

УДК 539.2

© 1992

## ВОЗНИКНОВЕНИЕ ПРИМЕСНОЙ ЗОНЫ СОСТОЯНИЙ КВАЗИБЛОХОВСКОГО ТИПА В МАЛОМЕРНЫХ СИСТЕМАХ

*М. А. Иванов, Ю. В. Скрипник*

Рассмотрены маломерные кристаллы (показатель степени в законе дисперсии больше или равен размерности системы) при наличии примесных состояний, описываемых в рамках  $s-d$  модели Андерсона. Показано, что для слабосвязанных примесей имеется достаточно малая критическая концентрация, при которой происходит когерентная перестройка электронного спектра, такая, что вблизи примесного локального уровня возникает новая зона состояний квазиблоховского типа, т. е. приближенно описываемых волновым вектором. Если же затравочный уровень попадает внутрь исходной зоны, то для хорошо определенного резонансного уровня, начиная с тех же характерных концентраций, происходит кроссовое расщепление исходного спектра с возникновением области, где состояния не описываются волновым вектором.

Для трехмерных кристаллов в ряде работ (см., например, [1-4]) было показано, что уже при относительно небольшой концентрации примесных центров, приводящих к появлению уровней вблизи края зоны, происходит существенная перестройка спектра элементарных возбуждений в этой области. При описании электронных спектров кристаллов, в частности кристаллов с примесями, широко используется гибридная  $s-d$  модель Андерсона [5-7].

В рамках этой модели при определенных условиях может возникать отщепленная зона примесных состояний, характеризующихся волновым вектором, либо может происходить кроссовая перестройка спектра, когда примесный уровень расположен внутри исходного электронного спектра [8, 9]. Представляет интерес выяснить, возможна ли аналогичная перестройка спектра для систем с пониженной размерностью: одно- и двумерных систем с квадратичным законом дисперсии, а в общем случае, когда размерность пространства меньше или равна показателю степени в законе дисперсии.

Наличие в указанных системах сильной особенности в плотности состояний вблизи края зоны [10] существенно меняет обусловленный примесями характер перестройки спектра. При этом для электронного спектра, в случае, когда примесные состояния описываются однопараметрической одноузельной моделью возмущения, не возникает отщепленная зона состояний, характеризующихся волновым вектором [11]. Однако, как и в обычном трехмерном кристалле, имеется возможность возникновения такой зоны при общей модели возмущения, вносимого примесью, когда энергия примесного центра и величина его взаимодействия с кристаллом описываются не одним, как в однопараметрической одноузельной модели, а двумя независимыми параметрами ( $s-d$  модель возмущения). Целью настоящей работы и является исследование этого вопроса. Анализ спектра неупорядоченных систем проводится, как и в предыдущих работах, на основе рассмотрения сходимости разложения одночастичных, диагональных в импульсном представлении, функций Грина в ряд по всевозможным группам взаимодействующих примесных центров. Вначале рассматривается случай,

когда примесный уровень расположен вдали от края зоны (вне так называемой припороговой области), затем — перестройка спектра для уровней, расположенных достаточно близко к краю зоны, а также когда исходный уровень попадает внутрь невозмущенного спектра.

## 1. Функция Грина и закон дисперсии неупорядоченной системы

Представим гамильтониан рассматриваемой системы в виде

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_d, \\ H_0 &= \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}}, \\ H_d &= \sum_s \varepsilon_0 b_s^{\dagger} b_s + \gamma a_s^{\dagger} b_s + \gamma^* b_s^{\dagger} a_s, \\ a_s &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}r_s}, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $H_0^{\dagger}$  и  $H_d$  — трансляционно-инвариантная и примесная части гамильтониана;  $a_{\mathbf{k}}^{\dagger}$  и  $a_{\mathbf{k}}$  — фермиовские операторы зонных состояний с волновым вектором  $\mathbf{k}$  и законом дисперсии  $\varepsilon(\mathbf{k})$ ;  $b_s^{\dagger}$  и  $b_s$  — операторы примесных состояний с энергией  $\varepsilon_0$  на узле  $s$ ;  $\gamma$  — параметр гибридизации;  $N$  — общее число узлов в системе.

