

کاربرد میانگین نایزوترپ فوق انتقالی در تخمین ضرایب اسپین
از:

م - ع - ضیائی

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه تهران - صندوق پستی ۲۹۸۹

و

ز - فردانی

خلاصه:

همان طور که در فرانس (۱) آمده است، این موضوع حائز اهمیت است که در تخمین ضرایب انتقالی اسپین (Spin transfer parameter)، تمام داده‌های تجربی بکار رفته، همگی حاصل از یک روش تجربی منحصر بفرد باشند و نه حاصل از روشهای تجربی مختلف. نمونه‌ای از چنین روش توسط نگارنده همین مقاله در فرانس (۱) بحث شده است که در آن از ترکیب میانکنش خیلی ظریف انتقالی (Transferred hyperfine interaction) و قسمت نایزوترپ میانکنش خیلی ظریف فوق انتقالی (Isotropic supertransferred hyperfine) استفاده شده است.

در این مقاله، روش دیگری برای تخمین ضرایب انتقالی اسپین ارائه می‌شود که اساساً "یک روش نظری است و از داده‌های تجربی پژوهشگران دیگر استفاده می‌کند. داده‌های تجربی لازم عبارتند از: مقادیر تجربی میانکنش‌های خیلی ظریف انتقالی و فوق انتقالی. این مقادیر معمولاً "توسط آزمایش تشدید پارامغناطیسی الکترون (Electron paramagnetic res.) و یا آزمایش تشدید دوگانه الکترون - هسته $me\delta$ double (elec.mucl.) قابل اندازه‌گیری می‌باشند.

در روش نظری ارائه شده در این مقاله، از ترکیب میانکنش خیلی ظریف انتقالی و قسمت نایزوترپ میانکنش خیلی ظریف فوق انتقالی استفاده می‌شود. اساس این روش برای این است که مدارهای ملکولی مؤثری که تولید میانکنش خیلی ظریف فوق انتقالی می‌کنند را تشکیل داده و توابع موج مربوط به این مدارها را می‌نویسیم. این توابع موج که شامل ضرایب انتقالی اسپین می‌شوند را می‌توان به مقادیر تجربی میانکنش خیلی ظریف فوق انتقالی ارتباط داد. در نتیجه این عمل، رابطه‌ای بدست می‌آید که مقدار تجربی میانکنش فوق انتقالی (قسمت نایزوترپ) را به ضرایب انتقالی اسپین ربط می‌دهد (به رابطه (۳) مقاله مراجعه شود).

بایکار بردن این رابطه در مورد پیوند خطی $M^{2+} = Mn^{2+}, Ni^{2+}$ $CsCdF_3:M^{2+}$ وجود دارد ، مقدار f ، یعنی ضریب انتقالی اسپین از $Mn^{2+}-F^{-}-Cd^{2+}$ که در کریستال‌های $Mn^{2+}-F^{-}$ حدود ۳/۱٪ به دست می‌آید . این مقدار با مقدار محاسبه شده توسط روش‌های نوع برای پیوند $Mn^{2+}-F^{-}$ و (λ) آمده است ، قابل مقایسه می‌باشد . این توافق نسبی امیدوارکننده است و دیگری که در فرانس‌های (۱) و f_{σ} بکار رفته است ، به احتمال زیاد یک راه حل قابل قبول می‌باشد . نشان می‌دهد که روشی که برای بدست آوردن f_{σ} بکار رفته است ، به احتمال زیاد یک راه حل قابل قبول می‌باشد .