

**ÇUKUROVA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Esra OKUR KABURCUK

**YENİ NESİL YÜKSEK VERİMLİ VE DAYANIKLI
PEROVSKİT YAPILARININ HİDROTERMAL SENTEZİ VE
GÜNEŞ PİLİ UYGULAMALARI**

KİMYA ANABİLİM DALI

ADANA, 2022

ÖZ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

YENİ NESİL YÜKSEK VERİMLİ VE DAYANIKLI PEROVSKİT YAPILARININ HİDROTERMAL SENTEZİ

Esra OKUR KABURCUK

ÇUKUROVA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
KİMYA ANABİLİM DALI

Danışman : Prof. Dr. Emel YILDIZ
Yıl:2022, Sayfa: 82
Jüri : Prof. Dr. Emel YILDIZ
: Prof. Dr. Bilgehan GÜZEL
: Doç.Dr.Başak DOĞRU MERT

Güneş pilleri, yenilenebilir enerji kaynakları için öne çıkan alternatifler arasında yer almaktadır. Güneş pillerinin üretim maliyetlerini azaltmak ve yeni uygulamalara uyumlu teknolojiler geliştirmek için farklı malzemeler araştırılmıştır. Bu çalışma ile güneş pili uygulamalarında kullanım potansiyeline sahip olabilecek, mevcut verimi artırabilecek perovskit yapıların hidrotermal yöntemle sentezlenmiştir. Bu tez çalışmasında TiO_2 ile Lantanitlerden Seryum Ce(III), Lantan La(III), Samaryum Sm (III) oksitlerinin farklı sıcaklık ve süre kombinasyonlarında tek perovskit olarak adlandırılan ABO_3 genel formüllü CeTiO_3 , LaTiO_3 ve SmTiO_3 yapıları oluşturulmuştur. Ayrıca kalay oksit (SnO_2) yüksek elektron hareketliliği, üstün fotokatalitik kararlılığı nedeniyle perovskit güneş pilleri için umut verici olarak görülmektedir. Bu amaçla elde edilen tek perovskit yapılar, SnO_2 ile farklı sıcaklık ve süre kombinasyonlarında aynı metodla A_2BCO_6 formülü çift perovskitlere dönüştürülmüştür. Karakterizasyon işlemleri sonucu katkılamanın başarılı olduğu ve morfolojik sonuçlarda pik şiddetlerinin ve tanecik boyutlarının literatür ile uyumlu olduğu, yüzeysel olarak homojen yapılar olduğu görülmüştür. Bu sonuçlar elde edilen nanoyapılar için fotovoltaiik uygulamalarda umut vericidir.

Anahtar kelimeler: Fosil yakıtlar, enerji, perovskit, lantanitler.

ABSTRACT

MSc. THESIS

HYDROTHERMAL SYNTHESIS OF NEW GENERATION HIGH EFFICIENT AND DURABLE PEROVSKITE STRUCTURES

Esra OKUR KABURCUK

**DEPARTMENT OF CHEMISTRY
INSTITUTE OF SCIENCES
UNIVERSITY OF ÇUKUROVA**

Supervisor : Prof. Dr. Emel YILDIZ.
Yıl:2022, Sayfa: 82
Jury : Prof.Dr.Emel YILDIZ
: Prof.Dr.Bilgehan GÜZEL
: Assoc.Dr.Başak DOĞRU MERT

Solar cells are among the prominent alternatives for renewable energy sources. Different materials have been researched to reduce the production costs of solar cells and to develop technologies compatible with new applications. With this study, it will have the potential to be used in solar cell applications, Perovskite structures that can increase the current yield were synthesized by hydrothermal method. In this thesis study, ABO_3 with general formula, which is called as single perovskite, in different temperature and time combinations of TiO_2 and lanthanides Lanthanum La(III), Cerium Ce(III), Samarium Sm (III) oxides, $LaTiO_3$, $CeTiO_3$ and $SmTiO_3$ structures were created. In addition, tin oxide (SnO_2) is seen as promising for perovskite solar cells due to its high electron mobility and superior photocatalytic stability. The single perovskite structures obtained for this purpose were converted into double perovskites in the form of A_2BCO_6 with the same method at different temperature and time combinations with SnO_2 . As a result of the characterization processes, it was observed that the doping was successful, and in the morphological results, the peak intensities and particle sizes were consistent with the literature, and superficially homogeneous structures were formed. These results are promising in photovoltaic applications for the nanostructures obtained.

Keywords: Fossil fuels, energy, perovskite, solar energy, lanthanides.

GENİŞLETİLMİŞ ÖZET

İnsanlığın enerji ihtiyacı geçmişten günümüze petrol, kömür, doğalgaz gibi fosil yakıtlarla elde edilmektedir. Günden güne dünya nüfusundaki artışla birlikte enerji ihtiyacı ve iklim değişikliği konusundaki kaygılar yenilenebilir enerji kaynaklarına olan ihtiyacı ortaya çıkarmaktadır. Enerji kaynaklarında önemli bir unsur enerji tüketimidir, çünkü hem fosil yakıtların tükenebilir olması hem de çevreye olumsuz etki etmesidir.

Yenilenebilir enerji kaynaklarının tercih edilmesiyle çevrenin ve iklim değişikliği konusundaki kaygıları azaltılarak düşük karbon ekonomisine ve biyolojik çeşitliliğin kaybolması yönündeki etkileri azaltılarak katkı sağlanmaktadır.

Dünya enerji pazarlarında rüzgar, jeotermal, güneş ve hidrolik enerji teknolojileri bulunmaktadır.

Yenilenebilir enerji kaynakları arasında güneş enerjisi sonsuz, temiz ve herkes tarafından kullanılabilir olması yönleri en çok tercih edilme sebepleridir. En temiz ve güvenilir enerji elde edilmesi güneş enerjisinin doğrudan elektrik enerjisine dönüşümü ile sağlanabilmektedir. Güneş enerjisinden fosil yakıtlar gibi çevreye sera gazı yayılımı olmaz.

En temiz ve güvenilir enerji kaynağı olarak güneş ışınlarından yararlanmak için birçok teknoloji geliştirilmiştir. Bu teknolojilerden bazıları güneş enerjisini ısı ya da ışık enerjisi şeklinde direkt kullanırken, diğer teknolojiler güneş enerjisinden elektrik eldesi şeklinde kullanmaktadır. Güneş pili uygulama alanlarında son zamanlarda perovskit tipi güneş pilleri çalışmalarına rastlanmaktadır.

Perovskit ışığa karşı duyarlı kristalli mineraller sayesinde güneş ışığını elektrik enerjisine dönüştürme ile verimde artış göstererek, güneş enerjisi maliyetlerini önemli ölçüde azaltacağı düşünülmektedir.

Perovskit yapısı genel olarak ABO_3 formülüne sahip benzer yapıdaki oksit gruplarının adı haline gelmiştir. Perovskit bileşikleri diğer oksit gruplarına göre çok farklı çeşitte elementlerin kombinasyonları ile üretilmektedir. Nedeni, perovskit yapısında A konumu olarak adlandırılan büyük katyonları, B konumu olarak adlandırılan küçük katyonları yapıya alabilmesi, kübik ideal yapının eğilmesi ile A ve B olarak adlandırılan farklı büyüklükteki katyonların yapıya girişine izin verip yapıda esnekliğin sağlanabilmesidir. Ayrıca atomik boyutta diğer yapısal motiflerin oluşumu yapıya elverişlilik kazandırır.

Bu tez çalışmasında TiO_2 ile Lantanitlerden Lantan La (III), Seryum Ce (III), Samaryum Sm (III) oksitlerinin farklı sıcaklık ve süre kombinasyonlarında tek perovskit olarak adlandırılan ABO_3 genel formüllü $CeTiO_3$, $LaTiO_3$ ve $SmTiO_3$ yapıları hidrotermal sentez yöntemiyle sentezlenmiştir. Ayrıca; son zamanlarda, kalay oksit (SnO_2) yüksek elektron hareketliliği, üstün fotokatalitik kararlılığı nedeniyle perovskit güneş pilleri için umut verici olduğu için elde edilen tek perovskit yapılar SnO_2 ile farklı sıcaklık ve süre kombinasyonlarında A_2BCO_6 formülü çift perovskitlere dönüştürülmüştür. Elde edilen yapılar XRD, FT-IR, AFM ve SEM cihazları ile karakterize edilmiştir.

TEŞEKKÜR

Yüksek lisans sürecim boyunca desteğini hep arkamda hissettiğim değerli danışman hocam Prof. Dr. Emel YILDIZ'a sunduğu tüm bilgi, deneyim ve aydınlatıcı yönlendirmeleri için en içten saygı ve teşekkürlerimi sunarım.

Yüksek lisans sürecim boyunca çalışmalarım sırasında yardımlarını esirgemeyen ve yorumlarıyla sürecimi aydınlatan değerli hocam Dr. Öğr. Üyesi Burak AY'a teşekkürlerimi sunarım.

Bu süreçte Çukurova Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü Başkanlığına, laboratuvar arkadaşım Seda İPEKBAYRAK'a destekleri için teşekkürlerimi sunarım.

Tezimi yazma sürecinde desteğini esirgemeyen arkadaşım Fizik Bölümünden Dr. Merhan KILIÇ'a sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

Desteğini her zaman hissettiğim aileme ve varlığı ile yanımda olan yol arkadaşım, eşim Emre KABURCUK'a teşekkürlerimi sunarım.

İÇİNDEKİLER

SAYFA

ÖZ	I
ABSTRACT.....	II
GENİŞLETİLMİŞ ÖZET	III
TEŞEKKÜR.....	V
İÇİNDEKİLER	VI
ŞEKİLLER DİZİNİ	VIII
ÇİZELGELER DİZİNİ	X
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	XII
1. GİRİŞ	1
1.1. Yeşil Kimya	3
1.2. Yeşil Kimyanın On İki Kuralı.....	3
1.3. Hidrotermal Sentezin Tanımlanması ve İşlevi.....	5
1.4. Hidrotermal Yöntemi	5
1.5. Hidrotermal Sentezde Çözücü Özelliği ve Suyun Rolü.....	7
1.6. Hidrotermal Sentezde Avantajlar.....	9
1.7. Hidrotermal Sentezin Endüstride Uygulama Alanları	10
1.8. Perovskit	10
1.8.1. Perovskit Güneş Pilleri.....	13
1.9. Titanyum Dioksit (TiO ₂).....	16
1.10. Lantanitler (La,Ce,Sm)	18
1.11. Kalay Oksit (SnO ₂)	19
2.ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR	21
3.MATERYAL VE METOD.....	25
3.1. Kullanılan Kimyasallar	25
3.2. Kullanılan Cihazlar	25
3.3. Metod	25
3.3.1. Genel Sentez	25

3.3.2. LaTiO ₃ Sentezi	26
3.3.3. CeTiO ₃ Sentezi	27
3.3.4. SmTiO ₃ Sentezi	27
3.3.5. La ₂ SnTiO ₆ Sentezi	28
3.3.6. Ce ₂ SnTiO ₆ Sentezi	28
3.3.7. Sm ₂ SnTiO ₆ Sentezi	29
4.BULGULAR VE TARTIŞMALAR	31
4.1. X – Işını Kırınım (XRD) Sonuçları	31
4.2. Morfolojik Analizler (SEM)	37
4.3. Atomik Kuvvet Mikroskopi ile Yüzey Taraması (AFM)	39
4.4. FT-IR Spektroskopisi	42
5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER	43
KAYNAKLAR	45
ÖZGEÇMİŞ	47
EKLER	48

ŞEKİLLER DİZİNİ

SAYFA

Şekil 1.1. Tipik hidrotermal yöntem ekipmanlarının şeması.....	6
Şekil 1.2. Parr Asit Reaktörü.....	6
Şekil 1.3. Hidrotermal reaksiyon ortamları	7
Şekil 1.4. Suyun Faz Diyagramı.....	8
Şekil 1.5. Farklı % doluluktaki suyun P-T davranışı.....	9
Şekil 1.6. Perovskit kübik kristal yapısı ABX_3	12
Şekil 1.7. Perovskit yapıların A ve B katyonlarının seçimi.....	12
Şekil 1.8. İdeal (kübik) perovskit yapısı.....	13
Şekil 1.9. Farklı güneş hücresi teknolojilerinin sınıflandırılması.....	14
Şekil 1.10. Güneş hücrelerinin verimlilik çizelgesi.....	15
Şekil 1.11. (A) Perovskit yapısındaki farklı konumlarda bulunan elementler (B) Perovskit yapısının farklı element ve kombinasyonlarıyla oluşan yasak enerji aralığı değerleri.....	15
Şekil 1.12. TiO_2 Bileşiğinin a) Rutil, b) Anataz ve c) Brokit faz yapıları	17
Şekil 1.13. Kalay oksit yapısı.....	19
Şekil 3.1. Hedeflenen nanoyapılar için hidrotermal koşullarda sentez	26
Şekil 3.2. $LaTiO_3$ sentezi	26
Şekil 3.3. $CeTiO_3$ sentezi	27
Şekil 3.4. $SmTiO_3$ sentezi.....	27
Şekil 3.5. La_2SnTiO_6 sentezi	28
Şekil 3.6. Ce_2SnTiO_6 sentezi.....	28
Şekil 3.7. Sm_2SnTiO_6 sentezi	29
Şekil 4.1. TiO_2 'in XRD grafiği.....	31
Şekil 4.2. $LaTiO_3$ 'in XRD grafiği.	32
Şekil 4.3. $CeTiO_3$ 'in XRD grafiği.	33
Şekil 4.4. $SmTiO_3$ 'in XRD grafiği.	34
Şekil 4.5. TiO_2/La_2SnTiO_6 'in XRD grafikleri.....	35

Şekil 4.6. $\text{TiO}_2/\text{Ce}_2\text{SnTiO}_6$ 'ın XRD grafikleri.....	36
Şekil 4.7. $\text{TiO}_2/\text{Sm}_2\text{SnTiO}_6$ 'ın XRD grafikleri.....	37
Şekil 4.9. a) TiO_2 , b) LaTiO_3 , c) CeTiO_3 , d) SmTiO_3 ait SEM görüntüleri.....	38
Şekil 4.10. a) TiO_2 , b) $\text{La}_2\text{SnTiO}_6$, c) $\text{Ce}_2\text{SnTiO}_6$, d) $\text{Sm}_2\text{SnTiO}_6$ ait SEM görüntüleri	39
Şekil 4.11. a) TiO_2 , b) LaTiO_3 , c) CeTiO_3 , d) SmTiO_3 ait AFM görüntüleri.....	40
Şekil 4.12. a) LaTiO_3 b) $\text{La}_2\text{SnTiO}_6$ AFM görüntüleri.....	40
Şekil 4.13 .a) CeTiO_3 b) $\text{Ce}_2\text{SnTiO}_6$ AFM görüntüleri	41
Şekil 4.14 .a) SmTiO_3 b) $\text{Sm}_2\text{SnTiO}_6$ AFM görüntüleri	41

ÇİZELGELER DİZİNİ

SAYFA

Çizelge 1.1. Doğal perovskit tipi bileşikler, yapıları ve bulundukları yerler	10
Çizelge 1.2. Perovskitlerin özellikleri ve uygulama alanları.....	11
Çizelge 1.3. TiO_2 'in farklı kristal yapılarıdaki fiziksel özellikleri	17





SİMGELER VE KISALTMALAR

°C	: Santigrat derece
atm	: Atmosfer
E _g	: Yasak enerji bant aralığı
FT-IR	: Fourier Transform İnfrared Spektroskopisi
g	: Gram
H ₃ O ⁺	: Hidronyum İyonu
HOMO	: İşgal edilmiş en yüksek moleküler orbital seviyesi
LUMO	: İşgal edilmemiş en düşük moleküler orbital seviyesi
mL	: Mililitre
mmol	: Milimol
nm	: Nanometre
OH ⁻	: Hidroksil İyonu
P	: Basınç
pH metre	: pH 211 Hanna Instruments
SCF	: Süperkritik sıvı
SEM	: Scanning electron microscopy
SnO ₂	: Kalay Oksit
T	: Sıcaklık
TiO ₂	: Titanyum dioksit
XRD	: X-Ray Diffractometer



1. GİRİŞ

Enerji, günümüz insanlığın temel ihtiyaçlarını karşılamak için önemlidir, böylece sağlık, gıda güvenliği, ulaşım vb. gibi yaşam kalitesinin gerçekleştirilmesini sağlar ve ekonomiye kilit bir bileşen olarak katkıda bulunur. Bugüne kadar fosil yakıtlar, küresel enerji tüketiminin % 87 sini oluşturmuştur (Biasotto ve ark, 2011). Her geçen yıl enerji kaynaklarının rezervleri giderek azalmaktadır. Dünya'nın en büyük sorunu haline gelen enerji ihtiyacının küresel ısınma ve fosil kaynaklarının yetersizliğinden dolayı, yenilenebilir enerji kaynakları ile giderilmesi elzemdir, çevre dostu enerji üretimi için arayışlar yenilenebilir enerji kaynaklarına yönelmiştir. Son zamanlarda yenilenebilir enerji kaynakları olarak güneş enerjisi sürdürülebilir olması, çevre dostu olması, verimli olması nedenlerinden dolayı en dikkat çekenidir.

Fotovoltaik hücreler, güneş enerjisinden elektrik üretimi için kullanılır (Yang ve ark, 2014). Güneş enerjisi özellikle de perovskit güneş hücreleri yenilenebilir enerji kaynakları olarak dikkat çekmektedir. Perovskitler mükemmel fotovoltaik performanslarıyla son yıllarda hızlı bir gelişme göstermiştir. İlk perovskit güneş hücresi 2009 yılında üretilmiş olup %3,8 verimlilik ile rapor edilmiştir (Wang ve ark, 2013). 2012 yılında ise %9 verim elde edilmiştir (Sun ve ark, 2016). 10 yıldan daha uzun bir süre içinde, perovskit güneş hücrelerinin verimlilikleri hızla artarak rekor bir değer olan %15,5' ye ulaşmıştır (NREL, 2021).

Perovskitler elektronik ve enerji depolama ve üretimi gibi çok çeşitli uygulamalar için öncü malzemeler olarak büyük ilgi görmüştür. Yakın gelecekte temiz enerji üretiminde perovskitlerin fotokatalitik için katalizör olarak kullanılması mükemmel absorpsiyonları, bant aralığı ayarlanabilirlikleri ve iyi stabiliteleri nedeniyle, güneş ışığını enerjiye dönüştürme verimini artırdığını, güneş enerjisi maliyetlerini bununla birlikte önemli ölçüde azaltacağı düşünülmüştür (Tuna ve ark, 2021).

Bu tezde perovskit yapıları hidrotermal koşullarda sentezlenecektir. Hidrotermal yöntemde kapalı bir reaktörde sulu çözeltilerle yüksek sıcaklık ve basınç koşulları altında reaksiyonlar gerçekleştirilmektedir.

Suyun çözücü olarak kullanımı diğer organik çözücülerden daha ucuz ve çevreci olması, istenilen basınç ve sıcaklıkta bir katalizör görevi görmesi, mutajenik veya kanserojen olmaması, zehirsiz olması, kolay bir şekilde elde edilen üründen uzaklaştırılabilmesi hidrotermal sentezin en önemli avantajlarındanır.

Geleneksel kimya yöntemleriyle hidrotermal yöntemi karşılaştırıldığında; etkili, hızlı, maliyet olarak düşük, yeşil kimya açısından insan sağlığına ve çevreye zararlı madde kullanımı ve üretimini azaltmak veya elimine etmek için daha çevreci bir yöntemdir.

Yeşil kimya, geleneksel yöntemlerden ortaya çıkan olumsuzlukların kaynağında yok edilmesi için bir yöntem olarak karşımıza çıkmaktadır. Küresel iklim değişikliğine duyulan hassasiyetin artması, kimyasal bileşiklerin üretim ve kullanımından ortaya çıkan atık ürünlerin zararlarının anlaşılması bu konularda alınan uluslararası önlemleri arttırmıştır. Bunlardan birisi, 1986 yılında kurulan Zararlı Madde Envanteri (Toxics Release Inventory, TRI), endüstri tarafından doğaya salınan kimyasalları sınıflandırarak kayıt altına almıştır (TRI, 1994). 1991 yılında ise EPA yeni bir alan üzerinde araştırmaların odaklanmasını sağlayacak bir öneri ile dünyada “Yeşil Kimya” araştırmalarının başlatılmasını sağlamıştır. Yeşil kimya sentez sırasında zararlı atıkların ve buna bağlı risklerin azaltılması temeli üzerine kurulmuştur (Anastas ve ark, 1998).

Çalışmada tek perovskit (ABO_3) yapılarının TiO_2 ile farklı stokiometrik katsayı oranlarında, farklı sıcaklık ve süre kombinasyonlarında $LaTiO_3$, $CeTiO_3$, $SmTiO_3$ yapılarının hidrotermal sentezi gerçekleştirilmiştir. Elde edilen tek perovskit yapıları SnO_2 ile A_2BCO_6 formulu çift perovskitlere dönüştürülmüştür. FT-IR, SEM, XRD, AFM cihazları ile karakterize edilmiştir. Literatür taramaları sonucunda kullanılacak metal oksitlerin seçimi gerçekleştirilmiştir (Chen ve ark, 2006).

Titanyum dioksitin lantanitler ile hidrotermal yöntemle tek - çift perovskit yapılarının sentezlenmesi ve SnO₂ ile doplanması ve bu doplama sonucunda fotovoltaiik özelliği daha iyi perovskit yapılar elde edileceği düşünülmüştür (Tasleem ve ark, 2020). Sentezlenen perovskit yapıların güneş pili uygulamalarında potansiyel olarak katkı sağlayacağı düşünülmektedir.

1.1. Yeşil Kimya

İnsan sağlığına ve çevreye zararlı maddelerin kullanımını ve üretimini azaltmak ya da ortadan kaldırmak için yeniden tasarlanması, iyileştirilmesi ve uygulanması aşamalarında bir dizi ilkelerin kullanılmasıdır (Anastas ve ark, 1998).

1.2. Yeşil Kimyanın On İki Kuralı

1. Atık Önleme: Atık oluşumunu önlemek, işlenecek veya temizlenecek atık bırakmamak üzere kimyasal sentezler tasarlamak.
2. Daha Güvenli Kimyasallar ve Ürünler Tasarlamak: Tamamen etkin, çok az veya hiç zehirliliği olmayan kimyasal ürünler tasarlamak.
3. Daha Az Zararlı Kimyasal Sentezler Tasarlamak: İnsan sağlığına ve çevreye az zararlı veya zararsız maddeler kullanarak sentezler tasarlamak.
4. Yenilenebilir Hammaddeler Kullanmak: Tükenebilecek hammadde kaynakları yerine yenilenebilir kaynaklar kullanmak. Yenilenebilir hammaddeler genellikle tarımsal ürünlerden veya diğer işlemlerin atıklarından, tükenebilir hammaddeler fosil yakıtlardan (petrol, doğal gaz veya kömür) veya madenlerden elde edilmektedir.
5. Stokiyometrik Reaktifler Yerine Katalizör Kullanmak: Katalitik tepkimeler kullanarak atıkları en aza indirmek. Katalizörler küçük miktarlarda kullanılmaktadırlar ve tek bir tepkimede birçok defa kullanılabilirler. Bunlar, aşırı miktarlarda ve sadece bir kez kullanılan stokiyometrik reaktiflere tercih edilirler.

6. Kimyasal Türevlerden Kaçınmak: Eğer mümkünse engelleyici veya koruyucu grupların kullanımından veya geçici düzenlemelerden kaçınmak. Türevler ek reaktifler kullanarak atık üretirler.
7. Atom Ekonomisini En Yüksek Yapmak: Son ürünün başlangıç maddesinin en yüksek oranını içerdiği sentezler tasarlamak. Mümkünse çok az atık olmalıdır.
8. Daha Güvenli Çözücüler ve Tepkime Koşulları Kullanmak: Çözücü, ayırma gereçleri veya diğer yardımcı kimyasalların kullanımından kaçınmak. Eğer bunlar gerekli ise tehlikesiz kimyasallar kullanmak.
9. Enerji Etkinliğini Arttırmak: Kimyasal tepkimeleri mümkün olduğunca ortam sıcaklığı ve basıncında gerçekleştirmek.
10. Kullanımından Sonra Yıkıma Uğrayabilecek Kimyasallar ve Ürünler Tasarlamak: Kullanımından sonra daha az zararlı maddelere dönüşebilecek ve böylece çevrede toplanmayacak kimyasal ürünler tasarlamak.
11. Kirliliği Önlemek İçin Gerçek Zamanlı Analiz Etmek: Sentez esnasında yan ürünlerin oluşumunu en aza indirmek veya ortadan kaldırmak için işlem içinde gerçek zamanlı görüntüleme içermek.
12. Kaza Potansiyelini En Aza İndirmek: Patlama, yangın ve çevreye yayılma gibi kimyasal kaza potansiyelini en aza indirmek için kimyasallar ve bunların formlarını (katı, sıvı veya gaz) tasarlamaktır (Anastas ve ark, 1998).

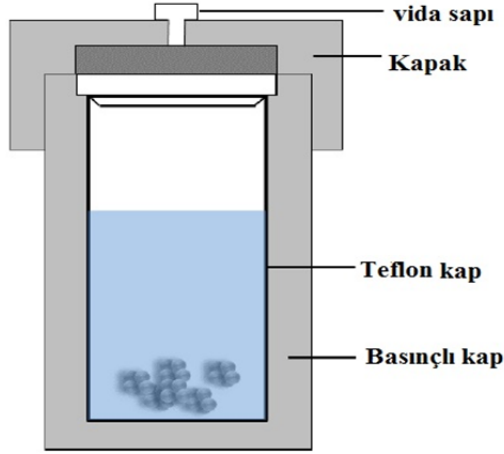
Günümüzde kimyasal işlemlerin her zaman bu on iki kuralı yerine getirmesi mümkün olmamaktadır ama bu 12 kural bir işlemin diğerine göre daha “yeşil” olup olmadığı hakkında basitçe bir fikirdir. Yeşil Kimya boyutunda gerçekleşen kimyasal reaksiyonlar, mikrodalga reaksiyonları ve hidrotermal sentez gibi çeşitli yöntemler kullanılmaktadır.

