

Ge_{0.99}Nd_{0.01}S BİRLƏŞMƏSİNİN KRİSTAL QURULUŞU

A.O. DAŞDƏMİROV

Azərbaycan Dövlət Pedaqoji Universiteti, Bakı, AZ-1000, Azərbaycan

adashdemirov@gmail.com

GeS laylı kristallarında qismən Ge → Nd əvəzləməsi aparılmışdır. Vakuüm şəraitində sintez edilmiş birləşmənin kristal quruluşu, otaq temperaturunda, rentgen difraksiyası metodu ilə tədqiq edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, üçqat birləşmənin kristal quruluşu Pnma fəza qruplu ortorombik sinqoniyaya malik olur. Elementar özəyin parametrləri: $a = 4.3165 \text{ \AA}$, $b = 3.6486 \text{ \AA}$ və $c = 10.4915 \text{ \AA}$ qiymətlərinə malik olur. Rentgen difraksiyası spektri Ritveld metodu ilə analiz edilərək atom koordinatları təyin edilmişdir. Kristalloqrafik parametrlərə əsasən Diamond 3.2 proqramında Ge_{0.99}Nd_{0.01}S birləşməsinin elementar qəfəsi qurulmuşdur.

Açar sözləri: Ge_{0.99}Nd_{0.01}S birləşməsi, nadir torpaq elementləri, rentgen difraksiyası, kristal quruluş.

PACS: 61.05.cp; 61.50.Nw; 61.66.Fn; 61.40.b

1. GİRİŞ

Halkogenli yarımkəçiricilər bərk cisimlər fizikasında geniş tədqiq edilən kristallar hesab olunur. Bu kristallar geniş praktiki tətbiq imkanlarına malikdir. Qeyri-oksüd material olmalarına baxmayaraq, onlardan hazırlanmış çeviricilər uzun istismar müddəti ilə seçildiyi üçün, aktuallığını qoruyub saxlayır [1-5]. Sadə kristal quruluşu malik olduqlarına görə, bu materialların öyrənilməsi və fiziki-kimyəvi xassələrinin izah edilməsi asandır və onlardan model obyekt kimi də geniş istifadə edilir [6-8].

Son on il müddətində GeS birləşməsinə marağın artmasına səbəb ABŞ alimləri tərəfindən onun əsasında superkondensatorların və nanostruktur sahə tranzistorlarının hazırlanmasıdır. GeS kristalının tətbiq imkanlarının genişləndirilməsi yollarından biri Ge atomlarını qismən nadir torpaq elementləri (NTE) ilə əvəz edilməsi, müxtəlif təbiətli ionlaşdırıcı şüalarla təsir etməkdir [9-11].

Məlumdur ki, fiziki xassələrdə yaranan dəyişikliklər, ilk növbədə, kristalların quruluşu ilə bağlıdır. Ona görə də, birləşmələrin elektron və kristal quruluşlarının öyrənilməsi, bu materialların fiziki xassələrinin izah edilməsi üçün vacibdir. Maddə atomlarını digər element atomları ilə qismən əvəzləmələr həm kristalın quruluşuna, həm kimyəvi rəbitənin təbiətinə güclü təsir edir. Nadir torpaq elementlərinin (xüsusi halda neodimin) ion radiusları Ge atomu ilə müqayisədə kifayət qədər böyük olduğuna görə GeS kristalında deformatsiya yaradır. Bu isə yarımkəçirici matrisanın optik və elektrik xassələrinə güclü təsir göstərir.

GeS kristallarında Ge→Nd, Sm, Gd əvəzləmələrinin müxtəlif təsirlərinin öyrənilməsinə baxmayaraq, bu kristallarda baş verən proseslərin quruluş aspektləri yetərinə öyrənilməmişdir.

Tədqiqat işində GeS kristalında germanium atomlarının qismən neodim atomları ilə əvəz edilməsi ilə Ge_{0.99}Nd_{0.01}S polikristalları sintez edilmiş, alınmış birləşmənin kristal quruluşu tədqiq edilmişdir. Tədqiqatlar otaq temperaturunda, rentgen difraksiyası metodu ilə yerinə yetirilmişdir.

