

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
ОДЕСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Шаповалов Геннадій Віталійович



УДК 004.942.532.

**МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ КРИТИЧНИХ ЯВИЩ У  
БАГАТОКОМПОНЕНТНИХ СИСТЕМАХ НА ОСНОВІ  
НАПІВПРОВІДНИКОВИХ СПОЛУК II – VI ТА III – V ГРУП.**

01.05.02 – Математичне моделювання та обчислювальні методи

**Автореферат**

дисертації на здобуття наукового ступеня

кандидата технічних наук

Одеса – 2021

Дисертацією є рукопис

Робота виконана в Одеському національному політехнічному університеті Міністерства освіти і науки України

**Науковий керівник** доктор технічних наук, професор  
**Казаків Анатолій Іванович**,  
Одеський національний політехнічний університет,  
завідувач кафедри інформаційних технологій  
проєктування в електроніці та телекомунікаціях

**Офіційні опоненти:** Доктор технічних наук, професор  
**Федорчук Володимир Анатолійович**  
Кам'янець-Подільський національний університет  
ім. Івана Огієнка МОНУ,  
завідувач кафедри інформатики

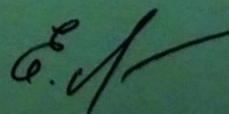
Кандидат технічних наук  
**Красношлик Наталя Олександрівна**  
Черкаський національний університет  
імені Богдана Хмельницького,  
доцент кафедри прикладної математики та інформатики

Захист відбудеться «10» 03 2021 р. о 17 год. 00 хв. на засіданні спеціалізованої вченої ради К41.052.11 в Одеському національному політехнічному університеті за адресою: 65044, м. Одеса, просп. Шевченка, 1

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Одеського національного політехнічного університету за адресою: 65044, м. Одеса, просп. Шевченка, 1.

Автореферат розіслано «09» 02 2021 р.

Вчений секретар  
спеціалізованої вченої ради К41.052.11  
кандидат технічних наук, доцент

 О. Ю. Лебедєва

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**Актуальність теми дослідження.** Особливе місце у сучасній мікро- та нано-електроніці займають прилади, які містять багатокомпонентні напівпровідникові тверді розчини (БКНТР) на основі сполук II – VI ( $A^2B^6$ ) та III – V ( $A^3B^5$ ) груп періодичної системи. Вищезазначені БКНТР в даний час є перспективними матеріалами при виготовленні оптоелектронних приладів, призначених для роботи в широкому спектральному діапазоні. У зв'язку з цим, значний інтерес викликають дослідження проблеми стабільності БКНТР. Сфери застосування приладів, до складу яких входять БКНТР, вимагають високу стабільність роботи за різними зовнішніми умовами. Однак, термодинамічні оцінки енергетичного стану твердих фаз напівпровідників  $A^2B^6$  та  $A^3B^5$  прогнозують високу ймовірність втрати термодинамічної стабільності по відношенню до флуктуації складу та появи метастабільних або нестабільних станів, але теорію математичного моделювання критичних явищ, які призводять до втрати стабільності в БКНТР, на цей час не розроблено. Зовсім відсутні ефективні математичні описи процесів упорядкування структур, які самоорганізовано утворюються, виникнення біфуркаційних просторів, критичних просторів і просторів співіснування фаз різних порядків. Вищезазначені критичні явища можуть стати причиною деградації властивостей БКНТР і привести до розладів в роботі приладів, виготовлених на їх основі.

Вирішення проблеми дослідження, проектування та виготовлення БКНТР, прогнозування їх властивостей, потребує суттєвий розвиток та ефективне використання математичних методів. В тому числі модифікацію та спеціалізацію існуючих обчислювальних методів розв'язання диференціальних рівнянь та нерівностей, методів обчислення детермінантів похідних вищих порядків багатовимірних функцій і розробку ефективних алгоритмів, що враховують особливості реальних технічних та технологічних процесів синтезу БКНТР, забезпечують створення ефективних програмних засобів комп'ютерної реалізації. Математичні моделі, які мають фізичне обґрунтування, дозволяють створювати основу для наступного опису процесів виникнення самоорганізовано упорядкованих структур. Математичне моделювання таких процесів відкриває можливість не тільки цілеспрямованого проведення низькотемпературного синтезу БКНТР, коли термодинамічні умови відповідають нестабільному стану системи, але відкривають перспективи синтезу нових матеріалів для сучасної мікро- та наноелектроніки. Тому математичне моделювання процесу утворення у багатокомпонентних системах біфуркаційних просторів, критичних просторів і просторів співіснування фаз різних порядків для прогнозування станів БКНТР є актуальною складовою частиною загального аналізу низькотемпературної фазової діаграми стану багатокомпонентних напівпровідникових систем.

Вказані вище задачі визначають *актуальність* дисертаційної роботи, зумовлюють необхідність розробки методологічних засад побудови систем математичного моделювання критичних явищ у БКНТР, а також автоматизованих комплексів розв'язування прикладних задач математичного

моделювання критичних явищ у системах напівпровідників з урахуванням термодинамічних властивостей.

**Зв'язок роботи з науковими програмами, темами, планами.** Дисертаційна робота виконувалася у відповідності до пріоритетних напрямків науково-дослідних робіт Одеського національного політехнічного університету та АН України, згідно координаційних планів Міністерства освіти і науки України, зокрема, в рамках наукових досліджень: «Розробка компонентів інформаційних технологій проектування та моделювання складних об'єктів та пристроїв» № 29-52, 2010 — 2014 р. р. (№ держ. реєстрації 0110U008192); «Розробка компонентів інтелектуальних інформаційних систем для моделювання та проектування складних об'єктів та систем» № 101-59, 2015 — 2018 р.р. (№ держ. реєстрації 0115U000835); «Синтез термо-динамічно нестабільних фаз та технології остаточного формування оптико-електричних властивостей гетероструктур для оптоелектронних детекторів спеціального призначення», 2017 — 2019 р.р. (№ держ. реєстрації 0117U000633); «Розробка компонентів інтелектуальних інформаційних систем для моделювання, прогнозування та діагностики складних об'єктів та пристроїв електронної техніки» № 167-59, 2019 — 2022 р.р. (№ держ. реєстрації 0119U000416).

**Мета та задачі дослідження.** Метою дисертаційного дослідження є підвищення точності математичного моделювання критичних явищ у багатокомпонентних системах на основі напівпровідникових сполук II–VI та III–V груп за рахунок створення нових і розвитку існуючих математичних моделей, обчислювальних методів та інструментальних програмних засобів для удосконалення технологічних процесів синтезу БКНТР та прогнозування їх поведінки в процесі експлуатації.

Для досягнення поставленої мети дослідження в дисертаційній роботі необхідно було вирішити наступні задачі:

– виконати аналіз та систематизацію існуючих експериментальних та розрахункових даних, які відповідають критичним явищам у БКНТР (ефекти впорядкування складу, появи просторів співіснування фаз різних порядків), а також існуючих систем математичного моделювання та дати оцінку ефективності і універсальності останніх.

— розробити математичні методи стосовно до вирішення проблем дослідження критичних просторів та просторів співіснування фаз різних порядків у багатокомпонентних напівпровідникових твердих розчинах за наближеннями, в яких враховуються взаємодії між атомами різних координаційних сфер, а також температурні та концентраційні залежності параметрів взаємодії між атомами;

— створити і дослідити обчислювальні методи і алгоритми прогнозування критичних явищ, що враховують особливості напівпровідникових систем на основі сполук II – VI та III – V груп та забезпечують створення ефективних програмних засобів комп'ютерної реалізації запропонованих методів, та виконати оцінку прикладних можливостей створених програмних засобів у відповідності до експериментальних даних прояву критичних явищ у досліджуваних системах;

— розробити математичну модель спінодального розпаду з утворенням концентраційних доменів у трикомпонентних напівпровідникових твердих розчинах зі структурою сфалериту;

— за розробленими математичними методами стосовно до вирішення проблем дослідження просторів співіснування фаз та математичної моделі спінодального розпаду виконати аналіз впливу технологічних режимів синтезу напівпровідникових розчинів на їх термодинамічні властивості.

