

## Заключение

На основе проведенных экспериментальных исследований по воздействию ИЭМП на ИМС выявлен механизм воздействия, установлен характер развития деградационных процессов в микроструктурных элементах и выявлены причины локальной деградации проводящих микроструктур. Более подробное рассмотрение физических процессов в микроструктурных элементах ИМС возможно при их моделировании. Для этого необходимо решить дифракционную задачу для определения поля вблизи микросхемы, кроме того, создать электротепловые модели типовых микроструктурных элементов и их комбинаций.

**Литература:** 1. *Чернышев А.А.* Основы надежности полупроводниковых приборов и интегральных микросхем. М.: Радио и связь, 1988. 255 с. 2. *Ефимов И. Е., Кальман И.Г., Мартынов В.И.* Надежность твердых интегральных схем. М.: Изд-во стандартов, 1979. 217 с. 3. *Князев А.Д.* Электромагнитная совместимость радиоэлектронных средств. М.: ИПК МРП СССР, 1982. 131 с. 4. *Григорьев Е.В., Малишевский С.В., Таран Е.П., Старостенко В.В.* Влияние поляризации электромагнитной волны на соотношение между волнами при воздействии на интегральные микросхемы // Радиоэлектроника и информатика. 2002. №2. С.19-21. 5. *Antonone J.* Electrical Overstress Protection for Electronic Devices. 1986, New York. 387p. 6. *Wunsch D.C., Bell R.R.* Determination Of Threshold Failure In Metallization Due To Pulse Voltages // IEEE Trans., 1970. Vol. NS-18, № 4. P.212-220. 7. *Гадецкий Н.П., Кравцов К.А., Магда И.И. и др.* Взаимодействие мощного СВЧ излучения УКДИ с приемно-усилительным трактом СВЧ диапазона // Материалы IV Междунар. конф. "СВЧ-техника и спутниковый прием". Том 2. Севастополь, 1994. С. 536-538. 8. *Галактионов В.А., Курдюмов С.П., Посашков С.А.,*

*Самарский А.А.* Квазилинейное параболическое уравнение со сложным спектром неограниченных автомодельных решений // В кн.: Математическое моделирование. Процессы в нелинейных средах. М.: Наука, 1986. С.142-182.

Поступила в редколлегию 16.01.2002

**Рецензент:** д-р физ.-мат. наук, проф. Чурюмов Г.И.

**Григорьев Евгений Владимирович**, старший преподаватель кафедры радиофизики Таврического национального университета (ТНУ). Научные интересы: экспериментальные исследования деградационных процессов в микроструктурных элементах интегральных микросхем при воздействии электромагнитных полей. Адрес: Украина, 95007, Симферополь, ул.Ялтинская, 4.

**Малишевский Станислав Владимирович**, аспирант кафедры радиофизики ТНУ. Научные интересы: моделирование дифракционных явлений в неоднородных металлодиэлектрических структурах при воздействии электромагнитных полей. Адрес: Украина, 95007, Симферополь, ул. Ялтинская, 4.

**Старостенко Владимир Викторович**, канд. физ.-мат. наук, зав. кафедрой радиофизики ТНУ. Научные интересы: моделирование вакуумных и твердотельных устройств СВЧ, исследование деградационных процессов в различных объектах и средах при воздействии электромагнитных полей. Адрес: Украина, 95022, Симферополь, ул.Б.Куна, 31, кв.13, тел.: раб. (0652)230360, дом. (0652)575401.

**Таран Евгений Павлович**, канд. физ.-мат. наук, старший преподаватель кафедры радиофизики ТНУ. Научные интересы: моделирование процессов в микроструктурах при воздействии электромагнитных полей. Адрес: Украина, 95004, Симферополь, ул. Лермонтова, 11, кв.79, тел.: раб. (0652)230360, дом. (0652)251466. E-mail: tatan@tnu.crimea.ua

УДК 532.534

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОУПРУГИХ НАПРЯЖЕНИЙ ПРИ РОСТЕ КРИСТАЛЛОВ

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

Рассматривается задача численного моделирования термоупругих напряжений при росте монокристаллов. Для цилиндрических кристаллов с плоским фронтом затвердевания, выращиваемых в осесимметричном температурном поле, приводятся результаты численных расчетов температурных и упругих полей.

### 1. Введение

Последние достижения в получении совершенных кристаллов различных типов непосредственно опираются на достижения теории внутренних напряжений в кристаллах. При выращивании кристаллов из расплава существенное влияние на формирование структуры монокристалла оказывают термоупругие напряжения, которые возникают при изменении температуры в кристаллизующемся слитке. Возникающие напряжения влияют на образование дислокаций и их размножение, на образование точечных дефектов в кристаллах [2].

