# 分子磁体中的量子隧穿及宏观量子效应\*

### 梁九卿

(山西大学理论物理研究所 太原 030006)

摘 要 文章介绍了分子磁体中的量子隧穿和宏观量子效应理论和实验研究的新进展. 分子磁体既有宏观磁体 特性也呈现纯量子行为,例如磁化矢量的量子隧穿. 文章作者解释了如何通过量子隧穿实现宏观量子相干(即薛定 谔猫态的相干叠加)和量子态位相干涉. 对隧穿率计算的瞬子方法,特别是有限温度隧穿理论及其在分子磁体量子 隧穿中的应用也做了简要的阐述.

关键词 分子磁体 是子隧穿 宏观量子效应 瞬子

# Quantum tunneling and macroscopic quantum effects in molecular magnets

#### LIANG Jiu-Qing<sup>†</sup>

(Institute of Theoretical Physics, Shanxi University, Taiyuan 030006, China)

**Abstract** A review is presented of recent developments in the experimental and theoretical studies of quantum tunneling and macroscopic quantum effects in molecular magnets which exhibit both macroscopic and quantum behavior, for instance, quantum tunneling of the magnetization vector. We explain how to realize macroscopic quantum coherence, namely the superposition of Schrödinger cat states and quantum phase interference by means of quantum tunneling. The instanton method for evaluation of tunneling rates at the ground and excited states is also introduced.

Key words molecular magnet, quantum tunneling, macroscopic quantum effect, instanton

## 1 引言

量子力学是支配物质世界运动和变化规律的基本法则,而描述宏观现象的经典力学一般地说只是 量子力学在宏观尺度下的近似.通常宏观系统的量 子效应并不显著,但在特定的系统中,量子现象也可 在宏观尺度下表现出来,称为宏观量子效应.例如, 超导体中的约瑟夫森(Josephson)隧穿,液氦中的超 流动性,以及玻色 – 爱因斯坦(Bose – Einstein)凝 聚等都是众所周知的宏观量子效应例子.随着半导 体微电子技术的发展,磁性材料的制备和研究已进 入纳米尺度.低温下纳米磁体已表现出明显的量子 特性<sup>[1-3]</sup>,纳米磁体磁化矢量的隧穿即一种宏观量 子现象.量子态位相及相干是量子力学的核心概念, 也是量子信息工程的基础. 是否存在宏观可区分态, 即薛定谔(Schrödinger)猫态的相干叠加是自量子力 学建立以来极具挑战性的问题. 20 世纪 80 年代, 2003 年的诺贝尔奖得主 Leggett 等指出 宏观可区分 态的相干叠加可通过量子隧穿实现<sup>[4]</sup>,也就是说, 宏观上稳定的态之间可通过量子隧穿相干关联. 随 着单畴磁体中隧穿率理论计算的研究进展<sup>[5-7]</sup>,纳 米磁体中宏观量子效应的实验和动力学理论研究成 为近年来的热点课题. 1993 年,美国物理学会把磁 的宏观量子效应列为凝聚态物理的重点研究方向之 一. 其实,早在 20 世纪 50 年代就有关于磁的宏观量

† E-mail jqliang@ qxu. edu. cn

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金(批准号:10075032,19775033,19677101)资 助项目

<sup>2003-12-30</sup> 收到初稿 2004-03-05 修回

子效应的推测[8],但由于理论和实验方面的困难, 没有引起重视. 纳米磁体中的宏观量子效应指磁化 矢量(宏观可测量)的量子隧穿和磁化矢量在稳定 取向(即宏观量子态)之间通过量子隧穿往复振荡 (宏观量子相干).实验上观察到的磁滞回线量子化 台阶和磁化矢量相干隧穿引起的共振吸收谱,以及 磁弛豫时间的低温反常是公认的宏观量子现象.纳 米磁体宏观量子效应实验可用来检验量子力学的基 本原理和宏观极限,同时它还和信息储存技术密切 相关.原则上每个单畴纳米磁体可以储存一个比特 信息 其中磁化矢量的两个稳定取向作为储存单元 的两个状态. 无外场作用时两状态保持稳定 因而可 储存信息.为提高计算速度和增加存储密度,必须 减小存储单元尺度. 当尺度小到出现量子隧穿时,磁 化矢量通过量子隧穿自动翻转,信息遗失.因此,宏 观量子相干隧穿最终限制了信息存储密度和计算速 度.

早期实验多用天然磁性颗粒 ,例如在平均尺度 为 15 nm 的铁磁颗粒( $Tb_{0.5}Ce_{0.5}Fe_{0.5}$ )中观察到低 温下弛豫时间不随温度变化的反常现象.但是在天 然和人造铁磁颗粒中做的宏观量子相干实验 因铁 磁颗粒缺乏全同性,未能得到令人信服的结 果[1,11-15]. 近几年来的重大发现是,某些磁性大分 子,例如 Mn<sub>1</sub>, , Mn<sub>4</sub>, Fe<sub>8</sub>等可被看作单畴磁性粒子. 在阻塞温度之下,单个磁性分子既表现出宏观磁体 特性(例如磁滞回线),也呈现纯量子行为(例如磁 化矢量量子隧穿和宏观量子态相干).分子磁体有 稳定的结构和优良的全同性 成为目前磁性宏观量 子效应实验的首选材料,量子隧穿导致宏观量子态 相干叠加 这正是量子计算所要求的特性. 而从信息 存储的观点,量子隧穿则引起信息遗失.因而在实验 和理论研究的基础上建立和环境耦合的单分子磁体 动力学理论,进而形成控制单分子量子特性的技术, 有重要的学术意义和技术应用价值.

