

Атомная динамика сплава α -(Al, Si)CuFe — кристаллического аппроксиманта для квазикристалла...

© П.П. Паршин¹, М.Г. Землянов¹, R.A. Brand², D. Pavlyuchkov^{3,4}, J. Ollivier⁵

¹ Российский научный центр „Курчатовский институт“, Москва, Россия

² INT, Forschungszentrum Karlsruhe, Eggenstein-Leopoldshafen, Germany

³ Forschungszentrum Juelich GmbH, Juelich, Germany

⁴ Институт проблем материаловедения им. И.М. Францевича НАН Украины, Киев, Украина

⁵ Institute Laue–Langevin, Grenoble, France

E-mail: zeml@isssph.kiae.ru

(Поступила в Редакцию 8 декабря 2009 г.)

С помощью неупругого рассеяния нейтронов исследована атомная динамика сплава с составом $\text{Al}_{0.55}\text{Si}_{0.07}\text{Cu}_{0.255}\text{Fe}_{0.125}$, строение которого аппроксимирует структуру икосаэдрического квазикристалла с близким химическим составом. Непосредственно из экспериментальных данных впервые восстановлены парциальные спектры колебаний атомов Cu, Fe и Al в кубическом аппроксиманте и спектр тепловых колебаний всего соединения. Проводится совместный анализ полученных результатов и данных по атомной динамике икосаэдрического квазикристалла i -AlCuFe.

Работа поддержана инициативным проектом РНЦ, КИ № 18-2008.

1. Введение

Атомное строение квазикристаллических сплавов характеризуется наличием дальнего порядка (по данным электронной, рентгеновской и нейтронной дифракции [1–3]) при отсутствии периодичности по всем трем пространственным измерениям. Этот дальний порядок, который называют квазипериодическим, допускает наличие поворотных осей пятого, восьмого, десятого порядков, не совместимых с трансляционной симметрией и запрещенных в классической трехмерной кристаллографии.

В самом общем виде атомную структуру квазикристаллов можно представить как пространственную сеть взаимопроникающих атомных кластеров, диаметр которых составляет несколько межатомных расстояний, упакованных квазипериодически. В случае икосаэдрических квазикристаллов эти атомные кластеры строятся из оболочек в форме икосаэдра и додекаэдра [4].

Для приближенного описания строения квазикристаллов часто используют периодические структуры, аппроксимирующие атомное строение квазикристалла в ограниченной области пространства [5]. В ряде случаев эти структуры реализуются в сплавах, по химическому составу близких к соответствующим квазикристаллам; такие сплавы принято называть кристаллическими аппроксимантами. В структурном отношении они представляют собой обычные трехмерные кристаллы, построенные из таких же атомных кластеров, что и соответствующий квазикристалл, но упакованных периодически. Таким образом, различие строения квазикристаллов и аппроксимирующих фаз заключается в спосо-

бе организации дальнего порядка (квазипериодичность и периодичность), в то время как ближний порядок в окружении атомов изменяется незначительно.

В частности, для икосаэдрического квазикристалла с составом $\text{Al}_{0.62}\text{Cu}_{0.255}\text{Fe}_{0.125}$ удастся синтезировать простейший кристаллический аппроксимант, структура которого построена из таких же кластеров, что и структура квазикристалла, но эти кластеры упакованы периодически. В результате образуется кубическая решетка типа CsCl с параметром $a = 1.23 \text{ nm}$, в узлах которой располагаются атомные кластеры, а элементарная ячейка содержит 137 атомов [5]. Для стабилизации кристаллической фазы аппроксиманта небольшая часть атомов алюминия замещается атомами кремния: $(\text{Al, Si})_{0.62}\text{Cu}_{0.255}\text{Fe}_{0.125}$, а в остальном химический состав этой фазы не отличается от состава квазикристалла.

