

$$\Psi(\zeta) = C \left[ -\frac{a_0}{\zeta^2 - m} - \frac{ma_0(1 - m\zeta^2)}{(\zeta^2 - m)^2} - \frac{2ma_0(1 + m\zeta^2)\zeta^2}{(\zeta^2 - m)^3} + \right. \quad (27)$$

$$\left. + 2\zeta \frac{1 + m\zeta^2}{\zeta^2 - m} \sum_{n=1}^{\infty} na_{2n}\zeta^{-2n-1} \right]$$

На контуре отверстия получаем

$$\sigma_{\theta\theta} = \frac{2\gamma_0}{a+b} \left[ \frac{1 - m^2}{(1 + m^2 - 2m \cos 2\theta)^{3/2}} - \frac{4(1+m)}{\pi} E\left(\frac{2\sqrt{m}}{1+m}\right) \frac{1}{1 + m^2 - 2m \cos 2\theta} \right] \quad (28)$$

( $E$  — полный эллиптический интеграл первого рода). Интересующие нас полные усилия  $N_{\theta\theta}$  в приповерхностном слое выражаются так:

$$N_{\theta\theta} = \gamma_0 + 2h \left( \sigma_{\theta\theta} - \frac{\nu}{1-\nu} p \right) =$$

$$= \gamma_0 \left\{ 1 - \frac{4h}{a+b} \left[ \frac{4(1+m)E\left(\frac{2\sqrt{m}}{1+m}\right)}{\pi(1+m^2-2m \cos 2\theta)} - \frac{1-2\nu}{1-\nu} \frac{1+m^2}{(1+m^2-2m \cos 2\theta)^{3/2}} \right] \right\} \quad (29)$$

В описанной модели величины  $N_{\alpha\beta}^*$ , отражающие зависимость полных поверхностных усилий от кривизны поверхности (вообще и от координат на поверхности), характеризуют различие между понятиями «поверхностная энергия» и «поверхностные усилия» и особенности поверхностных явлений на границе твердого тела по сравнению с поверхностными явлениями на границе жидкости. В отличие от последней в случае твердого тела тензор поверхностных усилий не является шаровым. В частности, в рассмотренном выше примере, когда твердое тело занимало внешность эллиптического цилиндра, в направлении, перпендикулярном к плоскости, будут действовать поверхностные усилия  $N_{zz} = \gamma_0$ , отличающиеся от усилий  $N_{\theta\theta} = \gamma_0 + N_{\theta\theta}^*$ .

1. Гельфанд И. М., Шиллов Г. Е. Обобщенные функции и действия над ними.— М.: Физматгиз, 1959.— 460 с.
2. Ландау Л. Д., Лифшиц И. М. Теория упругости.— М.: Наука, 1965.— 204 с.
3. Мусхелишвили Н. И. Некоторые основные задачи математической теории упругости.— М.: Наука, 1966.— 708 с.
4. Огибалов П. М., Колтунов М. А. Оболочки и пластины.— М.: Изд-во Моск. ун-та, 1969.— 696 с.
5. Савин Г. Н. Распределение напряжений около отверстий.— Киев: Наук. думка, 1968.— 887 с.
6. Herring C. Surface tension as a motivation for sintering.— In: The physics of powder metallurgy. New York: McGraw-Hill, 1951, p. 143—179.
7. Kees W., Teodorescu P. P. Aplicatii ale teoriei distributiilor in mecanica.— Bucuresti: Acad. RSR, 1970.— 438 p.
8. Vermaak J. S., Mays C. W., Kuhlmann-Wilsdorf D. On surface stress and surface tension.— Surf. Sci., 1968, N 12, p. 128—133.

