фициент пропускания) и электронные (проводимость) свойства лучше, чем у a-Si:H и a-SiC:H. Кроме того, mc-Si имеет такую же оптическую ширину щели, как и кристаллический кремний (1,1 эВ), а значит можно еще больше расширить спектральный диапазон преобразования, если на его основе строить нижние ячейки СЭ (микроморфные солнечные элементы). Однако использование mc-Si приводит к следующим проблемам. Для эффективного поглощения в длинноволновой области необходима толщина i-слоя в несколько мкм, притом, что скорость роста mc-Si невелика (<0,5 нм/с). Более того, для согласования токов при использовании нижних mc-Si слоев нужно увеличивать толщину верхнего слоя.

Заключение

Дальнейшее развитие тонкопленочных солнечных элементов должно быть связано с оптимизацией текстурированных многозонных структур, при этом перспективным является использование микроморфных солнечных элементов с высококачественным (стабильным) верхним a-Si:H i-слоем и СВЧ систем осаждения. Необходимо развитие как групповой, так и конвейерной технологических концепций для достижения оптимального соотношения эффективность/цена.

Для развития гелиоэнергетики по конвейерной концепции нужны значительные капиталовложения. В связи с этим в отечественных условиях более целесообразно использовать стандартную групповую технологию и уже имеющееся оборудование тонкопленочного производства. При этом основной задачей станет повышение эффективности преобразования.

Литература: **1**. *Ruud E.I. Schropp, Miro Zeman*. New developments in amorphous thin-film silicon solar cells // IEEE Trans. on ED. 1999. V. 46. № 10. P. 2086-2092. **2**. *Гордиенко Ю.Е., Яковлев Д.Р.* Тонкопленочные транзисторы на основе неупорядоченного кремния // Радиоэлектроника и информатика. 2000. № 4. С. 4-8. **3**. *Мездрогина М.М., Абрамов А.В., Мосина Г.Н., Трапезникова И.Н., Пацекин А.В.* Влияние отжига в атмосфере атомарного водорода на свойства пленок аморфного гидрированного кремния и параметры p-i-n структур на их основе // Физика и техника полупроводников. 1998. Т. 32, № 5. С. 620-626. **4**. *Subhendu Guha, Jeffrey Yang*. Science and technology of amorphous silicon alloy photovoltaics // IEEE Trans. on ED. 1999. V. 46, № 10. P. 2080-2085. **5**. *Amorphous semiconductor technologies & devices*. V. 6 / Y. Hamakawa. Tokyo-Amsterdam, 1983. **6**. *Keppner H., Meier J., Torres P., Fischer D., Shah A.* Microcrystalline silicon and micromorph tandem solar cells // Appl. Phys. A. 1999. V. 69. P. 169-177.

Поступила в редколлегию 12.12.2001

Рецензент: д-р физ.-мат. наук. проф. Ажажа В.М.

Гордиенко Юрий Емельянович, д-р физ.-мат. наук, профессор, зав. кафедрой микроэлектроники, электронных приборов и устройств ХНУРЭ. Научные интересы: микроэлектроника, неразрушающий контроль материалов и изделий. Адрес: Украина, 61166, Харьков, пр. Ленина, 14, тел. : (0572) 409-362, 321-276.

Мазинов Алим Сеит-Аметович, канд. техн. наук, доцент физического факультета Таврического национального университета. Научные интересы: многослойные фотоэлектрические преобразователи на основе гетеропереходов. Адрес: Украина, 95000, Симферополь, ул. Ялтинская, 4, тел. (0652) 230-333, 230-360.

Яковлев Дмитрий Рудольфович, аспирант кафедры микроэлектроники, электронных приборов и устройств ХНУРЭ. Научные интересы: интегральные тонкопленочные устройства на основе неупорядоченных полупроводников. Адрес: Украина, 61166, Харьков, пр. Ленина, 14, тел.: (0572) 40-93-62, 93-71-84.

УДК 548.4

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ТЕРМОУПРУГИХ НАПРЯЖЕНИЙ ПРИ РОСТЕ КРИСТАЛЛОВ

ТЕВЯШЕВ А.Д., СУЗДАЛЬ В.С., БОРОДАВКО Ю.М., ПЕЛИПЕЦ А.А.

Рассматриваются основные уравнения теории упругости в связи с условиями роста кристаллов – уравнения, составляющие математическую модель термоупругих напряжений при росте кристаллов. Эта математическая модель позволяет найти компоненты тензора деформации и тензора напряжений при заданном температурном поле и соответствующих начальных и граничных условиях в конкретном процессе выращивания монокристаллов из расплава.

1. Введение

Наиболее существенными источниками напряжений при росте кристаллов являются неоднородное поле температурных деформаций, вызывающее термоупругие напряжения, а также дислокации и примесные неоднородности, создающие остаточные напряжения [1, 2, 4, 5].

