

## امواج اسپینی آهن ربای تک ملکولی Fe8 با در نظر گرفتن برانگیختگی های دوقطبی و چهارقطبی

یوسف یوسفی\*  
دکتری، دانشکده فیزیک، دانشگاه پیام نور

تاریخ دریافت: 1398/01/26 تاریخ پذیرش: 1398/07/02

## Spin Waves of Single-Molecule Magnet Fe8 With Respect to Dipolar and Quadrupole Excitations

Y. Yousofi\*  
Ph.D., Faculty of Physics, Payame Noor University

Received: 2019/04/15 Accepted: 2019/08/24

### Abstract

In this paper, we have studied the equations describing the proposed experimental Hamiltonian of a single-molecule magnet Fe8.

In this research, we used from coherent states in real parameter and Feynman path integral. These nonlinear equations fully described dynamic of this single-molecule magnet in  $Su(2)$  and  $Su(3)$  groups. The solutions of these equations are magnetic solitons (not calculated in this study). Linear equations show that for this SMM, the mean square torque (Quadrupole excitation) is not constant and its dynamic consists of two parts. One part, rotate around the classical spin vector and the other is related to changing the size of the quadrupole torque. The spin wave dispersion equation for dipole and quadruple branches is calculated for small linear excitations from ground state (vacuum). These equations show that, for dipole branch, the spin wave is damping away from the single-molecular magnet and oscillating and not damping for the quadrupole branch.

### Keywords

Spin Wave, Quadrupole Excitations, Single Molecule Magnet.

### چکیده

در این مقاله، معادلاتی که هامیلتونین تجربی پیشنهادی برای زنجیره اسپینی آهن ربای تک ملکولی Fe8 را توصیف می کند، مطالعه شده است. پژوهش حاضر، برای به دست آوردن معادلات کلاسیکی حرکت، از حالت های هم دوس در پارامتر حقیقی و انتگرال مسیر فاینمن استفاده کرده و سپس معادلات حاصل شده دینامیک غیرخطی این هامیلتونین را در گروه های  $Su(2)$  و  $Su(3)$  به طور کامل توصیف کرده است. جواب های این معادلات سالیتون های مغناطیسی هستند (در این مطالعه محاسبه نشده اند). معادلات خطی شده نشان می دهند که برای این 'SMM' اندازه متوسط گشتاور چهارقطبی (برانگیختگی چهارقطبی) ثابت نبوده و دینامیک آن شامل دو قسمت است که یکی چرخش حول بردار اسپین کلاسیک و دیگری مربوط به تغییر اندازه گشتاور چهارقطبی است. معادله پاشندگی موج اسپینی برای شاخه های دوقطبی و چهارقطبی برای برانگیختگی های خطی کوچک از حالت پایه (خلأ) محاسبه شده است. این معادلات نشان می دهند که برای شاخه دوقطبی، موج اسپینی با دور شدن از آهن ربای تک ملکولی، میرا می شود و برای شاخه چهارقطبی به صورت موج نوسانی بوده و میرا نمی شود.

### واژگان کلیدی

موج اسپینی، برانگیختگی های چهارقطبی، آهن ربای تک ملکولی.