Институт прикладных проблем механики  
и математики АН УССР

Поступила в редколлегию  
11.10.78

УДК 621.315:592.2

В. Ф. Чекурин

#### УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ТРЕХКОНТИНУУМНОЙ МОДЕЛИ СОБСТВЕННОГО ПОЛУПРОВОДНИКА

Полупроводник как термодинамическая система содержит три взаимодействующие подсистемы — электроны, дырки и кристаллическую решетку. Концентрация свободных носителей в полупроводниках мала по сравнению с металлами и может изменяться в связи с возможностью переходов

электронов и дырок из связанного состояния в свободное и наоборот (генерация и рекомбинация). Если в результате внешнего воздействия система выведена из начального равновесного состояния, то установление нового равновесного состояния происходит вследствие протекания процессов внутри каждой из подсистем и процессов взаимодействия между подсистемами. В общем случае времена релаксации процессов различны [1]. Поэтому могут возникать такие состояния полупроводника, когда электронному и дырочному газам следует приписывать разные температуры, отличные от температуры кристаллической решетки [2, 7]. В связи с этим при построении моделей полупроводниковых тел естественным является постулирование локального термодинамического равновесия для каждой из подсистем в отдельности.

В литературе [4—6] при построении моделей многофазных многокомпонентных смесей для описания процессов тепло- и массопереноса с учетом химических реакций и фазовых превращений используется многотемпературный континуум, в котором каждая фаза характеризуется своей локальной температурой и другими локальными термодинамическими параметрами. В работе [8] двухтемпературный континуум используется для описания процессов теплопроводности и деформации в двухфазном твердом теле стохастической структуры. При построении математической модели многокомпонентной плазмы, состоящей из электронов, ионов разных сортов и нейтральных молекул, в работах [11, 12] постулируется существование локальной температуры для каждого компонента в отдельности. В работе [13] строится двухконтинуумная модель электропроводного твердого тела, описывающая движение электронного газа в кристаллической решетке. В этой модели кристаллическая решетка и электронный газ характеризуются разными температурами.

В настоящей работе предлагается трехконтинуумная модель собственного полупроводника для описания во взаимосвязи процессов деформации, тепло- и электропроводности, поляризации, а также генерации и рекомбинации. В линейном приближении получены соответствующие уравнения состояния модели.

**Параметры локального термодинамического состояния модели.** Рассмотрим упругий собственный полупроводник, который находится под воздействием внешних силовых нагрузок, температурных и электромагнитных полей. В естественном состоянии полупроводник изотропный однородный и макроскопически электронейтральный.

Представим модель собственного полупроводника в виде трех взаимодействующих взаимодействующих континуумов: континуума отрицательных зарядов — электронов, континуума положительных зарядов — дырок и континуума кристаллической решетки. Для каждого из континуумов постулируем локальное термодинамическое равновесие при неравновесном состоянии физически бесконечно малого элемента полупроводника в целом. Локальное термодинамическое равновесие каждого континуума будем определять внутренней энергией  $U^{(\alpha)}$  единицы объема физически бесконечно малого элемента ( $\alpha = n, p, s$ , где  $n, p, s$  — индексы, относящиеся к электронному, дырочному и решеточному континуумам соответственно).

В качестве параметров локального термодинамического состояния, соответствующих процессам теплопроводности и деформации, примем, как обычно, температуру  $T^{(\alpha)}$  — удельную энтропию  $S^{(\alpha)}$  и тензор напряжений  $\hat{\sigma}^{(\alpha)}$  — тензор деформаций  $\hat{\epsilon}^{(\alpha)}$ . Процесс поляризации полупроводника в рамках модели определяется поляризацией кристаллической решетки. В соответствии этому процессу поставим сопряженные термодинамические параметры: вектор напряженности электрического поля  $E'$  — вектор поляризации  $P'$ , измеряемые в системе координат, связанной с решеточной подсистемой.