*Об'єкт досліджень* — процеси математичного моделювання критичних явищ в багатокомпонентних напівпровідникових системах;

*Предмет досліджень* — математичні моделі критичних явищ у багатокомпонентних системах на основі напівпровідникових сполук II – VI та III – V груп і обчислювальні методи їх числової реалізації.

**Методи досліджень.** В дисертаційній роботі використано положення теорій: диференціального топологічного аналізу (для обчислення просторів співіснування фаз); теорії матриць (для обчислення детермінантів багатовимірних матриць); числового аналізу (для розв'язування диференціальних рівнянь другого порядку); обчислювального експерименту (для аналізу відповідності результатів експериментальним даним). Для підтвердження достовірності отриманих результатів застосовано комп'ютерне моделювання з використанням вільного пакету Maxima (<http://maxima.sourceforge.net>).

**Наукова новизна** результатів, які виносяться на захист, полягає у наступному:

*Вперше:*

— розроблено методи математичного моделювання процесів втрати стабільності у багатокомпонентних напівпровідникових системах, які на відміну від існуючих дотепер дозволяють отримувати кількісну інформацію про розташування просторів співіснування фаз різних порядків;

— запропоновано ефективне використання диференціального топологічного підходу для прогнозування критичних явищ у БКНТР, спінодального розпаду та дослідження процесів втрати термодинамічної стабільності різного типу, що дозволило відобразити простори співіснування фаз на перетинах фазових діаграм існування БКНТР;

— розроблено математичну модель спінодального розпаду (ММСР) з утворенням концентраційних доменів в твердих розчинах, що надало змогу обчислити параметри упорядкування та довести факт прояву ефекту модуляції складу як наслідок реалізації резонансного стану в коливальному процесі перетворювань енергії змішування та енергії пружних деформацій.

*Набули подальшого розвитку:*

– теорія математичного моделювання фазових переходів та положень теорії катастроф на випадок  $n$ -вимірною концентраційного простору, що, у порівнянні з існуючими підходами у математичному моделюванні, надало змогу описувати не лише найпростіші фазові стани у БКНТР, а й прогнозувати критичні явища у результаті яких утворюються де кілька співіснуючих фаз;

– модифікація та спеціалізація існуючих обчислювальних методів побудови діаграм існування БКНТР у рамках різних наближень, що додатково

надало змогу проводити порівняльний аналіз відповідності результатів моделювання існуючим експериментальним даним;

– спеціалізація існуючих обчислювальних методів пошуку розв'язок нелінійних диференціальних рівнянь другого порядку з метою підвищення їх ефективності для опису процесів спінодального розпаду у БКНТР.

**Практична цінність роботи** полягає у тому, що запропонована ММСР та метод математичного моделювання просторів співіснування фаз різних порядків дозволяють розширити клас важливих для практики задач дослідження та прогнозування втрати стабільності у БКНТР, а також у створенні комплексу комп'ютерних інструментальних засобів (КІЗ) розв'язування прикладних задач моделювання (зокрема, визначення просторів співіснування фаз різних порядків та прогнозування критичних явищ) в досліджуваних системах. Проведено аналіз перспективи використання різних наближень з метою розвитку та ефективного використання математичних методів стосовно до вирішення проблем дослідження та прогнозування критичних явищ у БКНТР.

Математичне моделювання, яке проводилось в роботі, надало важливі з практичної точки зору результати, оскільки вони пов'язані з труднощами синтезу шарів БКНТР і дозволяють розробити рекомендації щодо процесу їх вирощування в різних умовах, відкривають можливість оцінки виникнення періодичних коливань складу. Запропонована ММСР дозволяє аналізувати процеси формування концентраційних доменів, забезпечуючи при цьому необхідні умови для синтезу БКНТР. Отримані результати надають можливість прогнозувати виникнення в твердих розчинах просторів співіснування фаз різних порядків. При цьому збіг з експериментальними даними знаходиться на рівні, не менш 83%. Застосування комплексу КІЗ забезпечує скорочення часу моделювання за рахунок автоматизації процедур обчислювального процесу.

Результати, отримані в дисертаційній роботі, використано у НДР «Синтез термодинамічна нестабільних фаз та технології остаточного формування оптико-електричних властивостей гетероструктур для оптоелектронних детекторів спеціального призначення», 2017 — 2019 р. р. (№ держ. реєстрації 0117U000633) для прогнозування властивостей оптоелектронних детекторів спеціального призначення та при розробці лекційних курсів (і циклах лабораторних робіт) з дисциплін: «Технологія створення програмних продуктів», «Додаткові розділи числового аналізу», «Теорія алгоритмів», які читаються на кафедрі кібербезпеки та програмного забезпечення ОНПУ.

**Особистий внесок здобувача.** Всі наукові положення, висновки та рекомендації, які містяться у дисертаційній роботі та виносяться на захист, отримано здобувачем особисто і узагальнено при оформленні дисертації. В роботах, написаних у співавторстві [1–7], автору належать вибір наукового напрямку, постановка задач та способи їх розв'язування, теоретичне обґрунтування методології та інтерпретація результатів досліджень. Зокрема, автору належать:

— в [1] — Розробка методу математичного моделювання критичних явищ у системі *In-Ga-As-P*;

— в [2] — Розвиток та ефективне використання математичних методів стосовно до вирішення проблем дослідження та обчислення просторів співіснування фаз порядку II у системах напівпровідників III–V груп;

— в [3] — Розробка теорії математичного моделювання процесу формування просторів співіснування фаз різних порядків у БКНТР для складання ефективних математичних описів втрати стабільності;

— в [4] — Розвиток та ефективне використання математичних методів стосовно до вирішення проблем дослідження критичних явищ у чотирьохкомпонентних системах напівпровідникових сполук III – V груп в рамках наближення з врахуванням взаємодії між частинами системи, що знаходяться у першій та другій координаційних сферах, а також з враховуються взаємодії між частинами системи першої, другої і третьої координаційних сфер та КІЗ реалізації розроблених методів обчислювальної математики, а також проведення порівняльного аналізу ефективності врахування різних наближень;

— в [5] — Розвиток методів обчислювальної математики стосовно до вирішення проблем дослідження критичних явищ у чотирьохкомпонентній системі Hg-Mn-Te-Se та створення і дослідження нових алгоритмів для обчислення просторів співіснування фаз різних порядків;

— в [6] — Розробка методу математичного моделювання процесу формування критичних явищ у твердих розчинах напівпровідників на основі сполук  $A^2B^6$  та розробка КІЗ прогнозування втрати стабільності у БКНТР сполук II – VI груп періодичної системи;

— в [7] — Розвиток теорії математичного моделювання критичних явищ та розробка ММСР у трьохкомпонентних НТР на основі сполук  $A^3B^5$

Роботи [1 – 5] опубліковано у виданнях, що індексуються у міжнародних наукометричних базах даних, зокрема: Index Copernicus International, Electronic Journals Library, Google Scholar. Роботи [6, 7] опубліковано у зарубіжних виданнях, що індексуються у базі даних SCOPUS.

**Апробація результатів дисертаційної роботи.** Основні положення та результати дисертаційної роботи доповідалися на наукових семінарах кафедри інформаційних технологій проектування в електроніці та телекомунікаціях ОНПУ 2014 — 2020 р. р.; на XIII – XX Міжнародних науково-практичних конференціях «Современные информационные и электронные технологии» (СИЭТ – 2011, СИЭТ – 2012, СИЭТ – 2013, СИЭТ – 2014, СИЭТ – 2015, СИЭТ – 2016, СИЭТ – 2017, СИЭТ – 2018, СИЭТ – 2019, Одеса: ОНПУ, 2011 – 2019 р.р.); на Одинадцятій МНПК “Математичне та імітаційне моделювання систем. (МОДС, Жукин – Київ, 2016р.), на V (2005р), VI (2006р), XIV (2014р), XVI – XVIII (2016 – 2018 р.р.) Міжнародних наукових конференціях «The Odessa International Astronomical Gamow Con.», Odessa, Ukraine.

**Публікації.** Основні наукові результати дисертаційної роботи викладено в 16 наукових роботах, в тому числі: 7 статтях, з яких 5 опубліковано у виданнях, включених до Переліку фахових видань України (всі видання індексуються у міжнародних науко метричних базах даних, зокрема: *Index Copernicus International*, *Ulrich's Periodicals Directory*, *Electronic Journals*

*Library, Google Scholar*) та 2 — у зарубіжному виданні, що індексується у базі даних *SCOPUS*, а також 11 тезах міжнародних наукових конференцій.

