

## МОДЕЛЬ ВЗАЄМОПРОНИКНИХ КОНТИНУУМІВ І ТЕРМОДИНАМІКА ДЕФОРМУВАННЯ НАПІВПРОВІДНИКІВ

У рамках теорії взаємопроникних континуумів, використовуючи уявлення зонної теорії провідності твердих тіл, отримано основні термодинамічні співвідношення для напівпровідників, легованих декількома донорними та акцепторними домішками. На цій основі встановлено параметри локального термодинамічного стану, що відповідають процесам деформації, теплопровідності, електропровідності й генерації-рекомбінації вільних носіїв струму.

**Вступ.** Тверді тіла, які за їх електричними властивостями поділяють на діелектрики, напівпровідники та метали, різняться за рівнем електропровідності та характером її залежності від температури, деформації, впливу зовнішніх полів. Таку відмінність в електрофізичних властивостях зумовлює головно різниця у кількостях рухливих носіїв заряду. Так, наприклад, густина вільних електронів у міді (типовий метал) становить близько  $8 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$  і практично не змінюється із температурою, деформацією та під дією світла. В діелектриках, натомість, кількість вільних носіїв заряду приблизно на десять порядків менша. Напівпровідники ж займають проміжне місце між діелектриками та металами за густину вільних носіїв заряду та питомою електропровідністю. До того ж ці фізичні параметри в напівпровідниках можуть істотно змінюватись (на шість і більше порядків), залежно від температури, деформації, концентрації домішкових атомів, інтенсивності світлового потоку та інших чинників. У фізиці твердого тіла продуктивно використовують модель електропровідності, за якою вільні носії заряду розглядають як заряджений газ (плазму), що рухається в кристалічній гратці, обмінюючись з нею енергією та імпульсом. Таким чином, процеси в електронній підсистемі впливають на деформацію гратки і, на впаки, – деформація може спричинити зміну стану електронної підсистеми.

У зв'язку з широким застосуванням напівпровідників у техніці, зокрема, у приладобудуванні та мікроелектроніці розвиток теорії деформації таких тіл у взаємозв'язку з іншими фізичними процесами – тепловими та електрофізичними – привертає пильну увагу дослідників ось уже упродовж декількох останніх десятиліть. Серед них – Я. Й. Бурак, який у середині 60-х років минулого століття, базуючись на відомій на той час моделі електропровідного розчину [7], запропонував феноменологічну теорію деформації металу, в якій електронну підсистему розглядали як одну із компонент цього розчину [1]. За екстенсивний параметр стану, що відповідає процесу електропровідності, у цій моделі прийняли об'ємний заряд вільних носіїв, а як спряжений до нього інтенсивний параметр ввели електричний термодинамічний потенціал електронів провідності. Згодом ця модель була розвинена [9], а відтак і поширена на власні напівпровідники шляхом уведення в рівняння балансу заряду складових, що відповідають процесам генерації-рекомбінації вільних електронів і дірок [2]. Результати досліджень у цьому напрямку узагальнили в монографії [6].

Слід підкреслити, що припущення про локальну термодинамічну рівновагу, лінійні рівняння стану, які застосували в цій моделі напівпровідників, а також розгляд електронної підсистеми як однієї із компонент твердого розчину поряд із домішковими атомами істотно звужують область її застосування, обмежуючи випадками, коли відхилення температури та концентрації вільних носіїв заряду від їх вихідних рівноважних значень є достатньо малими.

Маючи на меті розширити область практичного застосування макроскопічних моделей деформівних напівпровідників у працях [3, 4, 13, 20–22]

запропонували термодинамічну теорію деформації власних напівпровідників, що базується на моделі взаємопроникніх континуумів. Ця модель дозволяє ураховувати в макроскопічній моделі електропровідного тіла інерційність руху носіїв струму, а також виділити частку кожної підсистеми твердого тіла – носіїв струму та деформівної гратки в сумарних потоках імпульсу, енергії, заряду та маси, процеси, що призводять до порушення локальної термодинамічної рівноваги між граткою та носіями струму тощо. Такі локально нерівноважні стани, що супроводжуються розшаруванням температур та електрохімічних потенціалів підсистем, як відомо, виникають у напівпровідниках під дією сильних електричних полів, великих градієнтів температури, струмових навантажень.

Багатоконтинуумні моделі напівпровідників тіл розвивались у працях А. С. Ерігена, Г. А. Можена, Г. Тірстена, їх співробітників, інших авторів (див., наприклад, [28–31]). Тут реалізовано підхід, що базується на застосуванні методів раціональної термомеханіки К. Трусдела та її розширень на системи, що містять заряджені частинки, до окремих підсистем тіла – носіїв струму та гратки. У цих моделях враховується обмін енергією та імпульсом між носіями струму та граткою лише за механізмом розсіювання (зіткненнями) носіїв із іонами гратки при відносному русі цих підсистем. Таким чином, у моделях не враховано обмінної взаємодії між електронною підсистемою і граткою, впливу деформації на цю взаємодію, як і зворотного впливу.

Оскільки автори обмежують себе методами раціональної термомеханіки, то в цих моделях лише постулюється загальний вигляд нелінійних фізичних співвідношень. Отримані ж лінійні рівняння стану містять значну кількість формально введених матеріальних констант, які підлягають експериментальному визначенням. Однак питання про зв'язок введених матеріальних характеристик із фізичними параметрами напівпровідників, які визначаються методами фізики твердого тіла, як правило, не ставиться.

Аналізуючи усі ці публікації можна дійти до висновку, що, застосовуючи чисто формальний механічний підхід, надзвичайно продуктивний у класичних теоріях пружності та термопружності, в яких можна обмежитися невеликою кількістю матеріальних констант, складно побудувати макроскопічну теорію деформації напівпровідників тіл, яку можна було б ефективно використовувати для реальних об'єктів, що містять напівпровідникові елементи.

Підхід, започаткований в публікаціях [3, 4, 13, 20–22], отримав подальший розвиток у працях [5, 14, 15, 17, 19, 23]. У цих роботах, виходячи із зонної теорії електричної провідності твердих тіл, сформульовано термодинамічні співвідношення теорії деформації для власних напівпровідників, з використанням методів статистичної фізики та термодинаміки необоротних процесів встановлено замкнену систему рівнянь моделі. У рамках моделі виконано низку досліджень [10–12, 18, 24, 25], їх результати частково увійшли до кандидатської [16] та докторської [26] дисертацій. Використовуючи цей підхід, встановимо далі термодинамічні співвідношення теорії деформації напівпровідників, легованих кількома донорними та акцепторними домішками. При цьому будемо виходити із уявлень зонної теорії провідності твердих тіл.