Нахождение тензора деформации и тензора термоупругих напряжений является основой исследования процессов образования напряжений и дислокаций в растущих кристаллах и представляет самостоятельный интерес при установлении безопасного режима их охлаждения [3-5].

2. Тензор деформации и тензор напряжений. Уравнения равновесия

Под влиянием приложенных сил твердые тела деформируются. Для математического описания их деформации поступают следующим образом. Положение каждой точки тела определяется ее радиус-вектором $\vec{r}$ в некоторой системе координат. При деформировании тела все его точки смещаются. Такое смещение можно представить вектором $\vec{u} = \vec{r}' - \vec{r}$ или

$$u_i = x_i' - x_i, \tag{1}$$

где $\vec{r} = (x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z)$,
$\vec{r}' = (x_1' = x', x_2' = y', x_3' = z')$ –

векторы точки тела до и после его деформирования.

Вектор $\vec{u}$ называется вектором деформации или вектором смещения. Координаты x_i' смещенной точки являются функциями от координат x_i той же точки до ее смещения. Поэтому и вектор деформации u_i является функцией координат x_i. Задание вектора $\vec{u}$ как функции от x_i полностью определяет деформацию тела.

При деформировании тела меняется расстояние между его точками. Рассмотрим две близкие точки. Если радиус-вектор между ними до деформирования был dx_i, то в деформированном теле он будет $dx_i' = dx_i + du_i$. Соответственно расстояние между точками до деформирования

$$dl = \sqrt{dx_1^2 + dx_2^2 + dx_3^2}$$

и после деформирования

$$dl' = \sqrt{dx_1'^2 + dx_2'^2 + dx_3'^2} .$$

Согласно общему правилу написания сумм (опускаются знаки суммирования по векторным и тензорным индексам; по всем дважды повторяющимся индексам везде подразумевается суммирование по значениям 1, 2, 3) имеем:

$$dl^2 = dx_i^2 , \; dl'^2 = dx_i'^2 = (dx_i + du_i)^2 .$$

Подставляя $du_i = \frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_k$, переписываем dl'^2 в виде $dl'^2 = dl^2 + 2\frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_i dx_k + \frac{\partial u_i}{\partial x_k}\frac{\partial u_i}{\partial x_l} dx_k dx_l$.

Поскольку во втором слагаемом справа производится суммирование по обоим индексам i и k, то можно написать

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_i dx_k = \frac{\partial u_k}{\partial x_i} dx_i dx_k .$$

В третьем слагаемом поменяем местами индексы *i* и *l*. Тогда dl'^2 предстанут в виде

$$dl'^2 = dl^2 + 2u_{ik} dx_i dx_k , \qquad (2)$$

где
$$u_{ik} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_l}{\partial x_i}\frac{\partial u_l}{\partial x_k}\right) \qquad (3)$$

– тензор деформации.

Из определения u_{ik} видно, что он симметричен:

$$u_{ik} = u_{ki} . \qquad (4)$$

Практически почти во всех случаях деформирования тел деформации оказываются малыми. Это значит, что изменение любого расстояния в теле получается малым по сравнению с самим расстоянием. Если тело подвергается малой деформации, то все компоненты тензора деформации являются малыми; малым будет и вектор деформации u_i.

Поэтому в общем выражении (3) можно пренебречь последним членом как малой величиной второго порядка и представить тензор деформации, для случая малых деформаций, в виде

$$u_{ik} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i}\right). \qquad (5)$$

Далее нам понадобятся компоненты тензора деформации в цилиндрических координатах r, φ, z:

$$u_{rr} = \frac{\partial u_r}{\partial r}, u_{\varphi\varphi} = \frac{1}{r}\frac{\partial u_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{u_r}{r}, u_{zz} = \frac{\partial u_z}{\partial z};$$
$$2u_{\varphi z} = \frac{1}{r}\frac{\partial u_z}{\partial \varphi} + \frac{\partial u_\varphi}{\partial z},$$
$$2u_{rz} = \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r}, \qquad (6)$$
$$2u_{r\varphi} = \frac{\partial u_\varphi}{\partial r} - \frac{u_\varphi}{r} + \frac{1}{r}\frac{\partial u_r}{\partial \varphi}.$$

Перейдем теперь к рассмотрению тензора напряжений σ_{ik}. Выделим в теле какой-нибудь объем и рассмотрим действующую на него суммарную силу. С одной стороны, эта суммарная сила равна сумме всех сил, действующих на каждый из элементов рассматриваемого объема, т.е. может быть представлена в виде объемного интеграла $\int \vec{F} dV$, где $\vec{F}$ – сила, действующая на единицу объема тела, так что на элемент объема dV действует сила $\vec{F} dV$. С другой стороны, силы, с которыми действуют друг на друга различные части рассматриваемого объема, не могут привести к появлению отличной от нуля суммарной равнодействующей силы, поскольку они в соответствии с законом равенства действия противодействию в сумме уничтожают друг друга. Поэтому искомую полную сумму можно рассматривать как сумму только тех сил, которые действуют на данный объем со стороны окружающих его частей тела. Но согласно сказанному выше эти силы действуют на рассматриваемый объем через его поверхность, и потому результирующая сила может быть представлена в виде суммы сил, действующих на каждый элемент поверхности объема, т.е. в виде некоторого интеграла по этой поверхности.

