

УДК 004.94 : 621.315.592

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ОБЛАСТЕЙ СОСУЩЕСТВОВАНИЯ ФАЗ В ЧЕТЫРЕХКОМПОНЕНТНЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ ТИПА $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$

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

Одесский национальный политехнический университет
Украина, г. Одесса
sciencestudies@rambler.ru

Проведен сравнительный анализ результатов моделирования формирования областей сосуществования фаз в четырехкомпонентных твердых растворах на основе использования дифференциального топологического подхода для моделей строго регулярного и пострегулярного растворов. Результаты расчетов не противоречат существующим в настоящее время экспериментальным данным.

Ключевые слова: термодинамические модели, топологический подход, пространства сосуществования, многокомпонентные твердые растворы.

Использование современных методов компьютерного моделирования на основе термодинамических подходов позволяет проанализировать процессы получения самоорганизованно образующихся упорядоченных структур и предсказать их свойства. В связи с необходимостью получения более точных прогнозов возникает необходимость сравнения результатов численных расчетов, полученных на основе использования различных термодинамических моделей.

В качестве объекта исследования были выбраны четырехкомпонентные твердые растворы со смешением атомов в двух подрешетках $In_xGa_{1-x}As_yP_{1-y}$. Основываясь на дифференциальном топологическом подходе [1], были построены модели формирования критических пространств и пространств сосуществования фаз в рассматриваемой системе.

В работе рассматривались термодинамические модели строго регулярного и пострегулярного раствора. В рамках модели строго регулярного раствора, в которой предполагается случайное распределение разнородных атомов по узлам соответствующих подрешеток, в качестве параметров взаимодействия были использованы данные, приведенные в [2]. В рассмотренной модели параметры взаимодействия считаются константами и не зависят от концентраций и температуры. Для учета концентрационных зависимостей параметров взаимодействия были использованы представления о том, что энергия смешения многокомпонентного соединения соответствует энергии дисторсии кристаллической решетки, вызванной различием длины ковалентных связей бинарных составляющих твердого раствора [3]. При этом для твердых растворов зависимость параметра взаимодействия от состава с достаточно высокой точностью аппроксимируется полиномом второй степени вида [4]

$$W(x) = W_1x + W_2(1-x) + W_3x(1-x), \quad (1)$$

где W_1 и W_2 — аппроксимационные коэффициенты, численно равные параметрам взаимодействия сильно обедненных растворов; W_3 — коэффициент нелинейности. Для анализа пострегулярных моделей типа (1) использовались данные, приведенные в [4].

Условия формирования сингулярностей для критического пространства и пространства сосуществования фаз второго порядка имеет вид [1]

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

На рис. 1 представлены полученные результаты расчета областей сосуществования фаз порядка два, построенные на сечениях существования твердых растворов системы $In-Ga-As-P$. Темным цветом показаны области выполнения условий формирования пространств сосуществования фаз второго порядка при температуре 773 К для строго регулярного (рис. 1, а) и пострегулярного рас-

твора (рис.1 б). Также показаны линии изопериодных составов к подложкам из GaAs и InP и экспериментальные составы эпитаксиальных слоев $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$, в которых наблюдалось формирование периодических модулируемых структур, полученных с помощью жидкофазной эпитаксии на подложках из InP [5, 6] и на подложках из GaAs [7, 8], а также полученных с помощью газотранспортной эпитаксии на подложках из InP [9].