**1. Механізми електричної провідності твердих тіл.** Зонна теорія [8] пояснює властивості твердих тіл, виходячи із атомно-молекулярної та кристалографічної їх будови.

Як відомо з квантової механіки, енергія електронів в атомах має дискретну (тобто квантову) множину значень. Дискретними також є множини допустимих значень імпульсу, моменту імпульсу та спіну електрона.

Таким чином, стан електрона в атомі визначається четвіркою параметрів (квантовими числами), які приймають значення з дискретних множин. Множини дозволених значень енергії електронів в атомах (іх називають ор-

біталями, атомними оболонками чи рівнями енергії), взагалі кажучи, різні для різних хімічних елементів.

Відомий принцип Паулі, за яким в системі не може бути електронів із однаковим набором всіх чотирьох квантових чисел. Тому, коли однотипні атоми зближують на відстані, на яких стає можливою їх взаємодія, рівні енергії зовнішніх оболонок у різних атомах зміщуються на різні величини, забезпечуючи таким чином виконання принципу Паулі. В результаті кожен рівень розщеплюється в дискретну зону, яка містить стільки рівнів енергії, скільки атомів об'єднано в систему. Оскільки густина атомів в твердих тілах має порядок  $10^{28} \text{ м}^{-3}$ , а ширина дозволеної зони має порядок одного електронволта ( $1 \text{ eV} = 10^{-19} \text{ Дж}$ ), то відстань між рівнями енергії в цих зонах є малою, тому їх називають квазінеперервними.

Дозволені енергетичні зони в твердому тілі можуть розділятися проміжками значень енергії, яку електрони не можуть набувати, їх називають забороненими зонами.

На макроскопічні властивості твердих тіл, які обумовлюються рухливими електронами (електропровідність, теплопровідність, обмінна сила взаємодія з граткою тощо), вирішальним чином впливають енергетичні зони, що утворюються із останньої заповненої електронами атомної оболонки (валентна зона) і наступної оболонки (зона провідності), а також проміжок енергії, що їх розділяє (заборонена зона). Саме параметрами цих трьох зон визначається, до якого класу твердих тіл належить об'єкт – діелектриків, напівпровідників чи металів.

У діелектриків і напівпровідників валентна зона повністю зайнята електронами (кількість дискретних рівнів енергії в зоні дорівнює кількості валентних електронів). Ці два класи твердих тіл відрізняються лише шириною забороненої зони – в напівпровідників заборонена зона вужча, внаслідок цього за достатньо високих температур значна кількість електронів набуває теплову енергію, достатню для подолання потенціального бар'єру забороненої зони. Цим, зокрема, і обумовлюється значна температурна залежність електропровідності цих тіл та внутрішній фотоефект – збільшення електропровідності під дією світла. В останньому випадку вільні носії струму утворюються за рахунок передачі енергії квантів світла (фотонів) електронам валентної зони та переходу цих електронів в зону провідності. У металів валентна зона лише частково заповнена електронами, отже, вони мають можливість збільшувати свою енергію в межах зони, наприклад під дією електричного поля, і переміщатись, таким чином, по цілому об'єму тіла, здійснюючи процеси електро- та теплопровідності навіть за кріогенних температур.

Отже, якщо в напівпровіднику якась кількість електронів потрапляє в зону провідності, подолавши потенціальний бар'єр забороненої зони (чи то за рахунок власної теплової енергії, чи за рахунок поглинання енергії світла), то ці електрони отримують здатність змінювати свою енергію в межах зони провідності під дією зовнішніх полів і переміщатись по всій області, зайнятій тілом.

Водночас у валентній зоні внаслідок переходу частини електронів в зону провідності з'являється відповідна кількість незайнятих енергетичних рівнів. Отже, електрони валентної зони набувають можливість переміщатись в об'ємі тіла. Переважно кількість електронів у валентній зоні значно перевищує кількість вакантних енергетичних рівнів. Тому рух електронів в цій зоні буває зручніше описувати рухом вакансій (незайнятих рівнів енергії), увівши у розгляд позитивно заряджені частинки – дірки, кількість яких дорівнює кількості вакантних рівнів. Отже, в напівпровідниках, на відміну від металів, можливі два типи провідності – електронна та діркова.

Механізм провідності, обумовлений переходом електронів із валентної зони в зону провідності, за якого утворюються рівні кількості вільних електронів і дірок, називається власною провідністю.

Домішковий тип провідності в напівпровідниках реалізується за рахунок вільних носіїв струму (електронів, дірок), які утворюються за рахунок домішкових атомів, які мають на своїх зовнішніх оболонках більшу або меншу кількість валентних електронів, ніж атоми основного матеріалу. Розглянемо цей тип провідності на прикладі кремнію (Si) – найпоширенішого зараз у технічних застосуваннях напівпровідника. Кремній як елемент IV групи таблиці Менделєєва має чотири валентних електрони і утворює ковалентні кристали. Ковалентний (парноелектронний) зв'язок у твердих тілах здійснюється таким чином, що кожен атом віддає четвірці своїх найближчих сусідів у спільне користування по одному електрону із зовнішньої (валентної) оболонки. В результаті кожен внутрішній атом твердого тіла має на зовнішній оболонці вісім електронів – утворюється стійка конфігурація інертних газів. Енергія зв'язку електронів з атомами в цій конфігурації складає  $\sim 1.12 \text{ eV}$  (ширина забороненої зони). Середня енергія теплового руху, яка визначається як  $k_B T$  (де  $k_B$  – стала Больцмана,  $T$  – температура), при  $T = 300 \text{ K}$  дорівнює  $0.026 \text{ eV}$ , отже, за такої температури частка електронів, здатних подолати заборонену зону, є незначною ( $\sim 2 \cdot 10^{-19}$ ), тому кремній є діелектриком за таких умов (густина електронів і дірок складає  $\sim 10^9 \text{ m}^{-3}$ ).

Нехай частина атомів в гратці кристалу кремнію заміщена атомами іншого елемента, наприклад фосфору (P), який належить до V групи таблиці Менделєєва, тобто має на своїй зовнішній оболонці п'ять валентних електронів. Чотири електрони домішкового атома включаються у ковалентний зв'язок із своїми найближчими сусідами, а п'ятий електрон, що не вкладається у стійку конфігурацію, має значно меншу енергію зв'язку ( $\sim 0.044 \text{ eV}$ ) із своїм атомом, ніж ті чотири, що здійснюють ковалентний зв'язок. На зонній схемі цим електронам відповідають рівні енергії (домішкові центри), що розміщені в забороненій зоні поблизу нижнього краю зони провідності. При кімнатній температурі частка електронів, локалізованих на домішкових центрах, що мають теплову енергію, достатню для подолання цього енергетичного бар'єру, вже становить  $\sim 0.18$ , тому при концентрації домішки  $10^{24} \text{ m}^{-3}$  густина вільних електронів становитиме  $1.8 \cdot 10^{23} \text{ m}^{-3}$ . Гратка при цьому стає додатно зарядженою. Домішки такого типу називають донорними.

