

МАШИНОЗНАВСТВО. ОБРОБКА МАТЕРІАЛІВ У МАШИНОБУДУВАННІ

УДК.548.52:541.123,537.311,33

М.С. Антонов, аспір.
П.П. Москвін, д.ф.-м. н., проф.
Житомирський державний технологічний університет

ТЕРМОДИНАМІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ФАЗОВИХ РІВНОВАГ У СИСТЕМІ ЦИНК-ТЕЛУР

На основі моделі поліасоційних розчинів проаналізовані фазові рівноваги у системі цинк-телур. Шляхом обробки експериментальних даних за складом фаз, що знаходяться в рівноважному стані, знайдено термодинамічні функції утворення рідкофазових асоціатів, котрі задовільно описують $p-T-x$ рівновагу у системі. Отримані результати аналізу фазової рівноваги доводять, що модель поліасоційних розчинів можна використовувати для моделювання діаграми стану системи цинк-телур у широкому інтервалі температур.

Постановка проблеми. У наших роботах по моделюванню фазових рівноваг у напівпровідниковій системі $Cd-Hg-Te$ [1–3] доведено, що характеристичні лінії фазової діаграми можуть бути описані із використанням моделі поліасоційних розчинів. Відповідно до цієї моделі рідка фаза напівпровідників класу A^2B^6 може бути описана набором асоціатів різного складу та вільними атомами вхідних компонентів. Саме конкурентним впливом асоціатів різного складу на характер фазової рівноваги вдалося описати складну форму ліквідусу вказаних систем, а незначною концентрацією вільних атомів вхідних компонентів, що відповідальні за тиск у системі, пояснити у цілому незначний парціальний тиск летючих компонентів над власним розплавом.

У роботі уявлення моделі поліасоційної рідкої фази будуть використані до аналізу $p-T-x$ рівноваги у системі $Zn-Te$. Сполука, що формується в досліджуваній двокомпонентній системі, може використовуватися як активне середовище для датчиків рентгенівського та ядерного випромінювання, а також входить основним компонентом у важливий для сучасної оптоелектроніки твердий розчин $Zn_xCd_{1-x}Te$. Цей твердий розчин використовується як буферний шар у гетерокомпозиціях для високоефективних приладів інфрачервоної техніки [4].

Викладення основної частини досліджень. Фазова рівновага системи $Zn-Te$ у експериментальному та теоретичному відношенні вивчалася у роботах [4–9]. Отримані експериментальні дані по $p-T-x$ рівновагах у системі дозволили зробити обґрунтований вибір термодинамічної моделі для опису термодинамічного стану взаємодіючих фаз, а також виконати теоретичну побудову її діаграми стану. За основу теоретичних розробок було взято модель асоційного розчину з одним комплексом у рідкій фазі. При цьому складна форма поверхні ліквідусу системи була описана завдяки врахуванню взаємодії між комплексом та вільними атомами цинку та телуру у відповідності до моделі субрегулярних розчинів [5, 6]. Це дозволило з високою достовірністю розрахувати лінію ліквідусу та тиск парів компонентів системи над власним розплавом. Приймаючи до уваги суперечливість моделі субрегулярних розчинів, обумовленої труднощами у фізичній інтерпретації залежності параметрів взаємодії від складу рідкої фази, та складнощами під час поширення отриманої термодинамічної інформації на багатокомпонентні фази системи A^2B^6 , проведений аналіз робіт [5, 6] не слід вважати завершеним. Тому у теперішній роботі визначені протиріччя будуть зняті завдяки використанню в аналізі фазової рівноваги у системі $Zn-Te$ моделі поліасоційних розчинів.

Відмінною особливістю діаграми стану системи $Zn-Te$ є специфічна форма її лінії ліквідусу, котра визначається у дуже значній асиметрії відносно еквіатомного складу рідкої фази (склад розплаву $X_{Zn} = X_{Te} = 0.5 \text{ ат.дол.}$) та незначним температурним інтервалом області суттєвої розчинності телуру у розплаві цинку у порівнянні із розчинністю цинку у рідкому телурі. На рис. 1 представлено ліквідус системи $Zn-Te$, де спостерігаються вказані особливості системи.