1.3. Hidrotermal Sentezin Tanımlanması ve İşlevi

Hidrotermal, ilke olarak, sıcaklık ve basınç için standart koşullar altında çözünmeyen materyallerin üretilmesinin, sulu çözücü ya da mineralizörlerin varlığında yüksek sıcaklık ve basınçla çözünmesi ve yeniden kristalleşmesi anlamına gelir. Hidrotermal kelimesi, Hydros (su) ve termos (ısı) kelimesini birleştiren Grecian'dan gelmektedir. Literatürde hidrotermal sentez için bazı yaklaşımlar bulunmaktadır. Örneğin, Acharya, hidrotermal sentezin ortam koşullarıyla sulu çözeltiden büyümesi olduğunu açıklar (Acharya ve ark,2021). Yang, kendine özgü olarak, 100 °C ve 1 bar'ın üzerindeki sulu ortamdaki heterojen reaksiyonlar olduğu için tanımlanmaktadır(Yang ve ark, 2014). En son yaklaşım ise Roy tarafından tanımlandı. Roy'a göre katalizör olarak su kullanımı ve nadiren 100 °C nin üzerindeki sıcaklıklarda ve 1 atm'den daha yüksek olan sıcaklıklarda katı fazların bir bileşeni olarak kullanılması hidrotermal sentezdir (Wang ve ark, 2013). Ortak görüş olarak bilim insanlarında 100 °C nin üstünde ve 1 atm nin üzerinde hidrotermal sentezin gerçekleştiğidir. Bu koşullar için daha alt bir sınır yoktur. Bu yüzden hidrotermal sentez 25 °C nin üstünde çözücü ile var olan ve kapalı bir kapta 1 atm ile heterojen kimyasal reaksiyon olarak tanımlanmaktadır.

1.4. Hidrotermal Yöntemi

Hidrotermal yöntem, yüksek sıcaklık ve basınçlı bir reaksiyon ortamı oluşturmak için parr acid reaktörleri (özel kapalı reaksiyon kabı) ile bir reaksiyon sistemi olarak sulu çözeltinin kullanılması anlamına gelir. Özel kapalı reaksiyon kabının reaktörleri çıkarılabilir teflon aparatı ile maksimum 250 °C sıcaklık ve 1800 psi basınca dayanıklıdır.



Şekil 1.1. Tipik hidrotermal yöntem ekipmanlarının şeması

Reaktör güvenlik disk, korozyon disk, alt ve üst basınç dengeleyici plakalardan oluşmaktadır (Şekil 1.2.).



Şekil 1.2. Parr Asit Reaktörü

Etüv istenilen sıcaklığa getirilerek uygun koşulların sağlanmasıyla reaktörler etüve yerleştirilir ve elde edilmesi istenilen kristal için gerekli parametrelere ulaşılmaya çalışılır (Şekil 1.3.). Hidrotermal sentezde pH değeri, giriş maddelerinin stokiyometrik oranları, sıcaklık ve süre vb. önemlidir.

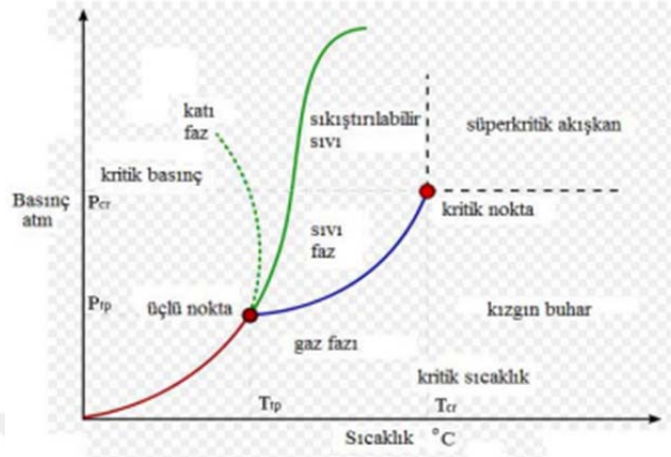


Şekil 1.3. Hidrotermal reaksiyon ortamları

1.5. Hidrotermal Sentezde Çözücü Özelliği ve Suyun Rolü

Genellikle organik olmayan katılar yüksek sıcaklıkta katı- sıvı-gaz reaksiyonu ile hazırlanır. Katıların oda sıcaklığında birbirleriyle tepkime vermedikleri için gerekli reaksiyon hızlarına ulaşmak için yüksek sıcaklıklar gereklidir. Ürün ile başlangıç maddesi arasında büyük fark varsa, başlangıç maddelerindeki tüm bağların kırılması ve yeni bağların oluşumu öncesi atomların göç etmesi gerekir. Bu difüzyon reaksiyonlarının yavaş ilerlememesi için çok yüksek sıcaklıklar gereklidir. Termodinamik yönden yüksek sıcaklıkta yapılan bileşikler karardır. Yüksek difüzyon reaksiyon hızını artırır(Lei ve ark, 2018).

Hidrotermal çözücüler 1 atm basınç ve 100 ° C sıcaklık üzerinde kritik noktada farklı özellikler gösterirler. Şekilde kritik nokta, saf ve homojen bir madde için, faz diyagramında kritik sıcaklık T_c ve basınçtaki P_c 'deki sıvı buharı bir arada bulunma eğrisinin sonunu gösterir. Bir akışkan kritik basınç ve sıcaklık üzerindeki koşullarda süperkritik olarak tanımlanır. Bu süperkritik akışkanların özellikleri, basınç ve sıcaklığa bağlı değişmesidir. Sıcaklığın artmasıyla, sıvı termal genleşme nedeniyle gaz yoğunlaşır. Her iki fazın yoğunlukları kritik noktada aynıdır. Bileşik, kritik noktada süper kritik akışkan haline gelir, bu noktada ne sıvı ne de gazdır.



Şekil 1.4. Suyun Faz Diyagramı

Doğadaki en önemli çözücülerden birisi sudur ve hidrotermal şartlar altında reaksiyon ortamı olarak dikkat çekici özelliklere sahiptir.

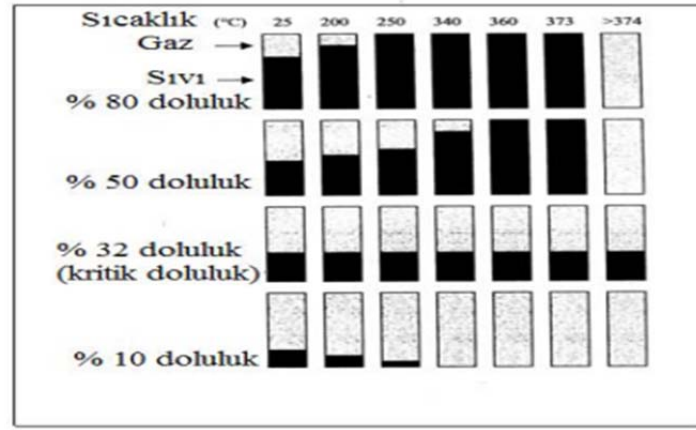
Hidrotermal sentezde su kullanmanın en büyük avantajlarından biri çevresel faydadır ve diğer çözücülerden daha ucuz olmasıdır. Yanmaz, kanserojen, mutajenik gibi zararları yoktur. Termodinamik olarak stabildir. Bir diğer avantajı olarak, suyun çok uçucu olmasıdır, bu yüzden üründen uzaklaştırma işlemi oldukça kolaydır.

Su polar bir çözücüdür ve yoğunluğu yeterince yüksek ise apolar bileşiklerle tamamıyla karışabilir. Diğer çözücülere göre suyun sıcaklık ve basınç ile polaritesinin kontrol edilebilmesi bir avantajdır.

Suyun P-T davranışını hidrotermal sentezde anlamak için ilk olarak sıcaklık, basınç, hacim şartları altında nasıl davranış göstereceğinin bilinmesi gerekir. Bu davranışları deneysel olarak incelemek üzere Chen ve arkadaşları detaylı bir çalışma yapmıştır.

Reaktör hacminin başlangıcından %32 doluyorsa sıvı seviyesi kritik sıcaklığa kadar kalır (Şekil 1.5.). Kritik noktada suyun hem sıvı hem de gaz yoğunluğu 0.32 g/cm^3 tür. %32 den fazla su ile reaktör doldurulduğunda kritik sıcaklıktan önceki sıcaklıklarda kalır. %32 den az doldurulduğunda sıvı seviyesinde sıcaklık arttıkça

düşüş olur ve gaz kritik sıcaklığın altındaki sıcaklıklarda sıvı kaybedilir ve otoklavı doldurur. Daha yüksek oranlarda doldurulduğunda daha düşük sıcaklıkta sıvı ile otoklav dolar (Chen ve ark, 2006). Hidrotermal sentez deneylerinde basınç değeri, sıcaklık ve doluluğun derecesi çalışma şartlarına göre belirlenir.



Şekil 1.5. Farklı % doluluktaki suyun P-T davranışı (Chen ve ark, 2006)

1.6. Hidrotermal Sentezde Avantajlar

Organik olmayan materyaller için hidrotermal sentez geleneksel ve geleneksel olmayan sentez yöntemlerine göre birçok avantajlar sunar. Tozlar, tek kristaller, metalik kaplamalar, polimerler yani organik olmayan materyallerin tüm formları hidrotermal sentez ile hazırlanabilir.

Hidrotermal sentez yüksek sıcaklık tekniği olarak kabul edilse bile bu sıcaklıklar aslında geleneksel tekniklere göre daha düşük sıcaklıktadır ve bu işlemlerde enerji tasarrufu sağlaması daha çevre dostu bir yöntemdir. Diğer önemli avantajı olarak diğer metotlara göre çok reaksiyon süresi gerektirmemesidir. Hidrotermal reaksiyon birkaç gün içinde yapılabilirken diğer reaksiyonlarda bu süre birkaç hafta olabilir.

Bu yöntemde düşük işlem sıcaklıkları, düşük maliyet, partikül boyutunun kontrolü gibi birçok avantaja sahiptir.

1.7. Hidrotermal Sentezin Endüstride Uygulama Alanları

İnsan yaşamında tehlike unsuru oluşturan bazı organik atık malzemeleri işlemiden geçirmek ya da düşük sıcaklıkta seramikleri sinterlemek için ultra aglomeralanmış veya daha az aglomerli kristalize seramik tozları hazırlamak için kullanılabilir(Saputra ve ark, 2018). Günümüzde bu sentez yöntemi malzeme ve yer bilimleri, metalürji, fizik, kimya ve biyoloji gibi çeşitli alanlarda kullanılarak bilim ve teknoloji dallarında yer edinmiştir.

1.8. Perovskit

Perovskit minerali Ural Dağları (Rusya)'da Alman minerolog ve kimyacı Gustav Rose tarafından CaTiO_3 'ün oksit formunda 1839 yılında keşfedilmiştir. Bu mineral ismini Lev Alexeievitch Perovsky'den alır(Biasotto ve ark, 2011). Doğada birkaç tür perovskit tipi bulunmaktadır. Bu bileşiklerden bazılarının gerçek isimleri ve keşfedildikleri yerler çizelgede verilmiştir.

Çizelge 1.1. Doğal perovskit tipi bileşikler, yapıları ve bulundukları yerler (Moure ve Pena, 2015)

Mineral	Yapısı	Keşfedildiği Yer
Latrappit	Ca (Fe, Nb)O_3	Oka, Quebec, Kanada
Loparit	$(\text{Na, Ce})\text{TiO}_3$	Kola, Peninsula, Rusya
Lueshit	NaNbO_3	Kongo Demokratik Cumhuriyeti
Makedonit	PbTiO_3	Makedonya
Perovskit	CaTiO_3	Zlatoust Bölgesi, Ural Dağları, Rusya
Tausonit	SrTiO_3	Murunsitesi, Yakutya, Rusya

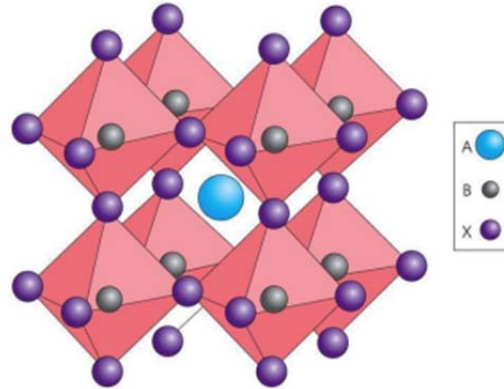
Bileşimleri, kristal yapısı ve simetrilerinin bir fonksiyonu olan perovskit benzeri bileşiklerin özelliklerinin oldukça geniş olduğu bilinmektedir (Çizelge 1.1. ve 1.2.) Perovskit tip bileşiklerin birçoğu iyonik bileşikler olarak değerlendirilir.

Bağ tipi genellikle kovalent ve iyonik bağın karışımıdır. Perovskitlerin elektrik ve manyetik özelliklerine dayanarak, iyonik iletkenler, metalik iletkenler, yarı iletkenler, yalıtkanlar, ferroelektrik bileşikler, antiferro, ferro, ya da ferrimanyetik bileşikler olabilirler(Liyan ve ark, 2006).

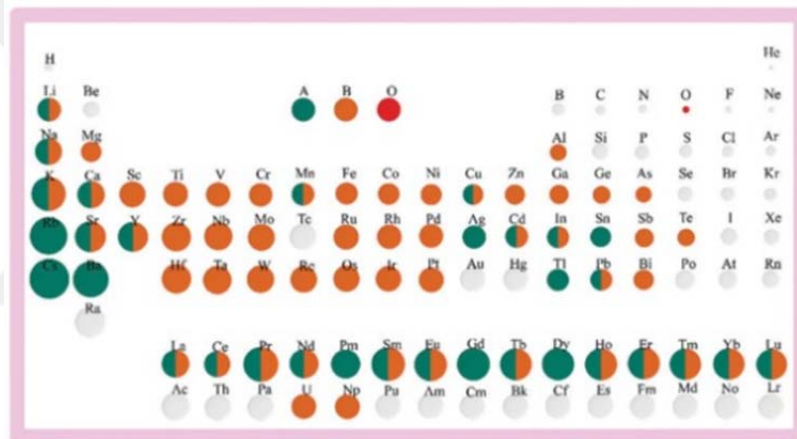
Çizelge 1.2. Perovskitlerin özellikleri ve uygulama alanları (Liyan ve ark, 2006, Tuna ve ark, 2021).

Özellik	Uygulama	Mineral
Proton İletkenliği	Katı oksit yakıt pili elektroliti	BaCeO ₃ , SrCeO ₃ , BaZrO ₃
İyonik İletkenlik	Katı elektrolit, Hidrojen sensörü, H ₂ Üretimi/ekstraksiyonu	(La, Sr) (Ga, Mg)O ₃
Katalitik	Katalizör	LaFeO ₃ , La (Ce, Co)O ₃
Elektriksel / Dielektrik	Çok tabakalı kapasitör, ince film resistör	BaTiO ₃ ,BaZrO ₃
Manyetik	Manyetik hafıza, Ferromanyetizm	GdFeO ₃ ,LaMnO ₃
Optik	Elektrooptik Modülatör,Lazer	(Pb, La) (Zr, Ti)O ₃ , KNbO ₃

Perovskit yapısı ABO₃ kimyasal formülüne sahiptir. A ve B yapıları katyonları temsil ederken X bir anyonu temsil eder(Soosaimanickam ve ark, 2021).



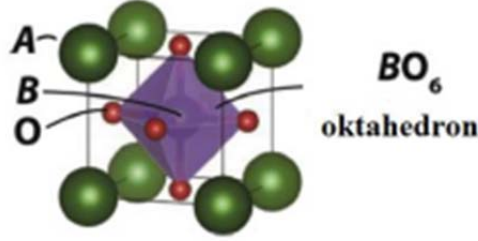
Şekil 1.6. Perovskit kübik kristal yapısı ABX_3 (Soosaimanickam ve ark, 2021)



Şekil 1.7. Perovskit yapıların A ve B katyonlarının seçimi (Zhang ve ark, 2011)

A ve B metalik elementler X ise oksijen(O), karbon (C), azot (N) veya bir halojendir. Günümüze kadar perovskit kristal yapısına sahip çok sayıda malzemenin keşfi gerçekleşmiştir(Murugados ve ark, 2018).

X anyonlarının (tercihen oksijen) iki tarafından biri altı koordinasyon yapmaktadır. Oktahedral kısımlar sekiz veya on iki koordinasyon kısmında mono, di ya da üç değerlikli büyük katyonların yer alabildiği gibi bir, iki, üç, dört, beş veya altı değerlikli oksidasyon hallerine sahip küçük katyonlarda yer alabilir (Chen ve ark, 2018).



Şekil 1.8. İdeal (kübik) perovskit yapısı (Tasleem ve ark, 2020)

Şekildeki perovskit yapısındaki B kasyonu oktahedral konfigürasyonda altı oksijen anyonu ile çevriliyorken, A kasyonu on iki oksijen anyonu ile çevrilmiştir.

1.8.1. Perovskit Güneş Pilleri

Güneşten gelen ışınları en verimli ve pratik enerji kaynağı olarak kullanmanın yollarından birisi, güneş hücrelerini elektriğe dönüştürmektir. Fotovoltaik etki prensibi ile güneş hücreleri çalışmaktadır(Fresnoa ve ark, 2021). Bu etki, yarı iletken bir malzemeye, yarı iletkenin yasak enerji aralığı (E_g) kadar ya da daha yüksek enerjiye sahip ışıkla aydınlatıldığında gerçekleşir. Yasak enerji aralığı yarı iletken malzemeler için valans bandının (VB) maksimumu ile iletkenlik bandının (İB) minimumu arasındaki enerji farkıdır. Atom çekirdeğinden en uzaktaki elektronların enerji seviyesine valans bandı, malzemeyi iletken forma getirmek için elektronların uyarılması gereken enerji seviyesine iletkenlik bandı denir.

Yarı iletkenler için yasak enerji aralığı HOMO–LUMO enerji boşluğu olarak isimlendirilir ve burada (HOMO) en büyük dolu molekül orbitali ile (LUMO) en düşük boş molekül orbitali arasındaki enerji farkı olarak verilir.

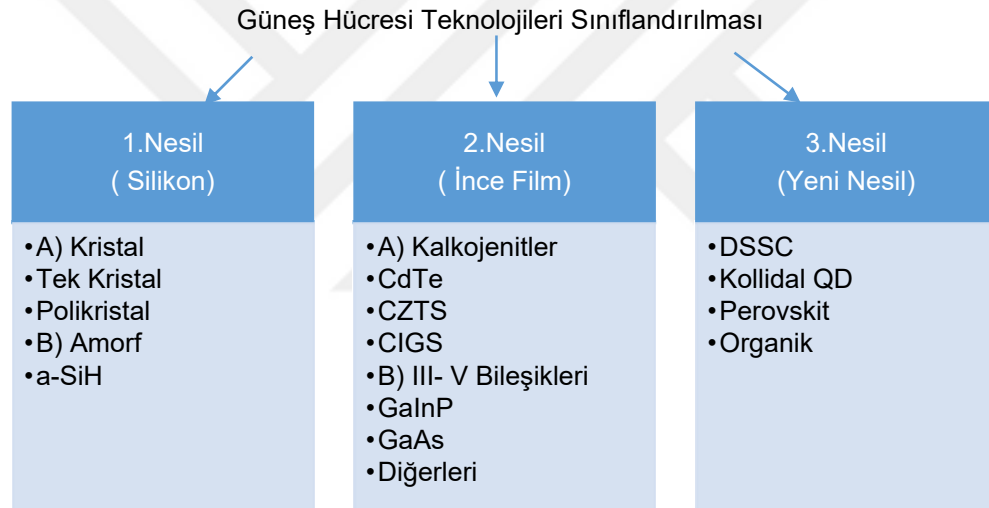
Son yıllarda, yapılan araştırmalar ve laboratuvar çalışmaları kapsamında fotovoltaik teknolojisi çok hızlı bir ilerleme gerçekleştirmiştir(Murugados ve ark, 2018).

Üretim teknolojisi ve kullanılan malzemeye bağlı olarak fotovoltaik cihazlar üç ana başlıkta incelenir(Tasleem ve ark, 2020).

1.nesil fotovoltaik cihazlar, mono ve polikristal silikon güneş hücreleri olmak üzere silikon güneş hücreleridir.

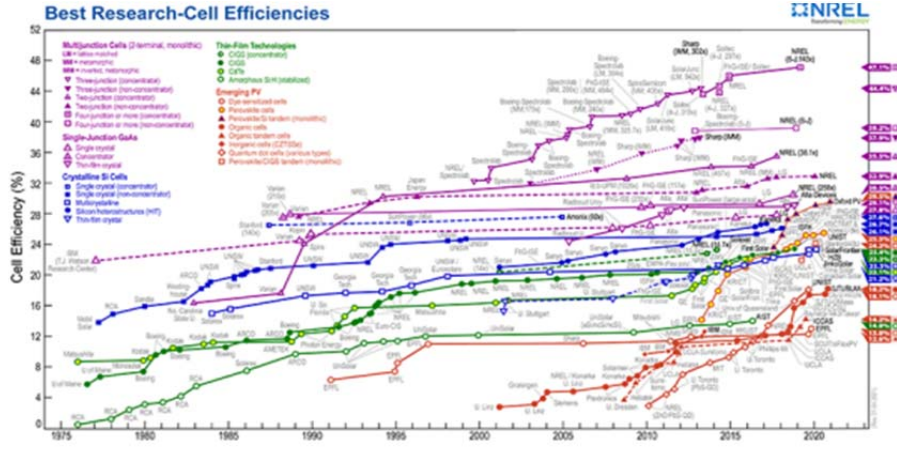
2.nesil fotovoltaik cihazlar, bakır indiyum galyum selenit (CIGS) güneş hücreleri, bakır çinko kalay sülfür (CZTS) güneş hücreleri, galyum arsenit (Ga As) güneş hücreleridir.

3.nesil güneş hücreleri arasında ise boyaya duyarlı güneş hücreleri (DSSC), kuantum nokta güneş hücreleri (QD) ve perovskit güneş hücreleri (PSC) bulunur. Şekil 1.9 farklı güneş hücre teknolojileri detaylı sınıflandırılması verilmiştir(Fresnoa ve ark, 2021).



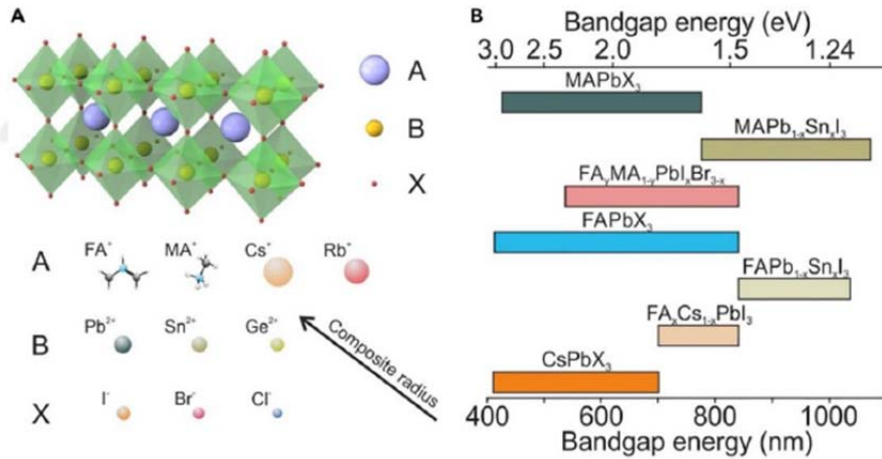
Şekil 1.9. Farklı güneş hücresi teknolojilerinin sınıflandırılması

Fotovoltaik nesiller arasında, perovskit güneş pilleri son yıllarda ilerleme kaydederek ilgi çekmiştir. 10 yıl gibi zaman diliminde perovskit güneş pillerinin verimleri 3.8 den % 15.5'e yükselmiştir (Saputraa ve ark, 2018) (Şekil 1.10).



Şekil 1.10. Güneş hücrelerinin verimlilik çizelgesi (NREL 2021)

Perovskit üretim aşamalarının kolay olması ve ucuz maliyetli olmaları önemli bir avantajdır. Perovskit malzemelerde yasak enerji aralığının kolay ayarlanabilir olması, yüksek dış kuantum verimliliği, soğurma spektrumunun geniş olması, difüzyon uzunluğu açısından uzun taşıyıcı olması ve düşük eksiton bağlanma enerjisi gibi avantajları sayesinde güneş hücresinin uygulamaları için yüksek potansiyele sahiptir(Acharya ve ark, 2021).



Şekil 1.11. (A) Perovskit yapısındaki farklı konumlarda bulunan elementler (B) Perovskit yapısının farklı element ve kombinasyonlarıyla oluşan yasak enerji aralığı değerleri (Acharya ve ark, 2021)

1.9. Titanyum Dioksit (TiO_2)

Beyaz renkte olup boya, kozmetik ve gıda sektöründe katkı maddesi olarak E171 koduyla yaygın olarak kullanılmaktadır. Oksijen atomu ve titanyum atomunun bir araya gelmesiyle oluşan titanyum dioksit yarı iletken bir metal oksit olarak tanımlanmaktadır. Titanyum dioksitin geniş bant aralığı (3.00 eV) ve yüksek kırılma indisine sahip olması sıkça optik uygulamalarda kullanılmasına neden olmaktadır. Ayrıca fotovoltaiik aygıtlarda, güneş panellerinde, kanser tedavilerinde, kendiliğinden temizlenen yüzeylerde, kimyasal kararlılığın oldukça yüksek olmasıyla biyomedikal uygulamalarda toksik olmama özelliği, maliyet açısından düşük maliyette sentezlenmesi ve üretim kolaylığı, yüksek katalitik aktiviteye sahip olması gibi avantajlarından dolayı en çok kullanılan yarı iletkenidir.

