

05,02

Ближний порядок и сингулярности электронной структуры икосаэдрических квазикристаллов

© А.Ф. Прекул, Н.И. Щеголихина

Институт физики металлов УрО РАН,
Екатеринбург, Россия

E-mail: prekul@imp.uran.ru

(Поступила в Редакцию 22 апреля 2013 г.)

Для икосаэдрических фаз системы Al–Cu–Fe впервые проведено совместное рассмотрение составляющих проводимости, магнитной восприимчивости, эффекта Холла и теплоемкости, связанных с термически индуцированными носителями заряда (ТИНЗ) в широкой области температур. Показано, что весь комплекс термических эффектов может быть понят в рамках единых представлений, основу которых составляет неоднородная система двухуровневых электронных возбуждений. Предлагается модель электронно-неоднородного состояния и механизм его формирования при доминирующей роли ближнего порядка.

Работа выполнена при поддержке программы фундаментальных исследований УрО РАН, проект № 12-У-2-1028.

1. Введение

На протяжении многих лет обсуждаются процессы, формирующие электронный спектр стабильных икосаэдрических (*i*-) фаз в сплавах на основе алюминия с переходными металлами. Решеточная структура этих фаз основана на икосаэдре — многограннике, имеющем симметрию пятого порядка и не могущем служить элементарной ячейкой периодического кристалла. Очевидно, что минимизация свободной энергии при формировании термодинамически устойчивых *i*-фаз может достигаться исключительно благодаря выигрышу в кинетической энергии свободных носителей. Не случайно поэтому, внимание исследователей привлек тот факт, что при формировании *i*-фаз наблюдается глубокое редуцирование металлических свойств.

От типичных металлов *i*-фазы отличаются количественно и качественно. Основное количественное отличие состоит в том, что эти фазы обладают аномально малой ($\sim 10^{20} \text{ cm}^{-3}$) концентрацией носителей заряда в пределе низких температур, т.е. средняя по сплаву валентность при низких температурах $e/a \sim 10^{-3}$. Как следствие, *i*-фазы обладают малой, но конечной ($\sim 100 \Omega^{-1} \text{ cm}^{-1}$) металлоподобной проводимостью, малыми величинами паулиевской восприимчивости и электронной теплоемкости свободных носителей. Эти отличия нашли свое отражение в гипотезе псевдощели, как электронно-стабилизирующем факторе квазирешетки. Из экспериментов по фотоэлектронной спектроскопии псевдощель, если она есть, имеет ширину $\sim 1 \text{ eV}$.

Основные качественные отличия обусловлены ярко выраженным непостоянством числа носителей заряда при конечных температурах. Концентрация термически индуцированных носителей заряда (ТИНЗ) возрастает с температурой весьма интенсивно. При 1000 К она лишь немногим отличается от атомной плотности ве-

щества, т.е. средняя по сплаву валентность при высоких температурах $e/a \sim 1$. Как следствие, с ростом температуры наблюдаются мощный рост проводимости (отрицательный ТКС) и мощный рост парамагнетизма. По амплитуде эти термические эффекты многократно превышают соответствующие параметры металлоподобных носителей основного состояния.

Давно замечено, что качественные отличия плохо согласуются с гипотезой псевдощели. Ширина псевдощели слишком велика, чтобы быть источником столь мощных температурных эффектов. Возникли предположения, что в окрестности уровня Ферми квазикристаллов имеются сингулярности иного рода, с которыми собственно и связаны термические эффекты. Это либо тонкая структура плотности состояний полосы проводимости, либо — локализованные состояния. Эмпирические аппроксимации температурных кривых различными функциями не помогли решению этой дилеммы. Выявились два отягчающих обстоятельства. Во-первых, нельзя отдать предпочтения степенным либо показательным функциям и, во-вторых, экспериментальные кривые аппроксимируются этими функциями по частям. Выяснение природы этих закономерностей представлялось важной вехой в дальнейшем развитии эксперимента [1,2,3].

Несколько лет назад нами были предприняты систематические исследования удельной теплоемкости икосаэдрических квазикристаллов системы Al–Cu–Fe. Целью этих экспериментов было проверить, исчерпывается ли электронная теплоемкость квазикристаллов линейным по температуре вкладом металлоподобных носителей основного состояния, или же с ТИНЗ связан свой особый вклад. Результаты отдельных этапов в развитии эксперимента публиковались в работах [4–9]. Здесь мы попытаемся обобщить достигнутое и оценить, что нового оно привносит в решение проблемы сингулярных электронных состояний.