Следует ожидать, что разные способы формирования дальнего порядка — квазипериодический в случае икосаэдрического квазикристалла и периодический в случае кристалла аппроксиманта — находят свое отражение в атомной динамике этих сплавов. Причем в первую очередь различия могут проявляться в области низкочастотных длинноволновых тепловых колебаний, отвечающих коррелированным движениям тяжелых атомных кластеров и, следовательно, отражающих специфику устройства дальнего порядка. Особенно важно было бы понять, как специфика дальнего порядка проявляется в спектрах колебаний атомов различных химических элементов. В работе [6] была предпринята попытка ответить на этот вопрос. Методом неупругого рассеяния синхротронного излучения с применением ядерно-резонансной спектроскопии были получены пар-

циальные спектры тепловых колебаний атомов железа в икосаэдрическом квазикристалле $Al_{0.62}Cu_{0.255}Fe_{0.125}$ и в кристаллическом образце тетрагональной ω -фазы с составом $Al_{0.70}Cu_{0.20}Fe_{0.10}$. В частности, было установлено, что в области низких частот спектр колебаний атомов железа в квазикристалле несколько мягче, чем в кристаллическом образце. Однако вопрос об изменениях парциальных спектров колебаний атомов меди и алюминия остался открытым. Кроме того, из-за различия химических составов образцов, исследованных в [6], остается неясным, связано ли обнаруженное смягчение спектра только с разными способами формирования дальнего порядка.

В системе Al–Cu–Fe возможно получение как икосаэдрического квазикристалла, так и кубического аппроксиманта с близким химическим составом. Таким образом, возникает возможность исследовать особенности атомной динамики, связанные как с ближним порядком (атомные кластеры), так и со способом дальнего упорядочения (пространственная периодичность и квазикристаллический порядок).

Атомная динамика квазикристалла i -AlCuFe экспериментально исследована методом неупругого рассеяния нейтронов с применением техники изотопического контраста [7,8]. В настоящей работе представлены результаты исследования атомной динамики кубического аппроксиманта с составом $Al_{0.55}Si_{0.07}Cu_{0.255}Fe_{0.125}$ и проводится анализ полученных результатов совместно с данными для квазикристалла i -AlCuFe.

2. Методика эксперимента

Для решения поставленной задачи использовался метод изотопического контраста в неупругом рассеянии нейтронов, позволяющий непосредственно из экспериментальных данных, без каких-либо модельных построений, получать информацию о парциальных спектрах тепловых колебаний атомов отдельных химических элементов, входящих в состав многоатомного соединения, и спектре тепловых колебаний соединения в целом [9].

Среди четырех химических элементов, входящих в состав исследованного сплава $Al_{0.55}Si_{0.07}Cu_{0.255}Fe_{0.125}$, только медь и железо имеют изотопы с заметным различием сечений рассеяния нейтронов (^{63}Cu $\sigma = 5.2$ barn и ^{65}Cu $\sigma = 14.5$ barn; ^{nat}Fe $\sigma = 11.62$ barn и ^{57}Fe $\sigma = 1.0$ barn) [10]. В связи с этим были синтезированы четыре образца сплава с различными изотопными составами по меди и железу.

В качестве исходных компонентов использовались компактные материалы высокой чистоты и изотопы: Al (99.999%); ^{nat}Cu (99.99%); ^{63}Cu (99.96%, изотопный состав: ^{63}Cu — 99.3%, ^{65}Cu — 0.7%); ^{65}Cu (99.96%, изотопный состав: ^{65}Cu — 99.7%, ^{63}Cu — 0.3%); ^{nat}Fe (99.99%); ^{57}Fe (99.88%, изотопный состав: ^{57}Fe — 95.57%, ^{56}Fe — 3.81%, ^{58}Fe — 0.61%, ^{54}Fe — 0.01%) и Si (99.999%). Навески химических элементов для каждого сплава, вес образца до и после плавки, а