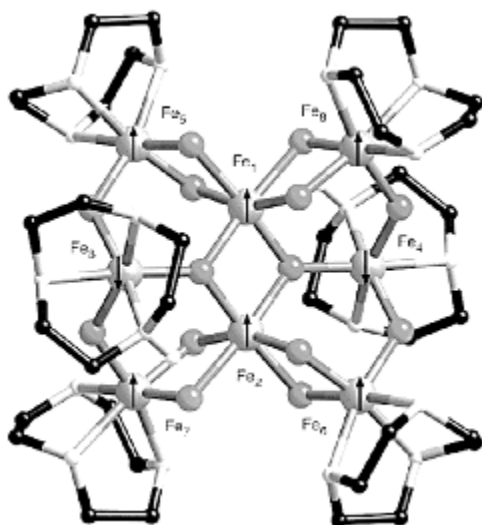
### 1. Single Molecule Magnet

\*Corresponding Author: yousof54@yahoo.com

\* نویسنده مسئول: یوسف یوسفی

## مقدمه

دیگری در حافظه‌های مغناطیسی یا جریان اسپینی<sup>2</sup> است. استفاده احتمالی از آهن ربا‌های تک‌ملکولی به عنوان بیت‌های کوانتومی و عناصر پردازش در کامپیوترهای کوانتومی، بسیار مورد توجه است. کامپیوترهای کوانتومی به طور منحصر به فردی از خواص کوانتومی مثل برهم‌نهی و آشفتگی<sup>3</sup> حالت‌ها بهره می‌برند. این کامپیوترها در حل مسائل خاص، در مقایسه با کامپیوترهای کلاسیک، خیلی موثرتر هستند؛ از طرفی چون آهن‌رباهای تک‌ملکولی بیت‌های کوانتومی مفیدی هستند، پس لازم است به طور مستقل، کنترل و آدرس داده شوند و حافظه‌های مغناطیسی نیز احتیاج به آدرس‌پذیری مجزا دارند [1 و 7-8].



شکل 1. ساختار شیمیایی آهن‌ربای تک‌ملکولی  $Fe_8$  [3]

تحقیقات گسترده‌ای درباره آهن‌رباهای تک‌ملکولی غیرهائیزنبرگی با اسپین بالا و دارای ساختار آنتی‌فرومغناطیسی انجام شده است؛ اما هنوز هم‌خوانی خوبی بین نتایج تجربی و مطالعات نظری وجود ندارد. یکی از مهم‌ترین دلایل آن در نظر نگرفتن برانگیختگی‌های چهارقطبی و بالاتر در این سیستم‌ها است که در این مقاله به این موضوع پرداخته شده است. این که تا چه درجه‌ای از برانگیختگی‌های چندقطبی را برای توصیف دقیق سیستم

اگرچه عبارت آهن‌رباهای تک‌ملکولی ابتدا در سال 1996 به کار برده شد [1]؛ اما اولین آهن‌ربای تک‌ملکولی در سال 1991 توسط سیسلی<sup>1</sup> و همکارانش گزارش شد [4]. ترکیبات آلی مختلفی از منگنز، آهن، کروم و... به عنوان آهن‌رباهای تک‌ملکولی بررسی شده‌اند که در این مقاله، ملکول  $Fe_8$  با فرمول شیمیایی  $[Fe_8O_2(OH)_{12}(tacn)_6]^{8+}$  مطالعه شده است. ملکول  $Fe_8$ ، یک تک بلور مغناطیسی به صورت شکل (1) است. در حالت پایه، این ملکول دارای اسپین 10 است که از تفاضل اسپین ملکول‌های آهن در ساختار آنتی‌فرومغناطیسی هشت یون  $Fe$  با اسپین  $\frac{5}{2}$  به صورت  $(s = 6 * \frac{5}{2} - 2 * \frac{5}{2} = 10)$  به دست می‌آید [5].

پاسخ مغناطیسی این آهن‌رباهای تک‌ملکولی که مانند آهن‌رباهای طبیعی رفتار می‌کند از حوزه‌های مغناطیسی حاصل نمی‌شود؛ بلکه از ملکول‌های مجزایی که با یکدیگر برهم‌کنش ندارند، به دست می‌آید؛ به عبارت دیگر، هر ملکول SMM دارای گشتاور مغناطیسی به اندازه‌ی کافی بزرگ ماست و ناهمسان‌گردی آن به گونه‌ای است که مثل یک آهن‌ربا رفتار می‌کند. در پاسخ به میدان مغناطیسی خارجی، SMMها می‌توانند در راستا یا در خلاف جهت محور غیرهائیزنبرگی خود مغناطیسی شوند. در این ملکول‌ها، بعد از اینکه گشتاور مغناطیسی به وسیله میدان خارجی جهت‌گیری کرد، اگر میدان حذف شود، در دمای پایین این گشتاورهای اسپینی خیلی کم و بسیار آرام، تغییر جهت می‌دهند.

این آهن‌رباها دارای اسپین  $1 \leq s$  هستند و به دلیل نتایج جالبی که از رفتارهای دینامیکی مربوط به برانگیختگی‌های چندقطبی حاصل می‌شود، بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند. در چنین سیستم‌هایی، تعداد پارامترهای لازم برای توصیف دقیق و کامل، برابر با  $4s$  است که  $s$  عدد اسپین سیستم است.

