

Ab initio расчеты колебательных спектров 1/1 аппроксиманта квазикристалла *i*-AlCuFe

© А.Н. Руденко, В.Г. Мазуренко

Уральский государственный технический университет (УПИ),
620002 Екатеринбург, Россия

E-mail: rudenko@dpt.ustu.ru

(Поступила в Редакцию 25 октября 2007 г.
В окончательной редакции 11 декабря 2007 г.)

С использованием метода псевдопотенциалов в рамках обобщенного градиентного приближения для описания электронных состояний и метода „замороженных фононов“ для расчета динамической матрицы вычислены парциальные и полная плотности колебательных состояний 1/1 кристаллического аппроксиманта икосаэдрического квазикристалла *i*-AlCuFe. Полученные результаты достаточно хорошо согласуются с экспериментальными данными по неупругому рассеянию нейтронов, что позволяет говорить об адекватности используемой расчетной схемы и возможности проведения аналогичных расчетов для других кристаллических аппроксимантов.

PACS: 61.44.Br, 63.20.-e, 07.05.Tr

1. Введение

Квазикристаллы — открытые около 20 лет назад сплавы металлических элементов, обладающие некристаллографической симметрией, но имеющие дальний порядок в расположении атомов [1,2]. Квазикристаллы стали объектами пристального внимания исследователей благодаря наличию у них ряда свойств, дающих перспективу широкого технологического применения. К таким свойствам относятся высокая твердость, низкий коэффициент трения, коррозионная стойкость, низкая теплопроводность и т.д. [2–4].

Ряд физических характеристик твердых тел, в частности квазикристаллов, зависит от особенностей их колебательных спектров: теплоемкость, тепловое расширение, теплопроводность и т.д. Это определяет актуальность изучения колебательных спектров квазикристаллов. Исследование особенностей колебательных спектров позволит прогнозировать ряд свойств квазикристаллов, понять физику процессов, происходящих в них, а также выявить условия их стабильности и образования.

Число работ, посвященных теоретическому исследованию колебательной динамики квазикристаллов, достаточно ограничено и в основном представлено рассмотрением двумерных квазикристаллов декагонального типа [5–7]. Экспериментальные исследования атомной динамики квазикристаллов проводились более широко. В частности, квазикристалл *i*-AlCuFe был исследован в работах [8,9], однако наиболее полное описание колебательных свойств было дано в работе [10]. В этой работе на основании экспериментальных данных по неупругому рассеянию нейтронов был получен не только полный колебательный спектр, но и парциальные спектры всех входящих в его состав элементов. Квазикристалл *i*-AlCuFe был исследован нами ранее [11] в рамках того же аппроксиманта, который используется в настоящей

работе. Однако в работе [11] была использована полупирическая модель межатомного взаимодействия, вопрос о допустимости которой в случае таких сложных систем, как аппроксиманты, ставится под сомнение. Кроме того, полученные результаты недостаточно хорошо воспроизводят экспериментальные данные и обладают низкой точностью.

Целью настоящей работы является применение *ab initio* методов, основанных на теории функционала электронной плотности, к расчету колебательных спектров кристаллического аппроксиманта квазикристалла *i*-AlCuFe, сравнение результатов с экспериментальными данными, выводы об адекватности используемых модельных представлений и расчетной схемы. Статья построена следующим образом. В разделе 2 приведены основные идеи метода „замороженных фононов“ для расчета колебательных спектров в гармоническом приближении. Раздел 3 посвящен апробации метода „замороженных фононов“ к расчету колебательных спектров чистых кристаллов ряда металлов: алюминия, меди, железа. В разделе 4 приведено описание структуры 1/1 аппроксиманта *i*-AlCuFe. В разделе 5 представлены результаты расчетов колебательных спектров аппроксиманта *i*-AlCuFe, сравнение результатов с экспериментальными данными и их обсуждение.

2. Методика расчета

В настоящее время среди *ab initio* методов исследования атомной динамики в гармоническом приближении могут быть выделены два метода: метод линейного отклика [12] и метод „замороженных фононов“ [13,14]. В основе обоих методов лежит теорема Геллманна–Фейнмана, одним из следствий которой является то, что при использовании плоских волн для разложения волновых функций сила, действующая на *l*-й ион в

основном электронном состоянии, имеет вид

$$\mathbf{F}_I = -\frac{\partial E_{\mathbf{R}}}{\partial \mathbf{R}_I} = -\left\langle \Psi_{\mathbf{R}} \left| \frac{\partial H_{\mathbf{R}}}{\partial \mathbf{R}_I} \right| \Psi_{\mathbf{R}} \right\rangle, \quad (1)$$

где $\Psi_{\mathbf{R}}$ — электронная волновая функция основного состояния системы, $H_{\mathbf{R}}$ — гамильтониан системы, $E_{\mathbf{R}}$ — собственное значение этого гамильтониана, а \mathbf{R}_I — координата I -иона.

