

Ю.В. Сироватко¹, О.О. Левкович²

Теплоємність декагональних та ікосаедричних квазікристалічних фаз при високих температурах

¹Дніпропетровська філія державної установи «Інститут охорони ґрунтів України», Україна,
Дніпропетровська область, с. Дослідне, yu.syrovatko@gmail.com;

²Придніпровська державна академія будівництва та архітектури, Дніпро, Україна, levk.olga77@gmail.com

В роботі розраховано теплоємність квазікристалічних декагональних $Al_{69}Co_{21}Ni_{10}$ та ікосаедричних $Al_{63}Cu_{25}Fe_{12}$ квазікристалічних фаз сплавів Al–Co–Ni і Al–Cu–Fe відповідно. Згідно з законом Грюнейзена теплоємність є енергетичною характеристикою, яка відображає стійкість фаз до руйнування. Для розрахунків теплоємності структуру квазікристалічних фаз розглянуто в уявленні моделі анізотропних кристалів. У результаті отримано, що теплоємність квазікристалічних фаз при високих температурах є надлишковою, тобто перевищує рівень Дюлонга-Пті. Таким чином квазікристалічні фази при високих температурах є більш стабільними, ніж кристалічна фаза. Для декагональної квазікристалічної фази теплоємність більше $3R$ в інтервалі температур $\sim 480 - 1500$ К, а для ікосаедричної квазікристалічної фази – в інтервалі температур $\sim 380 - 1120$ К. З цього випливає, що декагональні фази залишаються стійкими при високих температурах, за яких ікосаедричні фази руйнуються.

Ключові слова: квазікристали, декагональна фаза, ікосаедрична фаза, дисперсійний закон, анізотропія, ізотропія, температурна залежність теплоємності, надлишкова теплоємність, закон Дюлонга-Пті.

Подано до редакції 25.03.2020; прийнято до друку 15.06.2020.

Вступ

Унікальна структура квазікристалів визначає їх незвичайні фізико-хімічні властивості. Квазікристали мають низькі коефіцієнти тертя і поверхневого натягу, а також високі твердість, зносостійкість і корозійну стійкість. Завдяки цим властивостям квазікристали практично застосовують у вигляді плівок, покриттів і складових композиційних матеріалів. При виготовленні композиційних матеріалів з квазікристалічними сплавами-наповнювачами виникає питання про стабільність квазікристалічних фаз до температурної дії розплавленої зв'язки. В системах Al–Cu–Fe і Al–Ni–Co виявлені ікосаедричні $Al_{63}Cu_{25}Fe_{12}$ і декагональні $Al_{69}Co_{21}Ni_{10}$ квазікристалічні фази відповідно [1, 2]. Ці фази утворюються з розплаву при звичайних швидкостях охолодження і зберігаються після тривалої термообробки, тобто відносяться до рівноважних. Однак квазікристалічні декагональні

фази руйнуються при більш високих температурах [3, 4], ніж ікосаедричні фази.

У теперішній час увагу дослідників привертає так звана надлишкова теплоємність квазікристалічних фаз в області високих температур [1, 5]. Проявом надлишкової теплоємності є перевищення теплоємності системи значення $3R$ в моделі Дебая і відхилення від закону Дюлонга-Пті при температурах вище 300 К. Теплоємність підпорядковується закону Грюнейзена, а також залежить від коефіцієнту лінійного розширення. Таким чином можна сказати, що теплоємність відображає стійкість квазікристалічних фаз до температурної дії. Перші дослідження цього явища надлишкової теплоємності були проведені в роботах [6, 7]. О.Ф. Прекул та інші [1, 5] отримали, що теплоємність ікосаедричних фаз $Al_{63}Cu_{25}Fe_{12}$ починаючи від температур 300 К неперервно зростає, при температурі біля 1300 К досягає максимуму, а потім повільно спадає. Однак явище надлишкової

теплоємності дотепер не отримало достатнього пояснення.

Для пояснення явища надлишкової теплоємності квазікристалічних фаз, а також факту стабільності при більш високих температурах декагональних фаз в даній роботі розглянуто теплоємність фаз з позиції моделі анізотропних кристалів [8].