Nano boyutlu TiO_2 , atık sularda ve çevresel arıtmalarda zararlı kimyasalların parçalanmasında kullanılan ve en çok bilinen fotokatalistlerden birisidir(Chen ve ark, 2018).

TiO_2 'nin üç kristal fazı bulunmaktadır. Bunlar anataz, brokit ve rutil olarak adlandırılır. Bunlar arasında anataz form, pigment, katalizör, gaz sensörü ve çevresel arıtmada fotokatalizör görevinde kullanımı oldukça yaygındır. Titanyum dioksit (TiO_2) çok fazla araştırma yapılan yarı iletken oksitlerden birisidir. Nedeni çevre arıtması ve enerji üretimi alanlarında yapılan ciddi değişikliklerle gelişen teknolojiler üzerinde kullanılmasıdır.

Havada ve suda bulunan kirlilikleri uzaklaştırmada fotokatalizör olarak ayrıca suyun iyonlarına ayrıştırılarak hidrojen elde edilmesinde oldukça geniş uygulamaları bulunmaktadır. Maliyet olarak bakılınca, bu özelliklere sahip diğer maddelere göre düşük maliyette olması, zehirliliğinin az olması, yüksek ısıya ve kimyasallara dayanma özelliklerinden dolayı kullanımı yaygındır. Ancak fotokatalizör olarak görünür ışığa duyarlılığın düşük olması TiO_2 'nin dezavantajı olarak karşımıza çıkmaktadır.

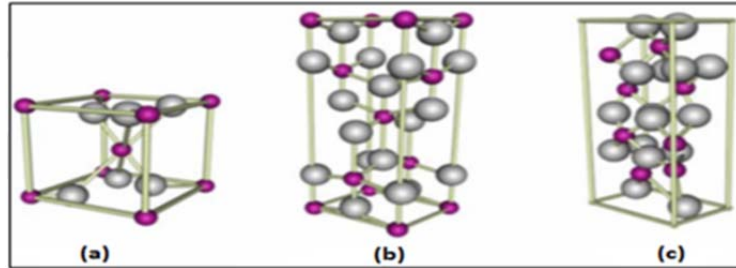
Çalışmaların birçoğunda TiO_2 'in görünür ışıktaki aktivitesini arttırarak, elektronik ve yüzey yapısını iyileştirmek için soy metal katma, metal iyon

yükleme, katyonik ve anyonik katkılama gibi işlemler yapılmaktadır. Birçok çalışmada görünür ışık altında TiO_2 'in fotokatalitik etkisi artırılmıştır. Temel olarak bu araştırmalarda fotokatalitik, elektrokatalitik ve biyomedikal uygulamalar için nano yapıda titanyum dioksitin hazırlanması, belirli nanometrik yapılar için yüzey kaplanmasında sol-jel yönteminin uygulanması esas alınan çalışmalar yapılmaktadır(Yang ve ark, 2014).

Titanyum dioksit (TiO_2) kristali doğada anataz, brokit, rutil ve amorf olmak üzere dört farklı fazda bulunmaktadır. Oldukça düşük sıcaklıklarda kararlı olması nedeniyle brokit fazı kullanım açısından pek pratik değildir. Brokit fazının fotokatalizör olarak kullanımı bulunmamaktadır(Sun ve ark, 2016).

Çizelge 1.3. TiO_2 'in farklı kristal yapılarıdaki fiziksel özellikleri

Kristal Yapı	Yoğunluk (kg/m^3)	Sistem	Nokta Grubu	Birim Hücre Parametreleri (nm)		
				A	B	C
Rutil	4240	Tetragonal	D4h	0.4584		0.2953
Anataz	3830	Tetragonal	D4h	0.3758		0.9514
Brokit	4170	Rombohedral	D2h	0.9166	0.5436	0.5135



Şekil 1.12. TiO_2 Bileşiğinin a) Rutil, b) Anataz ve c) Brokit faz yapıları (Acharya ve ark, 2021)

Renkli olan kürelerden gri olanı oksijen mor olanı titanyumu göstermektedir. Amorf TiO_2 'in ise hemen hemen hiç XRD piki vermediği gibi fotokatalizör olarak hiçbir etkinliği de bulunmamaktadır. Genellikle fotokatalizör olarak kullanılan rutil ve anataz fazlarıdır; ancak bu iki fazdan TiO_2 'in en fazla fotokatalitik etkiyi gösterdiği anataz fazı olarak bilinmektedir.

Titanyum dioksit gaz sensörü uygulamalarında kristal yapısı, elektronik yapısı ve sahip olduğu özelliklerinden dolayı fotokatalizör olarak kullanılmaktadır. Ayrıca TiO_2 'in kozmetik ürünlerinde, endüstride pigment ve korozyon inhibitörü olarak, güneş pillerinde antibakteriyel ve çevresel uygulamalarda da fotokatalizör olarak kullanılmaktadır(Chen ve ark, 2018).

1.10. Lantanitler (La,Ce,Sm)

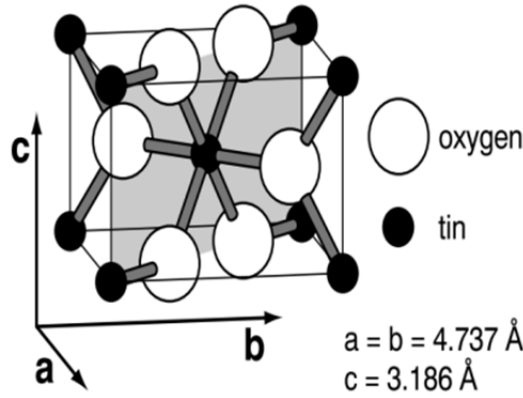
Periyodik tabloda geçiş metallerinin alt serisini oluşturan Lantanitler (Ln, 57) Seryum (Ce, 58), Samaryum (Sm, 62) elementlerini içerirler.

Genel olarak lantanitler 3+ oksidasyon sayılı olurlar ama bunların arasında istisnai olarak Ce 4+ oksidasyon sayısı da almaktadır. Bu toprak metaller, 3+ değerlikli hallerinde benzerlikleri oldukça fazla özellikleriyle de bilinmektedirler. Elementlerin birinden diğerine geçişinde elektron değişimi 5 ve 6'ncı yörüngede olmayıp, sadece 4'üncü yörüngeye (4f) elektron katılması ile meydana geldiğinden, kimyasal karakterizasyonları açısından oldukça benzerlik göstermektedirler.

Lantanitlerin kullanım alanlarının yarısından fazlası çelik (metalürji) sektörünü kapsamaktadır. Seramik ve cam üretimi, petrokimya, elektrik ve elektronik sektöründe de tercih edilmektedirler(Wang ve ark, 2013). Işığı absorbe etme yönüyle güneş gözlüğü camı üretiminde kullanılmaktadır. Süper iletken olarak hibrit otomobil üretiminde ve optoelektronik uygulamalarda ışık yayan malzeme özellikleri nedeniyle mevcuttur(Zhang ve ark, 2011). Yakın zamanda lantanitlerin en önemli kullanım alanı, yenilenebilir enerji kaynakları olarak rüzgar ve güneş enerji teknolojilerinde yapılan çalışmalarla artacağı öngörülmektedir.

1.11. Kalay Oksit (SnO_2)

4A ve 6A grup bileşiklerinden oluşan geniş bir yasak enerji bant boşluğuna sahip ($E_g=3.6\text{eV}$) olan n-tipi yarı iletkenlik gösteren metal oksittir. Tetragonal yapıya sahip SnO_2 'in kristal yapısı rutildir. Kafes yapısı 2 kalay ve 4 oksijen atomu içeren metal oksittir. Düzgün oktahedronların köşelerindeki 6 oksijen atomunun merkezinde kalay atomu yer alır. Her oksijen atomu eşkenar üçgenin köşelerindeki 3 kalay atomuyla çevrilidir. O-Sn mesafesi $3.7662 \text{ \AA}$ ve O-O mesafesi $4.6646 \text{ \AA}$ dur.



Şekil 1.13. Kalay oksit yapısı (Fresnoa ve ark, 2021)

Yalıtkan özelliğe sahip olan kalay oksitin kafes yapısının kusursuz olmaması ve oksijen boşluklarının bulunması ve bu oksijen boşluklarının zayıf bağlı elektronlarının, valans elektronları ile karşılaştırıldığında, iletim bandına ulaşma ihtimalleri daha yüksektir ve bu elektronlar iletkenlik özelliği kazandırmaktadır.

400-2000 nm dalga boyları arasında iyi geçirgenlik özelliği sergilemesi ayrıca geniş bant aralığına sahip olması n-tipi yarı iletken olması birçok kullanım avantajları sağlamaktadır(Lei ve ark, 2018).

Kalay Oksit (SnO_2) aşağıda sayılı olan nedenlerle kullanılmaktadır;

- Geniş bant aralığı ($E_g = 2,6 - 3.97 \text{ eV}$)
- Elektriksel öz direnci düşük (10^{-2} ile $10^{-3} \Omega \text{ cm}$)
- Optik geçirgenlik (görünür bölgede %65-80)
- Termal, mekanik ve kimyasal kararlılığı yüksek.



2. ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR

Huanhuan Chen ve ark (2018) yaptıkları çalışmalarda Er ve Mg katkılı TiO_2 nano çubuk dizileri ve perovskit güneş pili içindeki fotovoltaiik özelliklerin iyileştirilmesi çalışmalarında, Magnezyum (Mg) ve Erbium (Er) iyonları, bir hidrotermal yöntemle TiO_2 ince film (NRA) üzerine perovskit güneş pilleri (PGP'ler) ile uygulamışlardır. Sentezlenen Er/Mg katkılı TiO_2 NRA'ları, alan emisyonu taramalı elektron mikroskobu (FE-SEM), X-ışını toz difraksiyonu (XRD), UV-yansımali yansıma ve elektrokimyasal empedans spektroskopisi (EIS) ile araştırmışlardır. Er/Mg birlikte katkılı TiO_2 , bant enjeksiyonunu deęiştirmiş ve bu da yük enjeksiyon verimliliğini artırmıştır. Er / Mg birlikte katkılı PGP cihazının güç dönüştürme verimlilięi (PGP), %8.26'dan % 9.67'ye çıkarıldı; bu, katkısız cihazdan % 17 daha yüksektir. Bu çalışmada, güneş enerjisinin kullanımının ve PGP'lerin fotoelektrik dönüşüm performansının iyileştirilmesi için katkısız veya katkılı nanoyapılı malzemelere bir fikir sunacağını belirlemişlerdir.

Govindhasamy Murugadoss ve ark (2018) yaptıkları çalışmalarda formamidinyum kurşun iyodür perovskit aracılığıyla yapısı, şekli ve optik ayarlama çalışmalarında, organik ligandlar ve karışık katyonlar kullanılarak hidrotermal yöntem kullanılarak oda sıcaklığına dayanıklı $\alpha\text{-FAPbI}_3$ perovskitin hazırlanması için yeni bir yöntem geliştirmişlerdir. Ürünün yapısal, optik ve morfolojisi sıcaklığa göre deęişmiştir. Klorobenzen anti-çözücünün eşit hacmi, perovskit çözeltisi ile birlikte, perovskit kristalleriningözenek boyutunu hidrotermal yöntemle büyütmek için çalışmışlardır. Optimal sıcaklık (140°C) XRD ve UV-vis absorpsiyon sonucundan kararlı $\alpha\text{-FAPbI}_3$ perovskit yapısı elde edilmiştir. Bu çalışma, geniş çaplı ve kararlı morfolojiye sahip $\alpha\text{-FAPbI}_3$ perovskitin farklı alanlardaki potansiyel uygulamalarının önünü açtığını belirlemişlerdir.

Xiaolei Sun ve ark (2016) yaptıkları çalışmalarda Li-katkılı PbTiO_3 perovskit kübik parçacıkların hidrotermal sentezi ve fotokatalitik aktivitesi çalışmaları için katkı maddeleri olarak lityum nitrat (LiNO_3) kullanılarak,

hidrotermal yöntemle başarılı bir şekilde sentezlenmiştir. Li-katkılaması sayesinde, sadece partiküller küçültmekle kalmamış, aynı zamanda bazı Ti^{3+} iyonları ve $PbTiO_3$ perovskitin kafesinde meydana gelmiştir. Sonuç olarak, Li katkılı $PbTiO_3$ örnekleri MB'nin bozunmasında mükemmel görünebilir ışık fotokatalitik performans sergilediğini tespit etmişlerdir.

Hongwei Lei ve ark (2018) yaptıkları çalışmalarda Sb_2S_3 ve güneş pili uygulaması için hidrotermal yöntem şartlarını belirleyerek, Sb_2S_3 film yapısını sentezlemişlerdir. Elde edilen Sb_2S_3 filmlerinin özelliklerini araştırdılar. Yerleşik Sb_2S_3 filmini absorbe edici olarak kullanmışlar ve Sb_2S_3 güneş pillerin % 1.32'lik bir güç dönüşüm verimi sağlamışlardır.

G. Biasotto ve ark (2011) yaptıkları çalışmalarda perovskit bizmut ferrit nanopartiküllerin hidrotermal sentez yöntemiyle, kristalin bizmut ferrit ($BiFeO_3$) nanopartiküllerini (BFO) 180 °C sıcaklıkta 5 ila 1 saat arasında değişen sürelerde sentezlemişlerdir. BFO nanopartikülleri X-ışını analizleri, FT-IR, Raman spektroskopisi, TG-DTA, FE-SEM ile belirlemişlerdir. Geleneksel katı-hal reaksiyon prosesi ile karşılaştırıldığında, daha iyi homojenliğe sahip olan mikron altı BFO kristallerin 180 °C kadar düşük bir sıcaklıkta üretilebileceği rapor edilmiştir.

Chao Chen ve ark (2016) yaptıkları çalışmalarda perovskit bizmut ferrit kristallerin hidrotermal sentezi için, tek fazlı $BiFeO_3$, düşük sıcaklıklı bir hidrotermal sentezle KOH ortamında, perovskit BFO 200 °C sıcaklıkta elde edilmiş, Taramalı elektron mikroskobu incelemesi, ferroelektrik Curie sıcaklığı, diferansiyel termal analiz ile 825 °C olarak belirlenmiştir.

Yang ve ark (2014) yaptıkları çalışmalarda tek-kristal $BaTiO_3$ (BT) içi boş nanopartiküllerin hazırlanması için bir sol-gel ve hidrotermal yöntem geliştirmişlerdir. Ürünler XRD, Raman spektroskopisi, SEM, TEM ve Nitrojen adsorpsiyonu ile karakterize edilmiştir. Sonuçlar içi boş BT nanopartiküllerin yaklaşık 86,7 nm çapını farklılaştırdığını göstermiştir. Zamana bağlı sonuçlara göre deney, anagregasyon yeniden hizalama-füzyon prosesi olan bir yolu içeren olası bir

oluşum mekanizması önerilmiştir. Sentezlenmiş olan perovskitler diğer perovskit oksitlerin içi boş mimarilerinin tasarlanması ve kontrollü olarak hazırlanması için yeni bilgiler sağlayabileceğini göstermiştir.

Ganghua Zhang ve ark (2011) yaptıkları çalışmalarda süperiletkenler $Ba_{x-1}KxBiO_3$ ve vücut merkezli çift perovskitler $Ba_{x-1}KxBi - yNa_yO_3$, hidrotermal yolla sentezlenmiştir. Uygun oran, reaksiyon sıcaklığı ve süresi, bileşiklerin kristal büyümesini etkileyen kritik faktörlerdir. Kristallerin saflığı ve homojenliği ICP, SEM, EDX ve TEM çalışmaları ile tespit etmişler. Manyetik ölçümler, $Ba_{x-1}KxBiO_3$ 'ün süperiletken geçiş sıcaklıklarının doplamaseviyesini arttırarak 22 K'den ($x = 0.35$ için) 8 K'ya ($x = 0.55$ için) düştüğünü göstermiştir.

Shan Wang ve ark (2013) yaptıkları çalışmalarda Sr katkılı $LaCrO_3$ ($La_{0.9}Sr_{0.1}CrO_3$ ve $La_{0.8}Sr_{0.2}CrO_3$) yapısını hidrotermal yöntemle $260^{\circ}C$ 'de sentezlemişlerdir. Kristalin yapısı, toz X-ışını kırınımı, taramalı elektron mikroskobu, indüktif eşleşmiş plazma ve EDS ile karakterize edilmiştir. Kristaller, perovskit benzeri yapıyı (spacegroup Pnma) benimser ve 1–2 μm dar bir ışık büyüklüğü ile dağılıma sahiptir. Ürünlerin oluşumunda, KOH ve reaksiyon sıcaklığı önemli rol oynamaktadır.

Sang Yun Lee ve ark (2018) yaptıkları çalışmalarda Ni-katkılı lantanum stronsiyum manganit (LSMN) nanopowderleri, $La_{0.7}Sr_{0.3}Mn_xNi_{1-x}O_3$ ($0.05 < x < 0.3$), 8 saat boyunca $150^{\circ}C$ 'de, Ni katkılı konsantrasyonunun bir fonksiyonu olarak hidrotermal reaksiyon ile sentezlenmiştir. SEM analizleri, kalsinasyon işleminin nano tozların morfolojisini etkilediğini öne sürmüşlerdir. $1300^{\circ}C$ 'deki kalsine nano yapılar, 44-77 nm'lik aglomerasyonlu küresel yapıya sahiptir. Bu arada, XRD çalışmaları, nanotozların $x = 0.05-0.2$ aralığında tek kristalli faza sahip olduğunu ortaya çıkarmıştır. Elektriksel iletkenliği kademeli olarak 90.05 s/cm 'ye çıkmıştır. Bu sonuçlar $La_{0.7}Sr_{0.3}Mn_{0.8}Ni_{0.2}O_3$ 'ün LSMN' nin bileşimi olarak iyi bir performans sergilediğini göstermiştir.

R. Wendelbo ve ark (2004) yaptıkları çalışmalarda perovskitlerin hidrotermal sentezi ve karakterizasyonunu yapmışlardır. İçinde (Pb, Ba, Sr) ZrO_3

bileşim alanında 48 örnek içeren ilk seri, pH değişimi ile sentez koşulları optimize edilmiştir. 96 örneklemin ikinci bir dizisinde (Pb, Ba) (Zr, Ti) O₃ bileşim alanı kristallik ve partikül büyüklüğünü kontrol etme amacı ile araştırılmıştır. Toz X-ışını kırınımı (XRD) kullanılarak, çoğu bileşimin 3–23 s içerisinde 200 °C’ de 2.0-3.3 M KOH içinde kolayca kristalleştiği belirlenmiştir. Taramalı elektron mikroskobu (SEM) kullanılarak, saf zirkonatlar için saf titanatlar için 0.2-1 m’ye parçacık büyüklüğünün 3 ila 8 m arasında olduğu belirlenmiştir. Kimyasal analiz için micro dalga boyu dispersif spektroskopisi (WDS) kullanılmıştır. Parçacık büyüklüğünü belirlenmiş olup, bir poliakrilamid katkı maddesi ve pH’ın çok az etkiye sahip olduğu bulunmuştur. Kombinasyonel hidrotermal sentez ve karakterizasyon tekniklerinin perovskitlerin sentezi ve temel karakterizasyonu için tamamen uygulanabilir olduğunu göstermişlerdir.

Liyan Wu ve ark (2005) yaptıkları çalışmalarda çift perovskit Ba₂YSbO₆ hazırlamak için hidrotermal yöntemle sentezlenmiş olup, ürün XRD, TEM, XPS, ICP ve IR teknikleri temelinde karakterize edildi. Ürünün metal bileşimi, çift perovskit formüle ve 50–100 nm arasında bir tane büyüklüğüne yakındır. XRD modelleri, genel yapı analiz sistemi (GSAS) arıtma programını kullanarak rietveld yöntemi ile yapılmıştır.

3.MATERYAL VE METOD**3.1. Kullanılan Kimyasallar**

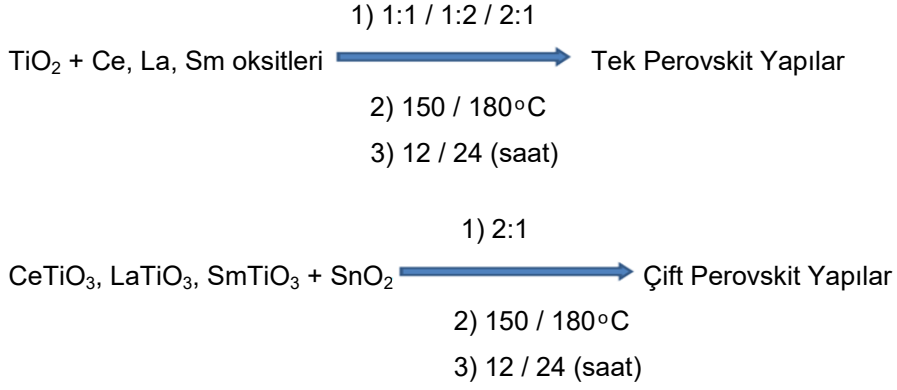
- TiO_2 (titanyum dioksit)
- Lantanitler; seryum Ce (III), lantan La (III), samaryum Sm (III) oksitleri.
- SnO_2 (Kalay oksit)
- NaOH

3.2. Kullanılan Cihazlar

- X ışını kırınım yöntemi (XRD)
- Atomic force microscope (AFM)
- Taramalı elektron mikroskobu (SEM, Tokyo)
- FT-IR Spektroskopisi
- pH metre; pH 211 Hanna Instruments
- Çelik Reaktör; Parr Acid Digestion Bomb; 23 mL Hacimli Teflon Hatlı
- Etüv; Elektromag M420 P
- Karıştırıcı; Velp, RPM

3.3. Metod**3.3.1. Genel Sentez**

Bu çalışmada 150-180° C sıcaklıkları arasında, 12 ve 24 saat sürelerinde, farklı molar oranlarda (M:L ; (1:1) , (1:2), (2:1) metal oksit bileşikleri hidrotermal koşullarda doplama işlemi uygulanarak elde edilmiştir (Şekil 3.1.).

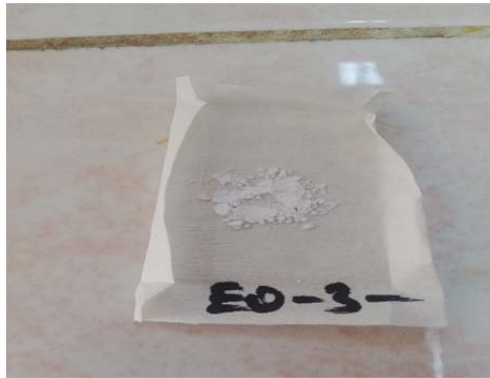


Şekil 3.1. Hedeflenen nanoyapılar için Hidrotermal koşullarda sentez şeması

Hazırlanan numuneler 15-20 dakika karıştırılır. Çözeltinin pH'ı 3,2-5,3 olarak ayarlanır. 180 °C sıcaklıkta ve 24 saat sürede etüvde bekletilen reaktörler bekletilerek soğumaya bırakılır. Vakumlu süzme sonrası katı toz madde 800°C de 6 saat kalsine edilir. AFM, SEM, FT-IR ve XRD cihazları kullanılarak sentezlenen perovskitlerin karakterizasyonu yapılmıştır.

3.3.2. LaTiO₃ Sentezi

TiO₂ (1 mmol 0,079 g), La₂O₃ (1 mmol 0,325 g) ve H₂O (5 mL) karışımı belirlenen molar oranları ile hazırlanarak reaktörlerine eklendi. pH 4,2 olarak belirlendi.



Şekil 3.2. LaTiO₃ sentezi

3.3.3. CeTiO₃ Sentezi

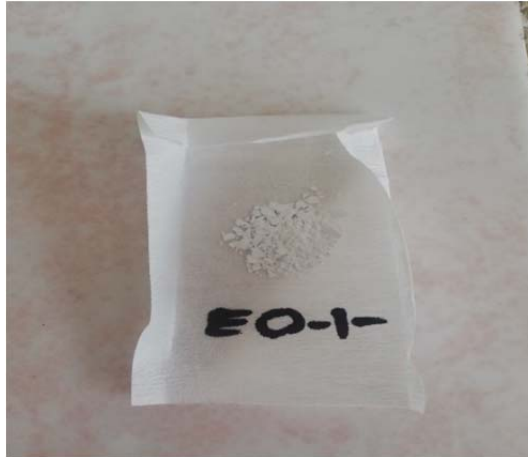
TiO₂ (1 mmol 0,079 g), CeO₂ (1 mmol 0,172 g) ve H₂O (5 mL) karışımı belirlenen molar oranlarında hazırlanarak reaktörlere eklendi. pH 3,7 olarak belirlendi.



Şekil 3.3. CeTiO₃ sentezi

3.3.4. SmTiO₃ Sentezi

TiO₂ (1 mmol 0,079 g), Sm₂O₃ (1 mmol 0,348 g) ve H₂O (5 mL) karışımı belirlenen molar oranlarında hazırlanarak reaktörlere alındı. pH 3,2 olarak belirlendi.