При выборе параметров, необходимых для описания процессов перераспределения свободных носителей заряда, будем учитывать, что изменение

концентрации электронов и дырок в  $n$ - и  $p$ -подсистемах происходит за счет протекания двух процессов: перемещения носителей в рамках континуумов (электропроводность) и перехода носителей из  $s$ -подсистемы в  $n$ - и  $p$ -подсистемы и наоборот (генерация и рекомбинация). Однако состояние  $n$ - и  $p$ -подсистем определяется лишь общей концентрацией носителей в подсистемах. При этом изменение концентрации свободных носителей в подсистеме как за счет процессов генерации — рекомбинации, так и за счет перераспределения в рамках одного континуума приводит к одинаковому изменению энергии подсистемы. Поэтому в качестве параметров локального термодинамического состояния в  $n$ - и  $p$ -континуумах, соответствующих процессам электропроводности и генерации — рекомбинации свободных носителей, примем концентрацию свободных электронов и дырок  $n^{(\alpha)}$  — химический потенциал свободных электронов и дырок  $\eta^{(\alpha)}$  ( $\alpha = n, p$ ).

В данной модели будем рассматривать только процессы генерации, при которых образование свободных электронов и дырок, т. е. перевод их на более высокие энергетические уровни, происходит благодаря уменьшению внутренней энергии решеточной подсистемы. При переходе электрона и дырки из свободного состояния в связанное, во-первых, решеткой поглощается тепловая энергия, равная разности суммарной энергии электрона и дырки в свободном и связанном состояниях, во-вторых, в связи с увеличением концентрации связанных электронов и дырок возрастает внутренняя энергия  $s$ -подсистемы. Поэтому в качестве параметров локального термодинамического состояния в  $s$ -континууме, соответствующих процессам генерации и рекомбинации, примем концентрацию связанных электронов и дырок  $n^{(s)}$  — химический потенциал связанных электронов и дырок  $\eta^{(s)}$ .

Внутренняя энергия каждой подсистемы является функцией своих параметров состояния:

$$\begin{aligned} U^{(\alpha)} &= U^{(\alpha)}(S^{(\alpha)}, \hat{e}^{(\alpha)}, n^{(\alpha)}) \quad (\alpha = n, p); \\ U^{(s)} &= U^{(s)}(S^{(s)}, \hat{e}^{(s)}, n^{(s)}, P'). \end{aligned} \quad (1)$$

Приращение внутренней энергии для каждой подсистемы определяется уравнением Гиббса

$$\begin{aligned} dU^{(\alpha)} &= T^{(\alpha)}dS^{(\alpha)} + \sigma_{ij}^{(\alpha)}de_{ij}^{(\alpha)} + \eta^{(\alpha)}dn^{(\alpha)} \quad (\alpha = n, p); \\ dU^{(s)} &= T^{(s)}dS^{(s)} + \sigma_{ij}^{(s)}de_{ij}^{(s)} + \eta^{(s)}dn^{(s)} + E'_i dP'_i. \end{aligned} \quad (2)$$

Если просуммировать уравнения (2) для  $\alpha = n, p$  и положить  $T^{(n)} = T^{(p)} \equiv T$ ;  $de_{ij}^{(n)} = de_{ij}^{(p)} = 0$ , то получим

$$dU = TdS + \eta^{(n)}dn^{(n)} + \eta^{(p)}dn^{(p)}, \quad (3)$$

где  $dS = dS^{(n)} + dS^{(p)}$ ;  $U$  — внутренняя энергия единицы объема физически бесконечно малого элемента континуума электронно-дырочного газа, принятая в работе [10] в качестве функции локального термодинамического состояния модели полупроводника.

Полагая в уравнениях (2)  $T^{(n)} = T^{(p)} = T^{(s)} \equiv T$  и суммируя их, получаем

$$dU = TdS + \sigma_{ij}de_{ij} + \eta dn + \eta^{(s)}dn^{(s)} + E'_i dP'_i, \quad (4)$$

где  $dU = \sum_{\alpha} dU^{(\alpha)}$  — внутренняя энергия единицы объема физически бесконечно малого элемента полупроводника;  $\sigma_{ij}de_{ij} = \sum_{\alpha} \sigma_{ij}^{(\alpha)}de_{ij}^{(\alpha)}$  ( $\alpha = n, p, s$ );  $\eta dn = \eta^{(n)}dn^{(n)} + \eta^{(p)}dn^{(p)}$ . В этом случае приходим к модели собственного полупроводника, приведенной в работе [3]. Для такой модели параметр  $\eta^{(s)}$  аналогичен энергии ионизации, используемой в этой работе.

