

УДК 004.94 : 621.315.592

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ ПРОСТРАНСТВ СОСУЩЕСТВОВАНИЯ ФАЗ В ЧЕТВЕРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ

Д. т. н. А. И. Казаков, О. А. Краева, Г. В. Шаповалов

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

Рассмотрена возможность моделирования процесса формирования критических пространств в многокомпонентных фазах на основе использования дифференциального топологического подхода. Были определены полные производные свободной энергии четверных твердых растворов с третьей по восьмую включительно. Результаты моделирования показывают возможность образования областей сосуществования фаз в твердых растворах $Cd_xHg_{1-x}Te_ySe_{1-y}$.

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

Прогресс современной микро- и наноэлектроники в значительной мере определяется применением новых многокомпонентных полупроводниковых материалов, позволяющих использовать принципы самоорганизации для создания упорядоченных наноструктур. Результаты экспериментальных исследований показали, что в определенных интервалах температуры и составов однородные твердые растворы полупроводников на основе соединений A_2B_6 оказываются неустойчивыми и распадаются на периодические структуры с модулированным составом. Можно предположить, что это явление может быть использовано для получения самоорганизованно образующихся упорядоченных наноструктур [1]. Так как экспериментальное определение фазовых диаграмм при наличии нестабильных фаз является достаточно сложным, то возможно использование компьютерного моделирования для анализа подобных критических явлений на основе использования термодинамических подходов. В подобных случаях необходим расчет многомерных фазовых диаграмм, учитывающий возможность существования бифуркационных пространств, критических пространств и пространств сосуществования фаз различных порядков.

Моделирование процесса формирования критических пространств сосуществования фаз в многокомпонентных фазах возможно на основе использования дифференциального топологического подхода [2]. Условия существования сингулярностей в этом случае имеют вид:

— для критического пространства второго порядка

$$\frac{dG}{dx} = \frac{d^2G}{dx^2} = \frac{d^3G}{dx^3} = 0; \quad \frac{d^4G}{dx^4} > 0; \quad (1)$$

— для критического пространства третьего порядка

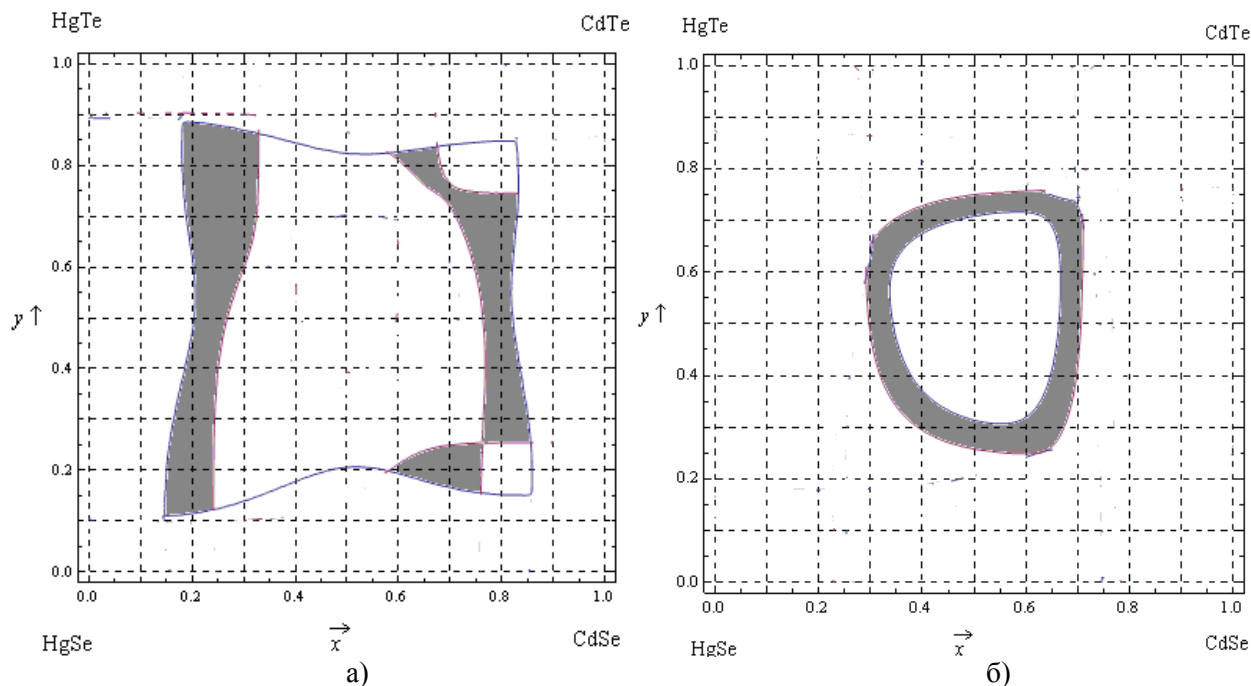
$$\frac{dG}{dx} = \frac{d^2G}{dx^2} = \dots = \frac{d^5G}{dx^5} = 0; \quad \frac{d^6G}{dx^6} > 0; \quad (2)$$

— для критического пространства четвертого порядка

$$\frac{dG}{dx} = \frac{d^2G}{dx^2} = \dots = \frac{d^7G}{dx^7} = 0; \quad \frac{d^8G}{dx^8} > 0. \quad (3)$$

Для получения высших производных свободной энергии четырехкомпонентной системы по

соответствующим концентрационным параметрам с третьей по восьмую включительно был использован метод матрично-векторного дифференцирования многомерных систем [3]. Символьное дифференцирование и численные вычисления производных были проведены с использованием системы компьютерной математики Maxima. Были проведены расчеты положения областей существования высших производных свободной энергии твердого раствора $Cd_xHg_{1-x}Te_ySe_{1-y}$ на сечении существования твердых растворов диаграммы состояния системы Cd-Hg-Te-Se. Результаты анализа соответствующих высших производных позволили получить оценки положения критических пространств сосуществования фаз порядка 2, 3 и 4, приведенных на рисунке.



Сечение существования твердых растворов диаграммы состояния системы Cd-Hg-Te-Se. Темным цветом показаны составы твердого раствора $Cd_xHg_{1-x}Te_ySe_{1-y}$, для которых возможно образование пространств сосуществования фаз порядка 2 (а) и 3 (б) при температуре 473 К.

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

A. I. Kazakov, O. A. Kraeva, G.V. Shapovalov

Computer simulation for the phase coexistence spaces formation in quaternary semiconductor alloys

The modeling of the process of formation of a critical and coexistence spaces in complex multi-component, multi-phase systems are considered on the basis of the differential topological approach. Total derivatives, from the third to the eighth inclusive, of the free energy of four-component solid solutions were found. Symbolic differentiation and numerical computation of the derivatives was carried out using a system of computer mathematics Maxima. The simulation results obtained allow admitting an opportunity to form phase coexistence spaces of various orders with different compositions for the $Cd_xHg_{1-x}Te_ySe_{1-y}$ alloys.

Keywords: *coexistence spaces, ordered phases, multi-component system, matrix differentiation.*