

УДК 621.315.592

Термодинамическая устойчивость объемных и эпитаксиальных твердых растворов CdHgTe, ZnHgTe, MnHgTe

© В.Г. Дейбук[¶], С.Г. Дремлюженко, С.Э. Остапов^{¶¶}Черновицкий национальный университет им. Ю. Федьковича,
58012 Черновцы, Украина

(Получена 13 января 2005 г. Принята к печати 7 февраля 2005 г.)

Исследована термодинамика стабильности твердых растворов $Cd_{1-x}Hg_xTe$, $Mn_xHg_{1-x}Te$ и $Zn_xHg_{1-x}Te$. Расчеты, проведенные в модели „ δ -параметра решетки“, указывают на стабильность твердых растворов CdHgTe и ZnHgTe во всем диапазоне концентраций компонент при типичных температурах выращивания. В то же время в MnHgTe обнаружена область несмешивания $0.33 < x < 1$ при $T = 950$ К, что согласуется с известными экспериментальными данными. Показано, что биаксиальные деформации, возникающие в тонких эпитаксиальных пленках $Mn_xHg_{1-x}Te/CdTe$ и $Mn_xHg_{1-x}Te/Cd_{0.96}Zn_{0.04}Te$, ведут к сужению областей несмешивания и незначительному понижению критических температур.

1. Введение

В настоящее время CdHgTe является наиболее широко используемым полупроводником с переменной шириной запрещенной зоны для создания фотодетекторов ИК излучения [1]. Однако существование ряда проблем с использованием CdHgTe, в частности нестабильность решетки, поверхности и границы раздела фаз, способствовало разработке альтернативных материалов для ИК детекторов. Среди них занимают особое место такие тройные соединения как MnHgTe и ZnHgTe, что обусловлено рядом преимуществ, которые интенсивно изучаются как теоретически, так и экспериментально [2,3]. Это в первую очередь улучшенные структурные свойства, такие как микротвердость, энергия формирования дислокаций, достаточно высокие подвижности носителей заряда. Композиционные и температурные зависимости ширины запрещенной зоны в этих материалах подобны зависимостям для CdHgTe [1]. Несмотря на имеющиеся на сегодняшний день серьезные проблемы выращивания высококачественных образцов MnHgTe и ZnHgTe (высокие коэффициенты сегрегации, более высокие температуры плавления соответствующих бинарных соединений и др.), новые узкощелевые полупроводники на основе Hg, по-видимому, постепенно заменят CdHgTe, особенно в тех применениях, где предъявляются повышенные требования к стабильности параметров приборов. Вместе с тем эпитаксиальные методы выращивания по сравнению с объемными методами дают возможность выращивать эпитаксиальные слои большой площади и сложные многослойные структуры при низких температурах, что особенно важно для достижения высоких рабочих характеристик фотовольтаических и МДП приборов второго поколения [4,5].

Кроме анализа зависимостей ширины запрещенной зоны и постоянной решетки от состава твердого раствора, необходимо учитывать тот факт, что большинство

твердых растворов являются неустойчивыми в некотором диапазоне составов. Твердый раствор в области неустойчивости стремится уменьшить свою свободную энергию в результате распада, т.е. фазового преобразования, которое приводит к нарушению макроскопической однородности кристаллов и образованию смеси фаз разного состава. Распад, который происходит без образования зародышей новых фаз, называют спинодальным. Соответствующую кривую на диаграмме составов, отделяющую область составов твердых растворов, неустойчивых даже к бесконечно малым флуктуациям состава, называют спинодалью [6]. Неупорядоченные полупроводниковые твердые растворы имеют положительную энтальпию смешивания, что ведет к распаду, противодействующему стабилизирующему действию внутренних напряжений. Разрывы зоны проводимости и валентной зоны на границе раздела двух полупроводников могут контролироваться с помощью соответствующих деформаций, что разрешает получать улучшенные гетероструктурные приборы. Деформация обеспечивает также дополнительную степень свободы для подгонки зонной структуры и изменения оптических и кинетических свойств полупроводников.