### 2. Математическая модель термоупругих напряжений

Для нахождения поля термоупругих напряжений  $\sigma_{ik}$  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. Для изотропных кристаллов цилиндрической формы радиуса  $R_K$  эта математическая модель имеет вид [1-5]:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \sigma_{rr}) + \frac{\partial}{\partial z} \sigma_{rz} = \frac{1}{r} \sigma_{\varphi\varphi}; \quad (1)$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \sigma_{rz}) + \frac{\partial}{\partial z} \sigma_{zz} = 0; \quad (2)$$

$$\sigma_{rr} = Ga \left[ \frac{\partial u_r}{\partial r} + k \left( \frac{u_r}{r} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) - cT \right]; \quad (3)$$

$$\sigma_{\varphi\varphi} = Ga \left[ \frac{u_r}{r} + k \left( \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) - cT \right]; \quad (4)$$

$$\sigma_{zz} = Ga \left[ \frac{\partial u_z}{\partial z} + k \left( \frac{u_r}{r} + \frac{\partial u_r}{\partial r} \right) - cT \right]; \quad (5)$$

$$\sigma_{rz} = Ga \left[ \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} \right]. \quad (6)$$

Граничные условия:

$$1) \ r = R_K, \ 0 \leq z \leq l: \ \sigma_{rr} = 0, \ \sigma_{rz} = 0; \quad (7)$$

$$2) \ 0 \leq r \leq R_K, \ z = 0: \ \sigma_{zz} = 0, \ \sigma_{rz} = 0; \quad (8)$$

$$3) \ 0 \leq r \leq R_K, \ z = l: \ \sigma_{zz} = 0, \ \sigma_{rz} = 0; \quad (9)$$

$$4) \ r = 0, \ 0 \leq z \leq l: \ u_r = 0, \ \frac{\partial u_z}{\partial r} = 0, \quad (10)$$

где  $u_r(r, z, t)$  и  $u_z(r, z, t)$  – радиальное и осевое перемещения;  $T(r, z, t)$  – известное температурное поле, которое для случая роста кристаллов находится в результате решения задачи Стефана;  $G$  – модуль сдвига;  $a = 2(1-\mu)/(1-2\mu)$ ,  $k = \mu/(1-\mu)$ ,  $c = \alpha(1+\mu)/(1-\mu)$ ;  $\mu$  – коэффициент Пуассона;  $\alpha$  – коэффициент теплового расширения.

Выражения (1), (2) – уравнения равновесия, а (3)–(6) соответствуют закону Гука, связывая компоненты тензора термоупругих напряжений с компонентами тензора деформаций.

Граничные условия (7)–(10) записаны в предположении, что поверхности, включая границу раздела фаз, свободны от внешних сил, а на оси выполняются условия симметрии.

Подставляя (3)–(6) в (1), (2), получаем уравнения равновесия в смещениях:

$$a \left( \frac{\partial^2 u_r}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial r} - \frac{u_r}{r^2} + \frac{\partial^2 u_r}{\partial z^2} \right) + 2b \frac{\partial^2 u_z}{\partial r \partial z} = d \frac{\partial T}{\partial r}; \quad (11)$$

$$a \left( \frac{\partial^2 u_z}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial r} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right) + 2b \left( \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial^2 u_r}{\partial r \partial z} \right) = d \frac{\partial T}{\partial z}; \quad (12)$$

где  $b = 1/(1-2\mu)$ ,  $d = 2 \frac{1+\mu}{1-2\mu} \alpha$ .

Для перехода в граничных условиях (7)–(10) к смещениям используем зависимости (3)–(6):

$$1) \ r = R_K, \ 0 \leq z \leq l:$$

$$\begin{cases} \frac{\partial u_r}{\partial r} + k \left( \frac{u_r}{r} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) - cT = 0; \\ \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} = 0; \end{cases} \quad (13)$$

$$2) \ 0 \leq r \leq R_K, \ z = 0:$$

$$\begin{cases} \frac{\partial u_z}{\partial z} + k \left( \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_r}{r} \right) - cT = 0; \\ \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} = 0; \end{cases} \quad (14)$$

$$3) \ 0 \leq r \leq R_K, \ z = l:$$

$$\begin{cases} \frac{\partial u_z}{\partial z} + k \left( \frac{\partial u_r}{\partial r} + \frac{u_r}{r} \right) - cT = 0; \\ \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} = 0; \end{cases} \quad (15)$$

$$4) \ r = 0, \ 0 \leq z \leq l:$$

$$\begin{cases} u_r = 0; \\ \frac{\partial u_z}{\partial r} = 0; \end{cases} \quad (16)$$

$$5) \ r = R_K, \ z = 0:$$

$$\begin{cases} \frac{\partial u_r}{\partial r} - \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0; \\ \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} = 0; \end{cases} \quad (17)$$

$$6) \ r = R_K, \ z = l:$$

$$\begin{cases} \frac{\partial u_r}{\partial r} - \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0; \\ \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r} = 0. \end{cases} \quad (18)$$