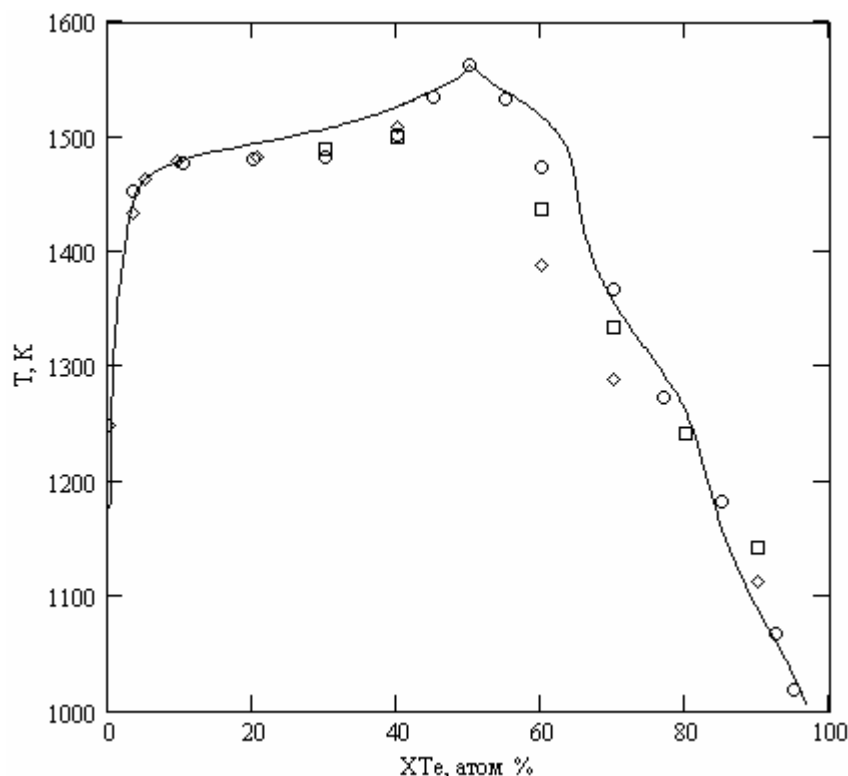


Рис. 1. Ліквідус системи Zn – Te. □, ◇, ○ - експериментальні дані робіт [6, 8, 12] відповідно

Відповідно до моделі асоційних розчинів $T - x$ фазова рівновага описується наступними рівняннями [1–3]:

$$\Delta S_{ZnTe}^F (T_{ZnTe}^F - T) / RT + \ln\left(\frac{x_{Zn} \cdot x_{Te}}{x_{Zn}^{Sl} \cdot x_{Te}^{Sl}}\right) = 0, \tag{1}$$

де $\Delta S_{ZnTe}^F, T_{ZnTe}^F$ – ентропія та температура плавлення телуриду цинку;

x_{Zn}, x_{Te} – концентрації вільних, неасоційованих атомів цинку та телуру;

T, R – абсолютна температура та газова стала; індекс Sl вказує на рідку фазу стехіометричного складу.

Концентрації комплексів у розплаві пов'язані із валовим складом компонента у рідкій фазі рівняннями балансу речовини:

$$\begin{aligned} X_{Zn}G - x_{ZnTe} - 2 \cdot (x_{Zn_2Te} + x_{Zn_2Te_3}) - x_{ZnTe_2} - x_{Zn} &= 0; \\ X_{Te}G - x_{ZnTe} - x_{Zn_2Te} - 2 \cdot x_{ZnTe_2} - 3 \cdot x_{Zn_2Te_3} - x_{Te} &= 0; \\ G = 1 + 2 \cdot (x_{Zn_2Te} + x_{Zn_2Te_3}) + x_{ZnTe} + 4 \cdot x_{ZnTe_2} &, \end{aligned} \tag{2}$$

де X_{Zn}, X_{Te} – загальний (валовий) вміст цинку та телуру у рідкій фазі;

$x_{Zn_pTe_q}$ – концентрація асоціату складу Zn_pTe_q ; $p = 1, 2$; $q = 1, 2, 3$.

Для квазіхімічної реакції отримання рідкофазних асоціатів правильні наступні рівняння закону діючих мас:

$$\frac{x_{Zn}^p x_{Te}^q}{x_{Zn_pTe_q}} = K_{pq}(T), \tag{3}$$

де K_{pq} – константа дисоціації комплексу складу Zn_pTe_q .

В отриманих рівняннях вже враховано, що рідка фаза системи Zn – Te може бути складена із комплексів $ZnTe, Zn_2Te, Zn_2Te_3, ZnTe_2$, а також з вільних атомів Zn та Te. В роботах [1–3] нами було доведено, що саме такий асоціативний склад розплаву напівпровідників A^2B^6 дає можливість досягти

задовільного опису фазових рівноваг в системах $Cd-Te$, $Hg-Te$. Останні матеріали є системами аналогами до системи $Zn-Te$, що аналізується.