Для исследования условий возникновения в рассматриваемой неупорядоченной системе дополнительной зоны квазиблоховских состояний оказывается наиболее удобным использовать полностью перенормированное разложение самоусредняющейся одночастичной, диагональной в импульсном представлении, функции Грина  $G(\mathbf{k})$ . Ограничиваясь в этом разложении вкладом от изолированных примесных центров и их пар при малой концентрации примесей

$$c = N^{-1} \sum_s 1 \ll 1,$$

получим аналогично [3, 4, 8, 9]

$$G(\mathbf{k}) = (\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(\mathbf{k}))^{-1}, \quad (2)$$

$$\Sigma(\mathbf{k}) = c\tau \left( 1 - cA_{00} - cA_{00}^2 + c \sum_{l \neq 0} \frac{A_{0l}^2 e^{i\mathbf{k}r_l} + A_{0l}^{\dagger}}{1 - A_{0l}^2} + \dots \right), \quad (3)$$

$$\tau = v(1 - vG_{00})^{-1}, \quad A_{0l} = \tau G_{0l}, \quad v = |\gamma|^2 / (\varepsilon - \varepsilon_0), \quad G_{0l} = N^{-1} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}r_l} G(\mathbf{k}). \quad (4)$$

Суммирование по  $l$  в (3) ведется по всем узлам решетки.

Условие сходимости перенормированного ряда для  $G(\mathbf{k})$  во всех рассматриваемых ниже случаях можно записать в виде

$$c \left| \sum_l A_{0l}^2 \right| \ll 1. \quad (5)$$

В областях сходимости ряда состояния при определенных условиях могут характеризоваться волновым вектором, т. е. являться квазиблоховскими состояниями. Закон дисперсии таких состояний определяется полюсами функции Грина  $G(\mathbf{k})$ . При этом в выражении для поляризационного оператора  $\Sigma(\mathbf{k})$

достаточно ограничиться первым его слагаемым  $c\tau$ . Соответственно выражение для  $G_{00}$  принимает вид

$$G_{00} = N^{-1} \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{k}) - c\tau)^{-1} = g_0(\varepsilon - c\tau), \quad (6)$$

где

$$g_0 = N^{-1} \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{k}))^{-1}$$

— диагональная в узельном представлении функция Грина невозмущенного кристалла. В результате, считая, что  $g_0(\varepsilon - c\tau) \approx g_0(\varepsilon(\mathbf{k}))$ , для закона дисперсии получим

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1,2}(\mathbf{k}) = & \frac{1}{2} \{ \varepsilon(\mathbf{k}) + \varepsilon_0 + |\gamma|^2 \operatorname{Re} g_0(\varepsilon(\mathbf{k})) \pm \\ & \pm \sqrt{(\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon_0 - |\gamma|^2 \operatorname{Re} g_0(\varepsilon(\mathbf{k})))^2 + 4c|\gamma|^2} \}, \end{aligned} \quad (7)$$

а затухание каждого состояния

$$\Gamma_{\mathbf{k}}^i = \left| \frac{\tilde{\varepsilon}_i(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k})}{\tilde{\varepsilon}_1(\mathbf{k}) - \tilde{\varepsilon}_2(\mathbf{k})} \right| |\gamma|^2 \operatorname{Im} g_0(\varepsilon(\mathbf{k})). \quad (8)$$

Электронные состояния будут квазиблоховскими, если затухание мало на длине волны, т. е. если выполняется условие Иоффе—Регеля—Мотта

$$\mathbf{k} \frac{\partial \tilde{\varepsilon}_i(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \gg \Gamma_{\mathbf{k}}^i. \quad (9)$$

Нетрудно видеть, что условие (9) может быть представлено в виде

$$\operatorname{Re}(\varepsilon - c\tau) \gg \operatorname{Im}(c\tau), \quad (10)$$

причем (9) и (10) согласуются с критерием сходимости ряда (5). Неравенства (9) и (10) перестают выполняться как раз в той области, где ряд (2)—(4) перестает сходиться.

Как следует из (7), в общем случае могут существовать две разделенные между собой области, где состояния описываются волновым вектором. Одна из областей (верхняя), отвечающая состояниям с энергиями, лежащими внутри исходного спектра достаточно далеко от примесного уровня, существует всегда, а возможность существования двух областей для систем с пониженной размерностью требует отдельного рассмотрения.