2. Свойства электронной теплоемкости

Очевидно, что если теплоемкость сингулярных электронных возбуждений существует, то она будет проявляться как теплоемкость, избыточная относительно суммы решеточной теплоемкости C_{lat} и металлоподобной (metal-like) теплоемкости электронов проводимости основного состояния $C_{ml} = \gamma T$, где γ — коэффициент Зоммерфельда, т. е.

$$C_{sing} = C_{total} - C_{lat} - C_{ml}. \quad (1)$$

В качестве объектов исследования были выбраны *i*-фазы $Al_{63}Cu_{25}Fe_{12}$ и $Al_{62}Cu_{25.5}Fe_{12.5}$. На первом этапе измерения теплоемкости и коэффициента теплового расширения, что необходимо для перевода C_p в C_v , были выполнены в интервале температур 1.5–400 К. Это — хорошо изученная область, где наблюдается заметный рост проводимости (отрицательный ТКС) и рост парамагнетизма и где, следовательно, сингулярный вклад мог себя проявить. Как выяснилось, учет C_{lat} в приближении модели Дебая приводит к очень сильной зависимости конечного результата от модельных предположений. Чтобы избежать этой трудности, вклад C_{lat} был определен нами в приближении эмпирического закона Грюнайзена, устанавливающего линейную связь решеточной теплоемкости с коэффициентом линейного расширения. Подробности можно найти в [5,6].

Результат оказался ошеломляющим в двух отношениях. Избыточная теплоемкость оказалась кривой с максимумом (рис. 1), которая прекрасно аппроксимируется функцией Шоттки в простейшем случае двухуровневых возбуждений. На рис. 1 это показано сплошной линией. С другой стороны, избыточная теплоемкость практически исчезает вблизи комнатной температуры, тогда как сингулярные термические эффекты в проводимости и в парамагнетизме продолжают усиливаться с ростом температуры вплоть до 1000–1200 К [2].

Потребовалось распространить калориметрический эксперимент на область высоких температур 300–1000 К, чтобы прояснить ситуацию. Оказалось, что избыточная теплоемкость вновь возрождается. Наглядно это проявляется в том, что полная теплоемкость C_{total} при высоких температурах заметно превышает предел Дюлонга–Пти. Избыточная теплоемкость в этом интервале температур определена нами, по-существу, относительно этого предела. Асимптотическое приближение к этому пределу вполне может быть учтено в модели Дебая. Так и было сделано. Подробности можно найти в [4,7].

В результате выявилась своеобразная картина. Кривая высокотемпературной избыточной теплоемкости, см. рис. 1, довольно быстро возрастает от 400 К, имеет точку перегиба в районе 750 К, затем рост продолжается замедленно до границы эксперимента 920 К. Определившийся в эксперименте участок кривой внешне напоминает восходящую ветвь тепловой аномалии Шоттки, но дальнейший ход кривой не ясен [8].

Дальнейшие измерения теплоемкости были проведены нами вплоть до области 1650 К, что значительно пре-

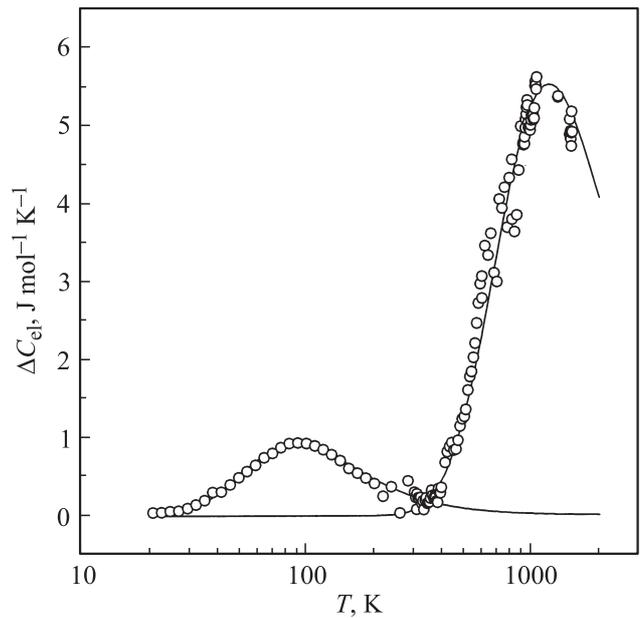


Рис. 1. Температурная зависимость электронной теплоемкости квазикристаллического сплава $Al_{63}Cu_{25}Fe_{12}$, избыточной относительно металлического вклада Зоммерфельда. Сплошными линиями показана аппроксимация кривой двумя вкладами Шоттки с энергиями возбуждения 0.02 и 0.25 eV соответственно.