Необхідно відмітити, що у формулі (1) проігнорована компонента рівняння, що враховує різницю мольних теплоємностей між твердим телуридом цинку та рідкими цинком та телуром. Ця процедура обґрунтована у зв'язку із незначною величиною цієї компоненти у порівнянні із першою компонентою рівняння (1). Така поведінка систем A^2B^6 також спостерігалася при виконанні аналогічних розрахунків фазової рівноваги в системах $Cd-Te$, $Hg-Te$ [1–3].

Для розрахунку парціальних тисків компонентів над розплавом вважали, що за величину тисків системи відповідають лише вільні, неасоційовані атоми цинку та телуру. Тоді у відповідності до закону Рауля-Генрі оцінки цих параметрів рівноваги можуть бути виконані за формулами:

$$p_{Zn} = x_{Zn} p_{Zn}^0(T); p_{Te_2} = x_{Te_2}^2 p_{Te_2}^0(T), \quad (4)$$

де $p_{Zn}^0(T)$, $p_{Te_2}^0(T)$ – тиск насичення цинку та двоатомного телуру при заданій температурі. У зв'язку з тим, що телур у газовій фазі знаходиться у двоатомному стані, в останню формулу концентрація телуру в рідкій фазі входить в квадратичній формі. Дані за тиском насиченого пару телуру при високих температурах були займані з роботи [5]:

$$\lg p_{Te_2}^0(\text{атм.}) = -\frac{5960,2}{T} + 4,7191; T > 723 K. \quad (5)$$

Наведена температурна функція досить вірогідна та використовувалась раніше [1–3, 5] для опису станів газової фази у системах $Cd-Te$, $Hg-Te$. Тиск насичення цинку при відносно низьких температурах експериментально ретельно вивчено. Однак для температурного інтервалу, де розглядаються фазові рівноваги у системі $Zn-Te$, інформація за тиском цього компонента достатньо обмежена [10]. Серед викладених довідкових даних пріоритет у виборі шуканої залежності було віддано наступному функціоналу:

$$\lg p_{Te_2}^0(\text{атм.}) = 12,301 - \frac{6967}{T} - 2,162 \lg T + 2,298 \cdot 10^{-4} \cdot T. \quad (6)$$

Розрахункові значення тиску насичення цинку, отримані за цим виразом для низьких температур ($T < 1200 K$), не суперечать експериментальним даним багатьох авторів та, у цілому, задовільно описують досліди тиску високих температур, котрі викликають найбільший інтерес у даному випадку [10].

Дані за температурою та ентропією плавлення телуриду цинку були отримані із робіт [5, 6]. Їх значення наступні: $T_{ZnTe}^F = 1563 K$, $\Delta S_{ZnTe}^F = 10,58$ е.о. Таким чином, наведені вище вирази (1–6) повністю характеризують $p-T-x$ рівноваги у розглянутій двокомпонентній системі.

Пошук необхідних для розрахунків температурних залежностей констант дисоціації, які є фундаментальними параметрами моделі, виконували із використанням наступних фізичних особливостей як діаграми стану системи, що моделюється, так і наявності термодинамічної інформації про даний матеріал. Першою принциповою складністю у реалізації моделі поліасоціативного розчину є відсутність експериментальних результатів за тиском парів компонентів у точці конгруентного плавлення сполуки $ZnTe$. Ці дані є вхідною інформацією для розрахунків концентрацій вільних атомів цинку та телуру при умовах конгруентного плавлення сполуки. За формулою (1) ці шукані дані позначені як x_{Zn}^{Sl} , x_{Te}^{Sl} . Вкажемо, що такі складнощі не виникали під час моделювання фазової діаграми систем $Cd-Te$, $Hg-Te$ [1–3], коли вказаний тиск експериментально визначений достатньо точно. Наявні експериментальні дані тисків над насиченим розплавом $Zn-Te$ обмежені низькими температурами та не дають точної інформації про залежності тиску від температури біля температури плавлення в системі. Виходячи із цього, вказані параметри системи у роботі розглядалися як підгінні. Для оцінки тиску телуру у точці конгруентного плавлення використана наступна процедура. Для високотемпературної залежності тиску телуру над насиченим розплавом існують експериментальні результати [9], котрі, у цілому, непогано корелюють із достовірними даними [5, 7]. Для оцінки тиску телуру при температурі плавлення у роботі через експериментальні дані [9] методом найменших квадратів проводились екстраполюючі поліноми від другого до четвертого ступенів. Одна з таких отриманих функцій четвертого ступеня у координатних осях $\lg p$, $1/T$ наведена на рис. 2. Розрахунки показали, що, починаючи із третього ступеня, збільшення ступеня апроксимуючого полінома практично не впливало на хід наближених функцій. Збільшення ступеня полінома, що відповідало збільшенню точності апроксимації, надавало надію, що при наближенні до температури плавлення шукана функція різко змінить хід та почне асимптотичне наближення до вертикальної лінії, котра відповідає температурі плавлення телуриду цинку. Аналіз даних за тиском компонентів у споріднених системах $Cd-Te$, $Hg-Te$ вказує [1–3], що

