

# Analytical study of the spin tunneling effect by considering dipole excitations in single-molecular magnet

## $Mn_{12}$

Yousef Yousefi\*, Fathemah Ramezanpoor, Mohammad Reza Benam

Department of Physics, Faculty of Science, Payame Noor University, Tehran, Iran

Received: 16.10.2017    Final revised: 02.10.2018    Accepted: 07.07.2019

DOI: 10.22055/jrmbms.2020.15327

### Abstract

Spin tunneling effect in Single Molecule Magnet  $Mn_{12}$  is studied by instanton calculation technique, using  $SU(2)$  spin coherent state in real parameter as a trial function. For this SMM, tunnel splitting (steps in hysteresis loop) arises due to the presence of a Berry phase in action, which causes interference among tunneling trajectories (instantons). In the analytical calculation, the assumption of the linearity of the instanton solution in terms of applied magnetic field is used. It is observed that the number of quenching points of magnetic tunneling and the number of steps in hysteresis loop are equal to the number of points obtained from numerical calculation. Of course, the position of the points (the magnitude of the field in which the tunneling amplitude is zero) is different.

**Keywords:** Coherent State, Spin Tunneling, Instanton, dipole Excitation

---

\*Corresponding Author: [yusof54@yahoo.com](mailto:yusof54@yahoo.com)

## بررسی تحلیلی پدیده تونل زنی اسپین با در نظر گرفتن برانگیختگی های

### دوقطبی در آهن ربای تک مولکولی $Mn_{12}$

یوسف یوسفی\*، فاطمه رمضان پور، محمدرضا بنام

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه پیام نور، تهران، ایران

دریافت: 1396/10/28 ویرایش نهایی: 1398/05/23 پذیرش: 1398/10/07

DOI: 10.22055/jrmb.2020.15327

#### چکیده

پدیده تونل زنی اسپین در آهن ربای تک مولکولی  $Mn_{12}$  با استفاده از روش محاسبه اینستانتونی مطالعه و از حالت همدوس در پارامتر حقیقی در گروه  $SU(2)$  به عنوان تابع اولیه<sup>1</sup> استفاده شده است. برای این آهن ربای تک مولکولی، شکافتگی ترازهای انرژی حاصل شده (پله های حلقه پسماند مغناطیسی) مربوط به جمله ای در کنش کلاسیکی می باشد که از فاز بری نتیجه می شود و این جمله باعث تداخل بین مسیرهای تونل زنی (اینستانتون ها) می شود. در محاسبات تحلیلی انجام شده، از فرض خطی بودن جواب های اینستانتونی برحسب میدان مغناطیسی اعمالی استفاده شده و مشاهده می شود تعداد نقاط خاموش شوی پدیده تونل زنی مغناطیسی، که همان تعداد پله ها در حلقه پسماند مغناطیسی می باشند، با تعداد نقاط به دست آمده از محاسبات عددی برابر است.

**کلیدواژگان:** حالت همدوس، تونل زنی اسپین، اینستانتون، برانگیختگی دوقطبی

#### مقدمه

خارجی در راستا یا در خلاف جهت محور غیرهمسانگردی خود مغناطیسی می شوند و بعد از اینکه گشتاور مغناطیسی این مولکول ها به وسیله میدان خارجی جهت گیری کرد، اگر میدان حذف شود، در دمای پایین این گشتاورهای اسپینی به ندرت و بسیار آرام تغییر جهت می دهند.

حداقل دو دلیل بسیار مهم برای مطالعه نانو آهن رباهای ساخته شده از آهن رباهای تک مولکولی وجود دارد. اولین دلیل آن، ساخت حافظه های مغناطیسی با چگالی بسیار بالا از این آهن رباهای تک مولکولی است به گونه ای که امکان ذخیره کردن دو یا بیشتر بیت<sup>3</sup> در هر

اخیراً مولکول هایی پیدا شده است که مانند نانو آهن رباها رفتار می کنند و به عنوان آهن ربا های تک مولکولی<sup>2</sup> (SMM)، شناخته می شوند [1-6]. پاسخ مغناطیسی یک آهن ربای تک مولکولی از مولکول های غیر برهم کنشی مجزا حاصل شده و مربوط به حوزه های مغناطیسی نمی باشد. گشتاور مغناطیسی هر مولکول SMM به اندازه کافی بزرگ بوده و ناهمسانگردی آن به گونه ای است که مثل یک آهن ربا رفتار می کند. SMM ها در پاسخ به میدان مغناطیسی