**Структура та обсяг дисертації.** Дисертаційна робота складається зі вступу, чотирьох розділів, загальних висновків, списку використаної літератури зі 135 найменувань (на 17 сторінках), 2 додатки (на 11 сторінках), 43 рисунків та 6 таблиць. Загальний обсяг дисертаційної роботи складає 169 сторінок, в тому числі 152 сторінки основного тексту.

## **ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ**

**Вступ** містить загальну характеристику дисертаційної роботи; обґрунтування актуальності теми дослідження; мету і задачі дослідження; відомості про зв'язок обраного напрямку досліджень з планами наукових досліджень та пріоритетних напрямків науково-дослідних робіт ОНПУ та АН України. Визначено об'єкт та предмет дослідження, а також наукову новизну і практичну цінність отриманих результатів; зазначено особистий внесок здобувача у роботах, виконаних у співавторстві; наведено відомості щодо апробації результатів дисертаційної роботи та вказано основні положення, які виносяться на захист.

**У першому розділі «Стан проблеми комп'ютерних методів математичного моделювання критичних явищ у багатокомпонентних твердих розчинах»** наведено загальну характеристику процесів, які спричиняють виникнення критичних явищ у БКНТР і особливості їх перебігу. Проведено аналіз стану проблеми математичного моделювання та відповідних критичних явищ у БКНТР. Розглянуто математичні моделі, які використовуються у сучасних дослідженнях критичних явищ у БКНТР. Показано що, не дивлячись на значні досягнення в аналізі вказаних явищ, на даний час відсутні роботи з розробки математичних методів прогнозування просторів співіснування фаз різних порядків у БКНТР сполук  $A^2B^6$  та  $A^3B^5$ . Таке становище пов'язано, по перш за все, зі складністю математичного та термодинамічного забезпечення задач, які потрібно вирішувати під час математичного моделювання. В той же час аналізом умов проведення сучасних технологічних процесів синтезу надтонких шарів БКНТР, доведено, що термодинамічний стан твердої фази для основного набору БКНТР, які мають практичне значення для сучасної оптоелектроніки, є перенасиченим і, принаймні, близьким до стану спінодального розкладання.

Відомі на цей час моделі втрати стабільності у БКНТР не враховують можливості появи декількох одночасно співіснуючих фаз, тому недостатньо ефективні і не є універсальними, що зумовлено дією комплексу протиріч:

— при значному зростанні за останній час можливостей сучасних інструментальних засобів, зниженням їх вартості, розповсюдженням вільного програмного забезпечення та розширенням його сфер застосування в математиці, значною кількістю теоретичних напрацювань в області математичного моделювання в рамках термодинамічного підходу спостерігається відсутність розвитку математичного апарату аналізу



детермінантів багатомірних матриць, який є вкрай потрібним для аналізу вищих похідних багатокomпонентних функцій;

— при існуючому програмному забезпеченні розв'язання задач комп'ютерної алгебри, яке дозволяє отримувати аналітичні вирази повних похідних багатовимірних функцій, відсутні засоби аналітичного підходу до розв'язання нелінійних диференціальних рівнянь;

— при наявності моделей, які описують термодинамічні стани твердих розчинів, спостерігається неможливість використання цих моделей як первинних у процесі поліпшення існуючих систем моделювання та адаптації їх щодо прогнозування критичних явищ;

— при існуючій кількості експериментальних даних щодо визначення властивостей твердих розчинів має місце обмеженість даних щодо параметрів взаємодії між атомами другої та третьої координаційних сфер, а то й до взаємодії між атомами першої координаційної сфери як частин системи, що моделює ґратку Бете напівпровідникових твердих розчинів;

— при зростаючих потребах сучасної мікро- та наноелектроніки у розширенні кола прикладних задач, що розв'язуються, спостерігається обмеження можливостей у виборі ефективних моделей у конкретних випадках аналізу стабільності тієї чи іншої напівпровідникової системи.

Розширення можливостей сучасного обладнання для дослідження структури напівпровідникових систем надало змогу спостереження та вивчення процесів формування співіснуючих фаз у БКНТР, що зумовило інтерес до їх математичної формалізації. За аналізом існуючих математичних методів було виявлено, що диференціальний топологічний підхід, який базується на аналізі детермінантів матриць похідних багатомірних функцій, дозволяє розробити математичні методи, що надають змогу обчислити положення нульових контурів детермінантів у просторі концентрацій компонентів за температурними та іншими перетинами, а це, в свою чергу, забезпечує високий рівень адекватності характеру фізичних явищ, які спостерігаються: наявність просторів, що відповідають стабільності системи та її втрати; границь фазової рівноваги; просторів співіснування фаз різних порядків; появи за де якими умовами метастабільних станів; наявність просторів існування НТР та просторів, де вони не існують; виникнення ефекту впорядкування складу.

Розв'язування задач математичного моделювання процесів, що призводять до критичних явищ у БКНТР, пов'язано з низкою принципівих складностей як постановочного, так і обчислювального характеру. В цьому сенсі слід відзначити насамперед: обмежену кількість експериментальних даних щодо виникнення багатомірних фаз, нестационарний та нелінійний характер досліджуваних функцій, що моделюють вираз для вільної енергії системи; складність топології багатовимірних концентраційних просторів моделювання; обмеженість даних для визначення енергетичних параметрів взаємодії між частинами системи; громіздкість виразів похідних вищих порядків  $i$ , як наслідок, складність аналізу блочних матриць компонентів частинних похідних. Якісне розв'язування задач математичного моделювання процесів дослідження та прогнозування критичних явищ у БКНТР, з

урахуванням вищезазначених проблем, можливо лише на основі використання сучасних підходів математичного моделювання, та розробки нових математичних методів, які дозволяють розв'язувати задачі прогнозування поведінки багатокомпонентних систем.

Відомо широке коло фундаментальних теоретичних робіт та практичних досліджень вітчизняних і зарубіжних вчених, присвячених дослідженням критичних явищ у системах напівпровідників (наприклад, роботи: І. Пригожина, А. Г. Хачатуряна, Г.Ф. Вороніна, К. Onabe, D. De Fontaine, Р. Ненос, Cann J.W., Hillard J.E. та інших), а також використання моделей складних фізичних явищ, які можуть спричинити втрату стабільності систем напівпровідникових сполук (зокрема, роботи Л. Д. Ландау, Р. Тома, С. Курдюмова, І. Фішера, К. Okada, А. К. Singh, А. Laugier, К. Karkkainen). Однак залишаються не дослідженими питання теорії математичного моделювання для складання ефективних математичних описів критичних явищ у БКНТР, розробки та ефективного використання методів обчислювальної математики стосовно до вирішення проблем математичного моделювання просторів співіснування декількох фаз у БКНТР, побудови моделі спінодального розпаду, а також створення нових алгоритмів і КІЗ, що дозволяють прогнозувати критичні явища у БКНТР.

Така ситуація обумовлює актуальність розробки теорії математичного моделювання для прогнозування критичних явищ у БКНТР, які дозволяють обчислювати розташування просторів співіснування фаз різних порядків на діаграмах стану НТР та моделювати процеси впорядкування складу.

