

# As<sub>40</sub>Se<sub>60</sub> BİNAR XALKOGENİD ŞÜŞƏVARI SİSTEMİNDƏ RAMAN SƏPİLMƏSİNİN CÜT-PARSİAL KÖRRELYASIYA FUNKSIYALARININ RADİAL PAYLANMASI ÜSULU İLƏ ARAŞDIRILMASI

S.İ. MEHDİYEVA, R.İ. ƏLƏKBƏROV, S.M. MƏMMƏDOV, L.Ə. ƏLİYEVA,

A.Ç. MƏMMƏDOVA, S.U. ATAYEVA, N.N. EMİNOVA

*Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil nazirliyi, Fizika İnstitutu,*

*Bakı, Az 1143, H.Cavid, 131 E-mail: Rahim-14@mail.ru*

As<sub>40</sub>Se<sub>60</sub> binar xalkogenid şüşəvari sistemində quruluş əmsalının ( $S(Q)$ ) səpilmə vektorundan və intensivliyin tezlikdən asılılıqları neytron difraksiya və Raman səpilməsi metodları ilə tədqiq olunmuşdur. Tədqiq olunan materialın lokal quruluşunu formalaşdırın piramidal quruluş elementlərinin (AsSe<sub>3/2</sub>) və onlar arasındakı körpü əlaqələrin (As-Se-As) Raman səpilməsində müşahidə olunan rəqsi modların tezlikləri ( $\nu_{\text{AsSe}_{3/2}} = 226 \pm 0.5 \text{ sm}^{-1}$  və  $\nu_{\text{As-Se-As}} = 281 \pm 0.5 \text{ sm}^{-1}$ ) neytron difraksiya səpilməsinin nəticələrinə Əks Monte-Karlo modelləşməsinə (ƏMK) tətbiq etməklə müəyyənləşdirilmişdir.

**Açar sözlər:** xalkogenid şüşə, amorf, orta nizam, yaxın nizam.

**Pacs:** 81.05. Gc

## 1. GİRİŞ

Müxtəlif maddələrin (Si, Ge, SiC, Se) kristal və amorf modifikasiyalarında Raman səpilməsinə dair tədqiqatlar [1, 2] göstərir ki, istənilən maddəyə (kristal, amorf, polimer və s.) məxsus Raman səpilmə spektri həmin maddənin quruluşu və digər xüsusiyyətləri haqqında mühüm informasiyaya malikdir. Kristal maddələrin otaq temperaturunda birinci tərtib Raman səpilməsi kəskin pikə və dar yarımənə malik olub (full width at half maximum-FWHM  $\approx 3,5 \text{ sm}^{-1}$ ) üçqat cırlaşmış optik fononlarla əlaqələndirilir. Qeyd olunan tədqiqatlar [1, 2] göstərir ki, kristal halından amorf hala keçdikdə uzaq nizamlı düzülüşünün (UND) olmaması ilə bağlı olaraq dalğa vektoru üçün seçmə qaydası pozulur və onun hesabına, Raman səpilməsində bütün optik fononların iştirakı icazəli olur. Bunun nəticəsində amorf maddələrin Raman səpilmə spektrinin mənzərəsi dəyişərək geniş maksimumlu səpilmə zolağı ilə xarakterizə olunan fonon halları sıxlığının paylanması ilə xarakterizə olunur [1]. Səpilmə zolağının vəziyyəti tədqiq olunan maddənin quruluşunu, stexiometrik tərkibini və digər funksional qruplarını analiz etməyə, onun vəziyyətinin sürüşməsi isə təzyiqin, temperaturun, deformasiyanın təsirini tədqiq etməyə imkan verir. Raman səpilmə spektrində birinci pikin yarımənə maddənin kristal, və ya amorf luluq dərəcəsini, defektlərin, müxtəlif aşqarların təsirini müəyyənləşdirməyə, onun intensivliyi isə konsentrasiyanı müəyyənləşdirməyə imkan verir [1, 2]. Bu tədqiqatların müqayisəli təhlili göstərir ki, molekulyar quruluş modelinə əsasən Raman aktiv rəqsi modların tezliklərinin təyini üçün amorf matrisanı əmələ gətirən iki qonşu atomları əlaqələndirən homo- və heteropolıyar rabitələrə, və ya müxtəlif atomar quruluş elementlərini təmin edən rabitələrə məxsus qüvvə sabitinin ( $k$ ) və optik modun kütləsinin ( $\mu$ ) daha dəqiq modelləşmələr və təcrübə metodlarına əsaslanaraq hesablanmasına ciddi zərurət vardır.

