Физика низких температур, 1996, т. 22, № 10, с. 1186–1195

Примесные состояния и переход металл–диэлектрик в $2D$ системах с гибридизированным спектром

М. А. Иванов, В. М. Локтев*, Ю. В. Скрипник

Институт металлофизики НАН Украины, Украина, 252142, г. Киев, пр. Вернадского, 36

* *Институт теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова НАН Украины, Украина, 252143, г. Киев, ул. Метрологическая 14–б*

Статья поступила в редакцию 2 февраля 1996 г.

Рассмотрены энергии собственных (локализованных и делокализованных) состояний, их плотность и переход диэлектрик—металл в двухзонной модели $2D$ кристалла, исходный электронный спектр которого содержит две (широкую и узкую) гибридизирующиеся между собой зоны. Показано, что величина гибридизации существенно сказывается на всех характеристиках, определяющих спектральные и транспортные свойства как диэлектрической, так и металлической фаз системы. Рассчитана критическая концентрация перехода диэлектрик—металл, вызванного допированием, и показано, что плотность состояний в окрестности уровня Ферми может быть немонотонной функцией концентрации носителей. Сделана попытка связать полученные результаты с поведением плотности состояний и наблюдаемой зависимостью критической температуры от концентрации носителей в высокотемпературных сверхпроводниках.

Розглянуто енергії власних (локалізованих і делокалізованих) станів, їх густина та перехід діелектрик—метал у двозонній моделі $2D$ кристала, вихідний електронний спектр якого складається з двох (широкої та вузької) зон, що гібридизуються між собою. Показано, що величина гібридизації суттєво відбивається на усіх характеристиках, що визначають спектральні і транспортні властивості як діелектричної, так і металевої фаз системи. Розраховано критичну концентрацію переходу діелектрик—метал, що викликаний допіруванням, і показано, що густина станів в околі рівня Фермі може бути немонотонною функцією концентрації носіїв. Зроблено спробу зв'язати отримані результати з поведінкою густини станів і спостережуваною залежністю критичної температури від концентрації у високотемпературних надпровідниках.

1. Введение

Открытие слоистых купратных соединений, обладающих высокотемпературной сверхпроводимостью (ВТСП), поставило перед теорией твердого тела вопросы, ряд из которых остается без ответа уже на протяжении многих лет. Некоторые из этих вопросов, несомненно, имеют общий характер; к ним можно отнести вопрос о переходе диэлектрик—металл в моттовских диэлектриках, вопрос о металлизации низкоразмерных систем, в частности, о способе появления и месте расположения в последних уровня Ферми. Очевидно, что без ответа на них трудно говорить об углублении понимания того, каким образом происходит металлизация медных оксидов, описание сверхпроводимости которых в рамках разных моделей [1,2] зачастую вообще не учитывает такой принципиальный момент, как фактически примесный характер ее возникновения.

В то же время хорошо известно [1–4], что ВТСП соединения в своих исходных стехиометрических составах принадлежат к системам моттовского типа, диэлектрическая щель в которых обусловлена, однако, не столько сильной межэлектронной корреляцией, сколько присутствием двух типов ионов — меди и кислорода — и энергетическим положением их актуальных уровней ε_d и ε_p. Переход диэлектрик—металл в таких системах практически не описан, хотя к настоящему времени можно выделить два наметившихся основных подхода. Первый базируется на том [5], что в нормальной металлической фазе медные оксиды не что иное, как легированные мотт–хаббардовские диэлектрики, в которых новые состояния (глубокие примесные уровни) внутри диэлектрической щели возникают вследствие сильного хаббардовского отталкивания. Их описание невозможно в рамках каких-либо одноэлектронных теорий. Другой, противоположный, подход [6] исходит из того, что учет сильной корреляции производится на стадии формирования диэлектрического состояния, которое по мере гетеровалентного замещения ($La^{3+} \to Sr^{2+}$, как в лантановых соединениях) либо насыщения кислородом (как в иттриевых и некоторых других соединениях) ведет себя аналогично легированно-

© М. А. Иванов, В. М. Локтев, Ю. В. Скрипник, 1996

му полупроводнику, в которых для описания подсистемы носителей низкой плотности применима одноэлектронная картина. Последнее опирается на многочисленные результаты фотоэлектронной спектроскопии [7–13], допускающие достаточно убедительную интерпретацию с позиций стандартного ферми-жидкостного подхода, где взаимодействие между носителями не является сильным.

Однако в обоих упомянутых подходах исключительно важным и все еще не выясненным до конца остается вопрос о том, как собственно происходит металлизация исходно диэлектрической системы, особенно тогда, когда ее электронный спектр соответствует низкой (в частности, $2D$) размерности. Фактически проблема состоит в том, в какой части затравочного спектра (запрещенная ли это зона или же зона проводимости*) расположен фермиевский уровень металлической фазы. Некоторые экспериментальные данные как будто бы весьма ясно показывают, что уровень Ферми металлической фазы возникает в области примесных состояний, т.е. в запрещенной зоне невозмущенного спектра [8,14–17]. Однако в других работах (например, [18]) утверждается, что уровень Ферми допированных ВТСП соединений расположен в той области спектра, которая в недопированном диэлектрике отвечает делокализованным состояниям зоны проводимости.

Так ли это, еще предстоит выяснить, единственное, что не вызывает сомнения, это то, что переход диэлекрик—металл при изменении концентрации носителей происходит достаточно плавно (во всяком случае, резкого скачка проводимости по мере превращения диэлектрической фазы в проводящую наблюдать не удавалось) и что в предметаллической (слабо допированной) области медные оксиды проявляют поведение, типичное для легированных полупроводников с прыжковым характером проводимости и локализованными носителями [19–21]. Последнее свидетельствует о том, что локализованные состояния расположены в окрестности дна зоны проводимости (потолка валентной зоны в реальных системах).

В свете вышесказанного можно говорить о достаточно общей задаче нахождения электронных свойств неупорядоченных $2D$ систем, в которых (подобно ВТСП соединениям) число носителей совпадает с числом примесных центров. Последние при низкой концентрации допирующих ионов c, как хорошо известно, образуют мелкие примесные уровни с энергией ниже (выше) дна зоны проводимости (потолка валентной зоны), заселение которых носителями приводит в конечном итоге (после достижения концентрацией так называемого моттовского значения [22] $c_M \approx \eta(a/a_B)^2$, где $a_B >> a$ — эффективный боровский радиус водородоподобной функции примесного состояния; η — численный коэффициент) к переходу системы в металлическое состояние. Заметим, что для $3D$ случая аналогичный коэффициент $\eta \approx 2\cdot 10^{-2}$ [23]; что же касается $2D$ систем, то вопрос о численном значении данного коэффициента остается пока открытым.

