
高自旋磁性团簇研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/24069.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

开发具有预期稳定性、规则结构和精确组分的功能材料是化学研究的重要内容之一。高自旋磁性团簇由于电子结构与几何构型、自旋态以及原子间相互作用区别于块体材料，展现出奇异的物理化学性质，为自旋电子学材料和微器件的设计开发提供了新思路。

中国科学院

化学研究所分子动态与稳态结构实验室研究员骆智训课题组利用自主设计搭建的质谱与光电子能谱仪器，在金属团簇与超原子研究方面取得了系列进展。

近日，骆

智训课题组、姚建

年课题组，联合清华大学教授李隽理

论团队，在探究阴离子 Rh_n^- ($n=3-33$) 簇与几种典型气体（包括 O_2 、 CO_2 、 CH_4 和 CH_3Br ）的反应中发现， Rh_{19}^-

($S = 10/2$)。Rh

元素本身并非磁性。研究表明，强磁性团簇 Rh_{19}^-

的特殊稳

定性主要来源于其

独特的电子结构与成键方式，且具有

特殊的超原子轨道特征 $1S^22S^22P^63S^23P^6$

。基于此，研究进一步提出了金属团簇“电子自旋态异构体”（Electron-spin state isomers, ESSIs）的新概念，剖析了 Rh_{19}^- 团簇光电子能谱热带（Hot-bands）。

该工作发现了一种高对称的、尺寸在1nm的 Rh_{19}^-

团簇，对应于面心立方

晶体铑的一个片段，诠释了从金属原子到可调

控磁/

电性质固体材料的结构演变规律，为剖析过渡金属光电子性质提供了原子精准的范例，并为材料基因的原子构造提供了新思路。

相关研究成果发表在《科学进展》（Science

Advances, DOI: 10.1126/sciadv.adi0214）上。

研究工作得到国家自

然科学基金委员会、科学技术部和中国科学院的支持。南方科技大学科研人员参与研究。

图1. 铁磁性超八面体 Rh_{19}^- 团簇的发现

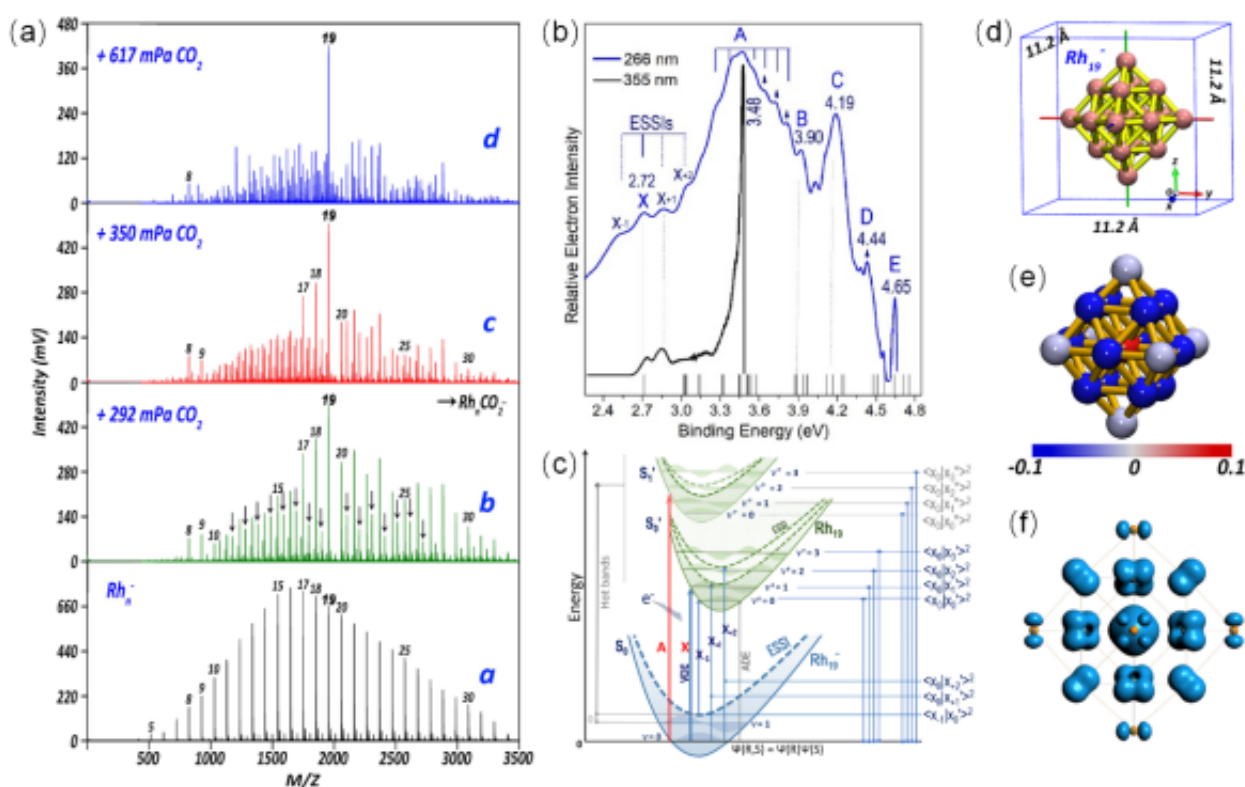


图2. (a) 基于自主研制仪器 (TOF-MS) 制备的阴离子 Rh_n^- 团簇与 CO_2 反应前后的质谱图; (b) Rh_{19}^- 团簇分别在 355 nm 和 266 nm 激光下的光电子能谱; (c) 金属团簇电子自旋态异构体 (Electron-spin state isomers, ESSIs) 机制; (d) 由全局搜索确定的 Rh_{19}^- 的最低能量结构及范德华半径; (e) Hirshfeld 电荷布居; (f) Rh_{19}^- 的自旋密度布居。

研究团队单位：化学研究所

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发