хід цих залежностей у розглянутому інтервалі температур різкий. Однак очікуваного не відбулося, та, починаючи із третього ступеня, поліноми практично починали співпадати одне з одним. Тому вважаємо, що така процедура оцінки тиску телуру при температурі конгруентного плавлення дала можливість оцінити лише його верхню межу. Іншими словами, відповідно до виконаних розрахунків тиск телуру у цій характеристичній точці не повинен перевищувати $p_{Te_2}^{St} \leq 0.29$ атм. Вкажемо також, що наступне збільшення ступеня полінома обмежене кількістю наявних експериментальних даних.

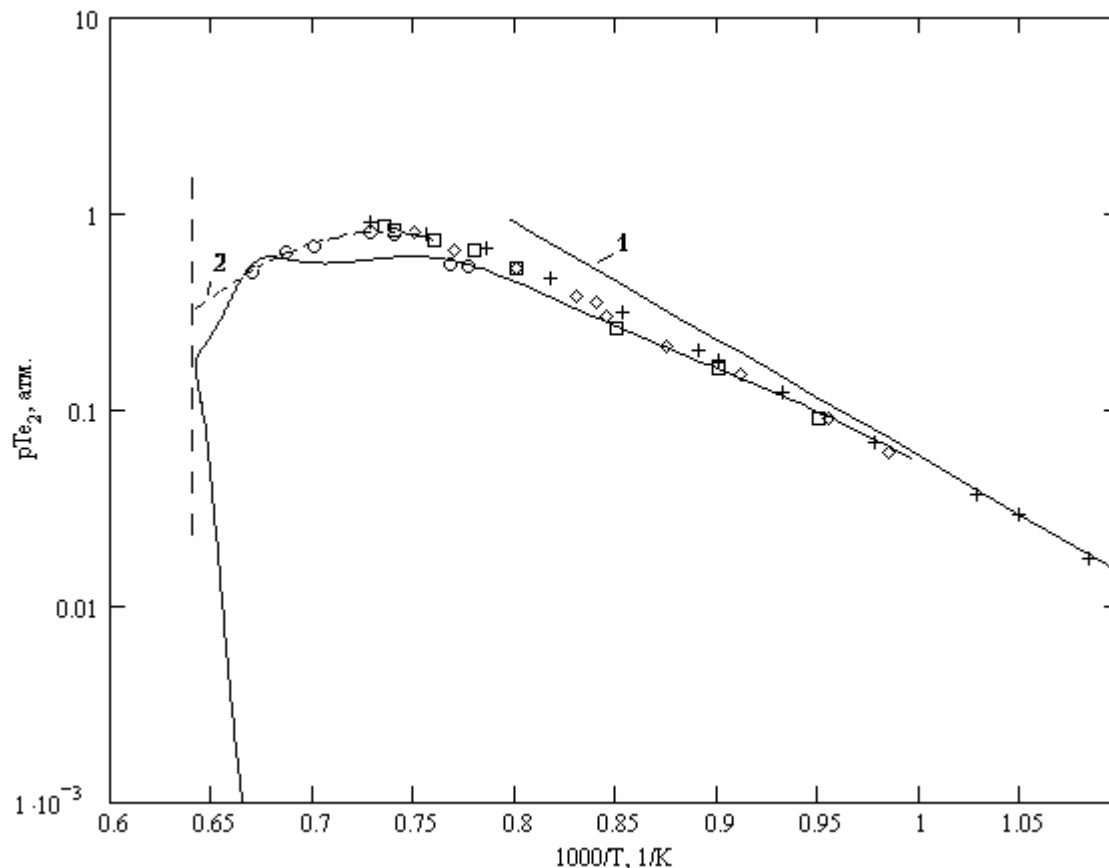


Рис. 2. Тиск телуру над насиченим розплавом системи Zn – Te :

□, ◇ – експериментальні дані [5], отримані із таблиці та зняті з графіка;

+ , ○ – експериментальні дані робіт [7, 9] відповідно; 1 – тиск телуру над власним розплавом; 2 – екстрапольована залежність тиску телуру над насиченим розплавом від температури. Вертикальна пунктирна лінія відповідає температурі плавлення телуриду цинку