Как известно, в гармоническом приближении проблема вычисления частот колебаний сводится к проблеме нахождения собственных значений динамической матрицы, которая является Фурье-образом матрицы силовых постоянных

$$\Phi_{\alpha\beta}(ij) = \frac{\partial^2 E}{\partial r_{i\alpha} \partial r_{j\beta}} \equiv -\frac{\partial F_{\alpha}(i)}{\partial r_{j\beta}}. \quad (2)$$

В методе линейного отклика данная матрица вычисляется аналитически, путем нахождения отклика электронной плотности на внешнее возмущение (отклонения атомов), что достигается посредством нахождения поправок к электронным волновым функциям с использованием теории возмущений.

В методе „замороженных фононов“ элементы матрицы силовых постоянных могут быть вычислены исходя из разницы сил, действующих на атомы. Эти силы, с одной стороны, вызваны конечными периодическими отклонениями, а с другой — силами в равновесном положении кристалла. В данном случае матрица вычисляется численно.

Основное преимущество метода „замороженных фононов“ заключается в том, что он не требует отдельного вычисления линейного отклика электронной плотности, что в случае систем с большим числом атомов в элементарной ячейке представляет собой трудоемкую задачу. К таким системам относятся и кристаллические аппроксиманты, исследуемые в настоящей работе.

В данной работе расчеты сил, действующих на атомы, были выполнены с использованием пакета Quantum-ESPRESSO [15], а расчеты динамической матрицы и частот колебаний — в пакете fpho [16].

3. Апробация расчетного метода

Для адекватного описания электронной и колебательной структуры квазикристаллов, в составе которых имеются металлы (в особенности переходные), целесообразно выбирать методы, которые демонстрируют хорошие результаты при описании свойств таких элементов в кристаллическом состоянии. К таким методам описания электронной структуры относится метод псевдопотенциала [17,18] в рамках обобщенного градиентного приближения [19]. Данный метод показывает хорошие результаты не только при описании электронной структуры металлов, но и при расчете колебательных свойств методом линейного отклика [20,21].

Расчетные параметры для алюминия, меди, железа: параметр решетки, число атомов в суперъячейке, величина отклонения атомов, предельная энергия плоских волн, сетка k -точек, параметр размытия в методе Метфесселя–Пакстона [25] для интегрирования по зоне Бриллюэна

Атом	a , Å*	Тип решетки	N_{at}	Δr , Å	E_{cut} , eV	k -точки	σ , eV
Al	4.04	ГЦК	27	0.14	400	$2 \times 2 \times 2$	0.6
Cu	3.61	ГЦК	27	0.09	400	$2 \times 2 \times 2$	0.3
Fe	2.87	ОЦК	27	0.08	400	$2 \times 2 \times 2$	0.7

* Данные [23].

Метод „замороженных фононов“ также ранее применялся для описания колебательных свойств чистых металлов [14,22], однако с использованием иных подходов для описания электронной структуры (модель почти свободных электронов, FP-LMTO и другие). В данном разделе метод „замороженных фононов“ в рамках псевдопотенциального подхода применен к расчету кристаллов элементов, составляющих исследуемый аппроксимант квазикристалла. В частности, изучены ГЦК-алюминий, ГЦК-медь, ОЦК-железо. Для всех элементов в качестве псевдопотенциалов мы использовали ультрамягкие псевдопотенциалы (US-PP) в рамках обобщенного градиентного приближения в параметризации Пердюю, Бурке, Эрнзерхофа [19].

3.1. ГЦК Al. Для выполнения расчетов мы выбрали суперъячейку, содержащую 27 атомов, построенную из ГЦК-решетки с параметром 4.04 Å [23]. Исходя из того что матрица силовых постоянных инвариантна относительно группы симметрии кристаллов, в случае выбранной ГЦК-суперъячейки достаточно задать смещение лишь одного атома в одном из направлений для того, чтобы рассчитать силы, действующие на атомы ячейки в неравновесном положении. Величина такого смещения в наших расчетах составляла 2–3% от параметра решетки. Так, для алюминия она выбиралась равной 0.14 Å. Основными параметрами для расчета электронной структуры являются максимальная энергия плоских волн, которая выбиралась равной 400 eV, сетка k -точек ($2 \times 2 \times 2$), сгенерированная по методу Монхорнста–Пака [24]. Эти и другие параметры приведены в таблице для трех рассматриваемых кристаллов.