## 2 分子磁体中的宏观量子效应及实验

#### 2.1 磁滞回线量子化台阶

1996 年 3 个实验组分别在高自旋大分子醋酸 锰(简称 Mn<sub>12</sub> ,分子结构如图 1 所示 )的低温磁滞回 线上观测到有规律的量子化台阶<sup>[16—19]</sup>.图 2 是 Thomas 等人的实验结果<sup>[19]</sup>. 在磁场增加方向相等 磁场值(0.44T )间隔处出现台阶 ,而在磁场降低方 向则没有. 当温度降低时 ,在高磁场区出现新的台阶



图 1 Mn<sub>12</sub>的结构示意图(外层黑色和中间影线大圆分别表示 Mn<sup>3+</sup>和 Mn<sup>4+</sup>)

(见图3),而低磁场区的台阶变得平滑.改变磁场方 向发现,量子化台阶的出现只与磁场平行于分子磁 体易磁化轴的分量有关.此外,实验还显示,弛豫时 间随外磁场振荡.弛豫时间的极小值对应隧穿率的 极大值,即对应磁滞回线上的跳变.用交流磁化实验 测得 $Mn_{12}$ 分子团簇自旋s = 10.相邻分子间的平均 距离为15Å,因而可忽略分子间的相互作用.图2可 看作单个 $Mn_{12}$ 分子磁体的磁滞回线<sup>[19]</sup>.



图 2 Mn<sub>12</sub>分子团簇的低温磁滞回线(B<sub>0</sub>表示外磁场)

磁滞回线量子化台阶可由 Mn<sub>12</sub>分子自旋态之 间的热助量子隧穿解释. Mn<sub>12</sub>有极强的单轴各向异 性,无外场时,每个 Mn<sub>12</sub>分子都有一双重简并基态 (*M* = ±10)对应自旋平行和反平行于易轴取向. 两 简并基态被各向异性势垒分离,是宏观可区分态. 外 加磁场使一态能量升高另一态降低,低温下弛豫过



图 3 高纵向磁场(longitudinal field)区磁滞回线局部

程由量子隧穿引起. 每当左右势阱能级相等时,发生 量子隧穿 称为共振隧穿. 磁滞回线的每一台阶对应 一共振隧穿(如图4所示). 因基态隧穿率很小(因 而弛豫时间十分长),弛豫过程被认为是由热助隧 穿产生<sup>[20,21]</sup> 图4(右)解释了这一过程:通过热激 发跃迁到较高能级,量子隧穿在高能级进行. 当温度 低于 0.6K 时,磁滞回线与温度无关.除 Mn<sub>12</sub>分子 磁体外,在 Fe<sub>8</sub>和 Mn<sub>4</sub> 超分子二聚物([Mn<sub>4</sub>])的低 温实验中也观察到了类似的磁滞回线量子化台 阶<sup>[23,24]</sup>.



图 4 共振和热助隧穿示意图

#### 2.2 Fe<sub>8</sub> 分子磁体中的宏观量子相干

 $Fe_8$  分子是 1984 年首次合成的,分子式为 [ $Fe_8O_2(OH)_{12}(tacn)_6$ ]<sup>§+</sup>,其中 tacn 表示有机配位 基.  $Fe_8$  分子团簇的结构如图 5 所示 8 个  $Fe^{3+}$  离子 形成" 蝶形分布". 高频电子顺磁共振(EPR)实验<sup>[25]</sup> 发现,分子基态自旋 *s* = 10.  $Fe_8$  分子有双轴各向异 性,我们选易和难磁化方向分别为 *x* 和 *z* 轴,则各向 异性能可表示为 *E* =  $K_{\perp} \cos^2 \theta + K_{//} \sin^2 \theta \sin^2 \varphi$ ,其 中 $K_{\perp}$ =0.338K, $K_{\parallel}/K_{\perp}$ =0.73.±x方向是分子磁体的两个简并宏观量子基态(易磁化方向),可通过量子隧穿关联形成相干叠加态(即薛定谔猫态的相干叠加),即分子磁体在两易磁化方向间通过量子隧穿往复振荡.结果简并解除,能级劈裂.该隧穿能级劈裂可用磁共振吸收实验测量.



图 5 Fe<sub>8</sub> 分子团簇结构示意图 摘自 www.mrs.org/bulletin/ November 2000 ]

1992 年 ,Loss 等人根据自旋相干态路径积分的 观点指出 几何位相的存在导致磁体总自旋为半整 数时隧穿劈裂淬灭,这一现象可用 Kramer 简并解 释<sup>[26]</sup>. 后来 Garg 在分析隧穿路径位相相干的基础 上预言,在双轴自旋模型难磁化轴方向加一磁场,会 引起隧穿劈裂随外磁场振荡<sup>[27]</sup>. 1999 年, Wernsdorfer 和 Sessoli 在  $Fe_s$  分子团簇中观察到了这一振荡现 象<sup>[28</sup>ℓ 实验温度 T < 350mK ,先用微超导量子干涉 仪(micro-SQUIDs)测隧穿几率 然后用 Landau – Zener 公式计算隧穿劈裂). 图 6 是实验观察到的隧穿 劈裂随外场的变化<sup>[28]</sup>,其中 $\varphi$ 是外磁场方向和难磁 化轴的夹角. 对于小角度  $\sigma$  ,隧穿劈裂随外磁场振 荡. 当 $\varphi$  角增加时 振荡逐渐消失. 图 6(b)是在态 M = -10 和态 M = s - n 之间共振隧穿劈裂随外磁场 的振荡( $\varphi = 0$ ) 其中 s 为自旋量子数 n 是小于或等 干s的整数n为奇数和偶数时有半周期相移 称为 宇称效应.