2. TƏDQIQAT METODLARI

2.1. Sintez. Ge_{0.99}Nd_{0.01}S polikristal təbəqədən birbaşa əritmə üsulu ilə CYOJI-2 markalı sobada sintez

edilmişdir. Sintez elementləri kimi xüsusi müqaviməti 50 Om·sm olan germanium polikristalından, B-5 markalı kükürddən və Hm-1 markalı neodimdən istifadə olunmuşdur. Sintez prosesinin təhlükəsizliyini təmin etmək üçün germanium kristalı tərzidə çəkilməzdən əvvəl həvəngdəstdə əzilərək toz şəklində salınmış, maddənin ümumi kütləsi 10-15 q aralığında götürülmüşdür. Nümunələr elektron tərzidə çəkilmiş, daxili diametri 10-12 mm, uzunluğu 15-18 sm olan kvarts ampulaya doldurulub havası vakuüm nasosu vasitəsi ilə 10⁻⁴ mm c. st. təzyiqə kimi sorulduqdan sonra qaynaq edilmişdir.

Nümunənin alınması üçün hazırlıq mərhələsi bitdikdən sonra, sintez prosesi başlamışdır. Polikristalın sintezi iki əsas mərhələdə aparılmışdır: birinci mərhələdə, 300°C-yə kimi ampula 3-5 dər/dəq sürəti ilə qızdırılmış və həmin temperaturda 10-12 saat saxlanmışdır. İkinci mərhələdə ampulanın temperaturu 2-3 dər/saat sürəti ilə 1000°C-yə kimi qaldırılaraq 18-20 saat saxlandıqdan sonra soba ilə birlikdə soyulmuşdur. Alınmış polikristal nümunənin homogenliyini (bircinsliyini) təmin etmək məqsədi ilə ampula 700°C-də iki sutka dəmləməyə qoyulmuşdur.

2.2. Quruluş tədqiqatları. Sintez edilmiş kristallarda fəza çevrilmələrinin olub-olmaması, aşqarların və məxsusi defektlərin qəfəsdə yarada biləcək deformatsiyalar və gərginliklər, kristal quruluşun müəyyən edilməsi, kristalloqrafik parametrlərin təyin edilməsi rentgen difraksiyası metodu ilə yerinə yetirilmişdir. Tədqiq edilən nümunələrin difraktoqramları Diffrac. Suite proqram təminatına malik, Bruker firmasının (Almaniya) istehsalı olan D8 ADVANCE difraktometrində aparılmışdır. Difraksiya mənzərəsinin yazılışı $5^\circ < 2\theta < 55^\circ$ difraksiya bucağı intervalında, CuK_α şüalanmasında, otaq temperaturunda aparılmışdır. Nümunələr əvvəlcə həvəngdəstdə əzilərək ovuntu halına salınmış, sonra isə quruluş tədqiqatları aparılmışdır.

2.3. Spektrlərin analizi. Alınmış rentgen difraksiyası spektrləri Ritveld metodu ilə analiz edilmişdir. Analizlər Fullprof proqramında (<https://www.ill.eu/sites/fullprof/index.html>) yerinə yetirilmişdir. Bu proqram, rentgen və neytron difraksiyası metodları ilə alınmış spektrləri analiz edərək kristalloqrafik parametrləri: sinqoniyası, fəza qrupunu,

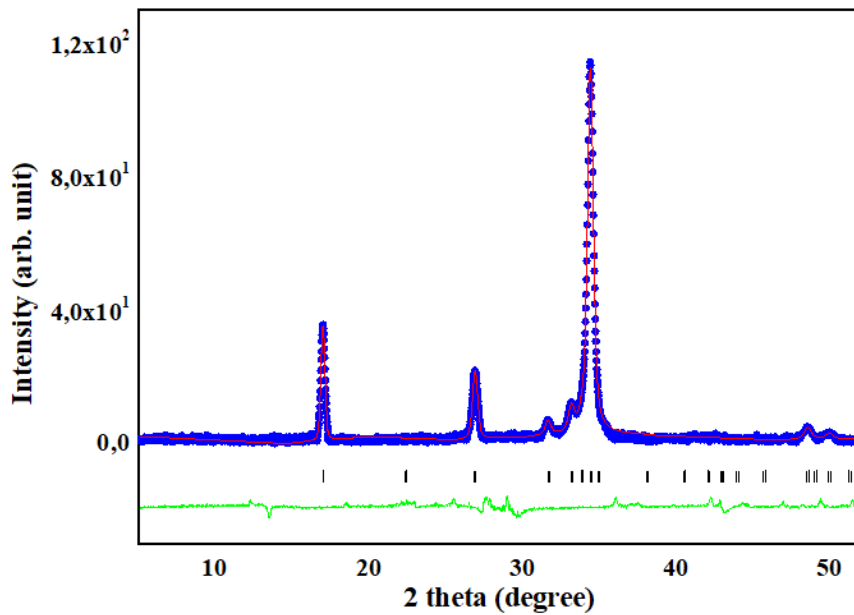
qəfəs parametrlərini, atom koordinatlarını, atomlararası məsafələri və rabitələrarası bucaqları təyin etməyə imkan verir.