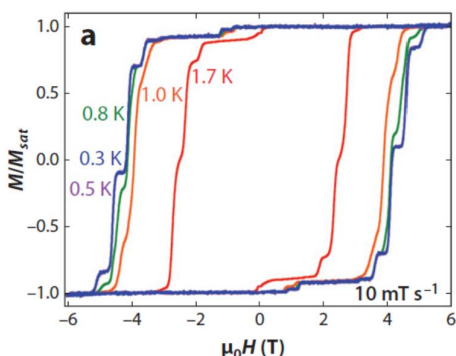
\* نویسنده مسئول: yousof54@yahoo.com

<sup>1</sup> Trial function

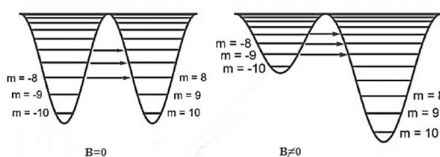
<sup>2</sup> Single Molecule Magnet

<sup>3</sup> bit





شکل 2. حلقه پسماند مغناطیسی  $Mn_{12}$  در دماهای مختلف [10].



شکل 3. چاه پتانسیل دوگانه در حضور و در غیاب میدان مغناطیسی اعمالی [10].

روش‌های آزمایشگاهی مختلفی (تشدید اسپین الکترون، واهلش مغناطیسی، اسپکتروسکوپی مورس‌باخر، پراکندگی نوترونی و...) نشان می‌دهند که این آهن‌ربای تک‌مولکولی با هامیلتونی پیشنهادی به‌صورت زیر به‌خوبی توصیف می‌شود [11].

$$H = S^2 - S_z^2 + \lambda(S_x^2 - S_y^2) + k(S_+^4 + S_-^4) - g\mu_B \vec{J} \cdot \vec{H} \quad (1)$$

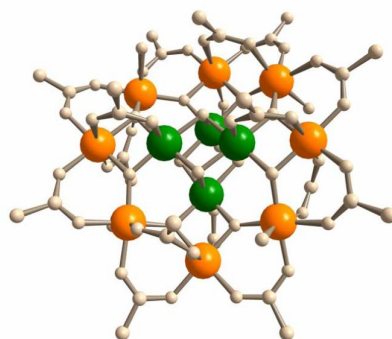
که  $S_i$ ها مؤلفه‌های عملگرهای اسپین و فاکتور  $g$  خیلی نزدیک به دو است. ثابت‌های غیرهمسانگردی  $\lambda = 10^{-4}$  و  $k = 5.4 \times 10^{-5}$  به‌گونه‌ای انتخاب شده‌اند که محور  $x$  محور آسان اسپین باشد. در این هامیلتونین، جمله  $S_z^2$  نشان دهنده سد پتانسیل دوگانه، جمله  $\lambda(S_x^2 - S_y^2)$  یک ناهمسانگردی عرضی مرتبه دو است که در بیشتر SMM‌های با تقارن پایین وجود دارد و جمله اختلالی  $k(S_+^4 + S_-^4)$  یک ناهمسانگردی عرضی مرتبه چهارمی باشد که مسئول تقارن چرخشی و جمله آخر مربوط به اثر زمین است

مولکول وجود دارد. دومین دلیل آن به بررسی و توصیف یک رفتار کلاسیکی با استفاده از مکانیک کوآنتومی مربوط می‌شود که در این مقاله در یک نمونه بزرگ از نانو آهن‌رباها (سیستم کلاسیکی)، تونل‌زنی کوآنتومی مغناطش با استفاده از رفتار حلقه پسماند مغناطیسی کلاسیکی توضیح داده می‌شود [7].

$[Mn_{12}O_{12}(O_2CMe)_{16}(H_2O)_4]2(HO_2CMe) \cdot 4(H_2O)$  یکی از مشهورترین آهن‌رباهای تک مولکولی است که اصطلاحاً  $Mn_{12}$  نامیده می‌شود. در این آهن‌ربای تک مولکولی چهار اتم  $Mn^{4+}$  با اسپین  $\frac{3}{2}$  به وسیله هشت اتم  $Mn^{3+}$  با اسپین 2 مطابق شکل 1 احاطه شده است به‌گونه‌ای که اسپین کل مولکول  $S = 10$  می‌شود.

