

MOLEKULYAR QURULUŞ MODELİ ƏSASINDA Ge-As-Se-S XALKOGENİD ŞÜŞƏVARI SİSTEMİNDƏ RAMAN SƏPİLMƏSİNİN TƏDQIQI

S.İ. MEHDİYEVA¹, R.İ. ƏLƏKBƏROV^{1,2}, S.M. MƏMMƏDOV¹

1. Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil nazirliyi, Fizika İnstitutu,

2. Azərbaycan Dövlət İqtisad Universiteti (UNEC)

E-mail: Rahim-14@mail.ru

Vakuumda termik buxarlandırma üsulu ilə alınan nazik təbəqəli $\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{Se}_{82}$, $\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{S}_2\text{Se}_{80}$, $\text{Ge}_7\text{As}_{16}\text{S}_5\text{Se}_{72}$, $\text{Ge}_{10}\text{As}_{20}\text{S}_{10}\text{Se}_{60}$, $\text{Ge}_{17,5}\text{As}_{15}\text{S}_{15}\text{Se}_{52,5}$, $\text{Ge}_{24}\text{As}_{19}\text{S}_{20}\text{Se}_{37}$, $\text{Ge}_{25}\text{As}_{10}\text{S}_{25}\text{Se}_{40}$, $\text{Ge}_{26}\text{As}_{18}\text{S}_{30}\text{Se}_{26}$, $\text{Ge}_{33}\text{As}_{17}\text{S}_{35}\text{Se}_{15}$ şüşəvari tərkibli xalkogenidlərin lokal quruluşunu əmələ gətirən quruluş elementlərinin optik rəqs modları Raman spektroskopiyası vasitəsilə tədqiq olunmuşdur. Raman səpilmə spektrlərinə molekulyar quruluş modeli tətbiq olunaraq müşahidə olunan müxtəlif rəqs tezliklərinə malik piklərin və səpilmə zolaqlarının amorf matrisi əmələ gətirən piramidal ($\text{AsS}_{3/2}$, $\text{AsSe}_{3/2}$) və tetraedral ($\text{GeSe}_{4/2}$, $\text{GeS}_{4/2}$) quruluş elementlərinin və kimyəvi rabitələrin (As-S, As-Se, Ge-S, Ge-Se) mövcudluğu ilə bağlılığı təsdiq olunmuşdur.

Açar sözlər: xalkogenid şüşə, amorf, molekulyar quruluş.

PACS: 81.05. Gc

1. GİRİŞ

Hazırda binar və mürəkkəb komponentli xalkogenid şüşələrin lokal quruluşu, optik spektroskopiyası və istilik xassələri sahəsində elmi tədqiqatlar intensiv şəkildə inkişaf edir [1]. Müxtəlif elmi məqalələrin təhlili göstərir ki, Ge-As-Se və Ge-As-Se-S çoxkomponentli xalkogenid şüşə sistemlərinin Raman səpilmə mexanizmlərinin dəqiq öyrənilməsi çox vacibdir. Xalkogenid şüşələrdə kristallara məxsus periodik nizamlı quruluş olmadığından onlara məxsus Raman səpilməsi bütün optik fononların iştirakının icazəli olması sayəsində geniş maksimumlu səpilmə zolağı ilə xarakterizə edilir [2]. Qeyd olunan maddələrdə səpilmə zolağının vəziyyəti və birinci pikin yarım eni onların quruluşunu, stexiometrik tərkibini və amorf matrisi əmələ gətirən digər quruluş elementlərinin rəqsi modlarını təhlil etməyə imkan verir [1, 2]. Aparılan elmi tədqiqatlar göstərir ki, şüşəvari matrisi əmələ gətirən quruluş elementlərinə məxsus rabitələrin elastiklik qüvvə sabitini, optik modun kütləsini və o cümlədən həmin modlara məxsus rəqs tezliklərinin Raman səpilmə spektrində aşkar olunması lokal quruluşun təbiətinin öyrənilməsi baxımından mühüm əhəmiyyət kəsb edir.

Təqdim olunan məqalənin məqsədi molekulyar quruluş modeli əsasında Ge-As-Se, Ge-As-Se-S xalkogenid şüşəvari sistemlərinin Raman səpilmə spektrində müxtəlif səpilmə zolaqlarının əmələ gəlməsinə zəmin yaradan quruluş elementlərinə məxsus rəqsi modların müəyyənləşdirilməsidir.

