

Ge-As-Te 玻璃结构的 X 射线衍射和 RMC 模拟研究*

张久明 杜金成 赵修建 谢 康

(武汉工业大学材料复合新技术国家实验室 武汉 430070)

摘 要

本文通过 X 射线衍射分析和逆蒙特卡洛 (RMC) 计算机模拟, 得到 $\text{Ge}_{10}\text{As}_{18}\text{Te}_{72}$ 玻璃中, Ge、As 原子的平均配位数分别为 3.55、3, 平均每个 Te 与 0.8 个 Te 原子配位成键; 玻璃网络结构为变形的 $[\text{GeTe}_4]$ 四面体和 $[\text{AsTe}_3]$ 、 $[\text{GeTe}_3]$ 三角锥通过 $-\text{As}(\text{Ge})-\text{Te}-\text{As}(\text{Ge})-$ 链连接起来的; $\text{Ge}_{15}\text{As}_{45}\text{Te}_{40}$ 玻璃中存在中程有序结构, 结构复杂, 平均每个 Ge 原子与 1.8 个 Te 原子和 1.1 个 As 原子相配位, 平均每个 As 原子与 1.3 个 Te 原子和 1.0 个 As 原子相配位; 后者中的 Ge-Te、As-Te 键长相应地小于前者。

关 键 词 X 射线衍射, 逆蒙特卡洛, 硫系玻璃, 网络结构

分 类 号 TQ 171

1 引言

硫系玻璃不仅可用作透红外材料, 而且还可作为非晶态半导体材料等^[1~3]. 作为 $6\sim 12\mu\text{m}$ 波长范围的透红外光纤材料, 特别是当光纤所需长度比较短且又要求有很好的柔韧性时, 具有较高玻璃转变温度的 Ge-As-Se(-Se-Te)^[4~6] 系统等硫系玻璃就更显出极大的优势; 而 Ge-As-Te 系统^[1] 等硫系玻璃的非晶态薄膜又可作为良好的光信息材料. 但无论怎样, 硫系玻璃的性能, 如 $6\sim 12\mu\text{m}$ 波长范围的光纤损耗及光、电性能等, 对玻璃组成和结构变化极其敏感. 到目前为止, 对 Ge-As-Se、Ge-As-Se-Te 等玻璃体系的结构有少量研究^[7,8], 但对 Ge-As-Te 体系尚未见详细报道, 只是在我们介绍逆蒙特卡洛 (Reverse Monte Carlo, RMC) 计算机模拟方法的文章^[13] 中, 曾介绍了 $\text{Ge}_{10}\text{As}_{18}\text{Te}_{72}$ 玻璃的部分结果.

另一方面, RMC 方法已应用于材料科学的诸多领域: 如液体、玻璃的结构模拟、晶态材料中的无序行为以及磁场无序的模拟等等^[9~11]. RMC 方法在结构模拟方面的优点是: 最大限度地使用实验数据所获得的结构信息, 而不是仅仅对其所获得的局部信息的解释; 不需要采用势能函数; 模型本身的自一致性, 即产生符合物理条件的模型; 多种结构信息可以同时采用; 较易于应用到不同物理问题上等. 本文采用 X 射线衍射和 RMC 模拟方法对 Ge-As-Te 玻璃结构进行了深入地研究.

2 实验

2.1 样品的制备

鉴于 Ge-As-Te 玻璃系统的成玻区包括不连续的两部分 (见图 1^[2]), 故本文在每部分成

* 1998-06-26 收到初稿, 1998-09-10 收到修改稿

国家自然科学基金资助项目 (69577015); 国家教委优秀青年教师基金资助项目

玻区域的中心位置各选取了一个样品 $\text{Ge}_{10}\text{As}_{18}\text{Te}_{72}$ 、 $\text{Ge}_{15}\text{As}_{45}\text{Te}_{55}$ 进行研究. 本实验所用原料为 5NGe 粒、As 块和 Te 块, 采用“熔融—冷却”方法制备玻璃. 将原料按所用化学配比准确计算, 精确称量 3g, 放入经预处理的石英管 (内径 $\phi 10\text{mm}$) 内, 真空 ($1.3 \times 10^{-3}\text{Pa}$) 熔封, 置入摇摆炉中, 在 950° 保温 10h, 使反应充分进行, 在温度降至 650° 时, 取出石英管放入冷水中冷却, 打破石英管即得所需玻璃.