Расчитанные дисперсионные кривые вдоль высоко-симметричных направлений зоны Бриллюэна и плотность колебательных состояний для кристаллов алюминия представлены на рис. 1. Из рисунка видно, что расчетные значения довольно хорошо воспроизводят экспериментальные данные по нейтронной дифракции при температуре 297 К. Расхождения наблюдаются вблизи границы зоны Бриллюэна, где имеется некоторая переоценка расчетных частот над экспериментальными данными. Такое расхождение можно объяснить пренебрежением нулевыми колебаниями и влиянием тепловых эффектов, которые могут приводить к расширению кристаллической решетки и, следовательно, к понижению

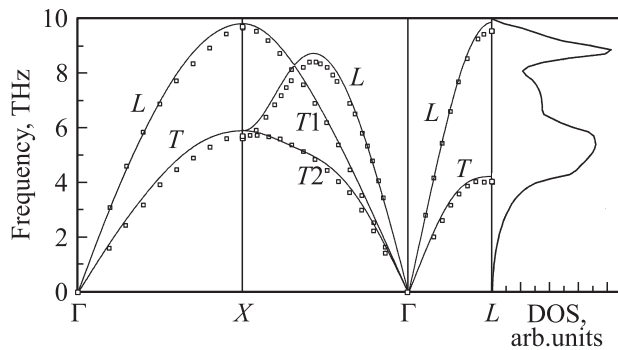


Рис. 1. Рассчитанные дисперсионные кривые для высокосимметричных направлений зоны Бриллюэна и плотность колебательных состояний в ГЦК-алюминии. Точки соответствуют экспериментальным значениям [23].

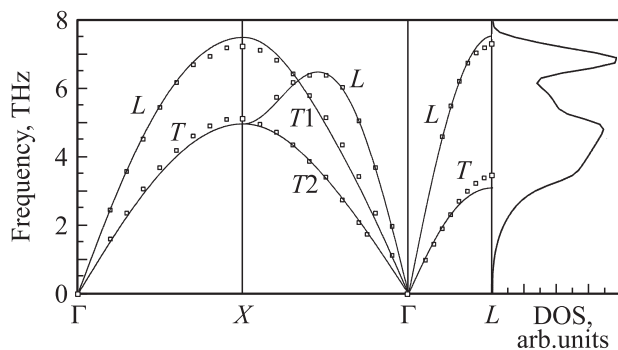


Рис. 2. То же, что на рис. 1, для ГЦК-меди. Точки соответствуют экспериментальным значениям [23].

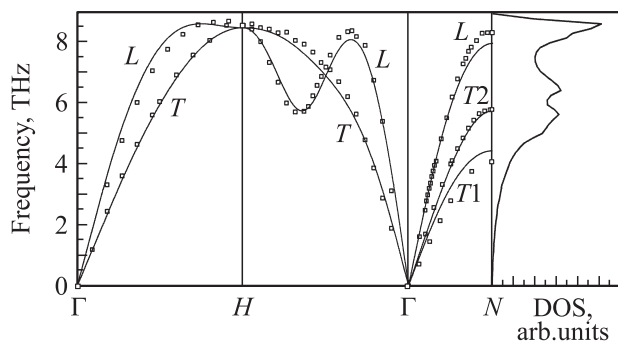


Рис. 3. То же, что на рис. 1, для ОЦК-железа. Точки соответствуют экспериментальным значениям [23].

частот колебаний, что также подтверждается рядом расчетов, выполненных в рамках теории линейного отклика [20,26].

3.2. ГЦК Cu. На рис. 2 приведены рассчитанные дисперсионные кривые и колебательный спектр ГЦК-меди. В силу того что ГЦК-медь обладает той же пространственной структурой, что и ГЦК-алюминий, колебательный спектр меди имеет те же особенности, что и спектр алюминия. Однако в связи с тем что масса атомов меди превышает массу атомов алюминия,

наблюдается смещение спектра в область низких частот. Спектр ГЦК-меди также демонстрирует хорошее согласие с экспериментом, однако в отличие от алюминия тенденция превышения расчетных частот над экспериментальными наблюдается не для всех ветвей колебаний. Так, расчетные значения поперечных (обозначены индексом T на рисунке) частот колебаний находятся на частотной шкале ниже экспериментальных данных. Продольные значения (индекс L на рисунке) частот, как и для алюминия, несколько больше экспериментальных. Однако такие отклонения нельзя назвать существенными, и в целом расчетные и экспериментальные спектры находятся в хорошем согласии друг с другом.