Təqdim olunan məqalənin əsas ideyası As<sub>40</sub>Se<sub>60</sub> tərkibinə məxsus neytron difraksiya səpilməsinin nəticələrinə Əks Monte-Karlo modelləşməsi (ƏMK) tətbiq olunaraq lokal quruluşu formalaşdırın piramidal quruluş elementlərinin (AsSe<sub>3/2</sub>) və onlar arasındakı körpü

əlaqələrin (As-Se-As) hesabına Raman səpilməsində yaranan rəqsi modların tezliyini ( $\nu$ ) müəyyənləşdir-məkdir.

## 2. TƏCRÜBƏNİN METODİKASI VƏ NÜMUNƏLƏRİN ALINMASI

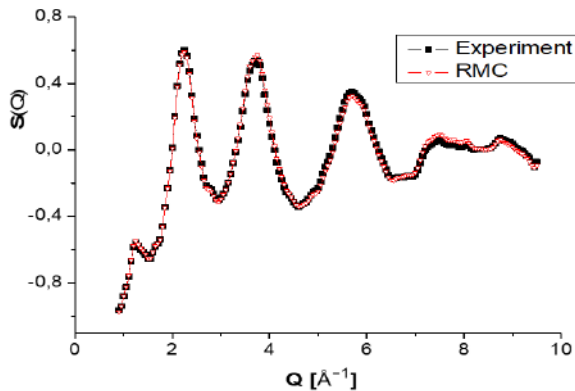
As<sub>40</sub>Se<sub>60</sub> xalkogenid şüşəvari tərkiblərinin sintezi ortasından tilinə perpendikulyar istiqamətdə yerləşən ox ətrafında fırlanan silindrik soba üsulu ilə yerinə yetirilmişdir. Sintez üçün tərkibə daxil olan xüsusi təmiz (təmizlik dərəcəsi 99,9999%) elementlərdən müvafiq miqdarda elekton tərəzidə çəkib götürməklə, daxili diametri 14÷16 mm və havası 10<sup>-4</sup> tor təzyiqə qədər sorulmuş kvarts ampulalara doldurulmuşdur. Fırlanan soba üsulunun seçilməsi alınmış məhlulun homogenliyini artırmaq məqsədilə nəzərdə tutulmuş və 950°C-dən yuxarı temperaturda sintez edilməklə bu temperaturda 12 saat ərzində saxlanılmışdır. Belə yüksək temperatur tərkibə daxil olan bütün komponentlərin mümkün qədər az özlülüklə bir-birinə qarışmasını təmin etmək məqsədilə yaradılmışdır. Sintez prosesinin sonunda xəlitənin soyudulması sobanı söndürükdən sonra havada yerinə yetirilmişdir. Neytron-difraksiya səpilməsinə dair eksperimentlər termal neytronlu Budapeşt Tədqiqat reaktorunda ikioxlu monoxromatik neytron difraktometrinin (dalğa uzunluğu  $\lambda_0 = 1.068 \text{ \AA}$  və səpilmə vektoru  $Q = 0.45 \div 9.8 \text{ \AA}^{-1}$ ) köməyi ilə yerinə yetirilmişdir [3]. Tədqiqat zamanı istifadə olunan maddələr massiv haldan təqribən 3÷4 q miqdarında toz halına salınaraq diametri 8 mm, hündürlüyü ( $h$ ) 50 mm divarının qalınlığı 0,07 mm olan vanadium tərkibli silindrik qablara doldurulmuşdur. Aparılan bütün təcrübələr otaq temperaturunda yerinə yetirilmişdir. Neytron difraksiya səpilməsinin nəticələrinə Əks Monte-Karlo modelləşməsinin (ƏMK) tətbiq edilməsi üçün paket proqram istifadə olunmuşdur (The software package RMC++ [<http://www.szfk.hu/~nphys/rmc+/opening.html>]) [4]. Hər bir tərkib üçün nizamsız atomik konfigurasiya olaraq 10.000 atomdan ibarət modelləşmə qutusu götürülmüş As<sub>40</sub>Se<sub>60</sub> üçün atomik sıxlıq 0.0355 atoms/Å<sup>3</sup> və modelləşmə qutusunun yarımuzunluğu isə 34.668 Å

