*Письма в ЖЭТФ, том 42, вып. 4, стр. 156 – 158* *25 августа 1985 г.*

# СДВИГ НАЙТА В КВАЗИОДНОМЕРНЫХ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМАХ С АНДЕРСОНОВСКОЙ ЛОКАЛИЗАЦИЕЙ ЭЛЕКТРОНОВ

*В.В.Авилов, Л.Н.Булаевский, О.Н.Дорохов*

**Для одномерной системы в состоянии андерсоновского диэлектрика рассчитано распределение сдвига Найта. При охлаждении распределение уширяется и становится асимметричным. Аналогичную форму приобретает линия ЯМР при низких температурах.**

1. В неупорядоченных системах измерения сдвига Найта дают прямую информацию о пространственном распределении спиновой плотности электронов. Мы рассчитали распределение сдвига Найта $K$ в системах с андерсоновской локализацией электронов. Функция распределения $K$ зависит от одного параметра $\rho = 4TV_l N(E_F)$, где $V_l$ – объем локализации, $T$ – температура и $N(E_F)$ есть средняя плотность электронных состояний на уровне Ферми. С уменьшением $\rho$ распределение $K$ становится асимметричным и уширяется. Поэтому при достаточно низких температурах распределение сдвига Найта начинает определять форму линии ЯМР, и измерения ее дают прямую информацию о радиусе локализации электронов.

Ниже мы рассмотрим одномерную систему электронов, имея в виду интерпретацию экспериментальных исследований ЯМР в квазиодномерном проводнике с сильным беспорядком $Qn(TCNQ)_2$.

2. Сдвиг Найта пропорционален величине спиновой плотности электронов на ядре $\sigma(\mathbf{r})$. Без учета взаимодействия электронов имеем

$$\sigma(\mathbf{r}) = \sum_{\nu} |\varphi_\nu(\mathbf{r})|^2 \frac{\partial f}{\partial \epsilon}\bigg|_{\epsilon = \epsilon_\nu} 2\mu_B H, \qquad (1)$$

где $f(\epsilon)$ – фермиевская функция распределения электронов и $\mu_B H$ есть зеемановская энерги... Индекс $\nu$ нумерует локализованные состояния с энергиями $\epsilon_\nu$ и волновыми функциями $\varphi_\nu(\mathbf{r})$ с центром локализации в точке $\mathbf{r}_\nu$, причем волновые функции спадают экспоненциально с ростом $|\mathbf{r}-\mathbf{r}_\nu|$. В одномерном случае мы будем аппроксимировать $|\varphi_\nu(r)|^2$ функцией $(4R_l)^{-1}\,\mathrm{ch}^{-2}\,[(r-r_\nu)/2R_l]$.

Тогда из (1)

$$\kappa = \frac{K}{\overline{K}} = \rho^{-1}\sum_\nu \mathrm{ch}^{-2}x_\nu \mathrm{ch}^{-2}y_\nu, \tag{2}$$

где $K$ есть средний (по объему) сдвиг Найта, пропорциональный $N(E_F)$ и $x_\nu = |r-r_\nu|/2R_l$, $y_\nu = |E_F-\epsilon_\nu|/2T$. В области $\rho\kappa \gg 1$ распределение $\kappa$ зависит от вида функции $\varphi_\nu(r)$ вблизи $r=R_l$, и описание с помощью (2) имеет модельный характер. При $\rho\kappa \ll 1$ основной вклад в распределение $\kappa$ определяется областью $r \gg R_l$ и полученные ниже результаты для систем универсальны.

Распределение $\kappa$ зависит от распределения случайных величин $x_\nu$, $y_\nu$ на плоскости $x, y$, причем средняя плотность точек $\nu$ равна $\rho$ (мы считаем $E_F \gg T$). Из расчетов [2] следует, что $x_\nu$ и $y_\nu$ распределены равномерно и независимо друг от друга при $x_\nu > 1$. На меньших расстояниях эффект расталкивания уровней приводит к тому, что при малых $x_\nu < 1$ более вероятны малые $y_\nu$. Этот эффект несуществен при $\rho\kappa \ll 1$ и далее мы будем считать распределения величин $x_\nu, y_\nu$ независимыми и равномерными. Тогда из (2) получаем для функции распределения

$$W(\kappa) = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dp}{2\pi}\exp\{ip\kappa + \rho\int_0^\infty dx\int_0^\infty dy\,[\exp(ip\rho^{-1}\,\mathrm{ch}^{-2}x\,\mathrm{ch}^{-2}y) - 1\,]\}. \tag{3}$$

При $\rho \gg 1$ выражение (3) дает гауссово распределение

$$W(\kappa) = \sqrt{\frac{9\rho}{8\pi}}\exp\left[-\frac{9}{8}\rho(\kappa-1)^2\right], \quad \rho \gg 1, \tag{4}$$

причем в соответствии со сказанным выше асимптотика (4) может быть использована лишь для оценок ширины распределения $\kappa$.