3.3. ОЦК Fe. На рис. 3 приведены дисперсионные кривые и плотность колебательных состояний для ОЦК-железа. В связи с тем, что железо имеет ОЦК-решетку, характер колебаний атомов железа отличается от колебаний атомов меди и алюминия. Расчетный и экспериментальный спектры также достаточно хорошо согласуются друг с другом.

Особенность, которую следует подчеркнуть при обсуждении колебательных спектров железа, заключается в том, что при проведении расчетов электронной структуры учитывались спин-поляризационные эффекты. Как показывают расчеты дисперсионных кривых ОЦК-железа, выполненные методом линейного отклика в рамках псевдопотенциальной схемы, игнорирование учета спин-поляризационных эффектов для железа приводит к ложным результатам для частот колебаний [21].

В целом, рассчитанные колебательные спектры алюминия, меди и железа хорошо согласуются с экспериментальными данными. Поэтому расчетную схему, в рамках которой проводился расчет, можно считать пригодной для воспроизведения экспериментальных колебательных спектров металлов. Существующие отклонения расчетных и экспериментальных значений незначительны и не превышают погрешности других расчетных *ab initio* методов (в частности, метода линейного отклика [20,21,26]).

4. Структура 1/1 аппроксиманта квазикристалла i -AlCuFe

Среди подходов к описанию структуры квазикристаллов можно выделить два основных метода: метод проектирования и кластерный метод. В методе проектирования квазикристаллическая структура является результатом проектирования шестимерной решетки на реальное пространство, иррациональным образом расположенное по отношению к исходной шестимерной решетке [27,28]. Кластерный подход заключается в заполнении пространства атомными конфигурациями, симметрия которых близка к икосаэдрической симметрии квазикристалла (кластеры Маккея и Бергмана [29,30]).

В настоящей работе была использована информация о структуре квазикристаллов, полученная методом про-

ектирования. Так, в качестве структуры квазикристалла *i*-AlCuFe использовали гипотетический 1/1 кубический аппроксимант состава $\text{Al}_{80}\text{Cu}_{32}\text{Fe}_{16}$, предложенный в [31]. В данной модели квазикристалл представляет собой периодическую структуру с кубической элементарной ячейкой, содержащей 128 атомов и имеющей параметр $a = 12.3 \text{ \AA}$. Геометрическое построение этой ячейки, обладающей икосаэдрической симметрией, осуществлялось на основе метода проектирования 6D-гранецентрированной кубической решетки на реальное пространство [32], а декорация полученной решетки атомами проводилась на основе экспериментальных данных по рентгеновской дифракции данного квазикристалла. Впоследствии мы выполнили структурную оптимизацию данного аппроксиманта *ab initio* методами, получив энергетически оптимальную конфигурацию. В качестве таких методов использовались те же методы, что и для расчета электронной структуры, описанного в разделе 2. Оптимизация структуры была проведена до достижения сил, действующих на атомы, меньших 0.01 eV/\AA .

Хотя в литературе описана структура реальных аппроксимантов исследуемого квазикристалла [33], структурные свойства которых наиболее приближены к квазикристаллам, в настоящей работе был использован гипотетический аппроксимант. Это связано, во-первых, с тем, что в элементарных ячейках реальных аппроксимантов количество атомов превышает количество атомов в используемом аппроксиманте, что является существенным барьером при проведении *ab initio* расчетов; во-вторых, для используемого аппроксиманта ранее были проведены расчеты атомной динамики (хотя и без учета релаксации) в рамках полуэмпирических моделей межатомного взаимодействия [11], сравнение с которыми также представляет интерес.

5. Результаты расчетов и их обсуждение

Расчеты проводили для 1/1 аппроксиманта квазикристалла *i*-AlCuFe, состоящего из 128 атомов и имеющего кубическую элементарную ячейку. Параметры электронных расчетов (максимальная энергия плоских волн, сетка k -точек, псевдопотенциалы) были выбраны так же, как и для чистых металлов. Величина отклонения атомов для расчета матрицы силовых постоянных выбиралась одинаковой для всех атомов в ячейке и составляла 0.05 \AA . В силу того что элементарная ячейка имеет пространственную группу симметрии $P2_13$, имеется всего 14 независимых атомов из 128, для которых необходимо произвести отклонения, чтобы вычислить матрицу силовых постоянных.

