



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 108 за 2018 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Волков Ю.А., Иноземцева К.К.,
Марков М.Б., Тараканов И.А.

Алгоритм моделирования
радиационных
термомеханических
эффектов в приближении
Каттанео

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Алгоритм моделирования радиационных термомеханических эффектов в приближении Каттанео / Ю.А.Волков [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 108. 12 с. doi:[10.20948/prepr-2018-108](https://doi.org/10.20948/prepr-2018-108)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-108>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
им. М.В. КЕЛДЫША
Российской академии наук**

Ю.А. Волков, К.К. Иноземцева, М.Б. Марков, И.А. Тараканов

**Алгоритм моделирования
радиационных термомеханических эффектов
в приближении Каттанео**

Москва – 2018

Ю.А. Волков, К.К. Иноземцева, М.Б. Марков, И.А. Тараканов
Алгоритм моделирования радиационных термомеханических эффектов
в приближении Каттанео

Рассмотрено воздействие ионизирующего излучения на изделие микроэлектроники. Распространение тепла и механических напряжений представлено как единый процесс переноса фононов кристаллической решетки, электронов проводимости и дырок валентной зоны. Сформулирована связанная модель, основанная на уравнениях термоупругости. Переноса тепла описан законом сохранения энергии и уравнением Каттанео – следствием кинетического уравнения для фононов. Колебания решетки рассмотрены в приближении линейной теории упругости. Разработаны разностные схемы для решения уравнений модели.

Ключевые слова: ионизирующее излучение, термомеханический эффект, математическая модель.

Yu.A. Volkov, K.K. Inozemtseva, M.B. Markov, I.A. Tarakanov
The Algorithm for Modeling Radiation Thermomechanical Effects
in Cattaneo Approximation

The effect of ionizing radiation on a micro-electronics product is considered. The propagation of heat and mechanical stresses is presented as a single process for the transport of crystal lattice phonons, conduction electrons, and holes of the valence band. A related model based on the equations of thermoelasticity is formulated. The transport of heat is described by the law of conservation of energy and the Cattaneo equation, a consequence of the kinetic equation for phonons. Lattice vibrations are considered in the approximation of the linear theory of elasticity. Difference schemes for solving model equations are developed.

Key words: ionizing radiation, thermomechanical effect, mathematical model.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (грант № 17-01-00301).

Оглавление

Введение	3
1. Математическая модель термомеханических эффектов в кристаллах	4
2. Численные алгоритмы	7
Заключение.....	11
Список использованных источников	12

Введение

Воздействие импульса ионизирующего излучения на полупроводниковый кристалл сопровождается образованием в зоне проводимости избыточных электронов и, соответственно, дырок валентной зоны. Средняя энергия избыточных носителей заряда составляет величину порядка 1эВ , что существенно превосходит температуру решетки кристалла (0.025эВ). Энергия избыточных носителей при рассеянии переходит в оптические и акустические колебания решетки.

Характерные размеры изделий микроэлектроники диктуют необходимость учитывать конечность скорости распространения тепла в объекте уже на временах, сопоставимых с длительностью импульса воздействующего излучения. Кроме того, в состав изделий входят материалы, которые поглощают энергию излучения, в частности, тяжелые металлы. Это создает дополнительные источники нагрева на границах кристалла, составляющего активную зону изделия.

Данная работа представляет модель термомеханических процессов радиационного происхождения в кристаллах, учитывающую конечность скорости распространения тепла. Уравнения модели вытекают из связанной системы квантовых кинетических уравнений для электронов и фононов. Интегрирование кинетических уравнений для симметричной части функции распределения фононов по квазиимпульсу определяет закон сохранения энергии с учетом объемных источников. Для антисимметричной части функции распределения фононов интегрирование приводит к уравнению типа Каттанео [1] для потока энергии. Это уравнение содержит в качестве параметра среднее время фонон-фононного взаимодействия. Соответственно, средняя термическая скорость распространения энергии оказывается близкой к групповой скорости акустических фононов – основных переносчиков тепла в кристалле. Полная система содержит уравнения для смещений в кристаллах с кубической решеткой. Это позволяет определить температурные поля, потоки энергии, деформации и напряжения. Такой подход единообразно описывает процессы переноса во всех материалах изделия.

