

М.В. Попович, О.В. Стронський, К.В. Шпортько

Структурні властивості стекел $\text{Ga}_{11.7}\text{Ge}_{14.1}\text{Te}_{74.2}$

Інститут фізики напівпровідників ім.В.Є. Лашкарьова НАН України, Київ, Україна, Niva94@ukr.net

У цій роботі аморфні сплави $\text{Ga}_{11.7}\text{Ge}_{14.1}\text{Te}_{74.2}$ досліджено методами рентгенівської дифракції та рамановської спектроскопії. Експериментальні рентгенівські дифрактограми були використані для розрахунків функцій радіального розподілу, які вказують положення довжин зв'язку найближчого сусіда $r_1 = 2,67 \text{ \AA}$ і довжини зв'язку другого сусіда $r_2 = 4,27 \text{ \AA}$. Подібні значення r_1 спостерігалися для стекел Ga-Ge-Te інших складів. Смуги, які спостерігаються в спектрах комбінаційного розсіювання зразків $\text{Ga}_{11.7}\text{Ge}_{14.1}\text{Te}_{74.2}$ показують, що це скло містить різні нанофази, що можна пояснити за допомогою режимів коливань, властивих склам Ga-Ge і Ge-Te, а також півкам. Дослідження композиційних залежностей характерних складових інтенсивностей раманівських смуг, які змінюються зі зміною складу, слід вивчати для отримання кращого розподілу раманівських смуг.

Ключові слова: халькогенідні стекла; рентгеноструктурний аналіз; функція радіального розподілу; Раманівська спектроскопія; нанофази.

Подано до редакції 07.07.2022; прийнято до друку 05.12.2022.

Вступ

Тонкі півки халькогенідних стекел і композити на їх основі використовуються в якості записуючого носія для виготовлення оптичних елементів, в дисках оптичної пам'яті, голографії, інтегральної і волоконної оптики, датчиків і т.д. [1-19] Це пов'язано з володінням ними такими унікальними характеристиками, як широкий діапазон оптичної прозорості, високі значення показників заломлення і різноманітними фото структурними перетвореннями, що супроводжуються зміною оптичних і хімічних властивостей [2-5]. Серед різних фотоіндукованих ефектів - фотопотемніння і фотопросвітлювання, локальне розширення або скорочення, зміни показника заломлення, поляризаційно-залежні структурні зміни, фото індукований діхроїзм [1-2, 4-5]. Останнім часом активно проводяться дослідження нанокompозитних матеріалів на основі халькогенідних стекел [6, 11, 13-14]. Такі нанокompозитні матеріали забезпечують можливість безпосереднього запису поверхневих рельєфів (без стадії селективного травлення), процес запису залежить від поляризації променів.

Сполуки GaGeTe є цікавими з точки зору застосувань у ІЧ-оптиці [7-10], оптичній пам'яті [15-16] і сенсориці [17]. Особливості будови халькогенідних стекел і півок важливі і впливають на різні характеристики і процеси, в тому числі і фотоіндуковані. Додавання Ga в сполуці GeTe може впливати на час кристалізації і стабільність при кімнатній температурі [20]. Відповідно, краще розуміння структурних властивостей може допомогти в оптимізації процесів чутливості і рельєфоутворення композиційних багатошарових наноструктур на основі халькогенідних стекел, перспективних для безпосереднього запису оптичних елементів. Необхідне краще розуміння кореляцій між їх структурними і макроскопічними властивостями і тому потрібна інформація про структуру ближнього порядку халькогенідних стекел. Це стало основною мотивацією до вивчення стекел $\text{Ga}_{11.7}\text{Ge}_{14.1}\text{Te}_{74.2}$.

I. Експеримент

Досліджувані об'єкти стекла $\text{Ga}_{11.7}\text{Ge}_{14.1}\text{Te}_{74.2}$ були виготовлені традиційним методом гартування з