Щодо тиску цинку при температурі плавлення сполуки, то ситуація ще більш невизначена. Хід ліквідусу системи Zn – Te у ділянці, збагаченій металом, такий, що істотна розчинність у рідкому цинку починає проявлятися при великих температурах, коли тиск важко експериментально визначити. Це пояснює наявність дуже незначної кількості експериментальних даних при температурах вище 1200 К (рис. 3). У той же час мала розчинність телуру у цинку при більш низьких температурах (рис. 2) призводить до того, що експериментальні дані за тиском цинку із розчинним у ньому телурі практично співпадає із температурною залежністю тиску насичення цинку над власним розплавом. Відмічений факт встановлюється даними рис. 3, де наведена залежність тиску цинку над насиченим розплавом системи. На рис. 3 спостерігається, що залежність тиску над розплавом цинку та насиченим розплавом Zn – Te (верхні лінії графіків) практично співпадають. Отже, ці дані практично непридатні до теоретичної обробки із метою розрахунків термодинамічної функції системи. У такому випадку тиск цинку при температурі плавлення розглядався як підгінний параметр до експериментальних результатів [9]. При цьому враховувалося, що значення шуканого параметра при температурі плавлення сполуки відповідно до роботи [9] повинно належати екстрапольованому за експериментальними точками інтервалу 0.8–1.5 атм. Зазначені фізичні припущення відносно значень термодинамічних параметрів системи при температурі плавлення дозволили суттєво обмежити інтервали їх пошуку при вирішенні сформульованого завдання.

Досвід пошуку температурних залежностей констант дисоціації комплексів у рідких фазах $Cd-Te$, $Hg-Te$ [1–3], а також теоретичні висновки про хід лінії ліквідусу в залежності від ступеня дисоціації розплаву [11], дозволили перед виконанням розрахунків зробити певні обмеження на шукані функції. По-перше, основним комплексом розплаву в інтервалі температур, близьких до температури плавлення, повинен бути асоціат $ZnTe$, тоді як більш складні, багатоатомні комплекси повинні проявлятися на лінії ліквідусу при зниженні температури. Вкажемо також, що присутність у розплаві при високих температурах тільки простішого комплексу не може бути чинником суттєвої асиметрії діаграми стану. Отже, багатоатомні комплекси повинні з'явитися у істотних концентраціях вже при достатньо високих температурах. При цьому, як і раніше [1–3], вважали, що із пониженням температури концентрації багатоатомних комплексів системи повинні зростати, тоді як вміст в рідкій фазі асоціату $ZnTe$ повинен зменшуватися. Таким чином, використання вказаних фізичних зауважень дозволило у даній роботі знайти температурні залежності констант дисоціації без залучення типових, громіздких математичних процедур пошуку параметрів математичної інтерпретації моделі рідкої фази. Крім того, використаний підхід задалегідь визначає отримання термодинамічних функцій розплаву, котрі не суперечать фізичному змісту моделі поліасоційованих розчинів. Останнє важливо, оскільки знайдені функції дисоціації у подальшому плануються до використання при моделюванні фазової рівноваги у трьох та більше компонентних системах. Обґрунтоване їх використання у загальному випадку аналізу фазових рівноваг у багатокомпонентних системах припускає збереження їх фізичної інтерпретації з виключенням можливості трансформації моделі розплаву із термодинамічної у чисто математичну, імітаційну.

Результати обробки експериментальних результатів по ліквідусу системи та тиску парів компонентів дозволили отримати параметри температурних залежностей констант дисоціації, котрі систематизовані у табл. 1. Відповідні знайденим константам дисоціації концентрації телуру та цинку у розплаві стехіометричного складу при температурі плавлення приймали наступні значення: $x_{Zn}^{Sl} = 0.05641$ ат. дол., $x_{Zn}^{Sl} = 0.17153$ ат. дол. Відповідно до оцінок роботи ці концентрації вільних компонентів забезпечують наступні тиски компонентів при температурі конгруентного плавлення телуриду цинку: $p_{Zn}^{Sl} = 1.12$ атм., $p_{Te_2}^{Sl} = 0.237$ атм. Наведені результати тисків парів не суперечать нашим оцінкам, що виконані вище.

Таблиця 1

Температурні залежності констант дисоціації комплексів у розплаві системи $Zn-Te$
($K_{nm} = \exp(A - B/T + C/T^2)$)

| Параметри температурної залежності констант дисоціації комплексів | A | B, K | C, K ² |
|---|----------|--------------------|--------------------|
| $ZnTe$ | 1551.2 | $4.759 \cdot 10^6$ | $3.641 \cdot 10^9$ |
| Zn_2Te | 1169.506 | $3.712 \cdot 10^6$ | $2.929 \cdot 10^9$ |
| Zn_2Te_3 | 106.034 | $3.30 \cdot 10^5$ | $2.337 \cdot 10^8$ |
| $ZnTe_2$ | 32.446 | $8.753 \cdot 10^4$ | $5.09 \cdot 10^7$ |

Результати розрахунків ліквідусу системи та тисків парів цинку та телуру над насиченим розплавом наведені на рис.1–3. У цілому спостерігається задовільна відповідність розрахунків до наявних експериментальних даних.