2. TƏCRÜBƏNİN METODİKASI VƏ NÜMUNƏLƏRİN ALINMASI

$\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{Se}_{82}$, $\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{S}_2\text{Se}_{80}$, $\text{Ge}_7\text{As}_{16}\text{S}_5\text{Se}_{72}$, $\text{Ge}_{10}\text{As}_{20}\text{S}_{10}\text{Se}_{60}$, $\text{Ge}_{17,5}\text{As}_{15}\text{S}_{15}\text{Se}_{52,5}$, $\text{Ge}_{24}\text{As}_{19}\text{S}_{20}\text{Se}_{37}$, $\text{Ge}_{25}\text{As}_{10}\text{S}_{25}\text{Se}_{40}$, $\text{Ge}_{26}\text{As}_{18}\text{S}_{30}\text{Se}_{26}$, $\text{Ge}_{33}\text{As}_{17}\text{S}_{35}\text{Se}_{15}$ xalkogenid şüşəvari yarımkeçirici (XŞY) tərkiblərinin sintezi fırlanan silindrik soba üsulu ilə yerinə yetirilmişdir. Bunun üçün göstərilən mürəkkəb komponentli şüşəvari tərkiblərə məxsus xüsusi təmizlikli (təmizlik dərəcəsi

99,9999%) elementlərdən seçilmiş stexiometrik və qeyri-stexiometrik tərkib nisbətlərinə uyğun elekton tərzidə çəkilərək, daxili diametri 12÷17 mm olan və havası 10^{-4} tor təzyiqə qədər sorulmuş kvarts ampulalara doldurulmuşdur.

Tədqiqat üçün seçilmiş mürəkkəb komponentli maddələrin sintezi 950°C temperaturda yerinə yetirilmişdir. Sintezin yüksək temperaturda aparılması nəticəsində tərkibə daxil olan bütün komponentlərin mümkün qədər az özlülüklə bir-birinə qarışmasına nail olunmuşdur. Sobanın qızdırılması nixrom spirali ilə, temperaturun ölçülməsi isə xromel-alümel termocütü vasitəsilə edilmişdir. Sintez olunacaq mürəkkəb komponentli tərkiblərin bircinsliliyini təmin etmək üçün ampulalar 950°C temperaturda 11 saat ərzində saxlanılmış, sintez prosesinin sonu söndürülmüş fırlanan soba rejimində həyata keçirilmişdir. Raman səpilməsi təcrübələri şüşə altlıqlar üzərində $d = 2$ mik qalınlıqlı nazik amorf təbəqələrdə yerinə yetirilmişdir.

Bu tədqiqatlar üçölçülü konfokal lazer mikro-spektroqrafında əsasən optik spektrin $\nu = 25 \div 500$ cm^{-1} intervalında aparılmışdır.