также относительная потеря веса в результате плавки приведены в табл. 1. Методом левитационной плавки в атмосфере аргона были выплавлены четыре образца с химическим составом $Al_{0.55}Si_{0.07}Cu_{0.255}Fe_{0.125}$ и с различными наборами изотопов железа и меди (табл. 1) весом около 8 г каждый. Сплавление компонентов сопровождалось весьма незначительной потерей веса образца (в пределах 0.4 wt.%). Следовательно, реально полученные составы сплавов практически не отличались от заданного. Это обстоятельство было подтверждено также и последующей аттестацией валового химического состава сплавов методами оптико-эмиссионной спектроскопии и рентгеноспектрального анализа. Для устранения локальной химической неоднородности материала, вызванной неравновесной кристаллизацией, образцы были повторно расплавлены и закалены методом спиннингования. Полученные чешуйки были помещены в корундовые тигли и отожжены в вакуумной печи (10^{-5} Pa) при $650^\circ C$ в течение 24 h. Отожженный материал был измельчен в порошок и его фазовый состав был исследован методом рентгеновской порошковой дифракции. На основе анализа полученных дифрактограмм было установлено, что структура всех синтезированных образцов соответствует кубическому аппроксиманту α -(Al, Si)CuFe ($Pm-3$, $a = 1.2321$ nm). На дифракционных картинах отсутствовали рефлексы, отвечающие какому-либо иному соединению системы Al–Si–Cu–Fe или исходным компонентам, что свидетельствует об однофазности синтезированных образцов.

Для увеличения изотопического контраста при рассеянии нейтронов на колебаниях атомов меди и железа в экспериментах использовали три поликристаллических образца сплава, химически полностью идентичных, но с различными изотопными составами: *A* — образец с сильно рассеивающей медью и слабо рассеивающим железом, синтезированный с использованием изотопов ^{65}Cu и ^{57}Fe ; *B* — образец с сильно рассеивающим железом и слабо рассеивающей медью, в котором железо представлено естественной смесью изотопов, а медь — изотопом ^{63}Cu ; *C* — слабо рассеивающий образец, синтезированный с использованием изотопов ^{63}Cu и ^{57}Fe .

Измерения спектров неупругорассеянных нейтронов проводились при комнатной температуре на спектрометре по времени пролета IN6 в институте Лауэ–Ланжевена, энергия нейтронов в первичном пучке $E_0 = 4.772$ meV. Кроме спектров нейтронов, рассеянных указанными выше образцами, были измерены спектры нейтронов, рассеянных стандартным образцом ванадия и контейнером образца, изготовленным 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

Таблица 1. Перечень и характеристики синтезированных образцов кристаллического сплава α -(Al,Si)CuFe

| Название сплава | Исходные компоненты | Вес, g | Вес образца до плавки, g | Вес образца после плавки, g | Относительная потеря веса образца, % |
|-----------------|--|--------------------------------------|--------------------------|-----------------------------|--------------------------------------|
| ASCF-65 (A) | Al Si ⁶⁵ Cu ⁵⁷ Fe | 2.9671 0.3930 3.3137 1.4247 | 8.0985 | 8.0914 | 0.087 |
| ASCF-NF (B) | Al Si ⁶³ Cu Fe | 2.9588 0.3918 3.2033 1.3918 | 7.9457 | 7.9311 | 0.183 |
| ASCF-63 (C) | Al Si ⁶³ Cu ⁵⁷ Fe | 2.9244 0.3869 3.1655 1.4038 | 7.8806 | 7.8658 | 0.187 |
| ASCF | Al Si Cu Fe | 2.9575 0.3915 3.2250 1.3890 | 7.9630 | 7.9355 | 0.345 |

рассеяния в образце. Дальнейшая обработка экспериментальных данных проводилась в некогерентном приближении [11], а необходимое для этого усреднение по фазовому пространству достигалось суммированием спектров, измеренных под разными углами рассеяния в диапазоне 10–115°, с весовым множителем, равным синусу угла рассеяния.

После учета всех экспериментальных поправок и усреднения по фазовому пространству для каждого из образцов восстанавливался нейтроннозвешенный спектр колебаний многоатомного соединения $G(E)$:

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

Здесь c_i — атомная концентрация, σ_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 (фонный спектр) можно представить как $g(E) = \sum c_i g_i(E)$. Из соотношения (1) видно, что в функцию $G(E)$ в отличие от $g(E)$ парциальные спектры тепловых колебаний атомов различных химических элементов входят со специфическим „нейтронным“ множителем σ_i/M_i ; именно наличие этого множителя и открывает возможность применения метода изотопического контраста для определения парциальных спектров колебаний.