### 3. Метод решения

*Метод переменных направлений (МПН).* При решении уравнений математической модели используется метод конечных разностей – МПН [4]. Для аппроксимации дифференциальных уравнений введем пространственную сетку с координатами

$$r_i = ih, \ z_j = jl,$$

где  $h, l$  – шаги сетки по координатам  $T_{i,j}^{n+1}$ ,  $z$  соответственно,  $i = 0, m, j = 0, n$ .

Введем следующее обозначение:  $\varphi(ih, jl) = \varphi_{i,j}$ .

Производные по пространственным переменным будем аппроксимировать конечными разностями:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial r} \sim \frac{\varphi_{i+1,j} - \varphi_{i-1,j}}{2h}, \quad \frac{\partial^2 \varphi}{\partial r^2} \sim \frac{\varphi_{i+1,j} - 2\varphi_{i,j} + \varphi_{i-1,j}}{h^2};$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z} \sim \frac{\varphi_{i,j+1} - \varphi_{i,j-1}}{2l}, \quad \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} \sim \frac{\varphi_{i,j+1} - 2\varphi_{i,j} + \varphi_{i,j-1}}{l^2};$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial r \partial z} \sim \frac{\varphi_{i+1,j+1} - \varphi_{i-1,j+1} - \varphi_{i+1,j-1} + \varphi_{i-1,j-1}}{4hl}.$$

МПН позволяет свести решение двумерных уравнений к последовательности одномерных уравнений с трехдиагональными матрицами. Существует ряд методов, использующих эту общую идею и отличающихся некоторыми деталями (метод переменных направлений или метод продольно-поперечных прогонок, метод расщепления, метод дробных шагов, локально одномерный метод). Общую структуру МПН поясним на двумерном операторном уравнении вида

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = (L_1 + L_2)\varphi + F, \quad (19)$$

где  $L_1$  и  $L_2$  – одномерные операторы, действующие по разным направлениям.

Решение уравнения (19) методом переменных направлений осуществляется в два этапа, которым соответствуют временные индексы  $k+1/2$ ,  $k+1$ , а именно:

$$\frac{\varphi^{k+1/2} - \varphi^k}{\tau/2} = \tilde{L}_1 \varphi^{k+1/2} + \tilde{L}_2 \varphi^k + F^k; \quad (20)$$

$$\frac{\varphi^{k+1} - \varphi^{k+1/2}}{\tau/2} = \tilde{L}_1 \varphi^{k+1/2} + \tilde{L}_2 \varphi^{k+1} + F^{k+1/2}. \quad (21)$$

Здесь  $\tilde{L}_1$  и  $\tilde{L}_2$  – разностные одномерные операторы. Оба разностных уравнения (20), (21) приводятся к стандартному трехдиагональному виду. На первом этапе прогонами в одном из направлений находится решение  $\varphi^{k+1/2}$  на полуцелом временном слое; затем, используя это решение, осуществляются прогоны по второму направлению для получения искомого решения  $\varphi^{k+1}$  на целом временном слое. На установившемся режиме решение не зависит от временного шага  $\tau$ , поэтому данная схема может использоваться и для решения стационарных задач «на установление».

Итак, имеем:

$$(L_1 + L_2)\varphi = F; \quad \frac{\partial \varphi}{\partial t} = (L_1 + L_2)\varphi - F,$$

$$\text{где } \varphi = \begin{pmatrix} u_r \\ u_z \end{pmatrix}; \quad F = \begin{pmatrix} d \frac{\partial T}{\partial r} + a \frac{u_r}{r^2} - 2b \frac{\partial^2 u_z}{\partial r \partial z} \\ d \frac{\partial T}{\partial z} - 2b \frac{\partial^2 u_r}{\partial r \partial z} \end{pmatrix};$$

$$L_1(\cdot) = \begin{pmatrix} a \left( \frac{\partial^2(\cdot)}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\cdot)}{\partial r} \right) & 0 \\ 0 & a \left( \frac{\partial^2(\cdot)}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\cdot)}{\partial r} \right) \end{pmatrix};$$