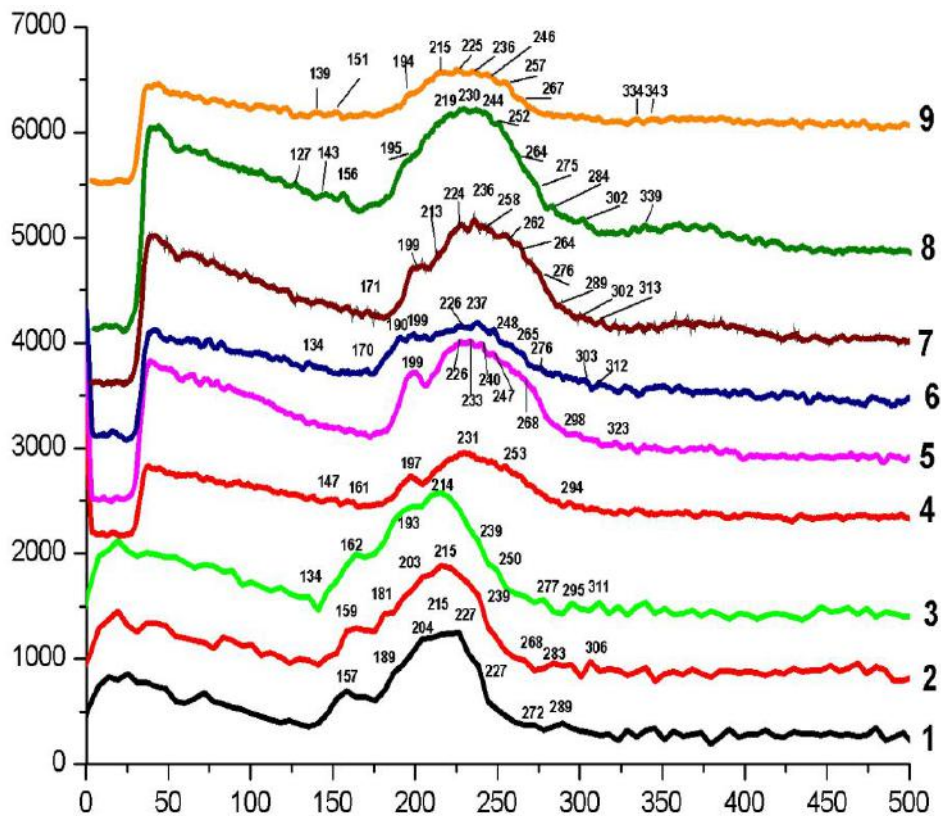
3. NƏTİCƏLƏR VƏ ONLARIN MÜZAKİRƏSİ

Şəkil 1-də $\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{Se}_{82}$, $\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{S}_2\text{Se}_{80}$, $\text{Ge}_7\text{As}_{16}\text{S}_5\text{Se}_{72}$, $\text{Ge}_{10}\text{As}_{20}\text{S}_{10}\text{Se}_{60}$, $\text{Ge}_{17,5}\text{As}_{15}\text{S}_{15}\text{Se}_{52,5}$, $\text{Ge}_{24}\text{As}_{19}\text{S}_{20}\text{Se}_{37}$, $\text{Ge}_{25}\text{As}_{10}\text{S}_{25}\text{Se}_{40}$, $\text{Ge}_{26}\text{As}_{18}\text{S}_{30}\text{Se}_{26}$ və $\text{Ge}_{33}\text{As}_{17}\text{S}_{35}\text{Se}_{15}$ xalkogenid şüşəvari tərkiblərinin Raman səpilmə spektrləri göstərilmişdir. Göründüyü kimi, bütün tərkiblərin Raman səpilmə spektrlərində müşahidə edilən səpilmə zolaqlarını əsasən dörd intervala bölmək olar. Tezliyin $\nu = 20 \div 100$ cm^{-1} intervalında müşahidə edilən aşağı tezlikli səpilmə zolağı əsasən xalkogenid şüşələrdə lokal quruluşun orta nizamlılığı (ON) ilə bağlıdır. Qeyri-kristal maddələrdə orta nizam quruluşu aşağı tezlikli Bozon pikinin və birinci kəskin difraksiya pikinin (BKDP) müşahidə olunması ilə təsdiq olunur [3-6].

Spektrdə digər $\nu = 115 \div 180$ cm^{-1} ; $180 \div 300$ cm^{-1} ; $300 \div 45$ cm^{-1} tezliklər intervalında müşahidə olunan sə-

pilmə zolaqları tədqiq olunan maddələrin amorf matrisini əmələ gətirən müxtəlif quruluş elementlərinin rəqs modları və rabitələrin rəqs tezlikləri ilə əlaqədardır. Spektrlərdən görüldüyü kimi, germaniumun (Ge) konsentrasiyasının $7 < x < 25$ at % aralığında artması, $\text{GeSe}_{4/2}$ tetraedrik quruluş elementlərinin künc sərhədli rəqs

modları hesabına $180 \div 203 \text{ cm}^{-1}$ tezliklər intervalında yeni pikin yaranmasına səbəb olur [1]. Raman səpilmə spektrinin $262 \div 280 \text{ cm}^{-1}$ tezliklər intervalında müşahidə olunan $\sim 265 \text{ cm}^{-1}$ tezlikli pik əsasən selen (Se) zəncirləri və $\text{GeSe}_{4/2}$ tetraedrik quruluş elementlərinin kiçik künc sərhədli rəqs modları ilə izah olunur [7].



