

**ТЕНЗОРНЫЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ ДЛЯ ДЕФОРМИРУЕМЫХ
ТВЕРДЫХ ТЕЛ**

Плотности свободной энергии f , внутренней энергии u , энтальпии h и потенциала Гиббса Φ однокомпонентных жидкостей являются термодинамическими потенциалами и удовлетворяют соотношениям Гиббса [6]

$$\begin{aligned}df &= -sdT - pd(1/\rho), & du &= Tds - pd(1/\rho), \\dh &= Tds + dp/\rho, & d\Phi &= -sdT + dp/\rho,\end{aligned}\quad (1)$$

где T — абсолютная температура; s — плотность энтропии; p — давление; ρ — плотность. Термодинамические функции связаны между собой преобразованиями Лежандра

$$u = f + Ts, \quad h = u + p/\rho, \quad \Phi = f + p/\rho = h - Ts. \quad (2)$$

Допустим, что для каждой компоненты многокомпонентной жидкой смеси справедлив принцип локального равновесия

$$df^{(\alpha)} = -s^{(\alpha)}dT^{(\alpha)} - p^{(\alpha)}d(1/\rho^{(\alpha)}), \quad \alpha = 1, 2, \dots, N \quad (3)$$

или

$$\rho^{(\alpha)}df^{(\alpha)} = -\rho^{(\alpha)}s^{(\alpha)}dT^{(\alpha)} + p^{(\alpha)}d\rho^{(\alpha)}/\rho^{(\alpha)}. \quad (4)$$

После суммирования уравнений (4) по α от 1 до N в предположении

$$T = T^{(1)} = T^{(2)} = \dots = T^{(N)},$$

$$\rho f = \sum_{\alpha=1}^N \rho^{(\alpha)}f^{(\alpha)}, \quad \rho u = \sum_{\alpha=1}^N \rho^{(\alpha)}u^{(\alpha)}, \quad (5)$$

$$\rho h = \sum_{\alpha=1}^N \rho^{(\alpha)}h^{(\alpha)}, \quad \rho \Phi = \sum_{\alpha=1}^N \rho^{(\alpha)}\Phi^{(\alpha)},$$

$$\rho s = \sum_{\alpha=1}^N \rho^{(\alpha)}s^{(\alpha)}, \quad p = \sum_{\alpha=1}^N p^{(\alpha)}$$

получаем

$$df = -sdT - pd(1/\rho) + \sum_{\alpha=1}^N (f^{(\alpha)} + p^{(\alpha)}/\rho^{(\alpha)}) d(\rho^{(\alpha)}/\rho), \quad (6)$$

т. е. обычное уравнение, выражающее принцип локального равновесия для смеси в целом:

$$df = -sdT - pd(1/\rho) + \sum_{\alpha=1}^N \varphi^{(\alpha)}dc^{(\alpha)}, \quad (7)$$

где $\varphi^{(\alpha)} = f^{(\alpha)} + p^{(\alpha)}/\rho^{(\alpha)}$; $c^{(\alpha)} = \rho^{(\alpha)}/\rho$ — концентрация. Аналогично можно получить

$$du = Tds - pd(1/\rho) + \sum_{\alpha=1}^N \varphi^{(\alpha)}dc^{(\alpha)},$$

$$dh = Tds + dp/\rho + \sum_{\alpha=1}^N \varphi^{(\alpha)}dc^{(\alpha)},$$

$$d\Phi = -sdT + dp/\rho + \sum_{\alpha=1}^N \varphi^{(\alpha)}dc^{(\alpha)}. \quad (8)$$

В случае однокомпонентного деформируемого твердого тела принцип локального равновесия формулируется в виде [6]

$$\begin{aligned}df &= -sdT + \rho^{-1}\sigma_{ij}de_{ij}, \\du &= Tds + \rho^{-1}\sigma_{ij}de_{ij},\end{aligned}\quad (9)$$

Здесь σ_{ij} , e_{ij} — компоненты тензоров напряжений и деформаций. Как и в случае жидкостей, величины f и u связаны между собой преобразованием Лежандра $u = f + Ts$. Вопрос о введении энтальпии и потенциала Гиббса для твердых тел нетривиален. Обычно принимаемые соотношения [1, 6]

$$h = u - \rho^{-1}\sigma_{ij}e_{ij}, \quad \varphi = f - \rho^{-1}\sigma_{ij}e_{ij}; \quad (10)$$

$$dh = Tds - e_{ij}d(\sigma_{ij}/\rho), \quad d\varphi = -sdT - e_{ij}d(\sigma_{ij}/\rho) \quad (11)$$

можно рассматривать как некоторое приближение, поскольку при $\sigma_{ij} = -\rho\delta_{ij}$ выражения (10), (11) не сводятся к соответствующим выражениям (2), (1) (появляется «лишний» множитель e_{ij}). Выход из создавшегося положения заключается в рассмотрении тензоров химического потенциала и энтальпии.