götürülmüşdür. Raman səpilməsi təcrübələri şüşə altlıqlar üzərində  $d=10 \mu\text{m}$  qalınlıqlı nazik amorf təbəqələrdə yerinə yetirilmişdir. Bu tədqiqatlar üç ölçülü konfokal lazer mikrospektroqrafında (Türkiyə, Tubitak tədqiqat mərkəzi) əsasən optik spektrin  $\nu=25\div 400 \text{ sm}^{-1}$  intervalında edilmişdir.

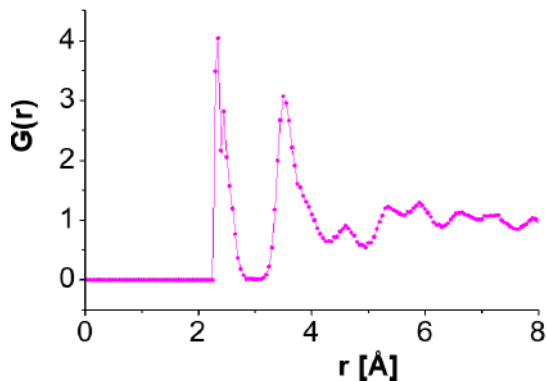
### 3. NƏTİCƏLƏR VƏ ONLARIN MÜZAKİRƏSİ

Şəkil 1-də As<sub>40</sub>Se<sub>60</sub> tərkiblərində neytron difraksiya səpilməsindən alınan quruluş əmsallarının ( $S(Q)$ ) təcrübə (simvollarla təsvir olunan) və modelin (qara xətlə təsvir olunan əyrilər ƏMK modelləşməsinin nəticələridir) verdiyi spektral asılılıqları təsvir olunmuşdur.

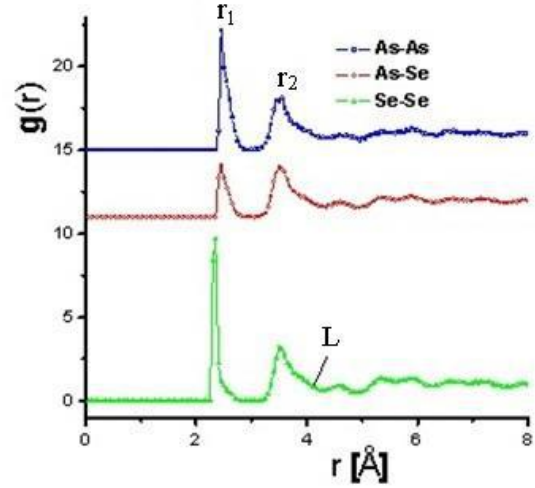
Spektrlərin xüsusiyyəti kovalent rabitəli materiallardakı piklərlə bənzərlik təşkil edən və əsas piklərin sol tərəfində yerləşən kiçik amplitudlu pikin müşahidə olunmasıdır. Bu pik birinci kəskin difraksiya piki (BKDP) adlanır. Tədqiq olunan As<sub>40</sub>Se<sub>60</sub>-ə məxsus səpilmə əyrilərində müşahidə olunan BKDP-vəziyyəti səpilmə vektorunun  $Q\sim 1\div 1.5 \text{ \AA}^{-1}$  – qiymətləri intervalında yerləşir ki, bu da kovalent rabitəli xalkogenid şüşələrdə orta nizam oblastının varlığı ilə izah olunur [5, 6]. As<sub>40</sub>Se<sub>60</sub>- maddəsində lokal quruluşu formalaşdıran müxtəlif kimyəvi rabitələrin rolunun aydınlaşdırılması və, o cümlədən, rabitə uzunluğunun müəyyənləşdirilməsi məqsədilə ƏMK modelləşməsi tətbiq olunaraq yekun və parsial cüt korrelyasiya funksiyaları ( $g_{ij}(r)$ ) hesablanaraq nəticələr şəkil 2 və şəkil 3-də təsvir olunmuşdur.