В области $\rho\kappa \ll 1$ функции $\mathrm{ch}^{-2}x$ и $\mathrm{ch}^{-2}y$ можно заменить экспонентами, так как основной вклад в интеграл дают большие $x, y$, и (3) преобразуется к виду

$$W(\kappa) = \pi^{-1}\rho\exp\left(\frac{5\pi^2\rho}{12}\right)\int_0^\infty dt\sin(\pi\rho\ln\gamma t)\exp\left(-\kappa\rho t - \frac{1}{2}\rho\ln^2\gamma t\right), \tag{5}$$

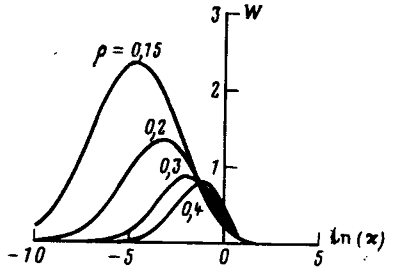
$$\gamma = e^C, \quad C = 0{,}577.$$

Графики функции $W(\kappa)$ в зависимости от $\ln\kappa$ показаны на рис. 1. Из (5) следует гауссово распределение логарифма $\kappa$ при $\rho \to 0$

$$W(\kappa) = \rho\exp\left[\frac{1}{2\rho} - C - \frac{1}{2}\alpha(\ln\kappa - \ln b)^2\right],$$

$$\ln b = -\frac{1}{\rho} - \ln\rho, \quad \alpha^{-1} = \rho^{-1} - \ln(\pi/2\gamma^2\rho). \tag{6}$$

При уменьшении $\rho$ пик функции $W(\kappa)$ сползает в область $\rho\kappa \ll 1$, и описание (6) при $\rho \ll 1$ оказывается точным почти для всех $\kappa$ за исключением далекого правого крыла, где функция $W(\kappa)$ очень мала. По мере уменьшения $\rho$ реальная ширина распределения сдвига Найта $\Delta\kappa$, определяемая по половине от максимума, сначала растет, достигает максимума при $\rho \approx 1$, и затем падает при $\rho \to 0$ как $\rho^{-1}\exp\left[-\frac{1}{\rho}+\left(\frac{2\ln 2}{\rho}\right)^{1/2}\right]$. Поэтому при малых $\rho$ форма линии ЯМР может зависеть от других источников уширения, отличных от неоднородного сдвига Найта. Если их вклад в ширину линии есть $\gamma$, то сдвиг Найта доминирует при $\Delta\kappa > \gamma$. В современной ЯМР спектроскопии высокого разрешения устранено диполь-дипольное уширение и на монокристаллических образцах типа $Qn(TCNQ)_2$ может быть достигнуто отношение $\gamma/\bar{K} \approx 0{,}02$ [1]. В такой ситуации сдвиг Найта определяет форму линии при $\rho > 0{,}1$.




3. Выше мы не учитывали отталкивание электронов. Из-за него при низких температурах вблизи уровня Ферми появляются состояния, занятые одним электроном. В результате парамагнитная восприимчивость $\chi$ растет по степенному закону при $T \to 0$, и расчет сдвига Найта требует иного подхода (см. [3]). В $Qn(TCNQ)_2$ рост $\chi$ начинается ниже 20К, а при $T > 20$К величина $\chi$ примерно постоянна и соответствует восприимчивости вырожденного электронного газа. При 295К измерения [1] показали доминирующую роль сдвига Найта в формировании линии ЯМР. Она асимметрична, ее ширина согласно (4) или (5) соответствует значению $\rho \approx 5$. Из данных для $\chi$ имеем $N(E_F) = (\pi v_F)^{-1} \approx 8{,}4\cdot 10^3$ К$^{-1}\cdot$см$^{-1}$ и $R_l$ достигает около 15 межмолекулярных расстояний вдоль стопки $TCNQ$. Обратное время соударений $\tau^{-1} = 2v_F/R_l \approx 150$К в согласии с оценками [4]. При охлаждении до 85К наблюдалось уширение линии и сдвиг пика в сторону $K = 0$ в соответствии с расчетами. При этом $\rho$ падало примерно в 4 раза. т. е. в интервале 85 – 295К радиус локализации $R_l$ почти не зависит от температуры. В [1] исследовались поликристаллические образцы. Для них $\gamma$ определяется в основном анизотропией сдвига, и $\gamma/\bar{K} \approx 0{,}4$ независимо от $T$. В таких образцах сдвиг Найта доминирует при $\rho \gtrsim 1$. Поэтому при меньших $\rho$ (ниже 85 К) исследование сдвига Найта возможно лишь на монокристаллических образцах.

Авторы благодарят А.М.Вайнруба за ознакомление с результатами измерений ЯМР в $Qn(TCNQ)_2$ при низких температурах, а также Л.П.Горькова и Э.И.Рашба за полезное обсуждение.

### Литература


1. *Вайнруб А.М., Хейнмаа И.А., Алла М.А., Вия С.Х., Липпмаа Э.Т.* Письма в ЖЭТФ, 1985, **41**, 468.
2. *Горьков Л.П., Дорохов О.Н., Пригара Ф.В.* ЖЭТФ, 1983, **84**, 1440.
3. *Булаевский Л.Н.* ЖЭТФ, 1978, **75**, 748.
4. *Дорохов О.Н., Матвеенко С.И., Пригара Ф.В.* ФНТ, 1981, **7**, 738.


Физический институт им. П.Н.Лебедева
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
1 июля 1985 г.