Предположим, что для каждой компоненты многокомпонентного деформируемого твердого тела справедливо соотношение

$$df^{(\alpha)} = -s^{(\alpha)}dT^{(\alpha)} + (\sigma_{ij}^{(\alpha)}/\rho^{(\alpha)})de_{ij}^{(\alpha)}, \quad i, j = 1, 2, 3; \quad \alpha = 1, 2, \dots, N. \quad (12)$$

По аналогии с работой [8] радиусы-векторы частиц сорта α в моменты времени 0 и t представим в виде

$$\vec{X}^{(\alpha)} = \vec{X}^{(\alpha)} + \vec{\Xi}^{(\alpha)}, \quad \vec{x}^{(\alpha)} = \vec{x} + \vec{\xi}^{(\alpha)}, \quad (13)$$

где \vec{X} , \vec{x} — радиусы-векторы центров масс; $\vec{\Xi}^{(\alpha)}$, $\vec{\xi}^{(\alpha)}$ — соответствующие относительные радиусы-векторы. Тогда векторы перемещения будут следующими:

$$\vec{u}^{(\alpha)} = \vec{x}^{(\alpha)} - \vec{X}^{(\alpha)} = (\vec{x} - \vec{X}) + (\vec{\xi}^{(\alpha)} - \vec{\Xi}^{(\alpha)}) = \vec{u} + \vec{\chi}^{(\alpha)}. \quad (14)$$

Здесь $\vec{u} = \vec{x} - \vec{X}$ — перемещение центра масс; $\vec{\chi}^{(\alpha)} = \vec{\xi}^{(\alpha)} - \vec{\Xi}^{(\alpha)}$.

Следовательно, в линейном приближении тензор деформации $e_{ij}^{(\alpha)}$ можно разбить на два слагаемых

$$e_{ij}^{(\alpha)} = e_{ij} + \psi_{ij}^{(\alpha)}, \quad (15)$$

причем e_{ij} — деформация центра масс, а $\psi_{ij}^{(\alpha)}$ — деформация, связанная с микроструктурой. Из формул (12), (15) следует, что

$$\rho^{(\alpha)}df^{(\alpha)} = -\rho^{(\alpha)}s^{(\alpha)}dT^{(\alpha)} + \sigma_{ij}^{(\alpha)}de_{ij} + \sigma_{ij}^{(\alpha)}d\psi_{ij}^{(\alpha)}. \quad (16)$$

После суммирования уравнений (16) по α от 1 до N с учетом соотношений (5), уравнений неразрывности для каждой компоненты и допущения $\sigma_{ij} = \sum_{\alpha=1}^N \sigma_{ij}^{(\alpha)}$ получаем

$$df = -sdT + \rho^{-1}\sigma_{ij}de_{ij} + \rho^{-1} \sum_{\alpha=1}^N \rho^{(\alpha)} \left(\frac{\sigma_{ij}^{(\alpha)}}{\rho^{(\alpha)}} - j^{(\alpha)}\delta_{ij} \right) d\psi_{ij}^{(\alpha)}. \quad (17)$$

Введем тензоры химического потенциала $\varphi_{ij}^{(\alpha)}$ и концентрации $c_{ij}^{(\alpha)}$ с помощью соотношений

$$\varphi_{ij}^{(\alpha)} = f^{(\alpha)}\delta_{ij} - \sigma_{ij}^{(\alpha)}/\rho^{(\alpha)}, \quad (18)$$

$$dc_{ij}^{(\alpha)} = -c^{(\alpha)}d\psi_{ij}^{(\alpha)}. \quad (19)$$

Тогда уравнение (17) примет вид

$$df = -sdT + \rho^{-1}\sigma_{ij}de_{ij} + \sum_{\alpha=1}^N \psi_{ij}^{(\alpha)}dc_{ij}^{(\alpha)}. \quad (20)$$

Впервые идея о необходимости рассмотрения тензоров химического потенциала и концентрации вещества была выдвинута в работах [2, 4, 5], в которых постулировалось уравнение (20). Позднее аналогичные идеи выдвигались в статьях [9, 10], в частности, в работе [10] приводится формула (18). В последующих работах предпринимались попытки дать физическую интерпретацию тензора концентрации. В статье [3] величина $c_{ij}^{(\alpha)}$ связывалась с анизотропными

распределением массы, в [7] — с силовыми диполями, моделирующими точечные дефекты. Формула (19) данной работы связывает тензор концентрации с обычной концентрацией и микроструктурными деформациями.

