Uniwersytet Wrocławski

Repozytorium

Plik pochodzi z repozytorium Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego

Temperature-stimulus responsive ferroelastic molecular–ionic crystal: $(C_8H_{20}N)[BF_4]$.

Autorzy

Marcin Moskwa

Emilia Ganczar

Paweł Sobieszczyk

Wojciech Medycki

Piotr Zieliński

Ryszard Jakubas

Grażyna Bator

Rok wydania

2020

Czasopismo

Journal of Physical Chemistry C

Numer woluminu

124

Strony

18209-18218

DOI

10.1021/acs.jpcc.0c05322

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Typ publikacji

Artykuł

Streszczenie

Molecular–ionic crystals, which are built of organic cations and discrete anionic components with AMX_4 stoichiometry, easily induce structural order–disorder transitions. These phenomena can generate interesting ferroic properties. Herein, we have synthesized and characterized a novel AMX_4-type crystal, $(C_8H_{20}N)[BF_4]$ (**1**). Thermal analysis, (DSC, TGA) indicates one structural phase transition (PT) at 257/259 K (cooling/heating, I ↔ II). The structure of **1** has been solved at two temperatures, 120 and 298 K, with single-crystal X-ray diffraction. The high-temperature phase I (**1-HT**) shows a tetragonal structure with the space group *I*4/*mmm*, whereas the low-temperature phase II (**1-LT**) is monoclinic with the space group $P2_1/a$. The PT belongs, thus, to the improper ferroelastic species 4/*mmmF*2/*m* with a 4-fold multiplication of the unit cell. All four possible ferroelastic domains of phase II have been identified in polarized light microscopy. The monoclinic deformation has been shown to give rise to a characteristic parquet-like texture preserving integrity of **1**. The molecular mechanism of PT involving changes in the cationic and anionic dynamics has been postulated based on measurements of the ^1H and ^{19}F NMR spin–lattice relaxation times, T_1, and second-moment, M_2, and of the dielectric responses. The ac and dc conductivity measurements have been used to determine the transport properties of the charge carriers in **1**. The intrinsic features of molecular–ionic crystals, such as the dynamics of molecular motions, structural instability with a lattice-symmetry change, formation of domain patterns, etc., provide a crystal with unique ferroelastic properties. This type of crystal may be useful as an functional material.

Słowa kluczowe

Crystals, Insulators, Anions, Electrical conductivity, Cations

Licencja otwartego dostępu

CC-BY

Licencja na prawach której można swobodnie kopiować, rozprowadzać, zmieniać i remiksować objęty prawem autorskim utwór (Utwór-przedmiot prawa autorskiego) pod warunkiem podania imienia i nazwiska autora utworu pierwotnego oraz źródła pochodzenia utworu.

Pełny tekst licencji:
https://creativecommons.org/licenses/by/3.0/pl/legalcode

Adres publiczny

http://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c05322

Strona internetowa wydawcy

https://www.acs.org/content/acs/en.html

Plik został wygenerowany dnia 2026-11-04 06:30:55
Adres w repozytorium https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/CAcYul8.