вышает температуру плавления вещества (1280 К). Причина этого в том, что плавлению предшествуют твердофазные структурные превращения. Эндотермические эффекты этих превращений в интервале 1100–1280 К настолько сильны, что поведение „основной линии“ („base line“) собственно теплоемкости вещества в границах твердого состояния становится неопределенным. Распространение эксперимента далеко в область расплавов показало, что избыточная теплоемкость в расплавах является падающей функцией температуры, т. е. кривая избыточной теплоемкости имеет максимум и внешне подобна аномалии Шоттки. Аппроксимация по Шоттки интервала 400–1650 К также показана на рис. 1 сплошной линией. Она вполне удовлетворительная. Подробности эксперимента и анализа результатов можно найти в [7,9].

Результаты всех этапов калориметрического эксперимента впервые соединены здесь на рис. 1. Итоговая кривая является двугорбой, но вряд ли она является непрерывной функцией температуры. Скорее всего, она состоит из двух функционально подобных, но не взаимосвязанных частей, сумму которых можно аппроксимировать двумя вкладами типа Шоттки [10] в виде

$$C = N_1 k_B \frac{\left(\frac{\delta E_1}{k_B T}\right)^2 \exp\left(\frac{\delta E_1}{k_B T}\right)}{\left(1 + \exp\left(\frac{\delta E_1}{k_B T}\right)\right)^2} + N_2 k_B \frac{\left(\frac{\delta E_2}{k_B T}\right)^2 \exp\left(\frac{\delta E_2}{k_B T}\right)}{\left(1 + \exp\left(\frac{\delta E_2}{k_B T}\right)\right)^2} \quad (2)$$

с энергиями возбуждения $\delta E_1 = 0.02$ eV, $\delta E_2 = 0.25$ eV соответственно. Благодаря заметному различию энергий

возбуждения, вклады практически не перекрываются в области комнатной температуры, чем и объясняется наблюдавшееся нами исчезновение избыточной теплоемкости.

В итоге получается, что электронная теплоемкость квазикристаллов не исчерпывается линейным по температуре вкладом металлоподобных носителей основного состояния. Существует сложный, осциллирующий по температуре вклад, который может быть представлен последовательностью двух аномалий Шоттки. Соответственно получается, что помимо континуальных возбуждений существуют два типа пороговых двухуровневых возбуждений. Понятно, что если эти возбуждения определяют поведение температурно-зависимых составляющих проводимости и магнитной восприимчивости, то аппроксимировать их однородными функциями вряд ли возможно.

3. Корреляции между избыточной теплоемкостью и другими термическими эффектами

Теплоемкость, как известно, отражает скорость изменения внутренней энергии системы и, соответственно, числа элементарных возбуждений с изменением температуры. Поэтому в процессе каждого этапа исследования мы отслеживали поведение величин, которые могут находиться в линейной связи с концентрацией элементарных возбуждений. Это — приращение средней энергии системы ΔU , приращение проводимости $\Delta\sigma$, магнитного параметра $\Delta(\chi T)$ и приращение обратного эффекта Холла $\Delta(1/R_H)$ в заданном интервале температур. Каждый раз мы убеждались в хорошо скоординированном поведении этих характеристик, что свидетельствовало об их взаимосвязи [8,9,11]. С построением полной картины избыточной теплоемкости и ее аппроксимации двумя аномалиями Шоттки, возникла уникальная возможность продемонстрировать и саму взаимосвязь и ее физический смысл.

Мы провели сравнительный анализ всех перечисленных выше характеристик во всей области температур существования однородной i -фазы. На рис. 2 показан пример того, как выглядят температурные составляющие проводимости, магнитной восприимчивости и сингулярной части внутренней энергии $U(T)$. Последняя получена численным интегрированием экспериментальной кривой $C_{\text{sing}}(T)$. Визуально можно говорить о внешнем сходстве кривых, но трудно говорить об их тождественности. Зависимость $U(T)$ отличается явными признаками знакопеременной кривизны и источник этого понятен. Коль скоро C_{sing} , согласно формуле (2), состоит из двух функционально подобных частей, значит температурная зависимость числа сингулярных возбуждений также состоит из двух функционально подобных вкладов в виде

$$N = \frac{N_1}{1 + \exp\left(\frac{\delta E_1}{k_B T}\right)} + \frac{N_2}{1 + \exp\left(\frac{\delta E_2}{k_B T}\right)}. \quad (3)$$