采用排液法 (比重瓶法) 测试样品的密度, 结果见表 1.

表 1 Ge-As-Te 玻璃的样品组成及其密度
Table 1 Composition, bulk density (ρ) for the Ge-As-Te glass

Sample	Composition/at. %			$\rho/\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$
	Ge	As	Te	
GAT01	10	18	72	5.5519
GAT02	15	45	40	5.2423

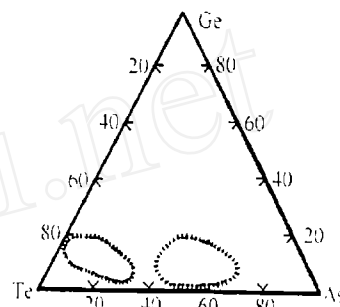


图 1 Ge-As-Te 玻璃的成玻区域
Fig. 1 Glass formation regions in the Ge-As-Te system

2.2 X 射线衍射测试和径向分布函数计算

将经密度测试后的样品研磨成粉末, 过 100~300 目筛, 在日本理学公司 Dmax-rA 型转靶 X 射线衍射仪上进行测试, 采用 $\text{MoK}\alpha$ 射线源, 其测试条件: $\text{MoK}\alpha=0.7107$; 功率 $P=6\text{kW}$; 采用石墨单色器, 置于衍射光一侧, 其布拉格角 $\alpha=26.6^\circ$; 扫描范围: $3\sim 140^\circ$; 扫描步长: $3\sim 25^\circ$ 为 $0.2^\circ/\text{步}$, $DS\&SS=0.5^\circ$; $20\sim 65^\circ$ 为 $0.2^\circ/\text{步}$, $DS\&SS=1^\circ$; $60\sim 140^\circ$ 为 $0.2^\circ/\text{步}$, $DS\&SS=2^\circ$; $RS=0.15\text{mm}$, $RS_{\max}=0.45\text{mm}$; 扫描时间以衍射强度 $> 10^4$ counts 为准.

和实验测定的晶态物质的衍射强度一样, 由实验测定的非晶态的散射强度 $I_m(\theta)$ 也包含偏振因子 P 、吸收因子 A 以及非相干散射 $I_m(S)$ 、多次散射 $I_{ms}(S)$ 、空气散射 $I_m(\theta)$ 等的贡献. 在测试过程中, 空气散射采用一半的扫描时间, 得到实际强度的 1/2. 在本实验测试条件下, 样品可视为无穷厚, 吸收因子 A 为一常数, 可用在归一化中统扣, 本文暂且认为吸收因子 $A=1$. 经偏振和吸收校正的强度认为相对强度, 还要进行归一化处理, 文中采用高角区法 β_{HA} , 在 X 射线衍射中, 由于多次散射强度 $I_{ms}(S)$ 对原子序数比较低的元素作用比较大, 故在本文中可忽略不计.

对于多组分系统, 在测定径向分布函数时, 要引入权重因子

$$W_{ij} = c_i c_j f_i f_j / (\sum_i c_i f_i)^2 \quad (1)$$

其中 c_i 、 f_i 分别为 i 种原子分数和原子散射因子. 通常 W_{ij} 与 s ($s = 4\pi \sin\theta/\lambda$) 有关, 为此, 假定试样中各类原子的散射因子与 s 有相同的关系, 于是 W_{ij} 便与 s 无关.