Şəkil 1. Xalkogenid şüşəvari nazik təbəqələrin Raman səpilmə spektrləri: 1 - $\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{S}_{82}$, 2 - $\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{S}_2\text{Se}_{80}$, 3 - $\text{Ge}_7\text{As}_{16}\text{S}_5\text{Se}_{72}$, 4 - $\text{Ge}_{10}\text{As}_{20}\text{S}_{10}\text{Se}_{60}$, 5 - $\text{Ge}_{17,5}\text{As}_{15}\text{S}_{15}\text{Se}_{52,5}$, 6 - $\text{Ge}_{24}\text{As}_{19}\text{S}_{20}\text{Se}_{37}$, 7 - $\text{Ge}_{25}\text{As}_{10}\text{S}_{25}\text{Se}_{40}$, 8 - $\text{Ge}_{26}\text{As}_{18}\text{S}_{30}\text{Se}_{26}$, 9 - $\text{Ge}_{33}\text{As}_{17}\text{S}_{35}\text{Se}_{15}$

Tezliyin $285 \div 300 \text{ cm}^{-1}$ və $300 \div 375 \text{ cm}^{-1}$ intervallarında müşahidə olunan piklər isə $\text{GeSe}_{4/2}$ tetraedrik quruluş elementlərinin asimmetrik rəqs modları (F_2 -modu) ilə [7] və $\text{GeS}_{4/2}$ tetraedrik quruluş elementlərinin simmetrik künc sərhədli və yansərhədli gərilmə rəqs modlarının ($\sim 340 \text{ cm}^{-1}$, $\sim 372 \text{ cm}^{-1}$) varlığı ilə izah edilir [8]. Məqalədə molekulyar quruluş modeli və tetraedral (AB_4) molekullar üçün Walter Gordy [9] tərəfindən təklif olunan (3) və (4) düsturları tətbiq olunaraq $\text{GeSe}_{4/2}$ ($\text{GeS}_{4/2}$) tetraedrik quruluş elementlərinin kiçik künc sərhədli və asimmetrik rəqs modları üçün müxtəlif müəlliflərin nəticələri ilə kifayət qədər uyğunluq təşkil edən nəticələr (cədvəl 1) əldə edilmişdir. Germaniumun (Ge) konsentrasiyasının nisbətən yüksək olduğu $\text{Ge}_{26}\text{As}_{18}\text{S}_{30}\text{Se}_{26}$ və $\text{Ge}_{33}\text{As}_{17}\text{S}_{35}\text{Se}_{15}$ təkiblərində yuxarıda qeyd olunan pikin zəifləməsi və qismən yox olması selen (Se) atomlarının konsentarsiyasının azalması və kükürd atomlarının (S) konsentrasiyasının artması və bunun nəticəsində tetraedral $\text{GeS}_{4/2}$ quruluş vahidlərinin konsentrasiyasının artması ilə əlaqədardır. Raman səpilmə spektrlərinə məxsus $210 \div 215 \text{ cm}^{-1}$ tezlik intervalında müşahidə olunan geniş piklər əsasən yan sərhədli $\text{GeSe}_{4/2}$ tetraedrik rəqs modlarının mövcudluğu ilə

izah olunur. $\text{Ge}_{10}\text{As}_{20}\text{S}_{10}\text{Se}_{60}$, $\text{Ge}_{17,5}\text{As}_{15}\text{S}_{15}\text{Se}_{52,5}$, $\text{Ge}_{24}\text{As}_{19}\text{S}_{20}\text{Se}_{37}$, $\text{Ge}_{25}\text{As}_{10}\text{S}_{25}\text{Se}_{40}$, $\text{Ge}_{26}\text{As}_{18}\text{S}_{30}\text{Se}_{26}$, $\text{Ge}_{33}\text{As}_{17}\text{S}_{35}\text{Se}_{15}$ təkiblərində germaniumun (Ge) konsentrasiyasının artması ilə yanaşı arsen (As) atomlarının konsentrasiyasının artması amorf matrisdə $\text{AsSe}_{3/2}$ piramidal quruluş elementlərinin nisbi payını artırır. $\text{AsSe}_{3/2}$ piramidal quruluş elementlərinin nisbi payının artması nəticəsində spektrin $210 \div 215 \text{ cm}^{-1}$ tezlik intervalında müşahidə edilən piklər qismən böyük tezliklər oblastına doğru sürüşərək $215 \div 226 \text{ cm}^{-1}$ tezlik oblastında yeni piklərin əmələ gəlməsinə səbəb olur. Qeyd olunan piklər $\text{AsSe}_{3/2}$ piramidal quruluş elementlərinə aid rəqs modlarının olması ilə əlaqədardır. Selen (Se) və arsenin (As) konsentrasiyasının nisbətən yüksək olduğu $\text{Ge}_{17,5}\text{As}_{15}\text{S}_{15}\text{Se}_{52,5}$, $\text{Ge}_{24}\text{As}_{19}\text{S}_{20}\text{Se}_{37}$, $\text{Ge}_{25}\text{As}_{10}\text{S}_{25}\text{Se}_{40}$, $\text{Ge}_{26}\text{As}_{18}\text{S}_{30}\text{Se}_{26}$ şüşə təkiblərinə aid Raman spektrlərində $343 \div 385 \text{ cm}^{-1}$ tezlik oblastında zəif piklərin müşahidə olunması AsS_3 piramidal quruluş vahidlərinin, həmçinin AsS_3 və AsSe_3 qarışıq piramidal və As_4S_4 quruluş elementlərinin rəqs modları ilə izah edilmişdir [10] AsS_3 piramidal quruluş elementlərinə məxsus rəqs modlarının tezlikləri G.Lucovsky tərəfindən təklif olunan molekulyar quruluş modelindən

