

# МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИТИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ НА ОСНОВЕ СОЕДИНЕНИЙ $A_2B_6$

Д. т. н. А. И. Казаков<sup>1</sup> д.ф.-м.н. П. П. Москвин<sup>2</sup>, Г. В. Шаповалов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Одесский национальный политехнический университет,

<sup>2</sup>Житомирский государственный технологический университет

Украина

anatkaz@mail.ru, moskvin@us.ztu.edu.ua, shapovalov@opu.ua

Для расчета областей сосуществования фаз порядка два в трехкомпонентных твердых растворах на основе соединений  $A_2B_6$  использован дифференциальный топологический подход. Расчеты проводились в рамках модели регулярного раствора. Дополнительно в модели учитывались взаимодействия как первых, так и вторых ближайших соседних пар атомов, а также температурная зависимость параметра взаимодействия.

**Ключевые слова:** термодинамическая модель, сосуществование фаз, твердые растворы.

Проблема создания и исследования функциональных материалов на основе твердых растворов  $A_2B_6$ , имеющих оптимальные свойства для реализации задач электроники, является актуальной в настоящее время. При этом свойства кристаллов играют важнейшую роль для характеристик создаваемых приборов. Исследования многокомпонентных материалов, полученных на основе  $A_2B_6$ , показали, что в определенных интервалах температур и составов однородные твердые растворы полупроводников оказываются неустойчивыми, что приводит к спиноподобному упорядочению и формированию периодических структур с модулированным составом. Однако вопрос прогнозирования возможности появления областей сосуществования фаз в твердых растворах на основе  $A_2B_6$  в современных исследованиях рассмотрен недостаточно.

Одним из перспективных материалов, создаваемых на основе соединений  $A_2B_6$ , является твердый раствор  $Zn_xCd_{1-x}Te$ , используемый в настоящее время для изготовления датчиков рентгеновского и ядерного излучения, а также солнечных батарей и приборов оптоэлектроники.

Целью данной работы является прогнозирование возможности появления в твердом растворе  $Zn_xCd_{1-x}Te$  областей сосуществования фаз в твердом растворе  $Zn_xCd_{1-x}Te$  в рамках термодинамического моделирования для различных температур и составов.

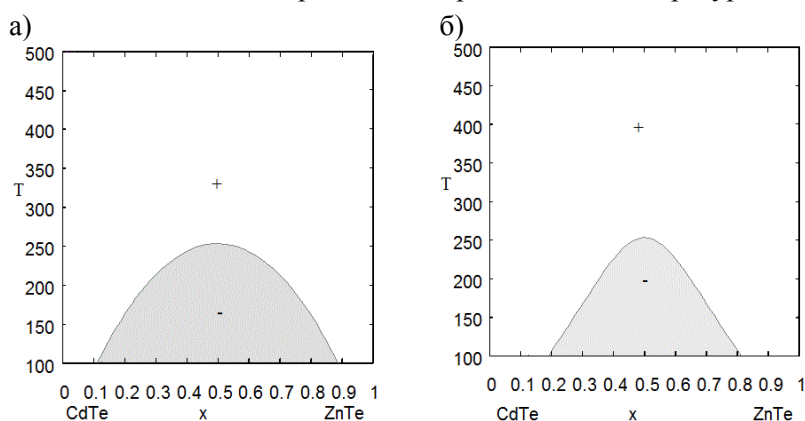


Рис. 1. Сечения существования твердых растворов диаграммы состояния системы Zn–Cd–Te, полученные в результате численных расчетов второй (а) и третьей (б) производных свободной энергии системы (темным цветом показаны области отрицательных значений соответствующих производных.)

С целью улучшения качества прогноза в модели регулярного раствора было учтено взаимодействие ближайших соседних атомов и вторых соседних пар атомов, а также температурная зависимость параметра взаимодействия [1]. Для построения областей сосуществования фаз порядка два были последовательно получены аналитические выражения для компонентов высших производных свободной энергии Гиббса  $G(x, T)$  по концентрациям соответствующих компонентов — с первой производной до четвертой. После фор-

мирования матриц соответствующих производных было использовано условие существования критического пространства второго порядка [2]:

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

Результаты расчетов приведены на рис. 1, 2.

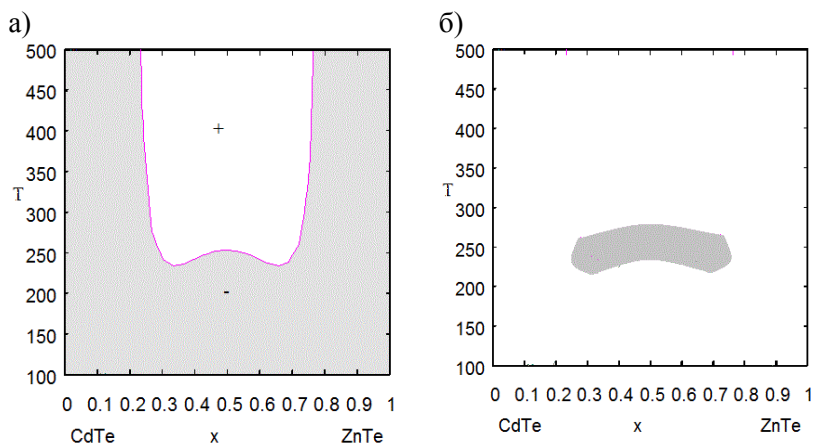


Рис. 2. Сечения существования твердых растворов диаграммы состояния системы Zn–Cd–Te, полученные в результате численных расчетов четвертой производной свободной энергии (а) и области выполнения условий формирования пространств сосуществования фаз порядка два (б) (показана темным цветом)

Таким образом, для твердого раствора  $Zn_xCd_{1-x}Te$  на сечениях существования твердых растворов диаграммы состояния системы Zn–Cd–Te в рамках термодинамического моделирования были построены области, в которых могут выполняться условия формирования пространств сосуществования фаз порядка два для различных концентраций и температур в интервале значений 100—500 К. Результаты работы могут быть использованы для прогнозирования свойств оптоэлектронных приборов.

Работа в рамках научного проекта «Синтез термодинамічно нестабільних фаз та технології остаточного формування оптико-електричних властивостей гетероструктур для оптоелектронних детекторів спеціального призначення» (номер державної реєстрації 0117U000633), который выполняется с 2017 г. за счет средств госбюджета Украины.

#### ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ИСТОЧНИКИ

1. Москвин П. П. Полиассоциативная модель расплава и  $p$ - $T$ - $x$ -равновесия в системе Zn–Cd–Te // Журнал физической химии.— 2010.— № 11.— С. 210–215.
2. 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.

A. I. Kazakov, P. P. Moskvina, G. V. Shapovalov

#### Mathematical modeling of critical phenomena in solid solutions of semiconductors based on $A_2B_6$ compounds

For calculating spaces of coexistence of phases of order two in ternary solid solutions based on  $A_2B_6$  compounds, the differential topological approach was used. The calculations were carried out in the framework of the regular solution model. Interactions both of the first and the second nearest neighbor pairs of atoms and also the temperature dependence of the interaction parameter were considered additionally.

Keywords: thermodynamic model, coexistence of phases, solid solutions.