Деформации и напряжения в материалах, выращенных эпитаксиальными методами, такими как молекулярно-лучевая эпитаксия (МВЕ), осаждение металлоорганических химических соединений из паровой фазы (МОСVD), обусловлены в основном несогласованностью решеток эпитаксиального слоя и подложки. Наличие упругой релаксации в тонких пленках также влияет на фазовые преобразования и стабильность [7].

В настоящее время вопросы термодинамической стабильности рассматриваемых твердых растворов изучены еще недостаточно. Получить твердые растворы на основе соединений $A^{II}B^{VI}$ с произвольным составом компонент не разрешает наличие области несмешиваемости. Так, в системах $Cd_{1-x}Hg_xTe$ и $Zn_xHg_{1-x}Te$ с небольшим рассогласованием постоянных решетки критическая температура распада является достаточно

[¶] E-mail: vdei@chnu.cv.ua^{¶¶} E-mail: sergey.ostapov@gmail.com

низкой, что разрешает получать более или менее „правильный“ твердый раствор во всем диапазоне составов при нормальных условиях роста [8]. В то же время в объемном сплаве $Mn_xHg_{1-x}Te$ экспериментально обнаружена довольно широкая область фазового разделения ($0.35 < x < 1$) [9].

При нормальных условиях $CdTe$ и $ZnTe$ кристаллизуются в структуру цинковой обманки, в то время как $MnTe$ имеет две основных модификации: высокотемпературную, с кубической структурой $NaCl$, и низкотемпературную, с гексагональной структурой $NiAs$ [9]. Тройные сплавы растут в сфалеритной структуре. Напряжения, связанные с несогласованностью решеток, и композиционные флуктуации влияют на большинство физических свойств, включая и растворимость.

В данной работе исследована термодинамика напряженных сплавов $Cd_{1-x}Hg_xTe$, $Mn_xHg_{1-x}Te$ и $Zn_xHg_{1-x}Te$. Анализируется влияние биаксиальных напряжений со стороны подложки и пластической релаксации, обусловленной образованием дислокаций несоответствия, на диаграммы спинодального распада в тонких пленках твердых растворов с использованием модели „ δ -параметра решетки“ [10].

2. Учет упругой энергии

Для термодинамического описания псевдобинарных тройных твердых растворов $A_{1-x}B_xC$ рассмотрим свободную энергию смешения Гиббса (ΔG) в расчете на моль:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S, \quad (1)$$

где ΔH — энтальпия смешения, T — абсолютная температура, ΔS — энтропия смешения, которая может быть записана

$$\Delta S = -R[\ln x + (1-x)\ln(1-x)], \quad (2)$$

R — универсальная газовая постоянная. Для описания энтальпии смешения наиболее часто используются две модели — модель регулярного раствора [11] и модель „ δ -параметра решетки“ (DLP) [10]. Известно, что модель регулярного раствора хорошо описывает термодинамические свойства жидкой фазы и имеет ограничения для случая твердой фазы, поскольку параметры взаимодействия в модели регулярного раствора зависят от состава (x). В модели DLP энтальпия смешения ΔH зависит лишь от параметра решетки (a). Для твердых растворов $A_{1-x}B_xC$ ΔH может быть записана в форме [12]

$$\begin{aligned} \Delta H &= E(\text{alloy}) - xE(BC) - (1-x)E(AC) \\ &= K[a_{\text{alloy}}^{-2.5} - xa_{BC}^{-2.5} - (1-x)a_{AC}^{-2.5}], \end{aligned} \quad (3)$$

где K — параметр модели. Твердый раствор будет испытывать спинодальный распад при условии, что кривая композиционной зависимости свободной энергии имеет точку перегиба. Критерий устойчивости псевдобинарных

сплавов можно записать в форме $\partial^2 G / \partial x^2 > 0$. Область нестабильности определяется как геометрическое место точек, для которого выполняется условие $\partial^2 G / \partial x^2 = 0$.