розплаву. Відповідні кількості елементів високої чистоти (99,999%), вакуумно запаєні в кварцову ампулу, витримували в печі при ~ 1000 °C протягом приблизно 30 годин, струшували для однорідного змішування, а потім загартовували в холодній воді. Зразки рентгенівських дифрактограм записували за допомогою рентгенівського дифрактометра з геометрією Брегга–Брентано з використанням $\text{Cu K}\alpha$ випромінювання $1,54178$ Å та встановленого графітового монохроматора для дифрагованого променя. Дифракційні дані збирали в діапазоні величин вектора розсіювання Q від $0,4$ до 8 Å $Q = \frac{4\pi \sin \theta}{\lambda}$. Усі зразки вимірювалися в геометрії на пропускання. Дифракційні рентгенівські експерименти проводили при температурі навколишнього середовища. Інтенсивності дифракції були скориговані на фонове, некогерентне (поляризація і поглинання) і багаторазове розсіювання звичайними способами з метою усунення частини випромінювання, яка не несе структурної інформації. Спектри вимірювали з постійною швидкістю. Комптонівське розсіювання було скориговано за допомогою значень, наданих Балюзі та Фабером-Зіманом [21-22], загальний структурний фактор $S(Q)$ був розрахований за інтенсивністю розсіювання як

$$S(Q) = \frac{I_{\text{expt}}^{\text{coh}} - \langle f^2(Q) \rangle - \langle f(Q) \rangle^2}{\langle f(Q) \rangle^2}$$

де $\langle f^2(Q) \rangle = \sum_i c_i f_i^2(Q)$, $\langle f(Q) \rangle = \sum_i c_i f_i(Q)$ де c_i – молярна частка, f_i – загальний атомний коефіцієнт розсіювання i -го компонента скла. Після перетворення Фур'є були визначені приведені функції радіального розподілу $G(r)$ (RDF), виміряні $S(Q)$ за допомогою методу швидкого перетворення Фур'є [23-26] наступним чином:

$$G(r) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} (S(Q) - 1) Q \sin(Qr) dQ \quad (1)$$

Дані ще слід помножити на коефіцієнт модифікації, щоб зменшити пульсації, які неминуче виникають через кінцеве доступне верхнє значення K (K_{max}) у вимірюваннях. Тоді рівняння (1) перетворюється до вигляду

$$G(r) = \frac{2}{\pi} \int_0^{Q_{\text{max}}} (S(Q) - 1) Q M(Q) \sin(Qr) dQ \quad (2)$$

де $M(Q)$ називається коефіцієнтом демпфування [25-26] і визначається як

$$M(Q) = \frac{\sin\left(\frac{\pi Q}{Q_{\text{max}}}\right)}{\frac{\pi Q}{Q_{\text{max}}}} \quad Q \leq Q_{\text{max}}, \\ = 0, \quad Q > Q_{\text{max}}$$

$G(r)$ також може бути виражена безпосередньо в реальних просторових координатах, щоб підкреслити його зв'язок з локальною атомною густиною, $\rho(r)$ на відстані r і об'ємною атомною густиною, ρ_0 ; наступним чином

$$G(r) = 4\pi r (\rho(r) - \rho_0) \quad (3)$$

де $\rho(r)$ є функцією густини, яка представляє атомну парну кореляційну функцію, і дорівнює нулю при значеннях r , менших за середню міжатомну відстань найближчих сусідів, і дорівнює середньому значенню густини ρ_0 при дуже великому значенні r , де матеріал стає однорідним. Між цими двома межами ρ_0 для аморфного твердого тіла демонструватиме коливальну поведінку з піками у функції ймовірності, що представляють середні міжатомні відстані. На коротких відстанях ($r \leq 2$ Å), див. рівняння (3), $G(r)$ має слідувати за лінійною густиною ($-4\pi r \rho_0$), яка використовується для перевірки якості даних [25-26]. Функція радіального розподілу, $RDF(r)$, визначається як кількість атомів, що знаходяться на відстанях між $r, r+dr$ від центру атома довільного походження і записується як

$$RDF(r) = rG(r) + 4\pi r^2 \rho_0 = 4\pi r^2 \rho(r) \quad (4)$$

Функція, яка використовується для визначення атомних відстаней і координаційних чисел, є сумарною функцією розподілу, $T(r) = \frac{RDF(r)}{r} = 4\pi r \rho(r)$. Середнє координаційне число N у сферичній оболонці між радіусами r_1 і r_2 навколо будь-якого заданого атома можна розрахувати, як кількість атомів у зоні між r_0 і r' , де r_0 є нижньою межею r , нижче якої $\rho(r)$ дорівнює нулю, а r_0 є першим мінімумом $4\pi r^2 \rho(r)$. Положення першого піку дає значення довжини зв'язку найближчого сусіда, r_1 , і аналогічно положення другого піку дає відстань наступного сусіда, r_2 . RDF дає лише обмежену кількість інформації, яка по суті обмежена локальною структурою навколо даного атома, тобто довжинами зв'язків і кутами зв'язку. Знання довжини зв'язку r_1 і r_2 дає значення кута зв'язку θ , заданого [27]:

$$\theta = 2 * \sin^{-1}\left(\frac{r_2}{2*r_1}\right) \quad (5)$$

Спектри комбінаційного розсіювання зразків $\text{Ga}_{18}\text{Ge}_{20,9}\text{Te}_{61,2}$ були виміряні в спектральному діапазоні від 50 до 400 cm^{-1} при кімнатній температурі за допомогою приставки FRA-106 до Bruker IFS 88 із застосуванням Nd:YAG лазера з потужність 100 мВт і використанням охолодженого рідким азотом Ge детектора, виміри проводилися з роздільною здатністю 1 cm^{-1} із 256 скануваннями, зібраними в кожному експерименті.

III. Результати та їх обговорення

Функції радіального розподілу стекел Ga-Ge-Te.

Для розрахунку функцій радіального розподілу (ФРР) використовували рентгенівські дифрактограми стекел $\text{Ga}_{11,7}\text{Ge}_{14,1}\text{Te}_{74,2}$ ФРР для досліджуваних сплавів отримані з використанням програми RAD GTK+ [28] і представлені на рис. 1. Положення довжини зв'язку найближчих сусідів r_1 було $2,67$ Å, а $r_2 - 4,27$ Å. Подібні значення r_1 спостерігалися для стекел Ga-Ge-Te інших складів. Значення співвідношення r_2/r_1 близькі до $1,63$, що є типовим

значенням для правильної структури тетраедра. Дослідження EXAFS а-GeTe [29] показали, що відстань Ge–Te становить приблизно 2,65 Å. Для систем GaGeTe згідно з [30] довжини зв'язків Te–Ge були оцінені як 2,67 Å. Подібні значення для зв'язків Ga–Te в GaTe (2,64–2,69 Å) отримано в [31] і 2,67 Å для Ga₂₅Te₇₅ у [15].

Значення кута зв'язку $\theta=106^\circ$, розраховані за допомогою рівняння (5) для стекол Ga_{11,7}Ge_{14,1}Te_{74,2} добре узгоджується з опублікованими даними по стеклах інших складів GaGeTe [32].

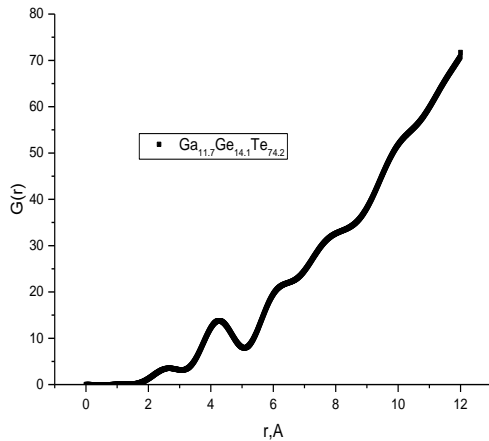


Рис. 1. Функції радіального розподілу скла Ga_{11,7}Ge_{14,1}Te_{74,2}.

Раманівські спектри

Раманівські спектри зразків Ga_{11,7}Ge_{14,1}Te_{74,2} та розкладання на складові смуги, представлені на рис. 2, основні смуги: 88 см⁻¹, 104 см⁻¹, 115 см⁻¹, 125 см⁻¹, 136 см⁻¹ і смугова структура близько 160 см⁻¹. Спостережувані смуги в Раманівських спектрах зразків Ga_{11,7}Ge_{14,1}Te_{74,2} можна пояснити в термінах коливальних мод стекол Ga–Te і Ge–Te [33–47]. Смуга при 88 см⁻¹ у спектрі приписується модам коливальних GeTe (моди вигину тетраедра GeTe₄ (GaTe₄)) [34–39] або тригонального Te [40]. Смуга при 104 см⁻¹ характерна для тригонального Te [40]. Спектри КРС для відпалених плівок GeTe₂ мають дві широкі смуги КРС від 110–135 см⁻¹ і 135–145 см⁻¹ з максимумом при 121 см⁻¹ і 141 см⁻¹ і додаткову смугу помічають при 156 см⁻¹ [33]. Раманівську смугу, отриману при 121 см⁻¹, відносять до моди A₁ тетраедричного блоку GeTe₄ [41]. Дані Раманівського розсіювання для об'ємних стекол Ga–Te [15] відносять смугу 109 см⁻¹ до симетричної дишаючої моди Ga–Te, діапазон 124–135 см⁻¹ – тетраедральної моди GaTe₄ із спільним кутом (CS) або спільним ребром (ES), мода 156 см⁻¹ до мод розтягування Te–Te. Спектри комбінаційного розсіювання осаджених і відпалених плівок Ge–Ga–Te, що охоплюють область 100–200 см⁻¹, складаються з таких ознак: дві основні смуги, розташовані при 120–125 см⁻¹ (пік А) і 150–155 см⁻¹ (пік В) і для відпалених плівок пік С (141 см⁻¹) [42]. Пік А можна віднести до режиму розтягування [GeTe₄], зрештою [GaTe₄] тетраедричних [42–43] або коливальних зв'язків Te–Te [36, 42, 44], пік С при