I. Модельне представлення структури кристалічної фази

Відповідно до закону Грюнейзена [8] якщо немає значних варіацій тиску, то можна припустити, що коефіцієнт теплового розширення ґратки кристалу лінійно залежить від теплоємності. При збільшенні коефіцієнту теплового розширення ґратки збільшується пластичність структури і відповідно стійкість до руйнування. Тому теплоємність є енергетичною характеристикою стійкості фаз.

Вільна енергія тіла F згідно з [8]:

$$F = \frac{VT}{2\pi^2 u^3} \int_0^\infty \omega^2 \ln \left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{T}} \right) d\omega, \quad (1)$$

де V – об'єм тіла, T – температура, u – групова швидкість, \hbar – постійна Планка. Оскільки структура кристалічної фази ізотропна, в (1) розглядається тільки один напрям поляризації. Дисперсійний закон має лінійну залежність:

$$\omega = uk, \quad (2)$$

де k – хвильовий вектор. Використовуючи формалізм Дебая [8], замінюємо верхню границю інтегрування у

(1) на $y = \frac{\hbar\omega_D}{T}$, де ω_D – частота Дебая, та

підставляємо (2) в (1), після чого отримуємо:

$$F = \frac{VT^3}{2\pi^2 u^3 \hbar^3} \int_0^y \ln(1 - \exp(-x)) x^2 dx, \quad (3)$$

де $x = \frac{\hbar uk}{T}$. Далі проінтегруємо частинами і отримаємо:

$$F = \ln(1 - \exp(-x)) \frac{x^3}{3} \Big|_0^y - \int_0^y \frac{x^3}{3} \frac{1}{1 - \exp(-x)} dx. \quad (4)$$

Розкладемо функцію $\exp(-x)$ у (4) до другого члену і після інтегрування отримаємо вираз

$$F = \frac{Vk_D^3}{2\pi^2 3} \left(T \ln(\hbar uk) - T \ln T - \frac{T}{3} \right), \quad (5)$$

де k_D – хвильовий вектор Дебая. Звідси ентропія тіла:

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = \frac{Vk_D^3}{2\pi^2 3} \left(-\ln(\hbar uk) + \ln T + 1 + \frac{1}{3} \right). \quad (6)$$

Внутрішня енергія тіла E і теплоємність C

відповідно мають вигляд $E = F + TS = \frac{Vk_D^3}{2\pi^2 3} T$,

$$C = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{Vk_D^3}{2\pi^2 3}. \quad (7)$$

З виразу (7) видно, що теплоємність кристалічної

фази дорівнює сфері Дебая $3R = \frac{Vk_D^3}{2\pi^2 3}$. Це

відповідає тому, що при високих температурах теплоємність кристалічної фази дорівнює $3R$, тобто виконується закон Дюлонга-Пті.

II. Представлення структури квазікристалічної декагональної фази з позиції моделі анізотропних кристалів

Структура квазікристалічної декагональної фази $Al_{69}Co_{21}Ni_{10}$ сплаву Al–Co–Ni анізотропна, тобто має квазікристалічну будову в площині xu і кристалічну будову в напрямку осі z [9]. Будемо описувати будову структури квазікристалічної декагональної фази за допомогою моделі сильно анізотропних кристалів [8]. Декагональну фазу можна розглядати як шарувату структуру, в якій присутня взаємодія між шарами. У структурі наявні коливання як у самих шарах, так і коливання шарів один відносно іншого. Також наявні коливання вигинів самих шарів. Будемо вважати, що анізотропія квазікристалічної декагональної фази проявляється у відмінності дисперсійних законів у площині xu і в напрямку z . У площині xu для квазікристалічної будови [10] дисперсійний закон представлений квадратичною залежністю $\gamma\chi^2$ ($\chi^2 = k_x^2 + k_y^2$), де γ – групова швидкість в площині, а у напрямку z для кристалічної будови має лінійну залежність $\approx uk_z$. Сумарну частоту звукових хвиль можна виразити наступним чином згідно [8]:

$$\omega^2 = u^2 k_z^2 + \gamma^2 \chi^4. \quad (8)$$

З урахуванням внеску від звукових коливань, вільна енергія квазікристалічної декагональної фази визначається за формулою [8]:

$$F = \frac{8VT}{(2\pi)^3} \int_0^{\hbar uk_{\max}/T} dk_z \int_0^{\hbar \gamma \chi_{\max}^2/T} \ln \left(1 - \exp \left(-\frac{\hbar}{T} \sqrt{u^2 k_z^2 + \gamma^2 \chi^4} \right) \right) 2\pi \chi d\chi. \quad (9)$$