Для объемного твердого раствора, кроме химической части свободной энергии, необходимо учитывать также и упругую составляющую, возникающую из требования когерентного сопряжения фаз [13] с учетом анизотропии кристалла. В случае, когда твердый раствор представляет собой тонкую эпитаксиальную пленку, а термодинамический процесс идет по пути образования дислокаций несоответствия, вследствие несогласованности постоянных решетки (a_{alloy}) с материалом подложки (a_{sub}) в пленке будут возникать биаксиальные деформации растяжения или сжатия, причем $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy}$. Компонента тензора напряжения в перпендикулярном (z) направлении для кубических кристаллов может быть записана:

$$\tau_z = C_{12}\varepsilon_{xx} + C_{12}\varepsilon_{yy} + C_{11}\varepsilon_{zz}, \quad (4)$$

где C_{11}, C_{12} — упругие постоянные пленки. Принимая во внимание для свободного (ростового) направления пленки, что $\tau_z = 0$, из (4) получим

$$\varepsilon_{zz} = -\frac{2C_{12}}{C_{11}}\varepsilon_{xx}(x). \quad (5)$$

Энергия такой деформации на единицу объема может быть записана [14]:

$$E_s = \frac{E\varepsilon^2}{1-\nu}, \quad (6)$$

где $\varepsilon = \varepsilon_{xx}$, E — модуль Юнга, ν — коэффициент Пуассона. Кроме того, как было впервые показано в [15], в случае эпитаксиальной пленки энергия упругой деформации изменяется за счет релаксации упругих напряжений на поверхности. В таком случае вместо соотношения (6) более корректно записать

$$E'_s = \frac{C_{11}}{2(C_{11} + C_{12})} \frac{E\varepsilon^2}{1-\nu}. \quad (7)$$

Относительная деформация полностью напряженной эпитаксиальной пленки равна

$$\varepsilon(x) = \varepsilon_m(x) = \frac{a_{\text{alloy}}(x) - a_{\text{sub}}}{a_{\text{sub}}}. \quad (8)$$

Зависимость постоянной решетки сплава $a_{\text{alloy}}(x)$ от состава описывалась правилом Вегарда, которое выполняется для твердых растворов полупроводников $A^{IV}B^{VI}$ с хорошей точностью.

Однако описанная ситуация наблюдается лишь в случае, когда толщина пленки (h) меньше критической толщины (h_c). Если же $h > h_c$, в пленке имеют место процессы пластической релаксации с образованием дислокаций несоответствия, причем, чем толще пленка, тем меньшей будет ее деформация. Для определения влияния указанных эффектов на термодинамическую

устойчивость рассматриваемых твердых растворов заметим, что согласно модели баланса сил [16], действующих на дислокации, можно записать

$$\varepsilon = A/h, \quad (9)$$

т. е. с ростом толщины эпитаксиальной пленки величина относительной деформации уменьшается, пленка постепенно релаксирует. Здесь параметр A определяется из условия непрерывности функции $\varepsilon(h)$ в точке $h = h_c$. Тогда из соотношений (8) и (9) получим $A = \varepsilon_m h_c$. Большинство полупроводниковых гетероструктур выращиваются на поверхности подложки (001), и именно такую ориентацию мы будем здесь рассматривать.

В расчетах мы использовали модель баланса сил, в которой критическая толщина эпитаксиального слоя описывается как [16]

$$h_c = \left(\frac{b}{\varepsilon_m}\right) \frac{1}{8\pi(1+\nu)} \left[\ln\left(\alpha \frac{h_c}{b}\right) + \beta \right], \quad (10)$$

где $\alpha = 4$, β — феноменологический параметр, являющийся мерой отклонения напряжений в области ядра дислокации от линейной зависимости [7], b — модуль вектора Бюргерса. Поскольку в полупроводниковых эпитаксиальных слоях наиболее часто встречаются 60° -е дислокации несоответствия в плоскости (001), вектор Бюргерса можно записать в виде $(a/2)\langle 110 \rangle$, тогда $b = a/\sqrt{2}$.