141 см⁻¹ можна віднести до кристалічної фази Te [42, 44–46]. У Раманівських спектрах плівок GeTe, нанесених при різних температурах [34], виявлено піки при 88, 120, 139 і 160 см⁻¹. Широки піки, виявлені при 88 і 160 см⁻¹, спричинені модами коливальних GeTe [35–37]. Також спостерігалися два чітких піки при 120 і 139 см⁻¹. Відомо, що кристалічний телур має найсильніші піки при 120,4±0,5 і 140,7±0,5 см⁻¹ [47]. Близьке розташування піків, що спостерігаються, дозволяє припустити наявність гомополярних зв'язків Te–Te у осаджених плівках GeTe. У спектрах комбінаційного розсіювання а-GeTe чотири основні смуги з'являються в діапазоні частот 50–250 см⁻¹ (приблизне положення хвильових чисел цих смуг таке: смуга А, ~83 см⁻¹; смуга В, ~125 см⁻¹; смуга С, ~162 см⁻¹; смуга D, ~218 см⁻¹) [35]. Було відмічено, що смуги А, В і С, безумовно, є комбінаціями щонайменше двох окремих піків кожна.

Частотні призначення відомих структурних одиниць у стеклах були використані для виконання аналізу підгонки піків і порівняння відносного внеску кожної структурної одиниці в спектрі аморфних сплавів Ga_{11,7}Ge_{14,1}Te_{74,2}. Слід зазначити, що більша кількість коливальних мод вносить вклад у загальний спектр. Під час підгонки спектрів КРС ми допустили максимальне зміщення піку на 2–3 см⁻¹ від положення піків, відомих з літератури. Орієнтовний гаусівський розклад раманівських спектрів стекол Ga_{11,7}Ge_{14,1}Te_{74,2} показаний на рис. 2. Віднесення окремих смуг, виявлених у спектрах КРС зразків Ga_{11,7}Ge_{14,1}Te_{74,2}, підсумовано в Таблиці 1.

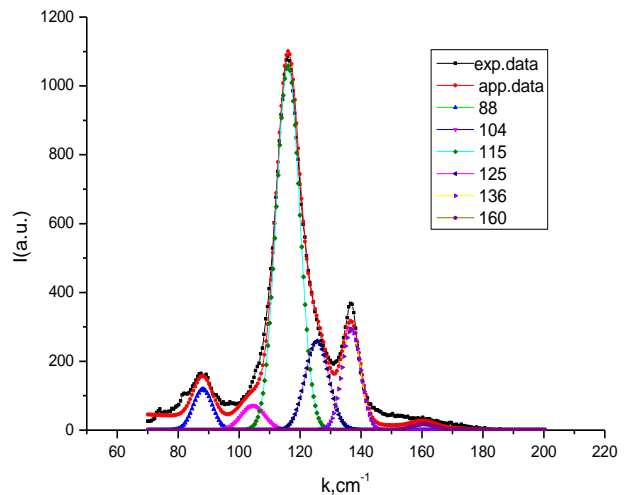


Рис.2. Спектри КРС досліджуваних халькогенідних стекол Ga_{11,7}Ge_{14,1}Te_{74,2}.

Висновки

У даній роботі досліджено аморфні сплави Ga_{11,7}Ge_{14,1}Te_{74,2} методами рентгенівської дифракції та раманівської спектроскопії. Експериментальні рентгенівські дифрактограми були використані для розрахунків радіальних функцій розподілу, які дали положення довжини зв'язку найближчих сусідів r₁ –

Інтерпретація смуг в Раманівських спектрах Ga-Ge-Te, Ge-Te, Ga-Te, Te.