Якщо кремній легований атомами III групи, що, як відомо, мають три валентних електрони, то в околі домішкового атома утворюється дозволений рівень енергії, розміщений в забороненій зоні поблизу стелі зони провідності. Енергетична ціліна між цим рівнем і валентною зоною, наприклад у випадку, коли домішками є атоми бору (B), має ширину  $0.046 \text{ eV}$ . Отже, значна частка ( $\sim 0.17$ ) електронів із валентної зони може подолати цей потенціальний бар'єр, створюючи вакантні енергетичні рівні у валентній зоні, внаслідок чого виникає діркова провідність. Електрони, локалізовані на домішкових центрах, роблять гратку від'ємно зарядженою. Ці домішки є акцепторними.

Донорні та акцепторні рівні в напівпровідниках можуть створювати не тільки домішкові атоми, але й дефекти кристалічної структури – точкові дефекти, дислокації, границі розділу різномірідних тіл, вільні поверхні тощо. Зонний спектр напівпровідника може включати декілька різних донорних і акцепторних енергетичних рівнів, обумовлених домішками та дефектами.

**2. Опис локально нерівноважних станів у моделі взаємопроникних континуумів.** Застосування припущення про локальну термодинамічну квазірівновагу, яке ефективно використовується в моделях гомогенних систем, до опису нерівноважних процесів в багатоконтинуумних середовищах, таких, зокрема, як електропровідні тверді тіла, суттєво звужує сферу застосування цих моделей, оскільки розгляд обмежується лише такими нерівно-

важними станами, за яких локальна нерівноважність між різними підсистемами твердого тіла (наприклад, між електронами та граткою) є незначною, так що з достатньою точністю виконуються умови термодинамічної рівноваги для макроелемента тіла в цілому. Справді, якщо електропровідне тіло виведене із стану рівноваги, то новий рівноважний стан у ньому встановлюється як внаслідок процесів, що протикають в кожній підсистемі, так і в результаті взаємодії підсистем. Оскільки підсистеми відрізняються не тільки за їх фізичними характеристиками, але й за своєю природою, то часи релаксації процесів у підсистемах і взаємодії підсистем, взагалі кажучи, не співпадають. Можливі, зокрема, такі ситуації, коли рівновага в підсистемах наступає задовго до встановлення рівноваги в тілі в цілому. Так, якщо часи релаксації імпульсу та енергії  $\tau_{(as)}^p$ ,  $\tau_{(as)}^\varepsilon$  процесів взаємодії носіїв струму з граткою пов'язані з часом релаксації імпульсу електронної підсистеми  $\tau_{(aa)}$  співвідношенням [8]

$$\tau_{(aa)} \ll \tau_{(as)}^p \ll \tau_{(as)}^\varepsilon, \quad (1)$$

то для відповідних груп носіїв можна вводити різні температури  $T_{(\alpha)}$ , які відрізняються від температури гратки  $T_{(s)}$ .

Можна виділити також інший специфічний тип локальної нерівноважності між підсистемами напівпровідника [8]. У рівноважному стані при заданому напруженено-деформованому стані кожному значенню температури  $T_{(\alpha)} = T$  відповідають певні рівноважні значення густин електронів  $n_{(n)}$  і дірок  $n_{(p)}$ , які є однозначними функціями їх хімічних потенціалів  $\mu_{(\alpha)}$ , температури  $T$  і напруженості деформованого стану. Зовнішньою дією, наприклад оптичним випромінюванням певної довжини хвилі при незмінній температурі  $T$ , однаковій для всіх підсистем, і фіксованому напруженому стані тіло може бути переведено в такий нерівноважний стан, коли густини електронів і дірок стають відмінними від своїх рівноважних значень. Такі нерівноважні стани можуть виникати також і внаслідок процесу електропровідності.

Зазначимо, що розглянуті тут випадки локальної нерівноважності між підсистемами характерні переважно для напівпровідників. У випадку металів співвідношення між часами релаксації електронних та електро-граткових процесів таке, що у більшості випадків справджується припущення про локальну квазірівновагу в тілі.

Отже, при розгляді напівпровідникових тіл більш загальним є припущення про локальну термодинамічну квазірівновагу в кожній підсистемі тіла при локально нерівноважному стані тіла в цілому. Це означає, що дляожної із підсистем твердого тіла з достатньою точністю локально виконуються термодинамічні співвідношення, справедливі для рівноважних макросистем тієї ж природи.

**3. Рівняння Гіббса та параметри стану.** У рамках фізичних уявлень, які викладено у **п. 1**, та на підставі міркувань **п. 2** напівпровідник можна розглядати як термодинамічну систему, що складається з кількох взаємопроникних підсистем (континуумів) – твердої деформівної гратки й носіїв заряду різних типів (електронів дірок). Дляожної із цих підсистем встановлено основне термодинамічне співвідношення – рівняння Гіббса. Для підсистем носіїв струму, які розглядали у наближенні газів заряджених частинок, ці рівняння мають вигляд

$$du_{(\alpha)} = T_{(\alpha)} ds_{(\alpha)} - p_{(\alpha)} dv_{(\alpha)}, \\ \alpha \in \{n1, n2, \dots, nN_n, p1, p2, \dots, pN_p\}, \quad (2)$$

де  $u_{(\alpha)}$  та  $s_{(\alpha)}$  – питомі внутрішня енергія та ентропія  $\alpha$ -підсистеми;  $T_{(\alpha)}$  та  $p_{(\alpha)}$  – її температура та тиск;  $v_{(\alpha)} = n_{(\alpha)}^{-1}$ ,  $n_{(\alpha)}$  – густина носіїв струму;  $n1, n2, \dots, nN_n$  – індекси, що вказують на підсистеми електронів різних сортів;  $p1, p2, \dots, pN_p$  – індекси, що вказують на підсистеми дірок різних сортів.