از بین مجموعه کاربردهای گسترده‌ای که برای آهن‌رباهای تک‌ملکولی وجود دارد، می‌توان به دو نمونه بارز و مهم آن اشاره کرد که یکی در محاسبات کوانتومی و

ملکول  $Fe_8$  دارای تقارن  $D_2$  است. (شکل 1 را ببینید) برهمکنش های اسپین- اسپین و اسپین- مدار ناوردایی چرخشی ملکول را کاملاً برهم زده و آن را نسبت به جهت های بلوری شبکه ناهمسانگرد می کند. روش های آزمایشگاهی مختلفی (تشدید اسپین الکترون، واهلش مغناطیسی، اسپکتروسکوپی مورس باخر، پراکندگی نوترونی و...) نشان می دهند که زنجیر اسپینی یک بعدی این آهن ربای تک ملکولی با هامیلتونی پیشنهادی به صورت زیر به خوبی توصیف می شود [8-12].

$$\mathcal{H} = (k_1 - k_2) \sum_n S_x^n S_x^{n+1} - k_1 \sum_n S_z^n S_z^n \quad [1]$$

که  $S_x^n$  و  $S_z^n$  مولفه های عملگر اسپین در جایگاه  $n$ ام،  $k_1 = 0/33 K$  و  $k_2 = 0/22 K$  ثابت های غیرهمسانگردی است. ناهمسانگردی های با مرتبه بالاتر و خیلی ضعیف تر هم وجود دارد که تصحیح غیرهمسانگردی مرتبه چهار برجسته ترین است؛ ولی در این مطالعه در نظر گرفته نشده است.

### معادلات حرکت در گروه $SU(2)$ با در نظر گرفتن برانگیختگی های دوقطبی

با توجه به اینکه با استفاده از توصیف نیمه کلاسیک، معادلات حرکت مربوط به این آهن ربای تک ملکولی با در نظر گرفتن برانگیختگی های چندقطبی محاسبه می شود؛ ابتدا حالت های همدموس را بررسی می کنیم. در این قسمت فقط برانگیختگی های دوقطبی در محاسبات وارد می شود؛ سپس از حالت های همدموس در گروه  $SU(2)$  استفاده می شود. حالت های همدموس در گروه  $SU(2)$  در پارامتر حقیقی به صورت زیر تعریف می شود [13]:

$$|\psi\rangle = e^{-i\varphi S^y} e^{-i\theta S^z} |0\rangle = C_0 |0\rangle + C_1 |1\rangle \quad [2]$$

که دو زاویه  $\theta$  و  $\varphi$  زوایای اوپلر هستند و جهت گیری بردار اسپین را مشخص می کنند و ضرایب  $C_0$  و  $C_1$  به صورت زیر نوشته می شوند [13]:

اسپینی باید در نظر گرفت، به تقارن عملگرهای اسپین در هامیلتونین و عدد اسپین سیستم بستگی دارد. برای این سیستم فیزیکی که عدد اسپین آن  $J = 10$  است، برای توصیف دقیق و کامل، باید برانگیختگی های چندقطبی تا درجه  $2^{20} = 2^{2J} = 2^{20}$  را در نظر گرفت و برای انجام این کار باید از حالت های همدموس در گروه  $SU(21)$  استفاده کرد. در این مقاله علاوه بر برانگیختگی های دوقطبی، برانگیختگی های چهارقطبی را نیز در محاسبات در نظر گرفته ایم؛ اما می دانیم که برای توصیف دقیق و کامل این نانودره باید برانگیختگی های چندقطبی بالاتر را نیز در نظر گرفت [2].