Хвильове число, cm^{-1}	Призначення	Список літератури
88 cm^{-1}	моди коливань GeTe тригональний Te	[34-38] [40]
92 cm^{-1}	моди вигину тетраедра GeTe_4 (GaTe_4)	[38-39]
104 cm^{-1}	Моди Te	[40]
109 cm^{-1}	симетрична дихаюча мода Ga-Te	[15]
$115-125 \text{ cm}^{-1}$	(пік А) розтягуючі моди тетрадральних одиниць [GeTe_4], [GaTe_4]	[42, 43]
$120.4 \pm 0.5 \text{ cm}^{-1}$	зв'язки Te-Te	[47]
121 cm^{-1}	A1 мода тетрадральних одиниць GeTe_4	[41]
$124-135 \text{ cm}^{-1}$	коливальні моди із спільним кутом (CS) або із спільном ребром (ES) тетрадрів GaTe_4	[15]
141 cm^{-1}	(peak C) кристалічна фаза Te	[42, 44-46]
$140.7 \pm 0.5 \text{ cm}^{-1}$	зв'язки Te-Te	[47]
$150-155 \text{ cm}^{-1}$	(peak B) коливальні моди Te-Te	[36, 44]
156 cm^{-1}	(peak B) розтягуючі моди Te-Te	[15]
160 cm^{-1}	(peak B) коливальні моди GeTe	[34-37]

$2,67 \text{ \AA}$ та $r_2 - 4,27 \text{ \AA}$. Отримані значення r_1 добре узгоджуються з відомими довжинами зв'язків Ge-Te і Ga-Te з літератури, аналогічні значення r_1 спостерігалися для стекел Ga-Ge-Te інших складів. Спостережувані смуги в Раманівських спектрах зразків $\text{Ga}_{11.7}\text{Ge}_{14.1}\text{Te}_{74.2}$ показують, що таке скло містить різні нанофази, і їх можна пояснити в термінах коливальних мод стекел і півок Ga-Te і Ge-Te. Для того, щоби отримати краще віднесення характерних смуг КР потрібні подальші композиційні дослідження

стекел Ga-Ge-Te інших складів.

Попович М.В. – молодший науковий співробітник відділу оптоелектронік;

Стронський О.В. – доктор фізико-математичних наук, провідний науковий співробітник відділу оптоелектроніки;

Шпуртько К.В. – доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник відділу сенсорних систем. .

- [1] K. Tanaka, *Light-induced anisotropy in amorphous chalcogenide*, Science 277, 1786 (1997); <https://doi.org/10.1126/science.277.5333.1786>.
- [2] A. Stronski, *Production of metallic patterns with the help of high-resolution inorganic resists* In : «Microelectronic Interconnections and Assembly», NATO ASI Series, 3:High Technology, 54, G.Harman@P.Mach, (Eds), Kluwer academic publishers, Netherlands, 263 (1998).
- [3] I.D. Aggarwal, J.S. Sanghera, *Development and applications of chalcogenide glass optical fibers at NRL*, JOAM, 4 (3), 665 (2002); <https://doi.org/10.1080/01468030050058811>.
- [4] A.V. Stronski, M. Vlček, *Photosensitive properties of chalcogenide vitreous semiconductors in diffractive and holographic technologies applications*, JOAM, 4 (3), 699 (2002).
- [5] D. Lezal, *Chalcogenide glasses—survey and progress*, J. Optoelectron. Adv. Mater., 5(1), 23 (2003); [https://doi.org/10.1016/S0022-3093\(03\)00417-4](https://doi.org/10.1016/S0022-3093(03)00417-4).
- [6] S. Kokenyesi, *Amorphous chalcogenidenano-multilayers: research and development*, JOAM, 8(6), 2093 (2006).
- [7] S. Albert, E.Barthelemy, C.Vigreuxa, A.Pradel, M.Barillot, *Fabrication of far infrared rib waveguides based on Te-Ge-Ga films deposited by co-thermal evaporation*, Advances in Optical Thin Films III, edited by Norbert Kaiser, Michel Lequime, H. Angus Macleod Proc. of SPIE 7101 (71011), 1 (2008); <https://doi.org/10.1117/12.797643>.
- [8] E. Barthélémy, C. Vigreux, G. Parent, M. Barillot, and A. Pradel, *Telluride films and waveguides for IR integrated optics*, Phys. Status Solidi C, 1 (2011); <https://doi.org/10.1002/pssc.201084126>.
- [9] C.Vigreux, E.Barthélémy, L.Bastard, J.-E.Broquin, S.Ménard, M.Barillot, G.Parent, and A.Pradel *Fabrication and testing of all-telluride rib waveguides for nulling interferometry*, Optical Materials Express, 1(3), 357 (2011); <https://doi.org/10.1364/OME.1.000357>.
- [10] Huijuan Xu, Yuju He, Xunsi Wang, QiuhuaNie, Peiquan Zhang, TiefengXu, Shixun Dai, Xianghua Zhang, Guangming Tao, *Preparation of Low-loss $\text{Ge}_{15}\text{Ga}_{10}\text{Te}_{75}$ chalcogenide glass for far-IR optics applications*, Inf. Phys. Techn., 65 (4-5), 77 (2014); <https://doi.org/10.1016/j.infrared.2014.03.008>.
- [11] A. Stronski, E. Achimova, O. Paiuk, A. Meshalkin, V. Abashkin, O. Lytvyn, S. Sergeev, A. Prisacar, P. Oleksenko, G. Triduh, *Optical and electron-beam recording of surface relief's using $\text{Ge}_{5}\text{As}_{37}\text{S}_{58}$ -Se nanomultilayers as registering media*, J. Nano. Res., 39, 96 (2016); <http://dx.doi.org/10.4028/www.scientific.net/JNanoR.39.96>.

