



# Beynəlxalq Konfrans "Fizika-2005" International Conference "Fizika-2005" Международная Конференция "Fizika-2005"

7 - 9  
Iyun  
June 2005  
Июнь

№53  
səhifə  
page 205-207  
стр.

Bakı, Azərbaycan

Baku, Azerbaijan

Баку, Азербайджан

## FeInSe<sub>3</sub>, Ga<sub>0.5</sub>Fe<sub>0.75</sub>In<sub>0.75</sub>Se<sub>3</sub>, GaFeSe<sub>3</sub> TƏRKİBLİ MAQNİT YARIMKEÇİRİCİLƏRİN SİNTEZİ VƏ RENTGENQURULUŞ XÜSUSİYYƏTLƏRİ

HÜSEYNOV Q.H., İBRAHİMQIZI Ş., SULTANOV Q.D., MƏHƏRRƏMOVA F.Q.

*AMEA Fizika İnstitutu. Bakı AZ-1143, H.Cavid 33.  
E-mail gguseynov@yandex.ru*

In<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> və GaInSe<sub>3</sub> tipli yarımkeçiricilərdə GaIn atomlarının Fe atomları ilə əvəz olunması yolu ilə InFeSe<sub>3</sub>, Ga<sub>0.5</sub>Fe<sub>0.75</sub>In<sub>0.75</sub>Se<sub>3</sub>, GaFeSe<sub>3</sub> tərkibli maqnit yarımkeçiriciləri sintez edilmişdir. Rentgenquruluş analizi əsasında müəyyən edilmişdir ki, birinci iki tərkib romboedrik simmetriyalı izomorf quruluşda kristallaşır. Qəfəs sabitləri uyğun olaraq heksaqonal aspektdə a=4,022(24) c=38, 920A<sup>0</sup>(11), a=3,950 (3) c=38,629 A<sup>0</sup> (24) və kubik qəfəsdə kristallaşan GaFeSe<sub>3</sub> üçün a= 11,020 A<sup>0</sup> (09)-dir.

Məlumdur ki, dövrü sistemin III<sup>B</sup> qrup elementlərinin polihalkogenidləri sırasında M<sub>2</sub>X<sub>3</sub> tipli (M-In, Ga, TL, Al; X-S, Se, Te) yarımkeçirici maddələr bir çox fiziki-kimyəvi xüsusiyyətlərinə görə olduqca maraqlı tədqiqat obyektləri kimi tədqiqatçıların diqqətini cəlb etməkdədir. Qeyd edək ki, göstərilən tip yarımkeçiricilərin əsas xüsusiyyətlərindən biri onların fiziki xassələrinin aşqarların qatılığından olduqca az asılı olmasıdır. Buda, şübhəsiz ki, bu tip birləşmələrdə quruluş defektlərinin olduqca yüksək, təxminən 5,5·10<sup>21</sup>sm<sup>-1</sup> tərkibdə olması ilə bağlıdır. Əlbəttə, bu tip yarımkeçiricilərin ümumi mənzərəsi N.A.Qoryunovanın məlum monoqrafiyasında [ 1 ] ətraflı surətdə müzakirə olunmuşdur. Lakin onu da qeyd etmək lazımdır ki, bu birləşmələrdə "xüsusi defektlərin hədsiz çox olması, nəticə etibarilə onlarda istilikkeçirmənin və yükdaşıyıcıların yürüklüyünün cüzi olmasına səbəb olur.