Необходимо заметить, что дальнодействующее кулоновское взаимодействие между допированными носителями препятствует последовательному расчету элементарных возбуждений системы во всей области значений c, поэтому к настоящему времени поведение одноэлектронного спектра удалось качественно оценить лишь для ограниченного круга $3D$ и $2D$ моделей, когда затравочный локальный уровень лежит в непосредственной близости к краю невозмущенного спектра [6,23,24].

В работе Погорелова и авторов [6] в рамках одноузельного возмущения было показано, что в слабо легированных однозонных $2D$ системах в отличие от $3D$ систем переход в металлическое состояние облегчен (в $3D$ случае энергия Ферми и ширина концентрационного размытия оказываются одного порядка, а в $2D$ случае первая, начиная с некоторой характерной концентрации, параметрически превышает это уширение).

Данная работа, которую можно рассматривать как продолжение начатого в [6] изучения металлизации $2D$ и квази-$2D$ кристаллов, ставит вопрос о роли эффектов гибридизации разных типов электронных состояний, что, как отмечалось, является одним из характерных признаков электронного (дырочного) спектра купратных плоскостей ВТСП соединений. Будет показано, что наличие гибридизации существенно сказывается на характере плотности состояний (ПС) в окрестности относительно более широкой зоны и, как следствие, на характере концентрационной зависимости металлических характеристик системы в целом.

* Мы используем такую формальную картину, в которой металлизации отвечает появление носителей (любого знака) в зоне проводимости. В большинстве соединений типа ВТСП подвижные носители отвечают дыркам, так что допирование вызывает появление носителей в валентной зоне медных оксидов. Развиваемый ниже подход зарядово симметричен и, ради простоты, мы полагаем, что в энергетической шкале нижняя зона отвечает валентной зоне, а верхняя — зоне проводимости.

2. Формулировка двухзонной модели

Наиболее естественным ответом на поставленный вопрос о роли гибридизации в переходе металл—диэлектрик могла бы стать феноменологическая модель неидеального кристалла с двумя — широкой и узкой — зонами, связанными одноэлектронными перескоками. В рамках такой модели можно было бы изучить как взаимное влияние обеих зон на характер спектра и формирование соответствующей ПС, так и роль примесей. Важно, что близкая ситуация наблюдается в ВТСП медных оксидах, где, как известно, проводимость (и сверхпроводимость) разыгрываются, в основном, в плоскостях CuO_2, имеющих в хорошем приближении тетрагональную симметрию. При этом как зона проводимости, так и валентная зона являются гибридными и формируются, главным образом, из $3d_{x^2-y^2}$-орбиталей ионов Cu^{2+} и $2p_{x,y}$-орбиталей ионов O^{2-} (см. [1–5]). Отвечающий им простейший одноэлектронный гамильтониан идеальной системы может быть записан в виде

$$H_0 = \varepsilon_d \sum_{\mathbf{n}_\alpha, \sigma} d^+_{\mathbf{n}_\alpha, \sigma} d_{\mathbf{n}_\alpha, \sigma} + \varepsilon_p \sum_{\mathbf{n}_\alpha, \sigma} p^+_{\mathbf{n}_\alpha, \sigma} p_{\mathbf{n}_\alpha, \sigma} +$$

$$+ \sum_{\mathbf{n}_\alpha, \mathbf{m}_\beta} \left[t^{pp}_{\mathbf{n}_\alpha \mathbf{m}_\beta} p^+_{\mathbf{n}_\alpha \sigma} p_{\mathbf{m}_\beta \sigma} + t^{pd}_{\mathbf{n}_\alpha \mathbf{m}_\beta} \left(p^+_{\mathbf{n}_\alpha \sigma} d_{\mathbf{m}_\beta \sigma} + \text{h.c.} \right) \right], \tag{1}$$

где ε_d и ε_p — одноэлектронные уровни меди и кислорода соответственно (ниже для определенности ε_d выбирается за начало отсчета, т.е. $\varepsilon_d = 0$, и полагается $\varepsilon_p > 0$); $t^{pp}_{\mathbf{n}_\alpha, \mathbf{m}_\beta}$ и $t^{pd}_{\mathbf{n}_\alpha, \mathbf{m}_\beta}$ — матричные элементы pp-перескоков и pd-гибридизации, причем в реальных системах $| t^{pd}_{\mathbf{n}_\alpha, \mathbf{m}_\beta} | > | t^{pp}_{\mathbf{n}_\alpha, \mathbf{m}_\beta} |$; $p^+_{\mathbf{n}_\alpha, \sigma}$ и $d^+_{\mathbf{n}_\alpha, \sigma}$ — операторы рождения p- и d-электронов на узле $\mathbf{n}_\alpha$ (α — номер подрешетки); σ — спин.

В рамках одноэлектронного приближения оператор (1) может быть частично диагонализован к p- и d-зонам. При этом спектр p-дырок будет состоять из четырех, а d-дырок — двух зон [4]. В принципе, гибридизация смешивает между собой все эти зоны. Мы, однако, ради упрощения, ниже ограничимся рассмотрением лишь одной, ближайшей к d-зонам, p-зоны и учтем, что в диэлектрической фазе обе d-зоны полностью заполнены, фактически отвечая локализованным (антиферромагнитно упорядоченным) дыркам. Для дальнейшего изложения усеченный оператор H_0 удобно представить в эквивалентном матричном виде

$$\hat{H}_0(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} H_p(\mathbf{k}) & H_{pd}(\mathbf{k}) \\ H^*_{pd}(\mathbf{k}) & H_d(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon - t_{pp}(\mathbf{k}) & t_{pd}(\mathbf{k}) \\ t^*_{pd}(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix}, \tag{2}$$

где

$$t_{pp}(\mathbf{k}) = \sum_{\vec{\rho}_{\alpha\beta}} | t^{pp}_{\mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha + \vec{\rho}_{\alpha\beta}} | \exp(i\mathbf{k}\vec{\rho}_{\alpha\beta})$$

и

$$t_{pd}(\mathbf{k}) = \sum_{\vec{\rho}_{\alpha\beta}} | t^{pd}_{\mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\alpha + \vec{\rho}_{\alpha\beta}} | \exp(i\mathbf{k}\vec{\rho}_{\alpha\beta})$$

описывают соответственно дисперсию нижайшей p-зоны и ее гибридизацию с d-уровнями, для которых dd-перескоки, как правило, считаются несущественными (напомним, что в решетках купратных плоскостей ближайшими являются p- и d-орбитали, разделенные векторами $\vec{\rho}_{\alpha\beta}$, следующими — соседние p-орбитали, разделенные векторами $\vec{\rho}_{\alpha\beta}$, и, наконец, лишь третьими соседями — ближайшие между собой d-орбитали). Заметим, что использование модулей в выражениях для дисперсии позволяет наиболее просто явно учесть знаки констант pp- и pd-перескоков для различных ближайших соседей [4]. Таким образом, задача о гибридном электронном спектре ВТСП систем в рассматриваемом приближении свелась к расчету спектра модельного кристалла с простейшим двухзонным спектром, в котором одна (условно p) зона имеет собственную (затравочную) дисперсию, а для другой (d), относительно более узкой зоны можно ограничиться лишь гибридизацией.