Şəkil 1. As<sub>40</sub>Se<sub>60</sub> –tərkibində quruluş əmsalının ( $S(Q)$ ) səpilmə vektorundan asılılığı.



Şəkil 2. Stexiometrik nisbətlə As<sub>40</sub>Se<sub>60</sub>- tərkibi üçün yekun cüt korrelyasiya paylanması funksiyaları.



Şəkil 3. As<sub>40</sub>Se<sub>60</sub> tərkibi üçün cüt parsial korrelyasiya funksiyaları:  $g_{\text{As-As}}(r)$ ,  $g_{\text{As-Se}}(r)$ ,  $g_{\text{Se-Se}}(r)$ .

Tədqiqatlar [7] göstərir ki, Se-Se və As-As, As-Se, korrelyasiyalarına uyğun olan cüt parsial korrelyasiya funksiyalarının ( $g_{\text{Se-Se}}$ ,  $g_{\text{As-As}}$ ,  $g_{\text{As-Se}}$ ) qrafiklərində müşahidə olunan ikinci piklər isə ONO-nun varlığı ilə bağlı olub, tədqiq olunan maddəyə məxsus AsSe<sub>3/2</sub> piramidial quruluş elementləri arasındakı korrelyasiyaya uyğun gəlir. Yuxarıda qeyd olunan cüt parsial korrelyasiya funksiyalarının ( $g_{ij}(r)$ ) radial paylanma əyrilərindən istifadə edərək As<sub>40</sub>Se<sub>60</sub>-maddəsinin lokal quruluşunu formalaşdıran piramidial quruluş elementlərinin (AsSe<sub>3/2</sub>) və onların arasındakı körpü əlaqələrinin hesabına yaranan rəqsi modların tezliyini hesablamaq üçün koordinasiya sferalarının radiusları ( $r_1=d$ ,  $r_2$ ) və ikinci koordinasiya sferasının bitmə sərhəddi ( $L$ ) təyin edilərək şəkil 4-də təsvir edilən Raman səpilmə spektrində müşahidə olunan rəqsi modların identifikasiya tezlikləri ilə müqayisə edilmişdir. Təklif edilən ideyanın reallaşdırılması zamanı qeyri-üzvi amorf bərk cisimlərin lokal quruluşunda orta nizam oblastının (ONO) növü və ölçüsü ilə neytron difraksiya təcrübələrinin nəticələrindən əldə edilən radial paylanma funksiyasının müxtəlif sərhəd və intervalları arasındakı korrelyativ əlaqələrin qrafik təsvirləri nəzərə alınmışdır [8].

Məqalədə molekulyar quruluş modelinə əsasən Raman aktiv rəqs modların tezliyi aşağıdakı düsturla hesablanır [9].

$$\nu_0 = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad (1)$$

burada  $k$  - qonşu atomları və ya atomar quruluş elementlərini əlaqələndirən qüvvə sabiti,  $\mu$ -isə kiçildilmiş kütlə (və ya optik modun kütləsi) adlanır və (2)-düsturu ilə hesablanır.

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_a} + \frac{1}{m_b} \quad (2)$$

burada  $m_a$  və  $m_b$  binar AB-maddəsində A və B elementlərinin atomar kütlələridir (məs:  $m_{\text{As}}$ ,  $m_{\text{Se}}$ ). Təqdim olunan məqalədə göstərilir ki, As<sub>40</sub>Se<sub>60</sub> tərkibinə məxsus neytron difraksiya səpilməsinin nəticələrinə Əks Monte-Karlo modelləşməsi (ƏMK) tətbiq olunarsa, (2) düsturuna daxil olan  $k$ -qüvvə sabitinin piramidial

(AB<sub>3</sub>) quruluş elementlərində hesablanması üçün Walter Gordy [10] tərəfindən təklif olunan (3) düsturundan  $d$ -rabitə uzunluğunu ( $d=r_1$ , cədvəl 1) və Herzberg [11] tərəfindən təklif olunan (4) düsturundan piramidal quruluş elementlərinə (AsSe<sub>3/2</sub>) məxsus optik modun kütləsini ( $\mu=m_1$ ) dəqiq hesablamaq mümkünlüyü göstərilir.

