

УДК 004.94 : 621.315.592

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ САМООРГАНИЗОВАННОГО ОБРАЗОВАНИЯ МОДУЛИРОВАННЫХ СТРУКТУР В МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ

Д. т. н. А. И. Казаков, Л. Т. Кваташидзе

Одесский национальный политехнический университет  
Украина, г. Одесса  
anatkaz@mail.ru

*Предложен метод определения полных производных свободной энергии четверных твердых растворов с третьей по восьмую включительно. Полученные результаты моделирования показывают возможность образования областей сосуществования фаз твердых растворов  $In_xGa_{1-x}As_yP_{1-y}$ . Эти результаты не противоречат экспериментальным данным, где наблюдалась модуляция составов твердых растворов.*

*Ключевые слова: пространства сосуществования, упорядоченные фазы, многокомпонентные системы, матричные производные.*

В настоящее время актуальными являются вопросы создания и исследования новых функциональных материалов, имеющих оптимальную структуру, для выполнения задач современной микро- и наноэлектроники. Это, в первую очередь, многокомпонентные полупроводниковые твердые растворы с неоднородным распределением концентраций компонентов, такие как периодические структуры, сверхрешетки, системы «квантовых точек» и т. д. Однако без использования принципов самоорганизации прогресс в этом направлении практически невозможен. Для анализа процессов получения самоорганизованно образующихся упорядоченных наноструктур возможно использование компьютерного моделирования на основе термодинамических подходов. В подобных случаях необходим расчет многомерных фазовых диаграмм, учитывающий возможность существования бифуркационных пространств, критических пространств и пространств сосуществования фаз различных порядков.

Целью работы является дальнейшее развитие методов термодинамического моделирования фазовых равновесий в многокомпонентных фазах путем применения отдельных положений теории бифуркаций и теории катастроф, позволяющих анализировать особенности потенциальных функций нескольких параметров порядка [1]. Для определения положения критических областей в многомерном фазовом пространстве возможно использование топологического подхода на основе анализа высших производных свободной энергии системы по концентрационным параметрам вплоть до восьмой производной включительно [2]. Основной задачей данной работы является построение и анализ критических пространств и пространств сосуществования фаз второго, третьего и четвертого порядков для твердых растворов типа  $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$ . Анализ возможных критических пространств и пространств сосуществования фаз в многокомпонентных твердых фазах возможен на основе рассмотрения высших производных свободной энергии Гиббса по параметрам порядка  $x_i$ . В некоторых точках четырехмерного пространства стабильная фаза может становиться нестабильной, образуя бифуркационное подпространство. Две фазы из четырех могут быть идентичными при некоторых значениях параметров порядка, образуя критическое пространство порядка 2. Для трех или четырех идентичных фаз образуются критические пространства порядка 3 или 4 соответственно. Условия существования стабильности и сингулярностей в этом случае имеют вид:

— стабильная фаза:

$$\frac{dG}{dx} = 0; \quad \frac{d^2G}{dx^2} > 0; \quad (1)$$

— область неустойчивости или бифуркационное пространство

$$\frac{dG}{dx} = \frac{d^2G}{dx^2} = 0; \quad \frac{d^3G}{dx^3} > 0. \quad (2)$$

Условие существования критического пространства второго порядка:

$$\frac{dG}{dx} = \frac{d^2G}{dx^2} = \frac{d^3G}{dx^3} = 0; \quad \frac{d^4G}{dx^4} > 0. \quad (3)$$

Условие существования критического пространства третьего порядка:

$$\frac{dG}{dx} = \frac{d^2G}{dx^2} = \dots = \frac{d^5G}{dx^5} = 0; \quad \frac{d^6G}{dx^6} > 0. \quad (4)$$

Условие существования критического пространства четвертого порядка:

$$\frac{dG}{dx} = \frac{d^2G}{dx^2} = \dots = \frac{d^7G}{dx^7} = 0; \quad \frac{d^8G}{dx^8} > 0. \quad (5)$$

Была рассмотрена возможность разложения в многомерный ряда Тейлора свободной энергии Гиббса четырехкомпонентных твердых растворов. Был проведен анализ существующих принципов использования многомерных матриц и выбран метод для получения матрично-матричных производных высших порядков на основе использования прямых сумм [3]. В работе были получены аналитические выражения для полных производных свободной энергии Гиббса четырехкомпонентных гомогенных твердых растворов типа  $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$ , начиная со второй производной по восьмую включительно. Было проведено численное определение положения областей и нулевых контуров производных со второй по восьмую включительно на сечении существования твердых растворов диаграммы состояния исследуемой системы  $In_xGa_{1-x}As_yP_{1-y}$ . Символьное дифференцирование и численные расчеты производных проводились с помощью системы компьютерной математики Maxima. Далее были построены контуры областей сосуществования фаз порядков два, три и четыре на сечении существования твердых растворов диаграммы состояния исследуемой системы. Полученные результаты моделирования на основе данного подхода позволяет объяснить имеющиеся экспериментальные данные по спонтанному формированию двухфазных модулированных структур в эпитаксиальных слоях твердого раствора  $In_xGa_{1-x}As_yP_{1-y}$  [4].

#### ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ИСТОЧНИКИ

1. Малинецкий Г. Г. Математические основы синергетики: Хаос, структуры, вычислительный эксперимент — Москва: Издательство ЛКИ, 2007.
2. Okada K., Suzuki I. Classical Calculations on the Phase Transition I. Phase Diagram in four-Dimensional space for the system with the one order parameter // J. Phys. Soc. of Japan — 1982 — Vol. 51, N 10. — P. 3250—3257.
3. Муха В. С. Анализ многомерных данных: проблемы, состояния, перспективы // Доклады БГУИР — 2004. — № 1. — С. 38—49
4. Henoc P., Izrael A., Quillec M., Launois H. Composition modulation in liquid phase epitaxial InGaAsP layers lattice matched to InP substrates // Appl. Phys. Let.— 1982.— Vol. 40.— P. 951—963.

A. I. Kazakov, L. T. Kvatashidze

#### **Simulation of origin of self-organizing formation of the structures with modulated composition in component semiconductor alloys.**

A method of calculating of the full derivatives of the free energy of the order with the third on the eighth inclusive for four-component solid solutions has been proposed. The simulation results obtained show the possibility to form areas of phases coexistence for the  $In_xGa_{1-x}As_yP_{1-y}$  alloys. This results do not contradict the existing experimental data where modulated solid solutions were observed.

Keywords: *coexistence spaces, ordered phases, multicomponent system, matrix differentiation.*