Взаимная нормировка и дальнейшая обработка спектров, измеренных для образцов с различными изотопными составами, с учетом вклада процессов многофонон-

ного рассеяния нейтронов, проводились по процедуре, достаточно подробно описанной в [7].

В результате для каждого из трех образцов α -(Al,Si)CuFe были получены однофононные нейтроннозвешенные спектры колебаний $G(E)$ (рис. 1). Для сравнения на рисунке показан вклад многофононного рассеяния нейтронов для образца A.

3. Экспериментальные результаты

Спектры $G(E)$, представленные на рис. 1, существенно отличаются друг от друга, хотя отражают атомную

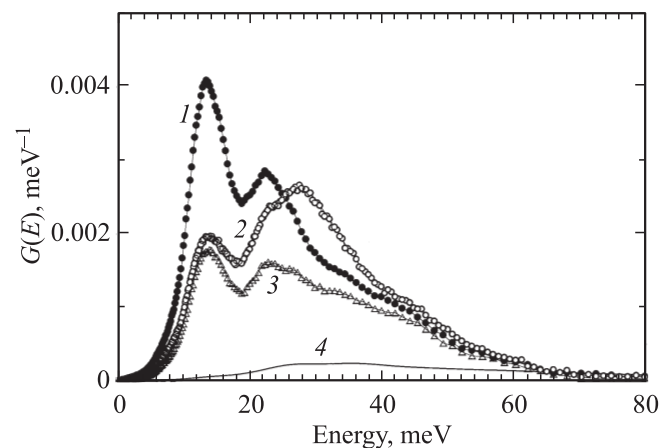


Рис. 1. Однофононные нейтроннозвешенные спектры колебаний для образцов кубического аппроксиманта $\text{Al}_{0.55}\text{Si}_{0.07}\text{Cu}_{0.25}\text{Fe}_{0.125}$. 1 — образец A с изотопами ^{65}Cu и ^{57}Fe , 2 — образец B с изотопом ^{63}Cu и $^{\text{nat}}\text{Fe}$, 3 — образец C с изотопами ^{63}Cu и ^{57}Fe , 4 — вклад многофононного рассеяния нейтронов для образца A.

динамику одного и того же вещества — сплава с составом $Al_{0.55}Si_{0.07}Cu_{0.255}Fe_{0.125}$, представляющего собой простейший кубический аппроксимант для икосаэдрического квазикристалла i -AlCuFe. Наблюдаемые различия спектров обусловлены разным изотопным составом образцов и демонстрируют проявление изотопического контраста в неупругом рассеянии нейтронов. Действительно, в спектре, измеренном на образце *A*, содержащем сильно рассеивающий изотоп меди, наиболее выражена область колебаний атомов меди, а в спектре, измеренном на образце *B*, содержащем сильно рассеивающее железо, более ярко выражена область колебаний атомов железа. Ниже всех располагается спектр, измеренный на образце *C*, в котором и медь и железо представлены слабо рассеивающими изотопами.

Парциальные спектры колебаний атомов меди $g_{Cu}(E)$ и железа $g_{Fe}(E)$ (рис. 2, 3) были получены как разности функций $G(E)$, экспериментально измеренных для образцов с разными изотопными состава-

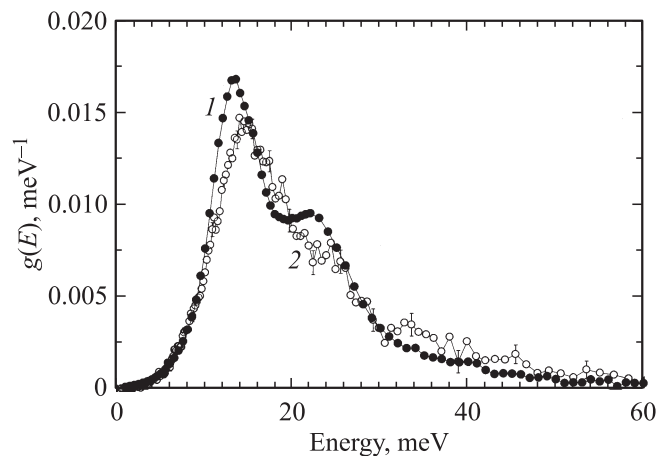


Рис. 2. Парциальные спектры тепловых колебаний атомов меди. 1 — в кубическом аппроксиманте α -(Al, Si)CuFe, 2 — в квазикристалле i -AlCuFe [7].