Таким образом, полная свободная энергия Гиббса системы в расчете на единицу объема является суммой химической энергии (ΔG) и упругой энергии (E'_s):

$$G_{\text{tot}} = N_v \Delta G + E'_s, \quad (11)$$

где N_v — количество молей на единицу объема гомогенного твердого раствора до распада. Анализ свободной энергии Гиббса как функции состава твердого раствора и толщины эпитаксиального слоя вместе с критерием стабильности позволяет рассчитать границы растворимости. Параметры, использованные для расчетов, были взяты из работы [12].

3. Анализ термодинамической стабильности

3.1. $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}$

Известные экспериментальные данные по твердотельной части фазовых диаграмм рассматриваемых полупроводниковых сплавов носят фрагментарный характер. Хотя детальные данные по высокотемпературным линиям ликвидуса и солидуса хорошо известны [8], малые значения атомно-диффузионных констант при более низких температурах затрудняют проведение таких исследований.

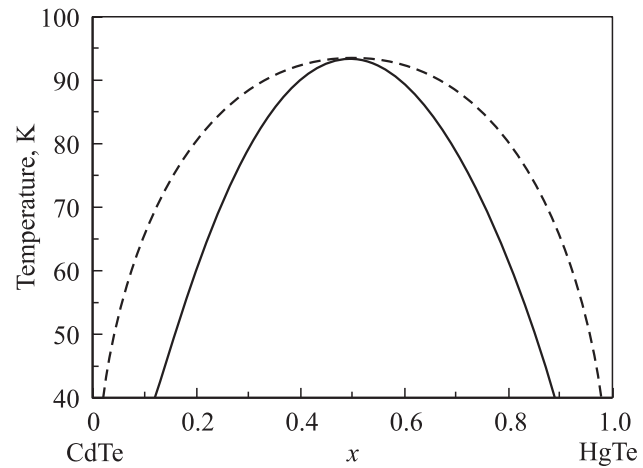


Рис. 1. Фазовые диаграммы распада $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}$: штриховая кривая — бинодаль, сплошная — спинодаль.

Твердые растворы замещения $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}$ экспериментально получают для всех составов x как в объемном, так и в пленочном вариантах, поэтому проведенный нами термодинамический анализ будет своего рода контрольным.

Термодинамика стабильности $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}$ исследовалась теоретически в ряде работ различными методами [17–19]. В частности, в расчетах из первых принципов [17] критическая температура спинодального распада составляет $T_c = 84$ К. В наших расчетах была принята модель „ δ -параметра решетки“, которая хорошо работает для сплавов на основе соединений $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$, обобщена нами для эпитаксиальных пленок и детально описана в работе [7]. Рассчитанная нами критическая температура составляет $T_c = 95$ К при $x_c = 0.5$, что объясняет отсутствие области несмешиваемости в данном сплаве при характерных температурах выращивания твердого раствора и обусловлено незначительными внутренними напряжениями вследствие хорошего согласования постоянных решетки образующих сплав соединений ($\Delta a/a \approx 0.3\%$). Рассчитанная нами диаграмма распада приведена на рис. 1, где бинодаль показана штриховой, а спинодальная кривая — сплошной линией. С уменьшением толщины пленки заметный вклад биаксиальных напряжений в энергию деформации приводит к некоторому понижению критической температуры распада и незначительному сужению области спинодального распада.

3.2. $\text{Zn}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$

Данная система довольно интенсивно изучается в последние годы как экспериментально, так и теоретически [3,4,18,20]. Подобно системе $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}$ сплавы $\text{Zn}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ образуют непрерывный ряд твердых растворов [8]. Однако внутренние локальные деформации, которые возникают вследствие смешивания двух