Таким образом, для любого объема тела каждая из трех компонент $\int F_i dV$ равнодействующей всех внутренних напряжений может быть преобразована в интеграл по поверхности этого объема. Как известно, интеграл от скаляра по произвольному объему может быть преобразован в интеграл по поверхности в том случае, если этот скаляр является дивергенцией некоторого вектора. В данном случае рассматривается интеграл не от скаляра, а от вектора. Поэтому вектор F_i должен быть дивергенцией некоторого тензора второго ранга, т.е. иметь вид

$$F_i = \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k}. \qquad (7)$$

Тогда сила, действующая на некоторый объем, может быть представлена в виде интеграла по замкнутой поверхности, охватывающей данный объем:

$$\int F_i dV = \int \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} dV = \oint \sigma_{ik} df_k . \qquad (8)$$

Тензор σ_{ik} называется тензором напряжений. Как видно из (8), $\sigma_{ik} df_k$ есть i-я компонента силы, действующая на элемент поверхности $\overrightarrow{df}$. Выбирая элементы поверхности в плоскостях $x, y; y, z; x, z$, находим, что компонента σ_{ik} тензора напряжений есть i-я компонента силы, действующей на единицу поверхности, перпендикулярную к оси x_k. Так, на единичную площадку, перпендикулярную к оси x, действует нормальная к ней (направленная вдоль оси x) сила σ_{xx} и тангенциальные (направленные по осям y и z) силы σ_{yx}, σ_{zx}.

Как показано в [3],

$$\sigma_{ik} = \sigma_{ki}, \qquad (9)$$

т.е. тензор напряжений – симметричный.

Найдем σ_{ik} при равномерном всестороннем сжатии тела. При таком сжатии на каждую единицу поверхности тела действует одинаковое по величине давление, направленное везде по нормали к поверхности внутрь объема тела. Если обозначить это давление буквой p, то на элемент поверхности df_i действует сила $(-pdf_i)$. С другой стороны, эта сила равна $\sigma_{ik} df_k$. Поскольку $(-pdf_i) = -p\delta_{ik} df_k$, то

$$\sigma_{ik} = -p\delta_{ik}. \qquad (10)$$

Все отличные от нуля компоненты тензора напряжений равны давлению p.

В равновесии силы внутренних напряжений должны взаимно компенсироваться в каждом элементе объема тела, т.е. должно быть $F_i = 0$. Таким образом, уравнения равновесия деформированного тела имеют вид

$$\frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} = 0. \qquad (11)$$

Если тело находится в поле тяжести, то должна исчезать сумма $\vec{F} + \rho\vec{g}$ сил внутренних напряжений и силы тяжести $\rho\vec{g}$, действующей на единицу объема тела (ρ – плотность, $\vec{g}$ – вектор ускорения силы тяжести, направленный вертикально вниз); уравнения равновесия в этом случае имеют вид

$$\frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} + \rho g_i = 0. \qquad (12)$$

Что касается внешних сил, приложенных непосредственно к поверхности тела, то они входят в граничные условия к уравнениям равновесия. Пусть $\vec{P}$ – внешняя сила, действующая на единицу площади поверхности тела, так что на элемент поверхности df действует сила $\vec{P}df$. В равновесии она должна компенсироваться силой $(-\sigma_{ik} df_k)$, действующей на тот же элемент поверхности со стороны внутренних напряжений. Таким образом, должно быть $P_i df - \sigma_{ik} df_k = 0$.

Написав df_k в виде $df_k = n_k df$, где $\vec{n}$ - единичный вектор, направленный по внешней нормали к поверхности, находим

$$\sigma_{ik} n_k = P_i. \qquad (13)$$

Это и есть условие, которое должно выполняться на всей поверхности находящегося в равновесии тела.

3. Термодинамика деформирования

Предположим, что деформация тела меняется так, что вектор деформации u_i изменяется на малую величину δu_i. Работа δR, производимая при этом силами внутренних напряжений в единице объема тела, как известно [3], определяется выражением

$$\delta R = -\sigma_{ik} \delta u_{ik}. \qquad (14)$$

Если деформация тела достаточно мала, то по прекращении действия вызвавших деформацию внешних сил тело возвращается в исходное недеформированное состояние. Такие деформации называются упругими. При большой деформации прекращение действия внешних сил не приводит к ее полному исчезновению; такие деформации называются пластическими. Далее будем рассматривать только упругие деформации.