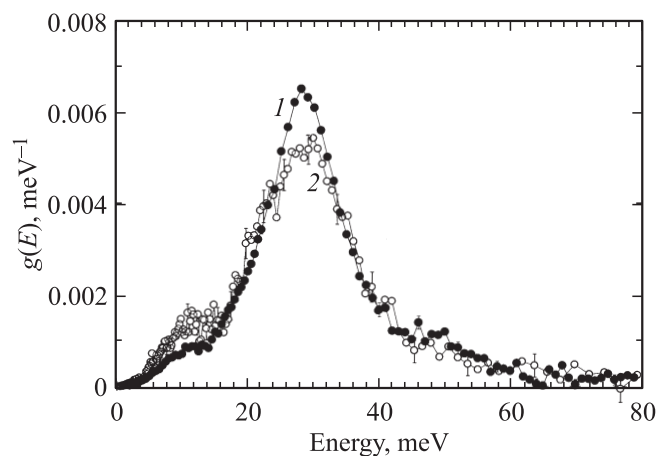


Рис. 3. Парциальные спектры тепловых колебаний атомов железа. 1 — в кубическом аппроксиманте α -(Al, Si)CuFe, 2 — в квазикристалле i -AlCuFe [7].

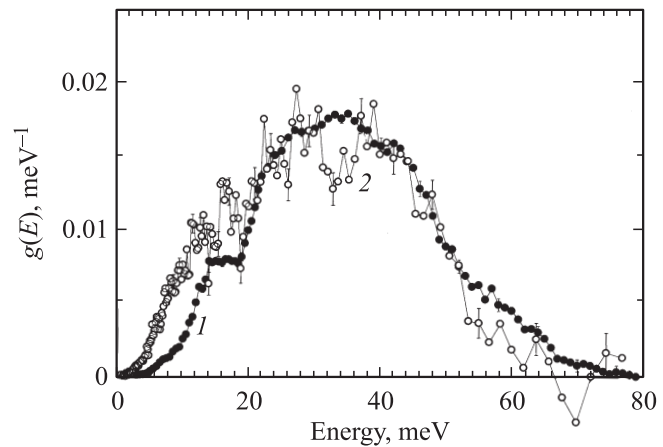


Рис. 4. Парциальные спектры тепловых колебаний алюминия. 1 — в кубическом аппроксиманте α -(Al, Si)CuFe, 2 — в квазикристалле i -AlCuFe [7].

ми: $g_{Cu}(E) \sim G_A(E) - G_C(E)$ и $g_{Fe}(E) \sim G_B(E) - G_C(E)$. А парциальный спектр колебаний атомов алюминия $g_{Al}(E)$ (рис. 4) после соответствующей нормировки спектров $g_{Cu}(E)$ и $g_{Fe}(E)$ и вычисления по ним парциальных тепловых факторов Дебая-Уоллера был получен как разность:

$$g_{Al}(E) \sim G_C(E) - \frac{c_{Cu}\sigma_{Cu}}{M_{Cu}} g_{Cu}(E)e^{-2W_{Cu}} \Big|_{^{63}Cu} - \frac{c_{Fe}\sigma_{Fe}}{M_{Fe}} g_{Fe}(E)e^{-2W_{Fe}} \Big|_{^{57}Fe} \quad (2)$$

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. Следует иметь в виду, что восстановленный нами парциальный спектр колебаний атомов алюминия фактически представляет спектр колебаний „среднего“ атома ($Al_{0.89}Si_{0.11}$).

Для сравнения на рис. 2–4 приведены также парциальные спектры тепловых колебаний атомов меди, железа и алюминия в икосаэдрическом квазикристалле i -AlCuFe, взятые из работы [7]. Площади под спектрами нормированы на атомную концентрацию соответствующего химического элемента. По парциальным спектрам рассчитаны интегральные параметры тепловых колебаний атомов различных химических элементов (табл. 2) и восстановлен спектр тепловых колебаний кристаллической решетки кубического аппроксиманта α -(Al, Si)CuFe (рис. 5).