Şekil 3.4. SmTiO₃ sentezi

3.3.5. $\text{La}_2\text{SnTiO}_6$ Sentezi

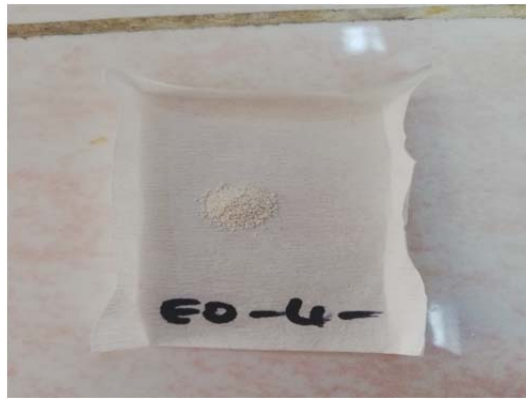
LaTiO_3 (0,2 mmol 0,0468 g) , SnO_2 (0,1 mmol 0,0264 g) ve H_2O (5mL) karışımı belirlenen molar oranlarında hazırlanarak reaktörlere eklendi. pH 5,1 olarak belirlendi.



Şekil 3.5. $\text{La}_2\text{SnTiO}_6$ sentezi

3.3.6. $\text{Ce}_2\text{SnTiO}_6$ Sentezi

CeTiO_3 (0,2 mmol 0,0470 g), SnO_2 (0,1 mmol 0,0264 g) ve H_2O (5mL) karışımı teflonda belirlenen molar oranlarında hazırlanarak reaktörlere eklendi. pH 4,5 olarak belirlendi.



Şekil 3.6. $\text{Ce}_2\text{SnTiO}_6$ sentezi

3.3.7. $\text{Sm}_2\text{SnTiO}_6$ Sentezi

SmTiO_3 (0,2 mmol 0,0492 g), SnO_2 (0,1mmol 0,0264 g) ve H_2O (5mL) karışımı belirlenen molar oranlarında hazırlanarak reaktörlere eklendi. pH 4,7 olarak belirlendi.



Şekil 3.7. $\text{Sm}_2\text{SnTiO}_6$ sentezi

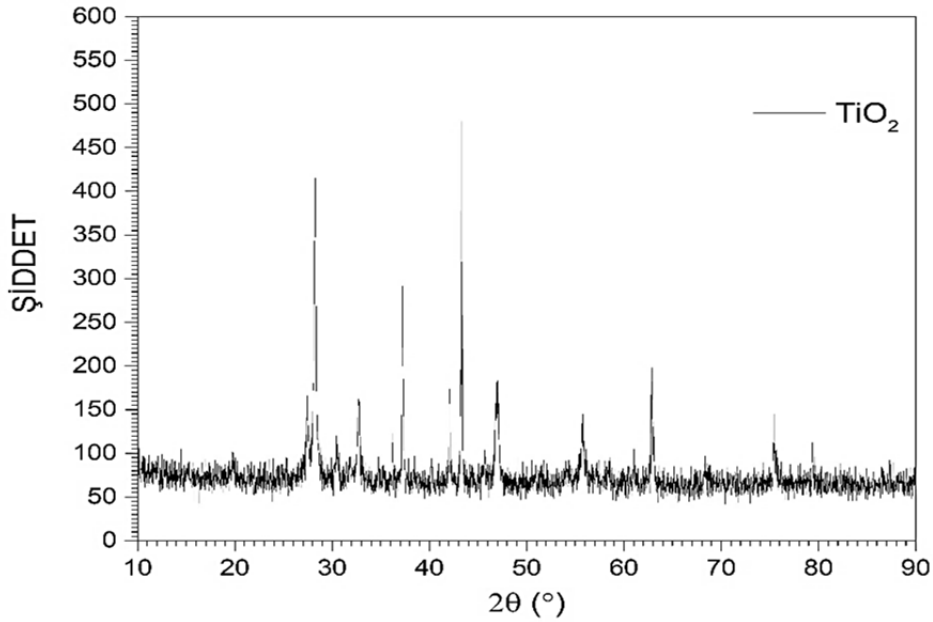


4.BULGULAR VE TARTIŞMALAR

Yaptığımız bu çalışmada hidrotermal yöntem kullanılarak farklı sıcaklık, süre ve pH değerlerinde, molar oranları (M:L (1:1), (1:2), (2:1)) değiştirilerek elde edilen optimum şartlarda sentezlenen perovskit yapılarının karakterizasyonları, FT-IR Spektroskopisi, X- Işını Kırınım Desenleri (XRD), Morfolojik Analizleri; Taramalı Elektron Mikroskobu (SEM), Atomik Kuvvet Mikroskobu (AFM) ile karakterize edilmiştir.

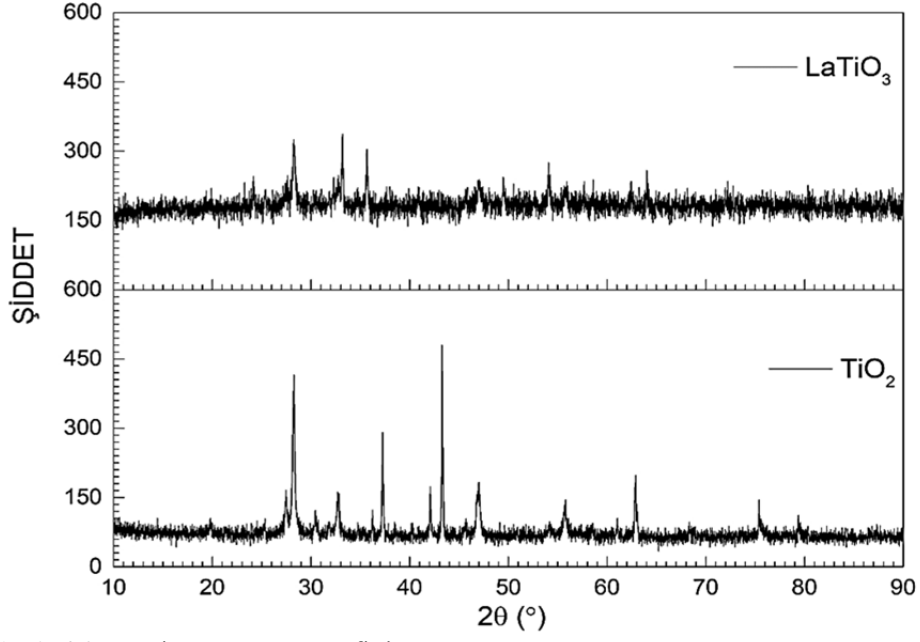
4.1. X – Işını Kırınım (XRD) Sonuçları

Şekil 4.1. de ki XRD grafiğine göre katkısız TiO_2 'in en şiddetli piklerin anataz yapıdaki TiO_2 'ye ait $2\theta = 25,300^\circ$; $37,801^\circ$, $48,282^\circ$, $54,160^\circ$; $55,028^\circ$; $62,700^\circ$; $75,789^\circ$; $78,956^\circ$ açılarını gösteren pikler olduğu görülmektedir. (PDF 98-064-7548 , EK 1.7).



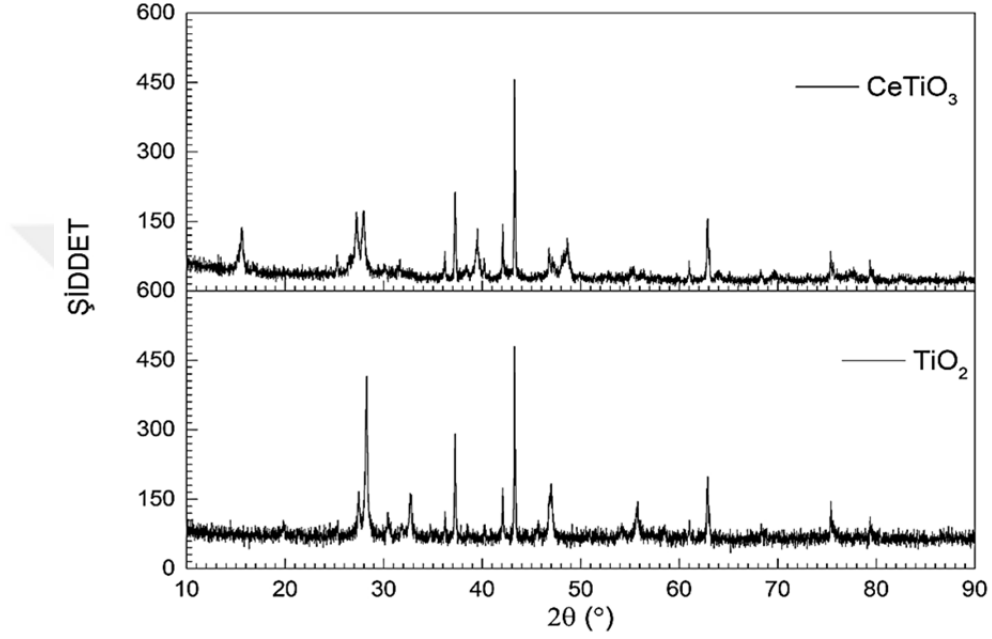
Şekil 4.1. TiO_2 'in XRD grafiği

Şekil 4.2. de ki XRD grafiğine göre TiO_2 'e katkılanan La_2O_3 ile oluşan LaTiO_3 yapısının tamamen değiştiği pik şiddetlerinin azaldığı görülmüştür(EK 1.10).



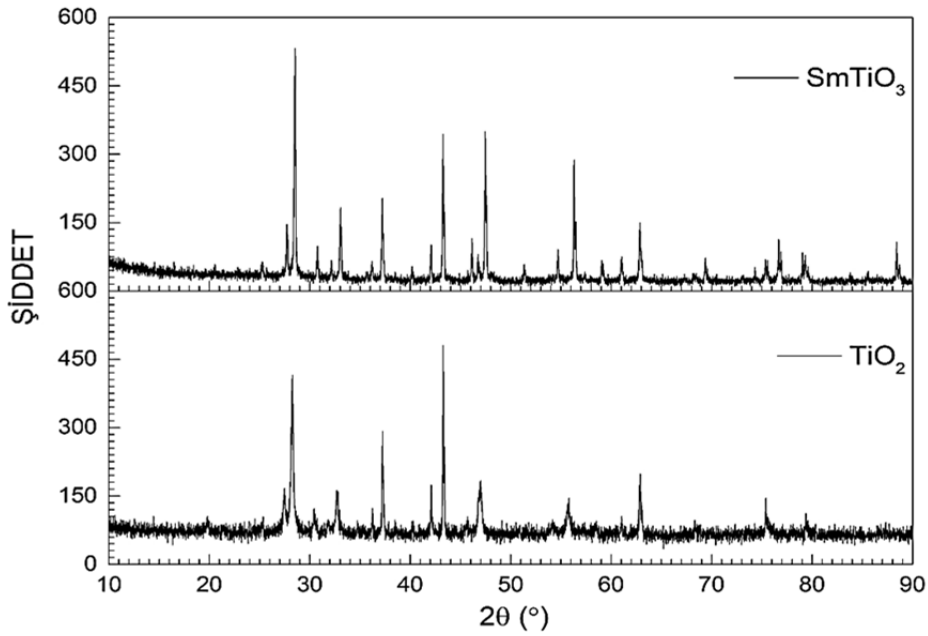
Şekil 4.2. LaTiO_3 'ün XRD grafiği.

Şekil 4.3.de ki XRD grafiğine göre TiO_2 'e katkılanan CeO_2 ile elde edilen CeTiO_3 yapısında yeni pikler oluştuğu ve TiO_2 'e ait 27° deki pik şiddetinin azaldığı ve kristalit boyutlarının küçüldüğü görüldü (PDF 98-016-4225, EK 1.9).



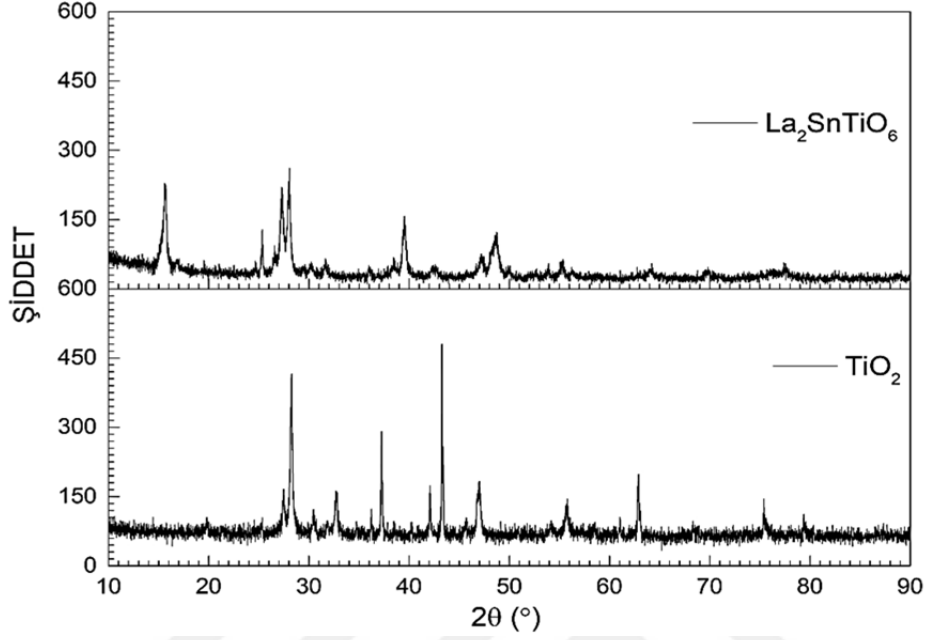
Şekil 4.3. CeTiO_3 'ün XRD grafiği.

Şekil 4.4 deki XRD grafiğine göre TiO_2 ye katkılanan Sm_2O_3 ile elde edilen SmTiO_3 yapısının oluştuğu ve tetragonal yapının bozulmadığı görülmüştür. $46,9^\circ$ de olan TiO_2 deki tek pik $46,73^\circ$ ve $47,45^\circ$ olarak SmTiO_3 'de oluştuğu ve kristalit boyutlarının 56,4 nm den 433,5 nm ve 230 nm ye arttığı görülmüştür. Ek olarak, TiO_2 de 61° de gözlenen tek pikin 61° ve 62° de iki pik olduğu ve kristalit boyutlarının 85,2 nm iken 228 nm ye arttığı görüldü. Son olarak 88° de oluşan pikin 226,8 nm kristalit boyutunda olduğu görüldü (PDF 98-064-7450, EK1.8).



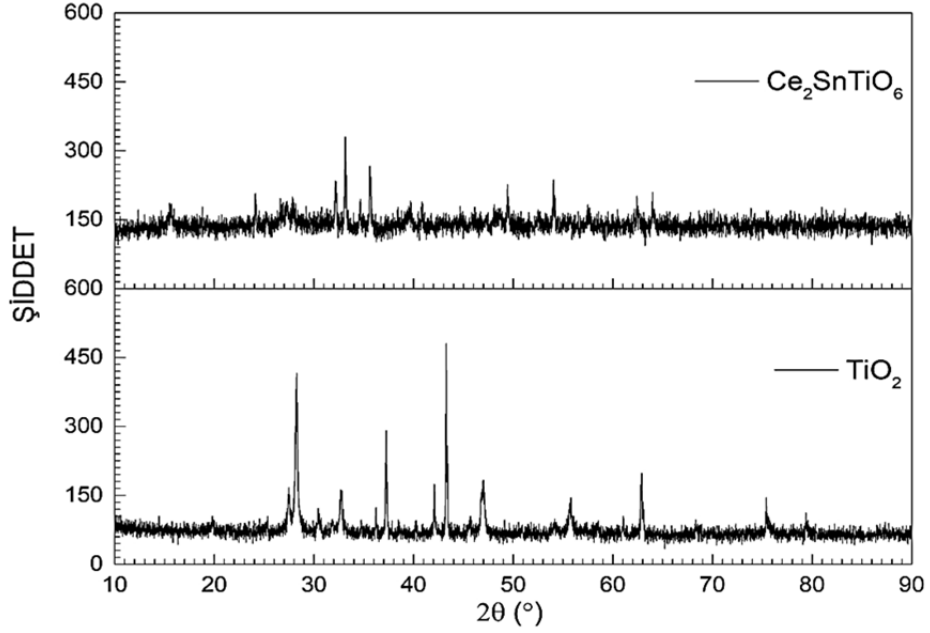
Şekil 4.4. SmTiO_3 'in XRD grafiği.

Şekil 4.5. deki XRD grafiğine göre TiO_2 'e katkılanan La_2O_3 ile elde edilen LaTiO_3 yapısına SnO_2 katkılanması ile $\text{La}_2\text{SnTiO}_6$ yapısı elde edilmiştir. TiO_2 'e göre 27° de olan pik şiddetinin düştüğü ve 15° de belirgin yeni pik oluştuğu gözlenmiştir. TiO_2 ye göre $46,9^\circ$ de olan pikin 56,4 nm olan kristalit boyutu 7,7 nm olmuştur (PDF 98-042-8135, EK1.13).



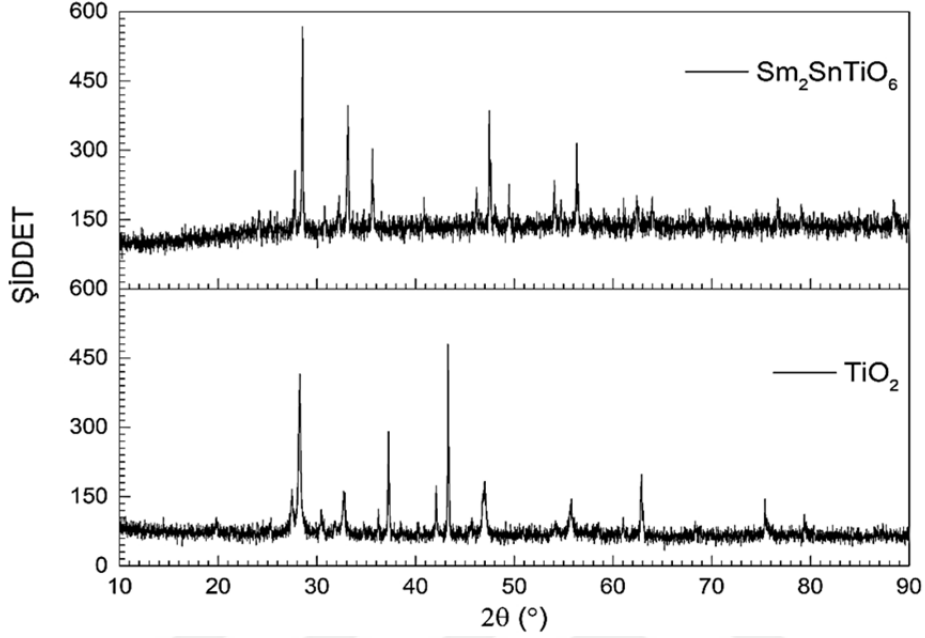
Şekil 4.5. $\text{TiO}_2/\text{La}_2\text{SnTiO}_6$ XRD grafikleri.

Şekil 4.6 da ki XRD grafiğine göre TiO_2 ye katkılanan CeO_2 ile elde edilen CeTiO_3 yapısına SnO_2 katkılanması ile $\text{Ce}_2\text{SnTiO}_6$ yapısı elde edilmiştir. TiO_2 'in belirgin piklerinin şiddetlerinin azaldığı görülmektedir. Ek olarak, 15,5°de yeni pik oluştuğu, 27,9° de ki pik şiddetinin azaldığı ve 46° de ki pikin kaybolduğu ve kristalit boyutlarının da azaldığı görülmüştür (PDF 98-008-4729, EK 1.12).



Şekil 4.6. $\text{TiO}_2/\text{Ce}_2\text{SnTiO}_6$ XRD grafikleri.

Şekil 4.7. deki XRD grafiğine göre TiO_2 'e katkılanan Sm_2O_3 ile elde edilen SmTiO_3 yapısına SnO_2 katkılanması ile $\text{Sm}_2\text{SnTiO}_6$ yapısı elde edilmiştir. Bununla birlikte TiO_2 de gözlenen 27° deki pik şiddetinde artış ve kristalit boyutunun 31,7 nm den 44,3 nm ye kaydığı görülmüştür (PDF 98-042-4674, EK1.11).



Şekil 4.7. $\text{TiO}_2/\text{Sm}_2\text{SnTiO}_6$ XRD grafikleri.

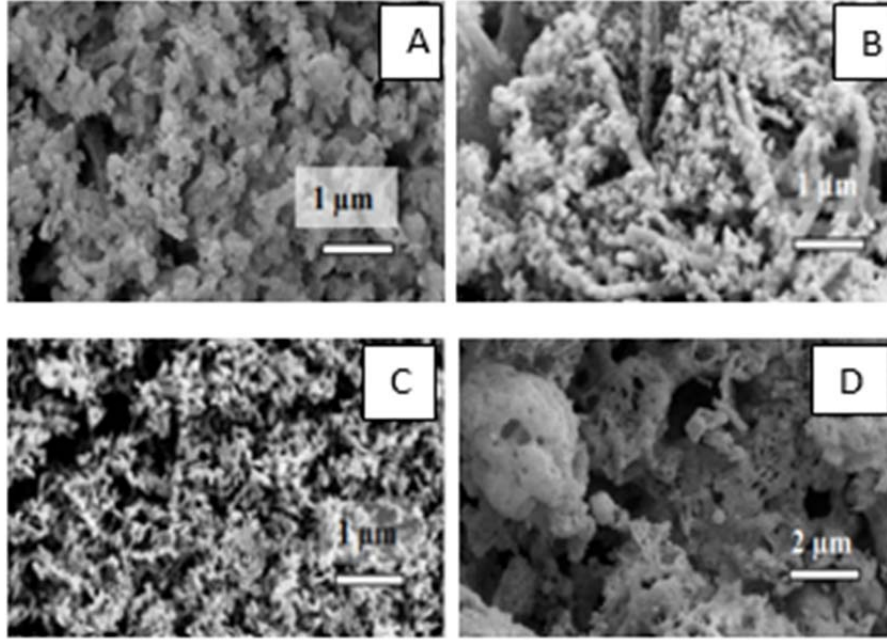
Tek perovskit yapılarının XRD grafiği görüntüsü ve Sn doplanması sonrası XRD piklerinin dereceleri kıyaslandığında titanyum dioksit (TiO_2) göre farklı dereceler tespit edildi. Piklerdeki genişleme kristal ve tane boyutlarında azalmaya neden oldu. Sentezlenen TiO_2 katkılı yeni nanoyapılarda anataz formun arttığı tespit edilmiştir. Bu sonuç fotokatalitik aktivitenin arttığının göstergesidir.

4.2. Morfolojik Analizler (SEM)

Taramalı elektron mikroskobu (SEM) cihazları yüksek çözünürlüğe sahip oldukları için malzemelerin morfolojilerini belirlemek amacı ile kullanılır.

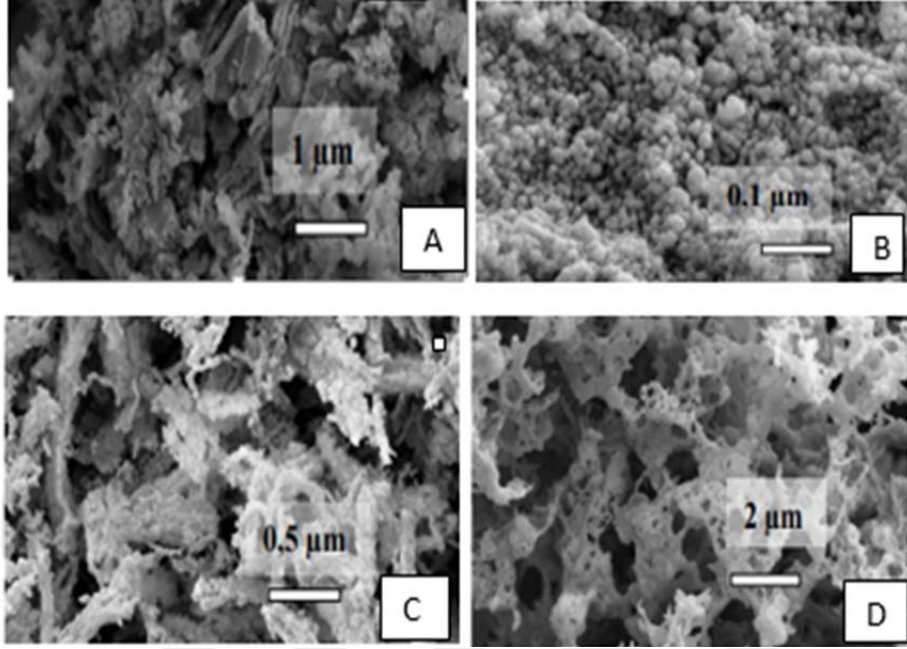
Sentezlenen tek perovskit nano yapıların yüzey görüntüleri (morfoloji) şekil 4.9 da incelendiğinde, A'da yer yer kümeleşmiş taneciklerin varlığı gözlenmiştir. B'de küçük boyutta taneciklerin bir araya gelerek agrega oluşturduğu ve belirli alanlarda kümelenmelerin olduğu, C'de tanecikler arası boşluklardan

dolayı gözenekli bir yapının oluştuğu görülmektedir. D’de süngerimsi görüntüler ve boşluklar tespit edilmiştir.



Şekil 4.9. a) TiO_2 , b) LaTiO_3 , c) CeTiO_3 , d) SmTiO_3 ait SEM görüntüleri

Sentezlenen tek perovskit yapılarının SnO_2 ile doplanması sonrasındaki SEM görüntüleri Şekil 4.10 da verilmiştir. A’da yer yer kümeleşmiş taneciklerin varlığı gözlenmiştir. B’de yapıdaki gözenekleri meydana getiren küresel taneciklerin olduğu, C’de çubuk yapıların oluştuğu görülmüştür. Taneciklerin homojen partikül boyutlarına sahip olmadıkları ve partiküllerin yığılmalar şeklinde gruplandığı görülmüştür. D’de yapının irili ufaklı taneciklerden oluştuğu ve bu taneciklerin büyük gözenek hacimlerinde boşluklar içerdiği görülmektedir. Bu boşluklar 180°C de etüvde hazırlanma aşamasında oluştukları kabul edilmektedir (Özer,2008).

