

**МОДЕЛЮВАННЯ ТЕРМОДИНАМІЧНОЇ СТАБІЛЬНОСТІ
НЕГОМОГЕННИХ ЧОТИРЬОХКОМП'ЮТЕРНИХ ТВЕРДИХ
РОЗЧИНІВ ТИПУ A₂B₆ В СЕРЕДОВИЩІ СИМВОЛЬНОЇ СИСТЕМИ**

Maxima.

Петров Д.К.

Науковий керівник – проф. каф. ІТПЕТ, д.т.н. Казаков А.І.

В багатокомпонентних напівпровідникових твердих розчинах можлива втрата термодинамічної стабільності, що призводить до їх розпаду на декілька співіснуючих твердих фаз різного складу і подальшої деградації їх електрофізичних властивостей. Тому моделювання термодинамічної стабільності таких багатокомпонентних твердих розчинів є важливим для аналізу можливого використання таких матеріалів.

Визначення стабільності твердих розчинів проводять на основі теорії Гіббса-Дюгема [1]. Для проведення математичного моделювання щодо визначення областей стабільності складу була визначена вільна енергія Гіббса чотирьохкомпонентного твердого розчину $Cd_xHg_{1-x}Te_ySe_{1-y}$ на основі параметрів взаємодії для квазібінарних систем в твердій фазі.

Для проведення математичного моделювання була використана система символної математики Maxima. Були проведені комп'ютерні розрахунки по обчисленню других похідних вільної енергії Гіббса чотирьохкомпонентної системи по концентраціях бінарних компонентів, та побудова нульового контуру матриці цих других похідних.

В результаті проведених обчислень було побудовано положення контура стабільності для багатокомпонентних систем на перерізі існування твердих розчинів діаграми стану системи $Cd_xHg_{1-x}Te_ySe_{1-y}$.

1. A. I. Kazakov, I. N. Kishmar. Computer simulation for stability of quaternary solid solutions. // J. Crystal Growth. – 1990. – v.110. – p.803-814.