У (9) замінено верхні границі інтегрування, застосовуючи формалізм Дебая для моделі анізотропних кристалів. Тоді формула (9) буде вірна і для випадку високих температур, як в моделі Дебая [8]. Для внутрішнього інтеграла отримаємо наступний вираз:

$$\frac{\pi T}{\gamma \hbar} \int_0^x \ln(1 - e^{-z}) dz = \frac{\pi T}{\gamma \hbar} \left[x \ln(1 - e^{-x}) - 3 \int_0^x \frac{z dz}{e^z - 1} \right], \quad (10)$$

де $z = \frac{\hbar}{T} \sqrt{a + \gamma^2 \chi^4}$, a – параметр $\sim u^2 k_z^2$,

$x = \frac{\hbar}{T} \sqrt{a + \gamma^2 \chi_{\max}^4}$ – границя інтегрування.

Коефіцієнт 3 в (10) враховує малі коливання вузлів кристалічної ґратки, які лежать в площині інтегрування, в трьох напрямках. Після розкладання у ряд e^z до третього члена, а e^x до другого, отримаємо вираз:

$$\frac{\pi T}{\gamma \hbar} \left[x \ln x - 6 \ln \left(1 + \frac{x}{2} \right) \right]. \quad (11)$$

Для подальшого інтегрування у напрямі хвильового вектора k_z , додатково розкладемо функцію $\ln \left(1 + \frac{x}{2} \right)$ до шостого члена. Тоді внутрішній

інтеграл виразу (9) буде мати вигляд:

$$\frac{\pi T}{\gamma \hbar} \left(x \ln x - 6 \left[\frac{x}{2} - \frac{x^2}{8} + \frac{x^3}{24} - \frac{x^4}{64} + \frac{x^5}{160} - \frac{x^6}{384} \right] \right). \quad (12)$$

Далі зробимо додаткову заміну змінного $x = \frac{\hbar}{T} \sqrt{u^2 k_z^2 + b}$, де $b = \gamma^2 \chi_{\max}^4$ – параметр,

$$y = \frac{\hbar}{T} \sqrt{u^2 k_{z\max}^2 + b}.$$

Тоді з урахуванням коефіцієнта, що знаходиться перед подвійним інтегралом у (9), отримаємо:

$$F = \frac{VT^3}{\pi^2 \gamma u \hbar^2} \left[\int_0^y x \ln x dx - 6 \int_0^y \left(\frac{x}{2} - \frac{x^2}{8} + \frac{x^3}{24} - \frac{x^4}{64} + \frac{x^5}{160} - \frac{x^6}{384} \right) dx \right]. \quad (13)$$

Після інтегрування вільна енергія буде мати вигляд:

$$F = \frac{VL^2}{2\pi^2 \gamma u} \left[T \ln \hbar L - T \ln T - \frac{7}{2} T + \frac{1}{2} \hbar L - \frac{1}{8} \frac{\hbar^2 L^2}{T} + \frac{3}{80} \frac{\hbar^3 L^3}{T^2} - \frac{3}{240} \frac{\hbar^4 L^4}{T^3} + \frac{3}{672} \frac{\hbar^5 L^5}{T^4} \right], \quad (14)$$

де $L = \sqrt{u^2 k_{z\max}^2 + \gamma^2 \chi_{\max}^4}$. Після нескладних розрахунків ентропії $S = -\frac{\partial F}{\partial T}$ та внутрішньої енергії системи $E = F + TS$, отримаємо для теплоємності вираз:

$$C = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{VL^2}{2\pi^2 \gamma u} \left[1 + \frac{1}{4} \frac{\hbar^2 L^2}{T^2} - \frac{9}{40} \frac{\hbar^3 L^3}{T^3} + \frac{3}{20} \frac{\hbar^4 L^4}{T^4} - \frac{5}{56} \frac{\hbar^5 L^5}{T^5} \right]. \quad (15)$$