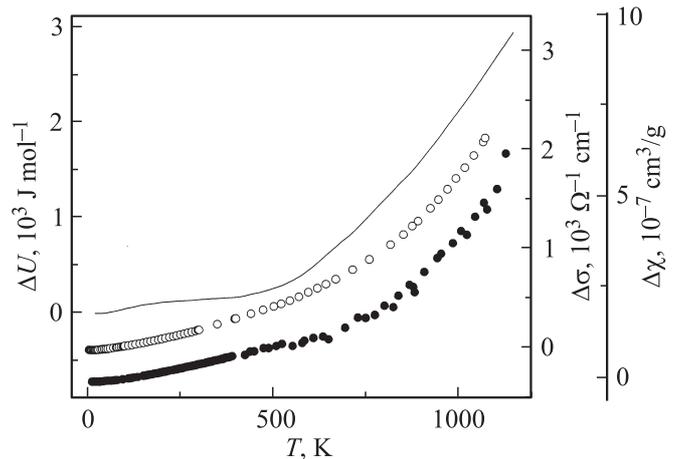


Рис. 2. Кривые термически индуцированных приращений проводимости $\Delta\sigma$ (светлые кружки), парамагнитной восприимчивости $\Delta\chi$ (темные кружки) и внутренней энергии ΔU (сплошная линия) икосаэдрической фазы $\text{Al}_{63}\text{Cu}_{25}\text{Fe}_{12}$ в интервале 1.8–1000 К.

Чтобы убедиться в этом, как оказалось, не обязательно знать каждый вклад в отдельности. Достаточно представить суммарную кривую $\Delta U(T)$ в координатах $\ln \Delta U(T)$ от T^{-1} , как это показано на рис. 3, *a* для i -фазы $\text{Al}_{63}\text{Cu}_{25}\text{Fe}_{12}$. Наличие двух активационных режимов проявляется в наличии двух линейаризованных участков.

Если теперь в таких же координатах отразить температурно-зависимые составляющие проводимости, магнитной восприимчивости и обратного эффекта Холла, где разделение вкладов произвести весьма проблематично, то, как видно из рис. 3, *b, c, d*, возникают картины, тождественные рис. 3, *a*. Ясно, что не только теплоемкость, но и проводимость, и магнитная восприимчивость, и эффект Холла квазикристаллов зависят от нескольких активационных вкладов с различными энергиями пороговых возбуждений.

4. Обсуждение результатов анализа

В рамках традиционного понимания тепловых аномалий Шоттки активационный характер элементарных возбуждений означает, что сингулярные состояния являются локализованными. Это соответствует одному из обсуждаемых в литературе предположений, но, как оказалось, таит в себе ряд неожиданностей.

Обнаружившаяся на опыте последовательность тепловых аномалий и смена режимов термической активации носителей свидетельствуют о наличии нескольких генераций локализованных состояний. С другой стороны, энергия пороговых возбуждений из описания низкотемпературной части избыточной теплоемкости $\delta E_1 \sim 0.02 \text{ eV}$ [5], из описания высокотемпературной части избыточной теплоемкости $\delta E_2 \sim 0.25 \text{ eV}$ [8]. Ширина псевдощели из фотоэлектронной спектроскопии, как отмечалось выше, $\sim 1 \text{ eV}$. Энергия Ферми остаточ-