اولین بررسی پدیده تونل زنی اسپین آهن‌ربای تک مولکولی  $Mn_{12}$  به وسیله فریدمن و همکاران انجام شد [4 و 5]. فریدمن میدان مغناطیسی را در راستای محور آسان آهن‌ربای تک مولکولی در دماهای مختلف اعمال کرد و مشاهده نمود که در بازه‌های مشخصی از میدان اعمالی، پله‌هایی در نمودار حلقه پسماند ایجاد می‌شود. این پدیده به وسیله گروه‌های تحقیقاتی دیگر نیز تأیید شد [8 و 9].

پله‌های مشاهده شده در حلقه پسماند در بازه‌های تقریباً منظم از میدان اعمالی هنگامی ایجاد می‌شود که ترازهای انرژی در چاه پتانسیل دوگانه‌ای که به وسیله غیرهمسانگردی ایجاد شده است، برابر باشند.



شکل 1. آهن‌ربای تک مولکولی  $Mn_{12}$  [10].

$$\begin{aligned} S^+ &= e^{i\varphi} \sin\theta \\ S^- &= e^{-i\varphi} \sin\theta \end{aligned} \quad 2$$

$$S^z = \cos\theta$$

با جای گذاری این مقادیر در هامیلتونین 1 و توجه به این نکته که محور X به جای Z به عنوان محور آسان سیستم با توجه به تقارن آهن ربای تک مولکولی در نظر گرفته می شود و میدان مغناطیسی نیز در راستای محور آسان اعمال می شود، داریم:

$$\begin{aligned} E(\theta, \varphi) &= 1 - \sin^2\theta \sin^2\varphi \\ &+ \lambda(\cos^2\theta - \cos^2\varphi \sin^2\theta) \\ &+ 2k(\cos^4\theta + \sin^4\theta \sin^4\varphi \\ &- 6\sin^2\theta \sin^2\varphi \cos^2\theta) - 2h \cos\theta \end{aligned} \quad 3$$

که در آن  $\hbar = \mu_B SH$  است.

همان طوری که در مقدمه گفته شد در این مقاله می خواهیم پدیده تونل زنی مغناطیسی را با استفاده از روش انتگرال مسیر (روش اینستانتون) بررسی نماییم. روش انتگرال مسیر یک روش بسیار مفید برای محاسبه دامنه تونل زنی هم برای ذرات و هم اسپین است [13 و 14]. اینستانتون ها، مسیرهای کلاسیکی هستند که بین دو حالت تبهگن کمینه انرژی کلاسیکی اجرا می شوند. از نظر کلاسیکی یعنی اینکه مسیرها از اصل کمترین کنش پیروی کرده و قانون پایستگی انرژی را ارضاء نمایند. اما می دانیم برای مسیرهایی که انرژی در آنها پایسته است با مختصات و تکانه حقیقی، امکان اجرا شدن بین دو کمینه وجود ندارد. به همین دلیل اجازه داده می شود مختصات یا تکانه موهومی باشند. در حد پیوسته دامنه تونل زنی از انتگرال تابعی زیر محاسبه می شود [15]:

$$\int \exp(-S(x, x, t)) d\mu(x) \quad 4$$

که  $d\mu(x) = \prod_{i=1}^N dx_i$  است. در گروه  $SU(2)$ ،  $N = 2$  است که N تعداد درجات آزادی سیستم است و کنش کلاسیکی نیز به صورت زیر از چند جمله تشکیل شده است:

$$S(x, x, t) = S_k + S_D + S_R \quad 5$$

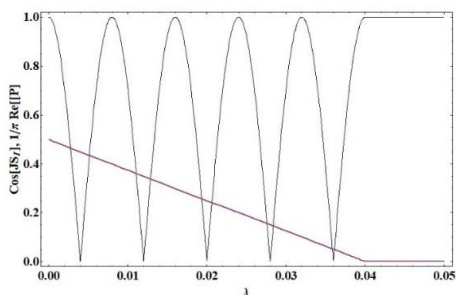
که حالت های با اسپین بالا و پایین را در میدان مغناطیسی از هم جدا می کند.