Вираз $\hbar L = \hbar \sqrt{u^2 k_{z\max}^2 + \gamma^2 \chi_{\max}^4}$ за змістом подібний до температури Дебая $\sim \theta = \hbar \omega_D$, оскільки $u k_{z\max}$ і $\gamma \chi_{\max}^2$ власне й являють собою складові виразу для максимальної частоти узагальненої за простором осцилюючої системи. Множник $\frac{VL^2}{2\pi^2 \gamma u}$ є подібний за змістом дебаєвській сфері $\frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4}{3} \pi k_D^3 \approx 3R$. Дійсно, прийемо, що швидкість звука γ у площині xu дорівнює швидкості звука u у напрямі z , і має деяке значення u . Тоді множник

дорівнює $\frac{V}{2\pi^2} \frac{u^2 (k_{z\max}^2 + \chi_{\max}^4)}{u^2}$. Вектор χ^2 у площині xu визначається сумою квадратів векторів k_x і k_y : $\chi^2 = k_x^2 + k_y^2$. Будемо далі складати вектор, спрямований по осі z $k_{z\max}$ з вектором χ^2 , який утворюється векторами k_x і k_y у площині. Звідси маємо хвильовий вектор K у просторі xuz , який дорівнює $K^2 = k_{z\max}^2 + (\chi_{\max}^2)^2$. Тоді множник у виразі для теплоємності стає рівним $\frac{V}{2\pi^2} K^2$.

Квазікристалічні декагональні фази мають упорядковану структуру, але не періодичну. Їх атомна структура характеризується наявністю високосиметричних кластерів Маккея [11]. Це

викликає зміщення векторів $k_{z\max}$ і χ_{\max}^2 . Тому треба розглядати K^2 як деяку змінну і інтегрувати множник, який буде дорівнювати $\frac{V}{2\pi^2} \int_0^k K^2 dK = \frac{V}{2\pi^2} \frac{k^3}{3}$. Якщо вважати $k = k_D$, то множник у виразі для теплоємності співпадає з загальноприйнятим $3R$. Тоді (15) можна представити у вигляді:

$$C = 3R \left[1 + \frac{1}{4} \frac{\theta^2}{T^2} - \frac{9}{40} \frac{\theta^3}{T^3} + \frac{3}{20} \frac{\theta^4}{T^4} - \frac{5}{56} \frac{\theta^5}{T^5} \right]. \quad (16)$$

$$F = \frac{8VT}{3(2\pi)^3} \int_0^{hk_{\max}^2/T} dk_z \int_0^{h\chi_{\max}^2/T} \ln \left(1 - \exp \left(-\frac{\hbar}{T} \sqrt{u^2 k_z^4 + \gamma^2 \chi^4} \right) \right) 2\pi \chi d\chi. \quad (18)$$

Зробимо інтегрування по $d\chi$ у внутрішньому інтегралі, як в попередньому випадку для декагональної фази. Отримаємо:

$$F = \frac{VT^2}{3\pi^2 \gamma \hbar} \int_0^y \left(x \ln x - 6 \ln \left(1 + \frac{x}{2} \right) \right) dk, \quad (19)$$

де $x = \frac{\hbar}{T} \sqrt{u^2 k_z^4 + b}$, де $b = \gamma^2 \chi_{\max}^4$ – параметр, $y = \frac{\hbar}{T} \sqrt{u^2 k_{z\max}^4 + b}$ – границя інтегрування.

Помножимо чисельник та знаменник під інтегралом на k^2 , після цього внесемо k під знак диференціалу.

$$F = \frac{VLk}{6\pi^2 \gamma} \left(T \ln \hbar L - T \ln T - 4T + \frac{3}{4} \hbar L - \frac{1}{12} \frac{(\hbar L)^2}{T} + \frac{3}{128} \frac{(\hbar L)^3}{T^2} - \frac{3}{400} \frac{(\hbar L)^4}{T^3} + \frac{1}{384} \frac{(\hbar L)^5}{T^4} \right) \quad (21)$$

де $L = \sqrt{u^2 k_{z\max}^4 + \gamma^2 \chi_{\max}^4}$. Після розрахунку ентропії та внутрішньої енергії отримаємо для теплоємності ікосаедричної фази:

$$C = \frac{\partial E}{\partial T} = 3R \left[1 + \frac{1}{6} \frac{\theta^2}{T^2} - \frac{9}{64} \frac{\theta^3}{T^3} + \frac{9}{100} \frac{\theta^4}{T^4} - \frac{5}{96} \frac{\theta^5}{T^5} \right], \quad (22)$$

