

唯实 拓新

[首页](#) [所况介绍](#) [科研机构](#) [职能部门](#) [科研成果](#) [人才队伍](#) [党群文化](#) [国际合作](#) [院地合作](#) [研究生世界](#) [公共资源](#) [内部信息](#)

## 新闻中心

[头条新闻](#)
[科研进展](#)
[工作动态](#)
[媒体视角](#)

您现在的位置：首页 &gt; 新闻中心 &gt; 科研进展

## 高自旋二价锰金属有机分子的室温电致自旋态转变

发表日期：2017-12-12

作者：朱大梅

[【打印】](#) [【小中大】](#) [【关闭】](#)

近期，固体所郝华副研究员和曾雄研究员课题组在室温电致分子自旋态转变方面获得新发现，相关结果发表在 *Journal of Materials Chemistry C* (*J. Mater. Chem. C* 5, 11598-11604 (2017)) 上。

电致分子自旋态转变是分子自旋电子学的研究热点，该效应可用来简化分子自旋器件的架构，提高自旋器件功能单元的密度和响应速度，从而获得更高的器件性能。目前用来实现电致自旋态转变的分子大多都是含有二价铁离子( $\text{Fe}^{2+}$ )的低自旋金属有机分子。然而，该类分子很难实现室温下电致自旋态转变，因为在室温下，该类分子已稳定在唯一已知的高自旋亚稳态上，彻底丧失了自旋态转变能力。所以，寻找能在室温下发生电致自旋态转变的分子，对实现室温下分子自旋器件的构筑和应用具有重要意义。

为此，固体所郝华副研究员和曾雄研究员基于本组前期电致自旋态转变机理的研究成果，(如图1所示，详情见 *Physical Chemistry Chemical Physics* 19, 7652-7658 (2017))，预测含有二价锰离子( $\text{Mn}^{2+}$ )的高自旋金属有机分子可稳定地实现室温下的电致自旋态转变，并通过相关密度泛函理论计算，证实了他们的想法。理论计算发现：1) 含有二价锰离子的高自旋金属有机分子在0、300以及370K下均可实现偏电压诱导的分子自旋态转变，如图2所示；2) 该类分子自旋态转变相关磁阻率高达40000%。上述研究结果表明，含有二价锰离子( $\text{Mn}^{2+}$ )的高自旋金属有机分子具备构建室温分子晶体管、分子存储器件的潜力。

以上研究得到了国家自然科学基金、中科院青年创新促进会和合肥超算分中心的资助和支持。

文章链接：<https://doi.org/10.1039/C7TC03966B>

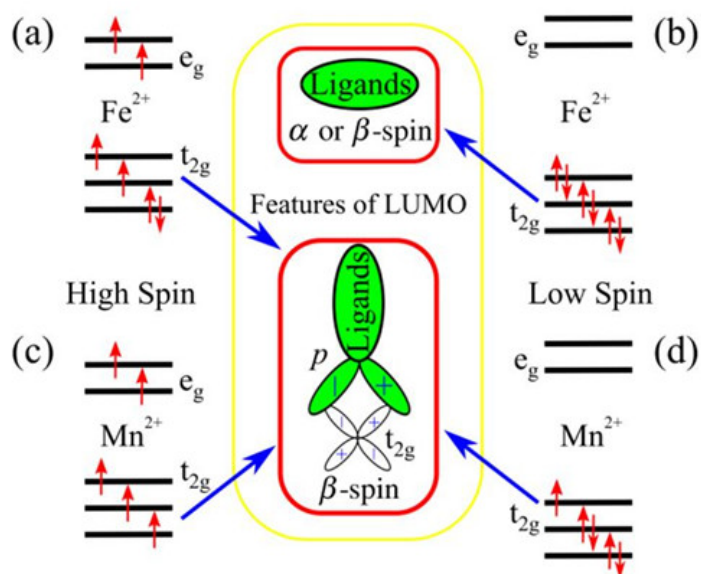


图1. 电致自旋态转变源于LUMO轨道中p-d成键态强弱显著不同。

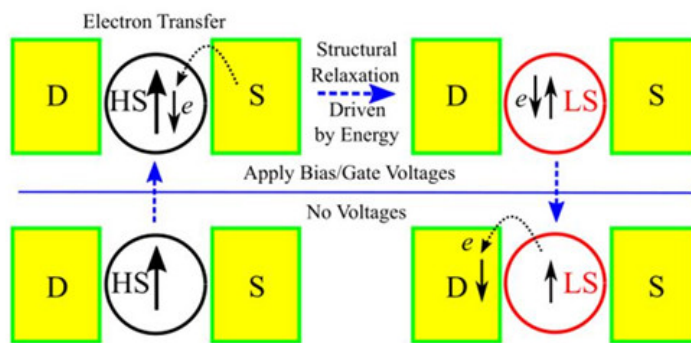


图2. 偏电压诱导分子自旋态转变物理图像示意图。