Оператор (2) тривиально диагонализируется, а дисперсия нижней («валентной») и верхней («проводимости») гибридных зон задаются выражениями

$$\varepsilon_{c,v}(\mathbf{k}) =$$

$$= \frac{1}{2} \left\{ \varepsilon_p - t_{pp}(\mathbf{k}) \pm \left[(\varepsilon_p - t_{pp}(\mathbf{k}))^2 + 4t^2_{pd}(\mathbf{k}) \right]^{1/2} \right\} \tag{3}$$

($t_{pp}(\mathbf{k})$ и $t_{pd}(\mathbf{k})$ отвечают, как и выше, приближению «своих» ближайших соседей). Поскольку дисперсия $\varepsilon_v(\mathbf{k})$ в валентной зоне обусловлена лишь взаимодействием исходных d-уровней с p-зоной, то легко видеть, что в рассматриваемом случае эффективная масса в этой зоне оказывается положительной. Что касается верхней зоны, то ее дисперсия зависит от соотношения величин $t_{pp}(\mathbf{k})$ и $t_{pd}(\mathbf{k})$. Очевидно, что простейшим является случай положительных масс обеих зон. Для него справедливы

следующие условия для положения нижних (L) границ гибридных зон (3)

$$\varepsilon^L_{c,v} \equiv \varepsilon_{c,v}(0) = \frac{1}{2}\left(\delta \pm \sqrt{\delta^2 + 4\gamma^2}\right);$$
$$\delta \equiv \frac{\varepsilon_p - 4|t_{pp}|}{4|t_{pp}|};\ \gamma \equiv \frac{|t_{pd}|}{|t_{pp}|}; \tag{4}$$

$$\varepsilon^L_c = \begin{cases} \delta + \gamma^2/\delta, & \delta^2 >> 4\gamma^2;\ \delta > 0; \\ \gamma, & \delta^2 << 4\gamma^2;\ \delta > 0; \\ \gamma^2/|\delta|, & \delta^2 >> 4\gamma^2;\ \delta < 0; \end{cases}$$
$$\varepsilon^L_v = \begin{cases} -\gamma^2/\delta, & \delta^2 >> 4\gamma^2;\ \delta > 0; \\ -\gamma, & \delta^2 << 4\gamma^2;\ \delta > 0; \\ -\delta - \gamma^2/|\delta|, & \delta^2 >> 4\gamma^2;\ \delta < 0, \end{cases} \tag{5}$$

которые мы приводим в безразмерных единицах ширины затравочной p-зоны.

Заметим, что принятое равенство $t_{dd} = 0$ с необходимостью приводит к наличию в электронном спектре системы гибридизационной щели (charge-transfer gap). Она возникает, в частности, при $\delta > 0$, $\delta \lesssim \gamma$ (d-уровни ниже дна p-зоны), но особенно ярко проявляет себя при $\delta \le 0$, $|\delta| > \gamma$ (d-уровни внутри p-зоны, причем это, разумеется, не предполагает $\varepsilon_p = \varepsilon_d$). Как следует из (4) и (5), в случае $\delta > 0$ край ε^L_v расположен ближе к положению затравочного d-уровня ($\varepsilon_d = 0$), чем ε^L_c; при $\delta < 0$ ситуация обратная.

Аналогично для верхних краев гибридных зон (3) имеем

$$\varepsilon^U_{c,v} = \frac{1}{2}\left(1 + \delta \pm \sqrt{(1+\delta)^2 + 4\gamma^2}\right) \approx$$
$$\approx \begin{cases} 1 + \delta + \gamma^2/(1+\delta); \\ \qquad\qquad (1+\delta)^2 >> 4\gamma^2. \\ -\gamma^2/(1+\delta); \end{cases} \tag{6}$$

При этом щель в спектре определяется разностью $\varepsilon^L_c - \varepsilon^U_v$. Сравнивая (4) и (6), видим, что при $\delta < 0$ и $|\delta| > 1$ результирующие зоны могу «обменяться» ширинами так, что зона проводимости окажется даже более узкой, чем валентная, что представляется весьма неправдоподобным, поэтому ниже мы этот случай анализировать не будем, считая, что $|\delta| < 1$.

Приведенные простые расчеты демонстрируют, что гибридизация действительно оказывает существенное влияние на вид спектра носителей. Однако для конкретных вычислений более удобно иметь дело не со спектром, а с ПС. В частности, всегда, как известно, в интегралах вида

$$\int f(\varepsilon(\mathbf{k}))\, d\mathbf{k}$$

(которые понадобятся для определения различных функций Грина (ФГ)) можно перейти от интегрирования по k к интегрированию по энергии:

$$\int f(\varepsilon(\mathbf{k}))\, d\mathbf{k} = \int \rho_0(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon.$$

Кроме того, хорошо также известно, что на тех участках спектра, где $\varepsilon(\mathbf{k}) \sim \mathbf{k}^2$, в $2D$ системах невозмущенная ПС $\rho_0(\varepsilon)$ оказывается константой. Поэтому для простоты удобно выбрать $\rho_0(\varepsilon)$ в модельном виде

$$\rho_0(\varepsilon) = \theta(\varepsilon)\left[1 - \theta(1-\varepsilon)\right] = \begin{cases} 1, & 0 \le \varepsilon \le 1; \\ 0, & \varepsilon < 0,\ \varepsilon > 1. \end{cases} \tag{7}$$

Строго говоря, такая ПС не соответствует какому-либо реальному спектру (например, она не содержит ван-хововских особенностей, возможная роль которых в проблеме ВТСП неоднократно отмечалась [1,2,4]). Однако подобный подход оказывается продуктивным для исследования спектров неидеальных кристаллов. Так например, для $3D$ решеток использование полуэллиптической ПС [25] позволило описать многие физически важные ситуации.