Предполагая, что закон дисперсии исходного кристалла имеет вид

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = E(a\mathbf{k})^m, \quad \varepsilon(\mathbf{k}) \ll E, \quad (11)$$

где  $a$  — постоянная решетки, а характерный энергетический параметр  $E$  в дальнейшем выбирается равным единице, для функции Грина  $g_0(\varepsilon)$  системы с размерностью  $d < m$  имеем

$$\begin{aligned} g_0(\varepsilon) = & \begin{cases} -(-\varepsilon)^{\alpha-1} \beta \sin(\alpha\pi), & \varepsilon < 0, \\ \beta^{-1} (c \operatorname{tg}(\alpha\pi) + i) \varepsilon^{\alpha-1}, & \varepsilon > 0, \end{cases} \\ & |\varepsilon| \ll 1, \quad \alpha = d/m, \quad 0 < \alpha < 1, \\ & \beta = m\Gamma(d/2) \pi^{d/2-1} 2^{d-1}. \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь оставлены лишь слагаемые, имеющие особенность при  $\varepsilon \rightarrow 0$ . Таким образом, функция  $g_0(\varepsilon)$ , как и связанная с ней плотность состояний, расходится вблизи края зоны.

Полученные выражения для  $g_0(\varepsilon)$  справедливы при  $(\alpha-1) \ln |\varepsilon| \gg 1$ . Если это условие не выполняется  $1-\alpha \ll 1$ , то в (12) необходимо учесть дополнительное слагаемое  $\sim (\pi\beta(1-\alpha))^{-1}$ . В результате, например, при  $\alpha=1$

$$g_0(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{i}{\beta} (\ln(\zeta\varepsilon), \pi + i), & \varepsilon > 0, \\ \frac{1}{\beta\pi} \ln(-\zeta\varepsilon), & \varepsilon < 0, |\varepsilon| \ll 1, \zeta \sim 1. \end{cases} \quad (13)$$

Результаты, приводимые ниже, записываются в таком виде, что они остаются справедливыми и при  $\alpha \rightarrow 1$ .

## 2. Перестройка спектра для локального уровня, расположенного вне припороговой области

Уравнение, определяющее энергию  $\varepsilon_x$  изолированного локального состояния

$$\varepsilon_x - \varepsilon_0 - |\gamma|^2 g_0(\varepsilon_x) = 0 \quad (14)$$

для рассматриваемых маломерных систем, всегда имеет решение в области  $\varepsilon < 0$  как при положительных, так и при отрицательных значениях затравочной энергии примесного центра  $\varepsilon_0$ , причем энергия локального уровня  $\varepsilon_x$  всегда меньше затравочной энергии  $\varepsilon_0$ . Радиус спадающей волновой функции такого состояния равен  $r_0 = a(-\varepsilon_x)^{1/m}$ , если в выбранном масштабе, связанном с шириной исходной зоны  $|\varepsilon_x| \ll 1$ , т. е. уровень расположен близко к краю затравочного спектра. Следует ожидать, что перестройка спектра в рассматриваемой системе должна иметь место, когда среднее расстояние между примесными центрами станет меньше радиуса волновой функции или, иначе, при  $c \gg (r_0/a)^{-d}$ .

Будем считать, что в выбранном масштабе параметр гибридизации  $|\gamma|^2 \ll 1$ . Тогда можно ввести понятие о некоторой достаточно узкой области вблизи края зоны, такой, что в зависимости от того, попадает или нет энергия примесного уровня  $\varepsilon_x$  в эту область, характер примесных состояний и вид перестройки спектра оказываются в значительной степени разными. Для оценки ширины данной области  $\Delta_0$  отметим в соответствии с [8], что вероятность обнаружения электрона в состоянии с энергией  $\varepsilon_x$  на примесном узле

$$|\varphi_0|^2 = P = \left[ 1 + \frac{|\gamma|^2}{N} \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{k}))^{-2} \right]^{-1} = \left( 1 - |\gamma|^2 \left( \frac{\partial}{\partial \varepsilon} g_0(\varepsilon) \Big|_{\varepsilon=\varepsilon_x} \right) \right)^{-1}, \quad (15)$$

$$-\frac{\partial}{\partial \varepsilon} g_0(\varepsilon) = \frac{(1-\alpha)}{\beta \sin(\alpha\pi)} (-\varepsilon)^{\alpha-2}.$$

Отсюда видно, что при

$$(-\varepsilon_x) \gg \Delta_0 = ((1-\alpha)|\gamma|^2/\beta \sin(\alpha\pi))^{1/(2-\alpha)}$$

значение  $P \approx 1$ , т. е. электрон в основном находится на примесном узле, а при  $(-\varepsilon_x) \ll \Delta_0$  электрон размазан по области с радиусом  $r_0$ . Таким образом, величину  $\Delta_0 \ll 1$  имеет смысл рассматривать как ширину припороговой области.