[11] alınan (1) düsturu və Herzberqin piramidal quruluşlu rəqs modları üçün təklif etdiyi (5) və (6) düsturlarına əsasən hesablanmış və nəticələr cədvəl 1-də göstərilmişdir. Göründüyü kimi, rəqs modlarına uyğun tezliklərin nəzəri hesablanmış və eksperimental qiymətləri uyğunluq təşkil edir.

Cədvəl 1.

Tetraedral və piramidal vahidlər və kimyəvi rabitələr	m [akv]	v, cm ¹ [15]	v, cm ⁻¹ [14]
GeS ₄	46,35	332	312
GeSe ₄	59,02	278	258
AsS ₃	42,12	290	280
AsSe ₃	56,91	240	229
AsS ₃	m ₁ =39,44 [16]	300	289
AsS ₃	m _{2,3,4} =29,29 [16]	348	335
AsSe ₃	m ₁ = 54,87 [16]	244	233
AsSe ₃	m _{2,3,4} =45,89 [16]	267	255
As-S	22,45	397	383
As-Se	38,44	292	279
Ge-S	22,24	479	451
Ge-Se	37,82	347	322

Ge-S rabitələrinin enerjisi As-S rabitələrinin enerjisindən yüksək olduğundan piramidal AsS₃ quruluş elementinin modlarının yaratdığı səpilmə zolağının intensivliyi çox zəifdir [12]. Tədqiq olunan şüşə tərkiblərin 115÷180 cm⁻¹; 180÷300 cm⁻¹; 300÷450 cm⁻¹ tezlik aralıklarında Raman rəqs modları molekulyar quruluş modelini tətbiq etməklə hesablanmışdır. G.Lucovsky [11] modelinə görə binar xalkogenid şüşələrdə (As₂S₃) molekulyar quruluş elementlərinin daxili rəqsələrinin identifikasiyası valent qüvvə sahəsi modelləri və AsS₃ piramidal molekulardan ibarət konfigurasiya şəbəkəsi ilə təsvir edilə bilər [11]. Molekulyar model göstərir ki, optik modların rəqs tezlikləri aşağıdakı düsturla hesablanıla bilər:

$$v_0 = \frac{1}{2\pi c} \left(\frac{k_{AB}}{\mu} \right)^{1/2}, \quad (1)$$

burada v₀ - harmonik ossilyatorun tezliyi, c - işıq sürəti, k - A və B atomları arasında rabitənin qüvvə sabiti, μ - A və B atomları üçün (2) ifadəsi ilə hesablanmış modun kütləsidir.

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_A} + \frac{1}{m_B}, \quad (2)$$

burada m_A və m_B A və B atomlarının atom kütlələridir. (1) düsturundakı k_{AB} piramidal (AB₃) və tetraedral (AB₄) molekulalar üçün Walter Gordy [9] tərəfindən təklif olunan (3) və (4) düsturları ilə hesablanmışdır.

$$k=1,67 \cdot N \cdot \left(\frac{X_A \cdot X_B}{d^2} \right)^3 + 0,30, \quad (3)$$

$$k=3,29 \cdot \left(\frac{X_A \cdot X_B}{d^2} \right)^3 - 0,40, \quad (4)$$

burada d - rabitə uzunluğu, N – rabitənin tərtibi və X_A və X_B rabitəni yaradan atomların elektromənfiliyidir. Amorf matrisanı əmələ gətirən müxtəlif atomlar arasındakı rabitə uzunluğunun qiymətləri molekulyar quruluşun tədqiqində tətbiq olunan SAMSON paket proqramı vasitəsilə [13] müəyyənləşdirilmiş və nəticələr Cədvəl 2-də göstərilmişdir.