Рівняння (2), записані стосовно густин екстенсивних параметрів  $u_{(\alpha)}^* = n_{(\alpha)} u_{(\alpha)}$ ,  $s_{(\alpha)}^* = n_{(\alpha)} s_{(\alpha)}$ , мають вигляд

$$du_{(\alpha)}^* = T_{(\alpha)} ds_{(\alpha)}^* + \eta_{(\alpha)} dn_{(\alpha)},$$

$$\alpha \in \{n1, n2, \dots, nN_n, p1, p2, \dots, pN_p\}. \quad (3)$$

Тут  $\eta_{(\alpha)}$  – електрохімічний потенціал  $\alpha$ -підсистеми, відрахований від екстремуму відповідної зони (енергії Фермі):

$$\eta_{(\alpha)} = \eta_{(\alpha)} - E_{(\alpha)}^0, \quad \alpha \in \{n1, n2, \dots, nN_n\},$$

$$\eta_{(\alpha)} = -\eta_{(\alpha)} + E_{(\alpha)}^0, \quad \alpha \in \{p1, p2, \dots, pN_p\}, \quad (4)$$

де  $\mu_{(\alpha)}$  – електрохімічний потенціал носіїв  $\alpha$ -підсистеми.

Крім диференціальних співвідношень (2), (3), справджаються також рівняння

$$u_{(\alpha)} = T_{(\alpha)} s_{(\alpha)} - p_{(\alpha)} v_{(\alpha)} + \eta_{(\alpha)},$$

$$u_{(\alpha)}^* = T_{(\alpha)} s_{(\alpha)}^* - p_{(\alpha)} + \eta_{(\alpha)} n_{(\alpha)}. \quad (5)$$

Звідси, зокрема випливає, що параметр  $\eta_{(\alpha)}$  є термодинамічним потенціалом, який пов'язаний з вільною енергією  $u_{(\alpha)}$  таким перетворенням Лежандра:

$$\eta_{(\alpha)} = u_{(\alpha)} - T_{(\alpha)} s_{(\alpha)} + p_{(\alpha)} v_{(\alpha)}. \quad (6)$$

Беручи до уваги рівняння Гіббса (3), із співвідношення (6) отримуємо таку формулу для повного диференціалу функції  $\eta_{(\alpha)}$ :

$$d\eta_{(\alpha)} = -s_{(\alpha)} dT_{(\alpha)} + v_{(\alpha)} dp_{(\alpha)}, \quad (7)$$

яка відома як рівняння Гіббса – Дюгема [7].

Використовуючи перетворення Лежандра

$$f_{(\alpha)} = u_{(\alpha)} - T_{(\alpha)} s_{(\alpha)},$$

$$f_{(\alpha)}^* = u_{(\alpha)}^* - T_{(\alpha)} s_{(\alpha)}^*, \quad (8)$$

отримуємо такі подання для диференціала вільної енергії:

$$df_{(\alpha)} = -s_{(\alpha)} dT_{(\alpha)} - p_{(\alpha)} dv_{(\alpha)},$$

$$df_{(\alpha)}^* = -s_{(\alpha)}^* dT_{(\alpha)} + \eta_{(\alpha)} dn_{(\alpha)}. \quad (9)$$

Для кристалічної ґратки, яку розглядали в наближенні пружного континууму, отримали таке рівняння Гіббса:

$$du_{(s)} = T_{(s)} ds_{(s)} + \rho^{-1} \left( \sum_{i,j=1}^3 \sigma_{(ss)}^{ij} d\varepsilon_{ij} + \sum_{i=1}^{N_n} E_{(ni)}^0 dn_{(ni)} - \sum_{i=1}^{N_p} E_{(pi)}^0 dn_{(pi)} - \sum_{i=1}^{N_d} E_i^d dn_i^d + \sum_{i=1}^{N_a} E_i^a dn_i^a \right). \quad (10)$$

Тут  $u_{(s)}$  та  $s_{(s)}$  – питомі внутрішня енергія та ентропія ґраткової підсистеми;  $T_{(a)}$  та  $\rho$  – її температура та густина мас;  $\sigma_{(ss)}^{ij}$  та  $\varepsilon_{ij}$  – декартові компоненти тензорів напружень та деформації для  $s$ -континууму;  $E_{(ni)}^0$  – мінімальна енергія зони провідності для  $i$ -ї групи електронів;  $n_{(ni)}$  – густина носіїв  $i$ -ї групи електронів;  $E_{(pi)}^0$  – максимальна енергія валентної зони для  $i$ -ї групи дірок;  $n_{(pi)}$  – густина носіїв струму для  $i$ -ї групи дірок;  $E_i^d$  – енергія  $i$ -го донорного рівня;  $n_i^d$  – густина електронів, локалізованих на  $i$ -му донорному рівні;  $E_i^a$  – енергія  $i$ -го акцепторного рівня;  $n_i^a$  – густина електронів, локалізованих на  $i$ -му акцепторному рівні.

Перший та другий доданки у рівнянні (10) враховують приплив тепла та пружну енергію ґратки. Решта доданків враховують обмінну взаємодію між ґраткою та підсистемами носіїв заряду: третій та четвертий – зміни її внутрішньої енергії внаслідок зміни кількості носіїв струму у зоні провідності та валентній зоні, а п'ятий і шостий – у зв'язку зі змінами густин електронів, локалізованих на домішкових рівнях.

Рівняння (10), записане стосовно густин екстенсивних параметрів  $u_{(s)}^* = \rho u_{(s)}$ ,  $s_{(s)}^* = \rho s_{(s)}$ , має вигляд

$$du_{(s)}^* = T_{(s)} ds_{(s)}^* + \sum_{i,j=1}^3 \sigma_{(ss)}^{ij} d\varepsilon_{ij} + \sum_{i=1}^{N_n} E_{(ni)}^0 dn_{(ni)} - \sum_{i=1}^{N_p} E_{(pi)}^0 dn_{(pi)} - \\ - \sum_{i=1}^{N_d} E_i^d dn_i^d + \sum_{i=1}^{N_a} E_i^a dn_i^a . \quad (11)$$

Вводячи вільну енергію для ґратки з використанням перетворення Лежандра

$$f_{(s)}^* = u_{(s)}^* - T_{(s)} s_{(s)}^* , \quad (12)$$

перепишемо рівняння Гіббса (11) у вигляді

$$df_{(s)}^* = -s_{(s)}^* dT_{(s)} + \sum_{i,j=1}^3 \sigma_{(ss)}^{ij} d\varepsilon_{ij} + \sum_{i=1}^{N_n} E_{(ni)}^0 dn_{(ni)} - \sum_{i=1}^{N_p} E_{(pi)}^0 dn_{(pi)} - \\ - \sum_{i=1}^{N_d} E_i^d dn_i^d + \sum_{i=1}^{N_a} E_i^a dn_i^a . \quad (13)$$

Слід підкреслити, що, оскільки ширина забороненої зони зазвичай значно більша від енергії активації домішок, то в діапазоні температур, у якому відбувається активізація домішкових центрів, перехід носіїв із валентної зони у зону провідності практично відсутній, тобто у рівняннях (10), (11) треба покласти  $dn_{(ni)} = 0$ ,  $dn_{(pi)} = 0$ . Тоді рівняння (11) набуває вигляду

$$du_{(s)}^* = T_{(s)} ds_{(s)}^* + \sum_{i,j=1}^3 \sigma_{(ss)}^{ij} d\varepsilon_{ij} - \sum_{i=1}^{N_d} E_i^d dn_i^d + \sum_{i=1}^{N_a} E_i^a dn_i^a . \quad (14)$$

У цьому випадку реалізується чисто домішкова провідність.