Начнем рассмотрение со случая, когда затравочная энергия примесного центра  $\varepsilon_0$  такова, что  $\varepsilon_x$  находится вне припороговой области. При этом если  $(-\varepsilon_0) > \Delta_0 \bar{f}(\Delta_0)^{1/2-\alpha}$  (где  $\bar{f}(x) \approx (1-\alpha)^{-1}$  при  $(\alpha-1) \ln x > 1$  и  $\bar{f}(x) \approx -\ln x$  при  $(\alpha-1) \ln x < 1$ ), то относительная поправка к энергии примесного уровня за счет гибридизации мала

$$\epsilon_{\cdot 1} = \epsilon_0 \left[ 1 + \left( \frac{\Delta_0}{\epsilon_0} \right)^{2-\alpha} f(\epsilon_0) \right],$$

$$\left| \frac{\epsilon_{\cdot 1} - \epsilon_0}{\epsilon_{\cdot 1}} \right| \ll 1. \quad (16)$$

Для примесного уровня, расположенного ниже припороговой области, удается показать, что при относительно высоких концентрациях

$$1 \gg c > c_0 = \frac{|\epsilon_{\cdot 1}|^\alpha}{A}, \quad A = \frac{\beta \sin(\alpha\pi)}{1-\alpha}, \quad (17)$$

как и в трехмерном случае с квадратичным законом дисперсии, вблизи примесного уровня возникает область, где состояния характеризуются волновым вектором с законом дисперсии  $\epsilon_{\cdot 2}(\mathbf{k})$ , отвечающим нижней ветви в формуле (7). Из условия сходимости ряда (5) можно найти предельные (минимальное и максимальное) значения волнового вектора в этой примесной зоне и, следовательно, остальные ее характеристики.

Максимальное значение волнового вектора, как и следовало ожидать, оказывается порядка обратной величины среднего расстояния между примесями

$$k_{\max} \sim \frac{1}{a} (cA)^{1/d},$$

$$\epsilon(k_{\max}) \sim (cA)^{1/\alpha} = (-\epsilon_{\cdot 1}) \left( \frac{c}{c_0} \right)^{1/\alpha}. \quad (18)$$

Значение  $k_{\max}$  достигается вблизи энергии  $\epsilon_{\cdot 1}$

$$\epsilon_{\cdot 1} = \epsilon_0 + |\gamma|^2 \operatorname{Re} g_0(\epsilon(k_{\max})). \quad (19)$$

Выражение для  $\epsilon_{\cdot 1}$  нетрудно преобразовать так, чтобы оно было справедливо при всех значениях  $\alpha \leq 1$

$$\epsilon_{\cdot 1} = \epsilon_{\cdot 1} - |\gamma|^2 g_0(\epsilon_{\cdot 1}) + |\gamma|^2 \operatorname{Re} g_0(\epsilon(k_{\max})) = \epsilon_{\cdot 1} + f\left(-\frac{\epsilon_{\cdot 1}}{\epsilon(k_{\max})}\right),$$

$$\left(-\frac{\epsilon_{\cdot 1}}{\epsilon(k_{\max})}\right) = \left(\frac{c_0}{c}\right)^{1/\alpha}, \quad (20)$$

$$f(x) = \frac{|\gamma|^2}{\beta \sin(\alpha\pi) |\epsilon_{\cdot 1}|^{1-\alpha}} (1 + \cos(\alpha\pi) x^{1-\alpha}).$$

Из (20) видно, что в отличие от рассмотренного в [8, 9] трехмерного изотропного случая при повышении концентрации предельная энергия  $\epsilon_{\cdot 1}$  сдвигается в сторону невозмущенной энергии  $\epsilon_0$ . Ширина области расходимости ряда (2)–(4) вблизи  $\epsilon_{\cdot 1}$ , т. е. концентрационное уширение примесного уровня, как следует из (5), имеет следующий порядок величины:

$$|\epsilon - \epsilon_{\cdot 1}| > \Gamma_1 = \left( \frac{c |\gamma|^2}{-\epsilon_{\cdot 1}} \right) \left( \frac{c_0}{c} \right)^{1/\alpha} = \frac{|\gamma|^2}{A (cA)^{1-1/\alpha}} \sim |\gamma|^2 \operatorname{Im} g_0(\epsilon(k_{\max})). \quad (21)$$

Таким образом, концентрационное уширение примесного уровня для маломерных систем в отличие от трехмерного случая падает с ростом концентрации примесей (для  $\alpha=1$  не зависит от концентрации). Указанное поведение связано с тем, что плотность состояний невозмущенного кристалла падает в глубь зоны. Величина  $\Gamma_1$  совпадает с резонансной энергией взаимодействия примесных состояний на средних расстояниях при радиусе спадающего этого взаимодействия также порядка среднего расстояния между примесями.