**У другому розділі «Моделювання критичних явищ у твердих розчинах на основі напівпровідникових сполук II – VI та III – V груп»** на основі методів сучасної термодинаміки фаз змінного складу було розроблено ММСР та метод математичного моделювання критичних явищ у БКНТР. Адаптація положень теорії катастроф та теорії фазових переходів на випадок  $n$ -вимірного концентраційного простору, дозволило отримати умови існування критичних просторів другого, третього та четвертого порядків. Області стабільної фази відповідають умовам:

$$\frac{dF}{dX} = 0; \quad \frac{d^2F}{dX^2} > 0, \quad (1)$$

а області нестабільності першого порядку, або біфуркаційні простори, відповідно, умовам:

$$\frac{dF}{dX} = \frac{d^2F}{dX^2} = 0; \quad \frac{d^3F}{dX^3} > 0. \quad (2)$$

Умова існування критичного простору другого порядку:

$$\frac{dF}{dX} = \frac{d^2F}{dX^2} = \frac{d^3F}{dX^3} = 0; \quad \frac{d^4F}{dX^4} > 0. \quad (3)$$

Умова існування критичного простору третього порядку:

$$\frac{dF}{dX} = \frac{d^2F}{dX^2} = \dots = \frac{d^5F}{dX^5} = 0; \quad \frac{d^6F}{dX^6} > 0. \quad (4)$$

Умова існування критичного простору четвертого порядку:

$$\frac{dF}{dX} = \frac{d^2F}{dX^2} = \dots = \frac{d^7F}{dX^7} = 0; \quad \frac{d^8F}{dX^8} > 0. \quad (5)$$

В умовах (1 – 5)  $F$  – функція, що моделює вільну енергію Гіббса досліджуваної системи,  $X$  – концентрації відповідних компонентів БКНТР. Запропоновано моделювання виразу вільної енергії як функції концентрацій бінарних компонентів  $X_{AC}$  та  $X_{BC}$ , при цьому:

$$X_{AC} + X_{BC} = 1 \quad (6)$$

Для моделювання просторів співіснування фаз у чотирьохкомпонентних НТР типу  $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$ , на перерізі існування твердих розчинів діаграми стану було запропоновано вирази для концентрацій бінарних компонентів записати через концентраційні параметри  $x$  та  $y$  ( $0 < x < 1$ ,  $0 < y < 1$ ) за співвідношеннями:

$$X_{AC} = (1-x)(1-y), \quad X_{AD} = (1-x)y, \quad X_{BC} = x(1-y), \quad X_{BD} = xy. \quad (7)$$

Результати математичного моделювання критичних просторів за (1) – (7) наведено у четвертому розділі. Обчислені критичні простори діаграм стану НТР надали змогу виявити умови виникнення ефекту впорядкування складу. З метою отримання ММСР у БКНТР з виникненням впорядкування складу було спільно розглянуто надлишкову енергію змішування компонентів і енергії пружно напружених виділень нової фази, що дозволило отримати адаптовану до напівпровідників зі структурою сфалериту, форму стаціонарного рівняння Канна-Хіллларда, для концентраційних полів компонентів матеріалу:

$$\beta \frac{d^2X}{dz^2} = \left\{ \alpha^S X \cdot (1-X) + RT[X \ln X + (1-X) \ln(1-X)] + \frac{1}{4} \lambda_{ijk} \cdot N_0 a(a-a_s)^2 \right\} - \mu, \quad (8)$$

де  $\beta$ ,  $X$  – коефіцієнт при градієнті концентрації в степеневому розкладі вільної енергії змішування твердої фази і концентрація компонента  $A$  в твердому розчині  $A_xB_{1-x}C$ ;  $a, a_s$  – поточний і середній період кристалічної ґратки шару (період ґратки вихідної матриці твердого розчину, період ґратки стабілізуючої підкладки);  $z$  – координата в напрямку зростання шару.

Для отримання математичної моделі було сформульовано співвідношення для середньої концентрації компонента в твердому розчині:

$$\bar{X} = \frac{1}{L} \int_0^L X(z) dz, \quad (9)$$

де  $L$  – період коливань складу. Граничні умови задачі визначаються величиною початкової концентрації компонента і величиною її похідної в точці  $z = 0$ :

$$X_{noc} = X|_{z=0} = X_0 = const, \quad \frac{dX}{dz}|_{z=0} = 0. \quad (10)$$

Диференційні рівняння та нерівності (1)–(5), граничні умови (6)–(7), диференціальне рівняння (8) з початковими умовами (10) і умовою збереження речовини (9) утворюють ММСР і фізично являє собою рівноважну термодинамічну модель, за якою було обчислено простори співіснування фаз різних порядків і проведено моделювання упорядкування складу у БКНТР.

Вираз вільної енергії досліджуваних систем було представлено у вигляді:

$$F = \sum_{i=1}^n F_i + F^{id} + \Delta F^{ex}, \quad (11)$$

де  $F_i$  - вільна енергія чистих бінарних компонентів;  $F^{id}$  - вільна енергія ідеальної суміші без урахування взаємодії компонентів;  $\Delta F^{ex}$  - відхилення вільної енергії від енергії ідеального розчину,  $n$  - кількість компонентів.

Моделювання вільної енергії (11) було здійснено у рамках регулярного, пострегулярного та квазірегулярного розчину. Були використані наближення, в яких параметр взаємодії не залежав від концентрацій компонентів БКНТР, а розглядався тільки як функція температури (модель квазірегулярного розчину), так і з врахуванням концентраційної залежності параметра взаємодії (модель субрегулярного розчину). Моделювання у рамках квазірегулярного розчину здійснювалось з урахуванням взаємодії між атомами перших трьох координаційних сфер. Повна потенціальна енергія  $E$  представлялась як сума енергій, обумовлених взаємодією кожної конфігурацій:  $E = E^1 + E^2 + E^3$ , де  $E^1, E^2, E^3$  - вклади, обумовлені взаємодіями між атомами першої, другої і третьої координаційних сфер, відповідно. Підходи до обчислень  $E^1, E^2$  та  $E^3$  викладено у третьому розділі роботи.

За умовами (1) - (5) запропоновано математичний метод і алгоритм обчислення положень просторів співіснування фаз у БКНТР, який розпочинається з аналізу існування стійкої фази (1), та знаходяться компоненти матриці першої та другої повної похідної вільної енергії системи по концентраціям відповідних компонентів. Далі, визначається простір нестабільності (2), для чого на випадок трьохкомпонентних систем формується матриця повної третьої похідної вільної енергії системи  $F_{ij1} = \begin{pmatrix} F_{111} & F_{121} \\ F_{211} & F_{221} \end{pmatrix}$ ,

$F_{ij2} = \begin{pmatrix} F_{112} & F_{122} \\ F_{212} & F_{222} \end{pmatrix}$ , та знаходиться її детермінант  $DetF_{ijk} = DetF_{ij1} + DetF_{ij2}$ . Для

чотирьохкомпонентних розчинів формується блочно-діагональна матриця повної третьої похідної вільної енергії по концентраціям відповідних компонентів, тобто елементами матриці третьої похідної вважаються матриці з компонентів похідних по відповідним концентраціям від елементів матриць другої похідної, які були отримані на крок раніше:

$$A_3 = \begin{pmatrix} \frac{dA_2}{dX_{AC}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{dA_2}{dX_{AD}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{dA_2}{dX_{BC}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{dA_2}{dX_{BD}} \end{pmatrix} \quad (13)$$

Детермінант отриманої матриці обчислюється як сума внесків детермінантів матриці частинних похідних, що перебувають на головній діагоналі:

$$DetA_3 = Det \frac{dA_2}{dX_{AC}} + Det \frac{dA_2}{dX_{AD}} + Det \frac{dA_2}{dX_{BC}} + Det \frac{dA_2}{dX_{BD}}, \quad (14)$$

а потім, на перетині існування БКНТР діаграми стану системи, відображаються простори з додатними та від'ємними значеннями детермінанту матриці третьої похідної вільної енергії, його нульовий контур та області з нульовими значенням першої та другої похідної. Отримані результати використовуються для перевірки умови (3) існування критичного простору другого порядку. Перевірка умов існування критичних просторів третього та четвертого порядків проводяться аналогічно, але за умовами (4) та (5), відповідно.

**У третьому розділі «Моделювання ефекту модуляції складу при спінодальному розпаді трьохкомпонентних твердих розчинів напівпровідникових сполук»** за ММСП проведено дослідження ефекту модуляції складу при спінодальному розпаді трьохкомпонентних твердих розчинів  $Ga_xIn_{1-x}P$ . Отримані модельні уявлення застосовані до опису ефекту автомодуляції складу твердих розчинів  $Ga_xIn_{1-x}P$ , які сформовано в умовах когерентного сполучення з підкладкою  $GaAs$  (111) при температурах, що відповідають областям метастабільного стану матеріалу.

Область вхідних параметрів для інтегрування рівняння (8) було отримано у результаті моделювання просторів співіснування фаз за умовами (1) – (5) та у відповідності до експериментальних даних щодо спостереження ефекту модуляції складу у твердому розчині  $Ga_xIn_{1-x}P$ .