Предположим, что процесс деформирования совершается настолько медленно, что в каждый момент времени в теле успевает установиться состояние термодинамического равновесия, соответствующее тем внешним условиям, в которых тело в данный момент находится. Тогда, как известно, процесс будет термодинамически обратимым.

Условимся относить все термодинамические величины к единице объема.

Бесконечно малое изменение $d\xi$ внутренней энергии равно разности полученного данной единицей объема тела количества тепла и произведенной силами внутренних напряжений работы dR. Количество тепла равно при обратимом процессе TdS, где T – температура. Таким образом, $d\xi = TdS - dR$; учитывая (14), имеем:

$$d\xi = TdS + \sigma_{ik} du_{ik} \qquad (15)$$

– основное термодинамическое соотношение для деформируемых тел.

Вводя вместо энергии ξ свободную энергию $F = \xi - TS$, переписываем соотношение (15) в виде

$$dF = -SdT + \sigma_{ik} du_{ik}. \qquad (16)$$

Независимыми переменными в (15) и (16) являются соответственно S, u_{ik} и T, u_{ik}. Компоненты тензора напряжений можно получить, дифференцируя ξ или F по компонентам тензора деформаций, соответственно при постоянной энтропии S или температуре T:

$$\sigma_{ik} = \left(\frac{\partial \xi}{\partial u_{ik}}\right)_S = \left(\frac{\partial F}{\partial u_{ik}}\right)_T . \qquad (17)$$

4. Закон Гука. Однородные деформации

Для того чтобы иметь возможность применять общие термодинамические соотношения к тем или иным конкретным случаям деформаций, необходимо иметь выражение для свободной энергии тела F как функции тензора деформации. Это выражение легко получить, воспользовавшись малостью деформаций и соответственно этому разложить свободную энергию в ряд по степеням u_{ik}.

Рассмотрим деформированное изотропное тело, находящееся при некоторой постоянной вдоль тела температуре. Недеформированным состояние тела будем считать при отсутствии внешних сил и при той же температуре. Тогда при $u_{ik} = 0$ должны отсутствовать и внутренние напряжения, т.е. должны быть $\sigma_{ik} = 0$. Поскольку $\sigma_{ik} = \frac{\partial F}{\partial u_{ik}}$, то отсюда следует, что в разложении F по степеням u_{ik} должны отсутствовать линейные члены.

Далее, поскольку свободная энергия является величиной скалярной, то каждый член в разложении F тоже должен быть скаляром. Из компонент симметрического тензора u_{ik} можно составить два независимых скаляра второй степени; в их качестве можно выбрать квадрат u_{ii}^2 суммы диагональных компонент и сумму u_{ik}^2 квадратов всех компонент тензора u_{ik}. Разлагая F в ряд по степеням u_{ik}, получаем с точностью до членов второго порядка выражение вида

$$F = F_0 + \frac{\lambda}{2} u_{ii}^2 + \mu u_{ik}^2 . \qquad (18)$$

Это и есть общее выражение для свободной энергии деформированного изотропного тела. Величины λ и μ называются коэффициентами Ламэ.

Известно [3], что изменение объема при деформации определяется суммой u_{ii}. Если эта сумма равна нулю, то при деформировании объем данного тела остается неизменным и меняется только его форма. Такие деформации без изменения объема называются сдвигом.

Деформация, сопровождающаяся изменением объема, но без изменения формы, называется всесторонним сжатием. Каждый элемент объема тела при такой деформации остается подобным самому себе; тензор такой деформации имеет вид $u_{ik} = const\,\delta_{ik}$.

Всякую деформацию можно представить в виде суммы деформаций чистого сдвига и всестороннего сжатия. Для этого достаточно написать тождество

$$u_{ik} = \left(u_{ik} - \frac{1}{3}\delta_{ik} u_{ll}\right) + \frac{1}{3}\delta_{ik} u_{ll} . \qquad (19)$$

Первый член справа представляет собой чистый сдвиг, поскольку сумма его диагональных элементов равна нулю ($\delta_{ii} = 3$). Второй же член связан со всесторонним сжатием.