Наряду с тензором химического потенциала можно ввести тензор энтальпии

$$h_{ij}^{(\alpha)} = u^{(\alpha)} \delta_{ij} - \sigma_{ij}^{(\alpha)} / \rho^{(\alpha)}, \quad (21)$$

связанный с $\varphi_{ij}^{(\alpha)}$ -преобразованием Лежандра

$$h_{ij}^{(\alpha)} = \varphi_{ij}^{(\alpha)} + T^{(\alpha)} s^{(\alpha)} \delta_{ij}. \quad (22)$$

На основании формул (18), (21) для смеси в целом получаем

$$d\varphi_{ij} = -s dT \delta_{ij} - d\sigma_{ij} / \rho + \sum_{\alpha=1}^N \varphi_{km}^{(\alpha)} d c_{km}^{(\alpha)} \delta_{ij} + \rho^{-1} (\sigma_{km} \delta_{ij} - \sigma_{ij} \delta_{km}) d e_{km}, \quad (23)$$

$$dh_{ij} = T ds \delta_{ij} - d\sigma_{ij} / \rho + \sum_{\alpha=1}^N \varphi_{km}^{(\alpha)} d c_{km}^{(\alpha)} \delta_{ij} + \rho^{-1} (\sigma_{km} \delta_{ij} - \sigma_{ij} \delta_{km}) d e_{km}.$$

Из формул (18), (21) — (23) в случае шарового тензора напряжений $\sigma_{ij} = -p \delta_{ij}$ следуют соответствующие формулы (2), (8).

1. Гольденблат И. И. Нелинейные проблемы теории упругости.— М.: Наука, 1969.— 336 с.
2. Підстригач Я. С. Диференціальні рівняння дифузійної теорії деформації твердого тіла.— Доп. АН УРСР, 1963, № 3, с. 336—339.
3. Підстригач Я. С. Про одне узагальнення теоретичної моделі твердого тіла.— Там же, № 8, с. 1015—1017.
4. Подстригач Я. С. Диффузионная теория деформации изотропной сплошной среды.— Вopr. механики реал. твердого тела, 1964, вып. 2, с. 71—99.
5. Подстригач Я. С. Диффузионная теория неупругости металлов.— Журн. прикл. механики и техн. физики, 1965, № 2, с. 67—72.
6. Седов Л. И. Введение в механику сплошной среды.— М.: Физматгиз, 1962.— 284 с.
7. Темнов О. В. Дна- и параупругая поляризация в твердых телах.— Исследов. по упругости и пластичности, 1974, № 10, с. 83—102.
8. Эринген А. К. Теория микрополяриной упругости.— В кн.: Разрушение. М.: Мир, 1975, т. 2, с. 646—751.
9. Stuke B. Allgemeine Rahmgleichungen der Kontinuumsdynamik.— Phys. Lett., 1966, 21, N 6, p. 649—650.
10. Stuke B. Tensorielle chemische Potentiale — eine notwendige Erweiterung der Gibbs'schen Thermodynamik.— Z. Naturforsch., A, 1975, 30, N 11, S. 1433—1440.

Институт прикладных проблем
механики и математики АН УССР

Поступила в редколлегию
09.11.81

УДК 621.325 : 592.2

В. Ф. Чекурин

НЕЛИНЕЙНЫЕ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ДЛЯ ТРЕХКОНТИНУУМНОЙ МОДЕЛИ ПОЛУПРОВОДНИКА

В работах [4, 10, 11] развивается трехконтинуумный подход к исследованию физико-механических процессов в беспримесных полупроводниковых телах, согласно которому в качестве исходного принимается предположение о локальном термодинамическом равновесии в каждой из трех взаимопроникающих подсистем (континуумов) полупроводника — электронной, дырочной и кристаллической решетках. В соответствии с этим для каждого континуума вводятся интенсивные $Y_{(\alpha)}^l$, $\alpha = n, p, s$, $l \in \{1, \dots, L_{(\alpha)} + 1\}$ и сопряженные им экстенсивные $y_{(\alpha)}^l$ параметры локального термодинамического состояния, соответствующие процессам деформации, тепло- и электропроводности, а также генерации и рекомбинации свободных электронов и дырок. Здесь n, p, s -индексы, относящиеся к электронной, дырочной и решеточной подсистемам соответственно; $L_{(\alpha)}$ — термодинамическая вариантность α -подсистемы. Получены линейные уравнения состояния, справедливые при небольших отклонениях параметров локального термодинамического состояния от исходных значений.