Əlbəttə, ilk baxışdan göstərilən xüsusiyyətlər müəyyən mənada mübahisələrə səbəb olsalar da, bütün bunlar reallıqla uyğun olan həqiqətdir və tədqiqatçıların da əsas vəzifəsi bu reallıqları tədqiqat məqsədlərinə uyğun istiqamətlərə yönəltməklə lazım olan xassəyə uyğun materialların kimyəvi reallaşması üçün optimal şəraitin yaradılmasına nail olmaqdan ibarətdir. Bu mənada məqsədyönlü texnologiya və rentgenquruluş tədqiqatların sistemli formada aparılması xüsusi əhəmiyyət kəsb edə bilər. Qeyd edək ki, məhz belə yanaşma əsasında aparılan tədqiqatlar nəticəsində Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub>–In<sub>2</sub>S<sub>3</sub> sistemində ümumi düsturu Ga<sub>1-x</sub>In<sub>1+x</sub>S<sub>3</sub> tipli monokristallarda orijinal rombik, şpinel quruluşlu kubik, müxtəlif (qarışıq) paketli triqonal quruluş və üç heksaqonal modifikasiyada çoxsaylı politip quruluşlar alınmış və onların kristal quruluşları açılmışdır [2-4]. Sonradan tipik ftohəssas yarımkeçiricilər olan (GaIn)<sub>3</sub>-ün əsasında tetraedrik və oktaedrik kationları mis və dəmir atomları ilə əvəz etməklə həm

əvəzləmənin quruluş əmələgəlmə prosesinə təsiri, həm də maqnit xassələrinin səciyyəsi öyrənilmişdir [5 - 6].

Təqdim olunan iş yuxarıda göstərilənlər əsasında selenli analoqların sintez edilməsi və alınan fazaların quruluş xüsusiyyətlərinə həsr olunmuşdur.

### SİNTEZ.

Qarşıya qoyulmuş məqsədə uyğun olaraq ilk növbədə iki kənar və bir aralıq fazanın – yəni FeGaSe<sub>3</sub>, FeInSe<sub>3</sub>, Ga<sub>0.5</sub>Fe<sub>0.75</sub>In<sub>0.75</sub>Se<sub>3</sub> tərkiblərin sintezinin kimyəvi reallaşması yerinə yetirilmişdir. Qeyd edək ki, hər üç tərkibin sintezi eyni şəraitdə aparılmışdır, yəni stexiometrik tərkibə uyğun olaraq tərkibə daxil olan yüksək kimyəvi təmizliyə malik Ga, In, Fe, Se ümumi çəkisi 5 qrama uyğun çəkilərək yüksək keyfiyyətli kvarts borudan hazırlanmış ampulalara doldurulmuş, havası 10<sup>-4</sup>ç.s tərtibinə qədər sorulmuş və ağzı bağlanaraq bir zonalı sintez peçinə yerləşdirilmişdir. Hər tərtibə uyğun ampula ayrı-ayrı sınaqlardan keçirilmişdir.

Sintez prosesinin gedişi aşağıdakı qaydada aparılmışdır. Ampula peçə yerləşdirildikdən sonra onun temperaturu tədricən 500<sup>0</sup>Ç-ə qədər qaldırılmış və bu temperaturda 3 saat saxlanmışdır. Se buxarının mütəmadi olaraq reaksiya zonasına yönəltmək üçün ampulanın bir ucu peçdən kənarında saxlanmış və daima su ilə soyudulmuşdur. Sonra peçin temperaturu 700<sup>0</sup> Ç-ə qədər qaldırılmış və 2 saat müddətində ampulanın ucuna toplanan Se buxarı soyutma yolu ilə reaksiya zonasına qovulmuşdur. Se buxarı tam tükəndikdən sonra ampula peçin daxilinə ötürülmüş, peçin ağzı bağlanmış, temperatur 1000<sup>0</sup> Ç-ə qaldırılmış və 1,5 saat həmin temperaturda saxlandıqdan sonra temperatur 600<sup>0</sup>Ç endirilərək 20 günlük tablama prosesində saxlanmışdır. Təcrübə bitdikdən sonra ampulalar peçdən çıxarılmış, sındırılaraq alınan nümunələrə vizual və mikroskopik baxış keçirilmişdir. Məlum olmuşdur ki, alınan

nümunələr aqreقات görünüşünə görə iki formadadır: GaFeSe<sub>3</sub> dənəvari aqreقات formasında, InFeSe<sub>3</sub> və Ga<sub>0.5</sub>Fe<sub>0.75</sub>In<sub>0.75</sub>Se–laylı aqreقات formasındadır. Qeyd edək ki, üçüncü nümunə bütövlükdə laylı monokristal bloklardan ibarətdir və bu da onun səthindən rentgen difraksiyası almaq imkanı verir. İkinci nümunə bloklardan ibarət olsa da, keyfiyyətə üçüncüdən aşağıdır.