در این مقاله هدف، به دست آوردن معادلات کلاسیکی حرکت برای هامیلتونین پیشنهادی برای این آهن ربای تک ملکولی با در نظر گرفتن برانگیختگی های دوقطبی و چهارقطبی و سپس جواب موج اسپینی برای برانگیختگی های خطی کوچک از حالت پایه است. حالت های همدموس نزدیک ترین حالت های کوانتمی به کلاسیک هستند؛ چون اصل عدم قطعیت هایزنبرگ را کمینه می نمایند؛ به همین دلیل برای به دست آوردن معادلات کلاسیکی موج اسپینی، از حالت های همدموس استفاده می شود؛ بنابراین در قسمت 2، هامیلتونین اسپینی موثر برای این آهن ربای تک ملکولی که روش های آزمایشگاهی مختلفی آن را پیشنهاد کرده است، آورده می شود و سپس در قسمت 3، حالت های همدموس، مقادیر چشمداشتی، لاگرانژین و معادلات حرکت در گروه  $SU(2)$  بررسی می شود. در ادامه این قسمت، برای برانگیختگی های خطی کوچک از حالت پایه، جواب معادلات موج اسپینی محاسبه می شود. با توجه به عدد اسپین آهن ربای تک ملکولی در قسمت 4، برانگیختگی های چهارقطبی را نیز به محاسبات اضافه می کنیم؛ به همین منظور در این قسمت، حالت های همدموس، مقادیر چشمداشتی، لاگرانژین و معادلات حرکت در گروه  $SU(3)$  بررسی می شود و در نهایت برای معادلات حاصل شده جواب موج اسپین محاسبه می شود.

هامیلتونین اسپینی موثر برای آهن ربای تک ملکولی  $Fe_8$

$$\begin{aligned} \theta_t &= (8\varphi + 4a\varphi_x)\sin\theta \\ \varphi_t &= (8 - 8\varphi^2 - m)\cos\theta + \\ & a(\theta_x \cos 2\theta \csc\theta - 8\varphi\varphi_x \cos\theta) - \\ & a^2(-\theta_x^2 \cos\theta + 4\varphi_x^2 \cos\theta + \\ & \frac{1}{2}\cos 2\theta \csc\theta \theta_{xx}) \end{aligned} \quad [8]$$

این معادلات دینامیک غیرخطی این آهنربای تک ملکولی را به طور کامل با در نظر گرفتن برانگیختگی دوقطبی توصیف می‌کنند. این معادله، همان معادله لاندئو لیف شیدز است که از معادله هایزنبرگ به دست می‌آید؛ اما ما در اینجا این معادله را از انتگرال مسیر فاینمن به دست آوردیم. مزیت این روش نسبت به معادله لاندئو لیف شیدز در این است که می‌توانیم برای برانگیختگی‌های بالاتر، به طریق مشابه، معادلات حرکت را برای هر یک از متغیرهای مربوطه محاسبه کنیم. حالت پایه این آهنربای تک ملکولی با هامیلتونین داده شده در مختصات  $\theta$  و  $\varphi = \varphi_0$  حاصل می‌شود؛ بنابراین برای برانگیختگی‌های خطی کوچک از این حالت پایه، معادلات به صورت زیر تغییر می‌کند:

$$\begin{aligned} \theta_t &= (8\varphi_0 + 4a\varphi_x) \\ \varphi_t &= -a\theta_x - \frac{1}{2}a^2\theta_{xx} \end{aligned} \quad [9]$$

با در نظر گرفتن متغیرهای  $\theta$  و  $\varphi$  به صورت امواج تخت زیر، معادله پاشندگی موج اسپینی نزدیک حالت پایه به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} \theta &= \theta_0 e^{i(\omega t - kx)} + \bar{\theta}_0 e^{-i(\omega t - kx)} \\ \varphi &= \varphi_0 e^{i(\omega t - kx)} + \bar{\varphi}_0 e^{-i(\omega t - kx)} \end{aligned} \quad [10]$$

با جایگذاری این روابط در معادله (9) معادله پاشندگی زیر در  $\mathbf{0} = \varphi_0$  برای موج اسپینی حاصل می‌شود:

$$\omega^2 = -4a^2 k^2 + 2ia^3 k^3 \quad [11]$$

این معادله پاشندگی نشان می‌دهد که عدد موج  $k$  باید برای این آهنربای تک ملکولی موهومی باشد؛ به عبارت

$$C_0 = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\varphi/2}, C_1 = \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\varphi/2} \quad [3]$$