Несложно убедиться, что гибридизация заметно сказывается и на ПС изучаемой двухзонной модели. Действительно, учитывая, что элементы ФГ в узельном представлении имеют вид

$$\hat{g}^{(0)}_{\mathbf{nm}}(\varepsilon) = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} g^{(0)}(\varepsilon,\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{n}-\mathbf{m})};$$
$$\hat{g}^{(0)}(\varepsilon,\mathbf{k}) = \frac{1}{\varepsilon - \hat{H}_0(\mathbf{k})}, \tag{8}$$

из (8) (принимая во внимание (7)) приходим к следующим выражениям для диагональных ФГ невозмущенного кристалла:

$$g^{pp}(\varepsilon) \equiv g^{(11)}_{00}(\varepsilon) =$$
$$= -\ln\left|\frac{1-\tilde{\varepsilon}}{\tilde{\varepsilon}}\right| + i\pi\theta(\tilde{\varepsilon})\left[1 - \theta(1-\tilde{\varepsilon})\right];$$
$$\tilde{\varepsilon} \equiv \varepsilon - \delta - \gamma^2/\varepsilon\ ; \tag{9}$$
$$g^{dd}(\varepsilon) \equiv g^{(22)}_{00}(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon}\left[1 + (\gamma^2/\varepsilon) g^{pp}(\varepsilon)\right];$$
$$g^{pd}(\varepsilon) \equiv g^{(12)}_{00}(\varepsilon) = (\gamma/\varepsilon) g^{pp}(\varepsilon).$$

При записи выражений (9) введена переменная $\tilde{\varepsilon}$, использование которой вызвано тем, что, например, вид ФГ $g^{pp}(\tilde{\varepsilon})$ совпадает с ФГ однозонной мо-

дели, где дно зоны соответствует нулевой энергии (см. [6]). Зависимость $\tilde{\varepsilon}(\varepsilon)$ для двухзонной модели показана на рис. 1; видно, что $\tilde{\varepsilon}(\varepsilon) \to \infty \operatorname{sgn} \varepsilon$ при $\varepsilon \to 0$. Поскольку двухзонная модель в указанном смысле подобна однозонной, положение затравочного d-уровня соответствует в последней бесконечно удаленной точке.

Приведем, наконец, вид полной ПС двухзонной модели, для чего представим

$$\rho(\varepsilon) = \rho^p(\varepsilon) + \rho^d(\varepsilon) \equiv \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left[g^{pp}(\varepsilon) + g^{dd}(\varepsilon) \right], \tag{10}$$

где, как нетрудно убедиться, число состояний равно числу ячеек, содержащих по два (p и d) иона, т.е. (см. (8))

$$\int \rho(\varepsilon) d\varepsilon = 2.$$

Тогда, как следует из выражения для $g^{pp}(\varepsilon)$ (9), обусловленная ею часть $\rho^p(\varepsilon)$ ПС (10) постоянна вблизи разрешенного спектра, а величина гибридизации сказывается лишь на положении краев спектра. Другая же ее часть, $\rho^d(\varepsilon)$, благодаря фактору γ^2/ε^2 оказывается немонотонной и испытывает подъемы (рис. 2) в окрестности точек ε_v^U и ε_c^L. Наиболее интересным, несомненно, является второй из них, поскольку в исходной системе v-зона полностью заполнена. Отмеченное же увеличение ПС в гибридной зоне проводимости обусловлено смягчением ее дисперсии в области малых k за счет воздействия d уровней. Более того, отчетливый

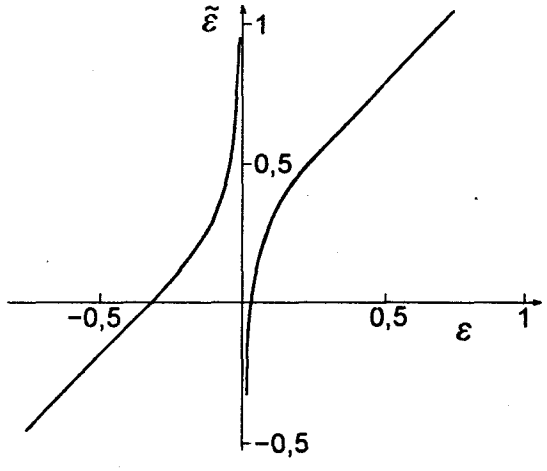

Рис. 1. Вид функции $\tilde{\varepsilon}(\varepsilon)$.

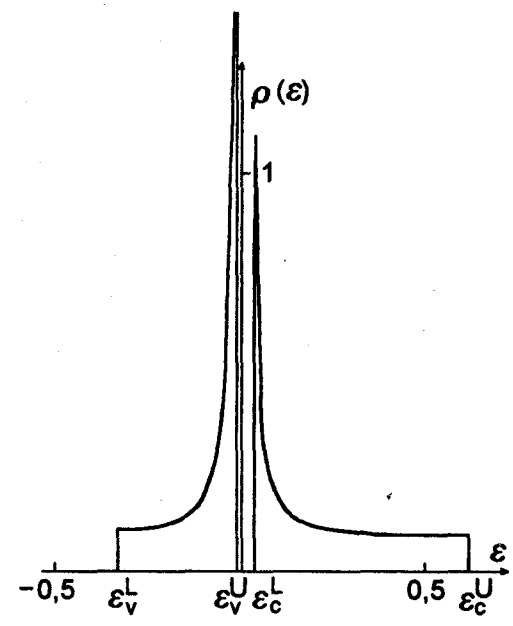

Рис. 2. Полная плотность состояний (10) двухзонной модели для случая $\delta < 0$, $\delta^2 >> \gamma^2$ ($\delta = -0{,}3$; $\gamma = 0{,}1$).

подъем ПС с максимумом на границе зоны * делокализованных состояний является существенной отличительной чертой $2D$ систем (независимо от наличия или отсутствия в них сильных (хаббардовских) корреляций).

Запишем величину, характеризующую отмеченное увеличение ПС на краю зоны проводимости

$$\rho^p(\varepsilon_c^L) + \rho^d(\varepsilon_c^L) = \frac{4\gamma^2}{\left[(\delta^2 + 4\gamma^2)^{1/2} + \delta \right]^2} = \begin{cases} 1 + \gamma^2/\delta^2; & \delta^2 >> 4\gamma^2; \ \delta > 0; \\ 2; & \delta^2 << 4\gamma^2; \ \delta > 0; \\ 1 + \delta^2/\gamma^2, & \delta^2 >> 4\gamma^2; \ \delta < 0. \end{cases} \tag{11}$$

Она свидетельствует, что максимальный всплеск ПС испытывает в том случае, когда невозмущенные d-уровни попадают внутрь области энергий, занятой исходной p-зоной ($\delta < 0$), и величина $\delta^2 >> \gamma^2$. Это обусловлено тем, что гибридная щель в этом случае оказывается весьма узкой $\approx \gamma^2/|\delta|$. Именно такая физическая ситуация ($\delta < 0$ и $\delta^2 >> \gamma^2$) будет, главным образом, анализироваться ниже, поскольку для нее следствия гибридизации наиболее отчетливы.

* В принципе, для произвольных соотношений между $t_{pp}(\mathrm{k})$ и $t_{pd}(\mathrm{k})$ такое увеличение может наблюдаться в окрестности любой точки гибридизованной зоны проводимости [26].

3. Спектр двухзонной модели с примесями

Введение иновалентных примесей или изменение содержания кислорода приводит в соединениях ВТСП, по существу, к двум следствиям. Первое — это создание подсистемы хаотически распределенных заряженных центров, создающих для носителей, движущихся по токонесущим купратным слоям, потенциал притяжения. Второе — поставка носителей в эти слои*. Возмущение $\hat{V}$ имеет одноузельный характер и сводится к однопараметрической модели Лифшица, обоснованной для ВТСП в [6,27].