В качестве общего выражения для свободной энергии деформированного изотропного тела удобно написать вместо (18) другое, воспользовавшись указанным разложением произвольной деформации на сдвиг и всестороннее сжатие. Выбирая в качестве двух независимых скаляров второй степени суммы квадратов компонент соответственно первого и второго членов в (19), имеем:

$$F = \mu\left(u_{ik} - \frac{1}{3}\delta_{ik} u_{ll}\right)^2 + \frac{K}{2} u_{ll}^2 , \qquad (20)$$

где μ и K называются соответственно модулем сдвига и всестороннего сжатия. Последний связан с коэффициентами Ламэ соотношением

$$K = \lambda + \frac{2}{3}\mu , \qquad (21)$$

причем $\mu > 0 , \; K > 0 .$ (22)

Воспользовавшись общим термодинамическим соотношением (17) и выражением (20), имеем для тензора напряжений:

$$\sigma_{ik} = K u_{ll} \delta_{ik} + 2\mu\left(u_{ik} - \frac{1}{3} u_{ll} \delta_{ik}\right). \qquad (23)$$

Это выражение определяет тензор напряжений через тензор деформаций для изотропного тела. Из него видно, что если деформация является чистым сдвигом или чистым всесторонним сжатием, то связь между σ_{ik} и u_{ik} определяется соответственно одним только модулем сдвига или модулем всестороннего сжатия.

Нетрудно получить и обратные формулы, выражающие u_{ik} через σ_{ik}:

$$u_{ik} = \frac{1}{9K}\delta_{ik}\sigma_{ll} + \frac{1}{2\mu}\left(\sigma_{ik} - \frac{1}{3}\delta_{ik}\sigma_{ll}\right). \qquad (24)$$

Из (24) видно, что тензор деформации u_{ik} является линейной функцией тензора напряжений σ_{ik}, т.е. деформации пропорциональны приложенным к телу силам. Этот закон, имеющий место при малых деформациях, называется законом Гука.

Учитывая квадратичность F по тензору деформации и (24), получаем две полезные формулы:

$$F = \frac{\sigma_{ik} u_{ik}}{2} , \qquad (25)$$

$$u_{ik} = \frac{\partial F}{\partial \sigma_{ik}} . \qquad (26)$$

Заметим, что формула (17) является общим термодинамическим соотношением, а справедливость формулы (26) связана с выполнением закона Гука.

Если тензор деформации постоянен вдоль всего объема тела, то деформацию называют однородной. К числу таких деформаций относится, например, простое растяжение (или сжатие) стержня. Пусть стержень расположен вдоль оси z и к его концам приложены силы, растягивающие его в противоположные стороны. Эти силы действуют равномерно на всю поверхность концов стержня; сила, действующая на единицу поверхности, пусть будет p.

Поскольку деформация однородна, т.е. u_{ik} постоянны вдоль тела, то постоянен также и тензор напряжений σ_{ik}, поэтому его можно найти непосредственно из граничных условий (13). На боковой поверхности стержня внешние силы отсутствуют, поэтому $\sigma_{ik}n_k = 0$. Поскольку единичный вектор $\vec{n}$ на боковой поверхности перпендикулярен к оси z, т.е. имеет только компоненты n_x, n_y, то отсюда следует, что все компоненты σ_{ik}, за исключением σ_{zz}, равны нулю. Последнюю находим из граничных условий на концах стержня $\sigma_{zi}n_i = p$, откуда $\sigma_{zz} = p$.

Из общего выражения (24), связывающего компоненты тензоров деформации и напряжений, видно, что все компоненты u_{ik} с $i \neq k$ равны нулю. Для остальных компонент находим:

$$u_{xx} = u_{yy} = -\frac{1}{3}\left(\frac{1}{2\mu} - \frac{1}{3K}\right)p,$$
$$u_{zz} = \frac{1}{3}\left(\frac{1}{3K} + \frac{1}{\mu}\right)p. \qquad (27)$$

Компонента u_{zz} определяет относительное удлинение стержня вдоль оси z [3]. Коэффициент при p называют коэффициентом растяжения, а обратную величину – модулем растяжения (или модулем Юнга) E:

$$u_{zz} = \frac{p}{E}, \quad E = \frac{9K\mu}{3K + \mu}. \qquad (28)$$

Компоненты u_{xx} и u_{yy} определяют относительное сжатие стержня в поперечном направлении. Отношение поперечного сжатия к продольному растяжению называется коэффициентом Пуассона σ.

Итак, $$u_{xx} = -\sigma u_{zz}, \quad \sigma = \frac{1}{2}\frac{3K - 2\mu}{3K + \mu}. \qquad (29)$$

Свободная энергия растянутого стержня

$$F = \frac{1}{2}\sigma_{zz}u_{zz} = \frac{p^2}{2E}. \qquad (30)$$

Обычно принято пользоваться величинами E и σ вместо модулей K и μ. Из (28) и (29) следует:

$$\mu = \frac{E}{2(1+\sigma)}, K = \frac{E}{3(1-2\sigma)}. \qquad (31)$$

Общие формулы (20), (23), (24) для свободной энергии, тензора напряжений и тензора деформации с коэффициентами, выраженными через E и σ, имеют вид:

$$F = \frac{E}{2(1+\sigma)}\left(u_{ik}^2 + \frac{\sigma}{1-2\sigma}u_{ll}^2\right), \qquad (32)$$

$$\sigma_{ik} = \frac{E}{1+\sigma}\left(u_{ik} + \frac{\sigma}{1-2\sigma}u_{ll}\delta_{ik}\right), \qquad (33)$$

$$u_{ik} = \frac{1}{E}\left[(1+\sigma)\sigma_{ik} - \sigma\sigma_{ll}\delta_{ik}\right]. \qquad (34)$$

5. Деформации с изменением температуры

Заметим, что изменение температуры может происходить как в результате самого процесса деформирования, так и по посторонним причинам.