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

$$\mu = m_1 = \frac{3m_y m_x \sin\beta}{m_x + 3m_y \sin\beta}, \quad (4)$$

(4) düsturunda ifadə olunan  $\sin\beta$ -ni hesablamaq üçün As<sub>40</sub>Se<sub>60</sub> tərkibinə məxsus neytron difraksiya səpilməsinin nəticələrinə Əks Monte-Karlo modelləşməsi (ƏMK) tətbiq edilərək alınan cüt parsial korrelyasiya funksiyalarının ( $g_{ij}(r)$ ) radial paylanma əyrilərindən (şəkil 3) koordinasiya sferalarının radiusları ( $r_1=d$ ,  $r_2$ ) və ikinci koordinasiya sferasının bitmə sərhəddi ( $L$ ) təyin olunaraq nəticələr (5) və (7) düsturlarında nəzərə alınmışdır (cədvəl 1).

$$\phi = 2\arcsin\left(\frac{L}{2r_1}\right), \quad (5)$$

$$\sin\beta = \frac{2\arcsin(\phi/2)}{\sqrt{3}}, \quad (6)$$

burada  $\phi$  - piramidal quruluş (AsSe<sub>3/2</sub>) elementlərində As-Se rabitələri arasındakı bucaqlar,  $\beta$ -isə piramidal quruluşlu AsSe<sub>3/2</sub> molekulunun üçqat simmetriya oxu ilə As-Se rabitəsi arasındakı bucaqlardır [9, 12].

$$\alpha = \arcsin\left(\frac{r_2}{2r_1}\right) \quad (7)$$

(7) düsturundan hesablanan  $\alpha$ -bucağının iki misli ( $2\alpha$ ) As-Se-As körpü əlaqəsindəki rabitə bucağıdır [12]. A bucağının sinusu ( $\sin\alpha$ ) ilə As-Se-As körpü əlaqələrinin tezliyi arasındakı əlaqə aşağıdakı düsturla ifadə edilir:

$$\nu_{As}^2 = \frac{1}{4\pi^2 c^2} \cdot \frac{2k_r}{m_{As-Se}} \cdot \sin^2 \alpha, \quad (8)$$

$\alpha$ -bucağının qiyməti (8) düsturunda nəzərə alınaraq As-Se-As körpü əlaqələrinin Raman səpilməsində müşahidə olunan rəqsi tezliyi hesablanmış və nəticələr Cədvəl 1-də göstərilmişdir.

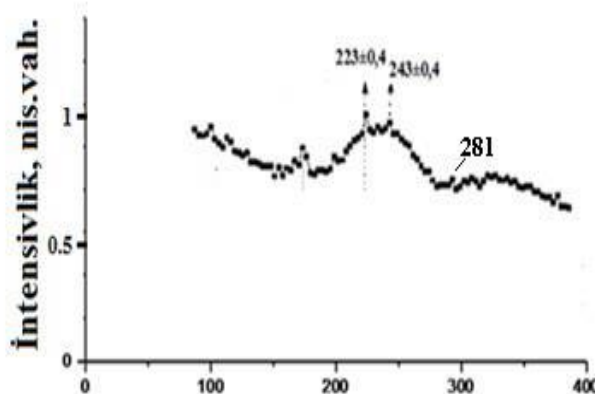
Cədvəl 1.

Tərkib	$d=r_1, \text{Å}$	$r_2, \text{Å}$	$L, \text{Å}$	$m_{As}, \text{a.k.v.}$	$m_{Se}, \text{a.k.v.}$	$X_{As} [13]$	$X_{Se} [13]$	
As <sub>40</sub> Se <sub>60</sub>	2,45	3,5	4,15	74,92	78,968	2	2,4	
	$\phi$	$\sin\beta$	$\alpha$	$\sin^2\alpha$	$m_1, \text{a.k.v.}$	$k_{As-Se}$	$\nu_{AsSe3/2}, \text{sm}^{-1}$	$\nu_{As-Se-As}, \text{sm}^{-1}$
	116°	0,97	46,4°	0,524	56,63	1,71	226±0,5	281±0,5