Ona görə də ikinci nümunədən öncə həm Laue rentgenoqramı, həm də səthdən əksolma rentgenoqramı alınmış, onun heksaqonal sinqoniyada kristallaşması, səthdən əksolma rentgenoqramında isə *OOI* tipli piklər olduğundan asanlıqla kristalın “ç qəfəs sabiqi təyin olunmuşdur. Sonra hər üç nümunədən həb hazırlanmış və avtodifraktometrə ÇuK<sub>α</sub> antikatodunda difraktoqramlar alınmışdır. 10°<2θ< 80° intervalında fiksə edilmiş bütün difraksiya pikləri üçün atom müstəviləri arasındakı məsafələr, onların intensivlikləri hesablanmış və onlar əsasında difraksiya piklərinə uyğun olan indekslər (h k l) və kristalların qəfəs sabitləri hesablanmışdır. Hesablanmış əsas kristalloqrafik məlumatlar 1-3 cədvəllərdə verilmişdir.

Aparılmış təcrübələr və onlar üzərində hesablamalar əsasında müəyyən edilmişdir ki, GaFeSe<sub>3</sub> sulfid analoqundan fərqli olaraq kubik sinqoniyanın Im3m fəza qrupunda kristallaşır. Onun qəfəs sabiti a=11,02 E, V<sub>qəfəs</sub> = 1331,7E<sup>3</sup>, bir selenə düşən həcm V<sub>se</sub> = 41,5 E<sup>3</sup>, sıx

yerləşmə əmsali K<sub>y</sub>=0,732 x 100%, rentgen sıxlığı ρ<sub>τ</sub> = 4,45 gr/sm<sup>3</sup>, qəfəsə düşən formula vahidinin sayı z=10,67; InFeSe<sub>3</sub> romboedrik sinqoniyanın R3m fəza qrupunda kristallaşır və onun heksaqonal aspektdə qəfəs sabitləri a = 4,00, c = 39,00E, V<sub>q</sub> = 541E, ρ<sub>τ</sub> = 4,67 gr/sm<sup>3</sup>, V<sub>se</sub> = 45,5 E<sup>3</sup>, K<sub>y</sub>=0,661x100%, z=4; Ga<sub>0.5</sub>In<sub>0.75</sub>Fe<sub>0.75</sub>Se<sub>3</sub> həmçinin romboedrik qəfəsdə R3m fəza qrupunda kristallaşır, onun heksaqonal aspektdə qəfəs sabitləri a = 3,958, c = 38,70E, V<sub>q</sub> = 525E<sup>3</sup>, V<sub>se</sub> = 43,4 E<sup>3</sup>, ρ<sub>τ</sub> = 4,7 gr/sm<sup>3</sup>, K<sub>y</sub>=0,690 x 100%, z=4.

Aлынmış nəticələrin analizi və aparılmış quruluş hesablatları əsasında belə nəticəyə gəlinmişdir ki, ikinci və üçüncü tərkibin quruluşları eynidir, qəfəs üçpaketli laylı quruluşa uyğundur və quruluş xüsusiyyətinə görə FeIn<sub>2</sub>Se<sub>4</sub> | 7 | tiplidir. Quruluşlar eyni olsalar da atomların tetraedrik və oktaedrik boşluqlarda paylanma əmsalları müxtəlifdir. Atomların paketlərdə paylanma ardıcılıqları aşağıdakı sxem üzrədir:

FeInSe<sub>3</sub> üçün Se – 1/2 Fe – 1/3 In – Se – In – Se 5/6 Fe – Se<sub>m</sub>  
Ga<sub>0.5</sub>Fe<sub>0.75</sub>In<sub>0.75</sub>Se<sub>3</sub> üçün ... Se 5/6 Fe – Se – In – Se – 2/3 Ga – 1/6 Fe – Se

GaFeSe<sub>3</sub> isə həcmdə mərkəzləşmiş şpinel quruluşa malikdir.