З підвищеннем температури в діапазоні її змін, коли перехід електронів із валентної зони в зону провідності стає істотним, домішкові центри вже цілком активізовані, тобто  $dn_i^d = 0$ ,  $dn_i^a = 0$ , і рівняння Гіббса для

граткової підсистеми виглядатиме так:

$$du_{(s)}^* = T_{(s)} ds_{(s)}^* + \sum_{i,j=1}^3 \sigma_{(ss)}^{ij} d\varepsilon_{ij} + \sum_{i=1}^{N_n} E_{(ni)}^0 dn_{(ni)} - \sum_{i=1}^{N_p} E_{(pi)}^0 dn_{(pi)}. \quad (15)$$

За таких умов у напівпровіднику існує змішана провідність.

За достатньо високих температур у напівпровідниках з достатньо низькою концентрацією домішкових атомів у гратці кількість вільних носіїв струму, обумовлених домішками, є малою у порівнянні з вільними носіями, які утворилися внаслідок переходів між валентною зоною та зоною провідності. У цьому випадку реалізується власна провідність. Для власного напівпровідника рівняння Гіббса для граткової підсистеми має вигляд (15). Зокрема, коли у кожній із двох дозволених зон є лише по одному типу носіїв струму, це рівняння набуває вигляду

$$du_{(s)}^* = T_{(s)} ds_{(s)}^* + \sum_{i,j=1}^3 \sigma_{(ss)}^{ij} d\varepsilon_{ij} + E_{(n)}^0 dn_{(n)} - E_{(p)}^0 dn_{(p)}, \quad (16)$$

у якому його отримано в праці [21].

Термодинамічні співвідношення (2)–(9) для підсистем носіїв струму залишаються незмінними для випадків домішкової, змішаної та власної провідності напівпровідника.

Отримані рівняння Гіббса визначають параметри локального термодинамічного стану напівпровідника, які відповідають процесам деформації, тепlopровідності, електропровідності та генерації-рекомбінації вільних носіїв струму. Визначені в такий спосіб параметри стану мають прозорий фізичний зміст і обґрутовані в рамках мікроскопічної теорії. Ці співвідношення є підставою для виведення рівнянь стану моделі. З рівнянь (9) і (13), які визначають повні диференціали відповідних функцій, випливають, зокрема, співвідношення

$$\begin{aligned} s_{(\alpha)}^* &= -\left( \frac{\partial f_{(\alpha)}^*}{\partial T_{(\alpha)}} \right)_{\eta_{(\alpha)}}, & n_{(\alpha)} &= -\left( \frac{\partial f_{(\alpha)}^*}{\partial \eta_{(\alpha)}} \right)_{T_{(\alpha)}}, \\ s_{(s)}^* &= -\left( \frac{\partial f_{(s)}^*}{\partial T_{(s)}} \right)_{\{\varepsilon_{ij}\}, \{n_{(ni)}\}, \{n_{(pi)}\}, \{n_i^d\}, \{n_i^a\}}, & & \\ \sigma^{ij} &= \left( \frac{\partial f_{(s)}^*}{\partial \varepsilon_{ij}} \right)_{T_{(s)}, \{\varepsilon_{ij}\}', \{n_{(ni)}\}, \{n_{(pi)}\}, \{n_i^d\}, \{n_i^a\}}, & & \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} E_{ni}^0 &= \left( \frac{\partial f_{(s)}^*}{\partial n_{(ni)}} \right)_{T_{(s)}, \{\varepsilon_{ij}\}, \{n_{(ni)}\}', \{n_{(pi)}\}, \{n_i^d\}, \{n_i^a\}}, \\ E_{pi}^0 &= -\left( \frac{\partial f_{(s)}^*}{\partial n_{(pi)}} \right)_{\{\varepsilon_{ij}\}, \{n_{(ni)}\}, \{n_{(pi)}\}', \{n_i^d\}, \{n_i^a\}}, \\ E_i^d &= -\left( \frac{\partial f_{(s)}^*}{\partial n_i^d} \right)_{T_{(s)}, \{\varepsilon_{ij}\}, \{n_{(ni)}\}, \{n_{(pi)}\}, \{n_i^d\}', \{n_i^a\}'}, \\ E_i^a &= \left( \frac{\partial f_{(s)}^*}{\partial n_i^a} \right)_{T_{(s)}, \{\varepsilon_{ij}\}, \{n_{(ni)}\}, \{n_{(pi)}\}, \{n_i^d\}, \{n_i^a\}'}. \end{aligned} \quad (18)$$

Тут фігурні дужки позначають множини відповідних параметрів стану, фігурна дужка зі штрихом вказує на множину параметрів стану, з якої вилучено один елемент, який вказано в дужках.

Отже, якщо відомі функції  $f_{(\alpha)}^*, f_{(s)}^*$ , то за формулами (17) (18) можна встановити рівняння стану для усіх підсистем напівпровідника. У праці [14] отримано нелінійні рівняння стану для підсистем напівпровідника, коли спрощується рівняння Гіббса вигляду (16) для граткової підсистеми. Для отримання цих рівнянь використали методи статистичної фізики. Такий підхід прийнятний і у випадку напівпровідників, легованих донорними та акцепторними домішками, який тут розглядали.

**4. Виробництво ентропії, термодинамічні сили і потоки.** Повна система рівнянь моделі, крім отриманих рівнянь Гіббса, включає також систему балансових співвідношень для кожного континууму. При встановлені цих співвідношень слід врахувати взаємодію підсистем носіїв струму та гратки, взаємовплив процесів – механічних, теплових, електрофізичних і електромагнітних, процеси генерації-рекомбінації вільних носіїв струму тощо. Формування такої математичної моделі в рамках чисто феноменологічного макропідходу із використанням лише методів механіки суцільного середовища, термодинаміки нерівноважних процесів та макроскопічної термодинаміки є проблематичним, оскільки необхідно розглядати чинники, що мають мікрокопічну природу. Водночас така модель мусить бути придатною для постановки крайових задач дослідження фізико-механічних процесів у реальних тілах у термінах макроскопічних (спостережуваних) величин.