1. Математическая модель термомеханических эффектов в кристаллах

Рассмотрим модификацию закона Фурье, состоящую во введении задержки потока тепла [1]:

$$\lambda \nabla T(x, t) = -\mathbf{q}(x, t + \tau). \quad (1)$$

Здесь $T = T(x, t)$ – температура; $\mathbf{q} = \mathbf{q}(x, t)$ – вектор плотности потока тепла, зависящий от координаты x и времени t , λ – теплопроводность, зависящая от температуры, τ – время релаксации. В кремнии при нормальных условиях τ составляет величину порядка 10^{-11} с. После разложения в ряд по степеням τ и в линейном приближении уравнение (1) записывается в виде

$$\tau \partial \mathbf{q} / \partial t + \lambda \nabla T(x, t) = -\mathbf{q}(x). \quad (2)$$

При $\tau \rightarrow 0$ уравнение (2) сводится к закону Фурье. Вместе с законом сохранения энергии эти уравнения составляют систему, которая может быть записана в эквивалентной форме в виде гиперболического уравнения теплопроводности (телеграфного уравнения) [2].

Пусть w – плотность внутренней энергии. Введем понятие псевдотемпературы $T = w / C_v$, где C_v – теплоемкость единицы объема среды, зависящая от температуры, и обозначим Q – мощность, выделяющуюся в единице объема под воздействием излучения. Телеграфное уравнение можно записать в виде:

$$\tau \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{C_v} \operatorname{div}(\lambda \nabla T) + \frac{Q}{C_v} + \frac{\partial Q}{\partial t} \frac{\tau}{C_v}.$$

Модифицированное уравнение для потока тепла, в отличие от закона Фурье, описывает распространение возмущений температурного поля с конечной скоростью. Это позволяет описывать процессы, происходящие в результате кратковременного, но интенсивного облучения.

Будем использовать линейную теорию упругости для моделирования механических процессов в предположении, что деформации малы [3]. Пусть $\mathbf{u}(x, y, z) = (u_x, u_y, u_z)$ – смещение точки (x, y, z) , $u_{\mu\nu} = (\partial u_\mu / \partial x_\nu + \partial u_\nu / \partial x_\mu) / 2$ – деформации, $\sigma_{\alpha\beta}$ – тензор механических напряжений, ρ – плотность вещества, $\varphi = \text{div } \mathbf{u}$ – дилатация поля смещений. Закон Гука связывает напряжения с деформациями:

$$\sigma_{\alpha\beta} = \sum_{\mu,\nu} E_{\alpha\beta\mu\nu} u_{\mu\nu},$$

где $E_{\alpha\beta\mu\nu}$ – модули упругости второго порядка. Используя обобщенный закон Гука и подставляя напряжения в уравнение для упругих волн, получим постановку задачи в перемещениях:

$$\rho \frac{\partial^2 u_\alpha}{\partial t^2} = \sum_{\beta,\mu,\nu} E_{\alpha\beta\mu\nu} \frac{\partial^2 u_\nu}{\partial x_\beta \partial x_\mu}.$$

В рассматриваемой модели уравнения для кристалла кубической симметрии [4] с учетом источника выглядят следующим образом

$$\rho \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = c_{11} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + c_{44} \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) + (c_{12} + c_{44}) \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial x \partial z} \right) - \gamma_G \frac{\partial w}{\partial x},$$

$$\rho \frac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} = c_{11} \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + c_{44} \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} \right) + (c_{12} + c_{44}) \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y \partial x} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y \partial z} \right) - \gamma_G \frac{\partial w}{\partial y},$$

$$\rho \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} = c_{11} \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} + c_{44} \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} \right) + (c_{12} + c_{44}) \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial z \partial x} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z \partial y} \right) - \gamma_G \frac{\partial w}{\partial z},$$

где c_{11}, c_{12}, c_{44} – постоянные упругой жесткости кристаллов кубической симметрии в представлении Фойгта. При $c_{11} - c_{12} = 2c_{44}$ данная система принимает вид уравнений упругого изотропного континуума:

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = c_{44} \Delta \mathbf{u} + (c_{11} - c_{44}) \text{grad div } \mathbf{u} - \gamma_G \text{grad } w.$$

Последний член в уравнениях связан с градиентом температуры и обеспечивает связь уравнений деформации с уравнением теплопроводности, $\gamma_G = \alpha K / C_V$ – параметр Грюнайзена, $K = (c_{11} + 2c_{12}) / 3$ – модуль всестороннего сжатия, α – объемный коэффициент теплового расширения.