图 6 隧穿劈裂  $\Delta E_{qt}$ 随横向磁场  $H_{trans}$ 的振荡 (a) 对于不同的 方位角  $\varphi$ ,在  $M = \pm 10$  态之间的量子隧穿 (b) $\varphi = 0$  时,在 M = -10和 M = s - n态之间的量子隧穿

#### 2.3 磁弛豫实验

纳米铁磁颗粒的低温弛豫反常是最早确认的宏 观量子效应实验. 1992 年 ,Barbara 小组研究了铁磁 颗粒( Tb<sub>0.5</sub>Ce<sub>0.5</sub>Fe<sub>2</sub> )( 平均尺寸为 15nm )中的弛豫 现象<sup>[29]</sup>. 根据经典磁学理论, 磁弛豫由经典热激活 过程主导, 弛豫率服从 Arrhenius 定律,温度趋于零 时弛豫率也趋于零. 但实验发现,当温度低于某临界 值  $T_e$ 时, 弛豫率等于常数<sup>[30,31]</sup>. 这时弛豫过程可理 解为由量子隧穿引起,  $T_e$ 称为由热激活向量子隧穿 过渡的交界温度. 图 7 是 Barbara 小组的实验结果. 温度在  $T_e = 2$ K 以下时, 弛豫时间明显偏离经典 Arrhenius 定律,基本不随温度变化. 这一低温反常被 认为是宏观量子隧穿的证据.

3 自旋相干态路径积分 瞬子

3.1 宏观量子态和宏观量子相干

我们选  $Fe_s$  分子磁体的难磁化方向为 z 轴 ,易 磁化方向沿 x 轴 ,则  $Fe_s$  分子磁体可用下面等效哈



图 7 弛豫时间的温度依赖关系(箭头所指为偏离 Arrhenius 定律  $\pi_0$  表示时间 ,单位  $\mu$ s )[ 摘自 www. mrs. org/bulletin/November2000 ]

密顿量描述 即

 $\hat{H} = K_{\perp} \hat{S}_{z}^{2} + K_{//} \hat{S}_{y}^{2}$ , (1) 其中各向异性常数均为正值,且 $K_{\perp} > K_{//}$ .若不存在 量子隧穿,则磁化矢量沿±x 取向是两宏观稳定态, 即宏观简并基态,记为 ↑ , ↓ .磁化矢量(宏观 量)的量子隧穿导致两简并宏观态相干关联,能级 分裂.结果是

$$|\psi_{e} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow + |\downarrow \rangle),$$

$$|\psi_{o} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow - |\downarrow \rangle), \quad (2)$$

其中偶态  $|\psi_e$  能量较低 ,是磁体的基态 ,而奇态  $|\psi_e$  是第一激发态.  $|\psi_e$  , $|\psi_e$  是宏观量子叠加态 , 即薛定谔猫态的相干叠加. 解含时薛定谔方程容易 发现 ,分子磁体磁化矢量在两易磁化方向( 宏观简 并基态 )间往复隧穿振荡 ,隧穿率是  $\Gamma = \frac{\Delta E}{2h}$  ,其中  $\Delta E$  表示基态能级的隧穿劈裂 ,即第一激发态和基 态的能量差 ,h 表示普朗克常数. 图 8 是宏观量子相 干示意图. 目前 ,纳米磁体中的宏观量子相干和外场 引起的拓扑位相干涉效应已成为本领域最活跃的理 论研究课题<sup>[32-76</sup>].

3.2 隧穿率的计算——瞬子方法

量子隧穿理论的出发点是计算由隧穿引起的两 宏观态 | ↑ , |↓ 之间的虚时跃迁几率幅——费 曼(Feynman)传播子,可用自旋相干态路径积分表示:

↑  $|e^{-(\tau_i - \tau_i)\frac{H}{\hbar}}| \downarrow ~ ~ \int D\{\varphi\} D\{\theta\} e^{-S/\hbar}$ , (3) 其中 $\tau = it \ t$  是实时间 $, \pi_i, \pi_i$ 分别表示初态和终态 虚时. 在自旋相干态路径积分表示中,自旋矢量为S=  $s(\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$ ,  $S = \int_{\tau_i}^{\tau_i} L_e d\tau$  是虚时 作用量  $L_e$  是虚时拉格朗日(Lagrange)量. 从简单的



图 8 势垒隧穿导致的宏观量子相干示意图

量子力学运算不难得到隧穿率(或能级劈裂)和费 曼传播子的关系.虚时费曼路径积分可用定态位相 微扰法计算,或称瞬子方法<sup>[77,78]</sup>.所谓瞬子即虚时 拉格朗日量对应的经典粒子(赝粒子).WKB方 法<sup>[79—84]</sup>是定态位相微扰的零级近似.值得强调的 是(1)自旋相干态路径积分拉格朗日量中包含一 个和场论中类似的Wess-Zumino 拓扑相互作用项

相应地 宏观量子态中有一 Aharonov – Bohm 位相. 半整数自旋时的隧穿劈裂淬灭则是拓扑位相干涉的 结果.(2)文献 5]指出,用自旋相干态路径积分得 不到正确的隧穿率前因子,成为长达 30 多年的难 题.最近发现,问题在于自旋系统的等效拉格朗日量 动能项中的转动惯量不是常数,而和瞬子位置有关, 即位置相关的转动惯量(或者质量),但文献中的前 因子计算公式只适用于常数质量系统.用非线性变 换得到新的等效拉格朗日量,其中质量变为常数,解 决了这一难题<sup>[87]</sup>.