Будем считать недеформированным состояние тела при отсутствии внешних сил при некоторой заданной температуре T_0. Если тело находится при температуре $T \neq T_0$, то даже в отсутствие внешних сил оно будет деформировано в связи с наличием теплового расширения. Поэтому в разложение свободной энергии $F(T)$ будут входить не только квадратичные, но и линейные по тензору деформации члены. Из компонент тензора второго ранга u_{ik} можно составить только одну линейную скалярную величину – сумму u_{ii} его диагональных компонент. Далее предположим, что сопровождающее деформацию изменение $T - T_0$ температуры мало. Тогда можно считать, что коэффициент при u_{ii} в разложении F просто пропорционален разности $T - T_0$. Таким образом, получаем для свободной энергии следующую формулу:

$$F(T) = F_0(T) - K\alpha(T - T_0)u_{ll} +$$
$$+ \mu\left(u_{ik} - \frac{1}{3}\delta_{ik}u_{ll}\right)^2 + \frac{K}{2}u_{ll}^2 \quad , \qquad (35)$$

где коэффициент при $T - T_0$ написан в виде ($-K\alpha$).

Величины μ, K, α надо считать постоянными; учет их зависимости от температуры привел бы к величинам высшего порядка малости.

Дифференцируя F по u_{ik}, получаем следующее выражение для тензора напряжений:

$$\sigma_{ik} = -K\alpha(T - T_0)\delta_{ik} + Ku_{ll}\delta_{ik} + 2\mu\left(u_{ik} - \frac{1}{3}\delta_{ik}u_{ll}\right). \qquad (36)$$

Первый член здесь представляет собой дополнительные напряжения, связанные с изменением температуры тела. При свободном тепловом расширении тела (в отсутствие внешних сил) внутренние напряжения должны отсутствовать. Приравнивая σ_{ik} нулю, найдем, что u_{ik} имеет вид const δ_{ik}, причем

$$u_{ll} = \alpha(T - T_0). \qquad (37)$$

Но u_{ll} представляет собой относительное изменение объема при деформации. Таким образом, α – коэффициент теплового расширения тела.

6. Уравнения равновесия изотропных тел

Подставим в общее уравнение (12)

$$\frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} + \rho g_i = 0$$

выражение (33) для тензора напряжений. Имеем:

$$\frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} = \frac{E\sigma}{(1+\sigma)(1-2\sigma)}\frac{\partial u_{ll}}{\partial x_i} + \frac{E}{1+\sigma}\frac{\partial u_{ik}}{\partial x_k}.$$

Подставляя сюда $u_{ik} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i}\right)$, получаем уравнение равновесия в виде

$$\frac{E}{2(1+\sigma)}\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_k^2} + \frac{E}{2(1+\sigma)(1-2\sigma)}\frac{\partial^2 u_l}{\partial x_i \partial x_l} + \rho g_i = 0. \quad (38)$$

Эти уравнения удобно переписать в векторных обозначениях. В этих обозначениях величины $\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_k^2}$ являются компонентами вектора $\Delta\vec{u}$, а $\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = div\vec{u}$.

Таким образом, уравнения равновесия приобретают вид

$$\Delta\vec{u} + \frac{1}{1-2\sigma}graddiv\vec{u} = -\rho\vec{g}\,\frac{2(1+\sigma)}{E}. \quad (39)$$

Используя известное тождество

$$rotrot\vec{u} = graddiv\vec{u} - \Delta\vec{u},$$

представим (39) в виде

$$graddiv\vec{u} - \frac{1-2\sigma}{2(1-\sigma)}rotrot\vec{u} = -\rho\vec{g}\,\frac{(1+\sigma)(1-2\sigma)}{E(1-\sigma)}. \quad (40)$$

При наличии каких-либо объемных сил вектор $\rho\vec{g}$ в правой части уравнения равновесия должен быть заменен соответствующей другой “плотностью” объемных сил.

Если деформация вызывается не объемными силами, а силами, приложенными к поверхности тела, то уравнение равновесия принимает вид

$$(1-2\sigma)\Delta\vec{u} + graddiv\vec{u} = 0 \quad (41)$$

или $$2(1-\sigma)graddiv\vec{u} - (1-2\sigma)rotrot\vec{u} = 0. \quad (42)$$

Внешние силы входят в решение только посредством граничных условий.

