

JOTCSA, volume 2, issue 2, 2015



TURKISH CHEMICAL SOCIETY
Journal of the Turkish Chemical Society, Section A: Chemistry

Owned by the Turkish Chemical Society

Correspondence e-mail: jotcsa@turchemsoc.org

Founded in February, 2014

SYMMETRY FACTOR FOR ELECTRONIC CONFIGURATION IN Ca₃Co₄O₉ SYSTEM

Ca₃Co₄O₉ SİSTEMİNİN ELEKTRONİK KONFIGÜRASYONU İÇİN SİMETRİ FAKTÖRÜ

Nazlı KARAMAN^{1*}, Ali BAYRİ²

¹Adiyaman University, Faculty of Science and Art, Physics Department, 02040,
Adiyaman, TURKEY

²Inonu University, Faculty of Science and Art, Physics Department, 44280,
Malatya, TURKEY

*Corresponding author. nkaraman@adiyaman.edu.tr

ABSTRACT

This study deals with the electronic configuration of Co ions in misfit $\text{Ca}_3\text{Co}_4\text{O}_9$ system at high temperature. The magnetic behaviour of this system shows an anomaly around 700 K. It is believed that this anomaly is caused by spin state transitions of Co^{2+} , Co^{3+} and Co^{4+} ions in the system. A detailed study of the symmetry properties of the wave functions of Co ions in an octahedral environment indicates that Co^{4+} ion prefers high spin configuration earlier than Co^{3+} ions. On the other hand the ligand field splitting of d orbitals in an octahedral environment shows that high spin configuration of Co^{3+} ions should be populated earlier than the high spin state of Co^{4+} ions.

Keywords

Spin State Transition, Molecular Symmetry, Cobalt Ions.

ÖZET

Bu çalışma, $\text{Ca}_3\text{Co}_4\text{O}_9$ sisteminde yüksek sıcaklıklardaki Co iyonlarının elektronik konfigürasyonlarıyla ilgilenir. Bu sistemin manyetik davranışı 700 K civarında bir anomali gösterir. Bu anomalinin sistemdeki Co^{2+} , Co^{3+} ve Co^{4+} iyonlarının spin durum geçişlerinden kaynaklandığı düşünülmektedir. Octahedral bir alandaki Co iyonlarının dalga fonksiyonlarının simetri özellikleri; Co^{4+} iyonlarının, Co^{3+} iyonlarından daha önce yüksek spin konfigürasyonunu tercih edeceğini göstermektedir. Ancak octahedral alandaki d orbitallerinin ligand alan yarıлма enerjileri; Co^{3+} iyonlarının yüksek spin konfigürasyonlarının, Co^{4+} iyonlarının yüksek spin konfigürasyonlarından daha önce gerçekleşeceğini göstermektedir.

Anahtar Kelimeler

Spin Durum Geçişleri, Moleküler Simetri, Kobalt İyonları.