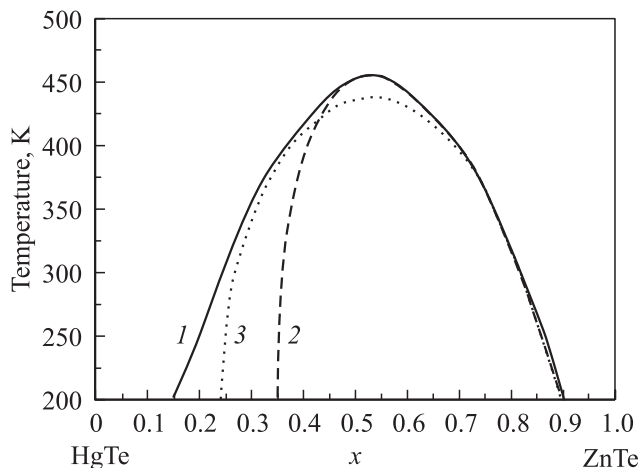


Рис. 2. Фазовые диаграммы спинопального распада $Zn_xHg_{1-x}Te$: 1 — объемный сплав, 2 — $Zn_xHg_{1-x}Te/CdTe$ ($h = 0.5$ мкм), 3 — $Zn_xHg_{1-x}Te/Cd_{0.8}Zn_{0.2}Te$ ($h = 0.5$ мкм).

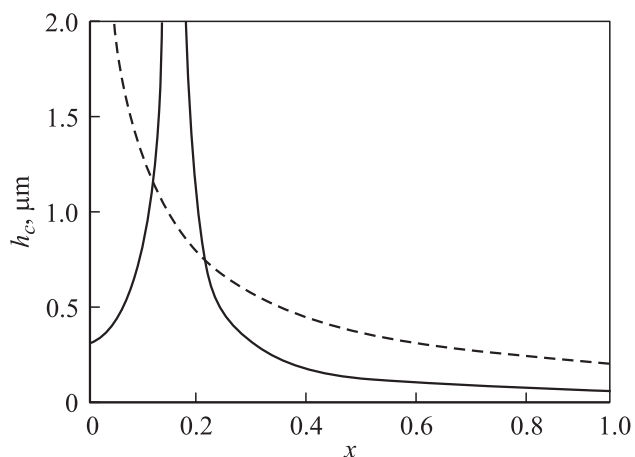


Рис. 3. Зависимость критической толщины (h_c) от состава (x) для эпитаксиальных пленок $Zn_xHg_{1-x}Te/CdTe$ (штриховая линия) и $Zn_xHg_{1-x}Te/Cd_{0.8}Zn_{0.2}Te$ (сплошная линия).

компонент $ZnTe$ и $HgTe$ с несогласованными постоянными решетки ($\Delta a/a \approx 6\%$), приводят к большей асимметрии кривых спинопального распада относительно $x = 0.5$ и возрастанию критической температуры (рис. 2, кривая 1). В частности, согласно нашим расчетам $T_c = 457$ К при $x_c = 0.53$, что хорошо согласуется с результатами [18] ($T_c = 455$ К при $x_c = 0.56$). Поэтому при типичных температурах роста сплава следует ожидать получение непрерывного ряда твердых растворов. На рис. 3 приведены рассчитанные нами композиционные зависимости критической толщины тонких пленок $Zn_xHg_{1-x}Te/CdTe$ (штриховая кривая) и $Zn_xHg_{1-x}Te/Cd_{0.8}Zn_{0.2}Te$ (сплошная кривая). В рамках модели DLP рассчитаны кривые спинопального распада для указанных пленок толщиной $h = 0.5$ мкм (рис. 2). Из наших расчетов следует, что при $h = 1$ мкм пленка полностью релаксировала, т.е. ее спинопальная кривая

практически совпадает со спинопальной объемного образца. С уменьшением толщины пленки влияние биаксиальных напряжений со стороны подложки все более будет проявляться на форме кривых распада. В частности, критическая температура распада незначительно понижается, а область спинопального распада сдвигается в сторону высших концентраций цинка. Полученные нами результаты объясняют с термодинамических позиций более высокое качество эпитаксиальных пленок $Zn_xHg_{1-x}Te$, получаемых на подложке $Cd_{0.8}Zn_{0.2}Te$ по сравнению с подложками $CdTe$, что подтверждается экспериментально [4].