Необхідно вказати на існуючу можливість збільшення точності опису окремо як лінії ліквідусу системи, так і позбавитися коливального характеру залежності тиску телуру над розплавом при високих температурах. Поява коливань на залежності тиску телуру від температури є прямим наслідком специфічного ходу ліквідусу системи поблизу температури плавлення сполуки (точки перегину лінії розчинності від температури). Тут мається на увазі наявність різкого спаду температури ліквідусу при $X_{Te} = 0.6-0.7$ ат. дол. із одночасним суттєвим зменшенням розчинності телуру у розплаві цинку для збагаченої металом частини діаграми стану. Вказані температурні ділянки розташовані симетрично відносно еквіатомного складу розплаву і одні й ті ж асоціати спричиняють суттєвий вплив на розташування ліквідусу у обох концентраційних частинах діаграми. Тому забезпечити одночасний опис діаграми у збагаченій металом та металоїдним компонентом системі складно. Природно, що головну роль у цьому інтервалі параметрів рівноваги відіграє комплекс $ZnTe$. Як вже відмічали, саме цей асоціат визначає загальний вигляд обговорених залежностей, та його вплив визначний для обох частин діаграми.

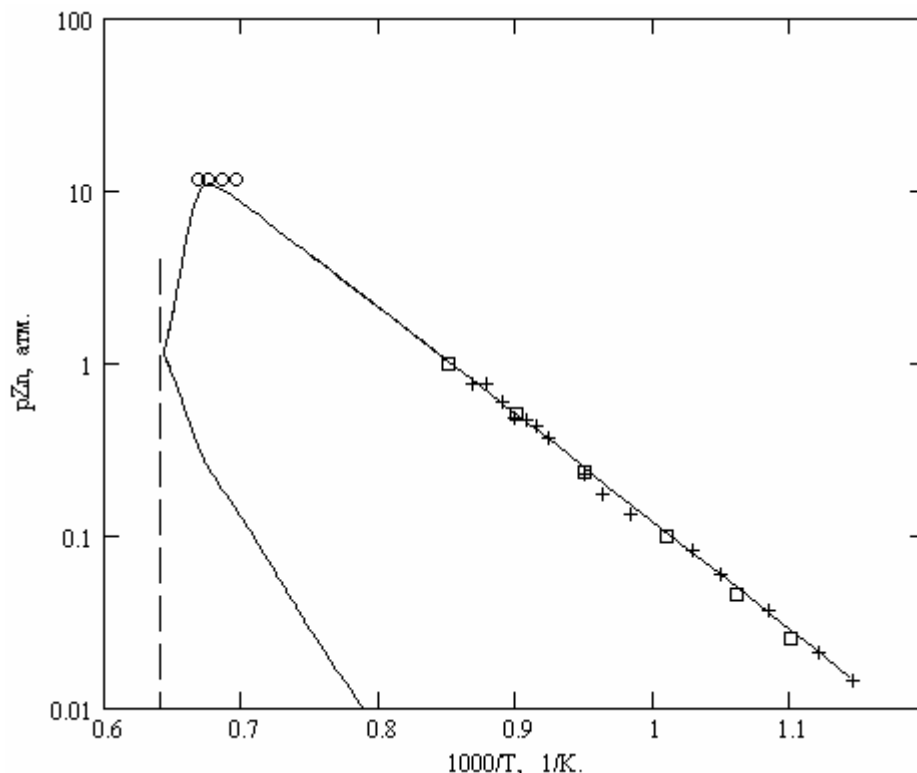


Рис. 3. Тиск цинку над насиченим розплавом системи $Zn-Te$:

$\square, +, o$ – експериментальні дані робіт [5, 7, 9] відповідно.

Пунктирна лінія відповідає температурі плавлення телуриду цинку

На рис. 4 надані розрахункові залежності концентрацій асоціатів вздовж ліній трифазної рівноваги системи $Zn-Te$. З рис. 4 бачимо складну взаємодію комплексів у розплаві, котра забезпечує відповідність розрахунків фазової рівноваги експериментам. Така ситуація не є несподіваною, бо є наслідком складної форми експериментального ліквідусу системи та різкої його асиметрії відносно еквіатомного складу розплаву.