$$L_2(\cdot) = \begin{pmatrix} a \frac{\partial^2(\cdot)}{\partial z^2} & 0 \\ 2b \frac{1}{r} \frac{\partial(\cdot)}{\partial z} & a \frac{\partial^2(\cdot)}{\partial z^2} \end{pmatrix};$$

$$\frac{\varphi^{k+1/2} - \varphi^k}{\tau/2} = \tilde{L}_1 \varphi^{k+1/2} + \tilde{L}_2 \varphi^k + F^k;$$

$$\frac{\varphi^{k+1} - \varphi^{k+1/2}}{\tau/2} = \tilde{L}_1 \varphi^{k+1/2} + \tilde{L}_2 \varphi^{k+1} + F^{k+1/2};$$

$$\begin{aligned} \frac{u_{r,i,j}^{k+1/2} - u_{r,i,j}^k}{\tau/2} = & a \left[ \frac{1}{h^2} (u_{r,i+1,j}^{k+1/2} - 2u_{r,i,j}^{k+1/2} + u_{r,i-1,j}^{k+1/2}) + \frac{1}{2ih^2} (u_{r,i+1,j}^{k+1/2} - u_{r,i-1,j}^{k+1/2}) \right] + \\ & + \frac{a}{l^2} (u_{r,i,j+1}^k - 2u_{r,i,j}^k + u_{r,i,j-1}^k) - \frac{d}{2h} (T_{i+1,j} - T_{i-1,j}) - \frac{a}{(ih)^2} u_{r,i,j}^k + \\ & + \frac{b}{2lh} (u_{z,i+1,j+1}^k - u_{z,i-1,j+1}^k - u_{z,i+1,j-1}^k + u_{z,i-1,j-1}^k); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{u_{z,i,j}^{k+1/2} - u_{z,i,j}^k}{\tau/2} = & \frac{a}{h^2} (u_{z,i+1,j}^{k+1/2} - 2u_{z,i,j}^{k+1/2} + u_{z,i-1,j}^{k+1/2}) + \frac{a}{2ih^2} (u_{z,i+1,j}^{k+1/2} - u_{z,i-1,j}^{k+1/2}) + \\ & + \frac{b}{ihl} (u_{r,i,j+1}^k - u_{r,i,j-1}^k) + \frac{a}{l^2} (u_{z,i,j+1}^k - 2u_{z,i,j}^k + u_{z,i,j-1}^k) - \\ & - \frac{d}{2l} (T_{i,j+1} - T_{i,j-1}) + \frac{b}{2hl} (u_{r,i+1,j+1}^k - u_{r,i-1,j+1}^k - u_{r,i+1,j-1}^k + u_{r,i-1,j-1}^k); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{u_{r,i,j}^{k+1} - u_{r,i,j}^{k+1/2}}{\tau/2} = & a \left[ \frac{1}{h^2} (u_{r,i+1,j}^{k+1/2} - 2u_{r,i,j}^{k+1/2} + u_{r,i-1,j}^{k+1/2}) + \frac{1}{2ih^2} (u_{r,i+1,j}^{k+1/2} - u_{r,i-1,j}^{k+1/2}) \right] + \\ & + \frac{a}{l^2} (u_{r,i,j+1}^{k+1} - 2u_{r,i,j}^{k+1} + u_{r,i,j-1}^{k+1}) - \frac{d}{2h} (T_{i+1,j} - T_{i-1,j}) - \\ & - \frac{a}{(ih)^2} u_{r,i,j}^{k+1/2} + \frac{b}{2lh} (u_{z,i+1,j+1}^{k+1/2} - u_{z,i-1,j+1}^{k+1/2} - u_{z,i+1,j-1}^{k+1/2} + u_{z,i-1,j-1}^{k+1/2}); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{u_{z,i,j}^{k+1} - u_{z,i,j}^{k+1/2}}{\tau/2} = & \frac{a}{h^2} (u_{z,i+1,j}^{k+1/2} - 2u_{z,i,j}^{k+1/2} + u_{z,i-1,j}^{k+1/2}) + \\ & + \frac{a}{2ih^2} (u_{z,i+1,j}^{k+1/2} - u_{z,i-1,j}^{k+1/2}) + \frac{b}{ihl} (u_{r,i,j+1}^{k+1} - u_{r,i,j-1}^{k+1}) + \\ & + \frac{a}{l^2} (u_{z,i,j+1}^{k+1} - 2u_{z,i,j}^{k+1} + u_{z,i,j-1}^{k+1}) - \frac{d}{2l} (T_{i,j+1} - T_{i,j-1}) + \\ & + \frac{b}{2hl} (u_{r,i+1,j+1}^{k+1/2} - u_{r,i-1,j+1}^{k+1/2} - u_{r,i+1,j-1}^{k+1/2} + u_{r,i-1,j-1}^{k+1/2}); \\ & - A_{i,j} \varphi_{i-1,j}^{k+1/2} + C_{i,j} \varphi_{i,j}^{k+1/2} - B_{i,j} \varphi_{i+1,j}^{k+1/2} = D_{i,j}^k, \quad i = \overline{1, m-1}; \end{aligned}$$