Гамильтониан возмущения, вносимого примесью в узле p, занятом кислородом, в рамках этой модели имеет вид

$$v = -\Delta\varepsilon p^{+}_{p\sigma} p_{p\sigma} ,$$

или

$$\hat{V}_{nm} = \delta_{nm}\delta_{np} \begin{pmatrix} -\Delta\varepsilon & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad (12)$$

где безразмерное возмущение $\Delta\varepsilon > 0$ описывает понижение уровней энергии p-дырок в кулоновском поле примесного иона, а вид матрицы 2×2 отвечает оговоренному выше приближению — учету только двух исходных зон. Мы также опускаем возможное воздействие возмущения на d-ионы, считая последнее относительно более слабым, так как в решетках ВТСП (см. [27]) примесные ионы расположены, как правило, ближе к ионам O^{2-}, чем к ионам Cu^{2+}.

Выражение (12) позволяет сразу записать уравнение для энергии локального (примесного) состояния

$$1 + \Delta\varepsilon g^{pp}(\tilde{\varepsilon}_{loc}) = 0.$$

Видно, что в переменной $\tilde{\varepsilon}$(9) это уравнение тождественно уравнению однозонной задачи, решение которой дает

$$\tilde{\varepsilon}_{loc} = \left[1 - \exp(1/\Delta\varepsilon)\right]^{-1} < 0, \qquad (13)$$

откуда для двухзонной задачи получаем

$$\varepsilon^{p,d}_{loc} = \frac{1}{2}\left[\delta + \tilde{\varepsilon}_{loc} \pm \left((\delta + \tilde{\varepsilon}_{loc})^2 + 4\gamma^2\right)^{1/2}\right]. \qquad (14)$$

Иначе говоря, из (14) следует, что независимо от величины возмущения $\hat{V}$ в двухзонной модели из непрерывного спектра отщепляется пара дискретных уровней. Потенциалу притяжения ($\Delta\varepsilon > 0$) соответствует такое их положение, при котором вблизи каждой из двух зон оказывается по одному уровню, причем ε^{p}_{loc} не может опуститься ниже $\varepsilon_d = 0$. В наиболее интересном случае $\delta < 0$, $\delta^2 >> \gamma^2$ из (14) следует, что энергия локального уровня, ближайшего к зоне проводимости,

$$\varepsilon^{p}_{loc} \approx \frac{\gamma^2}{|\tilde{\varepsilon}_{loc} + \delta|} > 0,$$

а его удаленность от нижнего края зоны проводимости

$$\varepsilon^{L}_{c} - \varepsilon^{p}_{loc} = \frac{\gamma^2}{|\delta|} - \frac{\gamma^2}{|\tilde{\varepsilon}_{loc} + \delta|} \approx \frac{\gamma^2}{\delta^2}\tilde{\varepsilon}_{loc} . \qquad (15)$$

Последнее соотношение показывает, что если (как это обычно имеет место в реальных системах) расстояние от локального уровня до края зоны проводимости значительно меньше щели, или

$$\varepsilon^{L}_{c} - \varepsilon^{p}_{loc} << \varepsilon^{L}_{c} - \varepsilon^{U}_{v}$$

(в рассматриваемом случае $\varepsilon^{L}_{c} - \varepsilon^{U}_{v} \approx \gamma^2/|\delta|$), то $\tilde{\varepsilon}_{loc} << |\delta|$.

В случае же потенциала отталкивания ($\Delta\varepsilon < 0$) оба дискретных уровня, описываемых (14), окажутся выше соответствующих им гибридных зон, однако положение ε^{d}_{loc} не может превысить то же значение $\varepsilon_d = 0$ и оказывается «зажатым» в узкой полосе $\varepsilon^{U}_{v} < \varepsilon^{d}_{loc} < 0$.

При исследовании спектра рассматриваемой системы при конечной концентрации примесных центров c, будем, в основном, интересоваться состояниями блоховского типа, т.е. такими, эффективное затухание которых вследствие рассеяния на примесях в неупорядоченной среде мало на длине волны. Для анализа спектра этих состояний удобнее всего разложить массовый оператор $\hat{\Sigma}(k)$ для одночастичной ФГ

$$\hat{g}(\varepsilon, k) = \left[\varepsilon - \hat{H}_0(k) - \hat{\Sigma}(k)\right]^{-1} \qquad (16)$$

* При таком способе осуществления перехода диэлектрик–металл концентрации примесей и носителей одинаковы, что, будучи несомненной особенностью ВТСП систем, обычно упускается из виду (см., например, [1–3]) при исследовании спектров металлической фазы.

неидеальной системы в бесконечный ряд по группам взаимодействующих примесных центров, используя в качестве пропагатора саму перенормированную ФГ $\hat{g}$ [24]. Первый член такого разложения соответствует хорошо известному приближению когерентного потенциала, когда

$$\hat{g}(\varepsilon, \mathbf{k}) \approx \hat{g}_{CP}(\varepsilon, \mathbf{k}) = [\varepsilon - \hat{H}_0(\mathbf{k}) - \hat{\sigma}]^{-1};$$

$$\hat{\sigma} = c\hat{V}\left[1 - g_{00}^{CP}(\varepsilon)(\hat{V} - \hat{\sigma})\right]^{-1}; \qquad (17)$$

$$g_{\mathbf{nm}}^{CP}(\varepsilon) = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} g_{CP}(\varepsilon, \mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{n}-\mathbf{m})}.$$

Учтем конкретный вид возмущения (12), что является упрощающим фактором для дальнейших расчетов. Действительно, возмущение имеет лишь один, не равный нулю, элемент, поэтому, как следует из (17), имеем

$$\hat{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma = -\frac{c\Delta\varepsilon}{1 + (\Delta\varepsilon + \sigma)\,\tilde{g}_{00}^{pp}(\varepsilon)}; \qquad (18)$$

и, кроме того,

$$\tilde{g}_{00}^{pp}(\varepsilon) \equiv g^{pp}(\tilde{\varepsilon} - \sigma). \qquad (19)$$

Подобным же образом упрощаются и остальные члены ряда в разложении массового оператора $\hat{\Sigma}(\mathbf{k})$. Из выражений (18) и (19) следует, что рассматриваемая двухзонная задача с возмущением вида (17) сводится к однозонной $2D$ задаче с модельной ПС (17), а переход к реальной задаче с двумя гибридными зонами осуществляется с помощью отображения полученной картины спектра, который здесь получается в терминах энергетического параметра $\tilde{\varepsilon}$, на ось реальных энергий ε с использованием приведенной выше зависимости $\tilde{\varepsilon}(\varepsilon)$ (см. рис.1) и, что особенно важно, к учету дополнительного вклада $\mathrm{Im}\, g^{dd}(\tilde{\varepsilon} - \sigma)$ в полную ПС.