На рис. 4 приведены рассчитанная полная плотность колебательных состояний (ПКС) исследуемого аппроксиманта *i*-AlCuFe и ПКС, измеренная методом неупругого рассеяния нейтронов для квазикристалла *i*-AlCuFe. Как видно из этого рисунка, по сравнению с

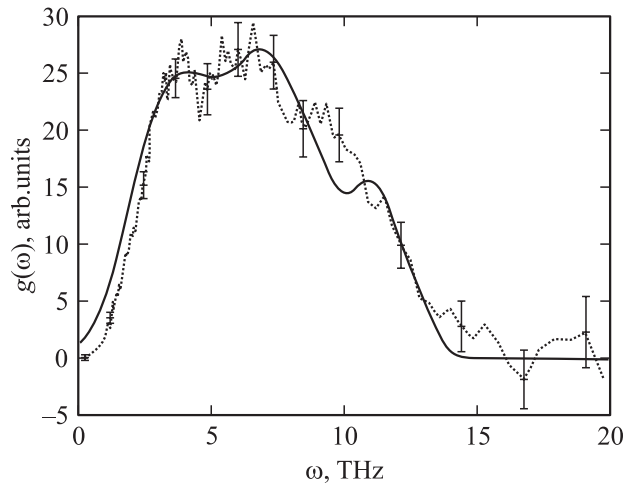


Рис. 4. Рассчитанные (сплошная линия) и экспериментальные [10] (пунктирная линия) полные ПКС для аппроксиманта квазикристалла *i*-AlCuFe и для квазикристалла *i*-AlCuFe соответственно. Вертикальными отрезками показана погрешность эксперимента.

ПКС чистого алюминия (рис. 1) спектр аппроксиманта существенно расширен вплоть до 15 ТГц (против 10 ТГц у алюминия) и не обладает выраженными максимумами, характерными для спектров кристаллов. Такое поведение скорее похоже на спектр аморфного вещества (см., например, спектр аморфного алюминия в [6]). Однако в отличие от спектра аморфного алюминия в спектре аппроксиманта квазикристалла *i*-AlCuFe имеются два небольших пика в области 4–7 ТГц и один пик в районе 11 ТГц. Первые два пика расчетного спектра можно обнаружить также и в экспериментальном спектре, хотя из-за большой погрешности эксперимента в этой области спектра данные пики менее заметны. Расчетный пик в области 11 ТГц не обнаруживается в экспериментальном спектре квазикристалла *i*-AlCuFe, однако его амплитуда не превышает ошибки эксперимента в этой области.

В целом можно говорить о достаточно хорошем согласии между расчетными ПКС для аппроксиманта *i*-AlCuFe и экспериментами ПКС для квазикристалла *i*-AlCuFe. Расхождения между спектрами наблюдается в низкочастотной области (до 3 ТГц), где расчетный спектр несколько превышает экспериментальный, и в области 10–11 ТГц в виде небольшого локального минимума, который выходит за рамки ошибки эксперимента. Такие расхождения также видны в расчетах, выполненных в рамках полуэмпирических моделей межатомного взаимодействия [11], что позволяет связывать причины таких расхождений со структурной моделью выбранного аппроксиманта. Вполне закономерно, что низкочастотные колебания, соответствующие длинным волнам недостаточно хорошо описываются в рамках выбранной модели, поскольку степень выбранного аппроксиманта является одной из наиболее низких (1/1). Это

соответствует малым размерам элементарной ячейки, выбранной для моделирования. Отклонения в области 10–12 THz можно объяснить не вполне корректным описанием межатомного взаимодействия, что в свою очередь также является следствием неполного структурного соответствия выбранного аппроксиманта и реального квазикристалла.

Для более полного анализа и сравнения с экспериментальными данными мы провели расчеты парциальных ПКС для атомов алюминия, меди и железа в аппроксиманте i -AlCuFe. Парциальные спектры рассчитывали путем проектирования всех колебательных состояний системы на состояния отдельных атомов

$$g(\omega) = \sum_{\mathbf{k}, \nu} |\mathbf{e}_{i,\mu}(\mathbf{k}, \nu)|^2 \delta(\omega - \omega(\mathbf{k}, \nu)), \quad (3)$$

где индексы i и μ соответствуют номеру атома и направлению его колебаний, а $\mathbf{e}_{i,\mu}(\mathbf{k}, \nu)$ — вектор поляризации (собственный вектор динамической матрицы).

