

Struktūrinių fazinių virsmų hibridiniuose perovskituose ir giminingose medžiagose EPR tyrimai

EPR of structural phase transitions in hybrid perovskites and related materials

Gediminas Usevičius¹, Vidmantas Kalendra¹, Mirosław Maćzka², Jūras Banys¹, Dominik Kubicki³, Mantas Šimėnas¹

¹Vilnius University, Faculty of Physics, Saulėtekio av. 9, LT-10222 Vilnius, Lithuania

²Polish Academy of Sciences, Institute of Low Temperature and Structure Research, PL-50-950 Wrocław 2, Poland

³Institute of Chemical Sciences and Engineering, School of Basic Sciences, Ecole Polytechnique Fédérale de

Lausanne, CH-1015 Lausanne, Switzerland

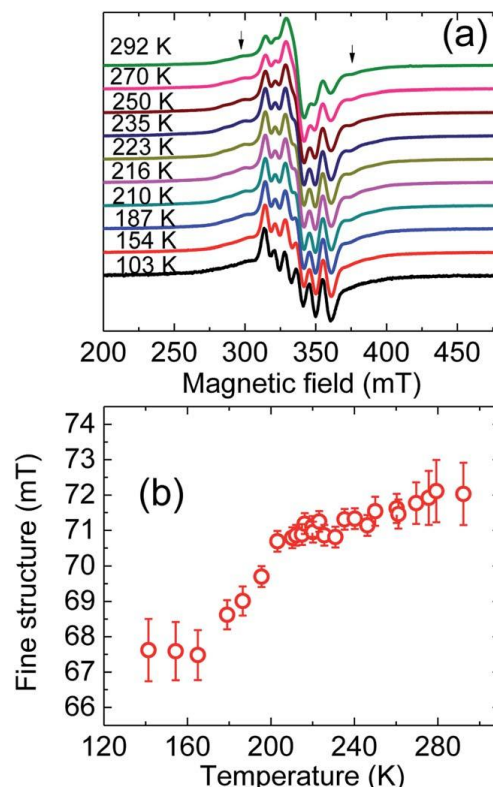
gediminas.usevicius@ff.vu.lt

Hibridinės ir panašios struktūros perovskitinės medžiagos yra sulaukusios didelės mokslo bendruomenės susidomėjimo dėl įdomių fizikinių ir cheminių savybių ir galimo jų pritaikymo dujų absorbcijai, efektyvių saulės elementų gamybai, multiferoinės atminties elementams.

Perovskitinės medžiagos turi molekulinę formulę AMX_3 , kur A yra katijonas, M - metalo centras, o X - organinės arba neorganinės kilmės jungiamoji molekulė/jonas. Dauguma šių medžiagų pasižymi struktūriniais faziniais virsmis, kurių metu pastebimas įvairių fizikinių parametru pokyčiai ir medžiagos karkaso deformacija [1,2].

Vienas iš metodų efektyviai charakterizuoti struktūrinius fazinius virsmus yra pastoviosios veikos elektronų paramagnetinio rezonanso (CW EPR) spektroskopija. CW EPR spektroskopija yra tirama lokali paramagnetinio centro aplinka, o tai leidžia užfiksuoti mikroskopinių fizikinių parametru pokyčius (pvz. gardelės deformaciją) bei tvarkos parametro kitimą fazinių virsmų metu. Dauguma hibridinių ir bei kitų perovskitinę struktūrą turinčių medžiagų neturi paramagnetinių centrų, todėl, norint jas tirti EPR metodu, reikalinga tiriamasias medžiagas šiais centrais praturtinti.

Šiame darbe yra pristatomas būdas detektuoti ir tirti struktūrinius fazinius virsmus perovskitinėse medžiagose - $CsPbBr_3$, $[(CH_3)_2NH_2]_2KCr(CN)_6$, $[(C_3H_7)_4N][Cd(N(CN)_2)_3]$, naudojantis CW EPR spektroskopija. $CsPbBr_3:Mn$ CW EPR spektro priklausomybės nuo temperatūros analizė parodo anomalų smulkiosios sandaros pokytį (1b pav.) esant ~200 K, indikuojančia lokalius struktūrinius pokyčius paramagnetinio centro aplinkoje.



1 pav. (a) $CsPbBr_3:Mn$ CW EPR spektro priklausomybė nuo temperatūros. Rodyklės žymi smulkiosios sandaros linijas, kuriomis buvo įvertinta smulkiosios sandaros priklausomybė nuo temperatūros (b) [1].

Reikšminiai žodžiai: EPR, faziniai virsmai, hibridinės medžiagos.

Literatūra

- [1] Š. Svirskas, S. Balčiūnas, M. Šimėnas, G. Usevičius, M. Kinka, M. Velička, D. Kubicki, M.E. Castillo, A. Karabanov, V.V. Shvartsman and M. de Rosário Soares, *Jour. Mat. Chem. A*, **8**(28): 14015-14022, (2020).
- [2] M. Maczka, M. Ptak, A. Gagor, A. Sieradzki, P. Peksa, G. Usevičius, M. Šimėnas, F. F. Leite and W. Paraguassu. *Jour. Mat. Chem. C*, **7** (8): 2408–2420, (2019).