



## DETERMINATION OF STRUCTURAL PROPERTIES OF Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> COMPOUND

Sevda Sarıtaş\*<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Electric Power Generation, Transmission and Distribution, İspir Hamza Polat Vocational College, Atattürk University,Erzurum, Turkey

(Alınış / Received: 19.09.2021, Kabul / Accepted: 19.10.2021, Online Yayınlanma / Published Online: 21.12.2021)

\*Corresponding Author: [sevda.saritas@atauni.edu.tr](mailto:sevda.saritas@atauni.edu.tr) (S.SARITAŞ)

(ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-7274-3968>)

### Keywords

Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>  
XRD  
Structural analysis  
Crystal lattice

**Abstract:** Semiconductors that form the basis of electronics; examination of its electrical, optical, magnetic, etc. properties in a wide range is thought to accelerate technological development and progress. X-Ray Diffraction (XRD) spectrometry, which provides a lot of information about the structural properties of semiconductor materials, is especially important in this respect. With XRD analysis, properties such as material structure (crystalline/amorphous), qualitative analysis for crystalline materials, calculation of lattice parameter, determination of interplanetary distance, calculation of miller indices, determination of crystal lattice structure can be determined. In this study, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> structure has been investigated, which attracts great attention due to its application potential such as field effect transistors, solar cells, UV photodetectors and gas sensors. The Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> structure with an average crystal size of 8.6 nm and a preferential crystal orientation (311) grown by RF magnetron sputtering method was investigated by XRD technique.

## Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> BİLEŞİĞİNİN YAPISAL ÖZELLİKLERİNİN BELİRLENMESİ

### Anahtar Kelimeler

Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>  
XRD  
Yapısal analiz  
Kristal kafes

**Özet:** Elektroniğin temel yapı taşı olan yarıiletkenlerin; elektriksel, optik, manyetik vb özelliklerinin oldukça geniş bir yelpazede incelenmesi teknolojik gelişmeyi ve ilerlemeyi hızlandırdığı düşünülmektedir. Özellikle yarıiletken malzemelerin yapısal özellikleri hakkında oldukça fazla bilgi sunan X Işını Kırınımı (XRD) spektrometresi bu açıdan önemlidir. XRD analiz ile, malzeme yapısı (kristal/amorf), kristalin malzemeler için kalitatif analiz, latis parametresinin hesaplanması, düzlemler arası mesafenin belirlenmesi, miller indislerinin hesaplanması, kristal kafes yapısının belirlenmesi gibi özellikler belirlenebilir. Bu çalışmada alan etkili transistörler, güneş pilleri, UV fotodedektörler ve gaz sensörleri gibi uygulama potansiyeli nedeniyle büyük ilgi görmekte olan Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> yapısı araştırılmıştır. RF magnetron saçırma yöntemi ile büyütülen (311) tercihli kristal yönelimine sahip, ortalama kristal büyüklüğü 8,6 nm olan Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> yapısı XRD tekniği ile incelenmiştir.

### 1. Giriş

Günümüz teknolojisi ile neredeyse tüm malzemelerin (iletken, yarıiletken ve yalıtkan vb.) elektriksel, optik, manyetik özelliklerinin yanı sıra yapısal, morfolojik ve topografik tüm özelliklerini inceleyebilmekteyiz. X Işını Kırınımı (XRD)

spektrometresinde, malzemeye gönderdiğimiz X ışının dalga boyu, incelendiğimiz malzemenin atomlar arası mesafe de aynı mertebede olduğundan dolayı kırınım şartı sağlanmış olup, malzemenin kristal yapısı hakkında bilgi elde edebilmemizi

sağlamaktadır. Bu tahribatsız analiz yöntemi malzeme bilimi, jeoloji, fizik, kimya, biyoloji gibi temel bilimler, nanoteknoloji, biyoteknoloji gibi sayısız değişik alanda yaygın bir şekilde kullanılmaktadır [1-3].

Soğurma ve yansıma Spektroskopisi, incelenen malzemeye gönderilen ışık madde ile etkileşmekte ve dedektör tarafından elde edilen veriler ile malzemenin optik özellikleri, band aralığı hakkında bilgi elde edilmektedir.

Taramalı Elektron Mikroskobu (SEM) incelenen malzeme hakkında yapısal ve morfolojik bilgiler sunmaktadır. Bu arada inceleme için ışık değil daha kısa dalga boylu olan elektronlar kullanılmaktadır [2-5].

Atomik Kuvvet Mikroskobu (AFM), incelenen malzemenin topografik özellikleri hakkında bilgi vermekte olup, inceleme sırasında mekanik anlama bir temas mevcut olmaktadır [6-7].

Bu cihazlara ek olarak inceleme sırasında, Geçirimli Elektron Mikroskobu, Raman Spektroskopisi, Enerji Ayırımı X-Işınları Floresans Spektrometresi (WD-XRF), Fotoluminesans spektrometresi (PL), Fourier Dönüşümlü Kızılötesi (FTIR) Spektroskopisi gibi çok sayıda cihaz kullanılmaktadır.