4. Обсуждение результатов

Спектр колебаний атомов меди в кристаллическом аппроксиманте (рис. 2, табл. 2) в среднем несколько мягче, чем в квазикристалле, в основном за счет несколько меньшего „хвоста“ в области энергий $E > 30$ meV.

В диапазоне энергий $E < 10$ meV эти спектры совпадают в пределах статистической точности эксперимента. На основании полученных данных можно предположить, что атомы меди в кубическом аппроксиманте в среднем имеют окружение, близкое к тому, которое реализуется в икосаэдрическом квазикристалле. По-видимому, сходны и силовые связи, характерные для атомов меди в этих сплавах.

В случае атомов железа средние по спектру энергии колебаний в квазикристалле и кристаллическом аппроксиманте совпадают в пределах погрешности (табл. 2), но в области энергий $E < 16$ meV плотность колебаний в аппроксиманте ниже, чем в квазикристалле (рис. 3). Можно заключить, что в среднем атомы железа в исследованном кристаллическом сплаве и в квазикристалле имеют сходные ближайшее окружение и силовые связи.

Имеется существенное различие парциальных спектров колебаний атомов меди и железа в α -(Al, Si)CuFe: спектр колебаний меди заметно мягче. Этот факт нельзя объяснить только различием атомных масс, поскольку массы атомов различаются на 10%, в то время как значения средних по спектру энергий колебаний — на 30% (табл. 2). Отсюда следует, что в структуре кристаллического аппроксиманта (подобно тому, как это имеет место для икосаэдрического квазикристалла) атомы меди в среднем связаны слабее, чем атомы же-

Таблица 2. Интегральные термодинамические характеристики тепловых колебаний атомов Al, Cu и Fe для кристаллического аппроксиманта α -(Al, Si)CuFe, квазикристалла i -AlCuFe и соответствующих чистых металлов: $\langle u^2 \rangle$ — средний квадрат тепловых смещений атомов при $T = 300$ К, $\langle E \rangle$ — средняя по спектру энергия колебаний, $\langle B \rangle \approx M \langle E^2 \rangle$ — средняя силовая константа связи

| Атом | $\langle u^2 \rangle, 10^{-3} \text{ \AA}^2$ | $\langle E \rangle, \text{ meV}$ | $\langle B \rangle, \text{ N/m}$ |
|------------------------------|--|----------------------------------|----------------------------------|
| Al α -(Al, Si)CuFe | 6.22 ± 0.10 | 35.6 ± 0.2 | 152 ± 4 |
| Al i -AlCuFe | 10.9 ± 0.4 | 32.1 ± 1.7 | 127 ± 21 |
| Al металл | 12.4 | 24.8 | 74 |
| Cu α -(Al, Si)CuFe | 8.0 ± 0.1 | 21.9 ± 0.3 | 159 ± 4 |
| Cu i -AlCuFe | 7.06 ± 0.15 | 23.8 ± 0.9 | 187 ± 14 |
| Cu металл | 7.7 | 20.2 | 113 |
| Fe α -(Al, Si)CuFe | 4.3 ± 0.1 | 31.5 ± 0.4 | 247 ± 5 |
| Fe i -AlCuFe | 5.6 ± 0.2 | 31.0 ± 1.0 | 248 ± 16 |
| Fe металл | 6.05 | 27.2 | 180 |

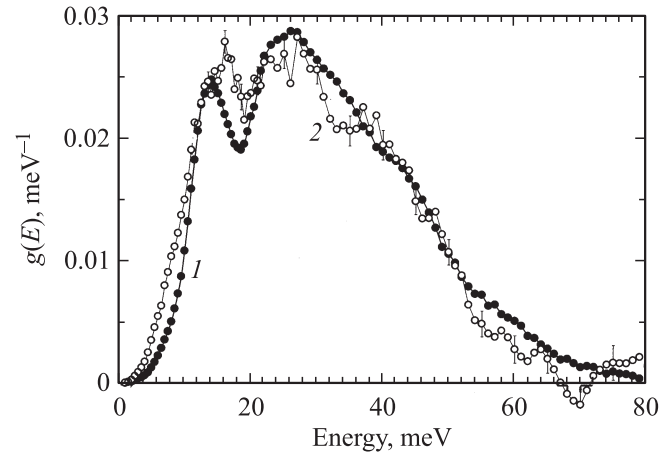


Рис. 5. Спектры тепловых колебаний. 1 — кубический аппроксимант α -(Al, Si)CuFe, 2 — квазикристалл i -AlCuFe [7].