Минимальное значение волнового вектора  $k_{\min}$  достигается в окрестности другой предельной энергии  $\epsilon_{\cdot 2}$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\text{нр}} &= \frac{1}{2} \{ \varepsilon_0 + |\gamma|^2 \operatorname{Re} g_0(\varepsilon(k_{\text{min}})) - \sqrt{(\varepsilon_0 + |\gamma|^2 \operatorname{Re} g_0(\varepsilon(k_{\text{min}})))^2 + 4c|\gamma|^2} \} = \\ &= \frac{1}{2} \{ \varepsilon_x + f(x_1) - \sqrt{(\varepsilon_x + f(x_1))^2 + 4c|\gamma|^2} \} \approx \frac{1}{2} \{ \varepsilon_x - \sqrt{\varepsilon_x^2 + 4c|\gamma|^2} \}, \quad (22) \end{aligned}$$

$$x_1 = -\frac{\varepsilon_x}{\varepsilon(k_{\text{min}})} = \left( \frac{\varepsilon_x^2 \Delta^2}{cc_0 |\gamma|^4} \right)^{1/(2-\alpha)} \approx \begin{cases} (c/c_0)^{1/(2-\alpha)}, & c_0 < c \ll c_1, \\ (c_1/c_0)^{1/(2-\alpha)}, & c \gg c_1, \end{cases}$$

$$c_1 = \varepsilon_x^2 / |\gamma|^2.$$

Ширина примесной зоны

$$\Delta = \varepsilon_x - \varepsilon_{\text{нр}} \approx \frac{1}{2} \{ \varepsilon_x + \sqrt{\varepsilon_x^2 + 4c|\gamma|^2} \} \quad (23)$$

имеет порядок  $c|\gamma|^2/|\varepsilon_x|$  при  $c_0 < c < c_1$  и  $\sqrt{c}|\gamma|$  при  $c_1 < c \ll 1$ . Используя значение  $\Delta$ , минимальное значение волнового вектора и ширину области расходимости вблизи  $\varepsilon_{\text{нр}}$  можно представить в виде

$$k_{\text{min}} \sim \frac{1}{a} \left( \frac{c|\gamma|^4}{\Delta^2 A} \right)^{1/(2m-d)} \approx \begin{cases} \frac{1}{a} \left( \frac{|\gamma|^2 c_1}{Ac} \right)^{1/(2m-d)}, & c_0 < c \ll c_1, \\ \frac{1}{a} (|\gamma|^2/A)^{1/(2m-d)}, & c \gg c_1, \end{cases} \quad (24)$$

$$\varepsilon(k_{\text{min}}) = \left( \frac{c|\gamma|^4}{\Delta^2 A} \right)^{1/(2-\alpha)},$$

$$|\varepsilon - \varepsilon_{\text{нр}}| > \Gamma_2 = \frac{\Delta}{\sqrt{\varepsilon_x^2 + 4c|\gamma|^2}} \varepsilon(k_{\text{min}}) \sim |\gamma|^2 \operatorname{Im} g_0(\varepsilon(k_{\text{min}})),$$

$$\Gamma_2 \approx \begin{cases} \Delta (c_0/c)^{1/(2-\alpha)} = \left( \frac{|\gamma|^2}{A} \right)^{1/(2-\alpha)} \left( \frac{c}{c_1} \right)^{(1-\alpha)/(2-\alpha)}, & c_0 < c \ll c_1, \\ \frac{1}{2} \Delta_0 = \frac{1}{2} \left( \frac{|\gamma|^2}{A} \right)^{1/(2-\alpha)}, & c \gg c_1. \end{cases} \quad (25)$$

