

蒋尚达——未来三年研究计划

1. 未来三年研究计划的总体目标

在配位化学和分子磁性领域，磁各向异性以及磁交换作用等研究已经兴起近三十年，连续波电子顺磁共振谱仪（cw-EPR）也是研究此类特性最强有力的手段，因此发展 cw-EPR 技术也是完善我国基础科学研究，特别是新谱学方法的重要组成部分；在此基础上脉冲谱仪（pulsed-EPR）技术则为分子磁体的量子计算应用提供了敲门砖，这也是民生科技和信息安全的重大基础科学问题。本托举项目将基于商用 X-band pulsed-EPR 和自主搭建的高频 cw-EPR 对分子磁体进行自旋动力学、磁各向异性以及弱磁耦合常数进行测定以及构性关系研究。

(1) 自主搭建高频连续波电子顺磁共振谱仪，并完成相关仪器调试以及软件编写。该谱仪预期具有 300 GHz 以上的微波频率，垂直方向磁场可达 17 T，样品腔温度可在 1.8-300 K 范围内稳定，将选取准光学系统传输微波，并在样品腔内设置单晶转台，提供单晶测试转动 EPR 的选项；

(2) 获得两种以上具有严格轴向对称性过渡金属配合物团簇的粉末以及较大的单晶样品。在详细表征粉末和单晶磁化率的基础上，初步确定分子的各向异性参数以及磁耦合常数。借助高频 cw-EPR 测定分子高阶零场分裂参数，单离子零场分裂参数，多自旋模型下的磁耦合、单离子各向异性对整体隧穿分裂能的影响。

(3) 获得相对稳定有机自由基、自旋 1/2 的单核金属配合物以及自旋基态 1/2 的配合物团簇分子。用商用 pulsed-EPR 表征电子自旋量子退相干时间以及其影响因素，尝试表征其 Rabi 振荡行为，以及相关器件的自旋动力学行为。

(4) 获得自旋态大于 1/2 的单核或分子团簇化合物。用商用 pulsed-EPR 表征其零场分裂态之间的自旋动力学行为。

2. 具体的研究计划

(1) **2016 年度：**化学合成方面：重点合成两类化合物（a）严格轴对称性顺磁配合物，期待其具有铁磁或者亚铁磁耦合，明确的自旋基态，样品具有相当的稳定性，具有较大的单晶结构；（b）具有自旋为 1/2 的单离子或者分子团簇，期待其具有较好的溶解性和稳定性；仪器搭建方面：设计 cw-EPR 样品腔中的单晶转台蓝图，并完成商用傅里叶变换电子顺磁共振谱仪的调试。

(2) 2017 年度：化学合成方面：获得自旋态大于 $1/2$ 的单核以及分子团簇化合物；实验表征方面：(a) 使用商用脉冲谱仪探究电子自旋量子退相干时间，并在此基础上对化合物进行化学调控，研究化学调控对电子量子退相干的影响；(b) 完成严格轴对称配合物的相关结构和磁性表征，在德法进行单晶和粉末高频顺磁共振谱的表征；仪器搭建方面：与磁体、微波源、微波桥等生产厂商洽谈、购置高频谱仪所需部件；完成制作单晶转台。

(3) 2018 年度：实验表征方面：一方面重点完善电子自旋量子退相干相关实验数据的测试与分析，一方面着重完善严格轴向对称性分子的各向异性研究数据与分析，此外还将着手测试高自旋分子的量子退相干行为；搭建仪器方面：组装搭建已购置的部件，对谱仪进行调试优化，编写操控软件，测试标准样品等。

3. 工作方式

本项目将以课题组的研究成果为基础，充分利用组内、北大化学学院内以及北京分子科学国家实验室的工作基础和实验条件，开展原创性质的实验仪器研发，并基于商用和自主研发的一起开展深入细致的研究跨学科无机合成和物化表征和物理分析工作，推动分子磁体各向异性、分子磁体自旋动力学、分子自旋电子学在基础科学中的发展以及材料应用中的可能性。

4. 预期成果

(1) 完成高频连续波电子顺磁共振谱仪的搭建，开发具有自主知识产权的仪器搭建技术，编写操控自主研发顺磁共振的操作软件系统。

(2) 将上述研究撰写成文，发表高质量学术论文 5-6 篇，其中 1 篇综述介绍该谱仪，其余 4-5 篇论文阐述以上研究成果，预计影响因子在 10 左右。

(3) 培养研究生 3~4 名。