- [12] Weike Wang, Liang Li, Zhitao Zhang, Jiyong Yang, Dongsheng Tang, and Tianyou Zhai, *Ultrathin GaGeTe p-type transistors*, Appl. Phys. Lett. 111, 203504 (2017); <https://doi.org/10.1063/1.4998350>.
- [13] A. Stronski, E. Achimova, O. Paiuk, A. Meshalkin, A. Prisacar, G. Triduh, P. Oleksenko, P. Lytvyn, *Direct Magnetic Relief Recording Using As₄₀S₆₀:Mn–Se Nanocomposite Multilayer Structures*, Nanoscale Research Letters, 12 (1), 286 (2017); <https://doi.org/10.1186/s11671-017-2060-6>.
- [14] A. Stronski, L. Revutska, A. Meshalkin, O. Paiuk, E. Achimova, A. Korchovyi, K. Shportko, O. Gudymenko, A. Prisacar, A. Gubanova, G. Triduh, *Structural properties of Ag–As–S chalcogenide glasses in phase separation region and their application in holographic grating recording*, Optical Materials, 94, 393 (2019); <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2019.06.016>.
- [15] M. Bokova, A. Tverjanovich, C. J. Benmore, D. Fontanari, A. Sokolov, M. Khomenko, M. Kassem, I. Ozheredov, and E. Bychkov, *Unraveling the Atomic Structure of Bulk Binary Ga–Te Glasses with Surprising Nanotectonic Features for Phase-Change Memory Applications* ACS, Appl. Mater. Interfaces, 13, 37363 (2021); <https://doi.org/10.1021/acsami.1c09070>.
- [16] M. Wuttig, *Phase change materials: towards a universal memory?* Nat. Mater. 4, 265 (2008).
- [17] K. C. Mandal, R. M. Krishna, T. C. Hayes, P. G. Muzykov, S. Das, T. S. Sudarshan and S. Ma, *Layered GaTe crystals for radiation detectors*, IEEE Trans. Nucl. Sci., 58, 1981 (2011); <https://doi.org/10.1109/TNS.2011.2140330>.
- [18] V.I. Min'ko, I.Z. Indutnyi, P.E. Shepeliaviy, P.M. Litvin, *Application of amorphous chalcogenide films for recording of high-frequency phase-relief diffraction gratings*, Journal of Optoelectronics and Advanced Materials, 7 (3), 1429 (2005).
- [19] A.V. Stronski, M. Vlček, *Imaging properties of As₄₀S₄₀Se₂₀ layers*, Opto-Electronics Review, 8, (3), 263 (2000).
- [20] Y. Sripathi, G B. Reddy, L.K. Malhotra, *Structural and optical properties of GaGeTe thin films*, Journal of Materials Science: Materials in Electronics, 2, 109 (1991); <https://doi.org/10.1007/bf00694761>.
- [21] M. Julien-Pouzol, S. Jaulmes, M. Guittard, F. Alapini, *Monotellurure de Gallium, GaTe*. Acta Crystallogr. B, 35, 2848 (1979); <https://doi.org/10.1107/S0567740879010803>.
- [22] T.E. Faber & J. M. Ziman, *A theory of the electrical properties of liquid metals*, Philosophical Magazine, 11 (109), 153 (1965); <https://doi.org/10.1080/14786436508211931>.
- [23] N. E. Cusack, & D. L. Stein, *The Physics of Structurally Disordered Matter: An Introduction*, Physics Today, 41(12), 110 (1988), IOP Publishing Ltd., Bristol, England, 1987; <https://doi.org/10.1063/1.2811678>.
- [24] A. Szczygielska, A. Burian, J.C. Dore, V. Honkimki & S. Duber, *Local structure of saccharose- and anthracene-based carbons studied by wide-angle high-energy X-ray scattering*, Journal of Alloys and Compounds, 362 (1–2), 307 (2004); [https://doi.org/10.1016/s0925-8388\(03\)00604-2](https://doi.org/10.1016/s0925-8388(03)00604-2).
- [25] T. Proffen, S. J. L. Billinge, T. Egami, and D. Louca, “*Structural analysis of complex materials using the atomic pair distribution function – a practical guide*”, Z. Krist., vol. 218, 132 (2003).
- [26] J.C. Phillips, *Topology of Covalent Non-Crystalline Solids I: Short-Range Order in Chalcogenide Alloys*, J. Non-Cryst. Solids, 34, 153 (1979); <https://doi.org/10.1524/zkri.218.2.132.20664>.
- [27] N. Ramesh Rao, P.S.R. Krishna, S. Basu, B.A. Dasannacharya, K.S. Sangunni, E.S.R. Gopal, *Structural correlations in GexSe1-x glasses - a neutron diffraction study*, Journal of Non-Crystalline Solids, 240, 221 (1998); <https://rad-gtk.software.informer.com/amp/>.
- [28] Y. Maeda and M. Wakagi, *Ge K-edge extended X-ray absorption fine structure study of the local structure of amorphous GeTe and the crystallization*, Japan. J. Appl. Phys. 30 101 (1991); <https://doi.org/10.1143/JJAP.30.101>.
- [29] Li Jingyu, Peng-Fei Liu, Chi Zhang, Xiaobo Sh, Shujuan Jiang, Weizhen Chen, Huabing Yin, Bao-Tian Wang, *Lattice vibrational modes and phonon thermal conductivity of single-layer GaGeTe*, Materials Science Journal of Materiomics, 6 (4), 723 (2020); <https://doi.org/10.1016/j.jmat.2020.04.005>.
- [30] M. Julien-Pouzol, S. Jaulmes, M. Guittard, F. Alapini, *Monotellurure de Gallium, GaTe*. Acta Crystallogr. B, 35, 2848 (1979); <https://doi.org/10.1107/S0567740879010803>.
- [31] Z. Chaker, G. Ori, M. Boero, C. Massobrio, E. Furet, et al. *First-principles study of the atomic structure of glassy Ga₁₀Ge₁₅Te₇₅*, Journal of Non-Crystalline Solids, Elsevier, 498, 338 (2015); <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2018.03.039>.
- [32] Ananth Kumar, Hussein A Mousa, P ChithraLekha, Saleh T Mahmoud and N Qamhieh, *Scrutiny of structural disorder using Raman spectra and Tauc parameter in GeTe₂ thin films*, Journal of Physics: Conf. Series 869, 012018 (2017); <https://doi.org/10.1088/1742-6596/869/1/012018>.
- [33] Chee Ying Khoo, Hai Liu, Wardhana A. Sasangka, Riko I. Made, Nobu Tamura, Martin Kunz, Arief S. Budiman, Chee Lip Gan, Carl V. Thompson, *Impact of deposition conditions on the crystallization kinetics of amorphous GeTe films*, J Mater Sci, 51, 1864 (2016); <https://doi.org/10.1007/s10853-015-9493-z>.
- [34] KS Andrikopoulos, SN Yannopoulos, GA Voyiatzis, AV Kolobov, M Ribes, J Tominaga. *Raman scattering study of the a-GeTe structure and possible mechanism for the amorphous to crystal transition*, J Phys 18 (3), 965 (2006); <https://doi.org/10.1088/0953-8984/18/3/014>.
- [35] KS Andrikopoulos, SN Yannopoulos, AV Kolobov, P Fons, J Tominaga, *Raman scattering study of GeTe and Ge₂-Sb₂Te₅ phase-change materials*, J Phys. Chem Solids, 68 (5–6), 1074 (2007); <https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2007.02.027>.