$$A_{i,j} = \begin{pmatrix} \frac{a}{h^2} - \frac{a}{2ih^2} & 0 \\ 0 & \frac{a}{h^2} - \frac{a}{2ih^2} \end{pmatrix};$$

$$B_{i,j} = \begin{pmatrix} \frac{a}{h^2} + \frac{a}{2ih^2} & 0 \\ 0 & \frac{a}{h^2} + \frac{a}{2ih^2} \end{pmatrix}; \quad C_{i,j} = \begin{pmatrix} \frac{2}{\tau} + \frac{2a}{h^2} & 0 \\ 0 & \frac{2}{\tau} + \frac{2a}{h^2} \end{pmatrix};$$

$$D_{i,j}^k = \begin{cases} \frac{2}{\tau} u_{r,i,j}^k + \frac{a}{l^2} (u_{r,i,j+1}^k - 2u_{r,i,j}^k + u_{r,i,j-1}^k) - \frac{d}{2h} (T_{i+1,j} - T_{i-1,j}) - \\ - \frac{a}{(ih)^2} u_{r,i,j}^k + \frac{b}{2lh} (u_{z,i+1,j+1}^k - u_{z,i-1,j+1}^k - u_{z,i+1,j-1}^k + u_{z,i-1,j-1}^k); \\ \frac{2}{\tau} u_{z,i,j}^k + \frac{b}{ihl} (U_{r,i,j+1}^k - U_{r,i,j-1}^k) + \frac{a}{l^2} (u_{z,i,j+1}^k - 2u_{z,i,j}^k + u_{z,i,j-1}^k) - \\ - \frac{d}{2l} (T_{i,j+1} - T_{i,j-1}) + \frac{b}{2hl} (u_{r,i+1,j+1}^k - u_{r,i-1,j+1}^k - u_{r,i+1,j-1}^k + u_{r,i-1,j-1}^k) \end{cases}; \quad \begin{cases} 4) \ i = 0, \ j = \overline{0, n} : \\ \left\{ \begin{aligned} u_{r,0,j} &= 0; \\ \frac{1}{h} (u_{z,1,j} - u_{z,0,j}) &= 0; \end{aligned} \right. \\ 5) \ i = m, \ j = 0 : \\ \left\{ \begin{aligned} \frac{u_{r,m,0} - u_{r,m-1,0}}{h} - \frac{u_{z,m,1} - u_{z,m,0}}{l} &= 0; \\ \frac{u_{r,m,1} - u_{r,m,0}}{l} + \frac{u_{z,m,0} - u_{z,m-1,0}}{h} &= 0; \end{aligned} \right. \end{cases} \quad (26)$$

$$-A_{i,j} \phi_{i,j-1}^{k+1} + C_{i,j} \phi_{i,j}^{k+1} - B_{i,j} \phi_{i,j+1}^{k+1} = D_{i,j}^{k+1/2}, \quad j = \overline{1, n-1}; \quad (22)$$

$$A_{i,j} = \begin{pmatrix} \frac{a}{l^2} & 0 \\ -\frac{b}{ihl} & \frac{a}{l^2} \end{pmatrix}; \quad B_{i,j} = \begin{pmatrix} \frac{a}{l^2} & 0 \\ \frac{b}{ihl} & \frac{a}{l^2} \end{pmatrix};$$

$$C_{i,j} = \begin{pmatrix} \frac{2}{\tau} + \frac{2a}{l^2} & 0 \\ 0 & \frac{2}{\tau} + \frac{2a}{l^2} \end{pmatrix};$$

