК-алюминии — 40 мэВ.

Для декагонального квазикристалла  $d$ -AlNiFe предложена физическая модель его строения, отличающаяся от предложенной ранее для икосаэдрического квазикристалла  $i$ -AlCuFe [4] тем, что в отличие от атомов меди, атомы никеля наравне с атомами железа участвуют в формировании жесткого Al–Fe–Ni каркаса.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 04-02-16448) и РНЦ «КИ» в рамках инициативного проекта № 18-2008.

## ЛИТЕРАТУРА

1. D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, and J. W. Cahn, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1951 (1984).
2. E. Huttunen-Saarivirta, *J. Alloys Comp.* **363**, 150 (2004).
3. П. П. Паршин, М. Г. Землянов, А. В. Машков, Р. А. Бранд, А.-Ж. Диано, И. Калвайрак, *ФТТ* **46**, 510 (2004).
4. П. П. Паршин, М. Г. Землянов, Р. А. Бранд, *ЖЭТФ* **128**, 785 (2005).
5. П. П. Паршин, М. Г. Землянов, П. И. Солдатов, *ЖЭТФ* **101**, 750 (1992).
6. Ю. Каган, *ЖЭТФ* **42**, 1375 (1962).
7. V. F. Sears, *Neutron News* **3**, 26 (1992).
8. В. С. Оскотский, *ФТТ* **9**, 550 (1967).
9. В. Ф. Турчин, *Медленные нейтроны*, Госатомиздат, Москва (1963).
10. M. Mikhalkovic and C. Henley, *Proc. Conf. Quasicrystals, The Silver Jubilee, Tel Aviv* (2007), p. 96.
11. R. J. Birgeneau, J. Cordes, G. Dolling, and A. D. B. Woods, *Phys. Rev.* **136**, 1359 (1964).
12. V. J. Minkiewicz, G. Shirane, and R. Nathans, *Phys. Rev.* **162**, 528 (1967).
13. G. Gilat and R. M. Nicklow, *Phys. Rev.* **143**, 487 (1966).
14. G. Trambly de Laissardière, D. Nguen Manh, L. Magaud, J. P. Julien, F. Cyrot-Lackmann, and D. Mayou, *Phys. Rev. B* **52**, 7920 (1995).
15. M. Krajčí and J. Hafner, *J. Non-Cryst. Solids*, **334&335**, 342 (2004).
16. V. Fournée, E. Belin-Ferré, and J. M. Dubois, *J. Phys.: Condens. Matter* **10**, 4231 (1998).
17. A.-P. Tsai, *J. Non-Cryst. Solids* **334&335**, 317 (2004).