Cədvəl 1-də ifadə olunan koordinasiya sferalarının radiuslarının ( $r_1=d$ ,  $r_2$ ) və ikinci koordinasiya sferasının bitmə sərhəddinin ( $L$ ) qiymətlərindən istifadə edərək hesablanan piramidal quruluş elementlərinin (AsSe<sub>3</sub>) və həmin elementlər arasındakı körpü əlaqələrin (As-Se-As) rəqsi tezlikləri ( $\nu_{AsSe3/2}$ ,  $\nu_{As-Se-As}$ ) şəkil 3-də As<sub>40</sub>Se<sub>60</sub> tərkibi üçün təsvir edilən təcrübi Raman səpilmə spektrlərinin tezlikləri ilə müqayisə edilmişdir. Uzun müddət müxtəlif xalkogenid şüşələrdə (As<sub>2</sub>S<sub>3</sub>, As<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>, As<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>, GeS<sub>2</sub>, GeSe<sub>2</sub> və s.) Raman səpilməsi-

nin fiziki izahı üçün Lukovski və Martin [14] tərəfindən təklif olunmuş molekulyar quruluş modeli istifadə olunmuşdur.

Bu modelin əsas fiziki mahiyyəti daxili rəqsləri valent qüvvə sahələri modeli ilə təsvir olunan molekulyar quruluş elementlərinin identifikasiyasıdır. Burada göstərilir ki, As<sub>2</sub>S<sub>3</sub>-ün molekulyar quruluşu piramidal AsS<sub>3</sub> molekullarından ibarət olmaqla şəbəkə konfigurasiyasında aşağıdakı kimi təsvir oluna bilər.



Şəkil 4. As<sub>40</sub>Se<sub>60</sub> xalkogenid şüşəvari tərkibini Raman səpilmə spektri.

Molekulyar quruluş modelinə əsasən müəyyən olunmuşdur ki, As<sub>2</sub>S<sub>3</sub>, As<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>, As<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>-ləri əmələ gətirən AsS<sub>3</sub>, AsSe<sub>3</sub>, AsTe<sub>3</sub> piramidal quruluş elementləri üçün dominantlıq təşkil edən rəqs modlarının tezlikləri uyğun olaraq  $\nu_1=344 \text{ sm}^{-1}$ ,  $227 \text{ sm}^{-1}$ ,  $195 \text{ sm}^{-1}$  olub Raman aktiv rəqs modları hesab olunur. Molekulyar quruluş modelinə əsaslanaraq aparılan müxtəlif tədqiqatlar göstərir ki, As<sub>2</sub>S<sub>3</sub>-ün kristalından (*c*), şüşə (*a*) və buxarlandırma ilə alınan nazik amorf təbəqələrinə (*b*) keçid zamanı piklərin genişlənməsi müxtəlif piramidal quruluş elementlərinin (AsS<sub>3/2</sub>) rəqsləri və onların qarşılıqlı əlaqələri ilə izah olunmuşdur [15]. Raman aktiv modların nəzəri araşdırılaraq təcrübə ilə müqayisə olunması və alınan nəticələrin mümkün izahı müasir tədqiqat [16] işlərinin əsas ideyasına çevrilmişdir. Məqalədə AsS<sub>n</sub>Se<sub>3-n</sub> (*n*=0,1,2,3) klasterlərinin əsas Raman aktiv modlarını tədqiq etmək üçün Hartree-Fork nəzəriyyəsinə əsasən hesablamalar aparılmış və tədqiq olunan maddənin molekulyar quruluşu [17]-də təklif olunan “künc sərhədlı” klaster konfigurasiyası ilə təsvir olunmuşdur. Müəllif tərəfindən müəyyən olunan AsSe<sub>3</sub>, AsSSe<sub>2</sub>, AsS<sub>2</sub>Se, AsS<sub>3</sub>-molekulyar quruluş vahidlərinə uyğun rəqsi tezliklər ardıcılığa  $228 \text{ sm}^{-1}$ ,  $238 \text{ sm}^{-1}$ ,  $252 \text{ sm}^{-1}$ ,  $339 \text{ sm}^{-1}$  təşkil edirlər [16]. Şəkil.4-də təsvir olunan Raman səpilmə spektrində  $281 \pm 0.5 \text{ sm}^{-1}$  tezlikli pik piramidal (AsSe<sub>3</sub>) quruluş elementləri arasındakı körpü əlaqələrinin mövcudluğu ilə əlaqədardır [14]. Təcrübədən alınan bu nəticə cədvəl 1-də göstərilən hesablamaların nəticələri ilə uyğunluq təşkil edir. Beləliklə, məqalədə təklif olunan yeni yanaşma və ali-