约化干涉函数 $F(s)$ 与约化径向分布函数 $G(r)$ 互为傅立叶变换:

$$F(s) = \int_0^\infty G(r) \sin(sr) dr \quad (2)$$

$$G(r) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty F(s) \sin(sr) ds \quad (3)$$

约化干涉函数 $F(s)$ 可由实测强度转化得到的、电子单位表示的、平均每个原子的相干散射强度 $I_a(s)$ 计算:

$$F(s) = s \cdot \frac{I_a(s) - \langle f^2 \rangle}{\langle f \rangle^2} \quad (4)$$

式中, $\langle f^2 \rangle = \sum_i^n c_i f_i^2$; $\langle f \rangle^2 = (\sum_i^n c_i f_i)^2$ 、由实测强度经 (4) 式转化得到约化干涉函数 $F(s)$, 再经傅立叶变换得到约化径向分布函数 $G(r)$, 进而求得径向分布函数 $RDF(r)$:

$$RDF(r) = 4\pi r^2 \rho_a + r \cdot G(r) \quad (5)$$

其中 ρ_a 为总平均原子数密度。

2.3 RMC 计算机结构模拟

将一定数量、满足材料密度要求的原子置于一立方体中, 这个立方体在空间上四周都是自己的影象, 即具有周期性边界条件, 然后采用 Metropolis 随机抽样方法产生移动原子及位移^[12], 以便模拟实验结果, 如衍射分析得到的衍射强度、约化干涉函数或原子径向分布函数等, 由计算与实测结果的方差随模拟计算的进行逐步减小, 直到其达到稳定, 并在平衡位置附近振荡, 从而获得符合实测数据的原子排布, 根据这个原子排布可以得到非晶态的直观结构信息和一些统计信息。

在 RMC 计算中可以用约化干涉函数或径向分布函数的数据作为依据, 本文采用前者。在对 X 射线衍射数据处理中, 由实测衍射强度到全约化干涉函数 $F^E(s)$ 的关系式为:

$$F^E(s) = s \cdot \frac{I_0(s) \cdot \beta_{HA} / (P \cdot A) - I_m(s) - \langle f^2 \rangle}{\langle f \rangle^2} \quad (6)$$

由原子排布计算出的双体相关函数得到的全约化干涉函数 $F^C(s)$ 为:

$$F^C(s) = \sum_i^n \sum_j^n W_{ij}(s) \int_0^\infty 4\pi r \rho_a [g_{ij}(r) - 1] \sin(sr) dr \quad (7)$$

式中, $g_{ij}(r)$ 为偏约化径向分布函数

表 2 $\text{Ge}_{10}\text{As}_{18}\text{Te}_{72}$ 玻璃 RMC 模拟时限制条件

Table 2 Proper constraints imposed for RMC simulation of $\text{Ge}_{10}\text{As}_{18}\text{Te}_{72}$ glass

Bonds	Te — Te	As — Te	Ge — Te	As — As	As — Ge	Ge — Ge
Bond lengths/Å	≥2.50	≥2.40	≥2.40	≥3.50	≥3.50	≥4.00
Coordination numbers	$N_{\text{Te}} \leq 2$		$N_{\text{As}} \leq 3$		$N_{\text{Ge}} \leq 4$	
The first-nearest neighbor sizes/Å	$r \leq 3.0$		$r \leq 3.0$		$r \leq 3.0$	

由此建立了实测数据与模拟数据之间的桥梁。

采用分子动力学 (MD) 计算结果作为初始配置, 在满足密度的条件下, 基元原子数取 800 个, $\text{Ge}_{10}\text{As}_{18}\text{Te}_{72}$ 玻璃以边长为 29.98Å 的立方体作为基元, $\text{Ge}_{15}\text{As}_{45}\text{Te}_{40}$ 玻璃以边长为 28.94Å 的立方体作为基元, 并引入原子最近邻距离、原子配位数作为限制条件 (列于表 2、3) 进行 RMC 模拟计算, 具体模拟步骤见参考文献 [13]。