3.3 宏观量子态位相干涉效应

沿 Fe<sub>8</sub> 分子磁体难轴方向加磁场也产生一 Wess – Zumino 类型的拓扑作用项,从而使量子态有 一和磁场值有关的 Aharonov – Bohm 位相. 由于宏观 量子态位相干涉引起隧穿劈裂随外场振 荡<sup>[44,47,85,86]</sup>. 用量子隧穿的瞬子方法可求得隧穿劈 裂随外场大小和方向变化的函数关系. 在难轴 *z* 和 中间轴 *y* 平面中加一大小为 *H* 的外磁场,设外场方 向和 *z* 轴的夹角为 γ,则(1)式的哈密顿算符中应加 – Zeeman 能量项  $\hat{H}' = -g\mu_{\rm B}H(\hat{S}_x \sin\gamma + \hat{S}_z \cos\gamma)$ , 其中 *g* 表示自旋 *g* 因子  $\mu_{\rm B}$  是玻尔磁子. 可得到能 级劈裂作为磁场值 *H* 和方位角 γ 的解析表达式. 结 果如图 9 所示<sup>[44]</sup> 和实验结果[图 6(a)]定性符合. 偏差的原因是哈密顿量(1)式太简单,而 Fe<sub>8</sub> 分子磁 体各向异性能中还应包含自旋 4 次方项<sup>[88]</sup>. 关于宇



图 9 基态能级劈裂  $\Delta \varepsilon_0$  作为磁场 H 函数的理论曲线(磁场方 位角  $\gamma$  从下到上分别取 0° 5°,10° 20°和 90°) (a)总自旋为 整数 ,s = 10; (b)总自旋为半整数 s = 10.5

# 4 周期瞬子 ,热助隧穿和隧穿率的温 度曲线

瞬子是场方程满足时空平移不变性的有限作用 量解,能量为零,只能描述基态量子隧穿.因此,瞬子 方法是零温度理论,不能解释隧穿率随温度的变化. 所以有必要把瞬子方法推广到激发态量子隧穿,从 而建立有限温度隧穿理论.周期瞬子是场方程的有 限能量解,满足周期边条件.用周期瞬子计算激发 态隧穿率的理论和计算方法也于10多年前建立,并 用于计算分子磁体激发态隧穿率及相关的干涉效 应<sup>[90—99]</sup>.激发态的量子隧穿可理解为系统被热激 发,而量子隧穿在激发态进行,故称热助隧穿.给定 温度下的隧穿率可用通常的热平均方法得到.基于 双轴各向异性磁体模型得到的隧穿率理论温度曲线 和实验观察到的弛豫时间温度关系(图7)定性符 合<sup>[40,96]</sup>.

# 5 从量子隧穿到经典热激活的过渡 ——相变过程

磁体中的宏观亚稳态衰变和简并宏观量子态之 间的相干,在零温时是纯量子隧穿过程.温度升高, 热助隧穿参与 同时伴随着经典热激活过程. 经典热 跃迁率服从 Arrhenius 定律 即  $\Gamma_{\rm th} \sim \exp(-S_0(T))$ ,其中  $S_0(T) = \frac{\Delta U}{kT} \Delta U$ 表示势垒高度. 随着温度升 高 经典热跃迁的作用增大 当温度高于某一转变温 度时,则完全由经典热激活过程主导.研究从量子隧 穿到经典热激活的过渡早已引起研究者的兴趣,而 且人们认识到 经典—量子过渡是一相变过程. 著名 物理学家 Affleck 和 Linde 等于 20 多年前分别从量 子力学和宇宙模型的分析中指出,经典—量子过渡 是二阶相变过程<sup>[100-102]</sup>. 后来 Chudnovsky 发现,若 粒子(即周期瞬子)的振荡周期随能量的增加不是 单调减小 见图 10(b)]则存在一阶相变<sup>[103]</sup>.之后 纳米磁体中经典—量子过渡的相变过程研究变得非 常活跃[104-128]. 有几种确定相变类型的方法:例如, 直接用 Landau 序参数相变理论研究经典—量子过 渡 用非线性微扰法分析势垒顶部小振动周期随能 量变化 给出确定一阶相变的条件等. 从周期瞬子作 用量和温度 周期和能量的关系 易于解释经典 - 量 子过渡的相变问题,根据周期瞬子方法,在能量为 E 的激发态隧穿率零级近似是

$$\Gamma(E) \sim e^{\frac{-S_{f}(E)}{\hbar}} = e^{\frac{-W(E)-pE}{\hbar}}, \qquad (4)$$

其中  $S_p(p)$ 表示周期瞬子作用量 p 为瞬子周期 ,是 能量的函数 ,W(E)表示 Wenzel – Kramers – Brillouin (WKB)隧穿作用量. 另一方面 ,可用热平均方法得 到给定温度 T 的隧穿率为

$$\Gamma(T) \sim \sum_{E} e^{\frac{-W(E)}{\hbar}} e^{\frac{-E}{kT}}.$$
 (5)

所有能量的隧穿都有贡献,但高能量时,虽然 WKB 隧穿作用量 W(E)减小时隧穿率增加,但高能态的 占据几率小使隧穿率受到抑制. 和瞬子方法得到的 隧穿率比较,在给定温度 T 时,只有当满足条件  $\frac{1}{kT}$ =  $\frac{p}{\hbar}$ 的热助隧穿贡献最大. 因为周期是能量的函数 p(E),我们由此得到能量和温度的关系. 因而可得 到温度 T 时的最可几隧穿率  $\Gamma(T) \sim e^{-S_T} S_T = \frac{W(E)}{\hbar} + \frac{E(T)}{kT}$ . 用周期瞬子方法分析了双轴各向异 性模型(1)式]的经典 – 量子过渡,指出该过渡可以是一阶也可以是二阶相变,完全由各向异性常数 $K_{\perp}, K_{//}$ 的比值 $\lambda = \frac{K_{//}}{K_{\perp}}$ 确定.而且阐明了一阶相变存在的原因是,该模型的等效经典转子的转动惯量不是常数而和位置有关.图10(a)给出了 $\lambda = 0.3$ 的瞬子周期 – 能量关系曲线<sup>[104]</sup>,周期随能量的增加单调减小,因而得到二阶相变.图10(b)是 $\lambda = 0.9$ 时的瞬子周期 – 能量关系曲线,相应的作用量 – 温度曲线见图 11<sup>[104]</sup>, 经典 – 量子过渡(即从 $S_0$ (T)到 $S_1$ (T)的过渡)显然是一阶相变.一个有趣的事实是,若把作用量和范德瓦耳斯(van der Waals)气体中的焓对应,又把周期和能量关系图和范德瓦耳斯气体状态方程中的压强 – 体积图对应,则两者十分相似<sup>[104]</sup>.