Geçiş metal oksit bileşikler yaygın olarak birçok teknolojik uygulama alanında kullanılmaktadır. Son yıllarda bu metal oksit tabanlı yarıiletken aygıtların öneminin artması bilimsel çalışmaları bu yöne yöneltmiş olup yapılan çalışma bu araştırma alanına katkı sağlamaktadır.

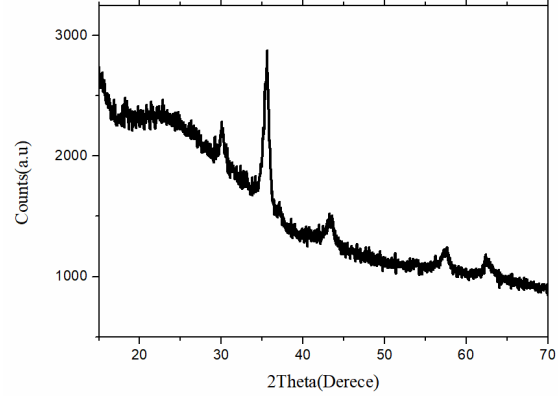
Yapılan birçok çalışmada Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> yapısı hakkında kapsamlı çalışmalar mevcuttur bunların bazıları, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> yapısının toz nanopartikül şeklinde sentezlemesi [8], Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> filminin farklı morfolojik yapıların incelenmesi ve ayrıntılı SEM görüntü analizi [9-10], Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> yapısının farklı fazların incelenmesi ayrıca XRD, FTIR, TEM, XPS ayrıntılı yapısal karakterizasyon [11-12] şeklinde çalışmalardır. Bu çalışmada XRD ile, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> bileşiğinin yapısı (kristal/amorf), kristalin latis parametresini, düzlemler arası mesafesi, miller indisleri, kristal kafes sabitleri belirlenecektir.

## 2. Materyal ve Yöntem

X-ışını kırınımı ölçümleri ile, kristalin yapısal özellikleri hakkında bilgi sahibi olmak, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> bileşiğinin yapısı (kristal/amorf), kristalin latis parametresini, düzlemler arası mesafesi, miller indisleri, kristal kafes sabitleri, bulunmuştur. Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ince filmlerin yapısal analizi için D-2 Phaser Bruker (CuK<sub>α</sub> = 1.5406 Å) markalı X-ışını Kırınımı (XRD) ölçüm cihazı kullanılmıştır. RF Magnetron Sıçratma tekniği ile demir oksit yarıiletken ince filmlerini büyütülmüştür, elde edilen filmlerin yapısal özelliklerinin belirlenmesi için X-ışını kırınımı (XRD) ölçümleri alınmıştır.

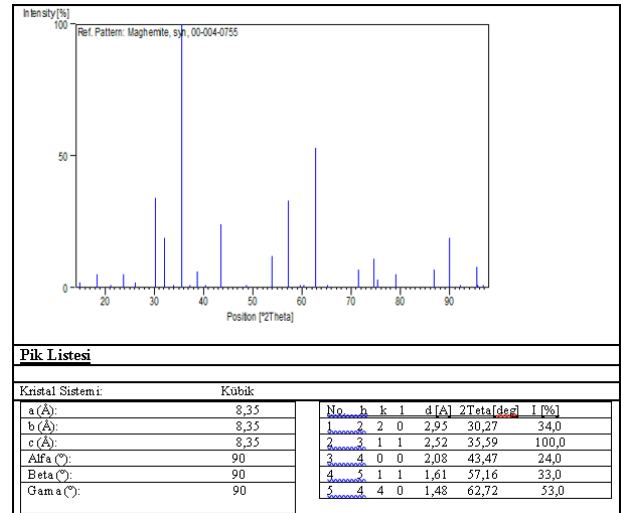
RF magnetron sıçratma yönteminde büyüme plazma ortamında gerçekleştirilmektedir. Plazma yönlendiricinin yani uygulanan güç, işlevi ise plazmayı

bir alana yoğunlaştırıp, plazmanın doğrultu şeklinde alttaş üzerine homojen olarak gitmesini sağlamaktır. Mıknatıslar materyali iyonize ederek malzemenin plazma formuna geçmesini sağlarlar. İstenilen malzeme alttaş üzerine yönlendirilerek orada yoğunlaşması sağlanır ve ince film oluşturulur. Şekil 1'de RF Magnetron Sıçratma tekniği ile büyütülen demir oksit yarıiletken ince filmin XRD kırınım deseni verilmiş olup değerlendirmeler ve hesaplamalar bu veriler üzerinden yapılmıştır.



**Şekil 1.** RF Magnetron Sıçratma tekniği ile büyütülen demir oksit yarıiletken ince filmin XRD kırınım deseni

**Tablo 1.** Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ince filmlerinin bazı yapısal parametrelerin literatür verileri (Reference Code:00-004-0755)



Tablo 1'de Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ince filmlerinin bazı yapısal parametrelerinin literatür verileri sunulmuştur. Bu verilerin deneysel veriler ile uyumlu olduğu görülmektedir.