表 3 Ge₁₅As₄₅Te₄₀ 玻璃 RMC 模拟时限制条件
Table 3 Proper constraints imposed for RMC simulation of Ge₁₅As₄₅Te₄₀ glass

Bonds	Te — Te	As — Te	Ge — Te	As — As	As — Ge	Ge — Ge
Bond lengths/Å	≥3.30	≥2.40	≥2.40	≥2.50	≥2.50	≥3.75
Coordination numbers	N _{Te} ≤2		N _{As} ≤3		N _{Ge} ≤4	
The first-nearest neighbor sizes/Å	r ≤3.0		r ≤3.0		r ≤3.0	

3 结果

由 X 射线衍射获得的 Ge-As-Te 玻璃结构的径向分布函数 (RDF) 如图 2 所示, Ge₁₅As₄₅Te₄₀ (GAT02) 玻璃 RDF 曲线的峰值均 < Ge₁₀As₁₈Te₇₂ (GAT01) 玻璃 RDF 曲线的峰值. 图 3 和 4

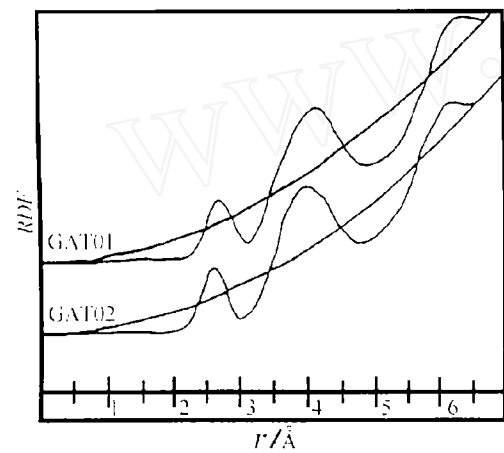


图 2 Ge-As-Te 玻璃的径向分布函数 (RDF) 曲线
Fig. 2 Calculated radial distribution function (RDF) for the Ge-As-Te glass

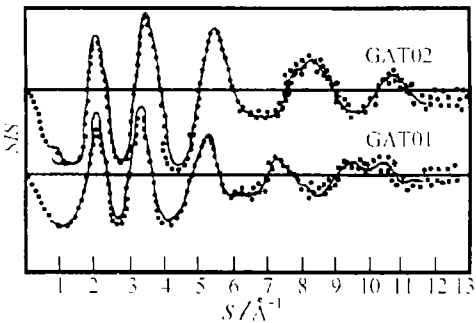


图 3 RMC 模拟与实测约化干涉函数的比较
Fig. 3 Comparison of measured and RMC calculated SIS
..... Measured; — Calculated

表 4 Ge-As-Te 玻璃的第一配位层结构参数
Table 4 Data of the first-nearest neighbors of Ge-As-Te glass

Samples		N _{Ge} ^{Te}	N _{As} ^{Te}	N _{Te} ^{Te}	N _{Ge} ^{As}	N _{As} ^{As}
Ge ₁₀ As ₁₈ Te ₇₂ (GAT01)	Coordination numbers	3.55	3.00	0.80	—	—
	r/Å	2.76	2.78	2.76	—	—
Ge ₁₅ As ₄₅ Te ₄₀ (GAT02)	Coordination numbers	1.80	1.30	—	1.10	1.00
	r/Å	2.66	2.68	—	2.66	2.70

分别为 RMC 模型与实测约化干涉函数曲线和衍射强度曲线图, 比较图 3 和 4 中的结果, 可以看到 RMC 模型与实测结果符合得很好. Ge₁₅As₄₅Te₄₀ 玻璃网络结构如图 5 所示 (Ge₁₀As₁₈Te₇₂ 玻璃网络结构图见文献 [13]). 图 6、7 分别为 Ge₁₀As₁₈Te₇₂ 玻璃和 Ge₁₅As₄₅Te₄₀ 玻璃 RMC 模拟结果的各原子对的积分配位数曲线图. RMC 模型所得到的玻璃结构的第一

配位层主要参数列于表 4, 具体分析见讨论部分.