در این مقاله ارتباط بین پله ها در حلقه پسماند مغناطیسی و نقاط خاموش شوی پدیده تونل زنی اسپین در مقادیر خاصی از میدان مغناطیسی اعمالی با در نظر گرفتن برانگیختگی های دوقطبی به صورت تحلیلی بررسی شده است. به همین منظور در قسمت دو ابتدا با استفاده از مقادیر چشمداشتی عملگرهای اسپین که با استفاده از حالت های هم دوس در گروه  $SU(2)$  به دست آمده، انرژی کلاسیکی سیستم را محاسبه می نماییم.

چون می خواهیم پدیده تونل زنی مغناطیسی را با استفاده از روش انتگرال مسیر ( اینستانتون) بررسی نماییم، در ادامه این روش را از نظر می گذرانیم. دامنه تونل زنی توسط فریدمدن و همکاران به صورت عددی محاسبه گردیده است. نویسندگان این مقاله، نمودار محاسبات مربوطه را گزارش داده و در نهایت با استفاده از روش اینستانتون دامنه تونل زنی را به طور تحلیلی محاسبه و نمودارهای مربوطه را رسم نموده اند.

## تئوری و محاسبات

برای محاسبه انرژی کلاسیکی سیستم، از مقادیر چشمداشتی عملگرهای اسپین در گروه  $SU(2)$  استفاده می شود. در واقع با در نظر گرفتن مقادیر چشمداشتی در این گروه، فقط برانگیختگی های دوقطبی در محاسبات لحاظ خواهد شد. اما با توجه به درجه اسپین سیستم، در این آهن ربای تک مولکولی عدد اسپین  $S = 10$  است، می توان برای بررسی دقیق، برانگیختگی های چندقطبی تا مرتبه  $2^{(2s+1)}$  را لحاظ نمود [12]. مقادیر چشمداشتی عملگرهای اسپین در گروه  $SU(2)$  به صورت زیر محاسبه شده است:



شکل 5. نمودار محاسبات عددی با در نظر گرفتن برانگیختگی‌ها دوقطبی برای دامنه تونل زنی [11].

اما در این مقاله می‌خواهیم محاسبات را با یک سری فرض‌ها به صورت تحلیلی انجام دهیم و نتایج را با محاسبات عددی مقایسه می‌نماییم. بنابراین برای به دست آوردن اینستانتون‌ها، ابتدا نقاطی که در آن انرژی کلاسیکی کمینه می‌شود را محاسبه می‌کنیم، یعنی:

$$\frac{\partial E^{cl}}{\partial \theta} = 0, \quad \frac{\partial E^{cl}}{\partial \varphi} = 0 \quad 7$$

پس

$$\begin{aligned} & \sin 2\varphi[-\sin^2 \theta + \lambda \sin^2 \theta + 4k \sin^4 \theta \sin^2 \varphi \\ & - 12k \sin^2 \theta \cos^2 \theta] = 0 \\ & \sin \theta (2h - 2\cos \theta [\lambda + \lambda \cos^2 \varphi \\ & + \sin^2 \varphi + 4k \cos^2 \theta - 4k \sin^2 \theta \sin^4 \varphi \\ & + 12k \sin^2 \varphi \cos 2\theta]) = 0 \end{aligned} \quad 8$$

وقتی این شرایط به طور دقیق بررسی شود، مشاهده می‌شود که کمینه انرژی وقتی حاصل می‌شود که  $\varphi = 0, \pi$  باشد. در این صورت در معادله دوم رابطه 8 داخل پرانتز در  $\varphi = 0$  و  $\theta = \theta_0$  باید برابر با صفر شود، یعنی:

$$h - 2\cos \theta_0 - 4k \cos^3 \theta_0 = 0 \quad 9$$

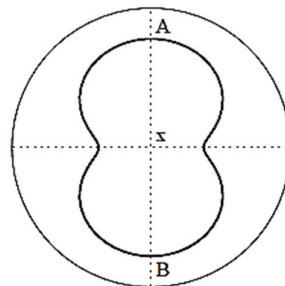
بنابراین انرژی کمینه سیستم به صورت زیر خواهد شد:

$$E_{min} = 1 + \lambda \cos 2\theta_0 + 2k \cos^4 \theta_0 - 2h \cos \theta_0 \quad 10$$

معادله 9 را با توجه به اینکه  $4k \cos^3 \theta_0 \ll 1$  است به روش اختلالی حل می‌کنیم، جواب این معادله به صورت زیر نوشته می‌شود:

جمله اول،  $S_R$  جمله جنبشی است که ویژگی‌های فاز بری را دارد و از تداخل بین مسیرهای مختلف حاصل می‌شود و نوسانات نتیجه‌ای از این پدیده تداخلی است. جمله دوم،  $S_D$  عبارت دینامیکی است و جمله سوم وابسته به مقادیر مرزی مسیرها است و این دو جمله تأثیری در محاسبه دامنه تونل زنی اسپین ندارند.