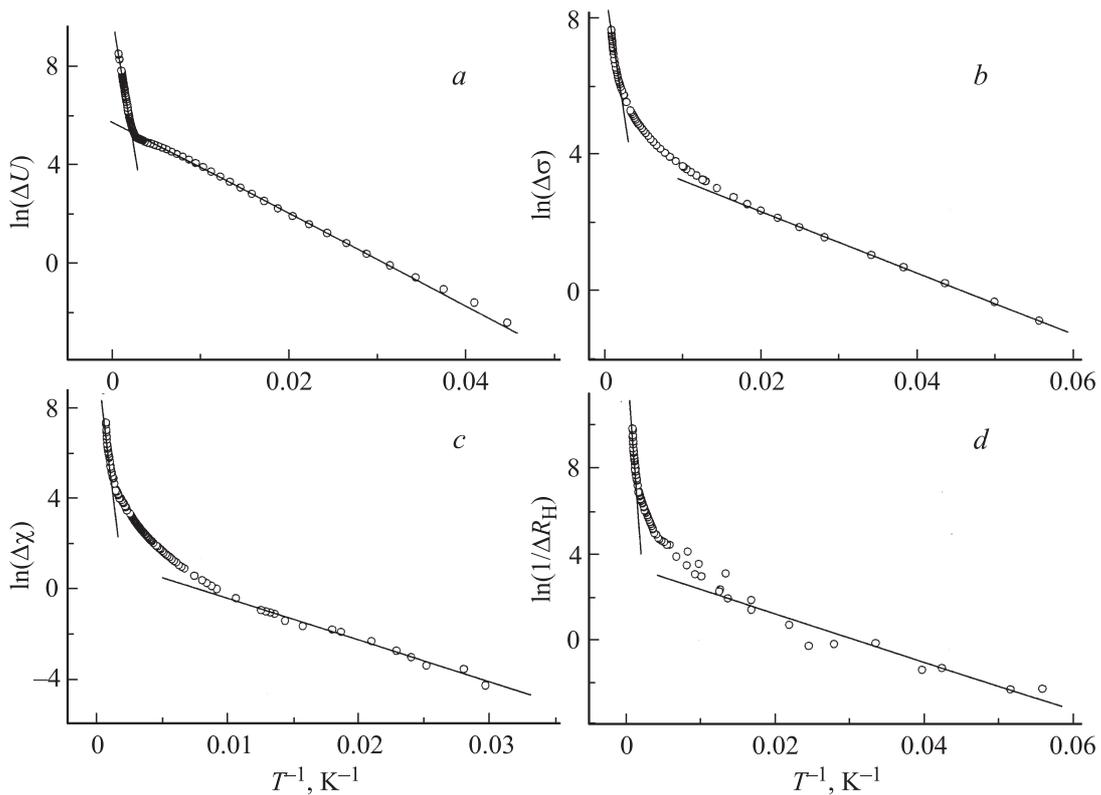


Рис. 3. Иллюстрация смены режимов термической активации в тепловых, электрических, магнитных и гальваномагнитных свойствах икосаэдрической фазы $\text{Al}_{63}\text{Cu}_{25}\text{Fe}_{12}$.

ных металлоподобных носителей в приближении свободных электронов и квадратичного закона дисперсии при концентрации носителей 10^{20} cm^{-3} , $E_F \sim 0.3 \text{ eV}$ [2]. Нетрудно заметить, что локализованные состояния, если они есть, совпадают по энергии с континуумом остаточных носителей. В рамках моделей однородной локализации такое совпадение невозможно [12]. Стало быть, в квазикристаллах мы имеем дело с разновидностью электронно-неоднородных систем с двояким проявлением неоднородности — в виде нескольких генераций локализованных состояний и в виде сосуществования распространенных и локализованных состояний при одинаковых энергиях.

Исходя из различных аспектов кристаллического строения, в квазикристаллах обсуждаются три сценария редуцирования металлических свойств. С одной стороны, квазирешетка не имеет дальнего периодического порядка в расположении атомов. В общем случае это означает, что квазикристаллы это неупорядоченные системы, где существенную роль в редуцировании металлических свойств может играть андерсоновская локализация [13]. С другой стороны, квазикристаллы обладают дальним аперiodическим порядком. Их можно рассматривать как предельный случай фаз Юм–Розери, когда все волновые векторы идеальной квазирешетки являются векторами отражения. На уровне Ферми в идеале формируется щель, в реальности — псевдощель [14]. Наконец, квазикристаллы обладают икосаэдрическим ближним порядком.

Редуцирование металлических свойств может быть связано с локализацией изначально валентных электронов путем обменного спаривания электронов при формировании химически насыщенных (ковалентных) связей [1,15,16].

Результаты многочисленных экспериментов по влиянию структурного совершенства квазирешетки на электрические свойства квазикристаллов [2 и ссылки здесь] позволяют исключить беспорядок и механизм андерсоновской локализации. Аргументация довольно проста. Структурный беспорядок оказывает на проводимость квазикристаллов эффект, обратный механизму Андерсона. Икосаэдрический дальний порядок и механизм Юм–Розери–Джонса (касание поверхностью Ферми границ зоны Бриллюэна) можно исключить на основании того факта, что сингулярные термические эффекты наблюдаются при температурах, существенно выше точки плавления вещества [7,9]. Этот же факт одновременно означает, что структурообразующим фактором сингулярных эффектов является ближний порядок в пространственном расположении атомов.