3.3. $Mn_xHg_{1-x}Te$

Система $Mn_xHg_{1-x}Te$ в отличие от $Cd_{1-x}Hg_xTe$ и $Zn_xHg_{1-x}Te$ изучена намного меньше и связано это с трудностями ее выращивания [2,9,21]. Большой интервал изменения ширины запрещенной зоны разрешает надеяться на широкое применение данного сплава, в частности, для фотоэлектронных приборов инфракрасного диапазона. Наличие в решетке магнитных ионов Mn позволяет эффективно управлять зонными параметрами при помощи магнитного поля. Однако довольно широкий интервал несмешиваемости ($0.35 < x < 1$) существенно ограничивает область применения объемных кристаллов. Поэтому в последнее время большие надежды связаны с получением качественных эпитаксиальных пленок с расширенным составом. Поиск оптимальной подложки в этом случае является одной из важнейших технологических проблем.

Нами рассчитаны свободные энергии Гиббса объемного (рис. 4, сплошная кривая) и эпитаксиально на-

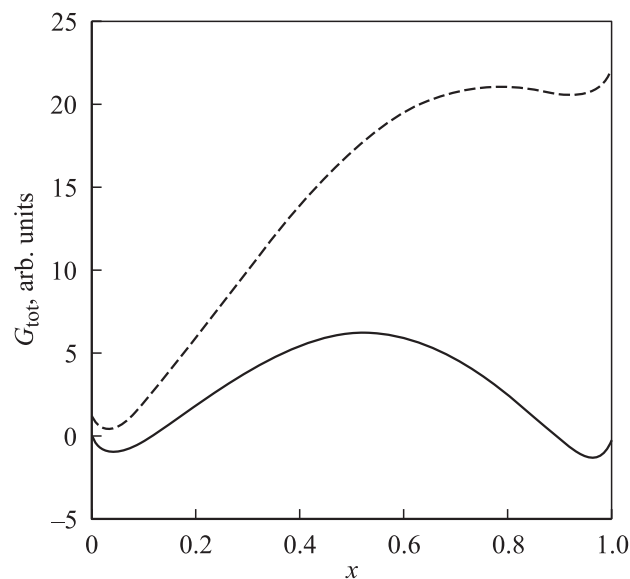


Рис. 4. Композиционная зависимость свободной энергии Гиббса $G_{tot}(x)$ для эпитаксиальных пленок $Mn_xHg_{1-x}Te/CdTe$ различной толщины при $T = 600$ К. Сплошная линия соответствует $h = 1$ мкм, штриховая — $h = 0.1$ мкм.

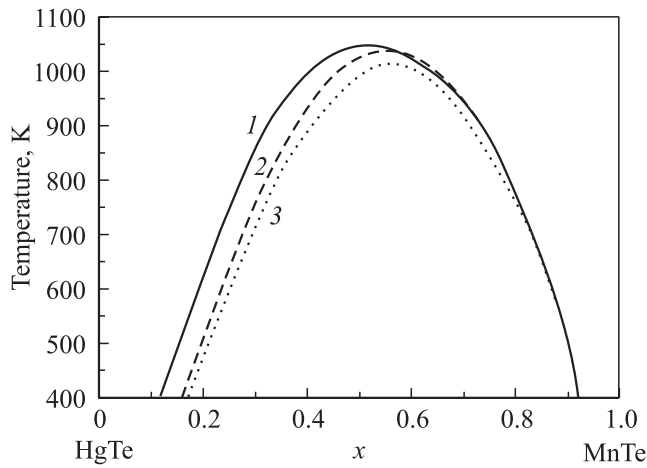


Рис. 5. Фазовые диаграммы спинопального распада $Mn_xHg_{1-x}Te$: 1 — объемный сплав, 2 — $Mn_xHg_{1-x}Te/CdTe$ ($h = 0.1$ мкм), 3 — $Mn_xHg_{1-x}Te/Cd_{0.96}Zn_{0.04}Te$ ($h = 0.1$ мкм).

