

КІЛЬКІСНА ОЦІНКА СТРУКТУРНИХ ДЕФЕКТІВ В ІКОСАЕДРИЧНИХ КВАЗІКРИСТАЛАХ

Баздирєва С.В., Малихін С.В.

Національний технічний університет

“Харківський політехнічний інститут” м. Харків

Квазікристали являють собою новий клас твердих тіл, структура яких характеризується наявністю далекого порядку в розташуванні атомів при відсутності трансляційної інваріантності [1]. Для квазікристалів відзначають ряд нових поєднань фізико-хімічних властивостей, які обумовлені особливістю і незвичністю структури та субструктури [2]. Під субструктурою, як завжди, розуміють густину та розподіл дефектів структури. Структурі квазікристалів притаманні як звичні дефекти кристалів, так і особливі дефекти, так звані, фазонні дефекти. На теперішній час вивчення фазонів носить здебільшого якісний характер [3]. Значну увагу приділяють вивченню впливу фазонних дефектів на картини дифракції [1], а роботи, присвячені комплексній кількісній оцінці дефектів у структурі квазікристалів, носять поодинокий характер [4]. У даній роботі для кількісної оцінки фазонних дефектів (n), областей когерентного розсіяння (ОКР, L), величини мікро деформацій (ϵ) та концентрації фазонних дефектів (n) застосовується модифікований метод апроксимації шляхом побудови тривимірних графіків залежності інтегральної ширини дифракційних максимумів від модулів дифракційних векторів в фізичному $Q_{\text{пар}}$ та $Q_{\text{перп}}$ перпендикулярному просторі. Процедура розрахунків параметрів субструктури полягає в знаходженні методом найменших квадратів вигляду рівняння площини, що описує ширину як функцію двох аргументів $Q_{\text{пар}}$ і $Q_{\text{перп}}$.

Методика була успішно відпрацьована на $\text{Ti}_{41,5}\text{Zr}_{41,5}\text{Ni}_{17}$ зразках у вихідному стані, після інтенсивної пластичної деформації, отриманих при різних швидкостях загартування, а також після гідрогенізації. При цьому отримані результати, які узгоджуються з теоретичними уявленнями про поведінку дефектів у квазікрисналах та літературними даними.

Список літератури:

- [1] Stadnik Z.M. Physical properties of quasicrystals, Berlin, Springer (1999) p 365.
- [2] Letoublon A., Yakhou F. Livet F. Europhys. Lett (2001), V.54, №6, P.753-759.
- [3] Franz V., Feuerbacher M., Wollgarten M., Urban K. Phil. Mag. Lett. (1999), Vol. 79, № 6, P. 333-342.
- [4] Nicula R. Jianu A. Biris A.R. . Europhys. Lett (1998), 3, 1-5.