Для досягнення цієї мети в праці [27] застосували комбінований підхід. Опис нерівноважних процесів у підсистемах носіїв струму різних груп здійснено в термінах функцій розподілу  $f_{(\alpha)}$ , для яких з використанням концепції локального закону дисперсії отримали такі кінетичні рівняння, що враховують неоднорідну деформацію гратки:

$$\frac{df_{(\alpha)}}{dt} + \mathbf{v}_{(\alpha)} \cdot \nabla f_{(\alpha)} + \left( \mp \nabla E_{(\alpha)}^0 + \frac{1}{2} \mathbf{p}_{(\alpha)} \cdot (\nabla \mathbf{m}_{(\alpha)}^{-1}) \cdot \mathbf{p}_{(\alpha)} + q_{(\alpha)}^0 (\mathbf{E} + \mathbf{v}_{(\alpha)} \times \mathbf{B}) - m_0 \frac{\partial \mathbf{V}_{(s)}}{\partial t} \right) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f_{(\alpha)} = J_{(\alpha)}, \quad \alpha \in \{n1, n2, \dots, nN_n, p1, p2, \dots, pN_p\}. \quad (19)$$

Тут  $\mathbf{v}_{(\alpha)}$  та  $\mathbf{p}_{(\alpha)}$  – швидкість і квазімпульс – параметри мікрокопічного руху носіїв струму;  $\mathbf{m}_{(\alpha)}$  – тензор ефективної маси носіїв сорту  $\alpha$ , який пов’язує їх квазімпульс і мікрокопічну швидкість:  $\mathbf{p}_{(\alpha)} = \mathbf{m}_{(\alpha)} \cdot \mathbf{v}_{(\alpha)}$ ;  $q_{(\alpha)}^0$  – елементарний заряд квазічастинки (електрона, дірки);  $m_0$  – маса електрона;  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{B}$  – вектори напруженості електричного та індукції магнітного поля;  $\nabla_{\mathbf{p}}$  – оператор градієнта в просторі квазімпульсу;  $\mathbf{V}_{(s)}$  – швидкість локального макроскопічного руху граткової підсистеми;  $J_{(\alpha)k}$  – складова, що враховує процеси генерації-рекомбінації носіїв заряду на домішкових центрах, їх міждолинне розсіювання та розсіювання у межах однієї групи.

Відтак шляхом статистичного осереднення рівнянь (19) отримали балансові співвідношення гідродинамічного типу для підсистем носіїв струму:

$$\begin{aligned} \frac{dn_{(\alpha)}}{dt} &= -\nabla \cdot (n_{(\alpha)} \mathbf{V}_{(\alpha)}) + \Gamma_{(\alpha)}, \\ \frac{dn_{(\alpha)} \mathbf{P}_{(\alpha)}}{dt} &= -\nabla \cdot (n_{(\alpha)} \mathbf{V}_{(\alpha)} \mathbf{P}_{(\alpha)} - \mathbf{S}_{(\alpha)}) - n_{(\alpha)} \nabla E_{(\alpha)}^0 + \\ &\quad + q_{(\alpha)}^0 n_{(\alpha)} (\mathbf{E} + \mathbf{V}_{(\alpha)} \times \mathbf{B}) + n_{(\alpha)} \mathbf{t}_{(\alpha)} + \mathbf{P}_{(\alpha)} \Gamma_{(\alpha)}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{dn_{(\alpha)} u_{(\alpha)}}{dt} = & -\nabla \cdot (n_{(\alpha)} u_{(\alpha)} \mathbf{V}_{(\alpha)} - \mathbf{J}_{(\alpha)}^Q) + n_{(\alpha)} \mathbf{V}_{(\alpha)} \cdot (-\nabla E_{(\alpha)}^0 + q_{(\alpha)}^0 \mathbf{E}) + \\ & + n_{(\alpha)} W_{(\alpha)} + V_{(\alpha)} \cdot n_{(\alpha)} \mathbf{t}_{(\alpha)} + \Gamma_{(\alpha)} u_{(\alpha)}. \end{aligned} \quad (20)$$

Макроскопічні параметри  $\mathbf{V}_{(\alpha)}$ ,  $\mathbf{P}_{(\alpha)} = \mathbf{m}_{(\alpha)} \cdot \mathbf{V}_{(\alpha)}$ ,  $\mathbf{S}_{(\alpha)} = -p_{(\alpha)} \mathbf{I} + \Pi_{(\alpha)}$ ,  $u_{(\alpha)}$ ,

$\mathbf{J}_{(\alpha)}^Q$  у цих рівняннях мають зміст відповідно середньої (макроскопічної) швидкості руху  $\alpha$ -підсистеми в локальній системі відліку (зв'язаній з граткою), її питомого імпульсу, тензора напружень, питомої внутрішньої енергії, потоку тепла, а складові  $\Gamma_{(\alpha)}$ ,  $\mathbf{t}_{(\alpha)}$ ,  $W_{(\alpha)}$  визначають швидкості виникнення квазічастинок, імпульсу і енергії в  $\alpha$ -підсистемі.

Натомість, систему рівнянь балансу для кристалічної гратки отримали в рамках феноменологічного підходу з урахуванням її взаємодії з іншими підсистемами та електромагнітним полем:

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} = & -\rho \nabla \cdot \mathbf{V}_{(s)}, \\ \rho \frac{d\mathbf{V}_{(s)}}{dt} = & \nabla \cdot \mathbf{S}_{(s)} + \sum_{\alpha} n_{(\alpha)} \nabla E_{(\alpha)}^0 + q_{(s)} (\mathbf{E} + \mathbf{V}_{(s)} \times \mathbf{B}) + \rho \mathbf{t}_{(s)} - \sum_{\alpha} \mathbf{P}_{(\alpha)} \Gamma_{(\alpha)}, \\ \rho \frac{du_{(s)}}{dt} = & -\nabla \cdot \mathbf{J}_{(s)}^Q - \mathbf{S}_{(s)} \cdot \nabla \mathbf{V}_{(s)} + \sum_{\alpha} n_{(\alpha)} \mathbf{V}_{(s)} \cdot \nabla E_{(\alpha)}^0 + \\ & + q_{(s)} \mathbf{V}_{(s)} \cdot \mathbf{E} + \rho W_{(s)} + \rho \mathbf{V}_{(s)} \cdot \mathbf{t}_{(s)} - \sum_{\alpha} n_{(\alpha)} \Gamma_{(\alpha)}. \end{aligned} \quad (21)$$

Тут  $q_{(s)} = \sum_k q_k^0 (1 - f_k) N_k$  – макроскопічна густина заряду;  $\rho$  – густина мас;

$\mathbf{S}_{(s)} = \boldsymbol{\sigma}_{(s)} + \Pi_{(s)}$ ;  $\boldsymbol{\sigma}_{(s)}$  – тензор напружень гратки;  $\Pi_{(s)}$  – тензор міжконтинуумної взаємодії гратки з іншими підсистемами.

