

УДК 519.63

А.В. Поддубная, Е.М. Веселова

**РАСЧЕТ КОНЦЕНТРАЦИИ РАДИАЦИОННЫХ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ
В ЛАЗЕРНЫХ КРИСТАЛЛАХ**

В работе представлены результаты компьютерного моделирования воздействия высокоэнергетического пучка электронов на цилиндрический образец лазерного кристалла. Для расчета концентрации точечных дефектов по длине образца была разработана прикладная программа в ППП Matlab. В среде COMSOL построена модель, позволяющая визуализировать результаты расчета.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, одномерное диффузионное уравнение, концентрация точечных дефектов, вычислительная схема, COMSOL Multiphysics.

**CALCULATION OF THE CONCENTRATION OF RADIATION POINT DEFECTS
IN LASER CRYSTALS**

The work presents the result of computer simulation of the impact of high-energy electron beam on a cylindrical laser crystal sample. Application program in Matlab was worked out for the calculation of the concentration of point defects a long the sample length. The results of calculation are presented in COMSOL Multiphysics program.

Key words: computer modelling, one-dimensional diffusion equation, concentration of point defects, computational scheme, COMSOL Multiphysics.

Введение

В настоящее время перспективными методами исследования физических процессов является математическое и компьютерное моделирование. Варьируя начальные параметры модели можно прогнозировать поведение материала или изменение его свойств в экстремальных условиях эксплуатации – при радиационном воздействии, без проведения экспериментальных исследований.

Современным мощным инструментом проведения расчетов и моделирования различных физических процессов, основанных на дифференциальных уравнениях в частных производных, является среда COMSOL Multiphysics. Отличительные особенности среды – мощный графический интерфейс и наглядная визуализация результатов моделирования [1].

Описание этапов моделирования

В данной работе приведены результаты численного и компьютерного моделирования воздействия высокоэнергетического пучка электронов на цилиндрический образец кристалла форстерита Mg_2SiO_4 .

Концептуальная постановка задачи: провести моделирование установившейся концентрации точечных дефектов в стержне лазерного кристалла длиной $L=3$ см, диаметром $d = 0,1$ см под воздействием направленного на его центр пучка электронов.

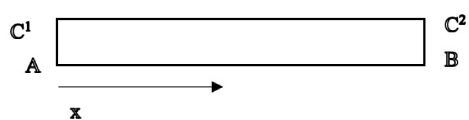


Рис. 1. Геометрическая модель математической задачи.

Концентрация дефектов на боковых поверхностях принимается равной нулю (рис. 1).

Цель данной работы – расчет концентрации точечных дефектов в образце лазерного кристалла под воздействием электронного излучения и визуализация результатов расчета в среде COMSOL Multiphysics.

Для формализации математической модели использовалось одномерное нестационарное диффузионное уравнение с источником:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \alpha \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right) + f(x), \quad (1)$$

где c – концентрация точечных дефектов; α – коэффициент диффузии; $f(x)$ – функция источника, имеющая вид:

$$f(x) = k \cdot e^{-\frac{\left(x - \frac{L}{2}\right)^2}{\sigma^2}},$$

где k – постоянная в функции источника; σ – сечение образования пар.

Решение должно удовлетворять начальному условию – концентрация дефектов в начальный момент времени известна: $c(x, 0) = c_0(x)$ – заданная функция на отрезке $[0, L]$, где происходит диффузия.

Граничные условия имеют вид (граничные условия I рода): $c(0, t) = 0$, $c(L, t) = 0$.

Для численного решения задачи использована явная разностная схема.

С целью замены начальных и граничных условий используют совокупность узлов, называемую шаблоном.

Запишем разностную схему для уравнения (1):

$$\frac{c_i^{j+1} - c_i^j}{\tau} = \alpha \frac{c_{i+1}^j - 2c_i^j - c_{i-1}^j}{h^2} + f(x_i).$$

Вычисляем значение уравнения (1) в узле $(j+1)$ -го шага:

$$c_i^{j+1} = c_i^j + \frac{\alpha \tau}{h^2} (c_{i+1}^j - 2c_i^j - c_{i-1}^j) + f(x_i).$$

В крайнем левом и правом узлах каждого слоя значение функции определяется из граничных условий: $c_i^0 = c(x_i)$, $c_i^{j+1} = 0$, $c_N^{j+1} = 0$.

По известным значениям решения на нулевом временном слое мы можем вычислить все значения $c(i)$ на первом временном слое, затем все значения $c(i)$ на втором временном слое и т. д.

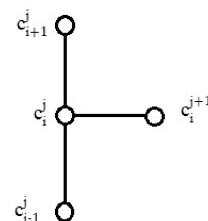
Необходимые для моделирования значения представлены в таблице.

№	Наименование	Обозначение	Ед. измерения	Значение
1.	Время наблюдения процесса	t	с	5
2.	Сечение образования пары	σ	см ²	$5 \cdot 10^{-3}$
3.	Постоянная в функции источника	k	ед/м ³ ·с	10^{14}

Отображение результатов моделирования

Результат реализации явного алгоритма решения уравнения (1) в ППП Matlab представлена на рис. 2.

По оси абсцисс – длина стержня L . На оси ординат отображается изменение концентрации дефектов. По полученному графику можно сделать вывод: концентрация дефектов достигает максимального значения в 4×10^8 в центре рассматриваемого образца. Впоследствии концентрация начинает



уменьшаться. После возвращения объекта исследования к исходному состоянию концентрация будет в точности соответствовать исходной.