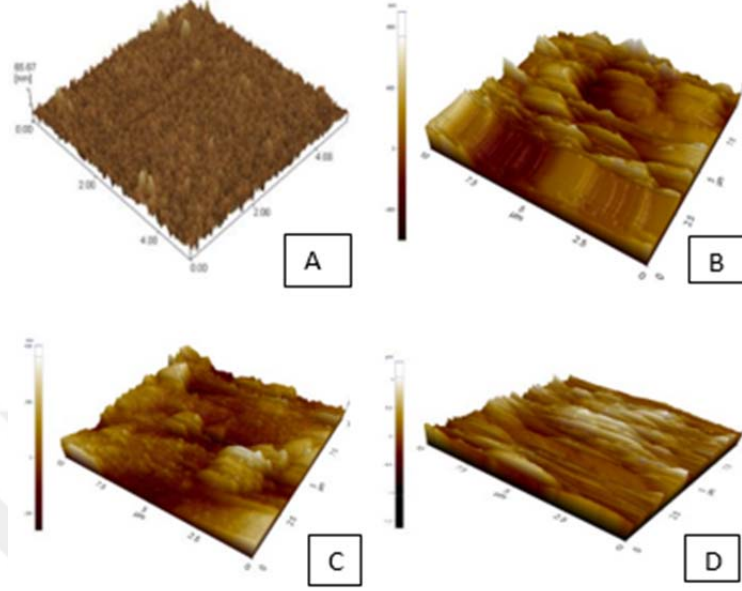


Şekil 4.10. a) TiO_2 , b) $\text{La}_2\text{SnTiO}_6$, c) $\text{Ce}_2\text{SnTiO}_6$, d) $\text{Sm}_2\text{SnTiO}_6$ ait SEM görüntüleri

4.3. Atomik Kuvvet Mikroskobu ile Yüzey Taraması (AFM)

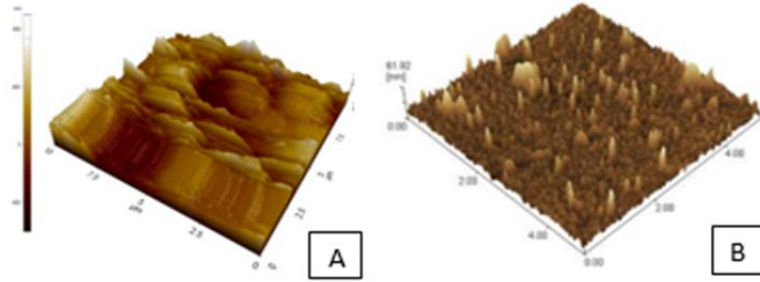
Atomik kuvvet mikroskobu (AFM) ile yapılan ölçümlerle, hidrotermal sentez yöntemiyle elde edilen tek ve çift perovskit yapılarının pürüzlülükleri belirlenmiştir. Yüzey pürüzlülüğü değeri root-mean-square (RMS) ile ifade edilmektedir ve nm cinsinden sonuç verilmektedir.

Şekil 4.11 de gözlenen AFM görüntüsünde TiO_2 'in yüzey pürüzlülüğü 4,8 iken tek perovskit katkılması sonucu bu değer LaTiO_3 , CeTiO_3 , SmTiO_3 için sırasıyla; 5,2; 5,4; 5,6 nm'ye kaymıştır.



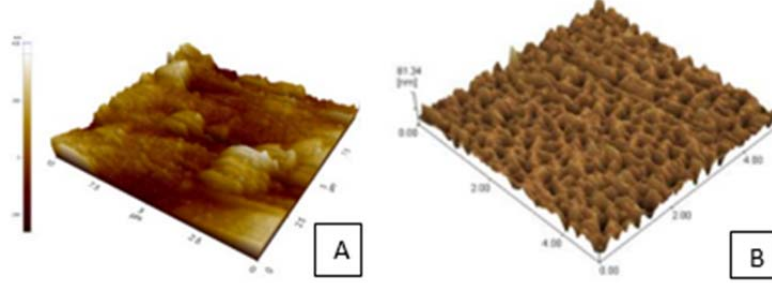
Şekil 4.11. a) TiO_2 , b) LaTiO_3 , c) CeTiO_3 , d) SmTiO_3 ait AFM görüntüleri.

Şekil 4.12 de gözlenen AFM görüntüsünde LaTiO_3 'in SnO_2 ile katkılanması ile yüzey pürüzlülüğü 5,2 den 6,3 nm'ye kaymış ve yüzeyde doplamanın başarılı olduğunu gösteren belirli aralıklarla çubuksu yükseltiiler gözlenmiştir.



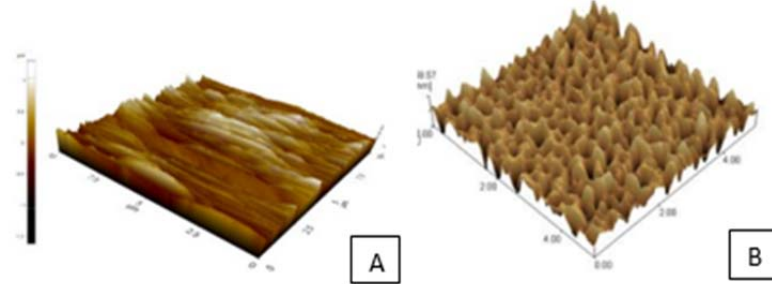
Şekil 4.12. a) LaTiO_3 b) $\text{La}_2\text{SnTiO}_6$ ait AFM görüntüleri

Şekil 4.13 de gözlenen AFM görüntüsünde CeTiO_3 'in SnO_2 ile katkılanması ile yüzey pürüzlülüğü 5,4 den 9,6 nm ye kaymış ve daha yoğun bir tabaka oluşmuştur.



Şekil 4.13. a) CeTiO₃ b) Ce₂SnTiO₆ AFM görüntüleri

Şekil 4.14 de gözlenen AFM görüntüsünde SmTiO₃'ün SnO₂ ile katkılanması ile yüzey pürüzlülüğü 5,6 dan 10,5 nm'ye kaymıştır. Yine yoğun gözenekli yapı dikkat çekici olarak Sn doplamanın gerçekleştiğini göstermektedir.



Şekil 4.14. a) SmTiO₃ b) Sm₂SnTiO₆ ait AFM görüntüleri

TiO₂ ile doplama öncesi ve sonrası, tek ve çift perovskit nanoyapıların AFM sonuçları değerlendirildiğinde yüzey pürüzlülüğünün farklılıkları ortaya konmuştur. TiO₂ in yüzey pürüzlülüğünün perovskit yapılara kıyasla daha düşük olduğu görülmektedir. Çalışmalar titanyum dioksitin etkinliğini arttırmak için ümit verici olarak değerlendirilmiştir.

4.4. FT-IR Spektroskopisi

FT-IR spektrumları incelendiğinde titanyum dioksit için gözlenen 2976cm^{-1} de görülen $\nu(\text{Ti-O})$ piklerinin tek perovskit yapılarda LaTiO_3 de 2315 cm^{-1} e, CeTiO_3 de 2418 cm^{-1} e kaydığı görülmüştür(EK1.1 -1.3). Perovskit yapıların SnO_2 ile doplama sonrası bu değerlerin $\text{La}_2\text{SnTiO}_6$ da 1015 cm^{-1} e, $\text{Ce}_2\text{SnTiO}_6$ da 1094 cm^{-1} e, $\text{Sm}_2\text{SnTiO}_6$ da 1071 cm^{-1} e kaydığı tespit edilmiştir. Bu durum diğer analiz sonuçlarını destekler niteliktedir(EK 1.4. -1.7).

5. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Güneş pilleri, yenilenebilir enerji kaynakları için öne çıkan alternatifler arasındadır. Üretim maliyetlerini azaltmak ve yeni uygulamalara uyumlu teknolojiler geliştirmek için bu konuda farklı malzemeler araştırılmaktadır. Perovskit güneş hücreleri literatürde pek çok farklı yöntemle üretilmektedir.

Bu çalışmanın amacı güneş pili uygulamalarında kullanım potansiyeline sahip olabilecek, mevcut verimi artırabilecek perovskit yapıların sentezlenmesidir.

Bu tez çalışmasında TiO_2 ile Lantanitlerden Seryum Ce(III), Lantan La(III), Samaryum Sm (III) oksitlerinin farklı sıcaklık ve süre kombinasyonlarında tek perovskit olarak adlandırılan ABO_3 genel formüllü CeTiO_3 , LaTiO_3 ve SmTiO_3 yapıları hidrotermal sentez yöntemi kullanılarak sentezlenmiştir. Ayrıca son zamanlarda, kalay oksit (SnO_2) yüksek elektron hareketliliği, üstün fotokatalitik kararlılığı nedeniyle perovskit güneş pilleri için umut verici olduğu rapor edilmiştir (Fresnoa ve ark, 2021). Tek perovskit yapılar SnO_2 ile farklı sıcaklık ve süre kombinasyonlarında hidrotermal sentez yöntemiyle $\text{Sm}_2\text{SnTiO}_6$, $\text{Ce}_2\text{SnTiO}_6$, $\text{La}_2\text{SnTiO}_6$ çift perovskitlere dönüştürülmüştür. (Liyan ve ark, 2006). Sentezlenen bu yapılar XRD, SEM, FT-IR ve AFM cihazları ile karakterize edilmiştir.

XRD desenleri karşılaştırıldığında gözlenen farklılıkların kırınım piklerinin geniş olmasından dolayı kristal boyutlarının küçüldüğü görülmüştür. Bu durum sentezlenen anataz formdaki TiO_2 'in fotokatalitik aktivitesini artırmaktadır.

AFM sonuçlarında TiO_2 'e karşılık doplamadan sonra yüzey pürüzlülüğünde farklılıkları ve dalgaboyu değişiklikleri tespit edilmiştir.

Sentezlenen yapıların yüzey morfolojilerindeki değişim SEM analizleri ile belirlenmiş, TiO_2 'in kararlı olmayan yapısından kaynaklı yer yer kümelenmeler, tanecikler arası boşluklar ve gözenekler oluşmuştur. Tek perovskit yapıların SnO_2 ile katkılanma sonrası büyük gözenek hacimlerinde boşluklar içerdiği tespit edilmiştir.

Bu tez çalışması sentezlenen tek ve çift perovskit yapılar; ışığı absorplayabilir, anataz formun artması sonucu fotokatalitik özelliklerindeki artışla güneş paneli sistemlerinde kullanım potansiyeline sahip olabilirler. Yeni nesil yüksek verimli ve dayanıklı malzemeler olarak güneş enerjisi uygulamalarında umut verici oldukları düşünülmektedir.



KAYNAKLAR

- Anastas, P.T., WARNER, J.C., 1998. Green Chemistry: Theory and Practice. Oxford University Press, New York.
- Chen, C., Cheng, J., Yu, S., Che, L., Meng, Z., 2006. Hydrothermal synthesis of perovskite bismuth ferrite crystallites. Journal of Crystal Growth, 291, 135–139.
- Murugadoss, G., Thangamuthu, R., Rajesh Kumar, M., 2018. Formamidinium lead iodide perovskite: Structure, shape and optical tuning via hydrothermal method. Materials Letters , (08), 003.
- Biasotto, G., Simoes, A.Z., Foschini, CR., Zaghet, M., Varela J., Longo, E., 2011. Microwave - hydrothermal synthesis of perovskite bismuth ferrite nanoparticles Materials Research Bulletin, 46(11), 2543–2547.
- Zhang, G., Guobao L., Huang, F., Liao, F., Kuo, L., Wang, Y., Jianhua L., 2011. Hydrothermal synthesis of superconductors $Ba_{1-x}K_xBiO_3$ and double perovskites $Ba_1 - xK_xBi_1 - yNa_yO_3$. Journal of Alloys and Compounds (509), 9804– 980.
- Lei, H., Lin, t., Wang, X., Zhang, S., Cheng, Q., Chen, X., Tan, Z., (2018) . A novel in situ hydrothermal preparation route for Sb_2S_3 and its solar cell application. Materials Letters(08)058.
- Chen, H., Zhu, W., Zhang, Z., Cai, W., Zhou, X., (2018). Er and Mg co-doped TiO_2 nanorod arrays and improvement of photovoltaic property in perovskite solar cell. Journal of Alloys and Compounds (08)279.
- Liyan, W., Xiaoyan M., Zheng ,W.,(2006). Hydrothermal synthesis and characterization of double perovskite Ba_2YSbO_6 Materials Letters (60)2 326–233
- Wang, S., Huang, K., Zheng, B., Zhang, A., Feng, S., (2013) Mild hydrothermal synthesis and physical property of perovskite Sr doped $LaCrO_3$. Materials Letters(101)86–89.

- Sun, X., Deng, S., Yang, Y., Zhao, G., Shen, G., Han, G., (2016). Hydrothermal synthesis and photocatalytic activity of PbTiO_3 perovskite cubic particles Surface & Coatings Technology.
- Yang, X., Ren, Z., Xu, G., Chao, C., Jiang, S., Deng, S., Xiao, W., Han, G., (2014). Monodisperse hollow perovskite BaTiO_3 nanostructures prepared by a sol-gel-hydrothermal method." Ceramics International (40) 9663–9670.
- Tuna, Ö., Simsek, B. E., (2021). Anchoring LaFeO_3 perovskites on the polyester filters for flowthrough photocatalytic degradation of organic pollutants" Journal of Photochemistry & Photobiology, A: Chemistry.
- Tasleem, S., Tahir, M., (2020). Recent progress in structural development and band engineering of perovskites materials for photocatalytic solar hydrogen production: A review" international journal of hydrogen energy.
- Fresnoa, F., Galdóna, S., Barawia, M., González, A. E., Escudero, C., Dieste, V., Iriarte, C., Víctor, A., (2021). Selectivity in UV photocatalytic CO_2 conversion over bare and silver decorated niobium-tantalum perovskites Catalysis Today.
- Acharya, P., Nayak, A., Bhuyana, K. R., Choudhary, N. P., Parida, K. S., (2021). Effect of cerium dopant on the structural and electrical properties of SrMnO_3 single perovskite" Journal of Molecular Structure.
- Soosaimanickam, A., Pedro, J., Cantó, R., Juan, P., Pastor, M., Abargues, R., (2021). Preparation and processing of nanocomposites of all-inorganic lead halide perovskite nanocrystal hybrid perovskite composite materials.
- Saputra, L., Kojima, T., Hara, T., Ichikuni, N., Shimazu, S., (2018). Recyclable Pd-contained perovskite catalyst synthesized by a low temperature hydrothermal method for aerobic alcohol oxidation Molecular Catalysis.

ÖZGEÇMİŞ

Esra Okur, ilkokul ve lise eğitimini Osmaniye’de tamamladı. 2010 yılında Dumlupınar Üniversitesi Fen Fakültesi Kimya bölümünde eğitimine başladı. 2015 yılı Haziran döneminde mezun olmuş ve 2018 yılı Şubat ayında Çukurova Üniversitesi’nde Kimya bölümünde yüksek lisansa başladı.

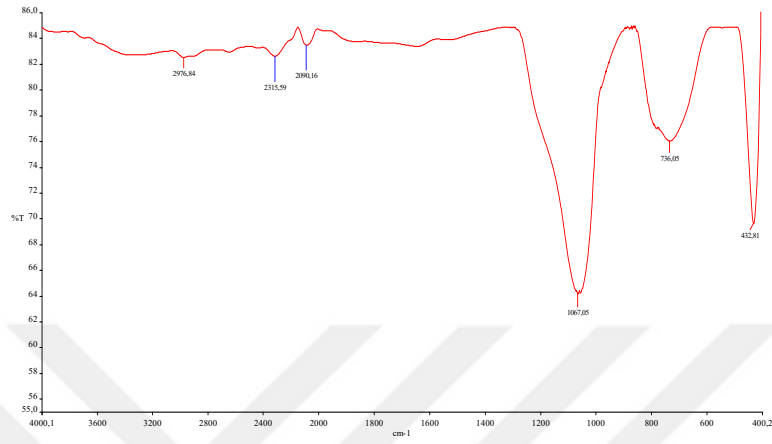




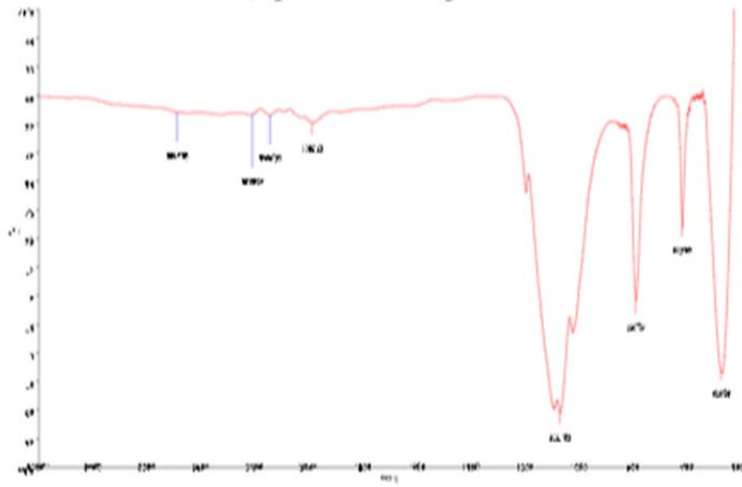
EKLER



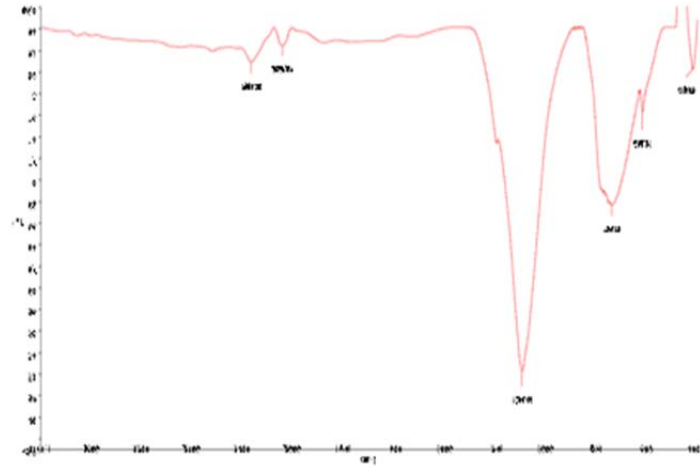
EK 1.1. TiO₂ nano yapıların FT-IR Spektrumu



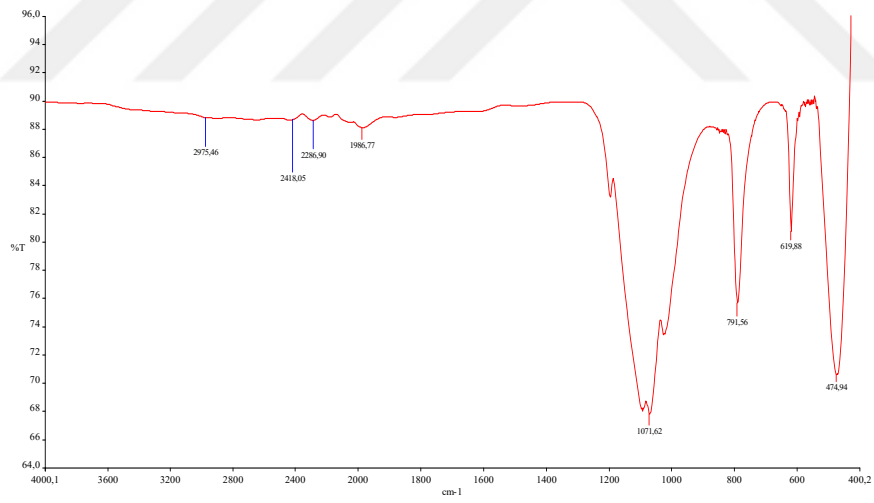
EK 1.2. SmTiO₃ nanoyapıların FT-IR Spektrumu



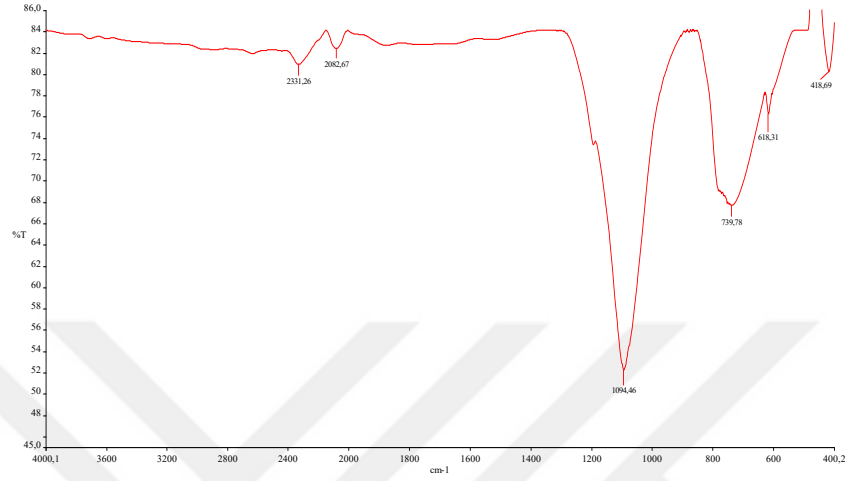
EK 1.3. CeTiO₃ nanoyapıların FTIR Spektrumu



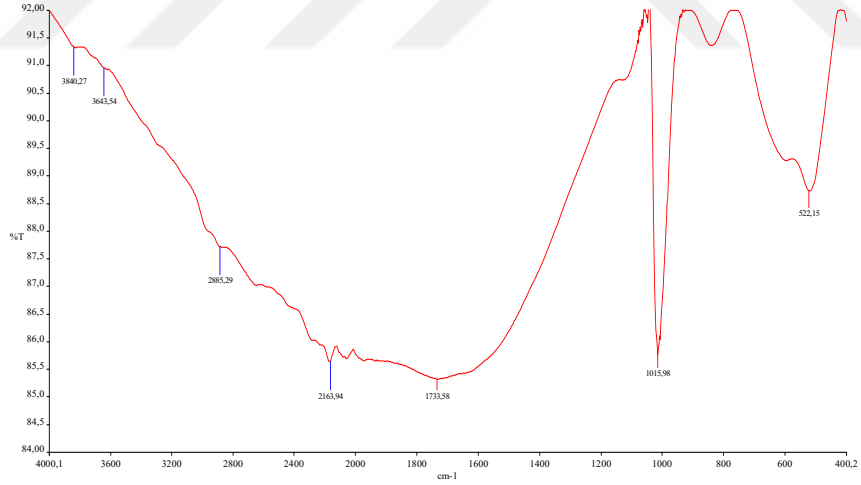
EK 1.4. Sm₂SnTiO₆ nano yapıların FT-IR Spektrumu



EK 1.5. Ce₂SnTiO₆ nano yapıların FT-IR Spektrumu



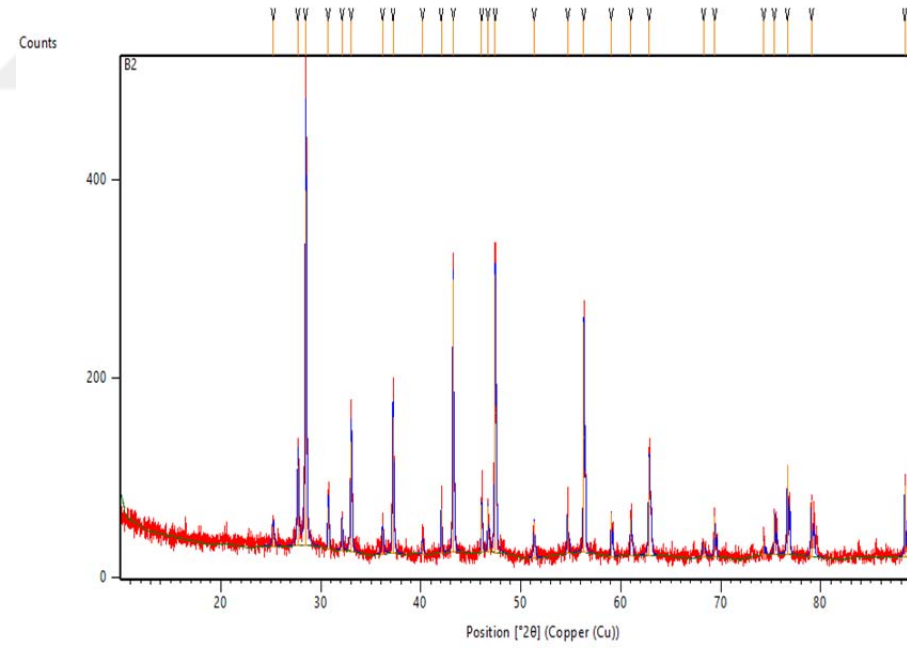
EK 1.6. La₂SnTiO₆ nano yapılarının FT-IR Spektrumu



