

## ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ЗАРОДЫШЕОБРАЗОВАНИЯ КАК СПОСОБ СЕЛЕКЦИИ МОДИФИКАЦИЙ НИТРИДА АЛЮМИНИЯ

*Зыков Ф.М., Кудякова В.С.*

Уральский федеральный университет  
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Нитрид алюминия обладает свойствами, востребованными в различных областях промышленности. Известны стабильная гексагональная модификация нитрида w-AlN, а также кубические метастабильные модификации со структурой каменной соли rs-AlN и сфалерита zb-AlN. Технологические режимы процессов, лежащих в основе получения наиболее интересных, метастабильных при обычных температуре и внешнем давлении кубических форм AlN могут быть оценены из результатов термодинамического анализа политермической устойчивости этих форм.

Наиболее приемлемыми здесь являются условия, позволяющие стабилизировать метастабильную форму AlN за счёт регулирования поверхностной энергии микрокристаллов. Поэтому актуальным является анализ влияния поверхностной энергии различных модификаций нитрида алюминия на общую энергетику зародышеобразования.

Для моделирования процесса образования зародыша новой фазы были использованы два подхода: классическая схема зародышеобразования по Фольмеру и схема, учитывающая анизотропию растущих кристаллов в рамках подхода Вульфа. Результаты оценок величины критического зародыша при образовании кристаллических форм AlN с использованием двух подходов сведены в таблице для различных степеней пересыщения.

Размеры критических зародышей нитрида алюминия

Фаза	Капля	Кристалл
	$r_{\text{крит}}, \text{Å}$	$r_{\text{крит}}, \text{Å}$
Пересыщение 100		
rs-AlN	6,8	7,2
zb-AlN	12,7	38,3
w-AlN	20,7	17,5
Пересыщение 1000		
rs-AlN	5,0	4,8
zb-AlN	8,5	26,0
w-AlN	12,0	11,7

Разница поверхностной энергии различных структур AlN позволит проводить избирательный синтез за счёт влияния на процесс зародышеобразования.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-33-01136.*