6)  $i = m, \ j = n$  :

$$\begin{cases} \frac{u_{r,m,n} - u_{r,m-1,n}}{h} - \frac{u_{z,m,n} - u_{z,m,n-1}}{l} = 0; \\ \frac{u_{r,m,n} - u_{r,m,n-1}}{l} + \frac{u_{z,m,n} - u_{z,m-1,n}}{h} = 0. \end{cases} \quad (28)$$

$$D_{i,j}^{k+1/2} = \begin{cases} \frac{2}{\tau} u_{r,i,j}^{k+1/2} + \frac{a}{h^2} (u_{r,i+1,j}^{k+1/2} - 2u_{r,i,j}^{k+1/2} + u_{r,i-1,j}^{k+1/2}) + \\ + \frac{1}{2ih^2} (u_{r,i+1,j}^{k+1/2} - u_{r,i-1,j}^{k+1/2}) - \frac{d}{2h} (T_{i+1,j} - T_{i-1,j}) - \\ - \frac{a}{(ih)^2} u_{r,i,j}^{k+1/2} + \frac{b}{2lh} (u_{z,i+1,j+1}^{k+1/2} - u_{z,i-1,j+1}^{k+1/2} - u_{z,i+1,j-1}^{k+1/2} + u_{z,i-1,j-1}^{k+1/2}); \\ \frac{2}{\tau} u_{z,i,j}^{k+1/2} + \frac{a}{h^2} (u_{z,i+1,j}^{k+1/2} - 2u_{z,i,j}^{k+1/2} + u_{z,i-1,j}^{k+1/2}) + \\ + \frac{a}{2ih^2} (u_{z,i+1,j}^{k+1/2} - u_{z,i-1,j}^{k+1/2}) - \frac{d}{2l} (T_{i,j+1} - T_{i,j-1}) + \\ + \frac{b}{2hl} (u_{r,i+1,j+1}^{k+1/2} - u_{r,i-1,j+1}^{k+1/2} - u_{r,i+1,j-1}^{k+1/2} + u_{r,i-1,j-1}^{k+1/2}) \end{cases};$$

Граничные условия:

1)  $i = m, \ j = \overline{1, n-1}$  :

$$\begin{cases} \frac{1}{h} (u_{r,m,j} - u_{r,m-1,j}) + k \left( \frac{1}{ih} u_{r,m,j} + \frac{1}{l} (u_{z,m,j} - u_{z,m,j-1}) \right) - c T_{m,j} = 0; \\ \frac{1}{l} (u_{r,m,j} - u_{r,m,j-1}) + \frac{1}{h} (u_{z,m,j} - u_{z,m-1,j}) = 0; \end{cases} \quad (23)$$

2)  $j = 0, \ i = \overline{1, m-1}$  :

$$\begin{cases} \frac{1}{l} (u_{z,i,1} - u_{z,i,0}) + k \left( \frac{1}{h} (u_{r,i,0} - u_{r,i-1,0}) + \frac{1}{ih} u_{r,i,0} \right) - c T_{i,0} = 0; \\ \frac{1}{l} (u_{r,i,1} - u_{r,i,0}) + \frac{1}{h} (u_{z,i,0} - u_{z,i-1,0}) = 0; \end{cases} \quad (24)$$

3)  $j = n, \ i = \overline{1, m-1}$  :

$$\begin{cases} \frac{1}{l} (u_{z,i,n} - u_{z,i,n-1}) + k \left( \frac{1}{h} (u_{r,i,n} - u_{r,i-1,n}) + \frac{1}{ih} u_{r,i,n} \right) - c T_{i,n} = 0; \\ \frac{1}{l} (u_{r,i,n} - u_{r,i,n-1}) + \frac{1}{h} (u_{z,i,n} - u_{z,i-1,n}) = 0; \end{cases} \quad (25)$$

На основании уравнений (23)-(28) легко получить граничные условия на границе и в угловых точках.

Схема устойчива при  $\mu < \frac{1}{4}$  [4].

Для решения систем линейных уравнений с трехдиагональной матрицей был использован метод матричной прогонки.

Условие окончания вычислений:  $\|\phi_{i,j}^{k+1} - \phi_{i,j}^k\| < \varepsilon$ .

**Метод конечных элементов (МКЭ).** Он основан на идее аппроксимации непрерывной функции дискретной моделью, которая строится на множестве кусочно-непрерывных функций, определенных на конечном числе подобластей. Кусочно-непрерывные функции вычисляются с помощью значений непрерывной величины в конечном числе точек рассматриваемой области.

При построении дискретной модели поступают следующим образом:

1. В рассматриваемой области фиксируется конечное число точек. Эти точки называются узловыми точками или узлами.

2. Значение непрерывной величины в каждой узловой точке считается переменной, которая должна быть найдена.

3. Область определения непрерывной величины разбивается на конечное число подобластей, называемых элементами. Эти элементы имеют общие узловые точки и в совокупности аппроксимируют форму области.

