

Progressive Structural Complexity in Ferroelectric 1,2,4-Triazolium Hexabromoantimonate(III): Interplay of "Order-Disorder" and "Displacive" Contributions to the Structural Phase Transitions

Autorzy

Michał Chański
Agata Białońska
Ryszard Jakubas
Magdalena Rok
Jan K. Zaręba
Rafał Janicki
Piotr Durlak
Anna Piecha-Bisiorek

Rok wydania

2023

Czasopismo

Journal of Physical Chemistry
Letters

Numer woluminu

14

Strony

4524-4531

DOI

10.1021/acs.jpcclett.3c00924

Kolekcja

Naukowa

Język

Angielski

Streszczenie

Halobismuthates(III) and haloantimonates(III) with the R_3MX_6 chemical composition create a new and broadly unexplored class of ferroelectric compounds. In this paper, we report the haloantimonate(III) ferroelectric comprising an aromatic (1,2,4-triazolium) cation, i.e., $(C_2N_3H_4)_3[SbBr_6]$ (**TBA**). Temperature-resolved structural and spectroscopic studies indicate that **TBA** undergoes two solid–solid phase transitions between tetragonal [$P4_2/m$ (I)] and monoclinic [$P2_1/n$ (II) and $P2_1$ (III)] phases. **TBA** experiences a paraelectric–ferroelectric phase transition at 271/268 K (II–III) driven by “order–disorder” and “displacive” molecular mechanisms. The ferroelectric properties of phase III have been confirmed by hysteresis loop measurement, and additionally, the acentric order has been further supported by second-harmonic generation measurements. Insight into the molecular origins of the ferroelectric polarization was provided by periodic *ab initio* calculations using the Berry phase approach at the density functional theory (DFT-D3) method level employed for calculations of spontaneous polarization.

Słowa kluczowe

Anions, Bromine, Cations, Phase transitions, Polarization

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>

Typ publikacji

Artykuł

Adres publiczny

<http://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.3c00924>

Strona internetowa wydawcy

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

Plik został wygenerowany dnia 2026-04-23 01:20:20

Adres w repozytorium <https://old.chem.uni.wroc.pl/pl/repozytorium/Z6vNq6k>.