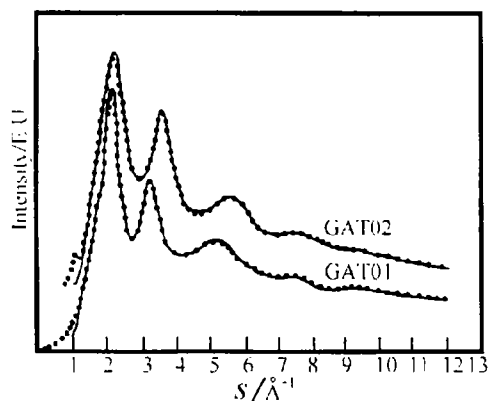


图 4 RMC 模拟与实测衍射强度的比较

Fig. 4 Comparison of measured and RMC calculated X-ray diffraction intensity

..... Measured; — Calculated

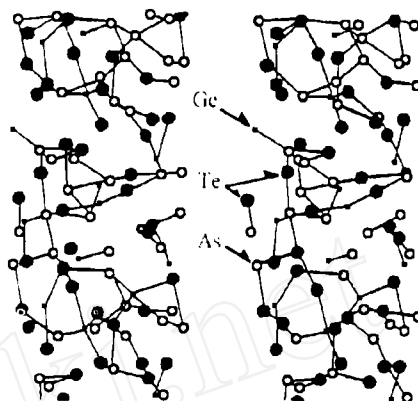


图 5 $\text{Ge}_{15}\text{As}_{45}\text{Te}_{40}$ 玻璃 RMC 模型原子排布

Fig. 5 Atomic configuration of $\text{Ge}_{15}\text{As}_{45}\text{Te}_{40}$ glass from RMC simulation result

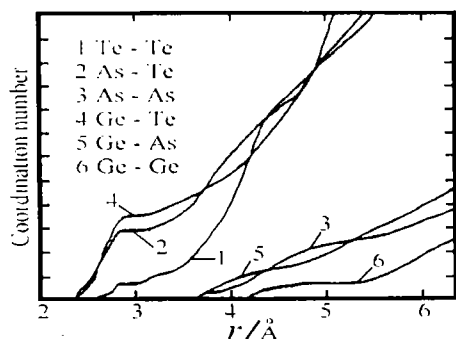


图 6 由玻璃 RMC 模型得到的各原子对积分配位数

Fig. 6 Running Coordination Number of each atomic pair of $\text{Ge}_{10}\text{As}_{18}\text{Te}_{72}$ glass from RMC simulation result

r : The distance between two atoms

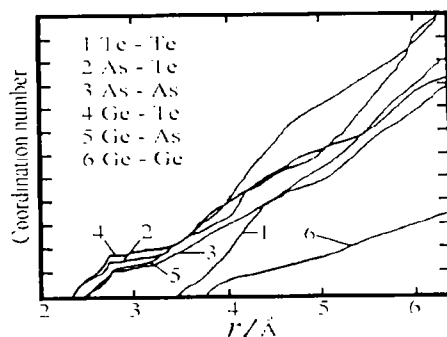


图 7 由 $\text{Ge}_{15}\text{As}_{45}\text{Te}_{40}$ 玻璃 RMC 模型得到的各原子对积分配位数

Fig. 7 Running Coordination Number of each atomic pair of $\text{Ge}_{15}\text{As}_{45}\text{Te}_{40}$ glass from RMC simulation result