4. Непрерывная величина аппроксимируется на каждом элементе многочленом, который определяется с помощью узловых значений этой величины.

Для каждого элемента определяется свой многочлен, но многочлены подбираются таким образом, чтобы сохранилась непрерывность величины вдоль границ элементов. Полином, связанный с каждым элементом, называют функцией элемента

5. Объединение конечных элементов в ансамбль. В этом ансамбле узловые значения неизвестной функции должны быть отрегулированы таким образом, чтобы обеспечить наилучшее приближение к истинному непрерывному распределению. Этот этап приводит к алгебраической системе линейных уравнений относительно узловых значений. Эта система является моделью искомой непрерывной функции.

6. Решение полученной системы, т.е. нахождение узловых значений.

7. Нахождение искомой величины в любой точке области по узловым значениям и функциям элементов.

Разбиение двумерной области начинают от ее границы в целях наиболее точной аппроксимации формы границы. Затем производят разбиение внутренних областей.

Для приведения исходной дифференциальной задачи к системе линейных алгебраических уравнений будем использовать метод Галеркина. Общую структуру МКЭ поясним на двумерном операторном уравнении вида

$$Lu + f = 0; \quad (29)$$

$$u|_{\Gamma} = \varphi_1, \quad \frac{\partial u}{\partial n}|_{\Gamma} = \varphi_2. \quad (30)$$

Решение будем искать в виде

$$u = \sum_{i=1}^n N_i u_i, \quad (31)$$

где  $N_i, i = \overline{1, n}$  – система ортогональных базисных функций;  $u_i$  – значение функции  $u$  в узлах сетки.

Приближенное решение будет наилучшим, если интеграл взвешенной невязки равен нулю:

$$\int_R (Lu + f) N_i dR = 0, \quad i = \overline{1, n}. \quad (32)$$

Пусть  $L = \Delta$ .

Интегрируя (32) по формуле Грина, с учетом краевых условий (30) получаем

$$\int_R \nabla u \nabla N_i dR - \int_{\Gamma} \varphi_2 N_i d\Gamma = \int_R f N_i dR. \quad (33)$$

Подставляя (31) в (33), получаем систему алгебраических уравнений для определения коэффициентов:

$$\sum_i a_{ij} u_j = b_j, \quad (34)$$

где

$$a_{ij} = \int_R \nabla N_i \nabla N_j dR; \quad (35)$$

$$b_j = \int_R f N_j dR + \int_{\Gamma} \varphi_2 N_j d\Gamma. \quad (36)$$

Таким образом, решение дифференциального уравнения, как и в МКР, сведено к решению системы алгебраических уравнений.

#### 4. Анализ результатов

По описанным алгоритмам была составлена программа для расчета температурного поля и термоупругих напряжений в прямоугольной области ( $0 < r < R_K, 0 < z < L$ ). Также эта задача была решена в системе FlexPDE, разработанной компанией PDE Solutions Inc. Кроме основных составляющих напряжений  $\sigma_{rr}, \sigma_{\varphi\varphi}, \sigma_{zz}, \sigma_{rz}$ , рассчитывались сдвиговые напряжения  $\tau_1, \tau_2, \tau$  по плоскостям скольжения в направлении выращивания. Точность расчетов проверялась на модельном примере, взятом из книги А.Д. Коваленко [6]. Это пример расчета напряжений для цилиндра ( $0 < r < 1, -1 < z < 1$ ) с

распределением температуры  $T = cr^2$  (рис. 1), свободной поверхностью и отсутствием нагрузки на торцах цилиндра. Для этого случая в [6] приводится аналитическое решение и соответствующие расчеты термонапряжений. Расчеты по описанному выше алгоритму сравнивались с аналитическим решением из [6] (рис. 2-4). На рисунках даны поля напряжений  $\sigma_{rr}, \sigma_{\varphi\varphi}, \sigma_{zz}$ , нормированные к величине

$$k1 = \frac{G(1+\mu)\alpha c}{8(1-\mu)}. \quad (37)$$

Отрицательные значения термоупругих напряжений соответствуют сжатию, положительные – растяжению.