با استفاده از انتگرال مسیر فاینمن و استفاده از دامنه گذار بین دو حالت همدوس، لاگرائزین به صورت زیر محاسبه می‌شود [15]:

$$\mathcal{L} = S\hbar\cos\theta\varphi_t - H(\theta, \varphi) \quad [4]$$

که  $S$  عدد اسپین،  $\hbar$  ثابت پلانک و  $H(\theta, \varphi)$  هامیلتونین کلاسیک است. مقادیر چشمداشتی عملگرهای اسپین در گروه  $SU(2)$  در جایگاه  $n$ ام به صورت زیر می‌باشد [13]:

$$\begin{aligned} S_n^+ &= e^{i\varphi_n} \sin\theta_n \\ S_n^- &= e^{-i\varphi_n} \sin\theta_n \\ S_n^z &= \cos\theta_n \\ S_n^z S_n^z &= Q_n^{zz} = \frac{1}{2}(1 + \cos^2\theta_n) \end{aligned} \quad [5]$$

حال تقریب‌های زیر در نظر گرفته می‌شود:

$$\begin{aligned} \varphi_{n+1} &\approx \varphi_n + a\varphi_{nx} \quad , \quad \theta_{n+1} \approx \theta_n + \\ a\theta_{nx} &+ \frac{1}{2}a^2\theta_{nxx} \end{aligned} \quad [6]$$

که  $\theta_{nx}$  مشتق مرتبه اول  $\theta$  نسبت به  $x$  در جایگاه  $n$  و  $\theta_{nxx}$  مشتق مرتبه دوم و  $a$  فاصله تعادلی دو جایگاه در زنجیره اسپینی است. با استفاده از مقادیر چشمداشتی و استفاده از تقریب‌های بالا در هامیلتونین (1) انرژی کلاسیک در حد پیوسته به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} H_{cl} &= \int \frac{dx}{a} \{ (4 - 4\varphi^2) \sin^2\theta + \\ & \frac{m}{2} (1 + \cos^2\theta) + a(-4\varphi\varphi_x \sin^2\theta + \\ & \frac{1}{2}\sin 2\theta\theta_x) - a^2[(2\varphi_x^2 - \\ & \frac{1}{2}\theta_x^2) \sin^2\theta + \frac{1}{4}\sin 2\theta \theta_{xx}] \end{aligned} \quad [7]$$

که در آن  $m = \frac{k_1}{k_2 - k_1}$  است. با جایگذاری این هامیلتونین در معادلات حرکت که با استفاده از کمینه کردن کنش کلاسیکی حاصل می‌شود، داریم:

$$\begin{aligned} S_n^z &= \cos(2g_n) \cos\theta_n \\ Q_n^{zz} &= 1 - \frac{1}{2} \sin^2\theta_n + \\ & \frac{1}{2} \sin^2\theta_n \cos 2\gamma_n \sin 2g_n \end{aligned} \quad [15]$$

اگر از این مقادیر و تقریب های رابطه (6) استفاده شود، با جایگذاری در هامیلتونین (1) انرژی کلاسیک با در نظر گرفتن برانگیختگی های دوقطبی و چهارقطبی به صورت زیر حاصل می شود:

$$\begin{aligned} H_{cl} &= \int \frac{dx}{a} \{ (4 - 4\varphi^2) \cos^2 2g \sin^2\theta + \\ & m \left( 1 - \frac{1}{2} \sin^2\theta + \frac{1}{2} \sin^2\theta \cos 2\gamma \sin 2g \right) + \\ & a \left( -4\varphi\varphi_x \cos^2 2g \sin^2\theta + \right. \\ & \left. \frac{1}{2} \theta_x \sin 2\theta \cos^2 2g - g_x \sin 4g \sin^2\theta \right) + \\ & \frac{a^2}{2} \left( -4\varphi_x^2 \cos^2 2g \sin^2\theta - \right. \\ & \left. \theta_x^2 \cos^2 2g \sin^2\theta + \frac{1}{2} \sin 2\theta \cos^2 2g \theta_{xx} - \right. \\ & \left. 4g_x^2 \sin^2\theta \cos^2 2g - g_x \theta_x \sin 4g \sin 2\theta - \right. \\ & \left. g_{xx} \sin 4g \sin^2\theta \right) \end{aligned} \quad [16]$$