r : The distance between two atoms

4 讨论

根据以往的研究结果^[14,15], As 和 Ge 的硫化物系统, 在其非晶态半导体合金 ($\text{As-Ge-}Ch(Ch=\text{S, Se, Te})$) 中, 原子成键遵循 8-N 规则, 即 As、Ge、 Ch 的原子配位数分别为 3、4、2. 这也是本文在进行 RMC 模型模拟对 Ge-As-Te 玻璃中原子配位数限制的依据, 即 $N_{\text{Ge}} \leq 4$, $N_{\text{As}} \leq 3$, $N_{\text{Te}} \leq 2$. 硫系玻璃组成的连续变化常导致其结构的改变, 具有一定的连续性, 当某种组分含量达到一定值时, 其结构会发生较大的变化.

4.1 $\text{Ge}_{10}\text{As}_{18}\text{Te}_{72}$ 玻璃

在 $\text{Ge}_{10}\text{As}_{18}\text{Te}_{72}$ 玻璃中, 根据异极键优先形成的假说^[14,15], Ge 和 As 原子优先与 Te 原子成键, 但 Ge 和 As 含量相对较少, 故不存在 Ge-As 键. 在 $\text{As}_{15}\text{Ge}_{30}\text{Se}_{55}$ 中, 也没有发现 Ge-As 键^[8], 而且菲利普 (H.R.Philipp) 指出, 过量的 Ge 在玻璃中形成类似 $\text{Ge-Ge}_n\text{Se}_{4-n}$ 四面体结构^[16]. 从我们的模拟结果 (见表 4, 图 6) 可知, 平均与每个 Ge 和 As 原子配位的 Te 原子数分别为 3.55、3, 由于存在较多过量的 Te 原子, 平均每个 Te 原子与 0.49 个 Ge 原子、0.75 个 As 原子和 0.8 个 Te 原子配位成键. 在 $\text{Ge}_{10}\text{As}_{18}\text{Te}_{72}$ 玻璃中, As 原子全部达到饱和 3 配位, 完全符合 $8-N$ 规则, 其所形成的结构单元为变形的 $[\text{AsTe}_3]$ 三角锥. Ge 原子含量为 10at.%, 同大量的 Te 原子相比, 不可能有少于 2 配位的情况出现, 多数为 4 配位, 剩下的以 3 配位形式存在, 即构成的结构单元为变形的 $[\text{GeTe}_4]$ 四面体和 $[\text{GeTe}_3]$ 三角锥. 由此可知, $\text{Ge}_{10}\text{As}_{18}\text{Te}_{72}$ 玻璃的网络结构为变形的 $[\text{GeTe}_4]$ 四面体和 $[\text{AsTe}_3]$ 、 $[\text{GeTe}_3]$ 三角锥通过 $-\text{As}(\text{Ge})-\text{Te}-\text{As}(\text{Ge})-$ 链连接起来的.

应该指出, 从原子对间的成键趋势和相关的研究结果^[17] 可知, Ge-Te 成键能力强于 As-Te 键, 且在 $\text{As}_{15}\text{Ge}_{30}\text{Se}_{55}$ 玻璃中^[8], Se 原子优先与 Ge 原子成键, 形成 $[\text{GeSe}_4]$ 四面体. 结合本文研究结果, 由于 Te 与 Se 原子的不同, 在不能排除 $\text{Ge}_{10}\text{As}_{18}\text{Te}_{72}$ 玻璃实际结构中少于 4 配位 Ge 的存在同时, 也说明了在 RMC 模型结构模拟中没有可靠的方法来体现不同原子对间成键的优先性.