Звертає на себе увагу екстремальний характер залежності складу комплексу $ZnTe$ від валового складу розплаву поблизу температури плавлення сполуки. Розрахунки показують, що для забезпечення достатньо різкого максимуму лінії ліквідусу біля температури плавлення, котрий властивий системам з малою дисоціацією сполуки [11], зі зниженням температури від точки плавлення концентрація асоціату повинна зростати. Це відповідає загальним тенденціям у поведінці лінії ліквідусу двокомпонентної системи в залежності від ступеня дисоціації рідкої фази. При подальшому зниженні температури концентрація його спадає, а форму ліквідусу починають визначати концентрації більш складних триатомних комплексів у рідкій фазі. Тому можна стверджувати, що саме перерозподілом вкладів від присутності кожного із рідкофазних асоціатів у положення лінії ліквідусу зі зміною температури вдається описати складний характер фазової рівноваги у системі.

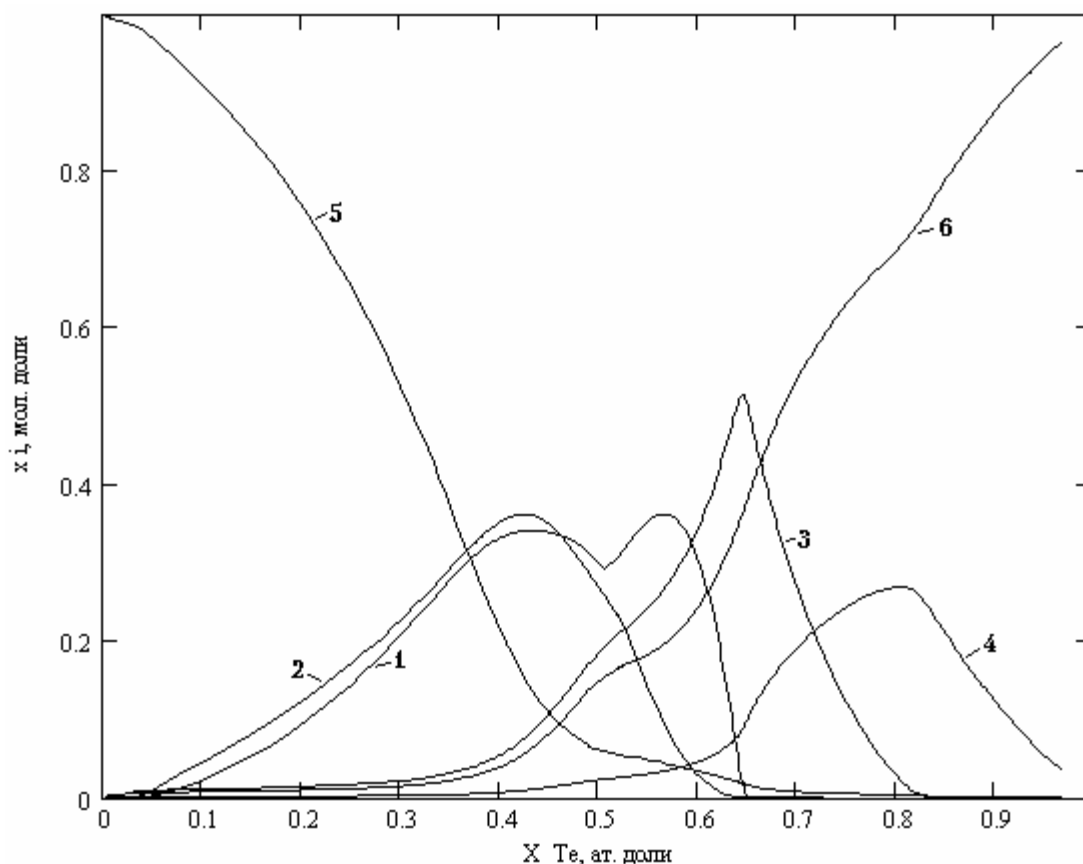


Рис. 4. Концентрації асоціатів вздовж ліквідусу системи Zn – Te :
 1 – ZnTe; 2 – Zn₂Te; 3 – Zn₂Te₃; 4 – ZnTe₂;
 5, 6 – концентрації вільних атомів цинку та телуру відповідно

Висновки. Таким чином, задовільний опис різко асиметричної $p-T-x$ діаграми системи Zn – Te єдиними термодинамічними функціями для рідкої фази доводить доцільність використання моделі поліасоційних розчинів для аналізу фазової рівноваги у напівпровідникових системах A^2B^6 зі складним характером взаємодії компонентів у розплаві. Знайдені при обробці експериментальних даних за фазовою рівновагою термодинамічні функції системи можуть бути використані для аналізу діаграм станів багатокомпонентних твердих розчинів із участю телуриду цинку.