На рис. 5 изображена парциальная ПКС алюминия в аппроксиманте (расчет) и в квазикристалле i -AlCuFe (эксперимент). Как и в случае полного спектра, между расчетными и экспериментальными данными наблюдается хорошее согласие, за исключением области длинноволновых (низкочастотных) колебаний, возможные причины расхождения в которой обсуждались выше. Сравнивая полную ПКС и парциальную ПКС алюминия, можно отметить, что основной вклад в полный колебательный спектр вносят именно атомы алюминия. Это неудивительно, поскольку алюминий является основным элементом в рассматриваемом соединении. Как можно видеть из рис. 6, 7, атомы меди и железа совершают колебания в довольно узких диапазонах частот, которые находятся в нижней области спектра. Частоты колебаний атомов меди ниже, чем у железа. Так, коле-

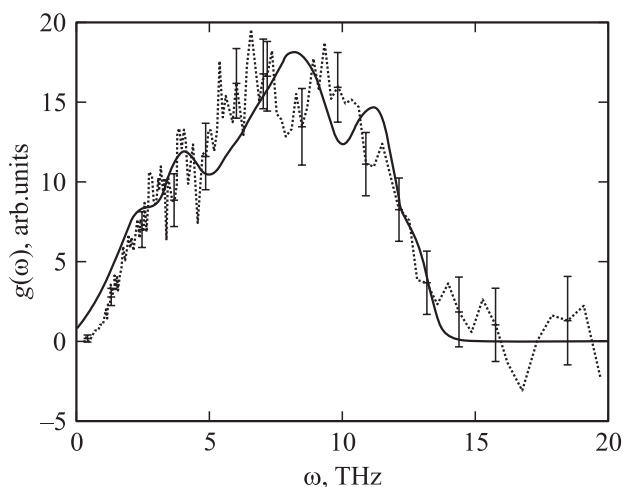


Рис. 5. Рассчитанные (сплошная линия) и экспериментальные [10] (пунктирная линия) парциальные ПКС алюминия для аппроксиманта квазикристалла i -AlCuFe и для квазикристалла i -AlCuFe соответственно. Вертикальными отрезками показана погрешность эксперимента.

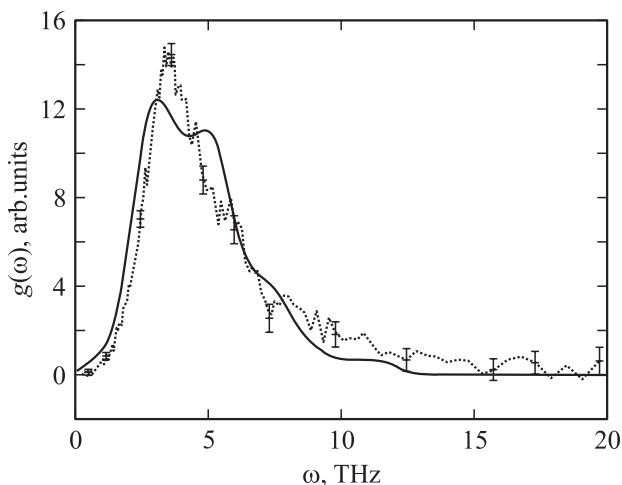


Рис. 6. То же, что на рис. 5, для ПКС меди.

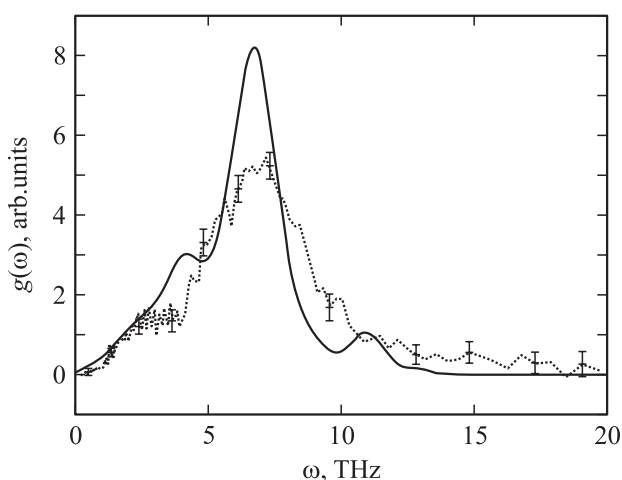


Рис. 7. То же, что на рис. 5, для ПКС железа.

бания атомов меди совершаются в области 3–6 THz ($\omega^{\text{Cu}}(g_{\text{max}}) \approx 4$ THz), а железа — в области 5–8 THz ($\omega^{\text{Fe}}(g_{\text{max}}) \approx 7$ THz). В целом расчетные парциальные спектры хорошо описывают экспериментальные результаты: особенно это касается основных пиков в спектрах меди и железа. Вид расчетных кривых все же несколько отличается от экспериментальных, что особо заметно при сравнении парциальных спектров железа. Расхождение снова можно объяснить низкой степенью аппроксимации квазикристалла при проведении расчетов, что особенно сказывается на колебательном поведении атомов железа, поскольку железо занимает лишь малую массовую долю в исследуемом квазикристалле.