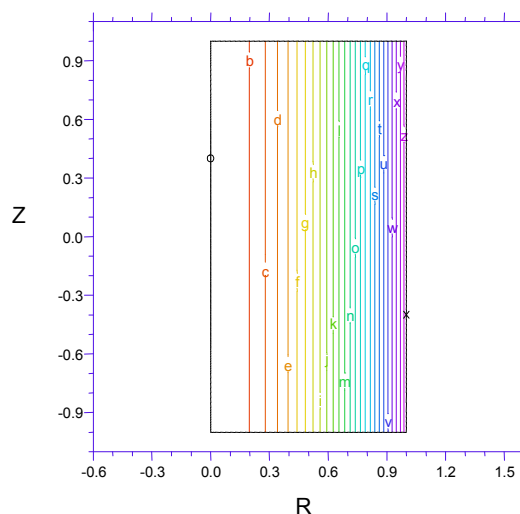


Рис. 1. Линии уровня температуры в кристалле

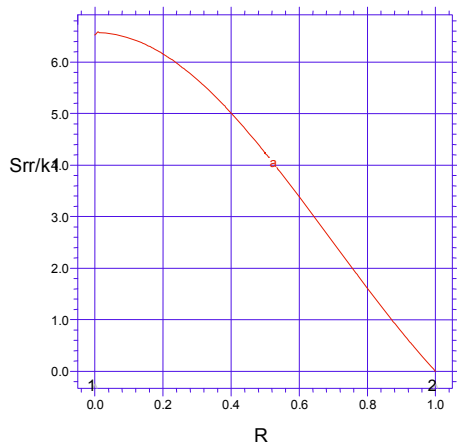


Рис. 2. Термоупругие напряжения  $\sigma_{rr} / k1$  ( $z = 0$ )

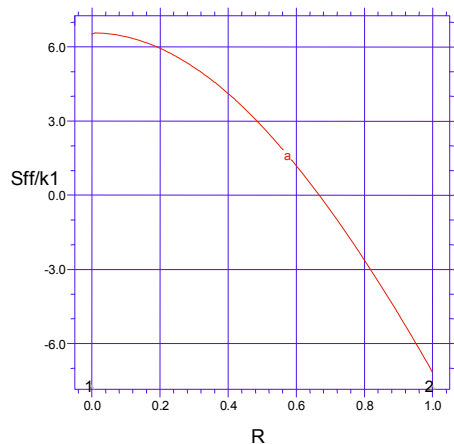


Рис. 3. Термоупругие напряжения  $\sigma_{\phi\phi} / k1$  ( $z = 0$ )

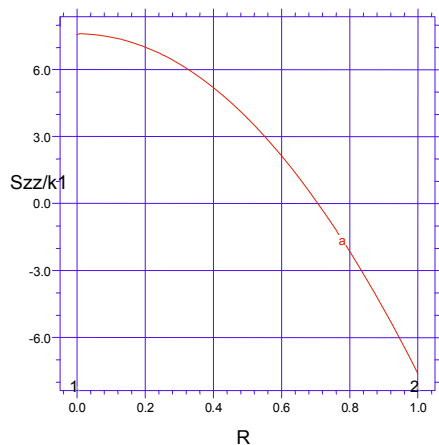


Рис. 4. Термоупругие напряжения  $\sigma_{zz} / k1$  ( $z = 0$ )

## 5. Заключение

Произведено численное моделирование полей термоупругих напряжений, возникающих в слитке при выращивании монокристаллов методом Чохральского. Оценки показывают, что термоупругие напряжения могут быть значительно уменьшены путем подбора конфигурации теплового поля, устраняющего или выравнивающего сильные теплотокеты с поверхности образца.

**Литература:** 1. *Тевяшев А.Д., Суздаль В.С., Бородавко Ю.М., Пелипец А.А.* Математическая модель термоупругих напряжений при росте кристаллов // Радиоэлектроника и информатика. 2002. № 2. С. 27-33. 2. *Инденбом В.Л., Освенский В.Б.* Теоретические и экспериментальные исследования возникновения напряжений и дислокаций при росте кристаллов // В кн.: Рост кристаллов. М.: Наука, 1980. Т.13. С. 240-251. 3. *Шашков Ю.М.* Выращивание монокристаллов методом вытягивания, М.: Металлургия, 1982. 4. *Вахрамеев С.С.* Расчет термических напряжений в кристаллах, выращиваемых из расплава // В кн.: Ученые записки: Вопросы теории кристаллизации. Ч2, Рига: Латв. ГУ, 1975. Т.237. С. 101-122. 5. *Инденбом В.Л., Житомирский И.С., Морозовская Н.Н., Чебанова Т.С.* Численное решение задачи об остаточных напряжениях, возникающих при наращивании полубесконечного цилиндра // В кн.: Тепловые напряжения в элементах конструкций. Киев: Наук. думка, 1970. Вып. 9. С. 136-148. 6. *Коваленко А.Д.* Основы термоупругости. Киев: Наук. думка, 1970. 374 с.

Поступила в редколлегию 13.06.2002

**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.