با جایگذاری این هامیلتونین در معادلات حرکت، داریم:

$$\begin{aligned} \theta_t &= 8\varphi \cos 2g \sin\theta + \\ & a(4\varphi_x \sin\theta \cos 2g) + \\ & \frac{a^2}{4} (-m \sin 2\theta \tan 2g \sin 2\gamma) \\ \varphi_t &= 8(1 - \varphi^2) \cos 2g \cos\theta - \\ & m \cos\theta \sec 2g (1 - \sin 2g \cos 2\gamma) + \\ & a(-8\varphi\varphi_x \cos 2g \cos\theta + \\ & \theta_x \csc\theta \cos 2\theta \cos 2g - 4g_x \cos 2g \cos\theta) + \\ & \frac{a^2}{2} (8\varphi_x^2 \cos 2g \cos\theta + \\ & \theta_{xx} \csc\theta \cos 2\theta \cos 2g - 2\theta_x^2 \cos 2g \cos\theta - \\ & 8g_x^2 \cos\theta \cos 2g - 4g_x \theta_x \csc\theta \sin 2g - \\ & 4g_{xx} \sin 2g \cos\theta) \\ g_t &= \frac{m}{2} \sin^2\theta \sin 2\gamma \\ \gamma_t &= 2(1 - \varphi^2) \csc 2g \sin 4g \sin^2\theta - \\ & \frac{m}{2} \cot 2g \cos 2\gamma \sin^2\theta - \\ & a(8\varphi\varphi_x \cos 2g \sin^2\theta - 2\theta_x \cos 2g - \\ & 2g_x \csc 2g \cos 4g \sin^2\theta) - \\ & \frac{a^2}{2} (-8\varphi_x^2 \cos 2g \sin^2\theta - \theta_{xx} \cos 2g \sin 2\theta + \\ & 2\theta_x^2 \cos 2g \sin^2\theta + 8g_x^2 \cos 2g \sin^2\theta - \\ & 2g_x \theta_x \csc 2g \cos 4g \sin 2\theta - \\ & 2g_{xx} \csc 2g \cos 4g \sin^2\theta) - \varphi_t \cos\theta \end{aligned} \quad [17]$$

دیگر موج اسپینی در تقریب خطی از حالت پایه به صورت نمایی با دور شدن از آهنربا کاهش می یابد.

معادلات حرکت در گروه SU(3) با در نظر گرفتن برانگیختگی های دوقطبی و چهارقطبی

برای وارد کردن برانگیختگی های چهارقطبی از حالت های همدوس در گروه SU(3) استفاده می شود. این حالت های همدوس در پارامتر حقیقی به صورت زیر نوشته می شود: [14]

$$|\psi\rangle = D^1(\theta, \varphi) e^{-i\gamma S^z} e^{2igQ^{xy}} |0\rangle = C_0|0\rangle + C_1|1\rangle + C_2|2\rangle \quad [12]$$

که تابع  $D^1(\theta, \varphi)$  تابع ویگنر و  $Q^{xy}$  گشتاور چهار قطبی بوده و ضرایب به صورت زیر حاصل می شوند [14]:

$$\begin{aligned} C_0 &= e^{-i\varphi} \left( e^{-i\gamma} \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos g \right. \\ & \quad \left. - e^{i\gamma} \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin g \right) \\ C_1 &= \frac{\sin\theta}{\sqrt{2}} (e^{-i\gamma} \cos g + e^{i\gamma} \sin g) \\ C_2 &= e^{i\varphi} \left( e^{-i\gamma} \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos g - \right. \\ & \quad \left. e^{i\gamma} \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin g \right) \end{aligned} \quad [13]$$

دو زاویه  $\theta$  و  $\varphi$ ، جهت بردار اسپین کلاسیک را مشخص می کنند. زاویه  $\gamma$  چرخش گشتاور چهارقطبی حول بردار اسپین و پارامتر  $g$  تغییر اندازه بردار اسپین و گشتاور چهارقطبی را مشخص می کنند.