图 10 (a)λ = 0.3 时 瞬子周期随能量的变化 (b)λ = 0.9 时 瞬子周期随能量的变化



## 6 研究工作展望

从 1992 年纳米磁颗粒的低温磁弛豫和相干隧

穿实验开始,分子磁体中的量子隧穿和宏观量子效 应研究已有10多年的历史.最新的实验报道是超分 子二聚物[Mn4]。的低温量子化磁滞回线.理论上, 用单分子磁体瞬子方法已能定性地解释大部分实验 结果.因有限温度时,环境的影响不可避免,研究在 耗散环境中的分子磁体宏观量子相干和环境与分子 磁体的糾缠有重要意义,已有这方面的理论探讨:例 如,讨论源于声子、电磁场、核自旋等的耗散环境对 相干隧穿的影响(例如退相干)<sup>4,129—138]</sup>.和环境耦 合的分子磁体量子自旋动力学仍是正在进行和需要 深入研究的课题.另外,虽然晶体中分子磁体间的耦 合很弱,但初步的探讨发现,包含分子磁体间的耦合 有助于定性地解释实验曲线<sup>[46]</sup>.

正如本文引言中所说,基于分子磁体的量子计 算很有吸引力. Tejada 及其合作者曾提出用纳米磁 性粒子(如 Fe<sub>8</sub> 分子磁体)实现量子比特的设 想<sup>[139]</sup>. 文献中也给出了用 Mn<sub>12</sub>分子磁体,通过控制 多频相干磁脉冲实现 Grover 算法的理论方案<sup>[140]</sup>和 可行性分析<sup>[141]</sup>. 外场驱动的耦合多分子磁体量子 自旋动力学和控制其量子特性的技术是实现分子磁 体量子计算的基础,这方面需要更多的工作.

#### 参考文献

- [1] Awschalom D D , DiVincenzo D P , Smyth J F. Science ,1992 , 258 :414
- [2] Gunther L, Barbara B. Quantum Tunneling of Magnetization. Dordrecht : Kluwer , 1995
- [3] 钟文定. 物理,1996,25:37[Zhong W D. Wuli(Physics), 1996 25 37(in Chinese)]
- [4] Leggett A J, Chakravarty, Dorsey A T et al. Rev. Mod. Phys. ,1987, 59 :1
- [5] Enz M, Schilling R. J. Phys. C : Solid State Phys. , 1986 , 19 : L711 ; 1765
- [6] Chudnovsky E M, Gunther L. Phys. Rev. Lett., 1988, 60: 661
- [7] Chudnovsky E M , Gunther L. Phys. Rev. B , 1988 37 :9455
- [8] Pean C P , Livingston J D. J. Appl. Phys. , 1959 , 30 : 1205
- [9] Awschalom D D , DiVincenzo D P. Phys. Today , 1995 , 48 : 43
- [10] Gunther L. Phys. World , 1992(12):28
- [11] Awschalom D D, Smyth J F, Grinstein G et al. Phys. Rev. Lett. ,1992 ,68 :3092
- [12] Garg A. Phys. Rev. Lett. , 1993 , 71 : 4249
- [13] Awschalom D D , DiVicenzo D P , Garanin G et al. Phys. Rev. Lett. ,1993 ,71 #276
- $\left[ \ 14 \ \right]$  Tejada J , Garg A , Gider S  $et \ al.$  Science , 1996 , 272 :424
- [15] Gider S , Awschalom D D , DiVicenzo D P et al. Science , 1996 , 272 :425
- [16] Friedman J R , Sarachik H P , Tejada J *et al.* Phys. Rev. Lett. 1996 , 76 :3830
- [ 17 ] Hernandez J M , Zhang X X , Luis F et al. Europhys. Lett. , 1996 , 35 :301
- $\left[ \begin{array}{c} 18 \end{array} \right] \,$  Thomas L , Lionti F , Ballou R  $et~al. \,$  Nature , 1996 , 384 :145