Для удобства перепишем систему в виде

$$\begin{aligned} \frac{1}{c_s^2} \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} &= A \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + B \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) + C \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial x \partial z} \right) - \frac{\gamma_G}{K} \frac{\partial w}{\partial x}, \\ \frac{1}{c_s^2} \frac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} &= A \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + B \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} \right) + C \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y \partial x} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y \partial z} \right) - \frac{\gamma_G}{K} \frac{\partial w}{\partial y}, \\ \frac{1}{c_s^2} \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} &= A \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} + B \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} \right) + C \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial z \partial x} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z \partial y} \right) - \frac{\gamma_G}{K} \frac{\partial w}{\partial z}, \end{aligned}$$

где $A = c_{11} / K$, $B = c_{44} / K$, $C = (c_{12} + c_{44}) / K$, а $c_s^2 = K / \rho$ – квадрат средней скорости звука в среде. После решения уравнений для смещений напряжения находим из обобщенного закона Гука:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= c_{11} \frac{\partial u_x}{\partial x} + c_{12} \frac{\partial u_y}{\partial y} + c_{12} \frac{\partial u_z}{\partial z} - \alpha K (T - T_0), \\ \sigma_{yy} &= c_{12} \frac{\partial u_x}{\partial x} + c_{11} \frac{\partial u_y}{\partial y} + c_{12} \frac{\partial u_z}{\partial z} - \alpha K (T - T_0), \\ \sigma_{zz} &= c_{12} \frac{\partial u_x}{\partial x} + c_{12} \frac{\partial u_y}{\partial y} + c_{11} \frac{\partial u_z}{\partial z} - \alpha K (T - T_0), \\ \sigma_{yz} &= \frac{c_{44}}{2} \left(\frac{\partial u_z}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial z} \right), \quad \sigma_{xz} = \frac{c_{44}}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right), \quad \sigma_{xy} = \frac{c_{44}}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right), \end{aligned}$$

где T_0 – температура недеформированного тела.

Предполагается, что в начальный момент времени тело не деформировано, а его температура совпадает с температурой окружающей среды. Таким образом, для деформаций справедливы нулевые граничные условия. На свободной границе напряжения считаются нулевыми.

2. Численные алгоритмы

Полная система уравнений имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{1}{c_s^2} \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} &= A \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + B \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) + C \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial x \partial z} \right) - \frac{\gamma_G}{K} \frac{\partial w}{\partial x}, \\ \frac{1}{c_s^2} \frac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} &= A \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + B \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} \right) + C \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial y \partial x} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y \partial z} \right) - \frac{\gamma_G}{K} \frac{\partial w}{\partial y}, \\ \frac{1}{c_s^2} \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} &= A \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} + B \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} \right) + C \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial z \partial x} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z \partial y} \right) - \frac{\gamma_G}{K} \frac{\partial w}{\partial z}, \\ \frac{\partial w}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{q} &= Q, \quad \tau \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \lambda \nabla \frac{w}{C_v} = -\mathbf{q}. \end{aligned}$$

Уравнения аппроксимируются на декартовой сетке из прямоугольных ячеек. Узлы сеток по каждой из координат занумерованы полуцелыми индексами $x_{i+1/2}$, $y_{j+1/2}$, $z_{k+1/2}$, середины отрезков – целыми x_i, y_j, z_k . Соответственно центр ячейки определяется тремя целыми индексами, вершина – тремя полуцелыми, ребра имеют индексацию $i, j+1/2, k+1/2$, грани занумерованы двумя целыми индексами и одним полуцелым $i, j, k+1/2$.

Сеточная вектор-функция, соответствующая полю смещений, и дилатация φ задаются в узлах: $\left(u_{x_{i+1/2}, y_{j+1/2}, z_{k+1/2}}, u_{y_{i+1/2}, j+1/2, k+1/2}, u_{z_{i+1/2}, j+1/2, k+1/2}} \right)$. Напряжения σ и потоки энергии \mathbf{q} задаются в центрах граней. Плотность энергии w , температура T и энерговыделение Q заменяются на средние по ячейке значения и приписываются к центрам ячеек.

Ниже на рис. 1 схематично изображена ячейка с отмеченными точками, к которым приписаны дискретные функции.