**Уравнения состояния.** Уравнения (2), записанные относительно удельной свободной энергии

$$F^{(\alpha)} = U^{(\alpha)} - T^{(\alpha)}S^{(\alpha)} - \eta^{(\alpha)}n^{(\alpha)} \quad (\alpha = n, p, s), \quad (5)$$

принимают вид

$$dF^{(\alpha)} = -S^{(\alpha)}dT^{(\alpha)} + \sigma_{ij}^{(\alpha)}de_{ij}^{(\alpha)} - n^{(\alpha)}d\eta^{(\alpha)} \quad (\alpha = n, p); \quad (6)$$

$$dF^{(s)} = -S^{(s)}dT^{(s)} + \sigma_{ij}^{(s)}de_{ij}^{(s)} - n^{(s)}d\eta^{(s)} + E'_i dP'_i.$$

При известных функциях  $F^{(\alpha)} = F^{(\alpha)}(T^{(\alpha)}, e_{ij}^{(\alpha)}, \eta^{(\alpha)})$  для  $\alpha = n, p$  и  $F^{(s)} = F^{(s)}(T^{(s)}, e_{ij}^{(s)}, \eta^{(s)}, P'_i)$ , используя (6), уравнения состояния записываем так:

$$S^{(\alpha)} = -\frac{\partial F^{(\alpha)}}{\partial T^{(\alpha)}}; \quad \sigma_{ij} = \frac{\partial F^{(\alpha)}}{\partial e_{ij}^{(\alpha)}}; \quad (7)$$

$$n^{(\alpha)} = -\frac{\partial F^{(\alpha)}}{\partial \eta^{(\alpha)}}; \quad E'_i = \frac{\partial F^{(s)}}{\partial P'_i} \quad (\alpha = n, p, s).$$

Запишем уравнения состояния для случая малого отклонения системы от состояния равновесия. Для этого разложим функции  $F^{(\alpha)}$  ( $\alpha = n, p, s$ ) в ряд в окрестности начального состояния  $T^{(n)} = T^{(p)} = T^{(s)} \equiv T$ ;  $S^{(\alpha)} = S_0^{(\alpha)}$ ;  $e_{ij}^{(\alpha)} = 0$ ;  $\sigma_{ij}^{(\alpha)} = 0$ ;  $n^{(n)} = n^{(p)} = n_0$ ;  $n^{(s)} = n_0^{(s)}$ ;  $\eta^{(n)} = \eta^{(p)} = \eta_0$ ;  $\eta^{(s)} = \eta_0^{(s)}$ ;  $E'_i = 0$ ;  $P'_i = 0$ . Ограничиваясь квадратичным приближением относительно приращений, получаем

$$F^{(\alpha)} = F_0^{(\alpha)} - S^{(\alpha)}(T^{(\alpha)} - T_0) - \frac{c^{(\alpha)}}{2T_0}(T^{(\alpha)} - T_0)^2 + \frac{1}{2}K^{(\alpha)}(e^{(\alpha)})^2 -$$

$$- n_0(\eta^{(\alpha)} - \eta_0) - \frac{C^{(\alpha)}}{2}(\eta^{(\alpha)} - \eta_0)^2 - \alpha^{(\alpha)}K^{(\alpha)}(T^{(\alpha)} - T_0)e^{(\alpha)} -$$