Как было показано в [28], условие асимптотической сходимости ряда для $\hat{\Sigma}(\mathbf{k})$ имеет вид

$$\left|\left\{c\left[\frac{\Delta\varepsilon + \sigma}{1 + (\Delta\varepsilon + \sigma)\tilde{g}_{00}^{pp}(\varepsilon)}\right]^2 + (1-c)\left[\frac{\sigma}{1 + \sigma\,\tilde{g}_{00}^{pp}(\varepsilon)}\right]^2\right\}\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\tilde{g}_{0\mathbf{n}}^{pp}(\varepsilon)\tilde{g}_{\mathbf{n}0}^{pp}(\varepsilon)\right| \leq \zeta, \qquad (20)$$

где $\zeta = 1/2$, и согласуется с критерием Иоффе—Регеля—Мотта. Таким образом, для квазиблоховских состояний разложение $\hat{\Sigma}(\mathbf{k})$ оказывается сходящимся, причем границы областей существования слабозатухающих состояний совпадают с границами областей расходимости данного ряда. Последним свойством воспользуемся ниже при определении смещения границ гибридизованных зон квазиблоховских состояний, происходящего при повышении концентрации примесей c.

Если теперь учесть, что в ВТСП оксидах относительная концентрация дефектов обычно мала ($c \ll 1$), то условие (20) можно записать в виде

$$\left|c\tau^2\sum_{\mathbf{n}\neq 0}\tilde{g}_{0\mathbf{n}}^{pp}(\varepsilon)\tilde{g}_{\mathbf{n}0}^{pp}(\varepsilon)\right| = \left|-c\tau^2\frac{dg^{pp}(E)}{dE}\right| \ll 1, \qquad (21)$$

где

$$E = \tilde{\varepsilon} - \sigma \qquad (22)$$

является перенормированным энергетическим параметром и использовано обозначение $\tau \equiv -\Delta\varepsilon[1 + \Delta\varepsilon\tilde{g}_{00}^{pp}(\varepsilon)]^{-1}$.

Отметим также, что указанное выше соответствие между критерием сходимости (21) и критерием Иоффе—Регеля—Мотта сводится к тому, что условие (20) можно представить в виде

$$\mathrm{Re}\, E \gg \mathrm{Im}\, E \equiv \mathrm{Im}\, \sigma, \qquad (23)$$

и, таким образом, на границе области расходимости с приемлемой точностью можно пренебречь величиной $\mathrm{Im}\,\sigma$ по сравнению с $\mathrm{Re}\, E$ в аргументе ФГ, а величину $\mathrm{Re}\,\sigma$ рассматривать как эффективный сдвиг квазиблоховских состояний. Тогда результирующий вид спектра элементарных возбуждений блоховского типа и соответствующую им ПС можно получить, производя в аргументе ФГ (9) и ПС (11) замену $\delta \to \delta + \mathrm{Re}\,\sigma(\varepsilon)$.

С учетом конкретного вида ФГ (9) и выражения для энергии локального уровня (13) критерий (21) можно переписать в форме

$$\left|c\left[\ln^2\left|\frac{(1-E)\,\tilde{\varepsilon}_{\mathrm{loc}}}{E(1-\tilde{\varepsilon}_{\mathrm{loc}})}\right|(1-E)E\right]^{-1}\right| \ll 1, \qquad (24)$$

которая показывает, что области расходимости присутствуют как на нижних краях обеих зон слабозатухающих состояний, так и в окрестностях локальных уровней. Для того чтобы при этом рассматриваемые состояния могли быть отнесены к

квазиблоховскому типу, значение E для них должно превосходить некоторую характерную величину E_L, так что

$$E >> E_L \approx c \ln^{-2} \left| \frac{(1-c)\,\tilde{\varepsilon}_{\text{loc}}}{c(1-\tilde{\varepsilon}_{\text{loc}})} \right|. \qquad (25)$$

В реальных системах, однако, обычно выполняются условия $c << 1$ и $\tilde{\varepsilon}_{\text{loc}} << 1$, поэтому (25) приобретает окончательный вид

$$E >> E_L \approx c \ln^{-2} \frac{c_0}{c}, \quad c_0 \equiv -\tilde{\varepsilon}_{\text{loc}}. \qquad (26)$$

Полученное выражение справедливо при $c < c_0$, где c_0 — характерная концентрация коллективной перестройки спектра [6,23,24], отвечающая, как будет видно, концентрации перехода от диэлектрического состояния или состояния с прыжковым типом проводимости, к металлическому состоянию системы в целом. Отметим, что в случае $\delta < 0$, $\delta^2 >> \gamma^2$ концентрация $c_0 < |\delta|$.

Таким образом, в рамках фиктивной однозонной задачи низкоэнергетическая граница квазиблоховских состояний при $c < c_0$ размыта на величину E_L, которая растет с ростом c. Соответственно сдвиг данной границы, который можно получить, подставляя в (18) найденное значение (26) этого энергетического параметра на границе области расходимости, составляет

$$\operatorname{Re}\sigma(E_L) \equiv \operatorname{Re}\sigma_L \sim c \ln^{-1} \frac{c_0}{c}. \qquad (27)$$

Видно (ср. (26)), что в пределе $c << c_0$ этот сдвиг $\operatorname{Re}\sigma_L >> E_L$, причем с ростом концентрации край зоны сдвигается в область более высоких энергий. Полученные выше выражения (4) и (5) для положения нижних краев гибридизованных зон сохраняют свой вид и для соответствующих смещений $\Delta\varepsilon^L_{c,v}$ с учетом замены (см. выше) $\delta \to \delta + \operatorname{Re}\sigma_L$. И так как

$$\frac{d\varepsilon^L_{c,v}}{d\delta} = \frac{1}{2}\left(1 \pm \frac{\delta}{(\delta^2 + 4\gamma^2)^{1/2}}\right) > 0, \qquad (28)$$

обе низкоэнергетические границы сдвигаются с ростом концентрации примесей в сторону бо́льших энергий.

В окрестности примесных уровней ПС (при малых концентрациях $c < c_0$) обусловлена возбуждениями, локализованными на группах примесных центров. Когда же c оказывается порядка c_0, концентрационные размытия нижних краев зон имеют уже тот же порядок, что и величины их сдвигов, а, с другой стороны, по порядку величины соответствуют расстояниям от невозмущенных краев зон до областей примесных уровней. При этом концентрационные уширения самих примесных уровней составляют величины порядка тех же расстояний. В итоге, при $c \sim c_0$ одновременно в обеих зонах происходит перестройка спектра, обусловленная перекрытием между собой волновых функций примесных состояний (коллективная перестройка спектра как физическое явление описана в обзоре [23]).