За результатами математичного моделювання фазової взаємодії було отримано кількісну інформацію про розподіл складу БКНТР  $Ga_xIn_{1-x}P$  після їх спінодального розпаду. Показано, що ефект автоколивань складу твердої фази особливо чітко проявляється для складів з  $x > 0.5$  мол. дол. за температурами, близькими до температур спінодального розпаду. Типова картина розподілу

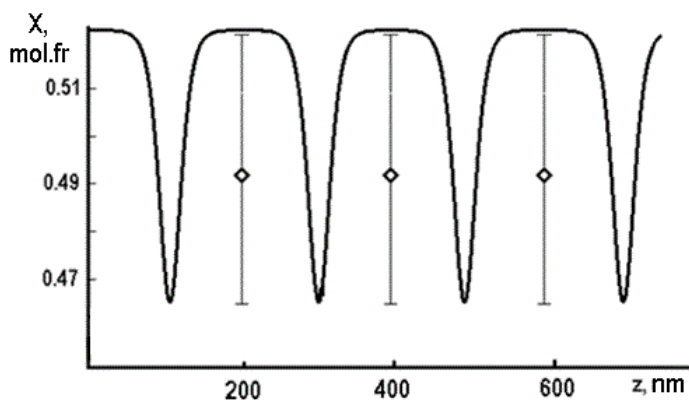


Рисунок 1. Розподіл складу по шару твердого розчину  $Ga_xIn_{1-x}P$  (111), синтезованого при  $T=993$  К і середнім складом  $\bar{x} = 0.5152$  мол. дол. на підкладці  $GaAs$ .  $\diamond$  – експериментальні дані за амплітудою коливань.

складу в гетероструктурі  $Ga_xIn_{1-x}P-GaAs$  в умовах спінодального розпаду за координатою вздовж плівки представлена на рис.1.

З рисунку видно періодичну структуру розподілу складу в напрямку зростання шару. При цьому концентраційні профілі компонентів істотно відрізняється від форми, відповідної гармонічним коливанням. Це стало безпосереднім наслідком складної залежності параметрів диференціального рівняння від складу матеріалу, та прояву резонансного

коливального стану взаємообміну між енергією розпаду нестабільної фази та

енергію вихідних пружних включень. Саме резонансний стан, що спостерігається поблизу бінодалей та спінодалей розпаду матеріалу, відповідає за значне зростання амплітуди коливань та прояв складної залежності параметрів рівняння від складу твердого розчину (істотна нелінійність диференційного рівняння). На рис.1 спостерігається відповідність результатів моделювання ефекту модуляції складу БКНТР наявним експериментальним даним.

Розроблена ММСР дозволила провести аналіз впливу умов синтезу БКНТР на параметри коливань складу, коли синтез матеріалу здійснюється в умовах близьких до меж стабільності матеріалу.

**У четвертому розділі «Комп'ютерні засоби та практика їх застосування при розв'язуванні задач прогнозування критичних явищ у багатокомпонентних системах на основі напівпровідникових сполук II – VI та III – V груп»** на основі алгоритму обчислення просторів співіснування фаз розроблено КІЗ для моделювання та прогнозування критичних явищ у БКНТР на основі сполук II – VI та III – V груп. За КІЗ, на прикладних задачах показано застосування запропонованого алгоритму для обчислення положень критичних просторів. Описано процес розробки КІЗ, обґрунтовано вибір засобів розробки, надано структурну організацію КІЗ, та наведені результати прогнозного моделювання процесів появи критичних явищ у БКНТР.

КІЗ являють собою користувацький додаток, розроблений на платформі вільного пакету Махіма і дозволяють формалізувати задачу моделювання та прогнозування критичних явищ у БКНТР. Вибір пакету Махіма обумовлено тим, що він є вільним та містить зручні та потужні об'єкти для обчислення аналітичних виразів похідних, детермінантів матриць, та графічні засоби.

Вхідні данні формуються відповідно (6) (7) за температурами, в яких проводиться дослідження конкретного БКНТР, температура та значення параметрів взаємодії є вхідними параметрами.

За проведеними обчисленнями віднайдено області співіснування фаз різних порядків на перетині існування БКНТР діаграми стану таких систем, як *Zn-Cd-Te*, *Ga-In-P*, *In-Ga-As-P*, *In-Ga-Sb-As*, *Cd-Hg-Te-Se*, *Hg-Mn-Te-Se*.

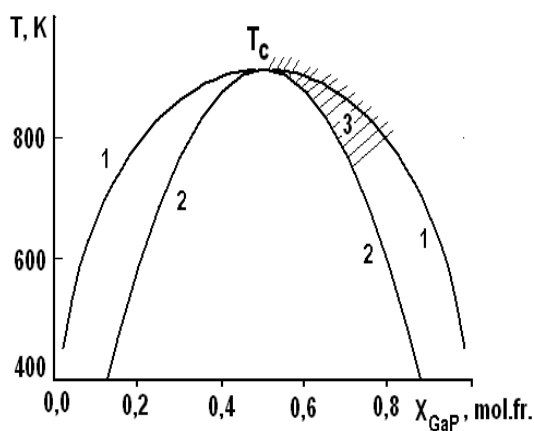


Рисунок 2. Квазібінарний розріз діаграми стану системи Ga-In-P. 1 – межа метастабільної області (бінодаль); 2 – спінодаль; 3 область прогнозованої модуляції складу.

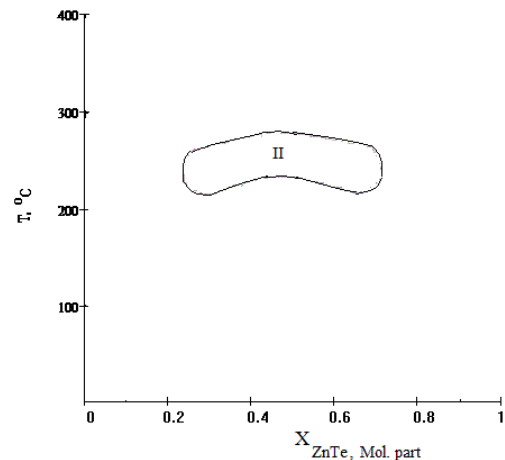


Рисунок 3. Розрахункові області співіснування фаз другого порядку для твердих розчинів системи *Zn-Cd-Te*.

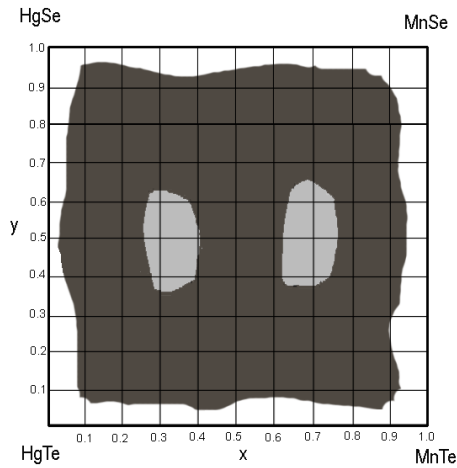


Рисунок 4. Ізотермічний переріз ( $T=800$  К) простору співіснування фаз порядку два діаграми стану системи *Hg-Mn-Te-Se*.

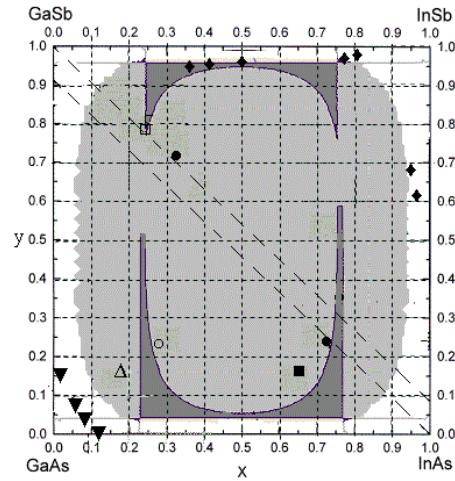


Рисунок 5. Ізотермічний переріз ( $T=773$  К) простору співіснування фаз порядку два діаграми стану системи *In-Ga-Sb-As*.