В интервале  $c_0 < c < c_1$  значения  $k_{\text{min}}$ ,  $\varepsilon(k_{\text{min}})$  падают с ростом концентрации примесей, в то время как величина  $\Gamma_2$  растет, однако медленнее, чем  $\Delta$ . Затем при  $c > c_1$  все эти величины выходят на предельные значения, причем  $\Gamma_2$  становится порядка  $\Delta_0$  — ширины припороговой области. Для всех концентраций  $c > c_0$  ширина примесной зоны намного больше ширин областей расходимости  $\Gamma_1$  и  $\Gamma_2$ , причем в области сходимости ряда между  $\varepsilon_{\text{нр}}$  и  $\varepsilon_x$  выполняется также условие Иоффе—Регеля—Мотта. Таким образом, действительно можно говорить о примесной зоне, в которой состояния характеризуются волновым вектором. Плотность состояний внутри этой зоны описывается величиной  $\rho(\varepsilon) = \pi^{-1} \operatorname{Im} g_0(\varepsilon - c\tau)$ , достигая максимального значения  $(\pi\beta(\varepsilon(k_{\text{min}}))^{1-\alpha})^{-1}$  при  $\varepsilon - \varepsilon_{\text{нр}} \sim \Gamma_2$  и минимального  $(\pi\beta(\varepsilon(k_{\text{max}}))^{1-\alpha})^{-1}$  при  $\varepsilon_x - \varepsilon \sim \Gamma_1$ . Следует отметить, что неравенства  $c_1 > c_0$  и  $|\varepsilon_x| > \Gamma_1$  эквивалентны требованию  $|\varepsilon_x| > \Delta_0$ .

Наряду с появлением примесной зоны происходит размытие и сдвиг края основной зоны. При  $c > c_0$  край квазиблоховских состояний расположен возле

$$\varepsilon_{\text{гп}} = \frac{1}{2} \left( \varepsilon_x + f\left(-\frac{\varepsilon_x}{\varepsilon(k_{\text{min}})}\right) + \sqrt{\left( \varepsilon_x + f\left(-\frac{\varepsilon_x}{\varepsilon(k_{\text{min}})}\right) \right)^2 + 4c|\gamma|^2} \right), \quad (26)$$

т. е. край зоны с ростом концентрации сдвигается в сторону больших энергий ( $\varepsilon_{\text{гп}} \approx c|\gamma|^2/|\varepsilon_x|$  при  $c_0 < c \ll c_1$  и  $\varepsilon_{\text{гп}} \approx \sqrt{c}|\gamma|$  при  $c \gg c_1$ ). Минимальное значение волнового вектора для квазиблоховских состояний в этой зоне

$$k_{1 \min} \sim \frac{1}{a} \left( \frac{c |\gamma|^4}{\Delta_1^2 A} \right)^{1/(2m-d)} \approx \begin{cases} \frac{1}{a} \left( \frac{c_1 |\gamma|^2}{Ac} \right)^{1/(2m-d)}, & c_0 < c \ll c_1, \\ \frac{1}{a} (|\gamma|^2 / A)^{1/(2m-d)}, & c \gg c_1, \end{cases} \quad (27)$$

а ширина области расходимости вблизи  $\varepsilon_{rp}$  имеет порядок

$$|\varepsilon - \varepsilon_{rp}| > \Gamma_3 = \frac{\Delta_1}{\sqrt{\varepsilon_x^2 + 4c |\gamma|^2}} \varepsilon(k_{1 \min}) \sim \varepsilon(k_{1 \min}), \quad (28)$$

$$\varepsilon(k_{1 \min}) = \left( \frac{c |\gamma|^4}{\Delta_1^2 A} \right)^{1/(2-\alpha)},$$

$$\frac{\varepsilon_x}{\varepsilon(k_{1 \min})} \approx \begin{cases} \frac{1}{a} \left( \frac{c_1}{cc_0} \right)^{1/(2-\alpha)}, & c_0 < c \ll c_1, \\ \frac{1}{a} \left( \frac{c_1}{c_0} \right)^{1/(2-\alpha)}, & c \gg c_1, \end{cases}$$

где  $\Delta_1 \approx (1/2) \{ \sqrt{\varepsilon_x^2 + 4c |\gamma|^2} - \varepsilon_x \}$  — расстояние от сдвинутого края зоны до локального уровня. Ширина области расходимости в рассматриваемом интервале концентраций ( $c > c_0$ ) увеличивается с ростом концентрации, оставаясь все время меньше сдвига края  $\varepsilon_{rp}$ . При  $c > c_1$  величина  $\Gamma_3$ , как и  $\Gamma_2$ , выходит на предельное значение порядка ширины припороговой области.