$$- C^{(\alpha)}\gamma^{(\alpha)}(\eta^{(\alpha)} - \eta_0)(T^{(\alpha)} - T_0) - C^{(\alpha)}\beta^{(\alpha)}(\eta^{(\alpha)} - \eta_0)e^{(\alpha)} \quad (\alpha = n, p);$$

$$F^{(s)} = F_0^{(s)} - S_0^{(s)}(T^{(s)} - T_0) - \frac{c^{(s)}}{2T_0}(T^{(s)} - T_0)^2 + \frac{1}{2}\left(K^{(s)} - \frac{2}{3}G\right)(e^{(s)})^2 - (8)$$

$$- \eta_0^{(s)}(\eta^{(s)} - \eta_0^{(s)}) - \frac{C^{(s)}}{2}(\eta^{(s)} - \eta_0^{(s)})^2 + \alpha^{(s)}K^{(s)}(T^{(s)} - T_0)e^{(s)} -$$

$$- C^{(s)}\gamma^{(s)}(\eta^{(s)} - \eta_0^{(s)})(T^{(s)} - T_0) - C^{(s)}\beta^{(s)}(\eta^{(s)} - \eta_0^{(s)})e^{(s)} + Ge_{ij}^{(s)}e_{ij}^{(s)} + \frac{1}{2a}P'_iP'_i,$$

где  $F_0^{(\alpha)}$  — свободная энергия единицы объема  $\alpha$ -подсистемы в начальном состоянии;  $e^{(\alpha)} = e_{ii}^{(\alpha)}$ ;  $c^{(\alpha)} = T_0 \left( \frac{\partial S^{(\alpha)}}{\partial T^{(\alpha)}} \right)_{e^{(\alpha)}, \eta^{(\alpha)}}$  — теплоемкость единицы объема  $\alpha$ -континуума;  $K^{(\alpha)} = \frac{1}{3} \left( \frac{\partial \sigma_{ij}^{(\alpha)}}{\partial e^{(\alpha)}} \right)_{T^{(\alpha)}, \eta^{(\alpha)}}$  — изотермический модуль объема сжатия;  $G^{(s)} \equiv G = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \sigma_{ij}^{(s)}}{\partial e_{ij}^{(s)}} \right)_{i \neq j}$  — модуль сдвига;  $C^{(\alpha)} = \left( \frac{\partial n^{(\alpha)}}{\partial \eta^{(\alpha)}} \right)_{T^{(\alpha)}, e^{(\alpha)}}$  — коэффициент, характеризующий изменение концентрации носителей заряда с изменением химического потенциала;  $\alpha^{(\alpha)} = \left( \frac{\partial e^{(\alpha)}}{\partial T^{(\alpha)}} \right)_{\eta^{(\alpha)}}$  — температурный коэффициент объемного расширения;  $\gamma^{(\alpha)} = \left( \frac{\partial \eta^{(\alpha)}}{\partial T^{(\alpha)}} \right)_{e^{(\alpha)}}$  — коэффициент, характеризующий изменение химического потенциала с изменением температуры;  $\beta^{(\alpha)} = \left( \frac{\partial \eta^{(\alpha)}}{\partial e^{(\alpha)}} \right)_{T^{(\alpha)}}$  — коэффициент, характеризующий изменение химического потенциала по деформации;  $a$  — коэффициент, характеризующий поляризуемость полупроводника.

Подставляя (8) в соотношения (7), получаем следующие линейные уравнения состояния:

$$\begin{aligned}
 S^{(\alpha)} &= S_0^{(\alpha)} + \frac{c^{(\alpha)}}{T_0} (T^{(\alpha)} - T_0) + \alpha^{(\alpha)} K^{(\alpha)} e^{(\alpha)} + C^{(\alpha)} \gamma^{(\alpha)} (\eta^{(\alpha)} - \eta_0^{(\alpha)}) \\
 &\quad (\alpha = n, p, s); \\
 n^{(\alpha)} &= n_0^{(\alpha)} + C^{(\alpha)} (\eta^{(\alpha)} - \eta_0^{(\alpha)}) + C^{(\alpha)} \gamma^{(\alpha)} (T^{(\alpha)} - T_0) + C^{(\alpha)} \beta^{(\alpha)} e^{(\alpha)} \\
 &\quad (\alpha = n, p, s); \\
 \sigma_{ij}^{(\alpha)} &= [K^{(\alpha)} e^{(\alpha)} - \alpha^{(\alpha)} K^{(\alpha)} (T^{(\alpha)} - T_0) - C^{(\alpha)} \beta^{(\alpha)} (\eta^{(\alpha)} - \eta_0^{(\alpha)})] \delta_{ij} \quad (9) \\
 &\quad (\alpha = n, p); \\
 \sigma_{ij}^{(s)} &= \left[ \left( K^{(s)} - \frac{2}{3} G \right) e^{(s)} - \alpha^{(s)} K^{(s)} (T^{(s)} - T_0) - C^{(s)} \beta^{(s)} (\eta^{(s)} - \eta_0^{(s)}) \right] \delta_{ij} + G e_{ij}^{(s)}, \\
 E_i &= \frac{1}{a} P_i.
 \end{aligned}$$

Здесь  $n_0^{(n)} = n_0^{(p)} = n_0$ ;  $\eta_0^{(n)} = \eta_0^{(p)} = \eta_0$ .

Для получения замкнутой системы уравнений модели уравнения состояния (9) необходимо дополнить балансовыми соотношениями как для процессов, протекающих в каждом из континуумов, так и для процессов взаимодействия между континуумами, а также уравнениями Максвелла для электромагнитного поля.

1. Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г. Физика полупроводников.— М.: Наука, 1977.— 672 с.
2. Бонч-Бруевич В. Л., Звягин И. П., Миронов А. Г. Доменная электрическая неустойчивость в полупроводниках.— М.: Наука, 1972.— 414 с.
3. Бурак Я. И., Галапац Б. П., Пеленский Р. А. Дифференциальные уравнения термодинамических процессов в собственных полупроводниках.— Мат. методы и физ.-мех. поля, 1975, вып. 2, с. 47—54.
4. Дорохов И. Н., Кафаров В. В., Нигматулин Р. И. Методы механики сплошной среды для описания многофазных многокомпонентных смесей с химическими реакциями и процессами тепло- и массопереноса.— ПММ, 1975, 39, № 3, с. 485—496.
5. Нигматулин Р. И. Методы механики сплошной среды для описания многофазных смесей.— ПММ, 1970, 34, № 6, с. 1097—1112.
6. Нигматулин Р. И. Основы механики геттерогенных сред.— М.: Наука, 1978.— 336 с.
7. Пожела Ю. К. Плазма и токовые неустойчивости в полупроводниках.— М.: Наука, 1977.— 367 с.
8. Хорошун Л. П., Солтанов Н. С. К построению уравнений термоупругости двухтемпературного континуума.— Прикл. механика, 1977, 13, № 5, с. 112—115.
9. Хорошун Л. П., Солтанов Н. С. Рівняння теплопровідності двофазного ізотропного тіла.— Доп. АН УРСР. Сер. А, 1977, № 1, с. 49—52.
10. Czaja W. Über die Anwendung der Thermodynamik irreversibler Prozesse auf Leitungsvorgänge in Halbleitern.— Helv. phys. acta, 1959, 32, N 1, S. 1—23.
11. Demiray H., Eringen A. C. Continuum theory of a slightly ionized plasma, diamagnetic effects.— Plasma Physic., 1973, 15, N 9, p. 903—920.
12. Demiray H., Eringen A. C. Constitutive equations of a plasma with bound charges.— Plasma Physic., 1973, 15, N 9, p. 889—901.
13. Demiray H., Eringen A. C. Motion of electron gas in conducting solid.— Plasma Physic., 1974, 16, N 7, p. 589—602.

Львовский политехнический институт

Поступила в редколлегию  
19.04.78