- [36] R Mazzeo, S Caravati, S Angioletti-Uberti, M Bernasconi, M Parrinello, *Signature of tetrahedral Ge in the Raman spectrum of amorphous phase-change materials*, Phys Rev Lett., 104 (8), 085503 (2010); <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.085503>.
- [37] C. Vignoux, M.V. Thi, R. Escalier, G. Maulion, R. Kribich, A. Pradel, *Channel waveguides based on thermally co-evaporated Te-Ge-Se films for infrared integrated optics*, J. Non-Cryst. Solids, 377 (10), 205 (2013); <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2012.11.037>.
- [38] S.N. Yannopoulos, G.A. Voyiatzis, A.V. Kolobov, M. Ribes, *Raman scattering study of the a-GeTe structure and possible mechanism for the amorphous to crystal transition*, J. Phys.:Condens. Mater., 18 (3), 965 (2006); <https://doi.org/10.1088/0953-8984/18/3/014>.
- [39] F. J. Manjón, S. Gallego-Parra, P. Rodríguez-Hernández, A. Iñonso Muñoz, C. Drasar, V. Muñoz-Sanjosé and O. Oeckler, *Anomalous Raman Modes in Tellurides*, J. Mater. Chem. C, 9, 6277 (2021); <https://doi.org/10.1039/D1TC00980J>.
- [40] B.H. Torrie, *Raman spectrum of tellurium*, Solid State Communications 8, Issue 22, 15 November, 1899 (1970), [https://doi.org/10.1016/0038-1098\(70\)90343-1](https://doi.org/10.1016/0038-1098(70)90343-1).
- [41] Ning Dong, Yimin Chen, Ningning Wei, Guoxiang Wang, Rongping Wang, Xiang Shen, Shixun Dai, Qiuhua Nie, *Optical and structural properties of Ge-Ga-Te amorphous thin films fabricated by magnetron sputtering*, Infrared Physics & Technology, 86, 181 (2017); <https://doi.org/10.1016/j.infrared.2017.09.008>.
- [42] I. Voleská, J. Akola, P. Jónvári, J. Gutwirth, T. Wágner, T. Vasileiadis, S. Yannopoulos, R. Jones, *Structure, electronic, and vibrational properties of glassy Ga11Ge11Te78: experimentally constrained density functional study*, Phys. Rev. B, 86 (9), 094108 (2012).
- [43] S. Sen, E.L. Gjersing, B.G. Aitken, *Physical properties of GexAs2xTe100-3x glasses and Raman spectroscopic analysis of their short-range structure*, J. Non-Cryst. Solids, 356 (41-42), 2083 (2010); <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2010.08.013>.
- [44] P. Neřmec, V. Nazabal, M. Dussauze, H.L. Ma, Y. Bouyrie, X.H. Zhang, *Ga-Ge-Te amorphous thin films fabricated by pulsed laser deposition*, Thin Solid Films, 531 (1), 454 (2013); <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2013.01.096>.
- [45] J. Sun, Q. Nie, X. Wang, S. Dai, X. Zhang, B. Bureau, C. Boussard, C. Conseil, H. Ma, *Structural investigation of Te-based chalcogenide glasses using Raman spectroscopy*, Inf. Phys. Technol., 55 (4), 316 (2012); <https://doi.org/10.1016/j.infrared.2012.03.003>.
- [46] AS Pine, G Dresselhaus, *Raman spectra and lattice dynamics of tellurium*. Phys Rev B, 4 (2), 356 (1971); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.4.356>.