Tezliyi (1) düsturu ilə hesablanan piramidal vibrasiya modlarının kütləsi (μ=m₁ və ya μ=m_{2,3,4}) Herzberg [16] tərəfindən təklif olunmuş (5) və (6) düsturları ilə verilmişdir.

$$m_1 = \frac{3m_y m_x \sin\beta}{m_x + 3m_y \sin\beta}, \quad (5)$$

$$m_{2,3,4} = \frac{3m_y m_x \cos\beta}{m_x + 3m_y \cos\beta}, \quad (6)$$

burada β X-Y rabitəsi ilə simmetriya oxu arasındakı bucaqdır [16]. Molekulyar quruluşun tədqiqində tətbiq olunan SAMSON paket proqramı vasitəsilə [13] AsS₃ və AsSe₃ quruluş elementləri üçün β-nın qiymətinin ~60° olduğu müəyyənləşdirilmişdir. Optik modların kütlələri və tezlikləri (1), (5) və (6) düsturlarından hesablanmış və alınan nəticələr Cədvəl 1-də göstərilmişdir.

Cədvəl 2.

Elektromənfilik [15]	k [dynes/cm·10 ⁻⁵] [15]	Pauling elektromənfiliyi [14]	k [dynes/cm·10 ⁻⁵] [14]	d, Å [13]	
Ge (2,01)	As-Se (1,936)	Ge (1,8)	As-Se (1,765)	As-S (2,26)	Ge-Ge (2,39)
As (2,18)	As-S (2,095)	As (2)	As-S (1,943)	As-Se (2,39)	As-As (2,42)
S (2,58)	Ge-Se (2,69)	S (2,5)	Ge-Se (2,319)	Ge-S (2,22)	Se-Se (2,38)
Se (2,55)	Ge-S (3,018)	Se (2,4)	Ge-S (2,673)	Ge-Se (2,36)	S-S (2,13)

Cədvəl 1-də alınan nəticələr göstərir ki, Ge₄As₁₄Se₈₂, Ge₄As₁₄S₂Se₈₀, Ge₇As₁₆S₅Se₇₂, Ge₁₀As₂₀S₁₀Se₆₀, Ge_{17,5}As₁₅S₁₅Se_{52,5}, Ge₂₄As₁₉S₂₀Se₃₇, Ge₂₅As₁₀S₂₅Se₄₀, Ge₂₆As₁₈S₃₀Se₂₆ və Ge₃₃As₁₇S₃₅Se₁₅ xalkogenid şüşəvari tərkiblərinin Raman səpilmə spektrlərinə molekulyar quruluş modelinin tətbiqi elmi

ədəbiyyatda alınan nəticələrlə yaxşı uyğunluq təşkil edir.

4. XÜLASƏ

Məqalədə molekulyar quruluş modeli tətbiq olunaraq Ge₄As₁₄Se₈₂, Ge₄As₁₄S₂Se₈₀, Ge₇As₁₆S₅Se₇₂,

$\text{Ge}_{10}\text{As}_{20}\text{S}_{10}\text{Se}_{60}$, $\text{Ge}_{17.5}\text{As}_{15}\text{S}_{15}\text{Se}_{52.5}$, $\text{Ge}_{24}\text{As}_{19}\text{S}_{20}\text{Se}_{37}$, $\text{Ge}_{25}\text{As}_{10}\text{S}_{25}\text{Se}_{40}$, $\text{Ge}_{26}\text{As}_{18}\text{S}_{30}\text{Se}_{26}$ və $\text{Ge}_{33}\text{As}_{17}\text{S}_{35}\text{Se}_{15}$ xalkogenid şüşəvari tərkiblərini əmələ gətirən müxtəlif quruluş elementlərinin və rabitələrin rəqs tezlikləri hesablanmışdır. Göstərilmişdir ki, amorf matrisanı təşkil edən $\text{GeSe}_{4/2}$ ($\text{GeS}_{4/2}$) tetraedrik quruluş elementlərinin rəqs modları üçün hesablanmış tezliklərin qiymətləri (278 cm^{-1} , 332 cm^{-1}) onların asimmetrik rəqs modları (F_2 -modu) və $\text{GeS}_{4/2}$ tetraedrik quruluş elementlərinin simmetrik künc sərhədli gərilmə rəqs modlarının tezlikləri ilə uyğunluq təşkil edir. Müəyyən olunmuşdur

