

# Perowskiete van alkalimetaalhaliedhibriede: Strukture en eienskappe

HJ van der Poll, M Rademeyer

Departement Chemie, Universiteit van Pretoria, Suid-Afrika

Korresponderende outeur: Hendrik van der Poll E-pos: [u16012594@tuks.co.za](mailto:u16012594@tuks.co.za)

**Hybrid halide alkali metal perovskites: Structures and properties:** In this research, hybrid halide alkali metal perovskites containing either piperazinium (piperazine-1,4-diium) or dabkonium (1,4-diazabicyclo[2.2.2]oktaan-1,4-diium) were studied crystallographically and subsequently, their optical band gaps were measured. Specifically, the alkali metal halides NaCl, NaBr, NaI, KCl, KBr, KI, CsCl, CsBr or CsI were combined with the aforementioned organic dications.

Die veld van hibriedmetaalhaliedperowskiet-materiale het uitgebreide aandag oor die afgelope twee dekades geniet, spesifiek na aanleiding van die toepassing van die materiale in opto-elektroniese tegnologie, soos perowskiet-sonelle.

In hierdie navorsing is hibriede van die alkalimetaalhaliedperowskiet-familie kristallografies ondersoek, waar die materiale óf piperasinium (piperasien-1,4-diium) óf dabkonium (1,4-diasabisiklo[2.2.2]oktaan-1,4-diium) katione bevat. Die navorsing het spesifiek gefokus op die alkalimetaalhaliede van NaCl, NaBr, NaI, KCl, KBr, KI, CsCl, CsBr en CsI in kombinasie met die voorgenoemde organiese katione. Bykomend is die optiese bandgapings van die materiale bepaal deur die gebruik van diffusieweerkaatsing-spektroskopie.

Sestien perowskiet-strukture is kristallografies gekarakteriseer, waarvan nege nuut is. Die nege nuwe strukture sluit agt dabkonium bevattende strukture en een piperasinium bevattende struktuur in. Die dabkonium-reeks het een van twee strukturele dimensionaliteite getoon, óf 'n 3-D-perowskiet-struktuur (ses in totaal) óf 'n 1D ABX<sub>3</sub>-tipe perowskiet-struktuur (vyf in totaal). Soortgelyk het die piperasinium-reeks ook óf 'n 3-D struktuur (vier in totaal) óf 'n 1-D (100)-tipe struktuur (een struktuur) opgelewer. Dit is opmerklik dat die piperasinium-strukture oor die algemeen met watermolekules in die kristalrooster gekristalliseer het, terwyl dit nie die geval in die dabkonium-reeks was nie.

Verdere waarnemings het getoon dat die dabkonium-reeks in 'n verskeidenheid fases gekristalliseer het, onder meer monoklinies, ortorombies, trigonaal en heksagonaal, terwyl die piperasinium-strukture slegs in een van twee fases gekristalliseer het (3-D-strukture in die ortorombiese fase en die 1-D-struktuur in die monokliniese fase). Algemene strukturele neigings is in beide hierdie twee reeks verbindings geïdentifiseer.

Die bandgapings van al sestien materiale was groter as 3.00 eV en die materiale is dus nie geskik as die aktiewe laag in perowskiet-sonelle nie. Desnieteenstaande kan die materiale geklassifiseer word as óf halfgeleiers (bandgapings kleiner as 5.0 eV) óf isoleerders (bandgapings groter as 5.0 eV).

Al het die materiale beperkte toepassing as die aktiewe laag in perowskiet-sonelle, toon hulle potensiaal as elektron geleidende materiale en kan dus steeds vir toepassing in perowskiet-sonelle oorweeg word.

Die mees merkwaardige aspek van die navorsing was die strukturele- en eienskapbeheerbaarheid wat deur die dabkonium-reeks vertoon is. Die struktuur en dus ook die bandgaping van die materiaal kon aangepas word deur die voorlopersamestelling (dus reaksiemengsel wat tot struktuurvorming lei) sorgvuldig te beheer. Hierdie beheerbaarheid is 'n gesogte eienskap in die veld van materiaalwetenskappe en laat groot ruimte vir verdere ontwikkeling.

Ter afsluiting, verskeie opsies vir toekomstige navorsing is tydens die navorsing geïdentifiseer, onder meer die sintetiese uitbreiding, bepaling van verdere eienskappe, en ander potensieële opto-elektroniese toepassings. Die perowskiet-familieboom groei dus sterk en bied elke dag 'n nuwe bloeisel vir wetenskaplikes om te pluk.