Numunelerimizin her birinin tanecik boyutunu hesaplamak için Scherrer formülü kullanılmıştır [13].

$$D = K\lambda / \beta \cos\theta \quad (1)$$

Bu ifade de D kristalin tanecik boyutu,  $\beta$  pikin yarı yükseklik tam genişliği,  $\theta$  Bragg'ın kırınım açısı  $\lambda$  kullanılan X ışını dalga boyu ve  $K = 0,9$  kullanılan sabit olarak verilmektedir. Bu formülden yararlanarak, numunelerimizin yapısal parametreleri hesaplanmış ve bunlar Tablo 2'de verilmiştir.

**Tablo 2.** Cam alt taş üzerine büyütülen Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ince filmlerinin bazı yapısal parametreleri

Uygulanan büyütme sıcaklığı	Yarı yükseklik tam genişliği (FWHM)	Miller indisi (hkl)	Gözlenen $2\theta$ (°)	Kristal tanecik boyutu (D)(nm)
450 <sup>o</sup>	1,54	(220)	30,12	5,34
	0,74	(311)	35,62	11,25
	1,22	(400)	43,48	7,01
	0,90	(511)	57,58	10,07
	0,98	(400)	62,58	9,48

### 3. Sonuç ve Tartışma

Cam alt taş üzerine büyütülen Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ince filmlerinin kübik kristal yapısı, kristalin latis parametresini a (Å):8,35, b (Å):8,35, c (Å):8,35, alpha 90°, beta 90°, gamma 90°, olduğu ve FWHM, kristal tanecik büyüklüğü, miller indislerinin (hkl) değerleri Tablo 2 verilmiştir. Büyütülen Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ince filmlerin (311) tercihli kristal yönelimine sahip, ortalama kristal büyüklüğü 8,6 nm olan maghemit yapısı olduğu görülmüştür. Bu veriler doğrultusunda yapının kristal özellikleri ölçüm sonucunda bulunmuş olup literatür ile uyumludur.

#### Çıkar çatışması

Yazar, bu makalede rapor edilen çalışmayı etkileyebilecek görünen hiçbir rekabet halindeki finansal çıkarları veya kişisel ilişkileri olmadığını beyan eder.

#### Kaynakça

- [1] Goldstein, J. I., Newbury, D. E., Michael, J. R., Ritchie, N. W., Scott, J. H. J., & Joy, D. C. (2017). Scanning electron microscopy and X-ray microanalysis. Springer.
- [2] Thamaphat, K., Limsuwan, P., & Ngotawornchai, B. (2008). Phase characterization of TiO<sub>2</sub> powder by XRD and TEM. Agriculture and Natural Resources, 42(5), 357-361.
- [3] Monshi, A., Foroughi, M. R., & Monshi, M. R. (2012). Modified Scherrer equation to estimate more

accurately nano-crystallite size using XRD. World journal of nano science and engineering, 2(3), 154-160.

- [4] McMullan, D. (1995). Scanning electron microscopy 1928–1965. Scanning, 17(3), 175-185.
- [5] Zhou, W., Apkarian, R., Wang, Z. L., & Joy, D. (2006). Fundamentals of scanning electron microscopy (SEM). In Scanning microscopy for nanotechnology (pp. 1-40). Springer, New York, NY.
- [6] Wojcikiewicz, E. P., Zhang, X., & Moy, V. T. (2004). Force and compliance measurements on living cells using atomic force microscopy (AFM). Biological procedures online, 6(1), 1-9.
- [7] Trache, A., & Meininger, G. A. (2008). Atomic force microscopy (AFM). Current Protocols in Microbiology, 8(1), 2C-2.
- [8] Chen, D., & Xu, R. (1998). Hydrothermal synthesis and characterization of nanocrystalline Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> powders. Materials Research Bulletin, 33(7), 1015-1021.
- [9] Mitra, S., Das, S., Mandal, K., & Chaudhuri, S. (2007). Synthesis of a  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanocrystal in its different morphological attributes: growth mechanism, optical and magnetic properties. Nanotechnology, 18(27), 275608.
- [10] Zhang, X., Sui, C., Gong, J., Su, Z., & Qu, L. (2007). Preparation and formation mechanism of different  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> morphologies from snowflake to paired microplates, dumbbell, and spindle microstructures. The Journal of Physical Chemistry C, 111(26), 9049-9054.
- [11] Schimanke, G., & Martin, M. (2000). In situ XRD study of the phase transition of nanocrystalline maghemite ( $\gamma$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) to hematite ( $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>). Solid State Ionics, 136, 1235-1240.
- [12] Guivar, J. A. R., Sanches, E. A., Bruns, F., Sadrollahi, E., Morales, M. A., López, E. O., & Litterst, F. J. (2016). Vacancy ordered  $\gamma$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanoparticles functionalized with nanohydroxyapatite: XRD, FTIR, TEM, XPS and Mössbauer studies. Applied Surface Science, 389, 721-734.
- [13] Patterson, A. L. (1939). The Scherrer formula for X-ray particle size determination. Physical review, 56(10), 978