ki, germaniumunla (Ge) yanaşı arsen (As) atomlarının konsentrasiyasının artması hesabına amorf matrisda $\text{AsSe}_{3/2}$ piramidal quruluş elementlərinin nisbi payı artır. Piramidal quruluş elementləri üçün optik modun kütləsini təyin edən Herzberg düsturu tətbiq olunaraq $\text{AsS}_{3/2}$, $\text{AsSe}_{3/2}$ piramidal quruluş elementlərinin rəqs modları hesabına Raman səpilmə spektrinin $343\div 385\text{ cm}^{-1}$, $215\div 226\text{ cm}^{-1}$ tezliklər aralığında müşahidə olunan maksimumlarının hesablamalarının nəticələri (348 cm^{-1} , 229 cm^{-1}) ilə uyğunluq təşkil etdiyi təsdiq olunmuşdur.

- [1] Rongping Wang, Kunlun Yan, Zhiyong Yang, Barry Luther-Davies. Structural and physical properties of $\text{Ge}_{11.5}\text{As}_{24}\text{S}_{64.5-x}\text{Se}_{64.5-(1-x)}$ glasses. Journal of Non-Crystalline Solids 427, 2015, 16–19.
- [2] Zongwei Xu, Zhongdu He, Ying Song, Xiu Fu, Mathias Rommel, Xichun Luo, Alexander Hartmaier, Junjie Zhang and F. Fengzhou. Topic Review: Application of Raman Spectroscopy Characterization in Micro/Nano-machining, Micromachines 9(7), 361, 2018. Doi: [10.3390/mi9070361](https://doi.org/10.3390/mi9070361)
- [3] S.R. Elliott. Medium-range structural order in covalent amorphous solids. Nature, 1991, 354, p.445-452.
- [4] S.R. Elliott. Second sharp diffraction peak in the structure factor of binary covalent network glasses. Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys., 1995, vol. 51, p.8599
- [5] A.P. Sokolov. Medium-range order in glasses: Comparison of Raman and diffraction measurements. A.P. Sokolov, A. Kisliuk, M. Soltwisch, D. Quitmann. Phys.Rev. Lett., 1992, 69 (1), p.1540-1543.
- [6] R.I. Alekberov, G.A. Isayeva, S.I. Mekhtiyeva. Boson peak and nanostructure of chalcogenide glass-like semiconductors. Journal of Advances in Physics, 2014, 6(3), p.1259-1262.
- [7] M.Olivier, J.C.Tchahame, P.Němec, M. Chauvet, V. Besse, C. Cassagne, G. Boudebs, G. Renversez, R. Boidin, E. Baudet, and V. Nazabal. Structure, nonlinear properties, and photosensitivity of $(\text{GeSe}_2)_{100-x}(\text{Sb}_2\text{Se}_3)_x$ glasses. Optical Materials Express, vol. 4, Issue 3, pp. 525-540, 2014. <https://doi.org/10.1364/OME.4.000525>
- [8] Quan Guo, Yantao Xu, Haitao Guo a, Xusheng Xiao, Changgui Lin, Xiaoxia Cui, Pengfei Wang, Fei Gao, Min Lua. Bo Peng Effect of iodine (I2) on structural, thermal and optical properties of Ge-Sb-S chalcogenide host glasses and ones doped with Dy. Journal of Non-Crystalline Solids 464, 2017, 81–88.
- [9] Walter Gordy. A Relation between Bond Force Constants, Bond Orders, Bond Lengths, and the Electronegativities of the Bonded Atoms. The Journal of Chemical Physics 14, 305, 1946; doi: 10.1063/1.1724138
- [10] P.И. Алекберов, С.И. Мехтиева, А. И. Исаев, Г.А. Исаева. Комбинационное рассеяние света в халькогенидных стеклообразных полупроводниках As-Se-S и As-Se-Te. ФТП, 2014, т.48, вып. 6, стр.823-826.
- [11] G. Lucovsky, R.M. Martin. A molecular model for the vibrational modes in chalcogenide glasses. J. Non-Cryst.Solids. 1972, 8–10, p.185–190.
- [12] Mykhaylo Shpotyuk, Oleh Shpotyuk. Correlation of the glass transition temperature and average energetic connectivity in network chalcogenide glasses, Computational Problems Of Electrical Engineering, vol. 11, No. 2, 2021, p. 32-37.
- [13] SAMSON molecular design software <https://www.samson-connect.net>
- [14] L. Pauling. The nature of the chemical bond, Cornell University Press Ithaca NY, Chap. IX, 1948.
- [15] Таблица Менделеева – Ptable, <https://ptable.com/>
- [16] G. Herzberg. Infrared and Raman Spectra of Polyatomic Molecules (Van Nostrand-Reinhold, New York, 1945.