M.V. Popovych, A.V. Stronski, K.V. Shportko

Structural properties of $\text{Ga}_{11,7}\text{Ge}_{14,1}\text{Te}_{74,2}$ alloys

V. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics NAS Ukraine, pr. Nauki, 41, Kyiv 03028, Ukraine, Niva94@ukr.net

In the present paper the amorphous $\text{Ga}_{11,7}\text{Ge}_{14,1}\text{Te}_{74,2}$ alloys have been studied by X-ray diffraction and Raman spectroscopy. The experimental X-ray diffraction patterns were used for calculations of radial distribution functions which have given the positions of the nearest-neighbour bond length r_1 - 2.67 Å and second-neighbour bond length r_2 - 4.27 Å. Similar r_1 values were observed for Ga-Ge-Te glasses of other compositions. Observed bands in the Raman spectra of $\text{Ga}_{11,7}\text{Ge}_{14,1}\text{Te}_{74,2}$ samples show that such glass contains different nanophases and can be explained in the terms of vibrational modes of Ga-Te and Ge-Te glasses and films. Investigations of compositional dependencies of characteristic constituent Raman bands intensities whose concentration is changing with the composition are necessary in order to obtain a better assignment of Raman bands.

Keywords: chalcogenide glasses, X-ray diffraction, radial distribution function, Raman spectroscopy, nanophases.