Нетрудно убедиться, что введенная в (26) концентрация c_0 вследствие влияния валентной зоны (т.е. характерная концентрация перестройки двухзонного спектра) больше той величины, которую можно было бы получить исходя из глубины локального уровня $\varepsilon^L_c - \varepsilon^p_{\text{loc}}$ (15), деленной на ширину зоны проводимости (в предельном случае $\delta < 0$, $\delta^2 >> \gamma^2$ указанное превышение, как следует из (15), составляет δ^2/γ^2 раз). Отмеченное поведение обусловлено тем, что вследствие гибридизации ширина зоны проводимости может уменьшиться (в том числе существенно) по сравнению со своим затравочным значением.

Рассмотрим теперь случай больших концентраций ($c > c_0$). Здесь важно отметить, что выражения (27) для размытия края зоны и (28) для его сдвига остаются неизменными и в этой области c, однако сдвиг (по-прежнему $|\operatorname{Re}\sigma_L| > E_L$) нижних краев гибридных зон, как это непосредственно следует из данных выражений, при увеличении c происходит уже в сторону более низких энергий, т.е. в обратном направлении ($\operatorname{Re}\sigma_L < 0$), чем это имело место в случае $c < c_0$. Поскольку в данной области $\operatorname{Re}\sigma_L < 0$, сдвиг нижней границы квазиблоховских состояний зоны проводимости с ростом концентрации примесей, согласно (28), все больше замедляется по сравнению со случаем одной изолированной зоны, если только $|\operatorname{Re}\sigma_L|$ окажется достаточно большим. В то же время для нижней границы слабозатухающих состояний валентной зоны справедливо противоположное утверждение.

Существенно, что величина сдвига на логарифмический множитель меньше, чем концентрация примесей. Это особенно важно, поскольку уровень Ферми по мере допирования проникает в область высоких (в терминах переменной $\tilde{\varepsilon}$) энергий на величину $\sim c$, что превосходит величину сдвига на тот же логарифмически большой фактор. Появление соответствующих логарифмов — особенность $2D$ и квази-$2D$ систем [6].

Исходные положения локальных уровней при этом оказываются лежащими среди сдвинутых в сторону меньших энергий слабозатухающих состояний, а локализованные состояния находятся в областях концентрационного размытия краев гибридных зон и ниже — в областях флуктуационных хвостов ПС, далеко отстоящих от положений локальных уровней. При этом интегральное число локализованных состояний не должно превосходить ширину области концентрационного размытия, которая существенно меньше концентрации.

4. Обсуждение

Проанализируем изменение в ПС и возможность металлизации рассматриваемой системы при введении в нее носителей посредством легирования.

При $c \ll c_0$ из (10) и (11) очевидно, что величина $\rho(\Delta\varepsilon_c^L)$ уменьшается с ростом c. Введенные носители при данных (малых) концентрациях занимают локализованные состояния, лежащие в области концентрационного уширения локального состояния $\varepsilon_{\text{loc}}^p$, включая флуктуационные хвосты (легирование, как отмечалось, происходит при полностью заполненной валентной зоне и полностью пустой (при $c = 0$) зоне проводимости). Уровень Ферми при этом лежит между положением локального уровня и $\Delta\varepsilon_c^L$.

Когда же $c \gg c_0$, то вследствие смещения нижнего края зоны проводимости в сторону затравочного d-уровня величина $\rho(\Delta\varepsilon_c^L)$ возрастает с увеличением концентрации примесей (или, что одно и то же, — концентрации носителей). Соответствующий рост особенно велик, если $\delta + \operatorname{Re}\sigma_L < 0$ и, кроме того, $(\delta + \operatorname{Re}\sigma_L)^2/\gamma^2 \gg 1$ (т.е. в качественно наиболее интересной ситуации). Локальный уровень, отщепляющийся от зоны проводимости, попадает при этом в узкий интервал энергий между $\varepsilon_d = 0$ и нижней границей ($\approx \gamma^2/\delta$) зоны проводимости. Поэтому вызванный допированием сдвиг края зоны проводимости будет мало заметен и, таким образом, будет подобен пиннингу.

Как следует из сказанного в предыдущем разделе (см. (26)), при $c \gg c_0$ число локализованных состояний в области концентрационного размытия длинноволнового края зоны проводимости $\sim c \ln^{-2}(c_0/c)$. Однако так как полное число носителей, появившихся благодаря допированию, в свою очередь, $\sim c$, то они будут занимать не только локализованные, а и слабозатухающие (квазиблоховские) состояния. В результате система в окрестности концентраций $c \approx c_0$ испытывает переход диэлектрик—металл. И поскольку сдвиг нижней границы таких состояний дается уравнением (27), уровень Ферми действительно оказывается лежащим несколько выше невозмущенной нижней границы зоны проводимости: это превышение $\sim c$ в терминах переменной $\tilde{\varepsilon}$ и (при $\delta < 0$, $\delta^2 \gg \gamma^2$) $\sim c\gamma^2/\delta^2 \ll c$ — в шкале истинных энергий. Эта оценка показывает, что уровень Ферми подвижных носителей возникает достаточно близко к невозмущенному краю зоны, но выше него. Тем самым в рамках двухзонной модели имеется ответ на вопрос о месте расположения уровня Ферми в окрестности перехода от диэлектрического состояния к металлическому: несмотря на сильное размытие края зоны и конечность ПС в области исходной запрещенной щели, уровень Ферми делокализованных носителей формируется в той области энергий, которая отвечает длинноволновым состоянием затравочной зоны проводимости, хотя и достаточно близко к ее краю.

Следует также сказать, что с увеличением концентрации примесей число добавочных носителей растет быстрее, чем сдвиг нижней границы состояний блоховского типа зоны проводимости (такой эффект имеет место и в однозонном случае [6]). Поэтому с увеличением c уровень Ферми повышается, а ПС на нем описывается величиной $(|\delta| - c)^2/\gamma^2$ (при тех же условиях $\delta < 0$, $\delta^2 \gg \gamma^2$). Другими словами, ПС на уровне Ферми падает с ростом концентрации (напомним, что мы считаем $c_0 \ll |\delta|$). Подобное падение имеет место лишь в двухзонной модели и есть следствие динамической (гибридизационной) «перекачки» ПС из узкой зоны в широкую (точнее, область ее нижнего края). По мере дальнейшего роста c падение замедлится (уровень Ферми пройдет область спада ПС) и при $c \sim |\delta|$ прекратится, поскольку ПС выйдет на свое предыдущее значение ~ 1.