Qeyd edək ki, bu modellərin maqnit xassələrinə həsr edilən məqalə çapa hazırlanır.

Cədvəl 1 FeInSe<sub>3</sub>-ün rentgen difraksiyasından hesablanmış kristalloqrafik konstantları

N	2θ	h k l	Inten	D təcrü	d hesab	Δd
1.	20.338	0 0 9	14.1	4.3630	4.3249	-0.1810
2.	25.594	1 0 0	15.1	3.4777	3.4827	0.0374
3.	25.915	1 0 2	6.7	3.4354	3.4283	-0.0546
4.	27.976	1 0 5	100.0	3.1867	3.1791	-0.0686
5.	28.605	0 1 6	13.4	3.1181	3.0964	-0.0217
6.	31.675	1 0 8	6.9	2.8226	2.8320	0.1082
7.	32.335	0 0. 14	6.9	2.7664	2.7803	0.1657
8.	36.107	1 0. 11	13.2	2.4856	2.4822	-0.0519
9.	41.452	1 0. 14	14.5	2.1766	2.1728	-0.0749
10.	45.072	1 1 0	40.3	2.0098	2.0108	0.0221
11.	47.363	1 1 6	8.0	1.9178	1.9206	0.0727
12.	48.225	1 1 7	4.4	1.8855	1.8909	0.1460
13.	50.045	1 1 9	16.7	1.8212	1.8233	0.0636
14.	51.577	0 0. 22	7.1	1.7706	1.7693	-0.0413
15.	52.615	2 0 0	6.6	1.7381	1.7414	0.1068
16.	53.945	2 0 5	18.0	1.6983	1.6994	0.0354
17.	58.039	2 0. 10	6.6	1.5879	1.5895	0.0658
18.	59.139	2 0. 11	6.6	1.5610	1.5624	0.0608
19.	62.915	2 0. 14	8.5	1.4760	1.4758	-0.0118
20.	71.783	2 1 0	6.8	1.3139	1.3163	0.1516
21.	72.844	2 1 5	15.9	1.2974	1.2979	0.0342
22.	80.619	2 1. 14	9.9	1.1907	1.1897	-0.0801
23.	83.119	3 0 0	9.9	1.1611	1.1609	-0.0200
24.	99.942	1 0. 37	6.6	1.0060	1.0071	0.1469
25.	106.690	3 1 4	7.1	0.9602	0.9612	0.1650

Cədvəl 2  $Ga_{0.5}Fe_{0.75}In_{0.75}Se_3$ -ün rentgen difraksiyasından hesablanmış kristalloqrafik konstantları

N	$2\theta$	h k l	Inten	D təcürü	d hesab	$\Delta d$
1.	20.603	0 0 9	3.1	4.3076	4.2921	-0.0752
2.	26080	1 0 1	4.2	3.4140	3.4110	-0.0231
3.	28.497	1 0 5	100.0	3.1297	3.1306	0.0086
4.	36.663	1 0. 11	3.1	2.4492	2.4517	0.0390
5.	42.033	1 0. 14	3.8	2.1479	2.1485	0.0137
6.	45.861	1 1 0	23.1	1.9771	1.9771	-0.0006
7.	50.805	1 1 9	11.3	1.7957	1.7957	0.0014
8.	53.599	2 0 1	0.9	1.7085	1.7105	0.0685
9.	54.420	2 0 4	1.8	1.6846	1.6859	0.0442
10.	54.905	2 0 5	12.2	1.6709	1.6716	0.0266
11.	60.078	2 0. 11	1.1	1.5388	1.5390	0.0099
12.	63.895	1 0. 24	1.3	1.4557	1.4567	0.0444
13.	73.114	2 1 0	1.1	1.2933	1.2943	0.0675
14.	74.202	2 1 5	7.8	1.2770	1.2765	-0.0321
15.	78.773	2 1. 11	1.5	1.2139	1.2144	0.0387
16.	82.097	2 0. 24	1.1	1.1730	1.1727	-0.0228
17.	84.805	3 0 0	7.1	1.1423	1.1415	-0.0781
18.	88.440	1 1. 29	1.4	1.1045	1.1047	0.0189