де вираз $\hbar L = \hbar \sqrt{u^2 k_{z\max}^4 + \gamma^2 \chi_{\max}^4}$ за змістом подібний до температури Дебая. Множник $\frac{VLk}{6\pi^2 \gamma}$ є подібним за змістом сфері Дебая $3R$. Дійсно, прийемо, що швидкість звука γ у площині xy дорівнює швидкості звука u у напрямі z , і має деяке значення u . Тоді множник дорівнює

III. Модельне представлення структури квазікристалічної ікосаедричної фази

Структура квазікристалічної ікосаедричної фази $Al_{63}Cu_{25}Fe_{12}$ сплаву Al–Cu–Fe має квазікристалічну будову в усіх напрямках. Тому дисперсійний закон буде мати квадратичну залежність як в площині xy , так і в напрямку осі z . Сумарна частота звукових хвиль буде згідно [8] виражатися як:

$$\omega^2 = u^2 k_z^4 + \gamma^2 \chi^4. \quad (17)$$

Оскільки будова ікосаедричної фази ізотропна і розглядається лише один напрям поляризації, вираз (9) потрібно поділити на 3. Також в (9) зміниться границя інтегрування:

Отримаємо:

$$F = \frac{VT^2 k}{6\pi^2 \gamma \hbar} \int_0^y \left(x \ln x - 6 \ln \left(1 + \frac{x}{2} \right) \right) \frac{1}{x} dx, \quad (20)$$

де k винесено за знак інтегралу як величина, що мало змінюється. Після розкладання функції $\ln \left(1 + \frac{x}{2} \right)$ до шостого члену та інтегрування, вільна енергія буде мати вигляд:

$\frac{Vk}{6\pi^2} \frac{u \left(k_{z\max}^4 + \chi_{\max}^4 \right)^{1/2}}{u}$. Будемо далі складати вектор, спрямований по осі z $k_{z\max}^2$ з вектором χ^2 , який утворюється векторами k_x і k_y у площині. Звідси маємо хвильовий вектор K у просторі xyz , який дорівнює $K^4 = k_{z\max}^4 + \chi_{\max}^4$. Якщо вважати що $k = K = k_D$, то множник буде дорівнювати $\frac{Vk_D^3}{6\pi^2} = 3R$.

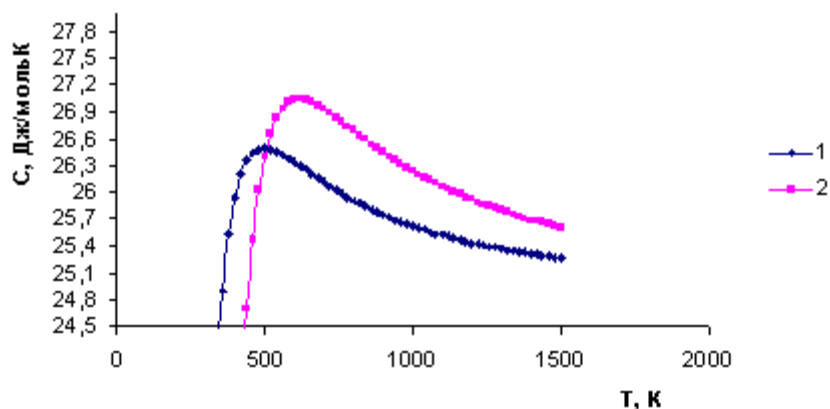


Рис. 1. Температурна залежність теплоємності квазікристалічної фази: 1 – ікосаедричної фази $\text{Al}_{63}\text{Cu}_{25}\text{Fe}_{12}$ сплаву Al–Cu–Fe; 2 – декагональної фази $\text{Al}_{69}\text{Co}_{21}\text{Ni}_{10}$ сплаву Al–Co–Ni.

IV. Аналіз отриманих результатів

З виразів (16) і (22) видно, що теплоємність декагональної та ікосаедричної квазікристалічних фаз при високих температурах буде перевищувати рівень Дюлонга-Пті $3R$ на відміну від кристалічних фаз. Цей результат підтверджують дослідження явища надлишкової теплоємності квазікристалічних фаз при високих температурах в роботах [1, 5, 6, 7]. Отже згідно закону Грюнейзена квазікристалічні фази мають більшу стійкість до температурної дії, ніж кристалічні. Температура Дебая згідно з [1, 12] для ікосаедричної фази $\text{Al}_{63}\text{Cu}_{25}\text{Fe}_{12}$ сплаву Al–Cu–Fe становить 510 K, а для декагональної фази $\text{Al}_{69}\text{Co}_{21}\text{Ni}_{10}$ сплаву Al–Co–Ni – 602 K. Температурна залежність для даних квазікристалічних фаз наведена на рис. 1.