4.2 $\text{Ge}_{15}\text{As}_{45}\text{Te}_{40}$ 玻璃

与 $\text{Ge}_{10}\text{As}_{18}\text{Te}_{72}$ 玻璃相比, $\text{Ge}_{15}\text{As}_{45}\text{Te}_{40}$ 玻璃中, Te 原子含量较少, 不足以按照 $8-N$ 规则满足 Ge 和 As 的 4 和 3 饱和配位, 因此不可能存在 Te-Te 键 (如图 5 所示). 由于大量的 As 存在, 除了 As-As 键以外, 不能排除 Ge-As 键存在的可能性. 从表 4 和图 7 可以看到, 平均每个 Ge 原子与 1.8 个 Te 原子和 1.1 个 As 原子相配位, 平均每个 As 原子与 1.3 个 Te 原子和 1.0 个 As 原子相配位. 从图 3、4 可以看到, 在 $s(s = 4\pi\sin\theta/\lambda) = 1\text{\AA}^{-1}$ 处, $\text{Ge}_{15}\text{As}_{45}\text{Te}_{40}$ 玻璃的约化干涉函数曲线和衍射强度曲线上出现了一个小峰 (FSDP 峰, First sharp diffraction peak), FSDP 峰的出现是共价键成分较高的玻璃结构的一个明显特征^[18], 表示玻璃中存在中程有序结构. 正是由于这种中程有序结构, 给 RMC 模型模拟带来了很大困难, 目前, 还没有找到合适的模型与之相符, 这也是 $\text{Ge}_{15}\text{As}_{45}\text{Te}_{40}$ 玻璃中 Ge、As 总的配位数偏低, 实测曲线和模拟曲线不能完全拟合的原因 (主要是 FSDP 峰处的拟合, 见图 3、4).

从图 2 可看到, $\text{Ge}_{15}\text{As}_{45}\text{Te}_{40}$ (GAT02) 玻璃 *RDF* 曲线的峰值均小于 $\text{Ge}_{10}\text{As}_{18}\text{Te}_{72}$ (GAT01) 玻璃 *RDF* 曲线的峰值. 结合表 4, 可以具体地看到, $\text{Ge}_{15}\text{As}_{45}\text{Te}_{40}$ 玻璃中的 Ge-Te 键、As-Te 键的平均距离为 2.66、2.68Å; $\text{Ge}_{10}\text{As}_{18}\text{Te}_{72}$ 玻璃中的 Ge-Te 键、As-Te 键的平均距离为 2.76、2.78Å.

5 结论

通过 X 射线衍射分析和逆蒙特卡洛 (RMC) 计算机模拟, 得到如下结果:

1. $\text{Ge}_{15}\text{As}_{45}\text{Te}_{40}$ 玻璃 *RDF* 曲线的峰值均小于 $\text{Ge}_{10}\text{As}_{18}\text{Te}_{72}$ 玻璃 *RDF* 曲线的峰值, 且对应二组分玻璃的 Ge-Te 键、As-Te 键的平均距离分别为 2.66、2.68Å; 2.76、2.78Å.
2. $\text{Ge}_{10}\text{As}_{18}\text{Te}_{72}$ 玻璃中, Ge、As 原子的平均配位数分别为 3.55、3, 形成的结构单元为变形的 $[\text{GeTe}_4]$ 四面体、 $[\text{GeTe}_3]$ 和 $[\text{AsTe}_3]$ 三角锥; 平均每个 Te 与 0.8 个 Ge 原子和 0.75 个 As 原子配位成键; 其网络结构为各配位多面体通过 $-\text{As}(\text{Ge})-\text{Te}-\text{As}(\text{Ge})-$ 链连接起来的.

3. $\text{Ge}_{15}\text{As}_{15}\text{Te}_{40}$ 玻璃中存在中程有序结构, 结构复杂, 平均每个 Ge 原子与 1.8 个 Te 和 1.1 个 As 原子相配位, 平均每个 As 原子与 1.3 个 Te 和 1.0 个 As 原子相配位.