- [19] Barbara B , Thomas L , Lionti F et al. J. Magn. Mater. , 1999 , 200 :167
- [20] Garanin D A, Chudnovsky E M. Phys. Rev. B ,1997 ,56 : 11102
- $\left[\begin{array}{c}21\end{array}\right]$  Leuenberger M N , Loss D. Phys. Rev. B 2000  $\beta1$  286
- [ 22 ] Barbara B , Chiorescu I , Giraud R et al. J. Phys. Soc. Jpn. , 2000 , 69( Suppl. A ):383
- [ 23 ] Caneschi A , Gatteschi D , Sangregorio C et al. J. Magn. Magn. Mater. , 1999 200 : 182
- [24] Wernsdorfer W, Aliaga Alcaid N, Hendrickson D N et al. Nature, 2002, 416:406
- [25] Barra A L et al. Europhys. Lett. , 1996 , 35 : 133
- [26] Loss D , DiVicenzo D P , Grinstein G , Phys. Rev. Lett. , 1992 , 69 :3232
- [27] Garg A. Europhys. Lett. , 1993 , 22 : 205
- [28] Wernsdorfer W, Sessoli R. Science, 1999, 284:133
- [29] Paulsen C, Sampaio L C, Barbara B et al. Europhys. Lett., 1992, 19:643
- [ 30 ] Tejada J , Zhang X X. J. Phys. : Condens. Matter , 1994 , 6 : 263
- [ 31 ] Zhang X X , Hernandez J M , Tejada J , Phys. Rev. B ,1996 , 54 :4101
- [ 32 ] Liang J Q , Müller-Kirsten H J W , Zhou J G. Z. Phys. B , 1997 , 102 :525
- [ 33 ] Lü Rong , Zhu Jia-lin , Chen Xi *et al.* Phys. Rev. B , 1997 , 56 :10993
- [ 34 ] Lü Rong, Zhu Jia-lin, Chen Xi *et al.* J. Phys. C : Condens Matter , 1998 , 10 :3595
- [ 35 ] Lü Rong , Zhu Jia-lin , Wu Jian et al. Mod. Phys. Lett. B , 1997 , 11 :599
- [ 36 ] Liang J Q , Zhang Y B , Müller-Kirsten H J W et al. Phys. Rev. B , 1998 , 57 , 529
- [ 37 ] Zhang Y B , Liang J Q , Müller-Kirsten H J W et al. Phys. Rev. B , 1999 , 60 12886
- [ 38 ] Zhang Y B , Nie Y H , Kou S P et al. Phys. Lett. A , 1999 , 253 345
- [ 39 ] Nie Y H , Zhang Y B , Liang J Q et al. Physica. B , 1999 , 270 :95
- [40] 聂一行,张云波,梁九卿等. 物理学报,1999,48:966[Nie Y X, Zhang Y B, Liang J Q *et al*. Acta Physica Sinica,1999, 48 966(in Chinese)]
- [41] Nie Y H , Jin Y H , Liang J Q et al. Phys. Rev. B ,2001 ,64 : 134417
- [42] Li B Z , Wu J H , Zhong W D et al. Science in China , 1998 , A41 301
- $\left[ \ 43 \ \right]$  Li B Z , Pu F C. Science in China , 1998 , A41 :983
- [44] Jin Y H , Nie Y H , Liang J Q et al. Phys. Rev. B 2000 62 : 3316
- $\left[ \ 45 \ \right]$  Leuenberger M N , Loss D. Phys. Rev. B , 2000 , 61 :1286
- [46] Chen Z D , Liang J Q , Shen S Q. Phys. Rev. B , 2002 , 66 : 92401
- [47] Liang J Q , Müller-Kirsten H J W , Park D K et al. Phys. Rev. B , 2000 , 61 8856
- [48] Liang J Q , Müller-Kirsten H J W , Zhou J G *et al.* Phys. Lett. B , 1997 , 393 : 368
- [49] Kou S P , Liang J Q , Zhang Y B et al. Phys. Rev. B , 1999 , 59 :11792
- [ 50 ] Wang X B , Pu F C. J. Phys. C : Condens. Matter , 1997 , 9 : 693
- $\left[ \begin{array}{c} 51 \end{array} \right] \ L$ ü ${\rm R}$ , Zhu J L , Chen X et al. Phys. Lett. A ,1997 ,226 :112
- [ 52 ] Lü R , Zhu J L , Wang X B *et al.* Phys. Rev. B , 1998 , 58 : 8542
- $\left[ \begin{array}{c} 53 \end{array} \right]$ Lü R , Zhu J L , Wu J et al. Phys. Rev. B , 1999 , 60 : 3435
- [ 54 ] Jin Y H , Nie Y H , Li Z J *et al.* Mod. Phys. Lett. B ,2000 , 14 809

· 494 ·

- [55] Barbara B , Chudnovsky E M. Phys. Lett. A ,1990 ,145 :205
- [ 56 ] Duan J M , Garg A. J. Phys. C : Condens. Matter , 1995 , 7 : 2171
- [57] Nie Y H , Zhang Y B , Liang J Q et al. Phys. B ,1999 , 270 : 95
- [58] Krive I V , Zaslavskii D B. J. Phys. C : Condens. Matter , 1990 2 :9457
- [59] Nie Y H , Jin Y H , Liang J Q et al. J. Phys. C : Condens. Matter , 2000 , 12 1.87
- [60] Nie Y H , Liang J Q , Jin Y H et al. Phys. Lett. A , 2001 , 282 215
- [61] 聂一行,石云龙,张云波等. 物理学报 2000,49:1580[Nie Y X, Shi Y L, Zhang Y B *et al*. Acta Physica Sinica 2000, 49:1580(in Chinese)]
- [62] Duan J M , Garg A. Phys. B , 1994 , 194 : 323
- [63] Chiolero A , Loss D. Phys. Rev. B , 1997 , 56 : 738
- [64] Lü R , Zhu J L , Zhou Y et al. Phys. Rev. B , 2001 , 64 : 64423
- [65] Simanjuntak H. J. Phys. C : Condens. Matter , 1994 , 6 2925
- [ 66 ] Zhu J L , Lü R , Wang X B et al. Eur. Phys. J. B ,1988 ,4 : 223
- [67] Lü R , Zhu J L , Liu Z R et al. J. Phys. C Condens. Matter , 2000 , 12 :4503
- [68] Garg A, Kim G H. Phys. Rev. B, 1992, 45: 12921
- [ 69 ] Garanin D A. J. Phys. A , 1991 , 24 : L61
- [70] Zaslavskii O B. Phys. Lett. A , 1990 , 149 : 471
- $\left[\begin{array}{c}71\end{array}\right]$  Leuenberger N M , Loss D. Europhys. Lett. ,1999 ,46 :692
- [72] Leuenberger N M , Loss D. Phys. Rev. B , 2000 , 61 :1286
- [73] Lius F , Bartolomé J , Fernández J F. Phys. Rev. B , 1998 , 57 505
- [74] Garanin D A , Martínez X , Chudnovsky E N. Phys. Rev. B , 1998 , 57 :13639
- [75] Von Delft J, Henley C L. Phys. Rev. Lett. , 1992, 69:3236
- [76] Chen Z D. Phys. Rev. B , 2002 , 65 :085313
- [77] Coleman S. Phys. Rev. D , 1997 , 15 : 2929
- [78] Callan C G , Coleman S. Phys. Rev. D , 1997 , 16 : 1726
- [79] Van Hemmen J L , Sütö A. Physica B , 1986 , 141 : 37
- [ 80 ] Van Hemmen J L , SütöA. Europhys. Lett. ,1986 ,1 :481
- [81] Scharf G , Wreszinski W F , Van Hemmen J L. J. Phys. A : Math. Gen. ,1987 ,20 4309
- [82] Garg A , Kim G H. J. Appl. Phys. , 1990 , 67 : 5669
- [ 83 ] Chudnovsky E M. J. Magn. Magn. Matter , 1995 , 140 :1821
- [ 84 ] Chudnovsky E M , DiVincenzo D P. Phys. Rev. B ,1993 ,48 : 10548
- [ 85 ] Chen Z D , Liang J Q , Pu F C. Phys. Lett. A , 2002 , 300 : 654
- [86] Liang J Q , Maharana L , Müller-Kirsten H J W. Physica B , 1999 , 271 :28
- [ 87 ] Chen Z D , Liang J Q , Pu F C. Phys. Rev. B , 2003 , 67 : 104420
- [ 88 ] Caciuffo R , Amoretti G , Murani A. Phys. Rev. Lett. ,1998 , 81 :4774
- [89] Liang J Q , Müller-Kirsten H J W. Tchrakian D H. Phys. Lett. B , 1992 , 282 :105
- [ 90 ] Liang J Q , Müller-Kirsten H J W. Phys. Rev. D ,1992 , 46 : 4685
- [ 91 ] Liang J Q , Müller-Kirsten H J W. Phys. Rev. D , 1994 , 50 : 6519
- [ 92 ] Liang J Q , Müller-Kirsten H J W. Phys. Lett. B ,1994 ,332 : 129
- [ 93 ] Liang J Q , Müller-Kirsten H J W. Phys. Rev. D , 1995 , 51 : 718
- [94] 张礼 葛墨林. 量子力学的前沿问题. 北京:清华大学出版 社, 2000[Zhang L, Ge M L. Advanced Topics of Quantum Mechanics. Beijing: Tsinghua University, 2000(in Chinese)]