Джерела імпульсу  $\mathbf{t}_{(s)}$ ,  $\mathbf{t}_{(\alpha)}$  і енергії  $W_{(\alpha)}$ ,  $W_{(s)}$  у рівняннях (20), (21), що враховують взаємодію зіткнень носіїв із граткою, пов'язані співвідношеннями

$$\begin{aligned} \rho \mathbf{t}_{(s)} + \sum_{\alpha} n_{(\alpha)} \mathbf{t}_{(\alpha)} &= 0, \\ \rho W_{(s)} + \rho \mathbf{V}_{(s)} \cdot \mathbf{t}_{(s)} + \sum_{\alpha} (n_{(\alpha)} W_{(\alpha)} + \mathbf{V}_{(\alpha)} \cdot n_{(\alpha)} \mathbf{t}_{(\alpha)}) &= 0, \end{aligned} \quad (22)$$

які випливають безпосередньо із законів збереження імпульсу та енергії системи напівпровідник – електромагнітне поле.

Використовуючи систему балансових співвідношень та рівняння Гіббса для підсистем, отримаємо такий вираз для локального виробництва ентропії в напівпровіднику:

$$\begin{aligned} \sigma = & \mathbf{J}_{(s)}^Q \cdot \mathbf{X}_{(s)}^Q + \sum_{\alpha} \left( \Pi_{(\alpha s)} \cdot \mathbf{X}_{(\alpha s)}^{\Pi} + \mathbf{J}_{(\alpha)}^Q \cdot \mathbf{X}_{(\alpha)}^Q + \mathbf{t}_{(\alpha)} \cdot \mathbf{X}_{(\alpha)}^t + \right. \\ & \left. + W_{(\alpha)} X_{(\alpha)}^W + \sum_{\beta} \Gamma_{(\alpha \beta)} X_{(\alpha \beta)}^{\Gamma} + \sum_k \Gamma_{(\alpha)k} X_{(\alpha)k}^{\Gamma} \right). \end{aligned} \quad (23)$$

Тут використано позначення

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_{(\alpha)}^{\Pi} &= -\frac{\nabla \mathbf{V}_{(\alpha)}}{T_{(\alpha)}}, & \mathbf{X}_{(\alpha)}^t &= -\frac{\mathbf{V}_{(\alpha)}}{T_{(\alpha)}}, \\ \mathbf{X}_{(\alpha)}^Q &= -\frac{\nabla T_{(\alpha)}}{T_{(\alpha)}^2}, & \mathbf{X}_{(s)}^Q &= -\frac{\nabla T_{(s)}}{T_{(s)}^2}, & X_{(\alpha)}^W &= -\left( \frac{1}{T} - \frac{1}{T_{(\alpha)}} \right), \\ X_{(\alpha \beta)}^{\Gamma} &= -\left( \frac{\mu_{(\alpha)}}{T_{(\alpha)}} - \frac{\mu_{(\beta)}}{T_{(\beta)}} \right), & X_{(\alpha)k}^{\Gamma} &= -\left( \frac{\mu_{(\alpha)}}{T_{(\alpha)}} - \frac{\mu_k}{T} \right), \end{aligned} \quad (24)$$

$\Gamma_{(\alpha\alpha i)}$  – швидкість перерозподілу носіїв в межах дозволеної зони;  $\Gamma_{(\alpha)k}$  – швидкість генерації-рекомбінації на  $k$ -му центрі;  $\Gamma_{(\alpha\beta)}$  – швидкість міжзонної генерації-рекомбінації;  $\Gamma_{(\alpha)} = \sum_{\alpha i \neq \alpha} \Gamma_{(\alpha\alpha i)} + \sum_k \Gamma_{(\alpha)k} + \sum_k \Gamma_{(\alpha\beta)}$ .

Відповідно до структури виразу для виробництва ентропії (23) параметри  $\mathbf{J}_\lambda \in \{\mathbf{J}_{(\alpha)}^Q, \mathbf{t}_{(\alpha)}, W_{(\alpha)}, \Gamma_{(\alpha\beta)}, \Gamma_{(\alpha)k}\}$  розглядаємо як термодинамічні потоки, а  $\mathbf{X}_\lambda \in \{\mathbf{X}_{(\alpha)}^Q, \mathbf{X}_{(\alpha)}^t, X_{(\alpha)}^W, X_{(\alpha\beta)}^\Gamma, X_{(\alpha)k}^\Gamma\}$  – як спряжені до них термодинамічні сили. Згідно із принципами термодинаміки необоротних процесів термодинамічні потоки пов'язані із термодинамічними силами кінетичними співвідношеннями.

Таким чином, розвинуту термодинамічну теорію деформації напівпровідникових тіл, легованих донорними та акцепторними домішками, яка враховує взаємодію механічних процесів з тепловими та електромагнітними, обмінну деформаційну взаємодію між підсистемами носіїв струму та граткою, відхилення від локальної термодинамічної рівноваги між підсистемами, залежність характеристик матеріалу від температури, деформації, концентрації домішок.