参 考 文 献

- 1 干福熹主编. 现代玻璃科学技术 (下册) — 特种玻璃与工艺. 上海科技出版社, 1990
- 2 Borisova Z U. ed. *Glassy Semiconductors*. New York, Plenum, 1981
- 3 Vasko A. *11th Int. Congr. on Glass, Prague*, 1977, **5**: 265–270
- 4 Inagawa I, Iizuka R, Yamagishi T, et al. *J. Non-Cryst. Solids*, 1987, **95&96**: 801–808
- 5 Savage J A, Webber P J, Pitt A M. *Infrared Phys.*, 1980, **20**: 313–320
- 6 Muri J A, Cashman R J. *J. Opt. Soc. Am.*, 1967, **57** (1): 1–3
- 7 Esquivias L, Rosa-Fox N de la. *J. Non-Cryst. Solids*, 1986, **85**: 239–243
- 8 Flank A M, Bazin D, Dexpert H, et al. *J. Non-Cryst. Solids*, 1987, **91**: 306–314
- 9 McGreevy R L, Hove M A. *Ann. Rev. Mater. Sci.*, 1992, **22**: 217–242
- 10 McGreevy R L, Hove M A, Keen D A, et al. 1990 IOP Conf. Ser., 1990, **101**: 41–50
- 11 McGreevy R L. *J. Non-Cryst. Solids*, 1993, **156-158**: 949–955
- 12 Metropolis A W, Rosenbluth M N, Teller A H, J. *Chem. Phys.*, 1953, **21**: 1087–1092
- 13 杜金成, 张久明, 赵修建. 材料研究学报. 1998, **12** (2): 191–194
- 14 Lucovsky G. In: *Proc. Fifth Int. Conf. on Amorphous and Liquid Semiconductors*, Garmisch-Partenkirchen. London, Taylor and Francis, 1974, **2**: 1099–1120
- 15 Lucovsky G, Nemanich R J, Solin S A. *Sol. St. Commun.*, 1975, **17** (12): 1567–1572
- 16 Philipp H R. *J. Non-Cryst. Solids*, 1972, **10**: 627–632
- 17 Shinya Hosokawa, Kozaburo Tamura, Masanori Inui, *J. Non-Cryst. Solids*, 1993, **156-158**: 712–715
- 18 Elliott S R. *Physics of Amorphous Materials*, 2nd Ed. London, Longman, 1990

Study on the Structure of Ge-As-Te Glass by X-ray Diffraction and Reverse Monte Carlo Simulation

ZHANG Jiu-Ming DU Jin-Cheng ZHAO Xiu-Jian XIE Kang

(State Key Laboratory of Advanced Technology for Materials Synthesis and Processing, Wuhan University of Technology Wuhan 430070 China)

Abstract

The structure of two Ge-As-Te glasses with compositions of $\text{Ge}_{10}\text{As}_{18}\text{Te}_{72}$ and $\text{Ge}_{15}\text{As}_{15}\text{Te}_{40}$ were studied by X-ray diffraction radial distribution function analysis and Reverse Monte Carlo simulation. In the $\text{Ge}_{10}\text{As}_{18}\text{Te}_{72}$ glass, the Ge, As and Te atoms are bonded on average to 3.55, 3 and 0.8 Te atoms, respectively. The structure of the investigated $\text{Ge}_{10}\text{As}_{18}\text{Te}_{72}$ glass can be described as network of distorted GeTe_4 tetrahedra and AsTe_3 (GeTe_3) pyramidal units, connected by $-\text{As}(\text{Ge})-\text{Te}-\text{As}(\text{Ge})-$ chain-like elements; In the $\text{Ge}_{15}\text{As}_{15}\text{Te}_{40}$ glass, there is one medium-range order dependent X-ray scattering feature, i.e., the first sharp diffraction peak (FSDP). The Ge atoms are bonded on average to 1.8 Te atoms and 1.1 As atoms. The As atoms are bonded on average to 1.3 Te atoms and 1.0 As atoms. And the length of the Ge-Te bonds and As-Te bonds is shorter in the latter than in the former, respectively.

Key words X-ray diffraction, Reverse Monte Carlo, chalcogenide, network