

# 富碲的碲镉汞相图的理论计算以及 与实验结果的比较

杨彦 宋炳文

(昆明物理研究所)

为了从富碲的碲镉汞  $[(\text{Hg}_{1-z}\text{Cd}_z)_{1-y}\text{Te}_y, y > 0.5]$  熔体中用液相外延法生长碲镉汞薄膜, 研究富碲的碲镉汞合金的相图是十分必要的。

本文用适合于富碲碲镉汞合金体系的规则缔合熔体模型(RAS 模型)计算了  $z=0.060$ 、 $0.078$  和  $0.160$ , 而  $y$  取不同值的各种合金的液相线温度。 $z=0.060$  的液相线温度的计算值较本文采用直接观察法的测定值低  $7\sim 8^\circ\text{C}$ ;  $z=0.078$  的计算值较实测值低  $9^\circ\text{C}$ ;  $z=0.160$ ,  $y > 0.88$  的计算值与实测值相符得较好。为使液相线温度的计算值与实测值符合得更好, 我们用实测结果对 RAS 模型液固平衡方程中 CdTe 与 Te 的混合作用参数  $\alpha_1$  进行重新拟合, 得到新的混合作用参数  $\alpha_{1r}(z)$ , 并建立了  $\alpha_{1r}(z)$  随  $z$  变化的表达式:

$$\alpha_{1r}(z) = 1.0410 + 0.1200z^{-1} - 0.0023z^{-2}.$$

用  $\alpha_{1r}(0.060)$  和  $\alpha_{1r}(0.078)$  分别计算了  $z=0.060$  和  $0.078$  的液相线, 前者计算值与实测值相差  $2^\circ\text{C}$ , 后者的计算值与实测值相差  $3\sim 6^\circ\text{C}$ 。可见, 用新拟合的混合作用参数  $\alpha_{1r}(z)$  计算的液相线温度比原“RAS”模型中给出的  $\alpha_1$  的计算值与实测结果更相符。这一事实说明, 在本文讨论的范围内, 不宜把混合作用参数取为常数, 它应随  $z$  的变化而变化。