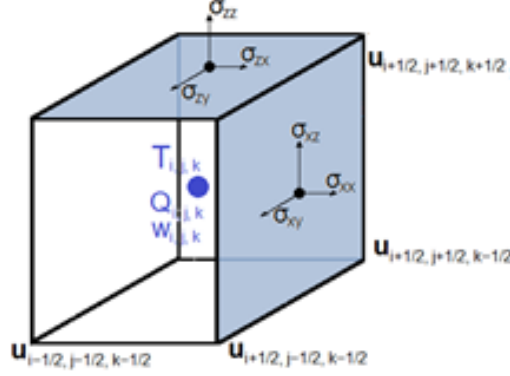


Рис. 1 – Схематичное изображение ячейки с сеточными функциями

Уравнения упругих деформаций решаются численно методом конечных разностей. Смешанные производные аппроксимируются полусуммой двух операторов, каждый из которых аппроксимирует производную с первым порядком точности в центрах граней, имеющих общую точку – искомый узел. В результате построенная разностная схема имеет второй порядок аппроксимации при постоянстве шагов по пространству и времени.

$$\begin{aligned}
 & \frac{(u_x)_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^{n+1} - 2(u_x)_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^n + (u_x)_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^{n-1}}{\Delta t^2} = \\
 & = A \frac{(u_x)_{i+1/3, j+1/2, k+1/2}^n - 2(u_x)_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^n + (u_x)_{i-1/2, j+1/2, k+1/2}^n}{\Delta x^2} + \\
 & + B \frac{(u_x)_{i+1/2, j+3/2, k+1/2}^n - 2(u_x)_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^n + (u_x)_{i+1/2, j-1/2, k+1/2}^n}{\Delta y^2} + \\
 & + B \frac{(u_x)_{i+1/2, j+1/2, k+3/2}^n - 2(u_x)_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^n + (u_x)_{i+1/2, j+1/2, k-1/2}^n}{\Delta z^2} + \\
 & + C \frac{(u_y)_{i+3/2, j+3/2, k+1/2}^n - (u_y)_{i+3/2, j-1/2, k+1/2}^n - (u_y)_{i-1/2, j+3/2, k+1/2}^n + (u_y)_{i-1/2, j-1/2, k+1/2}^n}{4\Delta x \cdot \Delta y} + \\
 & + C \frac{(u_z)_{i+3/2, j+1/2, k+3/2}^n - (u_z)_{i+3/2, j+1/2, k-1/2}^n - (u_z)_{i-1/2, j+1/2, k+3/2}^n + (u_z)_{i-1/2, j+1/2, k-1/2}^n}{4\Delta x \cdot \Delta z},
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{(u_y)_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^{n+1} - 2(u_y)_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^n + (u_y)_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^{n-1}}{\Delta t^2} = \\
& = A \frac{(u_y)_{i+1/2, j+3/2, k+1/2}^n - 2(u_y)_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^n + (u_y)_{i+1/2, j-1/2, k+1/2}^n}{\Delta y^2} + \\
& + B \frac{(u_y)_{i+3/2, j+1/2, k+1/2}^n - 2(u_y)_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^n + (u_y)_{i-1/2, j+1/2, k+1/2}^n}{\Delta x^2} + \\
& + B \frac{(u_y)_{i+1/2, j+1/2, k+3/2}^n - 2(u_y)_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^n + (u_y)_{i+1/2, j+1/2, k-1/2}^n}{\Delta z^2} + \\
& + C \frac{(u_x)_{i+3/2, j+3/2, k+1/2}^n - (u_x)_{i+3/2, j-1/2, k+1/2}^n - (u_x)_{i-1/2, j+3/2, k+1/2}^n + (u_x)_{i-1/2, j-1/2, k+1/2}^n}{4\Delta x \cdot \Delta y} + \\
& + C \frac{(u_z)_{i+1/2, j+3/2, k+3/2}^n - (u_z)_{i+1/2, j+3/2, k-1/2}^n - (u_z)_{i+1/2, j-1/2, k+3/2}^n + (u_z)_{i+1/2, j-1/2, k-1/2}^n}{4\Delta y \cdot \Delta z},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{(u_z)_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^{n+1} - 2(u_z)_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^n + (u_z)_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^{n-1}}{\Delta t^2} = \\
& = A \frac{(u_z)_{i+1/2, j+1/2, k+3/2}^n - 2(u_z)_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^n + (u_z)_{i+1/2, j+1/2, k-1/2}^n}{\Delta z^2} + \\
& + B \frac{(u_z)_{i+3/2, j+1/2, k+1/2}^n - 2(u_z)_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^n + (u_z)_{i-1/2, j+1/2, k+1/2}^n}{\Delta x^2} + \\
& + B \frac{(u_z)_{i+1/2, j+3/2, k+1/2}^n - 2(u_z)_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^n + (u_z)_{i+1/2, j-1/2, k+1/2}^n}{\Delta y^2} + \\
& + C \frac{(u_x)_{i+3/2, j+1/2, k+3/2}^n - (u_x)_{i+3/2, j+1/2, k-1/2}^n - (u_x)_{i-1/2, j+1/2, k+3/2}^n + (u_x)_{i-1/2, j+1/2, k-1/2}^n}{4\Delta x \cdot \Delta z} + \\
& + C \frac{(u_y)_{i+1/2, j+3/2, k+3/2}^n - (u_y)_{i+1/2, j+3/2, k-1/2}^n - (u_y)_{i+1/2, j-1/2, k+3/2}^n + (u_y)_{i+1/2, j-1/2, k-1/2}^n}{4\Delta y \cdot \Delta z}.
\end{aligned}$$