Pik Listesi

Pos. [°2θ]	Height [cts]	FWHM Left [°2θ]	d-spacing [Å]	Rel. Int. [%]	Backgr.[cts]	Matched by	Integral Breadth [°2θ]	Crystallite Size [Å]	Micro Strain [%]	h k l	Crystallite Size only [Å]	Micro Strain only [%]	FWHM Total [°2θ]
19.7613	7.41	2.3117	4.48901	2.14	68.12		4.764240	19	0.12312		19	11.69163	2.3117
27.4421	53.26	0.2137	3.24753	15.35	71.96		0.362591	317	-0.11207		317	0.51207	0.2137
28.2220	223.51	0.2202	3.15954	64.40	71.60		0.344754	341	-0.10317		341	0.46341	0.2202
30.4398	23.78	0.3034	2.93420	6.85	69.48		0.412884	419	0.29944		263	0.55781	0.3034
32.6958	60.18	0.2668	2.73671	17.34	67.00		0.471175	233	-0.09256		233	0.58748	0.2668
36.1982	30.42	0.0941	2.47954	8.76	65.37		0.123785	23605	0.03400		3314	0.03741	0.0941
37.2267	170.53	0.1051	2.41337	49.13	65.89		0.146973	2381	-0.01395		2366	0.05100	0.1051
40.1956	26.29	0.0874	2.24170	7.58	64.54		0.103378	-2448	0.05754		1948	0.05755	0.0874
42.0603	65.35	0.1137	2.14652	18.83	65.05		0.175010	1007	-0.06349		1006	0.10667	0.1137
43.2678	347.08	0.0762	2.08938	100.00	67.27		0.103941	490282	-0.04297		28898	0.00362	0.0762
46.9038	69.18	0.3870	1.93552	19.93	68.43		0.484700	564	0.30822		227	0.42651	0.3870
54.1486	8.52	0.8840	1.69242	2.46	63.95		1.652748	63	-0.04879		63	1.34010	0.8840
55.6981	42.89	0.3566	1.64896	12.36	63.73		0.628150	182	-0.05198		182	0.45413	0.3566
61.0390	22.51	0.1294	1.51684	6.49	63.92		0.201252	852	-0.04487		852	0.08906	0.1294
62.8585	113.62	0.1454	1.47724	32.73	64.62		0.181192	8558	0.07101		964	0.07658	0.1454
75.4097	33.85	0.2490	1.25949	9.75	61.99		0.513203	260	-0.03860		260	0.24240	0.2490
79.3939	22.69	0.1849	1.20599	6.54	64.10		0.230466	3814	0.07014		749	0.08052	0.1849

EK 1.8. SmTiO₃'in XRD Analiz Sonuçları



Pik Listesi

Pos. [°2θ]	Height [cts]	FWHM Left [°2θ]	d-spacing [Å]	Rel. Int. [%]	Backgr.[cts]	Matched by	Integral Breadth [°2θ]	Crystallite Size [Å]	Micro Strain [%]	h k l	Crystallite Size only [Å]	Micro Strain only [%]	FWHM Total [°2θ]
25.2419	19.96	0.1543	3.52539	5.59	31.48		0.266641	474	-0.12279		474	0.37194	0.1543
27.7082	79.65	0.1193	3.21694	22.31	32.06		0.195012	759	-0.11129		759	0.21199	0.1193
28.4893	356.98	0.1361	3.13050	100.00	32.26		0.180960	2055	0.12192		895	0.17492	0.1361
30.7356	42.60	0.1436	2.90663	11.93	29.12		0.153705	-1294	0.21984		661	0.21987	0.1436
32.1266	30.90	0.0873	2.78389	8.66	27.57		0.115879	62761	-0.02182		22088	0.00630	0.0873
33.0309	110.70	0.1346	2.70971	31.01	26.53		0.178672	2180	0.10371		923	0.14683	0.1346
36.1677	23.57	0.1308	2.48157	6.60	23.80		0.215454	661	-0.08357		661	0.18783	0.1308
37.2108	137.07	0.1160	2.41436	38.40	24.25		0.163516	1708	0.02664		1455	0.08294	0.1160
40.1679	12.78	0.1436	2.24318	3.58	23.97		0.148121	-1277	0.16018		700	0.16019	0.1436
42.0311	43.79	0.1093	2.14794	12.27	24.97		0.112689	-1283	0.10636		1010	0.10637	0.1093
43.2502	274.76	0.0926	2.09018	76.97	25.58		0.124033	10106	0.00817		6593	0.01585	0.0926
46.1012	47.31	0.1302	1.96734	13.25	25.33		0.134489	-1299	0.12192		807	0.12193	0.1302
46.7399	46.47	0.0839	1.94193	13.02	25.62		0.119491	4335	-0.04384		4245	0.02287	0.0839
47.4515	280.16	0.0996	1.91446	78.48	25.25		0.142412	2300	-0.03399		2287	0.04186	0.0996
51.3316	36.61	0.0737	1.77848	10.25	19.73		0.136853	1592	-0.05742		1588	0.05600	0.0737
54.6877	37.75	0.1294	1.67701	10.57	24.41		0.133485	-1328	0.09899		847	0.09900	0.1294
56.3135	231.33	0.1004	1.63239	64.80	25.40		0.133389	8669	0.02382		2705	0.03017	0.1004
59.0651	45.05	0.1017	1.56273	12.62	21.41		0.127885	-10139	0.03846		2031	0.03846	0.1017
61.0136	36.28	0.1531	1.51741	10.16	22.30		0.157840	-1348	0.10660		712	0.10661	0.1531
62.8537	98.22	0.1582	1.47734	27.51	22.22		0.205253	2280	0.07009		802	0.09215	0.1582
68.2766	13.22	0.1485	1.37261	3.70	20.72		0.237776	674	-0.04272		674	0.10182	0.1485
69.3869	39.99	0.1220	1.35334	11.20	20.95		0.137505	-2070	0.06245		1083	0.06245	0.1220
74.2973	14.23	0.0584	1.27557	3.99	23.26		0.060190	-1372	-0.01884		35016	0.00182	0.0584
75.3816	40.61	0.1290	1.25989	11.37	23.80		0.156167	-6629	0.04954		1271	0.04955	0.1290
76.6782	89.01	0.1219	1.24179	24.93	23.56		0.157757	10348	0.03282		1690	0.03673	0.1219
79.0673	56.81	0.1117	1.21015	15.91	20.93		0.204398	952	-0.03722		951	0.06361	0.1117
88.4147	71.89	0.1000	1.10476	20.14	20.97		0.152398	2268	-0.03107		2261	0.02444	0.1000

Referans Kodu Listesi

Ref. Cod	Score	Compound Name	Displacement [°2Th.]	Scale Factor	Total Lines	Matched Lines	New Matched Lines	Strong Unmatched Lines	Chemical Formula	Space Group	Crystal System	Cell Parameters	Delta d/d [‰]	RIR
98-018-1228	67	Cerium Samarium Iron Oxide (0.83/0.15/0.03/1.91)	0.000	1.133	9	9	9	0	Ce0.8245 Fe0.03 O1.9123 Sm0.1455	F m -3 m	Cubic	a 5.415 - b 5.415 - c 5.415	0.000	15.142190
98-016-4227	67	Cerium Ruthenium Oxide (0.9/0.1/1.94) - Nanocrystalline	0.000	1.133	9	9	9	0	Ce0.9 O1.94 Ru0.1	F m -3 m	Cubic	a 5.415 - b 5.415 - c 5.415	0.000	15.060070
98-018-6667	67	Cerium Neodymium Samarium Oxide (0.971/0.0145/0.0145/1.9855)	0.000	1.132	9	9	9	0	Ce0.971 Nd0.0145 O1.9855 Sm0.0145	F m -3 m	Cubic	a 5.415 - b 5.415 - c 5.415	0.000	15.331680
98-016-4228	67	Cerium Ruthenium Oxide (0.9/0.1/1.52) - Nanocrystalline	0.000	1.132	9	9	9	0	Ce0.9 O1.52 Ru0.1	F m -3 m	Cubic	a 5.415 - b 5.415 - c 5.415	0.000	15.690470
98-016-4226	67	Cerium Ruthenium Oxide (0.95/0.05/1.97) - Nanocrystalline	0.000	1.155	9	9	9	0	Ce0.95 O1.97 Ru0.05	F m -3 m	Cubic	a 5.414 - b 5.414 - c 5.414	0.000	15.181350
98-018-6169	67	Cerium Calcium Oxide (0.9/0.1/1.9)	0.000	1.156	9	9	9	0	Ca0.1 Ce0.9 O1.9	F m -3 m	Cubic	a 5.414 - b 5.414 - c 5.414	0.000	14.281530
98-018-0955	67	Cerium Dioxide - Nanocrystalline	0.000	1.155	9	9	9	0	Ce1 O2	F m -3 m	Cubic	a 5.414 - b 5.414 - c 5.414	0.000	15.302660
98-016-4225	67	Cerium(IV) Oxide - Nanocrystalline	0.000	1.155	9	9	9	0	Ce1 O2	F m -3 m	Cubic	a 5.414 - b 5.414 - c 5.414	0.000	15.302660
98-018-6659	67	Cerium Samarium Oxide (0.977/0.023/1.9885)	0.000	1.155	9	9	9	0	Ce0.977 O1.9885 Sm0.023	F m -3 m	Cubic	a 5.414 - b 5.414 - c 5.414	0.000	15.321230
98-016-4956	67	Cerium Oxide (1/1.88)	0.000	1.155	9	9	9	0	Ce1 O1.88	F m -3 m	Cubic	a 5.414 - b 5.414 - c 5.414	0.000	15.475280
98-016-4958	67	Copper Cerium Oxide (0.10/0.90/1.77)	0.000	1.157	9	9	9	0	Ce0.9 Cu0.1 O1.77	F m -3 m	Cubic	a 5.414 - b 5.414 - c 5.414	0.000	14.705310
98-019-	66	Uranium Oxide (3/8)	0.000	1.100	9	9	9	0	O4.8	F m -3 m	Cubic	a 5.415 - b	0.000	20.559220

1131							U1.76			5.415 - c		
98-018-2971	66	Cerium Ytterbium Oxide (0.8/0.2/1.9)	0.000	1.177	9	9	9	0 Ce0.81 O1.9 Yb0.19	F m -3 m Cubic	a 5.414 - b 5.414 - c 5.414	0.000	15.156260
98-008-4764	66	Lithium Nitride Chloride (1.33/2.67/6.67) - Ht	0.000	1.069	9	9	9	0 Cl2.666 Li6.665 N1.333	F m -3 m Cubic	a 5.416 - b 5.416 - c 5.416	0.000	3.259253
98-008-4765	66	Lithium Nitride Chloride (1.33/2.67/6.67) - Ht	0.000	1.070	9	9	9	0 Cl2.666 Li6.665 N1.333	F m -3 m Cubic	a 5.416 - b 5.416 - c 5.416	0.000	3.271517
98-006-0258	65	Sodium Ytterbium Tetrafluoride	0.000	1.080	9	9	9	0 F4 Na1 Yb1	F m -3 m Cubic	a 5.415 - b 5.415 - c 5.415	0.000	8.574296
98-019-1324	65	Ytterbium Bismuth Oxide (0.7/1.3/3)	0.000	1.018	9	9	9	0 Bi1.3 O3 Yb0.7	F m -3 m Cubic	a 5.417 - b 5.417 - c 5.417	0.000	18.038910
98-018-1242	65	Cerium Samarium Oxide (0.8/0.2/1.9)	0.000	0.996	9	9	9	0 Ce0.8 O1.9 Sm0.2	F m -3 m Cubic	a 5.416 - b 5.416 - c 5.416	0.000	15.321790
98-018-6663	65	Cerium Neodymium Oxide (0.973/0.027/1.9865)	0.000	0.996	9	9	9	0 Ce0.973 Nd0.027 O1.9865	F m -3 m Cubic	a 5.416 - b 5.416 - c 5.416	0.000	15.334770
98-002-8773	64	Cerium Uranium Oxide (.80/.20/2.13)	0.000	0.980	9	9	9	0 Ce0.8 O2.13 U0.2	F m -3 m Cubic	a 5.416 - b 5.416 - c 5.416	0.000	16.550220
98-018-4132	64	Pyrochlore-(Ce,La,Zr)	0.000	1.158	11	9	9	0 Ce0.3 La2 O7 Zr1.7	F d -3 m Cubic	a 10.829 - b 10.829 - c 10.829	0.000	13.275520
98-018-4585	64	Cerium Gadolinium Oxide (0.875/0.125/1.937)	0.000	1.073	9	9	9	0 Ce0.875 Gd0.125 O1.937	F m -3 m Cubic	a 5.413 - b 5.413 - c 5.413	0.000	15.337750
98-003-6627	64	Disodium Cadmium Ytterbium Fluoride	0.000	1.189	9	9	9	0 Cd1 F7 Na2 Yb1	F m -3 m Cubic	a 5.414 - b 5.414 - c 5.414	0.000	7.522117
98-019-3169	64	Cerium Dioxide	0.000	1.077	9	9	9	0 Ce1 O2	F m -3 m Cubic	a 5.413 - b 5.413 - c 5.413	0.000	15.303600
98-016-9029	64	Cerium Dioxide - Fluorite-type	0.000	1.077	9	9	9	0 Ce1 O2	F m -3 m Cubic	a 5.413 - b 5.413 - c 5.413	0.000	15.303600
98-002-8719	64	Neodymium Uranium Oxide (1.4/2.6/9.04)	0.000	0.963	9	9	9	0 Nd1.4 O9.04	F m -3 m Cubic	a 5.416 - b 5.416 - c	0.000	20.433750

98-018-4105	63	Pyrochlore-(Ce,La,Zr)	0.000	1.141	11	9	9	U2.6 0 Ce0.1 La2 O7 Zr1.9	F d -3 m	Cubic	5.416 a 10.830 - b 10.830 - c 10.830	0.000	13.019100
98-018-4090	62	Pyrochlore-(La,Zr)	0.000	1.163	11	9	9	La2 O7 Zr2	F d -3 m	Cubic	a 10.828 - b 10.828 - c 10.828	0.000	12.892280
98-016-4742	62	Tricerium(IV) Zirconium Oxide	0.000	0.854	10	9	9	Ce3 O8 Zr1	P 1	Anorthic	a 5.426 - b 7.651 - c 7.651 - alpha 90.000 - beta 90.000 - gamma 90.000	0.000	3.497487
98-003-2699	62	Cerium Antimony Oxide	0.000	1.074	9	9	9	Ce1 O3 Sb1	F d -3 m	Cubic	a 10.825 - b 10.825 - c 10.825	0.000	15.527680
98-023-7551	61	Copper Iron Tin Sulfide (2.2/0.8/1/3.76)	0.000	1.166	8	7	7	Cu2.6 Fe0.4 S3.76 Sn1	I -4 2 m	Tetragonal	a 5.418 - b 5.418 - c 10.817	0.000	9.451706
98-016-6120	61	Nickel Oxide (1/0.81)	0.000	0.584	5	5	5	Ni1 O0.81	R -3 m	Hexagonal	a 2.956 - b 2.956 - c 7.237	0.000	4.865821
98-016-6107	61	Nickel Oxide (0.96/1)	0.000	0.636	5	5	5	Ni0.96 O1	R -3 m	Hexagonal	a 2.956 - b 2.956 - c 7.241	0.000	5.177017
98-015-6250	60	Cerium(IV) Oxide	0.000	0.999	9	9	9	Ce1 O2	F m -3 m	Cubic	a 5.412 - b 5.412 - c 5.412	0.000	15.621290
98-023-8381	60	Cerium Dioxide	0.000	0.998	9	9	9	Ce1 O2	F m -3 m	Cubic	a 5.412 - b 5.412 - c 5.412	0.000	15.549860
98-015-6252	60	Cerium(IV) Zinc Oxide (0.97/0.03/2)	0.000	0.999	9	9	9	Ce0.97 O2 Zn0.03	F m -3 m	Cubic	a 5.412 - b 5.412 - c 5.412	0.000	15.252750
98-007-2155	60	Cerianite	0.000	1.004	9	9	9	Ce1 O2	F m -3 m	Cubic	a 5.412 - b 5.412 - c 5.412	0.000	15.470030
98-018-5285	60	Lithium Cobalt Nickel Oxide (0.05/0.05/0.90/1)	0.000	0.659	5	5	5	Co0.05 Li0.05 Ni0.9 O1	F m -3 m	Cubic	a 4.180 - b 4.180 - c 4.180	0.000	4.940554
98-002-	60	Neodymium Uranium Oxide	0.000	0.959	9	9	9	Nd1	F m -3 m	Cubic	a 5.412 - b	0.000	20.733370

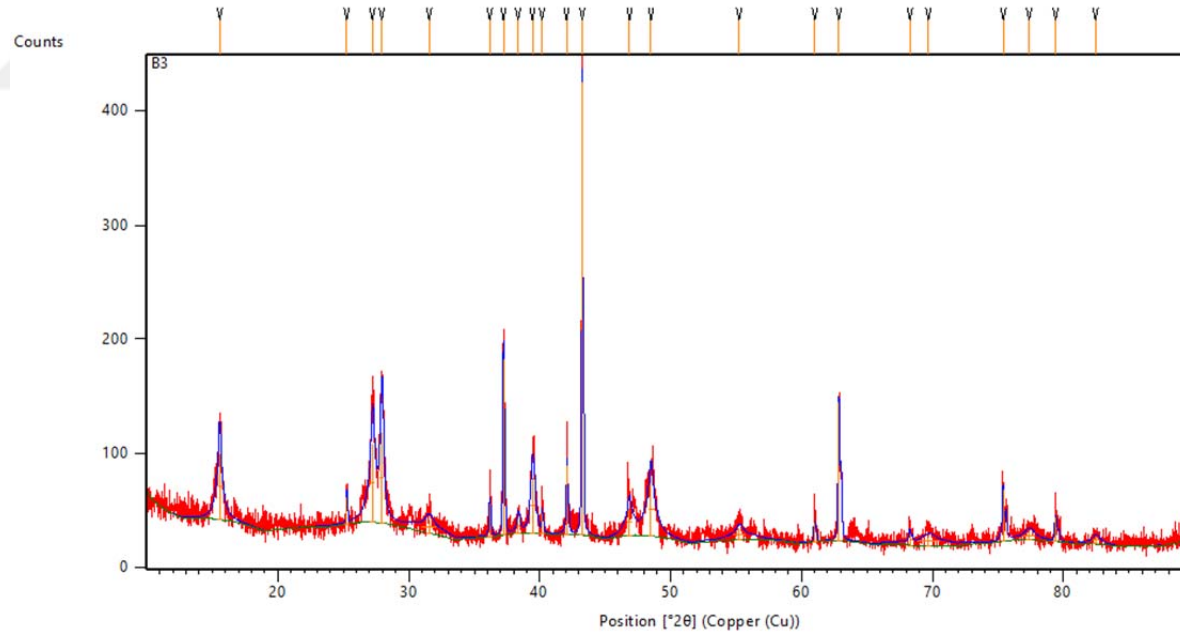
8718	(1/3/9.51)						O9.51 U3		5.412 - c		
98-002-4018	60 Bunsenite	0.000	0.648	5	5	5	0 Ni1 O1	F m -3 m Cubic	5.412 a 4.180 - b 4.180 - c 4.180	0.000	5.137277
98-005-3931	60 Bunsenite	0.000	0.648	5	5	5	0 Ni1 O1	F m -3 m Cubic	a 4.180 - b 4.180 - c 4.180	0.000	5.137277
98-006-0378	59 Sphalerite	0.000	1.134	7	7	7	0 S1 Zn1	F -4 3 m Cubic	a 5.415 - b 5.415 - c 5.415	0.000	8.805369
98-002-8798	59 Dysprosium Cerium(IV) Oxide (0.1/0.9/1.95)	0.000	1.005	9	9	9	0 Ce0.9 Dy0.1 O1.95	F m -3 m Cubic	a 5.412 - b 5.412 - c 5.412	0.000	16.545500
98-007-6188	59 Sphalerite, ferroan	0.000	1.134	7	7	7	0 Fe0.175 S1 Zn0.825	F -4 3 m Cubic	a 5.415 - b 5.415 - c 5.415	0.000	8.580623
98-003-8513	59 Sphalerite (Fe-rich)	0.000	1.133	7	7	7	0 Fe0.27 S1 Zn0.73	F -4 3 m Cubic	a 5.415 - b 5.415 - c 5.415	0.000	8.461947
98-018-4918	59 Nickel Oxide	0.000	0.688	5	5	5	0 Ni1 O1	F m -3 m Cubic	a 4.179 - b 4.179 - c 4.179	0.000	5.136625
98-006-1318	59 Bunsenite	0.000	0.688	5	5	5	0 Ni1 O1	F m -3 m Cubic	a 4.179 - b 4.179 - c 4.179	0.000	5.136625
98-018-2195	59 Cerium(IV) Praseodymium(IV) Oxide (0.2/0.8/2)	0.000	1.007	9	9	9	0 Ce0.2 O2 Pr0.8	F m -3 m Cubic	a 5.412 - b 5.412 - c 5.412	0.000	15.656490
98-006-1300	59 Europium Protactinium Oxide (.5/.5/2)	0.000	1.001	9	9	9	0 Eu0.5 O2 Pa0.5	F m -3 m Cubic	a 5.412 - b 5.412 - c 5.412	0.000	19.783860
98-006-1545	59 Nickel Copper Oxide (.95/.05/1)	0.000	0.686	5	5	5	0 Cu0.05 Ni0.95 O1	F m -3 m Cubic	a 4.179 - b 4.179 - c 4.179	0.000	5.170772
98-016-4957	59 Copper Cerium Oxide (0.05/0.95/1.84)	0.000	1.008	9	9	9	0 Ce0.95 Cu0.05 O1.84	F m -3 m Cubic	a 5.412 - b 5.412 - c 5.412	0.000	15.069950
98-064-7548	59 Titanium(II) Oxide	0.000	0.674	5	5	5	0 O1 Ti1	F m -3 m Cubic	a 4.180 - b 4.180 - c 4.180	0.000	4.685225
98-064-7558	59 Titanium Oxide (1/1)	0.000	0.674	5	5	5	0 O1 Ti1	F m -3 m Cubic	a 4.180 - b 4.180 - c	0.000	4.685225

98-015-6251	58	Cerium(IV) Zinc Oxide (0.97/0.03/2)	0.000	1.013	9	9	9	0	Ce0.97 O2 Zn0.03	F m -3 m	Cubic	4.180 a 5.412 - b 5.412 - c 5.412	0.000	14.844320
98-018-1227	58	Cerium Samarium Iron Oxide (0.83/0.15/0.02/1.92)	0.000	0.950	9	9	9	0	Ce0.833 Fe0.02 O1.9165 Sm0.147	F m -3 m	Cubic	a 5.417 - b 5.417 - c 5.417	0.000	15.234140
98-018-0852	58	Cerium Zirconium Oxide (0.95/0.05/2)	0.000	0.949	9	9	9	0	Ce0.95 O2 Zr0.05	F m -3 m	Cubic	a 5.417 - b 5.417 - c 5.417	0.000	15.035890
98-007-7065	58	Nickel Zinc Oxide (0.85/0.15/1)	0.000	0.572	5	5	5	0	Ni0.85 O1 Zn0.15	F m -3 m	Cubic	a 4.181 - b 4.181 - c 4.181	0.000	5.301638
98-016-7160	58	Cerium(IV) Oxide - Nanoparticle	0.000	0.949	9	9	9	0	Ce1 O2	F m -3 m	Cubic	a 5.417 - b 5.417 - c 5.417	0.000	15.299840
98-008-8759	58	Cerium Dioxide	0.000	0.949	9	9	9	0	Ce1 O2	F m -3 m	Cubic	a 5.411 - b 5.411 - c 5.411	0.000	15.475610
98-018-2988	58	Cerium Dioxide	0.000	0.949	9	9	9	0	Ce1 O2	F m -3 m	Cubic	a 5.411 - b 5.411 - c 5.411	0.000	15.469340
98-018-3223	57	Lithium Iron Zinc Oxide (0.44/0.44/0.11/1)	0.000	0.705	5	5	5	0	Fe0.444 Li0.444 O0.999 Zn0.111	F m -3 m	Cubic	a 4.180 - b 4.180 - c 4.180	0.000	3.671053
98-062-1707	57	Cerium Oxide (1/2)	0.000	0.955	9	9	9	0	Ce1 O2	F m -3 m	Cubic	a 5.411 - b 5.411 - c 5.411	0.000	15.305490
98-018-6172	57	Cerium Dioxide	0.000	0.955	9	9	9	0	Ce1 O2	F m -3 m	Cubic	a 5.411 - b 5.411 - c 5.411	0.000	15.305490
98-002-8753	57	Cerianite	0.000	0.955	9	9	9	0	Ce1 O2	F m -3 m	Cubic	a 5.411 - b 5.411 - c 5.411	0.000	15.305490
98-002-9046	57	Cerianite	0.000	0.955	9	9	9	0	Ce1 O2	F m -3 m	Cubic	a 5.411 - b 5.411 - c 5.411	0.000	15.305490
98-006-1595	57	Cerianite-(Ce)	0.000	0.955	9	9	9	0	Ce1 O2	F m -3 m	Cubic	a 5.411 - b 5.411 - c 5.411	0.000	15.305490
98-015-	57	Cerium(IV) Oxide	0.000	0.955	9	9	9	0	Ce1 O2	F m -3 m	Cubic	a 5.411 - b	0.000	15.305490