З рисунку видно, що теплоємність квазікристалічних фаз перевищує рівень $3R$ і має максимуми при температурі 500 K – 26,5 Дж/моль·К для ікосаедричної фази і при температурі 620 K – 27,0 Дж/моль·К для декагональної фази. Далі теплоємність починає зменшуватись, але залишається підвищеною до температур ~ 1120 K для ікосаедричної фази і ~ 1500 K для декагональної фази. Відповідно декагональна квазікристалічна $\text{Al}_{69}\text{Co}_{21}\text{Ni}_{10}$ фаза залишається стабільною до більш високих температур, ніж ікосаедрична $\text{Al}_{63}\text{Cu}_{25}\text{Fe}_{12}$. Цей результат узгоджується з літературними даними. Отже композиційні матеріали з декагональними квазікристалічними сплавами-наповнювачами можна виготовляти при більш високих температурах, ніж з ікосаедричними квазікристалами. Тому використання декагональних квазікристалів є більш перспективним [13, 14].

На відміну від наведених в даній роботі результатів, в роботах [1, 5] теплоємність квазікристалічних фаз неперервно збільшується до

1300 K. Це може бути пов'язано з тим, що автори вимірювали теплоємність чистої квазікристалічної фази. Але у реальних структурах при високих температурах можливе виникнення дефектів квазікристалічної фази, як це описано в [15], або можливо квазікристалічна фаза перетворюється в кристалічні апроксиманти, що реалізуються при високих температурах [16, 17, 18]. Тому у зв'язку зі зменшенням кількості квазікристалічної фази починає знижуватися теплоємність структури.

Висновки

1. Структуру квазікристалічної фази можна розглядати в уявленні моделі анізотропних кристалів, згідно якої дисперсійний закон для кристалічної будови представляється як лінійний, а для квазікристалічної будови – як квадратичний. В підсумку отримано вирази для теплоємності квазікристалічних фаз при високих температурах, яка перевищує теплоємність кристалічної фази $3R$. Отже за допомогою моделі анізотропних кристалів можна пояснити явище надлишкової теплоємності квазікристалічних фаз.

2. За результатами розрахунків температурної залежності теплоємності квазікристалічних фаз видно, що теплоємність декагональної фази $\text{Al}_{69}\text{Co}_{21}\text{Ni}_{10}$ сплаву Al–Co–Ni має більший максимум і залишається надлишковою, тобто перевищує рівень Дюлонга-Пті, до більш високих температур, ніж ікосаедрична фаза $\text{Al}_{63}\text{Cu}_{25}\text{Fe}_{12}$ сплаву Al–Cu–Fe. Відповідно до закону Грюнейзена декагональна фаза більш стабільна при високих температурах.

Сироватко Ю.В. – к.ф.-м.н., спеціаліст-спектрометрист;
Левкович О.О. – к.ф.-м.н., доцент кафедри вищої математики.