- [95] Stamp P C E , Chudnovsky E M , Barbara B. Int. J. Mod. Phys. B ,1992 , 6 :1355
- [96 ] Liang J Q , Müller-Kirsten H J W , Nie Y H et~al. Phys. Lett. A , 1998 , 248  $\,434$
- [ 97 ] Liang J Q , Müller-Kirsten H J W , Shurgaia A V et al. Phys. Lett. A , 1998 , 237 :169
- [ 98 ] Liang J Q , Müller-Kirsten H J W , Zhou J G et al. Phys. Lett. A , 1997 , 228 97
- [99] Liang J Q, Müller-Kirsten H J W, Rana J M S. Phys. Lett. A ,1997 ,231 :255
- [ 100 ] Affleck I. Phys. Rev. Lett. , 1981 , 46 : 338
- [ 101 ] Linde A D. Phys. Lett. B , 1981 , 100 : 37
- [ 102 ] Larkin A I , Ovchinnikov Yu N. Zh. Eksp. Teor. Fiz. ,1984 , 86 :719
- [ 103 ] Chudnovsky E M. Phys. Rev. A , 1992 , 46 :8011
- [ 104 ] Liang J Q , Müller-Kirsten H J W , Park D K et al. Phys. Rev. Lett. , 1998 , 81 :216
- [ 105 ] Chudnovsky E M , Garanin D A. Phys. Rev. Lett. , 1997 , 79 : 4469
- [ 106 ] Gorokhov D A , Blatter G. Phys. Rev. B , 1997 , 56 : 3130
- [ 107 ] Müller-Kirsten H J W , Park D K , Rana J M S. Phys. Rev. B , 1999 ,60 :6662
- [ 108 ] Lee S Y , Kim H , Park D K et al. Phys. Rev. B , 1999 , 60 : 10086
- [ 109 ] Lee S Y , Müller-Kirsten H J W , Park D K et al. Phys. Rev. B , 1998 , 58 :5554
- [ 110 ] Park C S , Yoo S K , Park D K et al. Phys. Rev. B , 1999 , 59 :13581
- [111] Park C S , Yoo S K , Yoon D H. Phys. Rev. B , 2000 , 61 : 11618
- [ 112 ] Hidalgo X M , Chudnovsky E M. J. Phys. C : Condens. Matter , 2000 , 12 :4243
- [ 113 ] Zhou B , Liang J Q , Pu F C. Phys. Rev. B , 2001 , 64 : 132407
- $\left[ \ 114 \ \right]$  Zhou B , Liang J Q , Pu F C. Physica B , 2001 , 301 :180
- [ 115 ] Nie Y H , Liang J Q , Yan Q W. Phys. Lett. A , 2002 , 299 : 586
- [116] Ferrera A , Chudnovsky E M. Phys. Rev. B , 1996 , 53 : 354
- [117] Kim G H. Phys. Rev. B , 1999 , 60 £262
- [118] Kim G H. Phys. Rev. B , 1999 , 59 :11847
- [ 119 ] Kou S P , Liang J Q , Zhang Y B et al. Phys. Rev. B , 1999 , 59 :6309
- [ 120 ] Kim G H. J. Appl. Phys. , 1999 , 86 : 1062
- [ 121 ] Garanin D A , Chudnovsky E M. Phys. Rev. B , 1999 , 59 : 3671 ;
- [ 122 ] Garanin D A , Chudnovsky E M. Phys. Rev. B , 2000 , 63 : 24418
- [ 123 ] Zhou B , Liang J Q. Int. J. Mod. Phys. B , 2001 , 15 : 3143
- [ 124 ] Zhou B , Liang J Q , Pu F C. Phys. Lett. A , 2001 , 278 :243
- $\left[ \ 125 \ \right]$  Zhou B , Liang J Q , Pu F C. Physica B , 2001 , 304 :141
- $\left[ \ 126 \ \right]$  Choi T , Kim G H. Physica B , 2001 , 291 219
- [ 127 ] Kou S P , Liang J Q , Pu F C , J. Phys. : Condens. Matter , 2001 , 13 :2627
- [ 128 ] Zhang Y B , Nie Y H , Kou S P et al. Phys. Lett. A , 1999 , 253 : 345
- [ 129 ] Caldeira A D , Leggett A J , Ann. Phys. ( N. K ) , 1983 , 149 : 74
- [ 130 ] Garanin D A , Chudnovsky E M. Phys. Rev. B , 1997 , 56 : 11102
- $\left[ \ 131 \ \right]$  Garg A , Kim G H. Phys. Rev. Lett. , 1989 , 63 :2512