Исходя из парциальных колебательных спектров можно предположить, что два пика в полном расчетном спектре аппроксиманта (как и в экспериментальном) в нижней области спектра (4–7 THz) соответствуют колебаниям атомов меди и железа. Наличие в нижней области колебательного спектра колебательных мод характерно и для других икосаэдрических квазикристаллов

и описанию в литературе. Так, в экспериментальной работе [34] по измерению колебательных спектров методом неупругого рассеяния нейтронов квазикристалла *i*-AlPdMn подобные пики были обнаружены в области 4–7.5 THz. В работе [35] по исследованию термодинамических свойств квазикристалла *i*-AlPdTe был отмечен широкий максимум в температурной зависимости теплоемкости, который не обнаруживается в теплоемкости кристаллического алюминия. По мнению авторов работы, такой максимум соответствует наличию в колебательном спектре квазикристалла колебательной моды в нижней области спектра (3–4 THz). Как было показано позднее в рамках полуэмпирических расчетов [36], экспериментальные низкочастотные пики в квазикристалле *i*-AlPdMn соответствуют колебаниям палладия и марганца.

Различие основных частот колебаний в парциальном спектре атомов меди и железа нельзя объяснить только различием атомных масс. Отношение частот колебаний составляет примерно $\frac{\omega_{\text{Fe}}}{\omega_{\text{Cu}}} \approx 1.75$, в то время как отличие корней масс составляет $\sqrt{\frac{m_{\text{Cu}}}{m_{\text{Fe}}}} \approx 1.06$. Такое различие вызвано тем, что атомы меди в квазикристалле в среднем связаны слабее, чем атомы железа. Причиной этого является то, что в квазикристалле *i*-AlCuFe (равно как и в аппроксиманте этого квазикристалла) атомы меди находятся в ином, по сравнению с железом, окружении и, следовательно, имеют другой набор силовых связей. Этот вопрос ранее уже детально обсуждался в литературе [37] и не требует, на наш взгляд, дополнительного анализа.

6. Заключение

Впервые на основании *ab initio* расчетов методом „замороженных фононов“ восстановлены колебательные спектры 1/1 аппроксиманта икосаэдрического квазикристалла *i*-AlCuFe. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными по неупругому рассеянию нейтронов и более точно воспроизводят экспериментальные спектры, чем полуэмпирические расчеты. Некоторые отклонения от экспериментальных данных обусловлены, на наш взгляд, гипотетическим характером используемого аппроксиманта и его малым порядком.

Можно выделить следующие особенности колебательного поведения атомов в квазикристалле (и его соответствующем аппроксиманте) *i*-AlCuFe.

1) Спектр квазикристалла существенно расширен в высокочастотную область по сравнению со спектрами чистых элементов и напоминает скорее спектр аморфных тел, чем кристаллов. Данное обстоятельство связано с колебанием атомов алюминия, а это в свою очередь определяется наиболее сильным взаимодействием атомов алюминия в квазикристалле [37], чем, например, в ГКЦ-алюминии.

2) В полном спектре присутствуют низкочастотные (в области 4–7 THz) колебательные моды, связанные с колебаниями атомов меди и железа. Данные особенности качественно определяют характер колебаний атомов не только в квазикристалле *i*-AlCuFe, но и в других икосаэдрических квазикристаллах [35,36].

Наличие качественного и количественного согласия между результатами настоящей работы, ряда других работ и экспериментальными данными позволяет говорить о корректности выбранных теоретических моделей и методов расчета. Так, метод „замороженных фононов“ наряду с подходом псевдопотенциалов показал свою адекватность при описании колебательных свойств не только кристаллов чистых металлов (алюминия, меди, железа), но и аппроксиманта квазикристалла *i*-AlCuFe и может быть использован для описания колебательных и термодинамических свойств других квазикристаллов.

Все расчеты были выполнены на компьютерном кластере „Университетского центра параллельных вычислений“ УГТУ-УПИ.

Авторы выражают благодарность Александру Иосифовичу Лихтенштейну за обсуждение вопросов, связанных с особенностями применения расчетного метода, а также компании Intel за финансовую поддержку в рамках академической программы.