### 3. Перестройка спектра при наличии резонансных уровней

Перейдем теперь к рассмотрению случая, когда затравочная энергия  $\varepsilon_0$  примесного центра положительна и достаточно велика ( $\varepsilon_0 \gg \Delta_0$ ). При этом внутри припороговой области возникает сравнительно мелкий примесный уровень

$$\varepsilon_{\cdot 1} \approx \begin{cases} -(1-\alpha)^{-1/(1-\alpha)} \Delta_0 \left( \frac{\Delta_0}{\varepsilon_0} \right)^{1/(1-\alpha)}, & (1-\alpha) \ln \frac{1}{-\varepsilon_x} \gg 1, \\ -\exp(-\varepsilon_0/\Delta_0), & (1-\alpha) \ln \frac{1}{-\varepsilon_x} \ll 1. \end{cases} \quad (29)$$

Помимо локального уровня в этом случае возникает хорошо определенный резонансный уровень. Условие существования такого уровня (малость затухания по сравнению с энергией) имеет вид

$$\varepsilon_r \gg \left( 1 - |\gamma|^2 \left( \frac{d \operatorname{Re} g_0(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right)_{\varepsilon=\varepsilon_r} \right)^{-1} |\gamma|^2 \operatorname{Im} g_0(\varepsilon_r),$$

$$\varepsilon_r - \varepsilon_0 - |\gamma|^2 \operatorname{Re} g_0(\varepsilon_r) = 0. \quad (30)$$

Это условие эквивалентно требованию, чтобы резонансный уровень находился вне припороговой области ( $\varepsilon_r \gg \Delta_0$ ).

С повышением концентрации примесей, когда  $c$  становится порядка  $c_{0\alpha} = (1-\alpha)(-\varepsilon_r)^2/\beta \sin(\alpha\pi)$ , сначала происходит перестройка спектра в области энергий вблизи локального уровня. Характер этой перестройки, которую можно назвать некогерентной, имеет тот же вид, что и в [11] для модели, где возмущение, вносимое примесью, имело один параметр — изменение потенциала на узле, занятом примесью. При этом, если  $c > c_{0\alpha}$ , край зоны сдвигается в сторону отрицательных энергий на величину, значительно большую, чем  $\varepsilon_x$ , поглощая локальный уровень. При существенно более высоких концентрациях, когда  $c \sim c_{0r} = (1-\alpha) \varepsilon_r^2/\beta \sin(\alpha\pi)$ , начинается перестройка спектра в окрестности резонансного уровня. Характер этой перестройки является в определен-

ном смысле дуальным по отношению к описанной в разделе 2 когерентной перестройке вблизи достаточно глубокого локального уровня, когда возникает дополнительная зона состояний квазиблоховского типа. При  $c > c_{0r}$  вблизи  $\epsilon_r$  в области между  $\bar{\epsilon}_r$  и  $\epsilon_{np}^r$  возникает «запрещенная» зона, где состояния не описываются волновым вектором (величины  $\bar{\epsilon}_r$  и  $\epsilon_{np}^r$  аналогичны величинам  $\bar{\epsilon}_x$  и  $\epsilon_{np}$ , определенным в (20) и (22) для случая глубокого локального уровня). Ширина этой области  $\Delta_r$  при совпадающих значениях  $|\epsilon_x|$  и  $\epsilon_r$  оказывается того же порядка, что и ширина новой области квазиблоховских состояний для локальных уровней ( $\Delta_r \approx c |\gamma|^2 / \epsilon_r$ , когда  $c_{0r} < c < c_{1r} = \epsilon_r^2 / |\gamma|^2$ , и  $\Delta_r \approx \sqrt{c} |\gamma|$  при  $c > c_1$ ). Край зоны  $\epsilon_{np}$  в это время сдвигается в сторону отрицательных энергий. Основным общим свойством двух указанных типов когерентной перестройки является появление вместо одной двух разделенных между собой областей энергий, где состояния приближенно можно описывать волновым вектором (двух типов квазиблоховских состояний). При  $c \gg c_1$  полностью теряется различие в параметрах перестройки для резонансных и локальных уровней.

Для хорошо определенного резонансного уровня концентрацию  $\bar{c}_0$ , при которой начинается перестройка спектра, можно с достаточной степенью точности определить с помощью простой самосогласованной процедуры. С этой целью ограничимся в выражении (3) первым слагаемым и найдем, решая самосогласованную задачу, ту концентрацию, при которой в основной зоне впервые появляется точка с нулевой плотностью состояний. В результате получим

$$\bar{c}_0 = c_{0r} B(\alpha),$$

$$B(\alpha) = \frac{4}{(2 - \alpha)^2 - \alpha^2}. \quad (31)$$

Оценка отброшенных при таком подходе слагаемых показывает, что они не могут существенно изменять полученное значение  $\bar{c}_0$ . На это указывает также тот факт, что множитель  $B(\alpha)$ , который уточняет значение характерной концентрации по сравнению с простейшей оценкой  $c_{0r}$ , во всем рассматриваемом интервале значений  $\alpha$  ( $0 \leq \alpha \leq 1$ ) не имеет ни нулей, ни особенностей ( $B=1$  при  $\alpha=0$ ,  $B=3.08$  при  $\alpha=0.5$ ,  $B=4$  при  $\alpha=1$ ).