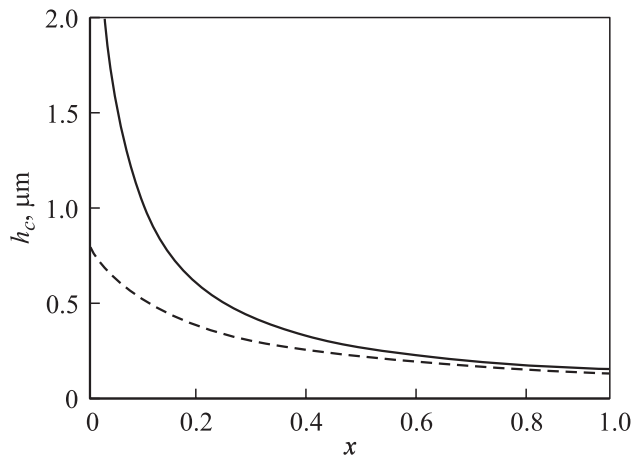


Рис. 6. Зависимости критической толщины (h_c) от состава (x) для эпитаксиальных пленок $Mn_xHg_{1-x}Te/CdTe$ (штриховая линия) и $Mn_xHg_{1-x}Te/Cd_{0.96}Zn_{0.04}Te$ (сплошная линия).

пряженного (рис. 4, штриховая кривая) твердого раствора $Mn_xHg_{1-x}Te/CdTe$. Биаксиальные напряжения со стороны подложки CdTe возрастают в сплаве с увеличением содержания Mn и приводят к сильной деформации композиционной зависимости свободной энергии Гиббса. Это в свою очередь сказывается и на кривых спинопального распада (рис. 5), построенных для двух подложек CdTe и $Cd_{0.96}Zn_{0.04}Te$. Результаты наших расчетов свидетельствуют о том, что для типичных температур выращивания будет наблюдаться фазовое разделение данного сплава в широкой области концентраций. Например, при $T = 950$ К спинопальный распад для релаксированных пленок ($h > 0.5$ мкм) будет иметь место при содержании Mn больше 35%, что хорошо согласуется с экспериментальными данными по фазовому разделению, согласно которым соответствующее значение $x > 0.35$ [8,9].

Учет биаксиальных деформаций в тонких пленках $Mn_xHg_{1-x}Te/CdTe$ и $Mn_xHg_{1-x}Te/Cd_{0.96}Zn_{0.04}Te$ со стороны подложки ведет к незначительному понижению критической температуры и увеличению области растворимости Mn до $x = 0.41$ ($Mn_xHg_{1-x}Te/CdTe$) и $x = 0.45$ ($Mn_xHg_{1-x}Te/Cd_{0.96}Zn_{0.04}Te$). Кроме того, область несмешиваемости уменьшается особенно быстро со стороны подложки, что нашло экспериментальное подтверждение в работах [22,23]. Следует отметить также значительное увеличение критической толщины пленки, выращенной на подложке $Cd_{0.96}Zn_{0.04}Te$ по сравнению с подложкой CdTe (рис. 6), что также свидетельствует о предпочтении первой.

4. Заключение

В работе исследована термодинамика стабильности твердых растворов $Cd_{1-x}Hg_xTe$, $Mn_xHg_{1-x}Te$ и $Zn_xHg_{1-x}Te$. Расчеты, проведенные в модели „ δ -параметра решетки“, указывают на стабильность твердых растворов CdHgTe и ZnHgTe во всем диапазоне концентраций компонент при типичных температурах выращивания. В то же время в MnHgTe обнаружена область несмешивания, что согласуется с экспериментальными данными.

Показано, что биаксиальные деформации, возникающие в тонких эпитаксиальных пленках $Mn_xHg_{1-x}Te/CdTe$ и $Mn_xHg_{1-x}Te/Cd_{0.96}Zn_{0.04}Te$, ведут к сужению областей несмешивания и незначительному понижению критических температур.