评 述

- [132] Garg A, Kim G H. Phys. Rev. B, 1991, 43:712
- [133] Chudnovsky E M. Phys. Rev. Lett. , 1994 , 72 3433
- [134] Garg A. Phys. Rev. Lett. , 1993 , 70 :1541
- [ 135 ] Prokofév N V , Stamp P C E. Phys. Rev. Lett. , 1998 , 80 : 5794
- [136] Wernsdorfer et al. Phys. Rev. Lett. , 1999, 82:3903
- [ 137 ] Lee S Y , Kim H , Park D K et al. Phys. Rev. B , 1999 , 60 : 308
- $\left[ \ 138 \ \right]$  Zhou B , Liang J Q , Pu F C. Phys. Lett. B ,2000 ,496 :218
- [ 139 ] Tejada J , Chudnovsky E M , Barco E et al. Magnetic Qubits as Hardware for Quantum Computing. In HP Laboratories Technical Report , HPL , 2000 , 87
- [ 140 ] Leuenberger N M , Loss D. Nature , 2001 , 410 : 789
- [ 141 ] Zhou B , Tao R B , Shen S Q et al. Phys. Rev. A ,2002 ,66 : 10301

·物理新闻和动态·

# 水的年代测定与骨骼跟踪技术

由于原子数量测定技术的进步 高精度的水的年代测定及骨骼跟踪技术将更广泛地用于地质学和生物医学.

美国 Argonne 国家实验室的 Lu Zheng-Tian 等演示了原子阱痕量分析(ATTA)的两种新的应用. 研究人员用激光和磁场陷获所需要的同位素, 然后用激光技术对这些同位素的原子进行计数.

ATTA 现已用于测定撒哈拉的古老的地下水样品中氪 – 81 原子的数量. 氪 – 81 的半衰期为 229 ,000 年 ,是宇宙射线在大 气中产生的一种稀有的同位素. 在大气中 ,约 100 亿个氪原子中只有一个氪 – 81 的原子.

地下水中氪 – 81 相对于其他氪同位素的丰度与地下水存在年代的长短有关. 研究人员由撒哈拉西部努比亚的蓄水层提 取出氪 通过 ATTA 技术分析发现这些水的年龄范围在 200 000 到一百万年之间 依水样品的位置而异.

研究人员认为,这种新的超灵敏方法将为大陆地下水流动、长期冰河运动、通过海底的海水循环等的科学研究带来革命 性变化.

在另一项应用中,研究人员使用 ATTA 技术统计人体骨骼中释放出的钙 – 41 原子的数目. 将这种同位素注入到骨质疏松 病人体中,随后对钙 – 41 的丰度进行测量,可以监视骨骼疏松的速率. 在此之前,医学研究者只能依靠粒子加速器来完成这种 工作. 然而这种较小的、可变得更为经济的 ATTA 技术可以在 10<sup>8</sup>—10<sup>10</sup>个钙原子中探测到一个钙 – 41 原子,其精确度足以胜 任这种工作,

钙 – 41 的半衰期为 103 000 年. 如进一步提高精度 使得能够在 10<sup>15</sup>个其他钙原子中探测到一个钙 – 41 原子 ,ATTA 将是 范围在 50 000 到 500 000 年的古代骨骼年代测定的理想技术.

有关论文见 Sturchio. Geophysical Research Letters , 12 March 2002 及 Moore *et al*. Physical Review Letters ( 近期出版 ).

(树华 编译自 Physics News Update Number 679 #3, April, 2004)

## 病毒具有坚硬的外壳

荷兰与西班牙的一些生物物理学家用原子力显微镜研究在一定外力作用下病毒如何变形. 结果表明,某些病毒的外壳像 硬塑料一样坚硬. 这一研究结果除了医学上的价值外,在纳米技术方面也可能有重要应用(Ivanovska I L *et al.* 2004 Proc. Nat. Acad. Sci.)

病毒的外壳由蛋白质组成,用来在它攻击另一个细胞时保护自己的 DNA.现在对于病毒外壳的结构已了解得很清楚了, 但对这些外壳的机械性质却知道得很少.

Vrije 大学的 Gijs Wuite 及其同事把一台原子力显微镜探针的尖端放在一个噬菌体病毒的外壳上,然后,缓慢地增加原子力显微镜尖端所施加的压力,并记录外壳如何变化.

Wuite 的小组从这些测量中计算出壳的杨氏模量为 1.8 × 10<sup>9</sup> Pa,与硬的塑料相当. 此外,他们还发现这种病毒的外壳可以 承受住几纳牛顿的力,而且被压扁到原来高度的 30% 时也不破裂.

Wuite 说 " 从医学角度看,这项研究可能使我们对于不同病毒的运输策略产生新的见解,壳的强度也可以与病毒在主细胞外具有传染性的时间联系起来. 从纳米技术观点看,病毒的外壳可用作结实且能自组合的纳米容器,壳的蛋白还可以作为形成其他复杂结构的基石."