леза. Это утверждение следует также из оценки средней константы связи, которая для атомов меди меньше, чем для железа (табл. 2).

При рассмотрении парциального спектра тепловых колебаний алюминия предполагается, что он не изменяется при замещении 11% атомов алюминия близкими по массе атомами кремния. В области энергий $E < 24$ meV плотность колебаний атомов алюминия в квазикристалле заметно выше, чем в кристаллическом аппроксиманте (рис. 4), в то же время при энергиях $30 < E < 40$ и $E > 50$ meV ситуация обратная: плотность колебаний атомов алюминия в квазикристалле ниже, чем в кристалле. Средняя по спектру энергия колебаний атомов алюминия выше в кристаллическом аппроксиманте по сравнению с квазикристаллом (табл. 2).

Что касается спектров тепловых колебаний сплава в целом, то следует отметить, что в области энергий $E < 20$ meV плотность колебаний в аппроксиманте ниже, а в области энергий $E > 52$ meV — выше, чем плотность колебаний в квазикристалле. В среднем спектр тепловых колебаний кристаллического аппроксиманта несколько жестче, чем спектр квазикристалла (рис. 5).

Эти наблюдения находятся в качественном согласии с данными, полученными из измерений низкотемпературной теплоемкости [12], и свидетельствуют о наличии в икосаэдрическом квазикристалле низкочастотных колебательных возбуждений, отсутствующих в случае периодического кристалла с близким химическим составом. Анализ парциальных спектров тепловых колебаний позволяет утверждать, что эти низкочастотные возбуждения связаны с колебаниями атомов алюминия и железа, а атомы меди в них не участвуют. Поскольку в квазикристалле нет пространственной периодичности в расположении атомов, возникает возможность появления новых, отсутствующих в кристалле степеней свободы. Наличие этих степеней свободы приводит к возникновению дополнительных низкочастотных колебательных возбуждений, которые можно отождествить с

низколежащими ветвями оптических колебаний [13,14]. В соответствии с моделью строения квазикристалла, предложенной в [8], можно представить, например, колебания общих для соседних кластеров фрагментов каркаса из атомов алюминия и железа относительно более тяжелых атомов меди.

Следует отметить еще одно различие. В случае квазикристалла парциальные спектры колебаний атомов алюминия и меди удалось описать четырьмя, а спектр железа — двумя гауссианами [8]. На основе такого анализа было показано, что взаимодействие атомов железа и алюминия в икосаэдрическом квазикристалле хорошо описывается в простом приближении парных сил с учетом только ближайших соседей, а медь подстраивается под силовое взаимодействие, сложившееся в матрице алюминий–железо. Можно предположить, что в квазикристалле взаимодействие алюминий–железо носит локальный характер и в силу специфики его строения (отсутствие пространственной периодичности) не распространяется на расстояния дальше 1–2 координационных сфер. В случае же кристаллического аппроксиманта для описания спектра колебаний атомов железа пришлось привлечь четыре гауссиана, а спектр колебаний атомов алюминия вообще не удастся описать разумным количеством гауссианов. По-видимому, это означает, что в кристаллическом аппроксиманте в отличие от квазикристалла взаимодействие алюминий–железо распространяется заметно дальше и охватывает большее число координационных сфер, в этом случае простая модель взаимодействия только с ближайшими соседями уже не применима.

5. Выводы

1) Экспериментально методом изотопического контраста в неупругом рассеянии нейтронов получены парциальные спектры тепловых колебаний атомов Cu, Fe и Al в кристаллическом сплаве $\text{Al}_{0.55}\text{Si}_{0.07}\text{Cu}_{0.255}\text{Fe}_{0.125}$, аппроксимирующем строение икосаэдрического квазикристалла с составом $\text{Al}_{0.62}\text{Cu}_{0.255}\text{Fe}_{0.125}$.