Отмеченное немонотонное поведение ПС на уровне Ферми не может, вообще говоря, не отразиться на физических величинах. Одной из таких величин, особенно важных для сверхпроводников вообще и ВТСП соединений в частности, является критическая температура T_c, немонотонно зависящая от концентрации носителей (см., например, [3,4]). Как правило, такую зависимость связывают (см. [1,4]) с тем, что уровень Ферми пересекает по мере допинга одну из ван-хововских особенностей зоны проводимости, не учитывая при этом примесный характер возникновения самой проводимости как таковой. Нами показано (рис. 3), что аналогичный эффект характерного всплеска в ПС сохраняется и в том случае, когда металлизирует-

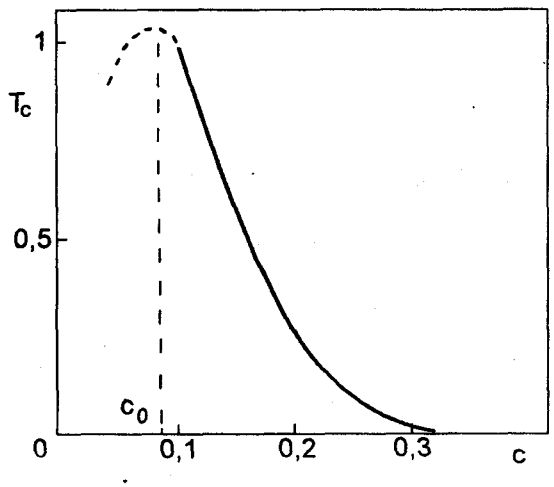

Рис. 3. Качественное поведение критической температуры сверхпроводящего перехода при $c > c_0$ (штриховая линия отвечает области прыжковой проводимости).

ся неупорядоченная 2*D* система, однако поведение ее ПС целиком обусловлено наличием двух гибридизующихся зон. Отметим, однако, что условия возникновения сверхпроводящих корреляций в системе, в которой число примесей (центров рассеяния) равно числу носителей, насколько нам известно, не изучались и составляют проблему для специального исследования (см. [29]).

Работа частично поддержана Международным фондом «Возрождение» (грант ISSEP SPU 042026) и Международным научным фондом (грант K5O100).

1. E. Dagotto, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 763 (1994).
2. W. Brenig, *Phys. Rep.* **251**, 153 (1995).
3. Ю. А. Изюмов, Н. М. Плакида, Ю. Н. Скрябин, *УФН* **159**, 621 (1989).
4. В. М. Локтев, *ФНТ* **22**, 3 (1996).
5. С. Г. Овчинников, *ЖЭТФ* **103**, 1404 (1993).
6. М. А. Иванов, В. М. Локтев, Ю. Г. Погорелов, Ю. В. Скрипник, *ФНТ* **17**, 716 (1991).
7. H. Matsuyama, T. Takahashi, H. Katayama-Yoshida, T. Kashiwakura, Y. Okabe, S. Sato, N. Kosugi, A. Yagishita, K. Tanaka, H. Fujimori, and H. Inokuchi, *Physica* **C160**, 567 (1989).
8. J. Fink, N. Nüker, H. Romberg, M. Alexander, P. Adelmann, J. Mante, R. Claessen, T. Buslaps, S. Harm, R. Manzke, and M. Sibkowski, in:*Intern. Seminar on High Temperature Superconductivity*, Dubna, July 3–6 (1990), p. 8.
9. J. C. Compuzano, G. Jennings, M. Faiz, L. Beaulaique, B. W. Veal, L. Z. Liu, A. P. Paulicas, K. Vandervoort, H. Claus, R. S. List, A. J. Arko, and R. J. Bartlett, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 2308 (1990).
10. C. G. Olson, R. Liu, D. W. Lynch, R. S. List, A. J. Arko, B. W. Veal, Y. C. Chang, P. Z. Jiang, and A. P. Paulicas, *Phys. Rev.* **B42**, 381 (1991).
11. D. S. Dessau, Z.-X. Shen, D. M. King, D. S. Marshall, L. W. Lombardo, P. H. Dickinson, A. G. Loeser, J. DiCarlo, C.-H. Park, A. Kapitulnik, and W. E. Spicer. *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2781 (1993).
12. K. Gofron, *J. Phys. Chem. Solids* **54**, 1193 (1993).
13. Z.-X. Shen and D. S. Dessau, *Phys. Rep.* **253**, 1 (1995).
14. J. W. Allen, C. G. Olson, M. B. Maple, J.-S. Kang, L. Z. Liu, J.-H. Park, R. O. Anderson, W. P. Ellis, J. T. Markert, Y. Dalichaouch, and R. Liu, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 595 (1990).
15. B. O. Wells, Z.-X. Shen, A. Matsuura, D. M. King, M. A. Kastner, M. Greven, and R. J. Birgeneau, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 964 (1995).
16. G. Rietveld, M. Glastra, and D. van der Marel, *Physica* **C241**, 257 (1995).
17. G. Rietveld, S. J. Collocott, R. Driver, and D. van der Marel, *Physica* **C241**, 273 (1995).
18. M. A. Veenendaal and G. A. Sawatsky, *Phys. Rev.* **B49**, 1407 (1994).
19. N. W. Preyer, R. J. Birgeneau, C. Y. Chen, D. R. Grabbe, H. P. Jenssen, M. A. Kastner, P. J. Picone, and T. Thio, *Phys. Rev.* **B39**, 11563 (1989).
20. J. P. Flack, A. Levy, M. A. Kastner, and R. J. Birgeneau, *Phys. Rev.* **B48**, 4043 (1993).
21. B. Keimer, N. Belk, R. J. Birgeneau, A. Cassanho, C. Y. Chen, M. Greven, M. A. Kastner, A. Aharony, Y. Endoh, R. W. Erwin, and G. Shirane, *Phys. Rev.* **B46**, 14034 (1992).
22. Н. Мотт, Э. Дэвис, *Электронные процессы в некристаллических веществах*, Мир, Москва (1974).
23. M. A. Ivanov, V. M. Loktev, and Yu. G. Pogorelov, *Phys. Rep.* **153**, 209 (1987).
24. М. А. Иванов, Ю. Г. Погорелов, *ЖЭТФ* **76**, 1010 (1979); **88**, 1738 (1985).
25. B. Velicky, S. Kirkpatrick, and H. Ehrenreich, *Phys. Rev.* **175**, 747 (1968).
26. М. Д. Медведев, *ФНТ* **21**, 810 (1995).
27. М. А. Иванов, В. М. Локтев, Ю. Г. Погорелов, *ЖЭТФ* **101**, 596 (1992).
28. М. А. Иванов, Ю. В. Скрипник, *ФТТ* **36**, 94 (1994).
29. В. М. Локтев, Ю. Г. Погорелов, *ФНТ* **22**, 9 (1996).

Impurity states and insulator-metal transition in 2D systems with hybridized spectrum

M. A. Ivanov, V. M. Loktev, and Yu. V. Skripnik

The characteristic energies of localized and delocalized states, their densities and insulator-metal transition in a two-band model of 2*D* crystal, the initial electronic spectrum of which consists of two (narrow and wide) hybridizating bands are considered. It is shown that hybridization essentially affect all characteristics defining spectral and transport properties of both insulating and metalic phases of the system. Critical concentration of insulator—metal transition induced by doping is calculated and it is shown that density of states near Fermi level can be non-monotonic function of carrier concentration. The attempt is made to relate the results obtained with a behavior of density of states and observable dependence of critical temperature on dopant concentration in high-T_c superconductors.