Выражения для напряжений также аппроксимируются методом конечных разностей. Получившиеся выражения для $\sigma_{\mu\nu}$, $\mu = x, \nu = x, y, z$ приведены ниже:

$$\begin{aligned}
& (\sigma_{xx})_{i+1/2, j, k}^n = \\
& = c_{11} \frac{(u_x)_{i+3/2, j+1/2, k+1/2}^n - (u_x)_{i-1/2, j+1/2, k+1/2}^n + (u_x)_{i+3/2, j-1/2, k+1/2}^n - (u_x)_{i-1/2, j-1/2, k+1/2}^n}{8\Delta x} + \\
& + c_{11} \frac{(u_x)_{i+3/2, j+1/2, k-1/2}^n - (u_x)_{i-1/2, j+1/2, k-1/2}^n + (u_x)_{i+3/2, j-1/2, k-1/2}^n - (u_x)_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}^n}{8\Delta x} + \\
& + c_{12} \frac{(u_y)_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^n - (u_y)_{i+1/2, j-1/2, k+1/2}^n + (u_y)_{i+1/2, j+1/2, k-1/2}^n - (u_y)_{i+1/2, j-1/2, k-1/2}^n}{2\Delta y} + \\
& + c_{12} \frac{(u_z)_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^n - (u_z)_{i+1/2, j+1/2, k-1/2}^n + (u_z)_{i+1/2, j-1/2, k+1/2}^n - (u_z)_{i+1/2, j-1/2, k-1/2}^n}{2\Delta z},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& (\sigma_{xy})_{i+1/2, j, k}^n = \\
& = \frac{c_{44}}{2} \frac{(u_x)_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^n - (u_x)_{i+1/2, j-1/2, k+1/2}^n + (u_x)_{i+1/2, j+1/2, k-1/2}^n - (u_x)_{i+1/2, j-1/2, k-1/2}^n}{2\Delta y} + \\
& + \frac{c_{44}}{2} \frac{(u_y)_{i+3/2, j+1/2, k+1/2}^n - (u_y)_{i-1/2, j+1/2, k+1/2}^n + (u_y)_{i+3/2, j-1/2, k+1/2}^n - (u_y)_{i-1/2, j-1/2, k+1/2}^n}{8\Delta x} + \\
& + \frac{c_{44}}{2} \frac{(u_y)_{i+3/2, j+1/2, k-1/2}^n - (u_y)_{i-1/2, j+1/2, k-1/2}^n + (u_y)_{i+3/2, j-1/2, k-1/2}^n - (u_y)_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}^n}{8\Delta x},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& (\sigma_{xz})_{i+1/2, j, k}^n = \\
& = \frac{c_{44}}{2} \frac{(u_x)_{i+1/2, j+1/2, k+1/2}^n - (u_x)_{i+1/2, j+1/2, k-1/2}^n + (u_x)_{i+1/2, j-1/2, k+1/2}^n - (u_x)_{i+1/2, j-1/2, k-1/2}^n}{2\Delta z} + \\
& + \frac{c_{44}}{2} \frac{(u_y)_{i+3/2, j+1/2, k+1/2}^n - (u_y)_{i-1/2, j+1/2, k+1/2}^n + (u_y)_{i+3/2, j-1/2, k+1/2}^n - (u_y)_{i-1/2, j-1/2, k+1/2}^n}{8\Delta x} + \\
& + \frac{c_{44}}{2} \frac{(u_y)_{i+3/2, j+1/2, k-1/2}^n - (u_y)_{i-1/2, j+1/2, k-1/2}^n + (u_y)_{i+3/2, j-1/2, k-1/2}^n - (u_y)_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}^n}{8\Delta x}.
\end{aligned}$$