لاگرانژین نیز مانند گروه SU(2) با استفاده از انتگرال مسیر فاینمن و دامنه گذار بین دو حالت همدوس به صورت زیر محاسبه می شود [14]:

$$\mathcal{L} = \cos 2g (\cos\theta \varphi_t + \gamma_t) - H(\theta, \varphi, \gamma) \quad [14]$$

مقادیر چشمداشتی عملگرهای اسپین در گروه SU(3) را به صورت زیر استفاده می کنیم [14]:

$$\begin{aligned} S_n^+ &= e^{i\varphi_n} \cos(2g_n) \sin\theta_n \\ S_n^- &= e^{-i\varphi_n} \cos(2g_n) \sin\theta_n \end{aligned}$$

برانگیختگی‌های دوقطبی یک موج میرا است. در این قسمت نیز برای این شاخه دوباره چنین موجی حاصل شده البته با ضریب  $\cos^2 2g_0$  که حداکثر مقدار آن یک است و وقتی حاصل می‌شود که شاخه چهارقطبی در نظر گرفته نشود؛ یعنی  $g = 0$ ؛ اما جواب معادله موج اسپینی وابسته به برانگیختگی‌های چهارقطبی برای برانگیختگی‌های کوچک از حالت پایه، به شکل موج نوسانی است که میرا نمی‌شود.

از ترکیب دو معادله آخر روابط (19)، به معادله زیر می‌رسیم:

$$g_{tt} = -\frac{m^2}{4}g + 2amg_x + ma^2g_{xx} \quad [21]$$

این معادله خطی که مربوط به برانگیختگی‌های چهارقطبی آهنربای تک ملکولی است، فرم عمومی معادله کلین - گورن خطی را دارد؛ بنابراین جواب آن را به صورت توابع سینوسی در نظر گرفته می‌شود؛ بنابراین امواج حاصل از برانگیختگی‌های چهارقطبی این آهن‌ربای تک ملکولی در تقریب خطی میرا نمی‌شود.

### بحث و نتیجه‌گیری

در این مقاله، معادلات کلاسیکی که هامیلتونین تجربی پیشنهادی، برای زنجیره اسپینی آهن‌ربای تک ملکولی Fe8 را توصیف می‌کنند، را با استفاده از حالت‌های همدوس در پارامتر حقیقی و با استفاده از نظریه گروه‌های  $Su(n)$  به دست آوردیم. در محاسبه معادلات، از روش انتگرال مسیر فاینمن به جای معادله لاندئو-لیف شیدز استفاده شد؛ چون در این روش می‌توان به راحتی تأثیرات مربوط به برانگیختگی‌های چندقطبی را در محاسبات وارد کرد و هدف ما در این تحقیق هم در نظر گرفتن تأثیرات همین برانگیختگی‌ها بود. در تقریب خطی کوچک از حالت پایه نشان دادیم که موج اسپینی مربوط به شاخه دوقطبی، میرا است؛ با این ویژگی که وقتی برانگیختگی‌های چهارقطبی در نظر گرفته، دامنه موج با ضریب  $\cos^2 2g$  کاهش می‌یابد. موج اسپینی وابسته به شاخه چهارقطبی نوسانی بوده و میرا نمی‌شود.

این معادلات به طور کامل دینامیک غیرخطی این آهنربای تک ملکولی را با در نظر گرفتن برانگیختگی‌های دوقطبی و چهارقطبی توصیف می‌کنند. جواب این معادلات سالتون‌های مغناطیسی است. با صرفنظر کردن از برانگیختگی‌های چهارقطبی، این معادلات به معادلات گروه  $SU(2)$  که همان معادله لاندئو لیف شیدز هستند، تبدیل می‌شود؛ بنابراین این معادلات در مقایسه با معادله لاندئو لیف شیدز کامل‌تر بوده و درجات آزادی بیشتری را شامل می‌شود.

برای به دست آوردن حالت پایه، از جمله غیر دیفرانسیلی انرژی کلاسیکی مشتق گرفته و آن را برابر با صفر قرار می‌دهیم؛ یعنی:

$$E_0 = (4 - 4\phi^2)\cos^2 2g\sin^2\theta + m\left(1 - \frac{1}{2}\sin^2\theta + \frac{1}{2}\sin^2\theta\cos 2\gamma\sin 2g\right) \\ \frac{\partial E_0}{\partial \theta} = 0 \rightarrow \sin 2\theta = 0 \rightarrow \theta = \frac{\pi}{2} \quad [18]$$