3. NƏTİCƏLƏRİN MÜZAKİRƏSİ

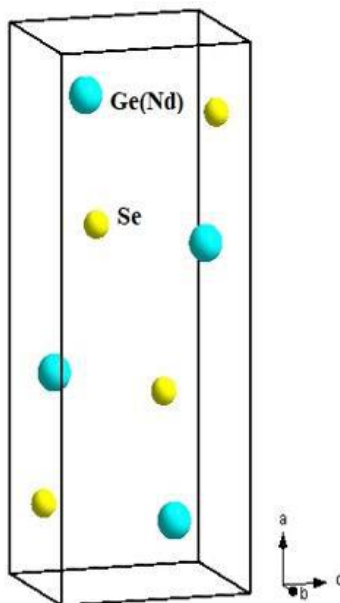
$\text{Ge}_{0.99}\text{Nd}_{0.01}\text{S}$ birləşməsinin kristal quruluşu otaq temperaturunda və normal şəraitdə tədqiq edilmişdir. Tədqiqatlar rentgenoqrafiya metodu ilə aparılmışdır. Alınmış rentgen difraksiyası spektri şəkil 1-də verilmişdir.

Şəkil 1-də verilmiş difraksiya mənzərəsində xətlər nəzəri spektri, nöqtələr isə təcrübi alınmış spektri göstərir. Şaquli xətlər Miller indekslərini, üfqi xətt isə nəzəri və təcrübi spektrlər arasındakı fərqi xarakterizə edir. Spekrin Fullprof proqramında analiz edilməsi zamanı müəyyən edilmişdir ki, $\text{Ge}_{0.99}\text{Nd}_{0.01}\text{S}$ birləşməsi-

nin kristal quruluşu ortorombik sinqoniyalı quruluşa uyğun gəlir. Fəza qrupunun Pnma olduğu müəyyən edilmişdir. Elementar özəyin parametrlərinin qiymətləri: $a = 4.3165 \text{ \AA}$, $b = 3.6486 \text{ \AA}$ və $c = 10.4915 \text{ \AA}$ müəyyən edilmişdir. Difraksiya maksimumlarının intensivliklərinin qiymətlərinə əsasən elementar qəfəsdə yerləşən germanium, neodim və kükürd atomlarının koordinatları təyin edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, germanium və neodim atomları eyni kristalloqrafik mövqedə qərarlaşır: $x/a = 3/8$, $y/b = 1/4$, $z/c = 1/6$, kükürd atomları isə $x/a = 0.1414$, $y/b = 1/4$, $z/c = 0.1287$ koordinatlarında yerləşərək metal atomları ilə kovalent rabitə yaradır. Təyin edilmiş koordinatlara əsasən Diamond 3.2 proqramında $\text{Ge}_{0.99}\text{Nd}_{0.01}\text{S}$ birləşməsinin kristal quruluşu alınmışdır. 3D formatında alınmış şəkil 2-də göstərilmişdir.



Şəkil 1. $\text{Ge}_{0.99}\text{Nd}_{0.01}\text{S}$ birləşməsinin rentgen difraksiyası spektri.



Şəkil 2. $\text{Ge}_{0.99}\text{Nd}_{0.01}\text{S}$ birləşməsinin kristal quruluşu.

Hesablamalar zamanı müəyyən edilmişdir ki, kovalent rabitə əmələ gətirən Ge(Nd) və S atomları arasındakı müxtəlif rabitələrin uzunluqları: $d = 2.4708 \text{ \AA}$, 2.6385 \AA , 2.9111 \AA , 3.4859 \AA olur. S – Ge – S rabitələrarası bucaqlar isə uyğun olaraq: 90.869° , 166.483° , 82.788° , 134.732° olmuşdur.