ЛІТЕРАТУРА:

1. Moskvina P.P., Khodakovskiy V., Rashkovetskii L., Stronski A. Polyassociative model of A^2B^6 semiconductor melt and $p-T-x$ equilibria in Cd – Hg – Te system. // J. Crystal Growth, 2008. – V. 310. – № 10. – P. 2617–2626.
2. Москвін П.П., Раїшковацький Л.В. Полиасоціативная модель расплава и фазовые равновесия в системах Cd-Te и Hg-Te // Журн. физ. химии. – 2006. – № 9. – Т. 80. – С. 1562–1567.
3. Moskvina P.P., Khodakovskiy V., Olchowick J., Zdyb A., et al. Thermodynamic description of $Cd_xHg_{1-x}Te$ growth process by LPE. // J. Non-Crystalline Solids. – 2008. – V. 354. – № 35–39. – P. 4407–4414.
4. Гуськов В.Н., Нупан Г.Д., Кольцова Т.Н. $p-T-x$ фазовые равновесия в системе Cd – Zn – Te // Неорганические материалы. – 2003. – № 4. – Т. 39. – С. 415–421.
5. Brebrick R.F. Partial pressure in the Cd-Te and Zn-Te systems. // J. Electrochem. Soc. – 1971. – V. 118. – № 12. – P. 2014–2020.
6. Steininger J., Strauss A.J., Brebrick R.F. Phase diagram of Zn-Cd-Te ternary system. // J. Electrochem. Soc., 1970. – V. 117. – № 10. – P. 1305–1309.
7. Guskov V.N., Greenberg J.H., Alikhanyan A.S., Natarovsky A.M., et al. P-T-X phase equilibrium in Zn-Te system // Phys. Stat. Sol. (b), 2002. – V. 229. – № 1. – P. 137–140.
8. Carides J., Fischer A.G. Solid State Communication, 1964. – V. 2. – P. 217.

9. *Shiozawa L.R., Jost J.M., Sullivan G.A.* Reseach on improved II-VI compounds, Final report, Contract AF 33(615)-2708, 1965–1968.
10. *Несмеянов А.Н.* Давление пара химических элементов. – М.: АН, 1961. – 396 с.
11. *Глазов В.М., Павлова Л.М.* Химическая термодинамика и фазовые равновесия. – М.: Металлургия, 1988. – 559 с.
12. *Kulwicki B.M.* Ph. D. Dissertation. Univ. of Michigan, 1963.

АНТОНОВ Максим Сергійович – аспірант кафедри фізики Житомирського державного технологічного університету.

Наукові інтереси:

- технологічні процеси отримання складних напівпровідникових плівок;
- термодинаміка багатокомпонентних напівпровідникових фаз.

МОСКВІН Павло Петрович – доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри фізики Житомирського державного технологічного університету.

Наукові інтереси:

- фізика напівпровідників, напівпровідникові кристали та плівки;
- технологія їх отримання;
- термодинаміка багатокомпонентних напівпровідникових фаз.

Тел.: (0412) 374617.

E-mail: moskvin@us.ztu.edu.ua

Подано 03.01.2009

Антонов М.С., Москвин П.П. Термодинамічне моделювання фазових рівноваг у системі цинк-теллур
Антонов М.С., Москвин П.П. Термодинамическое моделирование фазовых равновесий в системе цинк-теллур
Antonov M.S., Moskvina P.P. Thermodynamic modeling of phase equilibrium in $Zn - Te$ system

УДК 548.52:541.123,537.311,33

Термодинамическое моделирование фазовых равновесий в системе цинк-теллур / М.С. Антонов, П.П. Москвин

На основе модели полиассоциированных растворов проанализированы фазовые равновесия в системе цинк-теллур. Путем обработки экспериментальных данных по составу равновесных фаз найдены термодинамические функции образования жидкофазовых ассоциатов, которые удовлетворительно описывают $p - T - x$ равновесия в системе. Достигнутое соответствие расчетов эксперименту доказывает применимость модели полиассоциированных растворов для моделирования диаграммы состояния системы цинк-теллур в широком интервале температур.

УДК 548.52:541.123,537.311,33

Thermodynamic modeling of phase equilibrium in $Zn - Te$ system / M.S. Antonov, P.P. Moskvina

On the base of polyassociative solution theory the phase equilibrium in $Zn - Te$ system has been analyzed. By processing the experimental data on a composition of equilibrium phases, a thermodynamic functions of liquid phase associate formation, which well describe the $p - T - x$ equilibriums in system, are found. Satisfactory agreement the theoretical results to the experimental data on phase equilibrium proved the application the polyassosiative solution theory to the description of the $Zn - Te$ phase diagram.