nan nəticələr [18] göstərir ki, As<sub>40</sub>Se<sub>60</sub> tərkibinə məxsus neytron difraksiya səpilməsinin nəticələrinə Əks Monte-Karlo (ƏMK) modelləşməsi tətbiq olunaraq cüt-parsial korrelyasiya funksiyalarının radial paylanması müəyyənləşdirilməsi lokal quruluşu formalaşdıran piramidal quruluş elementlərinin (AsSe<sub>3/2</sub>) və onlar arasındakı körpü əlaqələrin (As-Se-As) Raman səpilməsində müşahidə olunan rəqsi modların tezliyini (*v*) dəqiq təyin etməyə imkan verir.

#### 4. NƏTİCƏ

Neytron difraksiya səpilməsinin nəticələrinə Əks Monte-Karlo modelləşməsi (ƏMK) tətbiq olunaraq As<sub>40</sub>Se<sub>60</sub>-ə məxsus cüt parsial korrelyasiya funksiyalarının radial paylanması müəyyənləşdirilmiş, göstərilmişdir ki, cüt parsial korrelyasiya funksiyalarının radial paylanmasından koordinasiya sferalarının radiuslarını təyin edərək Walter Gordy və Herzberg tərəfindən təklif olunan piramidal quruluş elementlərinə (AsSe<sub>3/2</sub>) məxsus *k*-qüvvə sabitini, optik modun kütləsini və lokal quruluşu formalaşdıran piramidal quruluş elementlərinin (AsSe<sub>3/2</sub>) və onlar arasındakı körpü əlaqələrin (As-Se-As) hesabına Raman səpilməsində yaranan rəqsi modların tezliklərini (*v*) hesablamaq mümkündür. Təklif olunan yanaşmaya əsasən piramidal quruluş elementlərinə (AsSe<sub>3/2</sub>) və onların arasındakı körpü əlaqələrinə (As-Se-As) məxsus rəqsi modların tezlikləri  $\nu_{\text{AsSe}_{3/2}}=226 \pm 0.5 \text{ sm}^{-1}$  və  $\nu_{\text{As-Se-As}}=281 \pm 0.5 \text{ sm}^{-1}$  qiymətlərini almışdır.