На рис. 2 – 5 (для прикладу) наведено положення обчислених областей виконання умов формування просторів співіснування фаз порядку два в системах *Zn-Cd-Te*, *Ga-In-P*, *In-Ga-Sb-As* та *Hg-Mn-Te-Se*. На рис. 5 наведено експериментальні дані щодо областей, в яких спостерігалось впорядкування складу та лінії ізоперіодичного змішування з підкладками GaSb та InAs.

В роботі виконано математичне моделювання критичних явищ у БКНТР для різних модельних наближень. Особливу увагу приділено:

- аналізу процесів виникнення критичних явищ у трьохкомпонентних системах, зокрема для систем *Zn-Cd-Te* та *Ga-In-P* у наближенні з врахуванням температурної залежності параметру взаємодії між атомами;

- критичним явищам у чотирьохкомпонентних системах на основі сполук  $A^2B^6$  та  $A^3B^5$ , зокрема, для  $In_xGa_{1-x}As_yP_{1-y}$  за температурами 773К-1023К (за моделями регулярного, пострегулярного та субрегулярного розчину);

- аналізу умов виникнення просторів співіснування фаз у твердому розчині  $In_xGa_{1-x}Sb_yAs_{1-y}$  за діапазоном температур 773-1023К у рамках моделі регулярного розчину;

- прогнозуванню критичних явищ у твердому розчині  $Cd_{1-x}Hg_xTe_{1-y}Se_y$  за температурою 473К у рамках моделі регулярного розчину та у чотирьохкомпонентному твердому розчині  $Hg_{1-x}Mn_xTe_{1-y}Se_y$  за діапазоном температур 800-1000К у рамках моделі регулярного розчину.

Результати обчислень за розробленими КІЗ узгоджуються з існуючими експериментальними даними щодо спостерігання процесів виникнення декількох співіснуючих фаз у БКНТР на основі сполук II – VI та III – V груп періодичної системи.

Проведено порівняльний аналіз отриманих в роботі результатів обчислень положень просторів співіснування фаз різних порядків на фазових діаграмах за різними наближеннями. Так, на діаграмі стану (рис. 6 та рис. 7) показано перерізи існування БКНТР в системі *In – Ga – As – P*. Наведено (для прикладу) результати обчислень областей, в яких виконуються умови співіснування фаз порядку два за наближеннями регулярного, та пострегулярного розчину:

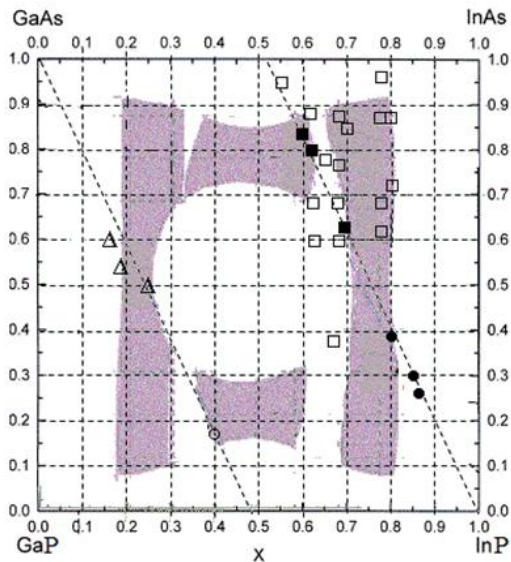


Рисунок 6. Переріз існування твердого розчину системи  $In-Ga-As-P$  ( $T=773K$ ). Показано області виконання умов формування просторів співіснування фаз порядку два в рамках регулярного розчину.

Результати обчислення в співставленні з наявними експериментальними даними свідчать про те, що врахування енергії взаємодії між атомами координаційних сфер вищих порядків забезпечують істотне підвищення точності обчислень, яка може зростати на 26%.

У додатках містяться інструкції по роботі з КІЗ та вигляд діалогових вікон, які відповідають режимам їх роботи.

## ВИСНОВКИ

В дисертаційній роботі розв'язано важливу науково-практичну задачу, яка полягає у підвищенні точності математичного моделювання критичних явищ у БКНТР на основі сполук II–VI та III–V груп за рахунок створення нових і розвитку існуючих математичних моделей спінодального розпаду, обчислювальних методів та інструментальних програмних засобів для удосконалення технологічних процесів синтезу БКНТР та прогнозування їх поведінки в процесі експлуатації.

В тому числі отримано наступні теоретичні та практичні результати:

1. Виконано аналіз та систематизацію існуючих експериментальних та теоретичних даних щодо ефектів упорядкування складу у БКНТР та виникнення просторів співіснування фаз різних порядків. Показано, що існуючі математичні моделі не надають можливість прогнозувати утворення просторів співіснування фаз різних порядків. Результати аналізу засвідчили актуальність і необхідність розробки обчислювальних методів щодо прогнозування критичних явищ у напівпровідникових сполуках II–VI та III–V груп.

2. Дослідження стану проблематики комп'ютерних методів математичного моделювання критичних явищ у БКНТР виявило відсутність відповідних КІЗ та їх модельної підтримки. Сформульовано та обґрунтовано вимоги до КІЗ, що забезпечують проведення всебічного якісного і кількісного прогнозу критичних явищ та просторів співіснування фаз у БКНТР.

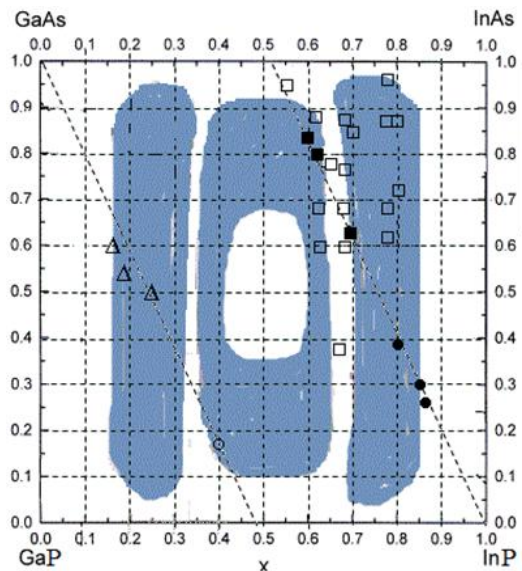


Рисунок 7. Переріз існування твердого розчину системи  $In-Ga-As-P$  ( $T=773K$ ). Показані області виконання умов формування просторів співіснування фаз порядку два в рамках пострегулярного розчину.



3. Спираючись на положення теорії катастроф та теорії фазових переходів на випадок  $n$ -вимірному концентраційного простору з використанням диференціального топологічного підходу розроблено математичні методи дослідження та прогнозування виникнення критичних просторів та просторів співіснування фаз у БКНТР II – VI груп та III – V груп періодичної системи.

4. Завдяки адаптації рівняння Кана-Хіллларда для опису процесів утворення концентраційних доменів при спінодальному розкладанні БКНТР, побудовано ММСР ефекту впорядкування складів у БКНТР III – V груп.

5. Розроблено метод математичного моделювання для оцінки розташування просторів співіснування фаз різних порядків на фазових діаграмах, який орієнтовано на застосування наближень регулярного, субрегулярного та пострегулярного розчинів.

6. Отримано кількісну оцінку щодо розподілу складу твердого розчину  $Ga_xIn_{1-x}P$  після його спінодального розпаду. Показано, що ефект автоколивань складу твердої фази в системах розглянутого виду може особливо чітко проявлятися для складів з  $x > 0.5$  мол. дол. при температурах близьких до температур спінодального розпаду.