4. NƏTİCƏ

Təqdim edilən işdə $\text{Ge}_{0.99}\text{Nd}_{0.01}\text{S}$ birləşməsinin polikristalları sintez edilmişdir. Alınmış birləşmənin kristal quruluşu rentgen difraksiyası metodu ilə otaq temperaturunda tədqiq edilmişdir.

Alınmış spektrin Ritveld metodu ilə analiz edilməsi zamanı müəyyən edilmişdir ki, bu birləşmənin kristal quruluşu Pnma fəza qruplu ortorombik simmetriyaya malik olur. $\text{Ge}_{0.99}\text{Nd}_{0.01}\text{S}$ birləşməsi üçün ilk dəfə kristalloqrafik parametrlər: sinqoniyası, fəza qrupu, qəfəs parametrləri, atom koordinatları, atomlararası məsafələri və rabitələrarası bucaqlarının qiymətləri təyin edilmişdir.

- [1] S.R. Azimova, Y.I. Aliyev, D.M. Mirzayeva. Modern Physics Letters B, 34, 36, p.2050417, 2020.
- [2] N.A. Alieva, G.G. Guseinov, V.A. Gasyrov, Yu.I. Alyev, T.R. Mekhtiev. Inorganic Materials, 51, p.661-664, 2015.
- [3] Yu.G. Asadov, Yu.I. Aliyev, A.G. Babaev. Physics of Particles and Nuclei, 46, 3, p.452-474, 2015.
- [4] Yu.G. Asadov, Yu.I. Alyev, A.G. Babaev. Inorganic Materials, 44, 4, p.337-344, 2008.
- [5] S.R. Azimova, N.M. Abdullayev, Y.I. Aliyev, M.N. Mirzayev. EModern Physics Letters b, 34, 15, p.2050156, 2020.
- [6] P.C. Madatov, A.C. Alekperov, O.M. Gasanov. Журнал прикладной спектроскопии, 84, 1, с.154-157, 2017.
- [7] G.D.Guseinov, G.B.Abdullayev, S.M.Bidzinova, F.M. Seidov, M.Z.Ismailov, A.M. Pashayev. Physics Letters A, 33, 7, p.421-422, 1970.
- [8] P.G. Costa, R.G. Dandrea, R.F. Wallis, M. Balkanski. Physical Review B, 48, p.14135, 1993.
- [9] A.S. Alakbarov, A.O. Dashdemirov, R.B. Bayramli, K.S. Imanova. Advanced Physical Research, 3, 1, p. 39-45, 2021.
- [10] R.S. Madatov, A.S. Alekperov, Dzh. Magerramova. Crystallography Reports, 60, 6, p.921-923, 2015.

А.О. Дашдемиров

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА СОЕДИНЕНИЯ Ge_{0.99}Nd_{0.01}S

В слоистых кристаллах GeS осуществлено частичное замещение Ge → Nd. Кристаллическую структуру соединения, синтезированного в условиях вакуума, исследовали методом рентгеноструктурного анализа. Исследования проведены при комнатной температуре. Установлено, что кристаллическая структура этого соединения имеет орторомбическую сингонию с пространственной группой Pnma. Параметры элементарной ячейки: $a = 4.3165 \text{ \AA}$, $b = 3.6486 \text{ \AA}$ и $c = 10.4915 \text{ \AA}$. Спектры рентгеновской дифракции анализированы по методу Ритвельда и определены координаты атомов. По кристаллографическим параметрам в программе Diamond 3.2 построена элементарная ячейка соединения Ge_{0.99}Nd_{0.01}S.

A.O. Dashdemirov

CRYSTAL STRUCTURE OF Ge_{0.99}Nd_{0.01}S COMPOUND

In layered crystals of GeS, a partial replacement of Ge → Nd is carried out. The crystal structure of the compound synthesized under vacuum conditions was studied by X-ray diffraction analysis. The studies were carried out at room temperature. It has been established that the crystal structure of this compound has an orthorhombic syngony with the space group Pnma. Unit cell parameters: $a = 4.3165 \text{ \AA}$, $b = 3.6486 \text{ \AA}$, and $c = 10.4915 \text{ \AA}$. The X-ray diffraction spectrum was analyzed by the Rietveld method and the atomic coordinates were determined. The unit cell of the Ge_{0.99}Nd_{0.01}S compound was constructed using the crystallographic parameters in the Diamond 3.2 program.

Qəbul olunma tarixi: 03.10.2022