- [1] Zongwei Xu, Zhongdu He, Ying Song, Xiu Fu, Mathias Rommel, Xichun Luo, Alexander Hartmaier, Junjie Zhang and F. Fengzhou. Micromachines 2018, 9, 361, Topic Review: Application of Raman Spectroscopy Characterization in Micro/Nano-machining
- [2] A.H. Goldan, C.Li, S.J. Pennycook et al. Journal Applied of Physics, 2016, 120, p. 135101-135110.
- [3] E. Sváb, Gy. Mészáros, F. Deák. Neutron powder diffractometer at the Budapest research reactor. Mater. Sci. Forum, 1996, 228, p.247-252.  
<https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/MSF.228-231.247>
- [4] R.L.McGreevy, L.Pusztai. Reverse Monte Carlo simulation: a new technique for the determination of disordered structures, Mol. Simul. 1, 1988, 359–367.
- [5] M. Bauchy, M. Micoulaut. J. Non-Crystalline Solids, 2013, 377, p.34-38.
- [6] J. Li, D.A. Drabold. Phys. Rev. B, 2001, 64(10), p.104206-104208.
- [7] S. Hosokawa, Y. Wang, W.C. Pilgrim et al. J. Non-Crystalline Solids, 2006, 352(9-20), p.1517-1519.
- [8] S.R. Elliott. Medium range structural order in covalent amorphous solids. Nature, vol.354, p.445-452.
- [9] G. Lucovsky. Physical Review B, vol.6, N4, p.1480-1489.
- [10] Walter Gordy. The Journal of Chemical Physics 14, 305, 1946; doi: 10.1063/1.1724138
- [11] G. Herzberg. Infrared and Raman Spectra of Polyatomic Molecules (Van Nostrand-Reinhold, New York, 1945)
- [12] E.I. Kamitsos, J.A. Kapoutsis, I.P. Culeac, M. S. Iovu. J. Phys. Chem. B 1997, 101, 11061-11067
- [13] Linus Pauling. The Nature of the Chemical Bond, Cornell University Press, Ithica, N.Y., 1948.
- [14] G.Lucovsky, R.M.Martin. J.Non-Cryst. Solids, 1972, 8–10, p.185–190.
- [15] K.Tanaka. Amorphous Chalcogenide Semiconductors and Related Materials. K.Tanaka, K. Shimakawa. Springer Nature Switzerland AG, 2021, 310 p.
- [16] X. Hana, H. Taao, R. Panb et al. Structure and vibrational modes of As-S-Se glasses: Raman scattering and ab initio calculations. Physics Procedia, 2013, 48, p. 59-64.
- [17] K. Jackson, A. Briley, S. Grossman. Phys. Rev. B, 1999, 60(22), p. R14985-R149.
- [18] R.I. Alekberov, S. I. Mekhtiyeva, A.I. Isayev, M.Fabian. J. Non - Crystalline Solids, 2017, 470(15), p.152-159.

**S.I. Mekhtiyeva, R.I. Alekberov, S.M. Mammadov, L.A. Aliyeva, A.Ch. Mammadova,  
S.U. Atayeva, N.N. Eminova**

**INVESTIGATION OF RAMAN SCATTERING IN  $As_{40}Se_{60}$  BINARY CHALCOGENIDE GLASSY  
SYSTEM BY METHOD THE RADIAL DISTRIBUTION OF PAIR-PARTIAL CORRELATION  
FUNCTIONS**

The dependences of the structure factor ( $S(Q)$ ) on the scattering vector ( $Q$ ) and intensity on the frequency were studied by neutron diffraction and Raman scattering methods in the  $As_{40}Se_{60}$  binary chalcogenide glass system. The frequencies ( $\nu_{AsSe_{3/2}}=226\pm 0.5\text{ cm}^{-1}$  and  $\nu_{As-Se-As}=172\pm 0.5\text{ cm}^{-1}$ ) of the oscillation modes of the pyramidal structure elements ( $AsSe_{3/2}$ ) and bridge connections between them ( $As-Se-As$ ), which form the local structure of the studied substance was determined by applying reverse Monte-Carlo modeling (RCM) to the results of neutron diffraction scattering.

**С.И. Мехтиева, Р.И. Алекберов, С.М. Маммадов, Л.А. Алиева, А.Ч. Маммадова,  
С.У. Атаева, Н.Н. Эминова**

**ИССЛЕДОВАНИЕ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЙЯНИЯ СВЕТА В БИНАРНОЙ  
ХАЛЬКОГЕНИДНОЙ СТЕКЛООБРАЗНОЙ СИСТЕМЕ  $As_{40}Se_{60}$  МЕТОДОМ РАДИАЛЬНОГО  
РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРНО-ПАРЦИАЛЬНЫХ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ФУНКЦИЙ**

Зависимость структурного фактора ( $S(Q)$ ) от вектора рассеяния ( $Q$ ) и интенсивности от частоты исследованы методами нейтронной дифракции и рамановского рассеяния в бинарной халькогенидной стеклообразной системе  $As_{40}Se_{60}$ . Определялись частоты колебаний моды ( $\nu_{AsSe_{3/2}}=226\pm 0.5\text{ см}^{-1}$  и  $\nu_{As-Se-As}=172\pm 0.5\text{ см}^{-1}$ ) элементов пирамидальной структуры ( $AsSe_{3/2}$ ) и мостовых связей между ними ( $As-Se-As$ ), образующих локальную структуру исследуемого вещества с применением обратного моделирование Монте-Карло (ОМК) к результатам дифракционное рассеяние нейтронов.

*Qəbul olunma tarixi: 25.04.2023*