Применяя к уравнению (42) операцию div и помня, что $divgrad\, u = \Delta$, имеем:

$$\Delta div\vec{u} = 0, \quad (43)$$

т.е. величина $div\vec{u}$, определяющая изменение объема при деформации, является гармонической функцией. Применяя к уравнению (41) оператор Лапласа Δ, получаем

$$\Delta\Delta\vec{u} = 0, \quad (44)$$

т.е. в равновесии вектор деформации удовлетворяет бигармоническому уравнению. Эти результаты остаются в силе и в однородном поле тяжести, так как при дифференцировании правая часть (55) исчезает, но они не справедливы в общем случае переменных вдоль тела объемных внешних сил.

Если тело неравномерно нагрето, то уравнение равновесия (42) будет иметь иной вид; действительно в тензоре напряжений должен быть учтен член $\left(-K\alpha(T-T_0)\right)\delta_{ik}$ и соответственно в $\frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k}$ возникает член

$$-K\alpha\frac{\partial T}{\partial x_i} = -\frac{E\alpha}{3(1-2\sigma)}\frac{\partial T}{\partial x_i}.$$

В результате получаем уравнение равновесия в виде

$$\frac{3(1-\sigma)}{1+\sigma}graddiv\vec{u} - \frac{3(1-2\sigma)}{2(1+\sigma)}rotrot\vec{u} = \alpha\nabla T. \quad (45)$$

7. Упругие свойства кристаллов

Изменение свободной энергии при изотермическом сжатии кристалла является, как и у изотропных тел, квадратичной функцией тензора деформаций. В противоположность тому, что имело место для изотропных тел, эта функция содержит не два, а большее число независимых коэффициентов.

Общий вид свободной энергии деформированного кристалла есть

$$F = \frac{1}{2}\lambda_{iklm}u_{ik}u_{lm}, \quad (46)$$

где λ_{iklm} — некоторый тензор 4-го ранга, называемый тензором модулей упругости. Поскольку тензор деформаций симметричен, то произведение $u_{ik}u_{lm}$ не меняется при перестановке индексов i с k, l с m или пары i,k с парой l,m. Очевидно поэтому, что и тензор λ_{iklm} может быть определен так, чтобы он обладал такими же свойствами симметрии по отношению к перестановке индексов:

$$\lambda_{iklm} = \lambda_{kilm} = \lambda_{ikml} = \lambda_{lmik}. \quad (47)$$

Путем подсчета можно убедиться в том, что число различных компонент тензора 4-го ранга, обладающего такими свойствами симметрии, равно в общем случае 21.

Соответственно выражению (46) для свободной энергии зависимость тензора напряжений от тензора деформаций имеет в кристаллах вид

$$\sigma_{ik} = \frac{\partial F}{\partial u_{ik}} = \lambda_{iklm}u_{lm}. \quad (48)$$

Наличие той или иной симметрии кристалла приводит к появлению зависимостей между различными компонентами тензора λ_{iklm}, так что число его независимых компонент оказывается меньше, чем 21.

Рассмотрим теперь тепловое расширение кристаллов. В изотропных телах оно происходит одинаково по всем направлениям, так что тензор деформации при свободном тепловом расширении имеет известный вид:

$$u_{ik} = \frac{1}{3}\alpha\left(T-T_0\right)\delta_{ik},$$

где α — коэффициент теплового расширения. В кристаллах же надо писать

$$u_{ik} = \frac{1}{3}\alpha_{ik}\left(T - T_0\right), \qquad (49)$$

здесь α_{ik} — некоторый тензор второго ранга, симметричный по индексам i, k. Выясним число независимых компонент этого тензора в кристаллах разных систем. Для этого воспользуемся известным из тензорной алгебры правилом: всякому симметричному тензору второго ранга можно привести в соответствие некоторый тензорный эллипсоид. Из соображений симметрии видно, что при триклинной, моноклинной и ромбической симметриях эллипсоид является трехосным (т.е. длины всех его осей различны). При тетрагональной, ромбоэдрической и гексагональной симметриях он должен быть эллипсоидом вращения. Наконец, кубическая симметрия приводит к вырождению эллипса в шар. Но трехосный эллипсоид определяется тремя независимыми величинами (длинами осей), эллипсоид вращения — двумя, шар — одной. Таким образом, число независимых компонент тензора α_{ik} в кристаллах различных систем есть: триклинная, моноклинная, ромбическая — 3; тетрагональная, ромбоэдрическая, гексагональная — 2; кубическая — 1.

Отметим, что тепловое расширение кристаллов кубической системы определяется одной величиной, т.е. они ведут себя в отношении своего теплового расширения как изотропные тела.