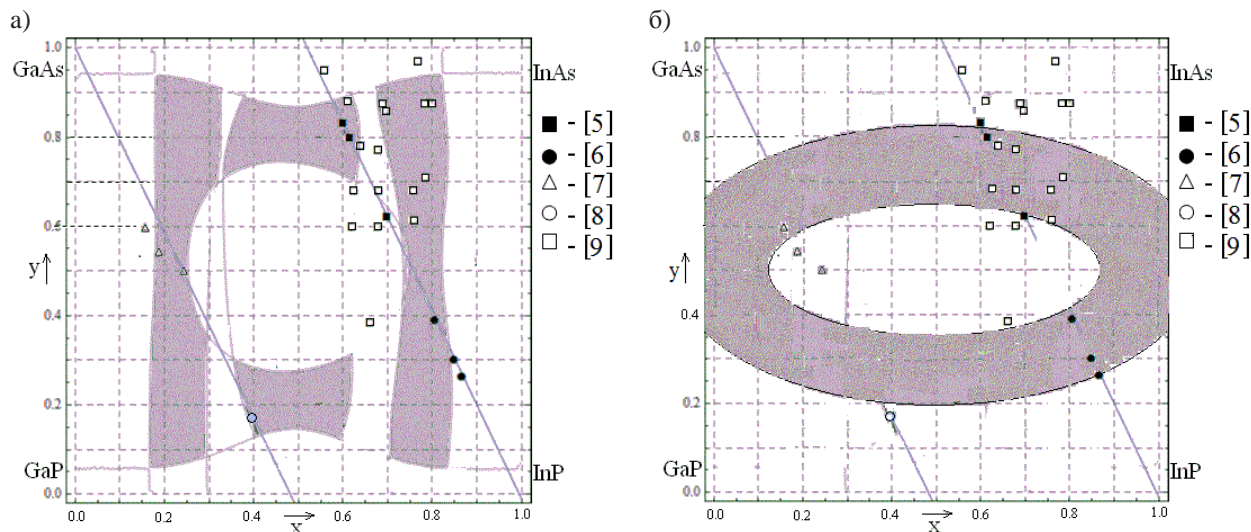


Рис. 1. Области сосуществования фаз второго порядка твердых растворов системы In—Ga—As—P для модели строго регулярного раствора (а), для пострегулярных моделей (б)

Показано, что в рамках рассматриваемых моделей наблюдается удовлетворительное соответствие экспериментальных результатов расчетным.

ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ИСТОЧНИКИ

1. Okada K., Suzuki I. Classical calculations on the phase transition I. Phase diagram in four-dimensional space for the system with one order parameter // J. Phys. Soc. Jap.– 1982.– Vol. 51, N 10.– P. 3250–3257.
2. А.И.Казаков, В.А.Мокрицкий, В.Н. Романенко и др. Расчет фазовых равновесий в многокомпонентных системах.– Москва: Металлургия, 1987.
3. Martin, R. Elastic properties of ZnS structure semiconductor // Phys. Rev. B.– 1970.– Vol. 1.– P. 4005.
4. Н.И. Подольская, С.Ю. Карпов и А.И. Жмакин. Энергия смещения соединений $\text{Al}_x\text{In}_y\text{Ga}_{1-x-y}\text{N}$ // Письма в Журнал Технической Физики.– 2008.– N 34(9).– P.17–23.
5. Henoc P., Izrael A., Quillec M., Launois H. Composition modulation in liquid phase epitaxial $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ layers lattice matched to InP substrates // Appl. Phys. Let.– 1982.– Vol. 40.– P. 951–963.
6. Spinodal decomposition in InGaAsP epitaxial layers / S.Mahajan, B.V. Dutt, H.Temkin, and others // J. Crystal Growth.– 1984.– Vol. 68, N 2.– P. 589–595.
7. N. Kuwano, K. Funuka, Oki K. et al. Electron microscope study of modulated structures and heterointerfaces in LPE-grown GaInAsP layers lattice matched on GaAs // J. Crystal Growth.– 1989.– Vol. 98.– P. 82–89.
8. Л. С. Вавилова, В. А. Капитонов, А. В. Мурашева и др. Спонтанно формирующиеся периодические InGaAsP-структуры с модулированным составом // Физика и техника полупроводников.– 1999.– Т. 33, № 9.– С. 1108–1110.
9. Л. С. Вавилова, В. А. Капитонов, А. В. Мурашева и др. Surface layer spinodal decomposition in $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_{1-y}\text{P}_y$ and $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ grown by hybrid transport vapor phase epitaxy. // J. Appl. Phys.– 1985.– Vol. 57.– P. 4610–4616.

A.I. Kazakov, G.V. Shapovalov

Thermodynamic analysis of areas of phase coexistence in the quaternary solid solutions $\text{A}_x\text{B}_{1-x}\text{C}_y\text{D}_{1-y}$

The paper presents a comparative analysis of the computer simulation results of modeling of formation of areas of phase coexistence in the quaternary solid solutions based on the differential topological approach for models of strictly regular and post-regular solutions. The results obtained do not contradict the existing experimental data.

Keywords: *thermodynamic models, topological approach, coexistence areas, multicomponent alloys.*