

14. МОДЕЛЮВАННЯ ТЕРМОДИНАМІЧНОЇ СТАБІЛЬНОСТІ БАГАТОКОМПОНЕНТНИХ ФАЗ З ВИКОРИСТАННЯМ ОСНОВНИХ ПОЛОЖЕНЬ ТЕОРІЇ КАТАСТРОФ

Тарлев С.А. Науковий керівник – проф. каф. “Інформаційних технологій проектування в електроніці та телекомунікація”, д.т.н. Казаков А.І.

Чотирьохкомпонентні напівпровідникові тверді розчини являються перспективними матеріалами для створення оптоелектронних приладів на основі епітаксіальних гетеропереходів, працюючих у широкому спектральному діапазоні. Широко використовуються тверді розчини типу $AxV_{1-x}CuD_1$ -у на основі з'єднань типу АЗВ5. Поява різних критичних явищ обумовлена ефектами зміщення, що приводять до деградації властивостей оптоелектронних приладів.

Аналіз стабільності багатоконпонентних систем за звичай базуються на термодинамічній теорії стабільності Гіббса – Дюгема [1]. Ця теорія дозволяє визначити області з утворення стабільних і нестабільних складів твердих розчинів. Але все ж отриманих за її допомогою даних не вистачить для більш точного визначення складів, у яких можливі критичні явища.

Для аналізу критичних явищ також можна використати основні положення теорії катастроф [2], що являє собою математичний апарат для дослідження розривних функцій і використовувалась при розрахунках незміщення в металевих розплавах і при аналізі термодинамічної стабільності двокомпонентних систем. Для моделювання термодинамічної стабільності чотирьохкомпонентних твердих розчинів типу $AxV_{1-x}CuD_1$ -у пропонується використовувати окремі положення теорії катастроф і модель регулярного розчину. Був використан метод визначення третьої похідної вільної енергії системи по відповідним концентраціям.

1. Пригожин И. Химическая термодинамика: Пер. с англ. /И. Пригожин, Р. Дефэй; Под ред. В.А. Михайлова. – Новосибирск: Наука, 1966. – 502 с.

2. Постон Т. Теория катастроф и ее приложение / Т. Постон, И. Стюарт – М.: Мир, 1980. – 670 с.