

Теоретическое и экспериментальное исследование квазитройных систем

$PbS-PbSe-PbTe$ и $SnS-SnSe-SnTe$ ¹

Волыхов Андрей Александрович, Худякова Екатерина Николаевна,

Рыженков Антон Владимирович

студенты

Химический факультет Московского государственного университета

им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: andyvolykhov@yandex.ru

Полупроводниковые твёрдые растворы являются перспективными оптоэлектронными и термоэлектрическими материалами. Для нужд полупроводниковой техники представляют интерес квазитройные твёрдые растворы, так как при их использовании можно независимо задавать два параметра твёрдого раствора, например, ширину запрещённой зоны и параметр элементарной ячейки. Для информации о предельной взаимной растворимости при различных температурах, а также об условиях синтеза монокристаллов различного состава необходимо построение фазовых диаграмм.

В настоящей работе было произведено экспериментальное исследование недостаточно изученных элементов фазовых диаграмм квазитройных систем $PbS-PbSe-PbTe$ и $SnS-SnSe-SnTe$. Образцы синтезированы из особо чистых бинарных компонентов с составами, отвечающими максимуму температуры плавления в бинарных системах металл-халькоген.

В системе, образованной халькогенидами свинца, методом ДТА были построены поверхности ликвидуса и солидуса. Кроме того, в обеих системах при помощи РФА и ЛРСА отожжённых гетерогенных образцов были найдены границы областей гомогенности твёрдых фаз при следующих температурах: для системы $PbS-PbSe-PbTe$ при 800 К, 840 К и 930 К, для системы $SnS-SnSe-SnTe$ при 950 К. Природа областей распада различная: в системе $PbS-PbSe-PbTe$ присутствует спинодальный распад кубического твёрдого раствора, в системе $SnS-SnSe-SnTe$ область распада существует между фазами различной структуры – кубической и ромбической. Из данных РФА построены зависимости параметров элементарной ячейки от состава.

На основании полученных экспериментальных результатов из данной работы и с привлечением литературных данных, в том числе о бинарных системах, методами термодинамического моделирования были построены расчётные фазовые диаграммы систем, включающие поверхности ликвидуса и солидуса и границы областей существования твёрдых фаз. Для моделирования применялась четырёхпараметрическая зависимость избыточной энергии Гиббса фаз от состава и температуры. В результате моделирования было найдено, что в системе $PbS-PbSe-PbTe$ необходимо учитывать поправку на тройное взаимодействие в жидкой и твёрдой фазах, а для описания данных в системе $SnS-SnSe-SnTe$ достаточно учёта тройного взаимодействия только в одной из твёрдых фаз (в ромбической). Полученные результаты могут быть применены для выработки методики синтеза трёх- и четырёхкомпонентных твёрдых растворов, а также для моделирования взаимной диффузии в квазитройных системах.

Для кубических фаз построены и сопоставлены со статистическим распределением зависимости вероятности образования четырёхчастичных кластеров от состава образцов, характеризующие ближний порядок в рассмотренных системах.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 06-03-33048-а.