در روش اینستانتون، مسیرها روی کره واحد قرار دارند و جمع روی مسیرها، به وسیله مسیرهای با کمترین کنش مشخص می‌شود. برای جهت‌های خاص میدان، دو مسیر با کمترین کنش وجود دارد که حول میدان در جهت‌های مخالف می‌چرخند (شکل 4) قسمت حقیقی کنش کلاسیکی،  $S_R^{cl}$  برای هر دو مسیر یکسان اما قسمت مجازی کنش،  $S_I^{cl}$  متفاوت است و منجر به فاز نسبی می‌شود که برابر با فاز بری حلقه بسته ساخته شده به وسیله دو مسیر است. این فاز برابر با مساحت  $\Omega$  دو حلقه است [16].



شکل 4. تداخل مسیرهای اینستانتونی.

برای آهن‌ربای تک مولکولی  $Mn_{12}$  دامنه تونل زنی محاسبه شده و از رابطه زیر به دست می‌آید [5]:

$$\Delta \approx 4e^{(-S_R^{cl})} \text{Cos}(10S_I^{cl}) \quad 6$$

شکل 5 محاسبات عددی مستقیم را برای دامنه تونل زنی به صورت تابعی از میدان مغناطیسی برای هامیلتونین پیشنهادی 1 نشان می‌دهد [11].

$$16Z^2(\varphi)A^6 + 8R(\varphi)Z(\varphi)A^4 + (R^2(\varphi) - 4Z(\varphi)W(\varphi))A^2 - h^2 = 0 \quad 19$$

وقتی جمله اختلالی توان چهار در نظر گرفته نشود، یعنی وقتی  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$  باشد، در آن صورت  $Z(\varphi)$  برابر با صفر شده و در نتیجه برای معادله 19 داریم:

$$A = \frac{h}{R^2(\varphi)} = \frac{h}{\lambda(1 + \cos^2\varphi) + \sin^2\varphi} \quad 20$$

این جواب برحسب میدان  $h$  از مرتبه اول است. اگر برای هامیلتونین مسئله نیز جوابی تا مرتبه اول برحسب میدان  $h$  را در نظر بگیریم، در آن صورت دو جمله اول معادله 19 حذف و جواب آن به صورت زیر خلاصه خواهد شد:

$$A = \frac{h}{(R^2(\varphi) - 4W(\varphi)Z(\varphi))^{(1/2)}} \quad 21$$

با این تقریب مخرج رابطه 21 با میدان  $h$  وابسته نیست و با تقریب خوبی می توان آن را به صورت زیر نوشت:

$$R^2(\varphi) - 4W(\varphi)Z(\varphi) \approx q_0 + q_2 \sin^2\varphi + q_4 \sin^4\varphi \quad 22$$

که در آن:

$$\begin{aligned} q_0 &= 4\lambda^2 \\ q_2 &= 4\lambda + 8k - 56\lambda k - 2\lambda^2 \\ q_4 &= 1 - 2\lambda + 24k - 40k\lambda + \lambda^2 + 128k^2 \end{aligned} \quad 23$$

با استفاده از تساوی دوم در رابطه 18 داریم:

$$B^2 = A^2 + \frac{R(\varphi)}{2Z(\varphi)} - \frac{h}{4AZ(\varphi)}$$

ساده ترین تقریب ممکن می توان نوشت  $B \approx A$ . پس با داشتن این دو تابع می توان قسمت حقیقی و قسمت موهومی کنش کلاسیکی را به صورت زیر به دست آورد:

$$S_R = \text{Re}S_k^{cl} = \text{Re} \int_0^\pi B d\varphi \approx \int_0^\pi A d\varphi = I(k, \lambda)$$

$$\cos\theta_0 = \frac{h}{2\lambda} + \frac{kh^3}{2\lambda^3} \quad 11$$

بنابراین انرژی کمینه به صورت زیر به دست می آید:

$$E_{min} = (1 - \lambda) - \frac{h^2}{2\lambda^2} + \frac{kh^4}{8\lambda^4} \quad 12$$