- [1] O.F. Prekul, V.A. Kazantsev, N.I. Shchegolikhina, R.I. Guliaeva, L. Edagawa, *Physics of the Solid State* 50(11), 1933(2008).
- [2] O.V. Sukhova, Yu.V. Syrovatko, *Physics of Metals and Advanced Technologies* 41(9), 1171(2019) (<https://doi.org/10.15407/mfint.41.09.1171>).
- [3] B. Grushko, *Philos. Mag. Lett.* 66(3),151 (1992) (<https://doi.org/10.1080/09500839208229278>).
- [4] M. Zhu, G. Yang, and L. Yao, *J. Mater. Sci.* 45(14), 3727 (2010) (<https://doi.org/10.1007/s10853-010-4421-8>).
- [5] O.F. Prekul, N.I. Shchegolikhina, A.B. Gaiduchenko, K.I. Grushevsky, *Physics of the Solid State* 53(10), 1885 (2011).
- [6] K. Edagawa, K. Kajiyama, *Mater. Sci. Eng. A* 294–296, 646 (2000) ([https://doi.org/10.1016/S0921-5093\(00\)01132-1](https://doi.org/10.1016/S0921-5093(00)01132-1)).
- [7] D.A. Shulyatev, A.S. Nigmatulin, A.V. Lobanova, T.A. Gasparyan., *Philos. Mag. Lett.* 88, 2319 (2008). (<https://doi.org/10.1080/14786430801958372>).
- [8] L.D. Landau, E.M. Lifshits, *Statisticheskaya fizika* (Nauka, Moscow, 1976).
- [9] M. Feuerbacher, M. Bartsch, B. Grushko, U. Messerschmidt, K. Urban, *Philos. Mag. Lett.* 76(6), 369 (1997) (<https://doi.org/10.1080/095008397178788>).
- [10] Yu.Kh. Velikov, M.A. Chernikov, *Advances in Physical Sciences* 180(6), 561(2010) (<https://doi.org/10.3367/UFNr.0180.201006a.0561>).
- [11] Z.M. Stadnik, *Physical Properties of Quasicrystals* (Springer, Berlin, 1999).
- [12] M.A. Chernikov, *Advances in Physical Sciences* 175(4), 437(2005).
- [13] O.V. Sukhova, Yu.V. Syrovatko, *Visnik Dnipropetrovs'kogo Universitetu. Seria Fizika, radioelektronika*, 24(23), 53(2016).
- [14] O.V. Sukhova, Yu.V. Syrovatko, *Adgeziya rasplavov i payka materialov* 47, 58(2014).
- [15] Ye.V. Shalayeva, O.F. Prekul, *The Physics of Metals and Metallography* 109(4), 424(2010).
- [16] M. Audier, Y. Brechet, De.M. Boissieu, P. Guyot, *Phil. Mag. B.* 63, 1375 (1991) (<https://doi.org/10.1080/13642819108205568>).
- [17] M. Jono, Y. Matsuo, Y. Ishii, *Mater. Sci. Eng. A*, 294–296, 680 (2000) ([https://doi.org/10.1016/s0921-5093\(00\)01188-6](https://doi.org/10.1016/s0921-5093(00)01188-6)).
- [18] M. Doblinger, R. Wittmann, D. Gerthsen, *Phys. Rev. B.* 65(22), 201(2002) (<https://doi.org/10.1103/PhysRevB65.224201>).

Yu.V. Syrovatko¹, O.O. Levkovich²

Heat Capacity of Decagonal and Icosahedral Quasicrystalline Phases at High Temperatures

¹*Dnipropetrovsk Branch of the State Institution "Soil Protection Institute of Ukraine",*

Doslidne settlement, Dnipro Region, Ukraine, yu.syrovatko@gmail.com;

²*Prydniprovsk State Academy of Civil Engineering and Architecture, Dnipro, Ukraine, levk.olga77@gmail.com*

The paper deals with the patterns of quasicrystalline decagonal Al₆₉Co₂₁Ni₁₀ and icosahedral Al₆₃Cu₂₅Fe₁₂ phases from the standpoint of the model of anisotropic crystals. In the *xy* plane, the structure of quasicrystalline decagonal phase features the quasicrystalline pattern and the dispersive law is represented by a quadratic dependence. In contrast, the dispersive law is linear in the direction of *z* axis, because of crystalline pattern of the structure. The dispersive law for the icosahedral phase in all directions is represented by quadratic dependence, since the structure of this phase is isotropic one. After calculations it is found that heat capacity of quasicrystalline phases at high temperatures exceeds the level of 3*R*, i.e. the Dulong-Petit law is not complied with. Therefore, with the use of the model described in this paper we explain the previously established phenomenon of excessive heat capacity of quasicrystalline phases at high temperatures. It is also found that the heat capacity of the decagonal phase Al₆₉Co₂₁Ni₁₀ remains the excessive one to higher temperatures, compared to the icosahedral phase Al₆₃Cu₂₅Fe₁₂. According to the Gruneisen law, it indicates the greater stability of the decagonal phase at high temperatures.

Key words: quasicrystals, decagonal phase, icosahedral phase, dispersive law, anisotropy, isotropy, temperature heat capacity dependence, excessive heat capacity, the Dulong-Petit law.