Гиперболическое уравнение теплопроводности решается методом конечного объема. Интегрируя уравнения по ячейке с учетом соотношения $T_{i,j,k}^n = w_{i,j,k}^n / C_{i,j,k}^n$, получаем:

$$\begin{aligned} \tau \frac{(q_x)_{i+1/2,j,k}^{n+1/2} - (q_x)_{i+1/2,j,k}^{n-1/2}}{\Delta t} + \lambda \frac{T_{i+1,j,k}^n - T_{i,j,k}^n}{\Delta x} &= -\frac{(q_x)_{i+1/2,j,k}^{n-1/2} + (q_x)_{i+1/2,j,k}^{n+1/2}}{2}, \\ \tau \frac{(q_y)_{i,j+1/2,k}^{n+1/2} - (q_y)_{i,j+1/2,k}^{n-1/2}}{\Delta t} + \lambda \frac{T_{i,j+1,k}^n - T_{i,j,k}^n}{\Delta y} &= -\frac{(q_y)_{i,j+1/2,k}^{n-1/2} + (q_y)_{i,j+1/2,k}^{n+1/2}}{2}, \\ \tau \frac{(q_z)_{i,j,k+1/2}^{n+1/2} - (q_z)_{i,j,k+1/2}^{n-1/2}}{\Delta t} + \lambda \frac{T_{i,j,k+1}^n - T_{i,j,k}^n}{\Delta z} &= -\frac{(q_z)_{i,j,k+1/2}^{n-1/2} + (q_z)_{i,j,k+1/2}^{n+1/2}}{2}, \\ \frac{w_{ijk}^{n+1} - w_{ijk}^n}{\Delta t} + \frac{(q_x)_{i+1/2,j,k}^{n+1/2} - (q_x)_{i-1/2,j,k}^{n+1/2}}{\Delta x} + \frac{(q_y)_{i,j+1/2,k}^{n+1/2} - (q_y)_{i,j-1/2,k}^{n+1/2}}{\Delta y} + \\ &+ \frac{(q_z)_{i,j,k+1/2}^{n+1/2} - (q_z)_{i,j,k-1/2}^{n+1/2}}{\Delta z} = Q_{ijk}. \end{aligned}$$

Алгоритм проверен путем решения задачи о термоударе, которая в ряде случаев имеет точные решения. При моделировании термоудара считается, что вся энергия мгновенно выделилась в металле на границе кристалла. Результаты численного решения задачи о термоударе позволили сделать вывод о том, что используемые методы и алгоритмы будут применимы в задачах импульсного радиационного воздействия на вещество.

Заключение

Предложена математическая модель термомеханического отклика изделия микроэлектроники на воздействие импульса ионизирующего излучения. Модель основана на уравнениях термоупругости в связанной постановке. Рассматриваются полупроводники и металлы изделия. Для моделирования потока тепла используется уравнение Каттанео. Вместе с законом сохранения энергии уравне-

ния образуют гиперболическую систему, эквивалентную телеграфному уравнению. Механические колебания решетки рассматриваются в приближении линейной теории упругости. Численные алгоритмы разработаны на основе метода конечных разностей для уравнений упругих волн и на основе метода конечного объема для уравнений, описывающих перенос тепла.

Список использованных источников

1. Cattaneo C., On a form of heat equation which eliminates the paradox of instantaneous propagation, C. R. Acad. Sci. Paris, 1958, pp. 431 – 433.
2. Ignaczak J., Ostoja-Starzewski M. Thermoelasticity with Finite Wave Speeds. Oxford University Press, 2009, 413 p.
3. Новацкий В. Теория упругости / перевод с польск. М.: Мир, 1975, 872 с.
4. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика Т. VII. Теория упругости. М.: Наука, 1978, 248 с.