Наконец, возможна также промежуточная ситуация, когда затравочная энергия примесного центра  $\epsilon_0$  близка к нулю, так что ни условие  $|\epsilon_x| > \Delta_0$ , ни условие  $\epsilon_r > \Delta_0$  не выполняются. Тогда в рассматриваемых маломерных системах имеется локальный уровень, энергия которого  $\epsilon_x \approx \Delta_0$ , т. е. оказывается порядка ширины припороговой области. В этом случае концентрация перестройки  $c_0$  (17) оказывается того же порядка, что и вторая характерная концентрация  $c_1$ . Поэтому характер перестройки при таких  $\epsilon_0$  имеет тот же вид, что и в разделе 2 при  $c \gg c_1$ , т. е., например, ширина нижней зоны квазиблоховских состояний  $\sim \sqrt{c} |\gamma|$ .

Полученные в настоящей работе результаты могут быть использованы для анализа различного рода спектров элементарных возбуждений маломерных систем с примесями. Так, например,  $s-d$  модель применяется для описания свойств проводящих полимерных цепей с примесями [12, 13]. Представляется актуальным также рассмотрение с помощью данной модели двумерных кристаллов с квадратичным законом дисперсии, включая ВТСП системы. Обычно для описания примесей в таких системах используется простейшая однопараметрическая модель. Однако в действительности однопараметрическая модель часто не позволяет адекватно описать свойства примесных центров. В моделях с большим числом параметров имеется возможность для появления новых эффектов, отсутствующих в простейшей модели, например может возникать новая зона вблизи примесного уровня. Особенно большой интерес представляет поведение



спектра в том случае, когда примесный уровень сближается с краем зоны за счет внешнего воздействия (магнитного поля, давления, температуры). Для трехмерных кристаллов такие эксперименты были выполнены рядом авторов [14-16]. Было бы интересно провести соответствующие эксперименты для систем с пониженной размерностью.

#### Список литературы

- [1] Лифшиц И. М. // УФН. 1964. Т. 83. № 4. С. 617—663.
- [2] Лифшиц И. М., Гредескул С. А., Пастур Л. А. Введение в теорию неупорядоченных систем. М., 1982. 360 с.
- [3] Иванов М. А. // ФТТ. 1970. Т. 12. № 7. С. 1895—1905.
- [4] Ivanov M. A., Loctev V. M., Pogorelov Yu. G. // Phys. Reps. 1987. V. 153. N 4—5. P. 209—330.
- [5] Anderson P. N. // Phys. Rev. 1961. V. 124. N 1. P. 41—53.
- [6] Levin K., Erenreich H. // Phys. Rev. 1971. V. B3. N 12. P. 4172—4188.
- [7] Brouers F., Vedyayev A. V. // Phys. Rev. 1972. V. B5. N 2. P. 348—360.
- [8] Иванов М. А., Погорелов Ю. Г. // ЖЭТФ. 1979. Т. 76. № 3. С. 1010—1022.
- [9] Иванов М. А., Погорелов Ю. Г. // ЖЭТФ. 1985. Т. 88. № 5. С. 1738—1751.
- [10] Косевич А. М., Физическая механика реальных кристаллов. Киев, 1981. 326 с.
- [11] Иванов М. А., Скрипник Ю. В. // ФТТ. Наем. № 2. С. 641—649.
- [12] Harigaya K. // J. Phys. C. 1991. V. 46. P. 9654—9667.
- [13] Harigaya K. // J. Phys. C. 1991. V. 47. P. 9721—9734.
- [14] Прохоров А. С., Рудашевский Е. Г. // Письма в ЖЭТФ. 1975. Т. 22. № 4. С. 214—218.
- [15] Eremenko V. V., Naumenko V. M. // Spin waves and magnetic excitations 2. Elsevier, 1988. P. 259—331.
- [16] Мелетов К. П., Щанов М. Ф. // ЖЭТФ. 1985. Т. 89. № 6. С. 2133—2141.

Институт металлофизики АН Украины  
Киев

Поступило в Редакцию  
15 апреля 1991 г.  
В окончательной редакции  
11 октября 1991 г.