7. У рамках розроблених математичних методів, ММСР та КІЗ проведено моделювання критичних явищ у твердих розчинах  $Ga_xIn_{1-x}P$ ,  $GaAs_xSb_{1-x}$ ,  $AlAs_ySb_{1-y}$ ,  $Zn_xCd_{1-x}Te$ ,  $Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$ ,  $In_xGa_{1-x}As_yP_{1-y}$ ,  $In_xGa_{1-x}Sb_yAs_{1-y}$ ,  $Cd_xHg_{1-x}Te_ySe_{1-y}$ ,  $Hg_{1-x}Mn_xTe_{1-y}Se_y$ . У твердому розчині  $In_xGa_{1-x}As_yP_{1-y}$  віднайдено чотири області виконання умов формування просторів співіснування фаз порядку два за температурою 773 К, які відповідають існуючим експериментальним даним (збіг з експериментальними даними на рівні 69% за моделлю, в якій враховуються взаємодії між атомами з першої до другої координаційних сфер, та на рівні 89% за умовою врахування взаємодії у третій координаційній сфері). Для твердих розчинів  $In_xGa_{1-x}Sb_yAs_{1-y}$  обчислено розташування двох просторів співіснування фаз порядку за температурою 773К (збіг з експериментальними даними на рівні 83%). Прогнозне моделювання критичних явищ в твердих розчинах  $Cd_xHg_{1-x}Te_ySe_{1-y}$  та  $Hg_{1-x}Mn_xTe_{1-y}Se_y$  виявило можливість існування просторів співіснування фаз порядку три і чотири за температурою 473 К та 800 К. Час моделювання на ПЕОМ середньої потужності (2,8 МГц, 2,0 ГБ) за обчисленням просторів співіснування фаз до четвертого порядку включно в рамках моделі, в якій враховуються взаємодії між атомами у перших двох координаційних сферах, не перевищує 5 хвилин. Врахування в моделі взаємодії між атомами перших трьох координаційних сфер збільшує відсоток збігу з експериментальними даними, але час моделювання, у зв'язку з ускладненням моделі, зростає удвічі.

Отримані данні дозволяють розробити рекомендації щодо процесу вирощування шарів БКНТР в різних умовах. Результати математичного моделювання критичних явищ в рамках розглянутої ММСР відкривають можливість оцінки періодичних коливань складу у БКНТР.

Показано, що розроблений математичний метод прогнозування критичних явищ дає змогу проводити досить коректну оцінку розташувань просторів співіснування фаз різних порядків на фазових діаграмах.

Математичні методи моделювання критичних явищ у БКНТР, що розроблено в роботі, дозволяють обчислити області, в яких найбільш вірогідно утворення модульованих структур. Результати обчислення значно зменшують область інтегрування диференціальних рівнянь, які використовуються для опису процесу утворення концентраційних доменів при спінодальному розпаді.

### **СПИСОК ПРАЦЬ, ЩО НАДРУКОВАНО АВТОРОМ ПО ТЕМІ ДИСЕРТАЦІЇ З ОСОБИСТИМ ВКЛАДОМ**

Основні наукові результати дисертаційної роботи викладено в 18 наукових роботах, в тому числі: 7 статтях, з яких 5 опубліковано у виданнях, включених до Переліку фахових видань України (всі видання індексуються у міжнародних науко метричних базах даних, зокрема: *Index Copernicus International*, *Ulrich's Periodicals Directory*, *Electronic Journals Library*, *Google Scholar*) та 2 — у зарубіжному виданні, що індексується у базі даних *SCOPUS*, а також 11 тезах наукових конференцій.

#### ***Статті, які надруковано у фахових виданнях України:***

1. Казаков, А.І. Комп'ютерне моделювання критичних просторів співіснування на фазових діаграмах багатокомпонентних твердих розчинів. [Текст] / Казаков А.І., Кваташидзе Л.Т., Шаповалов Г.В. // Інформатика та математичні методи в моделюванні. — 2014. — Т. 4, № 4. — С. 349 — 355.

2. Казаков, А.І. Розрахунок областей співіснування фаз в системі  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}_y\text{As}_{1-y}$ . [Текст] / Казаков А.І., Кваташидзе Л.Т., Шаповалов Г.В. // Інформатика та математичні методи в моделюванні. — 2015. — Т. 5, № 3. — С. 226 — 233.

3. Казаков, А.І. Математическое моделирование критических явлений в функциональных материалах микроэлектроники. [Текст] / Казаков А.І., Шаповалов Г.В. // Збірник наукових праць Військового інституту Київського національного університету, 2016. — № 52. — С. 32 — 39.

4. Казаков, А.І. Моделирование областей сосуществования фаз в твердых растворах  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$  с использованием различных термодинамических моделей. [Текст] / Казаков А.І., Шаповалов Г.В. // Технічні науки та технології — 2016. — Т. 5, № 3. — С. 96 — 103.

5. Kazakov, A. Calculation of the phases coexistence spaces in the system Hg-Mn-Te-Se / A. Kazakov, D. Burtnyi, G. Shapovalov // Proceedings of Odessa Polytechnic University. — 2018. — Т. 54, № 1. — С. 69 — 73.

#### ***Статті, які надруковано у зарубіжних виданнях:***

6. Kazakov, A.I. Computer simulation for formation of critical spaces in II–VI solid solutions [Текст] / A.I.Kazakov, G.V.Shapovalov, P.P.Moskvin // Journal of Crystal Growth. — 2019. — V. 506 — P. 201 — 205.

7. Moskvin, P. P. Spinodal decomposition and composition modulation effect at the lowtemperature synthesis of  $A_x^3B_{1-x}^3C_x^5$  semiconductor solid solutions. [Текст] / P. P. Moskvin, S. I. Skurativskiy, O. P. Kravchenko, G. V. Skyba, H. V. Shapovalov // Journal of Crystal Growth. — 2019. — V. 510 — P. 40 — 46.

#### ***Надруковані праці апробаційного характеру:***

8. Казаков, А. И. Моделирование спинодального упорядочения в нестабильных четырехкомпонентных твердых растворах типа  $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$  [Текст] / А. И. Казаков, Г. В. Шаповалов, Ю. В. Молчанова // Праці XII Міжнародної науково-практичної конференції «Современные информационные и электронные технологии 2011» (СИЭТ-2011, 23 — 27 травня 2011 р.): Тези доповідей. — Одеса, Политехперіодика, 2011. — С. 281.

9. Казаков, А. И. Прогнозирование свойств многокомпонентных систем для моделирования критических явлений в функциональных материалах микроэлектроники [Текст] / А. И. Казаков, Л. Т. Кваташидзе, Г. В. Шаповалов // Праці XIII Міжнародної науково-практичної конференції «Современные информационные и электронные технологии 2012» (СИЭТ-2012, 4 — 8 червня 2012 р.): Тези доповідей. — Одеса, Политехперіодика, 2012. — С. 270.

10. Шаповалов, Г.В. Разработка программного комплекса для исследования оптимального расположения элементов электронной техники в трехмерном пространстве [Текст] / Г. В. Шаповалов. // Праці XIV Міжнародної науково-практичної конференції «Современные информационные и электронные технологии 2013» (СИЭТ-2013, 27 — 31 травня 2013 р.): Тези доповідей. — Одеса, Политехперіодика, 2013. — С. 165 – 166.

11. Казаков А.И. Компьютерное моделирование формирования пространств сосуществования фаз в четверных полупроводниковых твердых растворах [Текст] / А. И. Казаков, О. А. Краева, Г. В. Шаповалов // Праці XIV Міжнародної науково-практичної конференції «Современные информационные и электронные технологии 2014» (СИЭТ-2014, 26 — 30 травня 2014 р.): Тези доповідей. — Одеса, Политехперіодика, 2014. — С. 117 – 118.

12. Казаков А.И. Термодинамический анализ областей сосуществования фаз в четырехкомпонентных твердых растворах типа  $A_x B_{1-x} C_y D_{1-y}$  [Текст] / А. И. Казаков, Г. В. Шаповалов // Праці XVI Міжнародної науково-практичної конференції «Современные информационные и электронные технологии 2015» (СИЭТ-2015, 25 — 29 травня 2015 р.): Тези доповідей. — Одеса, Политехперіодика, 2015. — С. 285 – 286.

13. Казаков А.И. Особенности моделирования областей сосуществования фаз многокомпонентных систем на основе соединений  $A_3B_5$  [Текст] / А. И. Казаков, Г. В. Шаповалов // Праці XVII Міжнародної науково-практичної конференції «Современные информационные и электронные технологии 2016» (СИЭТ-2016, 23 — 27 травня 2016 р.): Тези доповідей. — Одеса, Политехперіодика, 2016. — С. 224 – 225.

14. Казаков А.И. Расчет областей сосуществования фаз в твердых растворах  $In_xGa_{1-x}As_yP_{1-y}$  в рамках модели пострегулярного раствора [Текст] / А. И. Казаков, Г. В. Шаповалов // Одинадцята МНПК МОДС 2016, Жукин, 27 червня – 1 липня 2016р.: Тези доповідей. — Чернігів, Чернігівський національний технологічний університет, 2016. — С. 32 – 35.