Список литературы

- [1] А. Рогальский *Инфракрасные детекторы* (Новосибирск, Наука, 2003).
- [2] A. Rogalski. *Infr. Phys.*, **31**, 117 (1991).
- [3] A. Rogalski. *Prog. Quant. Electron.*, **13**, 299 (1989).
- [4] E.J. Smith, T. Tung, S. Sen, W.H. Konkel, J.B. James, V.B. Harper, B.F. Zuck, R.A. Cole. *J. Vac. Sci. Technol. A*, **5** (5), 2043 (1987).
- [5] N.V. Sochinskii, J.C. Soares, E. Alves, M.F. da Silva, P. Franzosi, E. Dieguez. *Semicond. Sci. Technol.*, **11**, 542 (1996).
- [6] В.И. Фистуль. *Распад пересыщенных твердых растворов* (М., Металлургия, 1977).
- [7] В.Г. Дейбук. *ФТП*, **37**, 1179 (2003).
- [8] В.Н. Томашик, В.И. Грыцив. *Диаграммы состояния систем на основе полупроводниковых соединений A^{II}B^{VI}* (Киев, Наук. думка, 1982).
- [9] J.K. Furdyna. *J. Appl. Phys.*, **64** (4), R29 (1988).
- [10] G.B. Stringfellow. *J. Phys. Chem. Sol.*, **34**, 1749 (1973).
- [11] M. Piegems, M.B. Panish. *J. Phys. Chem. Sol.*, **35**, 409 (1974).
- [12] A. Chen, A. Sher. *Semiconductor alloys: physics and material engineering* (N.Y., Plenum Press, 1995).
- [13] А.Г. Хачатурян. *Теория фазовых превращений и структура твердых растворов* (М., Наука, 1974).
- [14] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теория упругости* (М., Наука, 1987) § 5.

- [15] I.P. Ipatova, V.G. Malyshkin, V.A. Shchukin. *J. Appl. Phys.*, **74**, 7198 (1993).
- [16] R. Beanland, D.J. Dunstan, P.J. Goodhew. *Adv. Phys.*, **45**, 87 (1996).
- [17] S.-H. Wei, L.G. Ferreira, A. Zunger. *Phys. Rev. B*, **41**, 8240 (1990).
- [18] R.S. Patrick, A.-B. Chen, A. Sher, A. Berding. *J. Vac. Sci. Technol. A*, **6** (4), 2643 (1988).
- [19] J. Yang, N.J. Silk, A. Watson, A.W. Bryant, T.G. Chart, B.B. Argent. *Calphad*, **19** (3), 415 (1995).
- [20] M.A. Herman, J.T. Sadowski. *Cryst. Res. Technol.*, **34** (2), 153 (1999).
- [21] О.М. Боднарук, И.Н. Горбатюк, В.И. Каленик, О.Д. Пустыльник, И.М. Раренко, В.П. Шафранюк. *Неорг. матер.*, **28** (2), 335 (1992).
- [22] Г.В. Бекетов, А.Е. Беляев, С.А. Витусевич, С.В. Каверцев, С.М. Комирченко. *ФТП*, **31** (3), 268 (1997).
- [23] С.В. Каверцев, А.Е. Беляев. *ФТП*, **31** (3), 342 (1997).

Редактор Т.А. Полянская

A thermodynamic stability of bulk and epitaxial CdHgTe, ZnHgTe and MnHgTe solid solutions

V.G. Deibuk, S.G. Dremliuzhenko, S.E. Ostapov

Yu. Fedkovich Chernovtsi National University,
58012 Chernovtsi, Ukraine

Abstract A thermodynamics of $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}$, $\text{Zn}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ and $\text{Mn}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ alloys has been investigated for a delta-lattice parameter model. The phase diagrams obtained a certain show stability of $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}$, $\text{Zn}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ in the whole range of compositions, alongside with a miscibility gap for $\text{Mn}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ being of $0.35 < x < 1$ at $T = 950$ K. Biaxial strains in $\text{Mn}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}/\text{CdTe}$ and $\text{Mn}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}/\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$ epitaxial films result in lowering critical temperatures and narrow the miscibility gap.