2) На основе парциальных спектров колебаний без каких-либо модельных предположений восстановлен спектр тепловых колебаний исследованного сплава. Установлено, что спектр тепловых колебаний кристаллической решетки аппроксиманта в среднем несколько жестче, чем спектр икосаэдрического квазикристалла.

3) Обнаружено, что плотности тепловых колебаний для атомов алюминия в области энергий $E < 24 \text{ meV}$ и для атомов железа в области $E < 16 \text{ meV}$ в кристаллическом сплаве α -(Al, Si)CuFe заметно ниже, чем для тех же атомов в икосаэдрическом квазикристалле i -AlCuFe.

4) Показано, что атомы меди в исследованном кристаллическом сплаве связаны заметно слабее, чем атомы железа, как это имеет место и в квазикристалле.

5) Установлено, что в отличие от квазикристалла в кристаллическом аппроксиманте взаимодействие алюминий–железо уже не может быть описано простой

моделью парного взаимодействия ближайших соседей. Следовательно, межатомное взаимодействие в квазикристалле носит более локальный характер по сравнению с кристаллическим аналогом.

6) Различие способов упаковки атомных кластеров проявляется в низкоэнергетической части спектра тепловых колебаний ($E < 20 \text{ meV}$), где плотность тепловых возбуждений для квазикристалла заметно выше, чем для кубического аппроксиманта. Отсюда следует, что в квазикристалле с квазипериодической упаковкой атомных кластеров возникают дополнительные по сравнению с кристаллическим аппроксимантом низкочастотные колебательные возбуждения. Можно предположить, что в этой области энергий сосредоточены оптические колебания фрагментов Al–Fe-каркаса относительно более тяжелых и слабо связанных с каркасом атомов меди.

Авторы выражают благодарность А.С. Иванову за помощь в проведении нейтронных экспериментов.

Список литературы

- [1] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, G.W. Cahn. Phys. Rev. Lett. **53**, 1951 (1984).
- [2] P.A. Bancel, P.A. Heiney, P.W. Stephens, A.I. Goldman, P.M. Horn. Phys. Rev. Lett. **54**, 2422 (1985).
- [3] M. Quiquandon, A. Quivy, S. Lefebvre, E. Elkaim, G. Heger, A. Katz, D. Gratias. Phys. Rev. B **44**, 2071 (1991).
- [4] C.L. Henley, V. Elser. Phil. Mag. B **53**, L 59 (1986).
- [5] A. Quivy, M. Quiquandon, Y. Calvayrac., F. Faudot, D. Gratias, C. Berger, R.A. Brand, V. Simonet, F. Hippert. J. Phys.: Cond. Matter **8**, 23, 4223 (1996).
- [6] K. Suzuya, K. Shibata, M. Seto, S. Kitao, Y. Yoda, Y. Kashi-hara, A.-P. Tsai. J. Non-Cryst. Solids **312–314**, 508 (2002).
- [7] П.П. Паршин, М.Г. Землянов, А.В. Машков, Р.А. Бранд, А.-Ж. Диано, И. Кальвайрак. ФТТ **46**, 3, 510 (2004).
- [8] П.П. Паршин, М.Г. Землянов, Р.А. Бранд. ЖЭТФ **123**, 4(10), 785 (2005).
- [9] Ю. Каган. ЖЭТФ **42**, 1375 (1962).
- [10] V.F. Sears. Neutron News **3**, 26 (1992).
- [11] В.С. Оскотский. ФТТ **9**, 550 (1967).
- [12] Г.Х. Панова, М.Г. Землянов, П.П. Паршин, А.А. Шиков, Р.А. Бранд. ФТТ **52**, 4, 718 (2010).
- [13] J.A. Ashraff, J.-M. Luck. Phys. Rev. B **41**, 4314 (1990).
- [14] M. de Boissieu, K. Shibata, R. Currat, A.Q.R. Baron, S. Tsutsui, A.-P. Tsai. J. Non-Cryst. Solids **334–335**, 303 (2004).