حال برای به دست آوردن جواب اینستاتونی از شرط زیر استفاده می کنیم:

$$E^{cl} = E_{min} \quad 13$$

با جای گذاری در معادله 3 داریم:

$$\begin{aligned} &(1 - \sin^2\theta \sin^2\varphi) \\ &+ \lambda(\cos^2\theta - \cos^2\varphi \sin^2\theta) \\ &+ 2k(\cos^4\theta + \sin^4\theta \sin^4\varphi) \\ &- 6\sin^2\theta \sin^2\varphi \cos^2\theta \\ &- 2h\cos\theta = 1 - \lambda - \frac{h^2}{2\lambda} + \frac{kh^4}{8\lambda^4} \end{aligned} \quad 14$$

معادله فوق را به صورت زیر بازنویسی می کنیم:

$$Z(\varphi)\cos^4\theta + R(\varphi)\cos^2\theta - 2h\cos\theta + W(\varphi) = 0 \quad 15$$

که در آن

$$\begin{aligned} Z(\varphi) &= 2k(1 + 6\sin^2\varphi + \sin^4\varphi) \\ R(\varphi) &= \lambda(1 + \cos^2\varphi) + (1 - 12k)\sin^2\varphi - 4k\sin^4\varphi \\ W(\varphi) &= \lambda - \sin^2\varphi - \lambda\cos^2\varphi + 2k\sin^4\varphi + \frac{h^2}{2\lambda} - \frac{kh^4}{8\lambda^4} \end{aligned} \quad 16$$

جواب های معادله 15 اینستاتون ها هستند که با استفاده از آنها دامنه تونل زنی محاسبه می شود. جواب معادله 15

را به صورت زیر در نظر می گیریم:

$$\cos\theta = A + iB \quad 17$$

با جای گذاری این جواب در معادله 15 و مساوی با صفر قرار دادن معادلات با ضرایب حقیقی و موهومی داریم:

$$Z(\varphi)(A^4 + B^4 - 6A^2B^2) + R(\varphi)(A^2 - B^2) - 2hA + W(\varphi) = 0 \quad 18$$

$$4Z(\varphi)(A^3B - AB^3) + 2R(\varphi)AB - 2hB = 0$$

در معادله دوم از رابطه 18،  $B^2$  را برحسب  $A^2$  محاسبه و در معادله اول جایگذاری می کنیم:

می‌باشند که از جمله مربوط به فاز بری در عبارت دامنه تونل‌زنی،  $\cos(JS_1)$ ، حاصل می‌شوند. در نمودار محاسبات عددی که توسط فریدمدن و همکاران رسم گردیده است، در میدان‌های کمتر از 0/5 تعداد 5 نقطه خاموش شوی دامنه تونل زنی وجود دارد. همچنین محل نقاط خاموش شوی (میدانی که در آن دامنه تونل‌زنی صفر می‌شود) با محل نقاط در نمودار تجربی متفاوت است. قابل توجه است که در محاسبات این مقاله مانند محاسبات عددی فریدمدن و همکاران فقط برانگیختگی‌های دوقطبی لحاظ شده و هامیلتونین نیز در هر دو مورد یکسان فرض شده است.

نمودار شکل 6 مربوط به جمله فاز بری در عبارت تونل زنی اسپین است که از محاسبات تحلیلی به دست آمده است. در محاسبات تحلیلی نیز همان‌طوری که در نمودار مشاهده می‌شود، تعداد نقاط خاموش شوی که با استفاده از همان هامیلتونین پیشنهادی محاسبات عددی به دست آمده برابر 5 می‌باشد و فقط نسبت به نمودار محاسبات عددی موقعیت آنها مقداری جابه‌جا شده است و این مربوط به تقریباتی است که در محاسبات تحلیلی لحاظ شده است.