Список литературы

- [1] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J.W. Cahn. Phys. Rev. Lett. **53**, 1951 (1984).
- [2] J.M. Dubois, J. Phys.: Cond. Matter **13**, 7753 (2001).
- [3] C. Mancinelli, C.J. Jenks, P.A. Thiel, A.J. Gellman. J. Mater. Res. **18**, 1447 (2003).
- [4] T.M. Tritt, M.L. Wilson, A.L. Johnson, S. LeGault, R. Stroud. Proc. of 16th Int. Conf. on Thermoelectrics (1997). P. 454.
- [5] C. Janot. Quasicrystals: a primer. 2 ed. Clarendon Press, Oxford (1994). 409 p.
- [6] H. Elhor. Dissertation. Technischen Universität Chemnitz, Fakultät für Naturwissenschaften (2003).
- [7] T. Janssen. Springer Ser. Mater. Sci. **55**, 423 (2000).
- [8] R.A. Brand, G. Coddens, A.I. Chumakov, Y. Calvayrac. Phys. Rev. B **59**, 14145 (1999).
- [9] R.A. Brand, J. Voss, Y. Calvayrac. J. Non-Cryst. Sol. **287**, 210 (2001).
- [10] П.П. Паршин, М.Г. Землянов, А.В. Машков, Р.А. Бранд, А.-Ж. Диано, И. Калвайрак. ФТТ **46**, 510 (2004).
- [11] А.Н. Руденко, В.Г. Мазуренко, А.Н. Кислов. ФТТ **49**, 342 (2007).
- [12] S. Baroni, S. de Gironcoli, A. Dal Corso, P. Piazzi. Rev. Mod. Phys. **73**, 515 (2001).
- [13] M.T. Yin, M.L. Cohen. Phys. Rev. B **26**, 3259 (1982).
- [14] С.А. Останин, Е.И. Саламатов, В.И. Кормилец. ФТТ **39**, 171 (1997).
- [15] S. Baroni, A. Dal Corso, S. de Gironcoli, P. Giannozzi, C. Cavazzoni, G. Ballabio, S. Scandolo, G. Chiarotti, P. Focher, A. Pasquarello, K. Laasonen, A. Trave, R. Car, N. Marzari, A. Kokalj. <http://www.pwscf.org/>.

- [16] A. Togo. fropho: frozen phonon. Analyzer for periodic boundary condition materials. <http://fropho.sourceforge.net/>.
- [17] D.R. Hamann, M. Schlüter, C. Chiang. Phys. Rev. Lett. **43**, 1494 (1979).
- [18] D. Vanderbilt. Phys. Rev. B **41**, 7892 (1990).
- [19] J. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).
- [20] S. de Gironcoli. Phys. Rev. B **51**, 6773 (1995).
- [21] A. Dal Corso, S. de Gironcoli. Phys. Rev. B **62**, 273 (2000).
- [22] Pui K. Lam, M. Cohen. Phys. Rev. B **25**, 6139 (1982).
- [23] Landolt-Börnstein. New Series. Metals: phonon states, electron states and surfaces. Group III. V. 13a / Eds K.H. Hellwege, J.L. Olsen. Springer, Berlin (1981).
- [24] H.J. Monkhorst, J.D. Pack. Phys. Rev. B **13**, 5188 (1976).
- [25] M. Methfessel, A.T. Paxton. Phys. Rev. B **40**, 3616 (1989).
- [26] Э.И. Исаев, А.И. Лихтенштейн, Ю.Х. Векилов, Е.А. Смирнова. ФТТ **46**, 1158 (2004).
- [27] M. Duneau, A. Katz. Phys. Rev. Lett. **54**, 2688 (1985).
- [28] V. Elser. Acta Cryst. A **42**, 36 (1986).
- [29] A.L. Mackay. Acta Cryst. **15**, 916 (1962).
- [30] G. Bergman, J.L.T. Waugh, L. Pauling. Acta Cryst. **10**, 254 (1957).
- [31] E. Cockayne, R. Phillips, X.B. Kan, S.C. Moss, J.L. Robertson, T. Ishimasa, M. Mori. J. Non-Cryst. Sol. **153–154**, 140 (1993).
- [32] M. Cornier-Quiquandon, A. Quivy, S. Lefebvre, E. Elkaim, G. Heger, A. Katz, D. Gratias. Phys. Rev. B **44**, 2071 (1991).
- [33] V. Simonet, F. Hippert, R.A. Brand, Y. Calvayrac, J. Rodriguez-Carvajal, A. Sadoc. Phys. Rev. B **72**, 024 214 (2005).
- [34] J.B. Suck. J. Non-Cryst. Sol. **156–158**, 872 (1993).
- [35] М.Н. Михеева, Г.Х. Панова, А.А. Теплов, М.Н. Хлопкин, Н.А. Черноплеков, А.А. Шиков. ФТТ **42**, 2113 (2000).
- [36] A.N. Rudenko, V.G. Mazurenko. Proc. of 12th Int. Conf. on Phonon scattering in condensed matter. Paris (2007). P. 62.
- [37] П.П. Паршин, М.Г. Землянов, Р.А. Бранд. ЖЭТФ **128**, 785 (2005).