Таким образом, из перечисленных сценариев, локализация путем обменного спаривания, которую справедливо было бы назвать не рекуррентной [15] и не химической [16], а локализацией по Гайтлеру–Лондону (ГЛ), авторам первой квантово-механической теории ковалентного связывания [17], представляется единственно возможной. Согласно общим положениям, она эффек-

тивна в распадающихся сплавах, где состояние однородного трехмерного металла при полной коллективизации валентных электронов является абсолютно неустойчивым. Промежуточные стабильные/метастабильные состояния возникают потому, что формируются устойчивые атомные конфигурации. Они играют роль электронных ловушек, понижающих внутреннюю энергию системы и являющихся, в конечном счете, электронно-стабилизирующим фактором.

Согласно [1,15,16], устойчивыми конфигурациями в квазикристаллических сплавах являются многоатомные кластеры типа макромолекул с замкнутыми электронными оболочками. В связи с новыми экспериментальными наблюдениями по теплоемкости можно предположить, однако, что определяющую роль в понижении энергии играют не макромолекулы, а парные межатомные взаимодействия. В этом случае систему нетрудно сделать электронно-неоднородной в означенном выше смысле.

Действительно, в условиях абсолютной неустойчивости, сколь угодно слабые обменные взаимодействия могут оказаться сильными, и может возникнуть несколько типов обменно-связанных электронных пар, различающихся энергией расщепления симметричных и антисимметричных состояний (ГЛ-дуплеты). Если суммарным результатом таких „спариваний“ явится глобальное понижение энергии системы в целом, химический потенциал системы, очевидно, зафиксируется в центре ГЛ-дуплетов и все обменно-связанные пары, в том числе со сколь угодно малой энергией связи, будут устойчивыми и эффективно действующими элементами электронной структуры во всем интервале температур существования ближнего порядка.

Далее, максимально возможный выигрыш энергии достигается, очевидно, когда все валентные электроны являются связанными. Для обеспечения термодинамической устойчивости системы в этом, по-видимому, нет необходимости. Достаточно, если часть валентных электронов локализуется. Оставшаяся часть может находиться в редуцированной полосе проводимости. Принципиально важно то, что электроны образовавшихся обменно-связанных электронных пар не могут вступать в отношения гибридизации с электронами редуцированной полосы проводимости [17]. Это обеспечивает сосуществование распространенных и локализованных состояний при одинаковых энергиях.

Феноменологическая модель электронной структуры, соответствующая экспериментальной ситуации в *i*-фазах Al–Cu–Fe, схематически показана на рис. 4 сплошными линиями. Она содержит полосу проводимости с псевдощелью и два дуплета дискретных/квазидискретных состояний. В общем случае, очевидно, количество дуплетов может быть иным и глубина псевдощели может быть различной. На схеме это отражено пунктиром.

Чтобы оценить физические свойства и возможности этой модели рассмотрим влияние температуры и структурных несовершенств.

Что касается термических воздействий, то для начала надо определиться в вопросе о том, в какие состояния

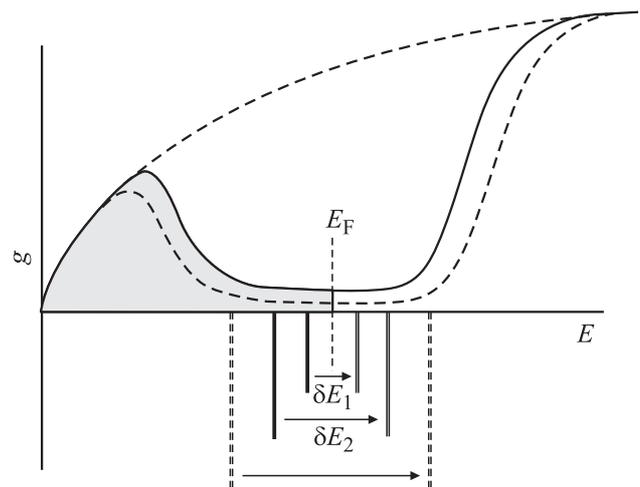


Рис. 4. Модель электронной структуры. Схематически показано наложение двух типов спектров — непрерывного с псевдощелью и дискретного/квазидискретного с несколькими типами двухуровневых состояний. Уровень Ферми фиксирован в центре наименьшей щели, разделяющей симметричные и антисимметричные состояния.

падают ГИНЗ в процессе возбуждения. Для этого существуют две возможности. Электроны симметричных состояний ГЛ-дуплетов могут возбуждаться либо в антисимметричные состояния, либо в редуцированную полосу проводимости. Коль скоро электронно-стабилизирующим фактором являются ГЛ-состояния, возбуждение электронов из этих состояний в область континуума означает дестабилизацию структуры ближнего порядка и, стало быть, квазикристаллической структуры в целом. Радикальный способ избежать этого, предположить, что термически возбужденные электроны переходят в антисимметричные состояния дуплетов.