7419											5.411 - c		
98-062-1719	57	Cerium Oxide (1/2)	0.000	0.955	9	9	9	0	Ce1 O2	F m -3 m	Cubic	5.411 a 5.411 - b 5.411 - c	0.000 15.305490
98-062-1704	57	Cerium Oxide (1/2)	0.000	0.955	9	9	9	0	Ce1 O2	F m -3 m	Cubic	5.411 a 5.411 - b 5.411 - c	0.000 15.305490
98-018-2180	57	Cerium(IV) Dioxide	0.000	0.955	9	9	9	0	Ce1 O2	F m -3 m	Cubic	5.411 a 5.411 - b 5.411 - c	0.000 15.305490
98-018-0853	57	Cerium Zirconium Oxide (0.9/0.1/2)	0.000	0.955	9	9	9	0	Ce0.9 O2 Zr0.1	F m -3 m	Cubic	5.411 a 5.411 - b 5.411 - c	0.000 14.778120
98-019-3174	57	Cerium Praseodymium Oxide (0.859/0.141/1.99)	0.000	0.955	9	9	9	0	Ce0.859 O1.99 Pr0.141	F m -3 m	Cubic	5.411 a 5.411 - b 5.411 - c	0.000 15.381260
98-018-2199	57	Cerium(IV) Praseodymium(IV) Oxide (0.1/0.9/2)	0.000	0.956	9	9	9	0	Ce0.1 O2 Pr0.9	F m -3 m	Cubic	5.411 a 5.411 - b 5.411 - c	0.000 15.702000
98-006-0164	57	Nantokite	0.000	0.992	7	7	7	0	Cl1 Cu1	F -4 3 m	Cubic	5.411 a 5.416 - b 5.416 - c	0.000 8.345364
98-008-5360	57	Samarium Yttrium Oxide (1.4/0.6/3)	0.000	1.056	13	9	9	0	O3 Sm1.4 Y0.6	I a -3	Cubic	5.416 a 10.832 - b 10.832 - c	0.000 12.980500
98-016-5777	56	Yttrium Samarium Oxide (0.6/1.4/3)	0.000	1.056	14	9	9	0	O3 Sm1.4 Y0.6	I a -3	Cubic	10.832 a 10.832 - b 10.832 - c	0.000 12.934720
98-001-7002	55	Nickel Oxide (1.88/2) - Subcell	0.000	0.485	5	5	5	0	Ni1.875 O2	C 1 2/m 1	Monoclinic	10.832 a 5.115 - b 2.958 - c 2.954 - alpha 90.000 - beta 125.190 - gamma 90.000	0.000 3.259408
98-007-7909	55	Sphalerite, ferrous	0.000	1.004	7	7	7	0	Fe0.026 S1 Zn0.984	F -4 3 m	Cubic	5.412 a 5.412 - b 5.412 - c	0.000 8.851889
98-005-1135	55	Bismuth Yttrium Oxide (0.65/0.35/1.5)	0.000	0.891	9	7	7	0	Bi0.65 O1.5 Yb0.35	F m -3 m	Cubic	5.412 a 5.420 - b 5.420 - c 5.420	0.000 18.556860

98-018-5284	55	Lithium Cobalt Nickel Oxide (0.05/0.02/0.93/1)	0.000	0.669	5	5	5	0	Co0.02 Li0.05 Ni0.93 O1	F m -3 m	Cubic	a 4.178 - b 4.178 - c 4.178	0.000	4.945850
98-000-9866	55	Bunsenite	0.000	0.654	5	5	5	0	Ni1 O1	F m -3 m	Cubic	a 4.178 - b 4.178 - c 4.178	0.000	5.161394
98-002-8957	55	Hongquiite	0.000	0.680	5	5	5	0	O3.3271 Ti3.43	F m -3 m	Cubic	a 4.178 - b 4.178 - c 4.178	0.000	3.972614
98-009-2140	54	Nickel Zinc Oxide (0.9/0.1/1)	0.000	0.540	3	3	3	0	Ni0.9 O1 Zn0.1	R -3 m	Hexagonal	a 2.957 - b 2.957 - c 7.244	0.000	1.770712
98-005-0965	54	Kuramite	0.000	1.140	7	7	7	0	Cu2 S3 Sn1	I -4 2 m	Tetragonal	a 5.413 - b 5.413 - c 10.824	0.000	3.742412
98-010-8733	54	Sphalerite	0.000	0.956	7	7	7	0	S1 Zn1	F -4 3 m	Cubic	a 5.411 - b 5.411 - c 5.411	0.000	8.806784
98-007-6210	54	Manganese Zinc Sulfide (0.05/0.95/1)	0.000	0.956	7	7	7	0	Mn0.05 S1 Zn0.95	F -4 3 m	Cubic	a 5.411 - b 5.411 - c 5.411	0.000	8.732686
98-007-3255	54	Nantokite	0.000	0.920	7	6	6	0	Cl1 Cu1	F -4 3 m	Cubic	a 5.420 - b 5.420 - c 5.420	0.000	6.353158
98-006-0711	53	Nantokite	0.000	0.957	7	7	7	0	Cl1 Cu1	F -4 3 m	Cubic	a 5.417 - b 5.417 - c 5.417	0.000	8.345061
98-042-4674	53	Copper Manganese Cobalt Tetrathioantennate (2/0.2/0.8/1)	0.000	1.017	9	7	7	0	Co0.8 Cu2 Mn0.2 S4 Sn1	I -4	Tetragonal	a 5.412 - b 5.412 - c 10.847	0.000	9.362302
98-002-7997	53	Europium Oxide	0.000	0.907	12	7	7	0	Eu2 O3	I 21 3	Cubic	a 10.840 - b 10.840 - c 10.840	0.000	13.351390
98-010-5472	53	Nickel Zinc (1/1)	0.000	0.923	6	6	6	0	Ni1 Zn1	F -4 3 m	Cubic	a 5.411 - b 5.411 - c 5.411	0.000	9.409383
98-019-0090	53	Cerium Iron Zinc (1/1.2/1.8)	0.000	1.090	15	10	10	0	Ce1 Fe1.2 Zn1.8	P m -3 m	Cubic	a 5.415 - b 5.415 - c 5.415	0.000	11.749350
98-007-6189	53	Sphalerite, ferroan	0.000	0.954	7	7	7	0	Fe0.224 S1 Zn0.776	F -4 3 m	Cubic	a 5.417 - b 5.417 - c 5.417	0.000	8.518473
98-018-	53	Digadolinium Trioxide	0.000	0.938	14	8	8	0	Gd2 O3	I a -3	Cubic	a 10.837 - b	0.000	13.038720

EK 1.9. CeTiO₃'in XRD Analiz Sonuçları



Pik Listesi

Pos. [°2θ]	Height [cts]	FWHM Left [°2θ]	d-spacing [Å]	Rel. Int. [%]	Backgr.[cts]	Matched by	Integral Breadth [°2θ]	Crystallite Size [Å]	Micro Strain [%]	h k l	Crystallite Size only [Å]	Micro Strain only [%]	FWHM Total [°2θ]
15.5555	58.05	0.3749	5.69196	14.62	41.97		0.657107	154	-0.20205		154	1.84719	0.3749
25.2630	23.91	0.0974	3.52249	6.02	38.00		0.100418	-1217	0.15198		1159	0.15200	0.0974
27.2298	68.86	0.4210	3.27237	17.34	39.57		0.778344	130	-0.11104		130	1.26163	0.4210
27.9370	79.39	0.3083	3.19112	19.99	38.93		0.415149	433	0.34590		259	0.61491	0.3083
31.5667	11.41	1.1456	2.83198	2.87	30.08		2.361117	40	-0.07485		40	3.51332	1.1456
36.1797	29.28	0.1292	2.48077	7.37	26.95		0.172846	2228	0.08362		1012	0.12258	0.1292
37.2237	153.75	0.1178	2.41355	38.71	28.42		0.144569	-10415	0.09997		1207	0.09998	0.1178
38.3522	13.93	0.2223	2.34509	3.51	29.86		0.363724	324	-0.07820		324	0.36150	0.2223
39.4479	48.29	0.3866	2.28244	12.16	30.24		0.546855	260	0.25135		194	0.58765	0.3866
40.1650	18.30	0.0974	2.24333	4.61	29.88		0.100414	-1275	0.09366		1197	0.09367	0.0974
42.0628	60.34	0.1081	2.14640	15.19	29.32		0.169530	1002	-0.07077		1001	0.10721	0.1081
43.2620	397.15	0.0738	2.08964	100.00	28.41		0.105803	7277	-0.05454		6790	0.01539	0.0738
46.8387	23.61	0.4058	1.93807	5.94	28.08		0.808176	132	-0.06186		132	0.73553	0.4058
48.4791	46.55	0.4823	1.87625	11.72	27.63		0.957355	110	-0.05903		110	0.85134	0.4823
55.2314	9.10	0.9449	1.66178	2.29	24.37		1.947382	53	-0.04556		53	1.55387	0.9449
60.9964	16.65	0.1736	1.51780	4.19	22.34		0.179068	-1348	0.12368		614	0.12370	0.1736
62.8615	121.62	0.1421	1.47717	30.62	23.20		0.183794	3315	0.06026		982	0.07522	0.1421
68.2716	9.81	0.1636	1.37270	2.47	19.38		0.168720	-1366	0.09979		688	0.09981	0.1636
69.6772	7.06	1.7705	1.34841	1.78	19.26		3.649025	30	-0.01637		30	2.22731	1.7705
75.3939	45.61	0.1299	1.25972	11.48	22.91		0.224913	783	-0.03886		783	0.08049	0.1299
77.3649	7.34	0.8882	1.23247	1.85	24.36		1.564142	77	-0.03517		77	0.80356	0.8882
79.3938	21.47	0.1871	1.20599	5.41	22.93		0.192928	-1384	0.09437		639	0.09438	0.1871
82.4493	6.70	0.5060	1.16887	1.69	20.59		0.926480	140	-0.03506		140	0.41682	0.5060

Referans Kodu Listesi

Ref. Cod	Score	Compound Name	Displacement [°2Th.]	Scale Factor	Total Lines	Matched Lines	New Matched Lines	Strong Unmatched Lines	Chemical Formula	Space Group	Crystal System	Cell Parameters	Delta d/d [‰]	RIR
98-020-0090	46	Lanthanum Hydroxide	0.000	0.183	24	13	13	0	H3 La1 O3	P 63/m	Hexagonal	a 6.547 - b 6.547 - c 3.854	0.000	4.618320
98-006-1318	45	Bunsenite	0.000	0.802	5	5	5	0	Ni1 O1	F m -3 m	Cubic	a 4.179 - b 4.179 - c 4.179	0.000	5.136625
98-018-4918	45	Nickel Oxide	0.000	0.802	5	5	5	0	Ni1 O1	F m -3 m	Cubic	a 4.179 - b 4.179 - c 4.179	0.000	5.136625
98-006-1545	45	Nickel Copper Oxide (.95/.05/1)	0.000	0.799	5	5	5	0	Cu0.05 Ni0.95 O1	F m -3 m	Cubic	a 4.179 - b 4.179 - c 4.179	0.000	5.170772
98-018-5284	43	Lithium Cobalt Nickel Oxide (0.05/0.02/0.93/1)	0.000	0.847	5	5	5	0	Co0.02 Li0.05 Ni0.93 O1	F m -3 m	Cubic	a 4.178 - b 4.178 - c 4.178	0.000	4.945850
98-000-9866	43	Bunsenite	0.000	0.827	5	5	5	0	Ni1 O1	F m -3 m	Cubic	a 4.178 - b 4.178 - c 4.178	0.000	5.161394
98-002-8957	43	Hongquiiite	0.000	0.864	5	5	5	0	O3.3271 Ti3.43	F m -3 m	Cubic	a 4.178 - b 4.178 - c 4.178	0.000	3.972614
98-007-7065	43	Nickel Zinc Oxide (0.85/0.15/1)	0.000	0.548	5	5	5	0	Ni0.85 O1 Zn0.15	F m -3 m	Cubic	a 4.181 - b 4.181 - c 4.181	0.000	5.301638
98-016-6107	43	Nickel Oxide (0.96/1)	0.000	0.716	5	5	5	0	Ni0.96 O1	R -3 m	Hexagonal	a 2.956 - b 2.956 - c 7.241	0.000	5.177017
98-016-6120	43	Nickel Oxide (1/0.81)	0.000	0.656	5	5	5	0	Ni1 O0.81	R -3 m	Hexagonal	a 2.956 - b 2.956 - c 7.237	0.000	4.865821
98-018-5285	42	Lithium Cobalt Nickel Oxide (0.05/0.05/0.90/1)	0.000	0.724	5	5	5	0	Co0.05 Li0.05 Ni0.9 O1	F m -3 m	Cubic	a 4.180 - b 4.180 - c 4.180	0.000	4.940554
98-002-4018	42	Bunsenite	0.000	0.711	5	5	5	0	Ni1 O1	F m -3 m	Cubic	a 4.180 - b 4.180 - c 4.180	0.000	5.137277
98-005-3931	42	Bunsenite	0.000	0.711	5	5	5	0	Ni1 O1	F m -3 m	Cubic	a 4.180 - b 4.180 - c 4.180	0.000	5.137277

98-024-5669	42 Lanthanum Tris(hydroxide)	0.000	0.197	23	13	13	0 H3 La1 O3	P 63/m	Hexagonal	4.180 a 6.532 - b 6.532 - c 3.855	0.000	4.334196
98-004-3740	42 Nickel Oxide	0.000	0.731	5	5	5	0 Ni1 O1	R -3 m	Hexagonal	a 5.911 - b 5.911 - c 7.226	0.000	5.135304
98-007-6959	42 Nickel Oxide	0.000	0.731	5	5	5	0 Ni1 O1	R -3 m	Hexagonal	a 2.955 - b 2.955 - c 7.227	0.000	5.135276
98-024-5674	42 Lanthanum Tris(hydroxide)	0.000	0.184	23	13	13	0 H3 La1 O3	P 63/m	Hexagonal	a 6.534 - b 6.534 - c 3.856	0.000	4.317122
98-064-7548	42 Titanium(II) Oxide	0.000	0.744	5	5	5	0 O1 Ti1	F m -3 m	Cubic	a 4.180 - b 4.180 - c 4.180	0.000	4.685225
98-064-7558	42 Titanium Oxide (1/1)	0.000	0.744	5	5	5	0 O1 Ti1	F m -3 m	Cubic	a 4.180 - b 4.180 - c 4.180	0.000	4.685225
98-018-3223	41 Lithium Iron Zinc Oxide (0.44/0.44/0.11/1)	0.000	0.787	5	5	5	0 Fe0.444 Li0.444 O0.999 Zn0.111	F m -3 m	Cubic	a 4.180 - b 4.180 - c 4.180	0.000	3.671053
98-024-5670	41 Lanthanum Tris(hydroxide)	0.000	0.195	23	13	13	0 H3 La1 O3	P 63/m	Hexagonal	a 6.528 - b 6.528 - c 3.853	0.000	4.264049
98-009-2140	41 Nickel Zinc Oxide (0.9/0.1/1)	0.000	0.480	3	3	3	0 Ni0.9 O1 Zn0.1	R -3 m	Hexagonal	a 2.957 - b 2.957 - c 7.244	0.000	1.770712
98-009-2144	40 Nickel Zinc Oxide (0.8/0.2/1)	0.000	0.254	3	3	3	0 Ni0.8 O1 Zn0.2	R -3 m	Hexagonal	a 2.960 - b 2.960 - c 7.251	0.000	2.259253
98-061-1812	40 Erbium Auride (1/4)	0.000	0.543	5	5	5	0 Au4 Er1	I 4/m	Tetragonal	a 6.636 - b 6.636 - c 4.149	0.000	25.333600
98-009-2143	40 Nickel Zinc Oxide (0.8/0.2/1)	0.000	0.320	4	4	4	0 Ni0.8 O1 Zn0.2	R -3 m	Hexagonal	a 2.959 - b 2.959 - c 7.246	0.000	2.410742
98-019-2946	40 Chromium Nitride (1/0.9)	0.000	0.485	5	5	5	0 Cr1 N0.9	F m -3 m	Cubic	a 4.176 - b 4.176 - c 4.176	0.000	4.072841
98-004-4310	39 Gadolinium Rhodium Boride	0.000	0.423	5	5	5	0 B1 Gd1 Rh3	P m -3 m	Cubic	a 4.182 - b 4.182 - c	0.000	16.120350

98-005-7152	39	(1/3/1) Hongquiite	0.000	0.796	5	5	5	0	O1 Ti0.91	F m -3 m	Cubic	4.182 a 4.177 - b 4.177 - c 4.177	0.000	4.279003
98-009-2134	39	Nickel Zinc Oxide (0.9/0.1/1)	0.000	0.416	5	5	5	0	Ni0.9 O1 Zn0.1	R -3 m	Hexagonal	a 2.953 - b 2.953 - c 7.230	0.000	3.096345
98-010-7735	39	Silver Mercury (0.65/0.35)	0.000	0.421	5	5	5	0	Ag0.65 Hg0.35	F m -3 m	Cubic	a 4.182 - b 4.182 - c 4.182	0.000	21.557490
98-001-7002	39	Nickel Oxide (1.88/2) - Subcell	0.000	0.538	5	5	5	0	Ni1.875 O2	C 1 2/m 1	Monoclinic	a 5.115 - b 2.958 - c 2.954 - alpha 90.000 - beta 125.190 - gamma 90.000	0.000	3.259408
98-009-2145	39	Nickel Zinc Oxide (0.8/0.2/1)	0.000	0.186	3	3	3	0	Ni0.8 O1 Zn0.2	R -3 m	Hexagonal	a 2.962 - b 2.962 - c 7.245	0.000	1.813299
98-016-7480	39	Lanthanum Trihydroxide	0.000	0.185	23	13	13	0	H3 La1 O3	P 63/m	Hexagonal	a 6.529 - b 6.529 - c 3.852	0.000	4.386536
98-007-7692	39	Hongquiite	0.000	0.767	5	5	5	0	O1 Ti1	F m -3 m	Cubic	a 4.177 - b 4.177 - c 4.177	0.000	4.683427
98-002-8955	39	Hongquiite	0.000	0.767	5	5	5	0	O3.38 Ti3.38	F m -3 m	Cubic	a 4.177 - b 4.177 - c 4.177	0.000	3.957496
98-006-1546	39	Nickel Copper Oxide (.90/.10/1)	0.000	0.430	5	5	5	0	Cu0.1 Ni0.9 O1	F m -3 m	Cubic	a 4.182 - b 4.182 - c 4.182	0.000	5.206904
98-015-8835	39	Bunsenite	0.000	0.317	5	5	5	0	Fe0.02 Ni0.98 O1	F m -3 m	Cubic	a 4.175 - b 4.175 - c 4.175	0.000	5.136087
98-015-8836	39	Bunsenite	0.000	0.316	5	5	5	0	Fe0.05 Ni0.95 O1	F m -3 m	Cubic	a 4.175 - b 4.175 - c 4.175	0.000	5.139321
98-008-7108	39	Nickel Oxide	0.000	0.538	5	5	5	0	Ni1 O1	F m -3 m	Cubic	a 8.353 - b 8.353 - c 8.353	0.000	5.191197
98-010-	39	Boron Gadolinium	0.000	0.716	5	5	5	0	B0.85 Gd1	P m -3 m	Cubic	a 4.178 - b	0.000	16.260310

8056		Rhodium (0.85/1/13)					Rh3				4.178 - c		
98-008-7107	39	Nickel Manganese Oxide (7.6/0.2/8)	0.000	0.318	5	5	5	0 Mn0.2 Ni7.6 O8	F m -3 m	Cubic	4.178 a 8.350 - b 8.350 - c 8.350	0.000	5.102444
98-006-1324	39	Bunsenite	0.000	0.728	5	5	5	0 Ni1 O1	F m -3 m	Cubic	a 4.177 - b 4.177 - c 4.177	0.000	5.135319
98-064-6098	39	Nickel Oxide	0.000	0.728	5	5	5	0 Ni1 O1	F m -3 m	Cubic	a 4.177 - b 4.177 - c 4.177	0.000	5.135319
98-026-0802	38	Nickel Zinc Oxide (0.9/0.1/1)	0.000	0.343	5	5	5	0 Ni0.9 O1 Zn0.1	F m -3 m	Cubic	a 4.184 - b 4.184 - c 4.184	0.000	4.565352
98-024-6910	38	Nickel(II) Oxide	0.000	0.730	5	5	5	0 Ni1 O1	C 1 2/m 1	Monoclinic	a 5.110 - b 2.956 - c 2.951 - alpha 90.000 - beta 125.200 - gamma 90.000	0.000	3.424518
98-009-2136	38	Nickel Zinc Oxide (0.9/0.1/1)	0.000	0.472	5	5	5	0 Ni0.9 O1 Zn0.1	R -3 m	Hexagonal	a 2.954 - b 2.954 - c 7.229	0.000	2.664867
98-007-6640	38	Nickel Oxide	0.000	0.535	5	5	5	0 Ni1 O1	R -3 m	Hexagonal	a 5.909 - b 5.909 - c 7.225	0.000	5.134652
98-061-9064	38	Vanadium Carbide (1/1)	0.000	0.277	5	5	5	0 C1 V1	F m -3 m	Cubic	a 4.175 - b 4.175 - c 4.175	0.000	4.371653
98-002-8910	38	Bunsenite	0.000	0.536	5	5	5	0 Ni1 O1	F m -3 m	Cubic	a 4.176 - b 4.176 - c 4.176	0.000	5.134664
98-006-1544	38	Bunsenite	0.000	0.536	5	5	5	0 Ni1 O1	F m -3 m	Cubic	a 4.176 - b 4.176 - c 4.176	0.000	5.134664
98-009-2141	38	Nickel Zinc Oxide (0.8/0.2/1)	0.000	0.347	5	5	5	0 Ni0.8 O1 Zn0.2	R -3 m	Hexagonal	a 2.959 - b 2.959 - c 7.248	0.000	2.946846
98-023-6791	38	Cobalt Nitride (1/1)	0.000	0.553	5	5	5	0 Co1 N1	F -4 3 m	Cubic	a 4.177 - b 4.177 - c 4.177	0.000	7.057676

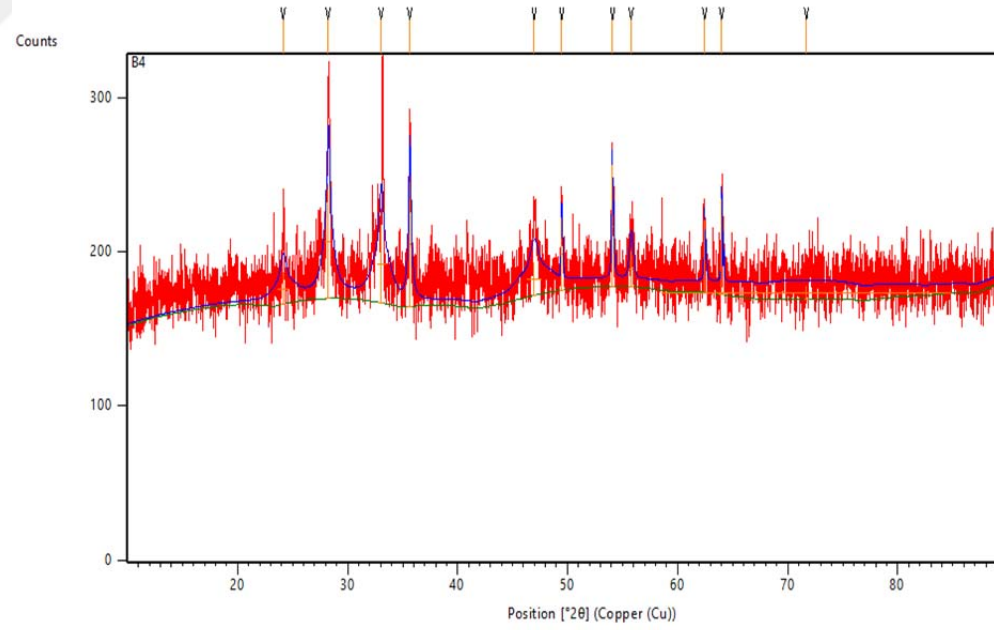
98-009-2142	38	Nickel Zinc Oxide (0.8/0.2/1)	0.000	0.346	5	5	5	0	Ni0.8 O1 Zn0.2	R -3 m	Hexagonal	a 2.959 - b 2.959 - c 7.248	0.000	3.014056
98-063-1538	38	Europium Palladium Silicide (1/3/0.25)	0.000	0.637	5	5	5	0	Eu1 Pd3 Si0.25	P m -3 m	Cubic	a 4.180 - b 4.180 - c 4.180	0.000	17.066220
98-018-3562	38	Dilithium Iron Titanium Tetraoxide	0.000	0.930	5	5	5	0	Fe1 Li2 O4 Ti1	F m -3 m	Cubic	a 4.178 - b 4.178 - c 4.178	0.000	3.350880
98-002-4289	38	Titanium Oxide (1/1.116)	0.000	0.331	5	5	5	0	O3.63816 Ti3.26	F m -3 m	Cubic	a 4.175 - b 4.175 - c 4.175	0.000	3.925308
98-017-3983	38	Cuprite	0.000	0.618	6	5	5	0	Cu2 O1	P n -3 m	Cubic	a 4.180 - b 4.180 - c 4.180	0.000	8.771386
98-024-5672	38	Lanthanum Tris(hydroxide)	0.000	0.172	23	13	13	0	H3 La1 O3	P 63/m	Hexagonal	a 6.524 - b 6.524 - c 3.857	0.000	4.315581
98-016-8427	38	Europium Palladium Boride (1/3/0.50)	0.000	0.692	5	5	5	0	B0.5 Eu1 Pd3	P m -3 m	Cubic	a 4.179 - b 4.179 - c 4.179	0.000	17.377220
98-002-4288	37	Titanium Oxide (1/0.99) - Ht	0.000	0.444	5	5	5	0	O0.995 Ti1	F m -3 m	Cubic	a 4.182 - b 4.182 - c 4.182	0.000	4.681007
98-007-6670	37	Nickel Oxide	0.000	0.536	5	5	5	0	Ni1 O1	C 1 2/m 1	Monoclinic	a 5.110 - b 2.956 - c 2.951 - alpha 90.000 - beta 125.250 - gamma 90.000	0.000	3.426634
98-018-8733	37	Titanium Oxide	0.000	0.444	5	5	5	0	O0.833 Ti0.833	F m -3 m	Cubic	a 4.182 - b 4.182 - c 4.182	0.000	3.903789
98-004-4242	37	Europium Rhodium Boride (1/3/1)	0.000	0.326	5	5	5	0	B1 Eu1 Rh3	P m -3 m	Cubic	a 4.184 - b 4.184 - c 4.184	0.000	16.450490
98-003-4242	37	Lanthanum Deuteriohydroxide	0.000	0.189	21	13	13	0	D3 La1 O3	P 63/m	Hexagonal	a 6.523 - b 6.523 - c 3.855	0.000	4.151512
98-061-9077	37	Vanadium Carbide (1/1)	0.000	0.602	5	5	5	0	C1 V1	F m -3 m	Cubic	a 4.177 - b 4.177 - c	0.000	4.228318

