

Perovskit Yapısı

Efe Ok
efeok3545@gmail.com

Kristal yapıların incelenmesi, X-ışınlarının kristal kafesin atomik düzlemleri tarafından yansıtılmasından kaynaklanan kırınım deseninin incelenmesine dayanır. Difraktogram (X-ışını yansımaları grafiğe eden cihaz), Bragg-Wolfe Denkleminin karşılık gelen bir dizi dar maksima içerir:

$$\lambda = 2d \cdot \sin(\theta)$$

Burada λ = dalga boyu, d =düzlemler arası mesafe ve θ =yansıma açısıdır.

Kübik kafesler söz konusu olduğunda, herhangi bir düzlem serisi için d mesafesi üç tane doğal sayı h, k, l (x, y, z eksenlerinde düzlem tarafından kesilen birim hücre parametrelerinin sayısını ifade eder) ve ifadeye göre kübik kafes parametresi a ile verilebilir:

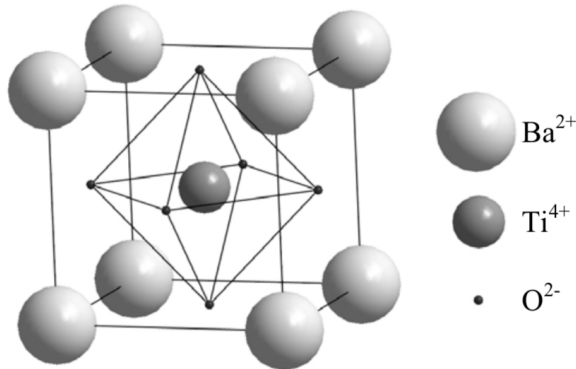
$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{N}{a^2} \quad \text{ve burada} \quad N = h^2 + k^2 + l^2$$

2θ	20.722	29.470	36.301	42.164	47.426	52.277	61.154
h, k, l	1,0,0	1,1,0	1,1,1	2,0,0	2,1,0	2,1,1	2,2,0

Bazı deneysel veriler

1) Herhangi bir h, k, l değeri dizisini tablodan alıp kullanarak kafes parametresi a 'yı hesaplayınız. ($\lambda=1,54060$ Å)

En yaygın kompleks oksitlerin bir tanesinin kübik yapısı aşağıda gösterilmiştir. Bu yapının formülizasyonu $Ba_aTi_bO_c$ şeklinde kısaca yapılabilir.



2) Bu sayıları (a,b,c) bularak tam formülü yazınız.

1926 yılında Norveçli jeokimyacı Victor Goldschmidt, bu tür bir kompleks oksidin ($X_a Y_b O_c$) oluşup oluşmadığını belirlemek için bir kriter önermiştir:

$$t = \frac{R_X + R_O}{\sqrt{2}(R_Y + R_O)}$$

Burada R_X , R_Y ve R_O sırasıyla X,Y ve O atomlarının yarıçaplarıdır. Bu formüle uyan bir kompleks oksidin oluşabilmesi için hesaplanan t değerinin $1,00 \pm 0,20$ aralığında bulunması gerekir.

3) Aşağıda parantez içerisinde Å biriminden yarıçapları verilen metal atom çiftlerinin hangileri oksijen ile perovskit (kompleks oksit) yapısını oluşturabilir, seçiniz. Hesaplarınızı gösteriniz. ($R_O = 1,4 \text{ Å}$)

- I) $Ba^{2+}(1.35\text{Å})$ ve $Ni^{2+}(0.73\text{Å})$ II) $La^{3+}(1.26\text{Å})$ ve $Mn^{3+}(0.65\text{Å})$
III) $Zn^{2+}(0.74\text{Å})$ ve $Ti^{4+}(0.61\text{Å})$ IV) $Ag^+(1.13\text{Å})$ ve $Nb^{5+}(0.66\text{Å})$

$K_2Na[AlF_6]$ ($\lambda=1,54056 \text{ Å}$) difroktagramının maksimalarına denk gelen 2θ değerleri aşağıda verilmiştir.

2θ (h,k,l)	18,918 (1,0,0)	21,879 (2,0,0)	31,159 (2,2,0)	38,353 (2,2,2)	44,599 (4,0,0)	48,817 (3,3,1)	50,166 (4,2,0)
2θ (h,k,l)	55,367 (4,2,2)	59,040 (3,3,3)	64,899 (4,4,0)	68,253 (5,3,1)	69,352 (4,4,2)	73,720 (6,2,0)	77,962 (6,2,2)

4) Buna göre maddemizin kafes parametresini hesaplayınız. (İpucu: Her h,k,l değeri için teker teker a hesaplamana gerek yoktur, hepsi aynı sonucu vermektedir.)

DİKKAT: Problem boyunca θ yerine 2θ kullanıldığına dikkat ediniz.