Сингулярная теплоемкость и сингулярный парамагнетизм являются тривиальными следствиями таких „внутридуплетных“ переходов. Их понимание не предполагает ничего нового. Достаточно помнить, что симметричное/основное состояние каждого дуплета является диамагнитным. Антисимметричное/возбужденное состояние каждого дуплета является парамагнитным. Все остальное определяется заселенностью состояний по формуле (3). Иное дело „сингулярная“ проводимость. Речь идет о проводимости по возбужденным состояниям дуплетов. Это прыжки, либо туннелирование. Теоретического обоснования в литературе мы не нашли, так что вопрос открыт. С экспериментальной точки зрения, никаких трудностей в обосновании такой проводимости нет. Если проводимость такого рода существует, она должна проявляться как аддитивная компонента к проводимости остаточных носителей σ_{ml} . Это следствие подтверждается эмпирической закономерностью, известной с начала 90-х годов, которая до сих пор не была востребована и не имела удовлетворительного объяснения. Мы имеем в виду так называемое „обратное правило Маттиссена“ [18]. Согласно этому правилу, электронный

транспорт в квазикристаллах определяется аддитивными вкладками в проводимость, а не в сопротивление, как в металлах.

Что касается влияния структурных дефектов, то, как уже отмечалось, их наличие усиливает металлоподобную компоненту проводимости σ_{ml} . Концентрация свободных носителей при этом также растет. Казалось бы можно просто объяснить это разрушением „связанных“ состояний, какова бы ни была их природа. Освободившиеся электроны поступают в полосу проводимости с очевидными последствиями для величины σ_{ml} . Из опыта известно, однако, что структурный беспорядок вызывает не только усиление проводимости и рост числа свободных носителей. Возникает низкотемпературный парамагнетизм, свидетельствующий о наличии в дефектах локальных магнитных моментов [2 и ссылки здесь]. Возникают дилатационные эффекты, знак которых зависит от знака остаточных носителей [19], что свидетельствует о наличии в дефектах избыточного заряда. Наконец, структурно-индуцированные изменения концентрации локальных моментов и проводимости находятся в линейной связи между собой [20].

Очевидно, что дело не в разрушении „связанных“ состояний. В случае, если структурообразующим фактором совершенных икосаэдрических квазикристаллов является межуатомная связь с насыщенной валентностью, имеется другая возможность. Можно предположить, что структурное несовершенство означает, что некоторые связи становятся не насыщенными. Предельный случай ненасыщенной связи это „оборванная связь“, когда сама связь не разрушается, но один из спаренных электронов теряется. Этот электрон, в отличие от термически возбужденного электрона, должен уйти в полосу проводимости, пополнить ее и увеличить σ_{ml} . В дефекте при этом изменяется и спиновое и зарядовое состояния. Одновременность событий порождает весь комплекс структурно-индуцированных эффектов и линейную связь между концентрацией локальных моментов и величиной остаточной проводимости.

Таким образом, механизм ГЛ-локализации позволяет понять термически-индуцированные и структурно-индуцированные эффекты во всем их многообразии.

Обобщая сказанное, схему формирования электронных свойств в квазикристаллах можно представить в следующем виде

$$\begin{aligned} C_{el} &= C_{ml} + C_{sing1} + C_{sing2} + \dots; \\ \chi &= \chi_{ml} + \chi_{sing1} + \chi_{sing2} + \dots; \\ \sigma &= \sigma_{ml} + \sigma_{sing1} + \sigma_{sing2} + \dots, \end{aligned} \quad (4)$$

распространив принцип аддитивности на все характеристики. Электронно-неоднородное состояние квазикристалла можно представить набором электронных подрешеток. Одна из них образована распространенными состояниями, другая локализованными ГЛ-парам с характерной энергией возбужденная δE_1 , третья локализованными ГЛ-парам с характерной энергией возбуждения

δE_2 и т.д. Каждая из подрешеток автономно участвует в суммарной картине свойств.

Последнее обстоятельство, как это ни странно, существенно расширяет возможности модели. Это видно на простом примере. Если мысленно убрать металлическую подрешетку, либо пренебречь ее влиянием, то система окажется узкощелевым полупроводником, проявляющим весь комплекс рассмотренных выше сингулярных термических эффектов как это, к примеру, имеет место в кондо-изоляторах [21]. Подобное рассмотрение этой и других возможностей модели выходит за рамки настоящего сообщения и будет сделано в другом месте.