98-018-5388	37	Titanium Aluminium Carbide (3/1/1)	0.000	0.534	7	6	6	0	C1 Al1 Ti3	P m -3 m	Cubic	4.177 a 4.181 - b 4.181 - c 4.181	0.000	5.568933
98-009-2135	37	Nickel Zinc Oxide (0.9/0.1/1)	0.000	0.420	5	5	5	0	Ni0.9 O1 Zn0.1	R -3 m	Hexagonal	a 2.953 - b 2.953 - c 7.228	0.000	2.870772
98-010-9351	37	Nickel Oxide (15/16) - Supercell	0.000	0.619	8	5	5	0	Ni15 O16	I 41/a m d	Tetragonal	a 5.911 - b 5.911 - c 8.360	0.000	2.059478
98-009-2139	37	Nickel Zinc Oxide (0.9/0.1/1)	0.000	0.677	3	3	3	0	Ni0.9 O1 Zn0.1	R -3 m	Hexagonal	a 2.956 - b 2.956 - c 7.238	0.000	1.768324
98-009-2138	37	Nickel Zinc Oxide (0.9/0.1/1)	0.000	0.759	3	3	3	0	Ni0.9 O1 Zn0.1	R -3 m	Hexagonal	a 2.956 - b 2.956 - c 7.233	0.000	1.767226
98-009-2146	36	Nickel Zinc Oxide (0.8/0.2/1)	0.000	0.116	3	3	3	0	Ni0.8 O1 Zn0.2	R -3 m	Hexagonal	a 2.963 - b 2.963 - c 7.253	0.000	1.816171
98-062-6357	36	Chromium Titanium Nitride (1/1/2)	0.000	0.319	5	5	5	0	Cr1 N2 Ti1	F m -3 m	Cubic	a 4.184 - b 4.184 - c 4.184	0.000	4.606930
98-023-6801	35	Titanium Nitride (1/1)	0.000	0.325	5	5	5	0	N1 Ti1	F m -3 m	Cubic	a 4.184 - b 4.184 - c 4.184	0.000	4.360404
98-009-2133	35	Nickel Oxide	0.000	0.788	3	3	3	0	Ni1 O1	R -3 m	Hexagonal	a 2.955 - b 2.955 - c 7.232	0.000	1.729215
98-026-0806	35	Nickel Zinc Oxide (0.9/0.1/1)	0.000	0.233	5	5	5	0	Ni0.9 O1 Zn0.1	R -3 m	Hexagonal	a 2.954 - b 2.954 - c 7.280	0.000	4.612349
98-061-5320	35	Rhodium Terbium Boride (3/1/1)	0.000	0.322	5	5	5	0	B1 Rh3 Tb1	P m -3 m	Cubic	a 4.175 - b 4.175 - c 4.175	0.000	16.224160
98-026-0801	35	Nickel Zinc Oxide (0.9/0.1/1)	0.000	0.233	5	5	5	0	Ni0.9 O1 Zn0.1	F m -3 m	Cubic	a 4.186 - b 4.186 - c 4.186	0.000	4.688015
98-026-0807	35	Nickel Zinc Oxide (0.9/0.1/1)	0.000	0.270	5	5	5	0	Ni0.9 O1 Zn0.1	R -3 m	Hexagonal	a 2.956 - b 2.956 - c 7.263	0.000	4.542025
98-009-2147	34	Nickel Zinc Oxide (0.8/0.2/1)	0.000	0.138	3	3	3	0	Ni0.8 O1 Zn0.2	R -3 m	Hexagonal	a 2.962 - b 2.962 - c 7.249	0.000	1.814191

98-023-7294	34	Trirubidium Trifluoromolybdate - Alpha Phase	0.000	0.188	2	1	1	0	F3 Mo1 O3 Rb3	I 41	Tetragonal	a 20.075 - b 20.075 - c 36.169	0.000	6.097730
98-060-5341	34	Silver Mercury (2.6/1.4)	0.000	0.321	5	5	5	0	Ag2.6 Hg1.4	F m -3 m	Cubic	a 4.175 - b 4.175 - c 4.175	0.000	21.558610
98-010-5551	34	Hongquuite	0.000	0.345	5	5	5	0	O1 Ti1	F m -3 m	Cubic	a 4.184 - b 4.184 - c 4.184	0.000	4.687617
98-007-7697	34	Titanium Oxide (4/5)	0.000	0.473	8	7	7	0	O5 Ti4	I 4/m	Tetragonal	a 6.632 - b 6.632 - c 4.156	0.000	2.682093
98-061-4376	34	Gadolinium Rhodium Boride (1/3/1)	0.000	0.412	5	5	5	0	B1 Gd1 Rh3	P m -3 m	Cubic	a 4.183 - b 4.183 - c 4.183	0.000	16.120360
98-018-1021	34	Zinc Copper Oxide (0.85/0.15/1) - B1,hp	0.000	0.388	5	5	5	0	Cu0.146 O1 Zn0.854	F m -3 m	Cubic	a 4.183 - b 4.183 - c 4.183	0.000	6.184000
98-003-1584	34	Lanthanum Hydroxide	0.000	0.163	23	13	13	0	H3 La1 O3	P 63/m	Hexagonal	a 6.523 - b 6.523 - c 3.851	0.000	4.517538
98-024-5671	34	Lanthanum Tris(hydroxide)	0.000	0.183	23	12	12	0	H3 La1 O3	P 63/m	Hexagonal	a 6.517 - b 6.517 - c 3.853	0.000	4.322703
98-004-4154	33	Cerium Rhodium Boride (1/3/1)	0.000	0.493	5	5	5	0	B1 Ce1 Rh3	P m -3 m	Cubic	a 4.176 - b 4.176 - c 4.176	0.000	16.812190
98-018-5286	33	Lithium Cobalt Nickel Oxide (0.05/0.10/0.85/1)	0.000	0.419	5	5	5	0	Co0.1 Li0.05 Ni0.85 O1	F m -3 m	Cubic	a 4.183 - b 4.183 - c 4.183	0.000	4.931910
98-006-1547	33	Nickel Copper Oxide (.85/.15/1)	0.000	0.262	5	5	5	0	Cu0.15 Ni0.85 O1	F m -3 m	Cubic	a 4.185 - b 4.185 - c 4.185	0.000	5.243064
98-004-4324	33	Hongquuite	0.000	0.217	5	5	5	0	O1 Ti1	F m -3 m	Cubic	a 4.174 - b 4.174 - c 4.174	0.000	4.681623
98-026-0803	33	Nickel Zinc Oxide (0.9/0.1/1)	0.000	0.259	5	5	5	0	Ni0.9 O1 Zn0.1	F m -3 m	Cubic	a 4.185 - b 4.185 - c 4.185	0.000	5.395076
98-002-8956	33	Hongquuite	0.000	0.261	5	5	5	0	O3.0788 Ti3.58	F m -3 m	Cubic	a 4.185 - b 4.185 - c 4.185	0.000	4.054169
98-010-	32	Vanadium Carbide	0.000	0.166	5	5	5	0	C0.94 V1	F m -3 m	Cubic	a 4.173 - b	0.000	4.193973

8191	(1/0.94)										4.173 - c			
98-009-2137	32	Nickel Zinc Oxide (0.9/0.1/1)	0.000	0.658	4	4	4	0	Ni0.9 O1 Zn0.1	R -3 m	Hexagonal	4.173 a 2.954 - b 2.954 - c 7.232	0.000	2.137148
98-026-0808	32	Nickel Zinc Oxide (0.9/0.1/1)	0.000	0.313	5	5	5	0	Ni0.9 O1 Zn0.1	R -3 m	Hexagonal	7.267 a 2.955 - b 2.955 - c 7.267	0.000	5.287402
98-009-2132	32	Nickel Oxide	0.000	0.500	3	3	3	0	Ni1 O1	R -3 m	Hexagonal	a 2.954 - b 2.954 - c 7.227	0.000	1.727076
98-002-9233	32	Lithium Cobalt Oxide (.210/.790/1)	0.000	0.218	5	5	5	0	Co0.79 Li0.21 O1	F m -3 m	Cubic	a 4.174 - b 4.174 - c 4.174	0.000	4.246570
98-042-5820	32	Dipotassium Thorium Hexafluoride	0.000	0.182	20	9	9	0	F6 K2 Th1	P -6 2 m	Hexagonal	a 6.573 - b 6.573 - c 3.823	0.000	10.686280
98-006-0483	32	Hongquuite	0.000	0.269	5	5	5	0	O0.857 Ti0.857	F m -3 m	Cubic	a 4.185 - b 4.185 - c 4.185	0.000	4.017797

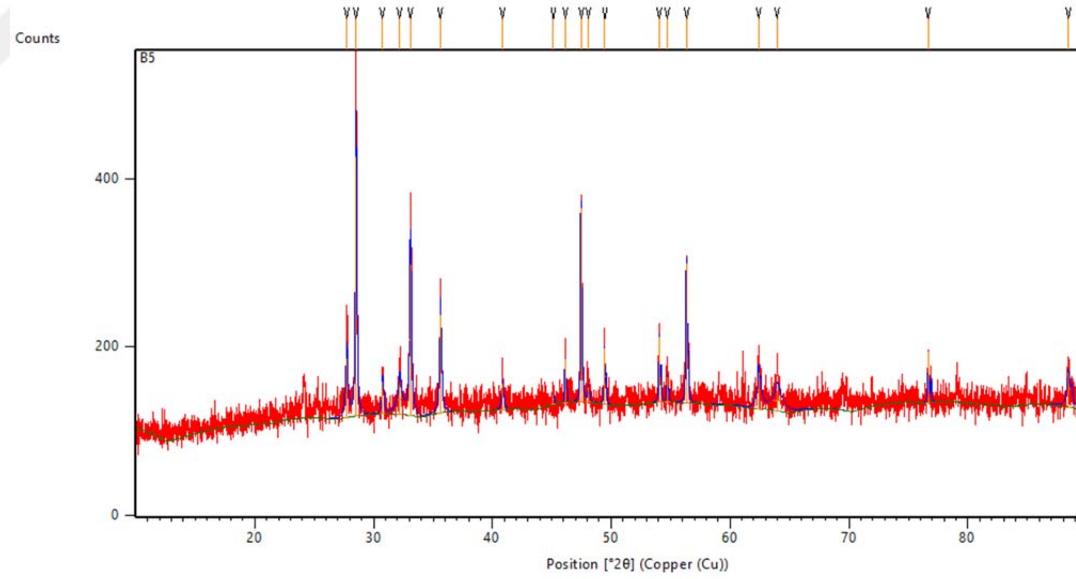
EK 1.10 LaTiO₃' in XRD Analiz Sonuçları



Pik Listesi

Pos. [°2θ]	Height [cts]	FWHM Left [°2θ]	d-spacing [Å]	Rel. Int. [%]	Backgr.[cts]	Matched by	Integral Breadth [°2θ]	Crystallite Size [Å]	Micro Strain [%]	h k l	Crystallite Size only [Å]	Micro Strain only [%]	FWHM Total [°2θ]
24.1599	20.55	1.0135	3.68077	25.33	166.00		2.088853	45	-0.10707		45	4.08649	1.0135
28.2397	74.34	0.4816	3.15760	91.62	169.99		0.935359	106	-0.10571		106	1.48594	0.4816
33.0545	50.57	0.7320	2.70783	62.33	166.80		1.508533	65	-0.08428		65	2.09898	0.7320
35.6259	81.14	0.2091	2.51806	100.00	164.37		0.383291	301	-0.08463		301	0.41767	0.2091
46.9653	21.56	1.3440	1.93313	26.58	172.03		2.770010	36	-0.04225		36	2.69436	1.3440
49.4616	47.43	0.1142	1.84126	58.46	175.42		0.119580	-1310	0.09622		957	0.09623	0.1142
54.0683	78.83	0.1120	1.69475	97.14	177.60		0.170327	1174	-0.04516		1172	0.07228	0.1120
55.7609	22.95	0.3672	1.64725	28.28	177.52		0.452882	741	0.24717		255	0.32272	0.3672
62.4520	47.12	0.0714	1.48587	58.07	173.94		0.127410	2063	-0.04679		2055	0.03616	0.0714
64.0165	61.79	0.0628	1.45328	76.15	172.59		0.097630	5701	-0.04501		5519	0.01317	0.0628
71.6897	8.17	26.2803	1.31542	10.07	169.67		54.162700	2	0.55097		2	32.52153	26.2803

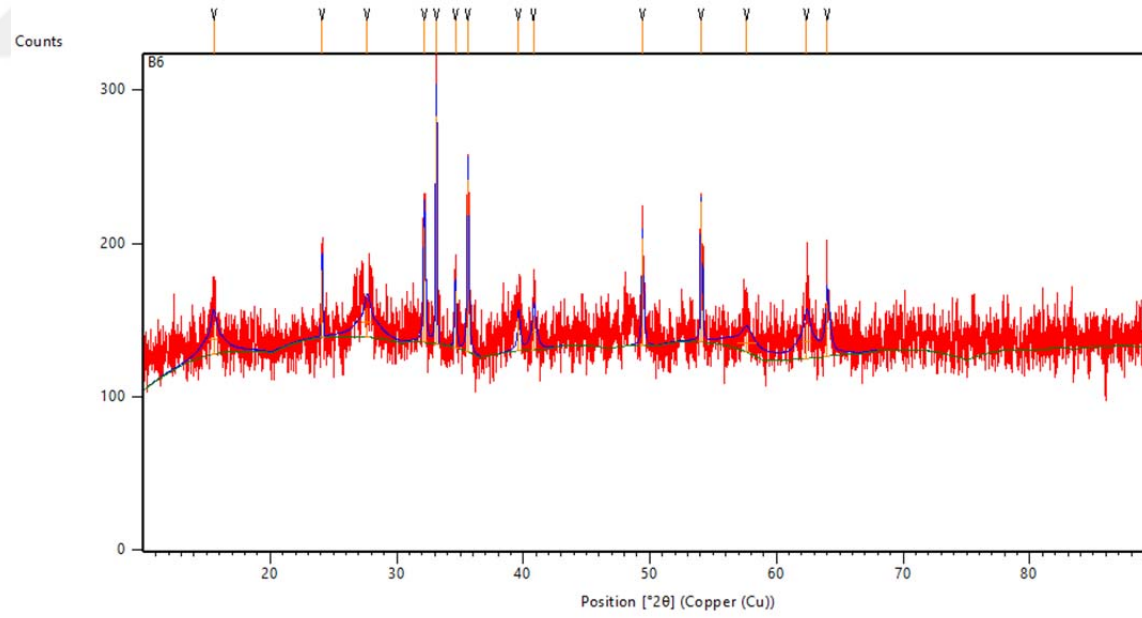
EK 1.11. $\text{Sm}_2\text{SnTiO}_6$ ' in XRD Analiz Sonuçları



Pik Listesi

Pos. [°2θ]	Height [cts]	FWHM Left [°2θ]	d-spacing [Å]	Rel. Int. [%]	Backgr.[cts]	Matched by	Integral Breadth [°2θ]	Crystallite Size [Å]	Micro Strain [%]	h k l	Crystallite Size only [Å]	Micro Strain only [%]	FWHM Total [°2θ]
27.7279	69.81	0.1487	3.21471	22.63	116.16		0.280740	443	-0.11105		443	0.36262	0.1487
28.5131	308.53	0.1077	3.12794	100.00	118.05		0.166954	1034	-0.10171		1033	0.15142	0.1077
30.7516	39.01	0.0943	2.90516	12.64	120.78		0.178851	881	-0.09956		881	0.16495	0.0943
32.1853	35.55	0.2803	2.77894	11.52	120.00		0.569059	187	-0.09379		187	0.74462	0.2803
33.0883	179.55	0.1445	2.70514	58.20	118.64		0.239016	562	-0.09194		562	0.24078	0.1445
35.6122	117.07	0.1053	2.51899	37.95	121.53		0.216565	655	-0.08497		654	0.19245	0.1053
40.8303	31.02	0.1209	2.20830	10.06	125.54		0.196511	774	-0.07335		774	0.14269	0.1209
45.1364	12.61	0.0750	2.00712	4.09	131.63		0.089652	-2372	0.02263		4434	0.02263	0.0750
46.1380	52.65	0.0990	1.96585	17.06	133.92		0.109511	-1611	0.07962		1234	0.07963	0.0990
47.4673	230.99	0.0699	1.91386	74.87	134.99		0.115748	2357	-0.06244		2343	0.04084	0.0699
48.0776	18.22	0.1127	1.89098	5.91	134.74		0.163915	1486	-0.03110		1483	0.06377	0.1127
49.4462	66.03	0.0750	1.84179	21.40	132.11		0.124854	1952	-0.05976		1944	0.04737	0.0750
54.0517	78.52	0.0940	1.69523	25.45	134.36		0.134301	2877	-0.03371		2853	0.02971	0.0940
54.7222	30.69	0.1131	1.67603	9.95	134.65		0.139188	-8594	0.05933		1412	0.05933	0.1131
56.3254	165.76	0.0836	1.63207	53.72	133.62		0.135432	1687	-0.05206		1682	0.04851	0.0836
62.4006	43.39	0.1878	1.48697	14.06	126.81		0.386988	335	-0.04661		335	0.22222	0.1878
63.9569	24.13	0.5887	1.45449	7.82	124.16		1.213334	92	-0.04339		92	0.79005	0.5887
76.6782	60.49	0.0898	1.24179	19.61	134.11		0.130810	3774	-0.03021		3732	0.01664	0.0898
88.4495	41.26	0.2381	1.10441	13.37	128.47		0.399985	399	-0.03375		399	0.13848	0.2381

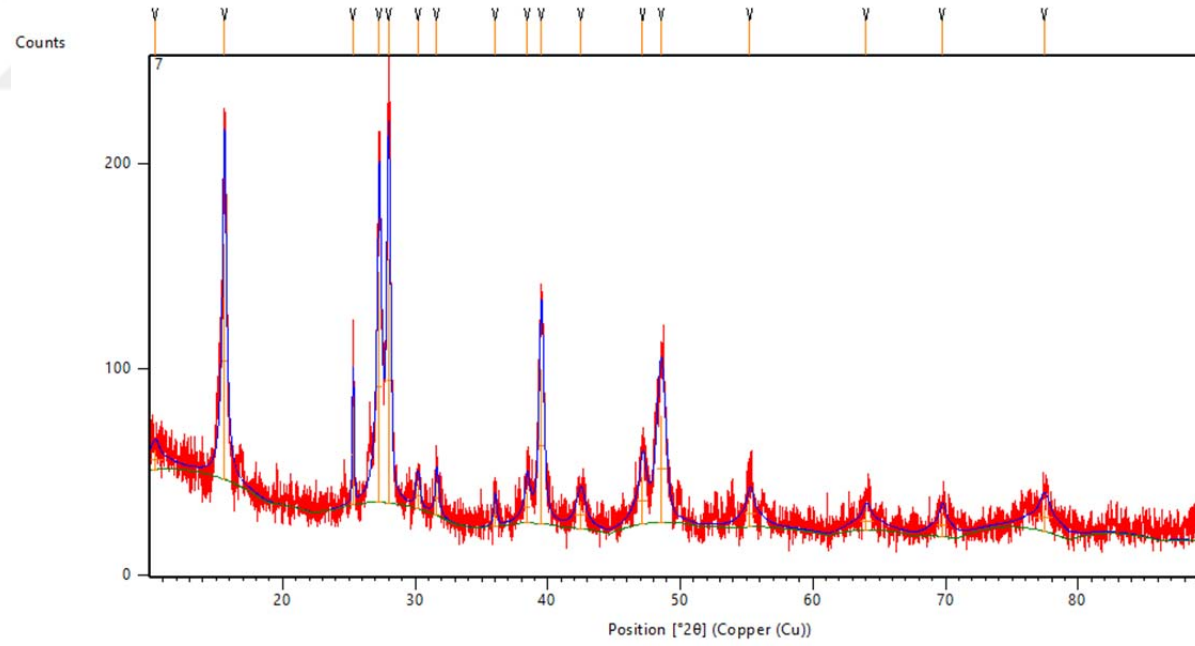
EK 1.12. $\text{Ce}_2\text{SnTiO}_6$ 'in XRD Analiz Sonuçları



Pik Listesi

Pos. [°2θ]	Height [cts]	FWHM Left [°2θ]	d-spacing [Å]	Rel. Int. [%]	Backgr.[cts]	Matched by	Integral Breadth [°2θ]	Crystallite Size [Å]	Micro Strain [%]	h k l	Crystallite Size only [Å]	Micro Strain only [%]	FWHM Total [°2θ]
15.5501	19.38	0.8180	5.69392	13.03	127.59		1.663366	56	-0.18453		56	5.04836	0.8180
24.1062	44.56	0.1006	3.68886	29.96	138.38		0.108373	-1295	0.17243		1070	0.17245	0.1006
27.6698	19.04	0.8826	3.22133	12.80	138.74		1.818912	52	-0.09744		52	3.07583	0.8826
32.1624	75.28	0.1436	2.78087	50.61	135.26		0.219679	685	-0.07192		685	0.20306	0.1436
33.1208	148.74	0.1135	2.70256	100.00	134.36		0.150977	3698	0.07081		1409	0.09588	0.1135
34.6137	37.04	0.1412	2.58934	24.90	131.89		0.186371	2059	0.10991		844	0.15337	0.1412
35.6048	112.57	0.1004	2.51950	75.69	129.14		0.177252	905	-0.08504		904	0.13936	0.1004
39.6162	21.64	0.1426	2.27314	14.55	129.74		0.276853	465	-0.07567		465	0.24430	0.1426
40.8118	23.08	0.3019	2.20926	15.52	130.39		0.573352	190	-0.07260		190	0.58260	0.3019
49.4226	70.86	0.0940	1.84262	47.64	133.19		0.165222	1080	-0.05977		1079	0.08541	0.0940
54.0378	91.85	0.0859	1.69563	61.75	135.52		0.123889	3518	-0.03963		3474	0.02440	0.0859
57.6433	11.26	1.5087	1.59785	7.57	128.88		3.109293	33	-0.02918		33	2.39400	1.5087
62.3619	21.96	0.7679	1.48780	14.77	124.72		1.569267	69	-0.04281		69	1.07082	0.7679
63.9979	36.29	0.2146	1.45366	24.40	126.19		0.423219	303	-0.04539		303	0.24027	0.2146

EK 1.13. $\text{La}_2\text{SnTiO}_6$ 'in XRD Analiz Sonuçları



Pik Listesi

Pos. [°2θ]	Height [cts]	FWHM Left [°2θ]	d-spacing [Å]	Rel. Int. [%]	Backgr.[cts]	Matched by	Integral Breadth [°2θ]	Crystallite Size [Å]	Micro Strain [%]	h k l	Crystallite Size only [Å]	Micro Strain only [%]	FWHM Total [°2θ]
10.3958	9.93	1.1832	8.50257	8.35	51.25		2.438435	38	-0.24099		38	11.27309	1.1832
15.6104	114.81	0.3627	5.67209	96.61	46.45		0.584988	176	-0.20195		176	1.61217	0.3627
25.3045	48.11	0.1495	3.51681	40.48	34.21		0.167320	-1998	0.26000		676	0.26003	0.1495
27.2818	111.79	0.3705	3.26625	94.07	35.34		0.635047	163	-0.11166		163	1.00271	0.3705
27.9878	118.84	0.3175	3.18544	100.00	35.04		0.409708	554	0.40470		262	0.60694	0.3175
30.1925	11.65	0.3638	2.95767	9.80	32.40		0.430371	1222	0.52147		246	0.60105	0.3638
31.6211	16.60	0.3002	2.82723	13.97	29.05		0.460913	251	0.07476		246	0.57388	0.3002
36.0197	11.23	0.2455	2.49142	9.45	23.85		0.327991	641	0.21017		356	0.35018	0.2455
38.4304	15.33	0.4749	2.34050	12.90	25.34		0.804211	129	-0.07654		129	0.90954	0.4749
39.4853	74.96	0.4056	2.28037	63.08	24.98		0.573140	247	0.26596		184	0.62000	0.4056
42.4645	13.37	0.8310	2.12702	11.25	22.59		1.312390	77	-0.06586		77	1.38387	0.8310
47.1590	22.93	0.7228	1.92564	19.29	24.91		1.332694	77	-0.05874		77	1.25180	0.7228
48.5462	52.28	0.7611	1.87381	43.99	25.63		0.946023	252	0.60160		109	0.86032	0.7611
55.2519	13.26	0.8339	1.66121	11.16	23.41		1.637562	64	-0.04790		64	1.29610	0.8339
64.0000	8.87	1.0977	1.45362	7.47	21.90		2.262414	48	-0.03706		48	1.51849	1.0977
69.7422	11.25	0.7708	1.34731	9.47	18.80		1.588494	72	-0.03841		72	0.94048	0.7708
77.4220	12.80	1.3077	1.23170	10.77	21.37		2.695187	44	-0.02878		44	1.41559	1.3077