برای اینکه نمودار محاسبات تحلیلی به نمودار تجربی نزدیک‌تر شود، اولاً باید جملات اختلالی بیشتری به هامیلتونین پیشنهادی اضافه شود و ثانیاً باید برانگیختگی‌های چندقطبی با درجه بالاتر را در محاسبات لحاظ نمود. به‌طور کلی برای سیستم با اسپین  $S$  برای توصیف دقیق و کامل و در نظر گرفتن همه برانگیختگی‌های چندقطبی باید از حالت هم‌دوس در گروه  $SU(2S+1)$  استفاده کرد و همچنین برانگیختگی‌های چندقطبی تا درجه  $2S+1$  را در محاسبات لحاظ نمود. بنابراین برای توصیف دقیق آهن‌ربای تک‌مولکولی  $Mn_{12}$  که دارای اسپین  $S = 10$  می‌باشد باید از حالت‌های هم‌دوس در گروه

$$S_I = \int_0^\pi (1-A) d\varphi = \pi - I(k, \lambda)$$

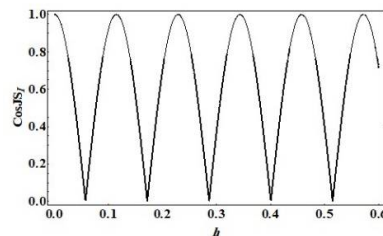
24

که در آن

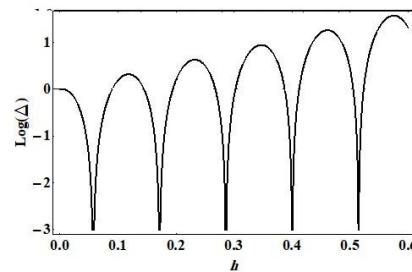
$$I(k, \lambda) = \int_0^\pi \frac{h}{(q_0 + q_2 \sin^2 \varphi + q_4 \sin^4 \varphi)^{(1/2)} d\varphi} = 2.74671h$$

25

انتگرال رابطه 25 با استفاده از نرم افزار ریاضی<sup>1</sup> محاسبه شده است. با جایگذاری مقادیر محاسبه شده در رابطه 18 در فرمول دامنه تونل زنی 6 شکافتگی ترازها به دست می‌آید. اگر توابع  $\log \Delta$  و  $\cos(JS_1)$  برحسب میدان مغناطیسی  $h$  رسم شود، نمودار شکل‌های زیر حاصل می‌شود:



شکل 6. نمودار تابع  $\cos(10S_1)$  برحسب میدان مغناطیسی اعمالی  $h$



شکل 7. نمودار تابع  $\log \Delta$  برحسب میدان مغناطیسی اعمالی  $h$ .

در نمودار تجربی شکل 2 مشاهده می‌شود که برای میدان‌های کمتر از 0/6 در حلقه پسماند در همه دماها 4 پله در منحنی وجود دارد که با توجه به دمای نمونه در هنگام آزمایش اندازه پله‌ها تغییر می‌کند. این پله‌ها مربوط به نقاط خاموش شوی دامنه تونل زنی اسپین

<sup>1</sup> Mathematica

141. (1993) 365  
<https://doi.org/10.1038/365141a0>

[3] M.A. Novak, R. Sessoli, A. Caneschi, D. Gatteschi, Magnetic properties of a Mn cluster organic compound, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **146** (1995) 211.  
[https://doi.org/10.1016/0304-8853\(94\)00860-4](https://doi.org/10.1016/0304-8853(94)00860-4)

[4] J.R. Friedman, M.P. Sarachik, J. Tejada, J. Maciejewski, R. Ziolo, Steps in the hysteresis loops of a high-spin molecule, *Journal of Applied Physics* **79** (1996) 6031.  
<https://doi.org/10.1063/1.361837>

[5] J.R. Friedman, M.P. Sarachik, J. Tejada, R. Ziolo, Macroscopic Measurement of Resonant Magnetization Tunneling in High-Spin Molecules, *Physical Review Letters* **76** (1996) 3830.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.76.3830>

[6] J.M. Hernandez, X.X. Zhang, F. Luis, J. Tejada, J.R. Friedman, M.P. Sarachik, R. Ziolo, Evidence for resonant tunneling of magnetization in Mn<sub>12</sub> acetate complex, *Physical Review B* **55** (1997) 5858.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.55.5858>

[7] D. Loss, D.P. DiVincenzo, G. Grinstein, Quantum tunneling and dissipation in nanometer-scale magnets, *Physica B* **189** (1993) 189-203.  
[https://doi.org/10.1016/0921-4526\(93\)90160-8](https://doi.org/10.1016/0921-4526(93)90160-8)

[8] L. Thomas, F. Lioni, R. Ballou, D. Gatteschi, R. Sessoli, B. Barbara, Macroscopic quantum tunnelling of magnetization in a single crystal of nanomagnets, *Nature* **383** (1996) 145.  
 DOI:[10.1038/383145a0](https://doi.org/10.1038/383145a0)

[9] J. Tejada, R. Ziolo, X.X. Zhang, Quantum Tunneling of Magnetization in Nanostructured Materials, *Chemistry of*

*SU(2)* و از برانگیختگی های چندقطبی تا درجه<sup>21</sup> استفاده نمود.

