

## Väitöstiedote

**Väitös 25.09.2020**

# Kaksoisperovskiittien kiderakenne ja magnetismi

<b>Väitöskirjan nimi</b>	On the Structural and Magnetic Properties of B-site Ordered Double Perovskites
<b>Väitöskirjan sisältö</b>	<p>Perovskiitit ovat yhdisteitä joilla on useita tieteen ja teknologian kannalta mielenkiintoisia sovelluksia. Ensimmäinen perovskiittien käyttökohde löytyi elektroniikasta, mutta nykyään niitä hyödynnetään monipuolisesti esimerkiksi polttokennoissa ja pietsosähköisissä laitteissa.</p> <p>Eri perovskiittiyhdisteet ovat luonnosta löytyvän perovskiittimineraalin, kalsiumtitaanioksidin, muunnelmia. Yhdisteille on tyypillistä, että niiden ominaisuuksia voidaan räätälöidä korvaamalla rakenteessa olevia alkuaineita toisilla, kiderakenteen säilyessä alkuperäisen kaltaisena. Tätä ominaisuutta hyödynnetään uusien perovskiittimateriaalien kehityksessä.</p> <p>Perovskiittitekien kolmiulotteissa rakenteessa jokaisella yhdisteen alkuaineella on oma tarkkaan määritelty paikkansa. Kaksoisperovskiitit ovat rakenteita, joissa puolet tietyn paikan alkuaineista on korvattu toisella. Korvatut alkuaineet voivat järjestäytyä rakenteeseen shakkilaudan ruutujen tavoin. Järjestäytyminen ei kuitenkaan aina ole täydellistä ja shakkilautaesimerkkiä käyttäen laudalla voi olla vierekkäin useampikin valkoinen ruutu. Usein korkea järjestäytyminen on ominaisuuksien, kuten magneettisuuden, kannalta eduksi.</p> <p>Väitöskirjatutkimuksessa valmistettiin kaksoisperovskiitteja erittäin korkeassa paineessa. Näin muodostuneet uudet yhdisteet sisälsivät tavallisesti yhteensopimattomia ja lähtöyhdisteessä huonosti järjestäytyviä alkuaineita. Näillä perovskiiteilla havaittiin myös magnetismin ja järjestäytymisasteen välinen yhteys. Korkeapainesynteeseillä valmistettujen näytteiden kaltaisia yhdisteitä onnistuttiin valmistamaan myös normaalipaineessa. Uusien yhdisteiden suunnittelun, valmistamisen ja ominaisuuksien määrittämisen tehostamiseksi analysoitiin jo raportoitua tietoa ja löydettiin lupaavia ennalta tuntemattomia perovskiitteja.</p>
<b>Väitöskirjan ala</b>	Epäorgaaninen kemia
<b>Väittelijä ja väittelijän yhteystiedot</b>	FM Taneli Tiittanen taneli.tiittanen@gmail.com
<b>Väitöksen ajankohta</b>	25.9.2020 klo 17
<b>Paikka</b>	Aalto-yliopiston kemian tekniikan korkeakoulu, Kemian ja materiaalitieteen laitos, Sali Aluminium, Circular Raw Materials Hub, Vuorimiehentie 2, Espoo
<b>Vastaväittäjä(t)</b>	Tohtori Graham King, Canadian Light Source, Kanada
<b>Valvoja</b>	Professori Maarit Karppinen, Aalto-yliopiston kemian tekniikan korkeakoulu
<b>Väitöskirjan verkko-osoite</b>	<a href="https://aaltodoc.aalto.fi/doc_public/eonly/riiputus/view/?handle=123456789/46475">https://aaltodoc.aalto.fi/doc_public/eonly/riiputus/view/?handle=123456789/46475</a>
<b>Avainsanat</b>	Perovskiitti, kaksoisperovskiitti, korkeapainesynteesi, monimuuttuja-analyysi

Press release

Defence on 25 September 2020

## Crystal structure and magnetism of double perovskites

**Title of the doctoral thesis** On the Structural and Magnetic Properties of B-site Ordered Double Perovskites

**Content of the doctoral thesis** Perovskites are compounds with several scientifically and technologically interesting applications. The first perovskite application was in electronics, but nowadays they are utilised, for example, in fuel cells and piezoelectric apparatus.

Perovskite compounds are variations of the natural perovskite mineral, calcium titanium oxide. Typically, perovskite's properties can be tailored by substituting elements in the structure, while preserving the general structure. This property is used in perovskite research.

In perovskite crystal's three-dimensional structure, each element has its well-defined position. Double perovskites are compounds where another element has substituted half of the elements on one specific site. Substituted elements may arrange in a chessboard pattern. However, the ordering is not always perfect, and the chessboard example may have multiple adjacent white squares. Often the high level of order is beneficial for certain property such as magnetism.

In this dissertation, double perovskites were prepared at very high pressures. Formed new compounds contained otherwise incompatible elements or had a high level of disorder in the initial product. Prepared perovskites had a relationship between the degree-of-order and magnetic properties. Similar samples could also be prepared at normal pressure. Existing data was analysed to design, prepare and characterise previously unknown perovskites.

**Field of the doctoral thesis** Inorganic chemistry

**Doctoral candidate and contact information** M.Sc. Taneli Tiittanen  
taneli.tiittanen@gmail.com

**Defence date and time** 25 September 2020 at 17

**Place of defence** Aalto University School of Chemical Engineering, Department of Chemistry and Materials Science, lecture hall Aluminium of the Circular Raw Materials Hub, Vuorimiehentie 2, Espoo

**Opponent(s)** Doctor Graham King, Canadian Light Source, Canada

**Custos** Professor Maarit Karppinen, Aalto University School of Chemical Engineering

**Link to electronic thesis** [https://aaltodoc.aalto.fi/doc\\_public/eonly/riiputus/view/?handle=123456789/46475](https://aaltodoc.aalto.fi/doc_public/eonly/riiputus/view/?handle=123456789/46475)

**Keywords** Perovskite, double perovskite, high-pressure synthesis, multivariate analysis