1. Бурак Я. И. Дифференциальные уравнения термодинамических процессов в деформируемом теплоэлектропроводном твердом теле // Физ.-хим. механика материалов. – 1966. – 2, № 4. – С. 371–377.
2. 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.
3. Бурак Я. И., Чекурин В. Ф. Основы трехконтинуумной теории деформации собственных полупроводников // Прикл. механика. – 1981. – 17, № 1. – С.14–20.
4. Бурак Я. И., Чекурин В. Ф. Термодинамическая модель собственного полупроводника // Тр. 9-го совещ. по теории полупроводников. – Тбилиси, 1978. – С. 77–78.
5. Бурак Я. И., Чекурин В. Ф. Физико-механические поля в полупроводниках. Математические основы теории. – Киев: Наук. думка, 1987. – 264 с.
6. Бурак Я. Й., Галапац Б. П., Гнідець Б. М. Фізико-механічні процеси в електропровідних тілах. – Київ: Наук. думка, 1978. – 230 с.
7. Гроот С. де, Мазур П. Неравновесная термодинамика. – Москва: Мир, 1964. – 456 с.
8. Зеегер К. Физика полупроводников. – Москва: Мир, 1977. – 616 с.
9. Подстригач Я. С., Бурак Я. И., Галапац Б. П., Гнідець Б. М. Исходные уравнения теории деформации электропроводных твердых растворов // Мат. методы и физ.-мех. поля. – 1975. – Вып. 1. – С. 22–29.
10. Стельмах О. Б., Чекурин В. Ф. Поверхностная релаксация энергии и эффект Бенедикса в полупроводниках // Физика и техника полупроводников. – 1988. – 22, № 9. – С. 1698–1699.
11. Стельмах О. Б., Чекурин В. Ф. Уравнения механотермоэлектрических процессов в полупроводниках, легированных примесью одного типа // Мат. методы и физ.-мех. поля. – 1988. – Вып. 28. – С. 14–18.
12. Стельмах О. Б., Чекурин В. Ф. Поверхневе остигання носіїв та поперечний термоелектричний ефект у напівпровідниках // Укр. фіз. журн. – 1991. – 33, № 10. – С. 1545–1548.
13. Чекурин В. Ф. Математическое моделирование процессов переноса в неравновесных деформируемых узкозонных полупроводниках // Полупроводники с узкой запрещенной зоной и полуметаллы: Материалы V Всесоюз. симп. – Львов, 1980. – Ч. 1. – С. 242–244.
14. Чекурин В. Ф. Нелинейные уравнения состояния для трехконтинуумной модели полупроводника // Мат. методы и физ.-мех. поля. – 1983. – Вып. 18. – С. 43–48.
15. Чекурин В. Ф. Об одном подходе к описанию локального термодинамического состояния твердых тел // Мат. методы и физ.-мех. поля. – 1992. – Вып. 35. – С. 57–62.
16. Чекурин В. Ф. Определение и исследование напряженного состояния беспримесных полупроводников с учетом влияния тепловых и электромагнитных процессов: Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук / ИППММ АН УССР. – Львов, 1982. – 18 с.

17. Чекурин В. Ф. Основы теории переноса в полупроводниках при больших градиентах температуры и деформации // Термодинамика необратимых процессов. – Москва: Наука, 1992. – С. 157–163.
18. Чекурин В. Ф. Пьезорезистивный эффект при динамическом деформировании многодолинных полупроводников // Физика и техника полупроводников. – 1991. – **25**, № 4. – С. 743 – 745.
19. Чекурин В. Ф. Термодинамическое описание явлений переноса в деформируемых полупроводниках. Многоконтинуумный подход // Термодинамика необратимых процессов и ее применение. – Черновцы, 1984. – С. 277–278.
20. Чекурин В. Ф. Трехконтинуумный подход к исследованию физико-механических процессов в собственных полупроводниках // V Всесоюз. съезд по теорет. и прикл. механике, Алма-Ата, 27 мая – 03 июня 1981. – Алма-Ата, 1981. – С. 353.
21. Чекурин В. Ф. Уравнения состояния трехконтинуумной модели собственного полупроводника // Мат. методы и физ.-мех. поля. – 1980. – Вып. 11. – С. 85–89.
22. Чекурин В. Ф. Уравнения термодинамических процессов в деформируемых полупроводниках. Диффузионная модель // Мат. методы и физ.-мех. поля. – 1981. – Вып. 14. – С. 30–33.
23. Чекурин В. Ф., Носалик Б. Я. К описанию термомеханических процессов в полупроводниках с учетом переноса энергии излучением // Мат. методы и физ.-мех. поля. – 1989. – Вып. 29. – С. 37–41.
24. Чекурин В. Ф., Стельмах О. Б. Размерный эффект в термоэдс полупроводниковых пленок // Поверхность. Физика, химия, механика. – 1990. – № 5. – С. 152–154.
25. Чекурин В. Ф., Стельмах О. Б. Разогрев электронного газа большими градиентами температуры и размерные термоэлектрические эффекты в полупроводниках // Мат. методы и физ.-мех. поля. – 1990. – Вып. 31. – С. 16–21.
26. Чекурін В. Ф. Математичні моделі і методи провідно-діелектричних тіл. – Автoreф. дис. ... докт. фіз.-мат. наук / ІППММ ім. Я. С. Підстригача НАН України. – Львів, 1998. – 34 с.
27. Чекурін В. Ф. Термодинамічна теорія кінетичних явищ у деформівних напівпровідниках. – Львів: ЛОНМІО, 1999. – 72 с.
28. Demiray H., Eringen A. C. Motion of an electron gas in conducting solids // Plasma Phys. – 1974. – **16**. – P. 589–602.
29. Lorensi H. G., Tiersten H. F. On the interaction of the electromagnetic field with heat conducting deformable semiconductors // J. Math. Phys. – 1975. – **16**, No. 4. – P. 938–957.
30. Maugin G., Daher W. Phenomenological theory of elastic semiconductors // Int. J. Eng. Sci. – 1986. – **24**, No. 5. – P. 703–732.
31. Tiersten H. F. Electric fields, deformable semiconductors and piezoelectric devices // The Mechanical Behaviour of Electromagnetic Solid Continua: Proc. IUTAM-IUPAP Symp., Paris, 1983. – Amsterdam-New-York, 1983. – P. 99–113.

### **МОДЕЛЬ ВЗАЙМОПРОНИКАЮЩИХ КОНТИНУУМОВ И ТЕРМОДИНАМИКА ДЕФОРМИРОВАНИЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВ**

*В рамках модели взаимопроникающих континуумов, используя представления зонной теории проводимости твердых тел, получены основные термодинамические соотношения для полупроводников, легированных несколькими донорными и акцепторными примесями. На этой основе установлены параметры локального термодинамического состояния, соответствующие процессам деформации, теплопроводности, электропроводности и генерации-рекомбинации свободных носителей тока.*

### **MODEL OF INTERPENETRATING CONTINUA AND THERMODYNAMICS OF DEFORMATION OF SEMICONDUCTORS**

*Within the framework of the model of interpenetrating continua using the concepts of the zone theory of conductivity of solids the basic thermodynamic relations for semiconductors doped by donor and acceptor impurities have been obtained. On this bases the parameters of local thermodynamic state corresponding to the processes of deformation, thermal conductivity, electric conductivity and free current carriers generation-recombination have been established.*