Cədvəl 3  $Fe GaSe_3$ -ün rentgen difraksiyasından hesablanmış kristalloqrafik konstantları

N	$2\theta$	h k l	Inten	D təcürü	d hesab	$\Delta d$
1.	16.155	2 0 0	5.9	5.4821	5.4891	0.0205
2.	22.927	2 2 0	4.1	3.8759	3.8424	-0.2030
3.	28.157	2 2 2	100.0	3.1667	3.1616	-0.0470
4.	28.720	3 2 1	6.6	3.1058	3.0924	0.0134
5.	32.492	4 0 0	6.5	2.7534	2.7445	-0.1081
6.	36.572	4 2 0	6.1	2.4551	2.4613	0.0961
7.	37.558	3 3 2	1.9	2.3929	2.4015	0.1397
8.	40.213	4 2 2	2.8	2.2408	2.2497	0.1669
9.	42.161	5 1 0	2.1	2.1416	2.1523	0.2191
10.	46.748	4 4 0	69.3	1.9416	1.9379	-0.0938
11.	47.450	5 3 1	3.1	1.9145	1.9212	0.1750
12.	48.350	4 3 3	3.1	1.8809	1.8814	0.0113
13.	49.765	6 0 0	1.7	1.8307	1.8297	-0.0306
14.	50.576	6 1 1	1.7	1.8033	1.8131	0.2929
15.	55.408	6 2 2	36.5	1.6569	1.6579	0.0377
16.	57.196	4 4 4	0.8	1.6093	1.6068	-0.0956
17.	58.196	4 4 4	0.8	1.5840	1.5808	-0.1297
18.	63.242	6 4 2	1.8	1.4692	1.4661	-0.1468
19.	68.179	8 0 0	5.5	1.3743	1.3759	0.0902
20.	75.279	6 6 2	10.9	1.2614	1.2648	0.2389
21.	86.675	8 4 4	10.7	1.1224	1.1249	0.2356

- [1]. Горюнова Н.А. «Слошные алмазоподобные полупроводники». М. изд. «Советское радио». 1968, с.164
- [2]. Гусейнов Г.Г., Амирасланов И.Р., Кулиев А.С., Мамедов Х.С. Кристаллография. 1987. Т.32. №1. с .243-244
- [3]. Гусейнов Г.Г., Кязумов М.Г., Кулиев А.С., Амирасланов И.Р. ДАН Азерб. ССР. 1988. Т.44. № 7. с.26-30.
- [4]. Гусейнов Г.Г., Амирасланов И.Р., Кулиев А.С., Мамедов Х.С.Изв. АН СССР. Неорг. Матер. 1987. Т.23. №5, с.854-856
- [5]. Guseinov G.G., Musayeva N.N., Asadova I.B. I.Fizika NAN Azerb. Rep. 2004, V.X. № 1.2, p.p. 8-9
- [6]. Guseinov G.G., Gasimov V.A., Magerramova F.G. I.Fizika NAN Azerb. Rep. 2002, V.8. №2, p.p. 33-35
- [7]. Reil S.Haeuseler I. of Alloys and Compounds. 1998. V.270. p.p. 83-87