S.I. Mekhtiyeva, R.I. Alekberov, S.M. Mammadov

STUDY OF RAMAN SCATTERING BASED ON MOLECULAR STRUCTURE MODEL IN Ge-As-Se-S CHALCOGENIDE GLASSY SYSTEM

Optical oscillation modes of structural elements forming the local structure of $\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{Se}_{82}$, $\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{S}_2\text{Se}_{80}$, $\text{Ge}_7\text{As}_{16}\text{S}_5\text{Se}_{72}$, $\text{Ge}_{10}\text{As}_{20}\text{S}_{10}\text{Se}_{60}$, $\text{Ge}_{17.5}\text{As}_{15}\text{S}_{15}\text{Se}_{52.5}$, $\text{Ge}_{24}\text{As}_{19}\text{S}_{20}\text{Se}_{37}$, $\text{Ge}_{25}\text{As}_{10}\text{S}_{25}\text{Se}_{40}$, $\text{Ge}_{26}\text{As}_{18}\text{S}_{30}\text{Se}_{26}$, $\text{Ge}_{33}\text{As}_{17}\text{S}_{35}\text{Se}_{15}$ with thin films chalcogenide glassy compositions obtained by vacuum thermal evaporation method were studied by Raman spectroscopy. Applying the model of the molecular structure to the Raman spectra of studied substances, it was confirmed that the peaks and scattering bands with different vibration frequencies observed in spectra are associated with the presence of pyramidal ($\text{AsS}_{3/2}$, $\text{AsSe}_{3/2}$) and tetrahedral ($\text{GeSe}_{4/2}$, $\text{GeS}_{4/2}$) structural elements and chemical bonds (As-S, As-Se, Ge-S, Ge-Se) that form an amorphous matrix.

С.И. Мехтиева, Р.И. Алекберов, С.М. Маммадов

**ИССЛЕДОВАНИЕ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЙЯНИЯ СВЕТА НА ОСНОВЕ
МОДЕЛИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ В ХАЛЬКОГЕНИДНОЙ СТЕКЛООБРАЗНОЙ
СИСТЕМЕ Ge-As-Se-S**

Моды оптических колебаний структурных элементов, образующих локальную структуру $\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{Se}_{82}$, $\text{Ge}_4\text{As}_{14}\text{S}_2\text{Se}_{80}$, $\text{Ge}_7\text{As}_{16}\text{S}_5\text{Se}_{72}$, $\text{Ge}_{10}\text{As}_{20}\text{S}_{10}\text{Se}_{60}$, $\text{Ge}_{17,5}\text{As}_{15}\text{S}_{15}\text{Se}_{52,5}$, $\text{Ge}_{24}\text{As}_{19}\text{S}_{20}\text{Se}_{37}$, $\text{Ge}_{25}\text{As}_{10}\text{S}_{25}\text{Se}_{40}$, $\text{Ge}_{26}\text{As}_{18}\text{S}_{30}\text{Se}_{26}$, $\text{Ge}_{33}\text{As}_{17}\text{S}_{35}\text{Se}_{15}$ с тонких пленок халькогенидных стеклообразных композиций, полученных методом термического испарения в вакууме, исследованы методом рамановской спектроскопии. Применяя модель молекулярного строения к спектрам комбинационного рассеяния исследуемых веществ, было подтверждено, что пики и полосы рассеяния с разными частотами колебаний, наблюдаемые в спектрах, связаны с наличием пирамидальных ($\text{AsS}_{3/2}$, $\text{AsSe}_{3/2}$) и тетраэдрических ($\text{AsS}_{3/2}$, $\text{AsSe}_{3/2}$) $\text{GeSe}_{4/2}$, $\text{GeS}_{4/2}$ структурных элементов и химических связей (As-S , As-Se , Ge-S , Ge-Se), образующих аморфную матрицу.