5. Заключение

Целью данной работы было оценить, что нового привносят calorиметрические эксперименты в решение проблемы сингулярных электронных состояний в квазикристаллах. В рамках традиционного понимания тепловых аномалий Шоттки определенно можно сказать, что сингулярные электронные состояния являются источником локальных „двухуровневых“ возбуждений. Определенно можно сказать, что система этих возбуждений не является однородной. Наконец, определенно можно сказать, что сингулярные электронные состояния могут сосуществовать с континуальными состояниями полосы проводимости. В предположении, что структурообразующим фактором сингулярных состояний является ближний порядок и механизмом их формирования является обменное спаривание валентных электронов ближайших соседей, перечень характеристических черт сингулярных состояний можно пополнить оценкой их пространственной протяженности. Длина локализации по порядку величины должна быть сопоставима с межуатомным расстоянием, т.е. ~ 0.5 nm.

Таковы в общих чертах последствия обнаружения избыточной электронной теплоемкости в квазикристаллах.

Авторы выражают благодарность М.И. Куркину за прочтение рукописи и ценные замечания.

Список литературы

- [1] C. Janot, M. de Boissieu. Phys. Rev. Lett. **72**, 1674 (1994); C. Janot. Europhys. News **27**, 60 (1996).
- [2] А.Ф. Прекул, Н.И. Щеголихина. Кристаллография **52**, 1032 (2007).
- [3] C. Berger, E. Belin, D. Mayou. Ann. Chim. Fr. **18**, 485 (1993).
- [4] А.Ф. Прекул, В.А. Казанцев, Н.И. Щеголихина. ФТТ **50**, 1933 (2008).
- [5] А.Ф. Прекул, Н.И. Щеголихина, С.М. Подгорных. ФНТ **35**, 683 (2009).
- [6] А.Ф. Прекул, Е.В. Шалаева, Н.И. Щеголихина. ФТТ **52**, 1675 (2010).
- [7] А.Ф. Прекул, Н.И. Щеголихина, А.Б. Гайдученко. ФТТ **53**, 1885 (2011).
- [8] A.F. Prekul, N.I. Shchegolikhina, K. Edagawa. Phil. Mag. **91**, 2828 (2011).

- [9] А.Ф. Прекул, Н.И. Щеголихина, А.Б. Гайдученко. Письма в ЖЭТФ **94**, 397 (2011).
- [10] W.H. Keesom, N. Pearlman. In Handbook der Physik. Bd. 14–15. Springer-Verlag (1956). П. Кеезом, Н. Пирлман. В кн.: Физика низких температур / Под ред. А.И. Шальникова. ИИЛ, М. (1959). С. 315.
- [11] А.Ф. Прекул, Н.И. Щеголихина, С.З. Назарова, К. Эдагава. ФММ **108**, 128 (2009).
- [12] N.F. Mott, E.A. Devis. Electronic processes in non-crystalline materials. Oxford, Clarendon Press (1971). Y. Imry. Introduction to mesoscopic physics. Oxford Univ. Press, 2002. Пер. Й. Имри. Введение в мезоскопическую физику / Под ред. А.С. Иоселевича. М., Физматлит (2002). Гл. 2.
- [13] Q. Guo, S.J. Poon. Phys. Rev. B **54**, 12 793 (1996-II).
- [14] J. Friedel. Helv. Phys. Acta **61** (1988) 538; T. Fujiwara, T. Yokokawa. Phys. Rev. Lett. **66**, 333 (1991).
- [15] C. Janot. J. Phys.: Cond. Matter. **9**, 1493 (1997).
- [16] В.Ф. Гантмахер. УФН **172**, 1283 (2002).
- [17] M. Born. Atomic Physics. Blackie and son lim. London–Glasgow (1963). Пер. М. Борн. Атомная физика / Под ред. Н.Н. Боголюбова. Мир, М. (1970). Гл. 9.
- [18] T. Klein, C. Berger, D. Mayou, F. Cyrot-Lackmann. Phys. Rev. Lett. **66**, 2905 (1991).
- [19] A.F. Prekul, N.Yu. Kuzmin, N.I. Shchegolikhina. J. Non-Cryst. Solids **334–335**, 380 (2004).
- [20] J.J. Prejean, C. Berger, A. Sulpice, Y. Calvayrac. Phys. Rev. B **65**, 140 203 (R) (2002).
- [21] G. Aeppli, Z. Fisk. Comments Cond. Mater. Phys. **16**, 155 (1992); P.S. Riseborough. Adv. Phys. **49**, 257 (2000).