15. Казаков А.И. Математическое моделирование критических явлений в твердых растворах полупроводников на основе соединений  $A_2B_6$ . [Текст] / А. И. Казаков, П. П. Москвин, Г. В. Шаповалов. // Праці XVIII Міжнародної науково-практичної конференції «Современные информационные и электронные

технологии 2017» (СИЭТ-2017, 22 — 26 травня 2017 р.): Тези доповідей. — Одеса, Политехперіодика, 2017. — С. 104 – 105.

16. Москвин П. П. Моделирование квазиравновесных состояний при синтезе слоев твердых растворов полупроводников  $A_3B_5$  в условиях спинодального распада [Текст] / П. П. Москвин, А. И. Казаков, С. И. Скуратовский, А. А. Громовой, Г. В. Шаповалов. // Праці ХVІV Міжнародної науково-практичної конференції «Современные информационные и электронные технологии 2018» (СИЭТ-2018, 28 травня — 1 червня 2018 р.): Тези доповідей. — Одеса, Политехперіодика, 2018. — С. 20 – 21.

17. Москвин П. П. Технологические особенности золь-гель синтеза сверхтонких пленок  $ZnO$  на кремниевых подложках для приборов ИК-фотоэлектроники и солнечной энергетики [Текст] / П. П. Москвин, А. И. Казаков, Г.В. Скрыба, Г. В. Шаповалов. // Праці ХХ Міжнародної науково-практичної конференції «Современные информационные и электронные технологии 2019» (СИЭТ-2019, 27 – 31 травня 2019 р.): Тези доповідей. — Одеса, Политехперіодика, 2019. — С. 128 – 129.

18. Москвин П. П. Спинодальный распад твердых растворов полупроводников  $A^2B^6$ , ограниченный внутренними макроскопическими деформациями [Текст] / П. П. Москвин, А. И. Казаков, С.И. Скуратовский, А.А. Громовой, Г. В. Шаповалов. // Праці ХХ Міжнародної науково-практичної конференції «Современные информационные и электронные технологии 2019» (СИЭТ-2019, 27 – 31 травня 2019 р.): Тези доповідей. — Одеса, Политехперіодика, 2019. — С. 130 – 131.

## АНОТАЦІЯ

**Шаповалов Г.В. Математичне моделювання критичних явищ у багатокомпонентних системах на основі напівпровідникових сполук II – VI та III – V груп — Рукопис.**

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук (доктора філософії) за спеціальністю 01.05.02 «Математичне моделювання та обчислювальні методи» (121 – Інженерія програмного забезпечення). – Одеський національний політехнічний університет, Одеса, 2020.

В роботі було вирішено важливу науково-практичну задачу, що полягає у створенні математичної моделі спинодального розпаду у багатокомпонентних системах на основі напівпровідникових сполук з утворенням концентраційних доменів, та методу числового моделювання процесів виникнення у багатокомпонентних твердих розчинах просторів співіснування фаз різних порядків на основі положень теорії катастроф, теорії фазових переходів та застосування диференціального топологічного підходу, а також у розробці ІКЗ, які забезпечують ефективно розв'язування прикладних задач при дослідженні і практичному використанні широкого класу технологічних процесів синтезу напівпровідникових твердих розчинів та прогнозування їх поведінки у процесі експлуатації як компонентів сучасних оптоелектронних приладів.

На підставі отриманих математичних методів розроблено алгоритмічні засоби обчислень багатокомпонентних діаграм існування твердих розчинів напівпровідників та розташування на них просторів з імовірним виникненням

співіснуючих фаз. Результати теоретичних досліджень, розроблені моделі, метод та алгоритми обчислювальної реалізації цих моделей, покладено в основу побудови проблемно-орієнтованого програмного комплексу розв'язування прикладних задач математичного моделювання процесів утворення у системах багатокомпонентних напівпровідникових сполук просторів співіснування фаз різних порядків, та прогнозування їх виникнення.

Проведено обчислення розташувань просторів співіснування фаз різних порядків для твердих розчинів напівпровідників II – VI та III – V груп в рамках різних наближень, а також проведено порівняльний аналіз результатів моделювання, що не проводилось раніше. Розташування просторів співіснування фаз були використані для моделювання ефекту впорядкування складу у твердих розчинах напівпровідників III – V груп.

Ключові слова: математична модель, математичні методи, напівпровідникові тверді розчини, упорядкування складу, спінодальний розпад.

### **АННОТАЦІЯ**

**Шаповалов Г.В. Математическое моделирование критических явлений во многокомпонентных системах на основе полупроводниковых соединений II – VI и III – V групп — Рукопись.**

Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук (доктора философии), специальность 01.05.02 «Математическое моделирование и вычислительные методы» (121 - Инженерия программного обеспечения). Одесский национальный политехнический университет, Одесса, 2020.

В работе была решена важная научно-практическая задача, которая заключается в создании математической модели спинодального распада в многокомпонентных системах полупроводниковых соединений с образованием концентрационных доменов и метода числового моделирования процессов возникновения в твердых растворах пространств сосуществования фаз различных порядков на основе положений теории катастроф, теории фазовых переходов и применения дифференциального топологического подхода. Разработаны инструментальные компьютерные средства, обеспечивающие эффективное решение прикладных задач при исследовании и практическом использовании широкого класса технологических процессов синтеза полупроводниковых твердых растворов и прогнозирования их поведения в процессе эксплуатации как компонентов современных оптоэлектронных приборов.

На основании полученных математических методов разработаны алгоритмические средства для построения многокомпонентных диаграмм существования твердых растворов полупроводников и расположения на них пространств с возможным возникновением сосуществующих фаз. Результаты теоретических исследований, математическая модель, метод и алгоритмы, положены в основу построения проблемно-ориентированного программного комплекса решения прикладных задач математического моделирования процессов возникновения в системах многокомпонентных полупроводниковых соединений пространств сосуществования фаз различных порядков и прогнозирование их поведения.

Проведены расчеты положения пространств сосуществования фаз различных порядков для твердых растворов полупроводников II - VI и III - V групп в рамках различных приближений, а также проведен сравнительный анализ результатов моделирования, что не проводилось ранее. Расположение пространств сосуществования фаз были использованы для моделирования эффекта упорядочения состава в твердых растворах.

Ключевые слова: математическая модель, математические методы, полупроводниковые твердые растворы, упорядочение, спинодальный распад.

#### ABSTRACT

**Shapovalov H. V. Mathematical modeling of critical phenomena in multicomponent systems based on semiconductor compounds II - VI and III - V groups. — Manuscript.**

Dissertation for the degree of candidate of technical sciences, specialty 01.05.02 — Mathematical modeling and computational methods. — Odessa National Polytechnic University, Odessa, 2020.

An important scientific and practical problem was solved in the work, which consists in creating a mathematical model of spinodal decay in multicomponent systems based on semiconductor compounds with the formation of concentration domains, and a method of numerical modeling of processes in multicomponent solid solutions of coexistence spaces of different orders, the theory of phase transitions and the application of differential topological approach, as well as in the development of ICS, which provide effective solutions to applied problems in the study and practical use of a wide class of technological processes of semiconductor solid solutions and prediction of their behavior during operation as components of modern optoelectronic devices.

On the basis of the received mathematical methods algorithmic means of calculations of multicomponent diagrams of existence of solid solutions of semiconductors and arrangement on them of spaces with probable occurrence of coexisting phases are developed. The results of theoretical research, developed models, methods and algorithms for computational implementation of these models, are the basis for building a problem-oriented software package for solving applied problems of mathematical modeling of the formation of multicomponent semiconductor compounds in spaces of coexistence of phases of different orders and their prediction.

The location of coexistence spaces of phases of different orders for solid solutions of semiconductors of II - VI and III - V groups within different approximations is calculated, and also the comparative analysis of simulation results which was not carried out earlier is carried out. The arrangement of the coexistence phases of the phases was used to model the effect of ordering the composition in solid solutions of semiconductors of groups III - V.

Keywords: mathematical model, mathematical methods, semiconductor solid solutions, composition ordering, spinodal decay.