## نتایج و بحث

در این مقاله، پدیده تونل زنی اسپین در آهن ربای تک مولکولی  $Mn_{12}$  با استفاده از روش اینستانتون به صورت تحلیلی مطالعه شد. در این بررسی از حالت های هم دوس در پارامتر حقیقی در گروه  $SU(2)$  به عنوان تابع اولیه استفاده گردید. در محاسبات تحلیلی انجام شده، از فرض خطی بودن جواب های اینستانتونی بر حسب میدان مغناطیسی اعمالی، استفاده شد و مشاهده گردید که تعداد نقاط خاموش شوی پدیده تونل زنی مغناطیسی با تعداد نقاط به دست آمده از محاسبات عددی برابر است اما تعداد و موقعیت آنها با تعداد و موقعیت پله ها در حلقه پسماند مغناطیسی متفاوت است. برای آنکه موقعیت و تعداد نقاط خاموش شوی حاصل شده با موقعیت و تعداد نقاط به دست آمده از داده های آزمایشگاهی هم خوانی داشته باشد، باید درجات آزادی بیشتری که از برانگیختگی های با درجه بالاتر حاصل می شود نیز لحاظ گردد. در این مقاله فقط برانگیختگی های دوقطبی لحاظ شده و برانگیختگی های بالاتر در نظر گرفته نشده است.

## مرجع ها

[1] R. Sessoli, H.L. Tsai, A.R. Schake, S. Wang, J.B. Vincent, K. Folting, D. Gatteschi, G. Christou, D.N. Hendrickson High-spin molecules  $[Mn_{12}O_{12}(O_2CR)_{16}(H_2O)_4]$ , *Journal of the American Chemical Society* **115** 5 (1993) 1804-1816.

<https://doi.org/10.1021/ja00058a027>

[2] R. Sessoli, D. Gatteschi, A. Caneschi, M.A. Novak, Magnetic bistability in a metal-ion cluster, *Nature*



*Materials*, **8** (1996) 1784.  
<https://doi.org/10.1021/cm9602003>

[10] J.R. Friedman, M.P. Sarachik, Single-Molecule Nanomagnets, *Annual Review of Condensed Matter Physics*, **1** (2010) 109–128.  
<https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-070909-104053>

[11] M.S. Foss-Feig, J.R. Friedman, Geometric-phase-effect tunnel-splitting oscillations in single-molecule magnets with fourth-order anisotropy induced by orthorhombic distortion, *EuroPhysics Letters*, **86** 2 (2009). Doi:[10.1209/0295-5075/86/27002](https://doi.org/10.1209/0295-5075/86/27002)

[12] Y. Yousefi, Kh. Kh. Muminov, Semi classical description of isotropic Non-Heisenberg magnets for spin  $S=3/2$  and linear quadrupole excitation dynamics, *Iranian Journal of Physics Research*, **12** 2 (2012) 179-183.  
<http://ijpr.iut.ac.ir/article-1-1071-en.html>

[13] B. Felsager, *Geometry Particles and Fields*, Springer, New York, (1998)

[14] E.M. Chudnovsky, L. Gunther, Quantum tunneling of magnetization in small ferromagnetic particles, *Physical Review Letters*, **60** 8 (1988) 661–664.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.60.661>

[15] E.M. Chudovsky, X. Martinez, Non-Kramers freezing and unfreezing of tunneling in the biaxial spin model, *Europhysics Letters*, **50** 3 (2000) 395–401. [10.1209/epl/i2000-00282-0](https://doi.org/10.1209/epl/i2000-00282-0)

[16] A. Garg, Topologically Quenched Tunnel Splitting in Spin Systems without Kramers Degeneracy, *Europhysics Letters* **22** (1993) 205.  
<https://doi.org/10.1209/0295-5075/22/3/008>