

Highlights

RESEARCH AREA 2 - Functional and Complex Materials for Innovative Electronics and Sensing - 2024

Unraveling the Role of Structural Topology on Chirality Transfer and Chiroptical Properties in Chiral Germanium Iodides

C. Coccia, M. Moroni, A. Treglia, M. Boiocchi, Y. Yang, C. Milanese, M. Morana, D. Capsoni, A. Porta, A. Petrozza, A. Stroppa, L. Malavasi

Università di Pavia/INSTM; IIT-CNST@PoliMi; University of Science and Technology Beijing (USTB)
Università di Firenze; CNR-SPIN c/o University of L'Aquila

JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY
2024, 146, 24377-24388

La chiralità nei metalli alogenuri ibridi può trasformare luce, carica e spin in nuove funzioni per chiro-optoelettronica e spintronica. Questo lavoro risponde a una domanda chiave: quanto conta la topologia, a parità di chimica? Gli autori preparano due nuove famiglie lead-free di ioduri di germanio chirali, $(R/S\text{-CIMBA})_3\text{GeI}_5$ e $(R/S\text{-CIMBA})_2\text{GeI}_4$, costruite dagli stessi ingredienti – CIMBA (4-cloro-metilbenzilammonio), Ge e I – ma organizzate in architetture 1D e 2D. Il confronto diretto mostra che la dimensionalità è una vera manopola di progetto: nel passaggio dal 2D al 1D il fattore di anisotropia CD cresce di circa un ordine di grandezza, da $\sim 4 \times 10^{-4}$ a $\sim 4 \times 10^{-3}$; la fase 2D, invece, favorisce grandi distorsioni Ge-I ed effetti spin-orbita più marcati, fino a un parametro Rashba di circa 227 meV/Å. Si completa la storia con sintesi, cristallografia, TGA/DSC, assorbimento, CD, PL, tempi di vita e calcoli DFT/mBJ con e senza SOC: non solo risultati, ma una mappa verificabile per progettare materiali chirali senza piombo.

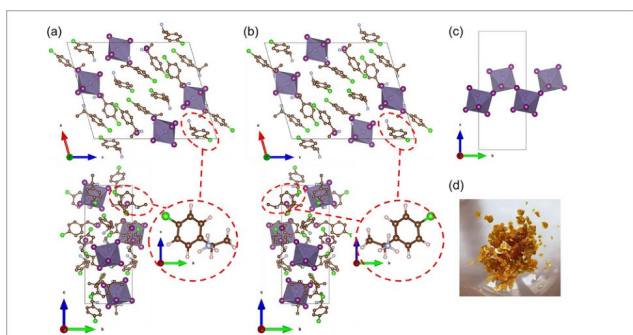


Fig. 1: Cristalli e catene Ge-I 1D di $(R/S\text{-CIMBA})_3\text{GeI}_5$: la stessa chimica genera una topologia diversa e rende misurabile il trasferimento di chiralità.

Stessa chimica, topologia diversa: la dimensionalità è la leva.

1D $g_{\text{CD}} \approx 4 \times 10^{-3}$
Risposta CD $\sim 10\times$ più intensa: catene Ge-I chirali.

2D $\text{Rashba} \approx 227 \text{ meV \AA}^{-1}$
Distorsioni Ge-I record + SOC più marcato.

Fig. 2: CD potenziato nel 1D, spin-splitting rilevante nel 2D e dataset SI che unisce prove termiche, ottiche e DFT.