پس در  $g = g_0$  و  $\theta = \frac{\pi}{2}$  انرژی سیستم کمینه می‌شود. حال برای برانگیختگی‌های خطی کوچک از حالت پایه، معادلات را بازنویسی می‌کنیم. در چنین شرایطی معادلات به صورت زیر ساده می‌شوند:

$$\theta_t = 8\phi_0\cos 2g_0 + 4a\phi_x\cos 2g_0 \\ \phi_t = -a\theta_x\cos 2g_0 - \frac{a^2}{2}\theta_{xx}\cos 2g_0 \\ g_t = \frac{m}{2}\gamma \\ \gamma_t = -\frac{m}{2}g + 4ag_x + 2a^2g_{xx} \quad [19]$$

با در نظر گرفتن هر چهار پارامتر بالا به صورت امواج تخت می‌توان معادلات پاشندگی را برای شاخه‌های مختلف محاسبه کرد که به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\omega_1^2 = \cos^2 2g_0(-4a^2k^2 + 2ia^3k^3) \\ \omega_2^2 = \frac{m^2}{4} + ma^2k^2 \quad [20]$$

معادله پاشندگی اول برای شاخه دوقطبی و معادله پاشندگی دوم برای شاخه چهارقطبی است. همان طوری که در قسمت پیشین هم مشاهده شد موج اسپینی وابسته به

پایین انجام می‌شد؛ اما اخیراً پژوهش‌هایی در دماهای بالا روی این نانوذرات انجام شده و دریچه‌ای جدید از کاربردهای آنها را در حوزه ذخیره‌سازی اطلاعات باز کرده است که در این باره می‌توان به پژوهش پرفسور شین جو و همکارانش اشاره کرد [16].

در حالت کلی، معادلات به دست آمده برای امواج اسپینی برای هر دو شاخه دوقطبی و چهارقطبی غیرخطی بوده و جواب‌های این معادلات به شکل سالیتون‌های مغناطیسی است که در این تحقیق بررسی نشده است و می‌تواند مسئله تحقیقاتی برای آینده باشد. این پژوهش و سایر پژوهش‌های انجام شده در حوزه آهن‌رباهای تک ملکولی تا سال‌های اخیر در دماهای خیلی

### منابع

- [1] یوسف یوسفی، حمیده فخاری، حکمت مومن اف، محمدرضا بنام، مجله پژوهش فیزیک ایران، جلد 17، 5 (1396) 745
- [2] یوسف یوسفی، حکمت مومن اف، مجله پژوهش فیزیک ایران، جلد 12، 2 (1391) 179.
- [3] M Aubin, W Wemple, M Adams, T Huilien, C. George, and H David N. Journal of the American Chemical Society, 118, 33 (1996) 7746.
- [4] A Caneschi, D Gatteschi, R Sessoli, A Barra, L Brunel, and M Guillot, Journal of the American Chemical Society, 113, 15 (1991) 5873.
- [5] Garg, Europhys. Lett, 22, (1993), 205.
- [6] JR Friedman, MP sarachik, Annu. Rev. Condens. Matter phys 1 (1), 109-128, 2010
- [7] CJ Milion, A Vinslava, W Wernsdorfer and et al., J. Am. Chem. Soc 129 2754-55, 2007
- [8] K Wieghardt, K Pohl, I Jibril and G Huttner, Angew. Chem. Int. Ed. Engl., 23 (1984) 77.
- [9] C Delfs et al., Inorg. Chem., 32 (1993) 3099.
- [10] A Barra, P Debrunner, D Gatteschi, Ch Schultz and R Sessoli, Europhys. Lett. 35 (1996) 133.
- [11] C Sangregorio, T Ohm, C Paulsen, R Sessoli and D Gatteschi, Phys. Rev. Lett., 78 (1997) 4645.
- [12] R Caciuffo, G Amoretti, A Murani, R Sessoli, A Caneschi and D Gatteschi, Phys. Rev. Lett. 81 (1998) 4744.
- [13] J J Sakurai, Modern Quantum Physics, Chapter 2, 1999.
- [14] Kh. O. Abdulloev and Kh. Kh. Muminov, "Accounting of quadrupole dynamics of magnets with spin," Proceedings of Tajikistan Academy of Sciences, No. 1, pp. 28-30, 1994 (Russian).
- [15] H Kuratsuji, T Suzuki, J. Math. Phys. 37, 4252, 1996.
- [16] Fu. Sheng Guo, M. Benjamin, Yan-Cong Chen and et al, Science, Vol. 362, issue 6421, PP. 1400-1403, 2018.