8. Математическая модель термоупругих напряжений

Для нахождения поля термоупругих напряжений σ_{ik} в общем случае произвольного температурного поля и произвольной формы кристаллов необходимо решить систему уравнений, состоящую из уравнений равновесия и уравнений Гука, при соответствующих граничных условиях. Указанная система уравнений и является математической моделью термоупругих напряжений при росте кристаллов. Например, для изотропных кристаллов цилиндрической формы радиуса R эта математическая модель имеет вид:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\sigma_{rr}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\sigma_{rz} = \frac{1}{r}\sigma_{\varphi\varphi}, \qquad (50)$$

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\sigma_{rz}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\sigma_{zz} = 0; \qquad (51)$$

$$\sigma_{rr} = \mu a\left[\frac{\partial u_r}{\partial r} + b\left(\frac{u_r}{r} + \frac{\partial u_z}{\partial z}\right) - cT\right], \qquad (52)$$

$$\sigma_{\varphi\varphi} = \mu a\left[\frac{u_r}{r} + b\left(\frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{\partial u_z}{\partial z}\right) - cT\right], \qquad (53)$$

$$\sigma_{zz} = \mu a\left[\frac{\partial u_z}{\partial z} + b\left(\frac{u_r}{r} + \frac{\partial u_r}{\partial r}\right) - cT\right], \qquad (54)$$

$$\sigma_{rz} = \mu a\left[\frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r}\right]. \qquad (55)$$

Граничные условия:

$$\sigma_{rr} = \sigma_{rz} = 0 \text{ при } r = R, \qquad (56)$$

$$\sigma_{zz} = \sigma_{rz} = 0 \text{ при } z = 0, l, \qquad (57)$$

$$u_r = 0, \ \frac{\partial u_z}{\partial r} = 0 \text{ при } r = 0, \qquad (58)$$

где $a = 2(1-\sigma)/(1-2\sigma)$, $b = \sigma(1-\sigma)$, $c = \alpha(1+\sigma)/(1-\sigma)$; μ — модуль сдвига; σ — коэффициент Пуассона; α — коэффициент теплового расширения; T — известное температурное поле, которое для случая роста кристаллов находится в результате решения задачи Стефана; u_r и u_z — радиальное и осевое перемещения.

Легко понять, что (50),(51) — уравнения равновесия, а выражения (52)-(55) соответствуют закону Гука, связывая компоненты тензора термоупругих напряжений с компонентами тензора деформаций.

Граничные условия (56)-(58) записаны в предположении, что поверхности, включая границу раздела фаз, свободны от внешних сил, а на оси выполняются условия симметрии.

Задача (50)-(58) для осесимметричного температурного поля $T(r,z)$ при выращивании монокристаллов методом Чохральского может быть решена численным методом с использованием ЭВМ.

Таким образом, рассмотрены методы математического описания деформаций и напряжений в связи с условиями роста кристаллов, приведшие к построению математической модели термоупругих напряжений при выращивании монокристаллов из расплава.

Литература: 1. *Лодиз Р., Паркер Р.* Рост монокристаллов. М.: Мир, 1974. 540 с. 2. *Шашков Ю.М.* Выращивание монокристаллов методом вытягивания. М.: Металлургия, 1982. 312 с. 3. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теория упругости. М.: Наука, 1965. 202 с. 4. *Инденбом В.Л., Житомирский И.С., Чебанова Т.С.* Внутренние напряжения, возникающие при выращивании кристаллов в стационарном режиме // Кристаллография. 1973. Т.18. С.39-47. 5. *Инденбом В.Л., Освенский В.Б.* Теоретические и экспирементальные исследования возникновения напряжений и дислокаций при росте кристаллов. В кн.: Рост кристаллов. М.: Наука, 1980. Т.13. С.240-251.

Поступила в редколлегию 19.11.2001

Рецензент: д-р физ.-мат. наук, проф. Гордиенко Ю.Е.

Тевяшев Андрей Дмитриевич, д-р техн. наук, профессор, зав. каф. ПМ ХНУРЭ. Научные интересы: системный анализ и теория оптимального стохастического управления. Адрес: Украина, 61166, Харьков, пр. Ленина, 14.

Суздаль Виктор Семенович, канд. техн. наук, зав. отделом НТК “Институт монокристаллов”. Научные интересы: системы управления технологическими процессами получения монокристаллов. Адрес: Украина, 61001, Харьков, пр. Ленина, 60.

Бородавко Юрий Михайлович, канд. техн. наук, доцент кафедры ПМ ХНУРЭ. Научные интересы: математическое моделирование физических процессов. Адрес: Украина, 61166, Харьков, пр. Ленина, 14.

Пелипец Андрей Александрович, аспирант кафедры ПМ ХНУРЭ. Научные интересы: математическое моделирование процессов выращивания монокристаллов из расплава. Адрес: Украина, 61166, Харьков, пр. Ленина, 14.