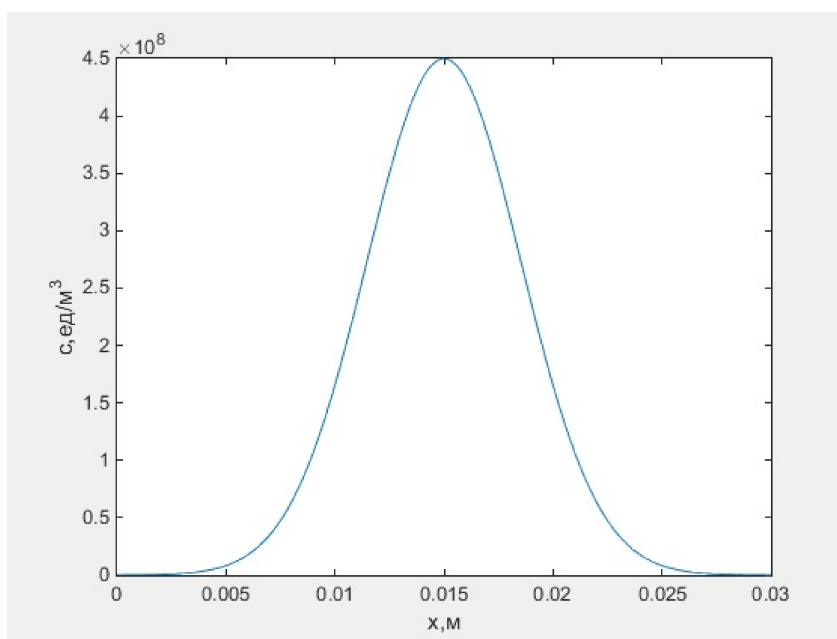


Рис. 2. Результаты реализации явного алгоритма в ППП Matlab.

При проведении данного исследования в среде COMSOL Multiphysics была построена трехмерная модель нестационарного процесса (Time Dependent). Исследовался образец кристалла форстерита Mg_2SiO_4 , геометрически представляющий собой цилиндрический стержень длиной 3 см и диаметром 0,1 см (рис. 3), на центр которого воздействует пучок электронов 1.4×10^{14} (электрон/см²).

Для проведения компьютерного моделирования в ПО необходимо в «Построителе моделей» выполнить ряд шагов – определение размерности модели; выбор типа исследования; создание геометрии; выбор материалов и задание их свойств; задание глобальных и локальных переменных; генерация сетки; проведение исследования; отображение и анализ результатов.

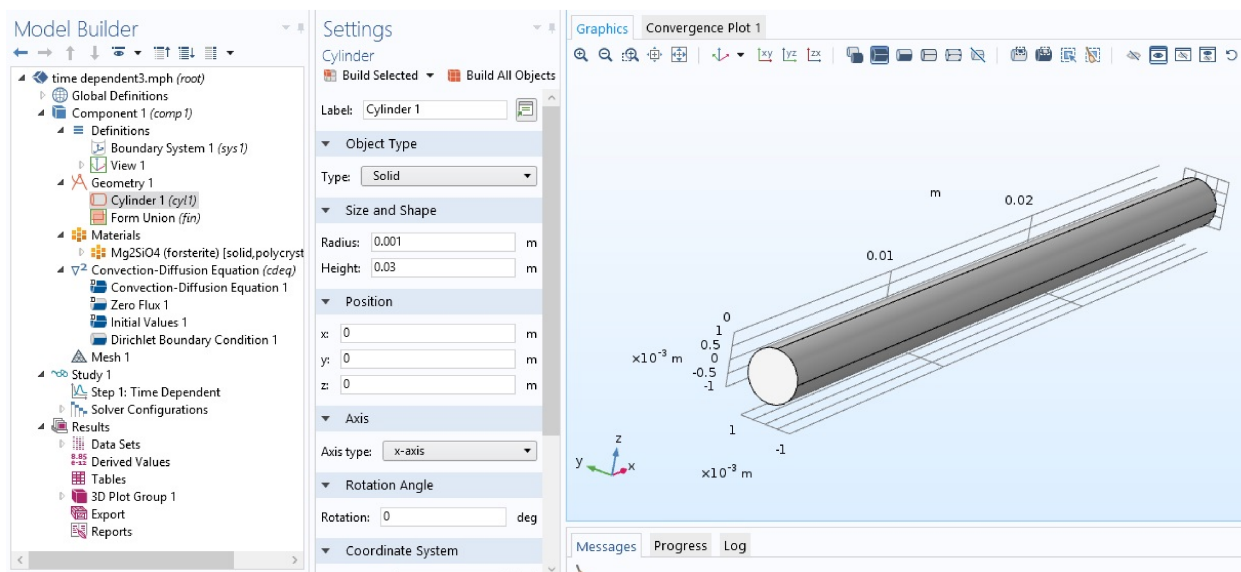


Рис. 3. Геометрия исследуемого образца.

В данной модели вычисление в COMSOL выполняется методом конечных элементов, для использования которого необходимо задать сетку разбиения образца. В модели была выбрана сетка *triangular* – трехгранная, размер сетки – *fine*.

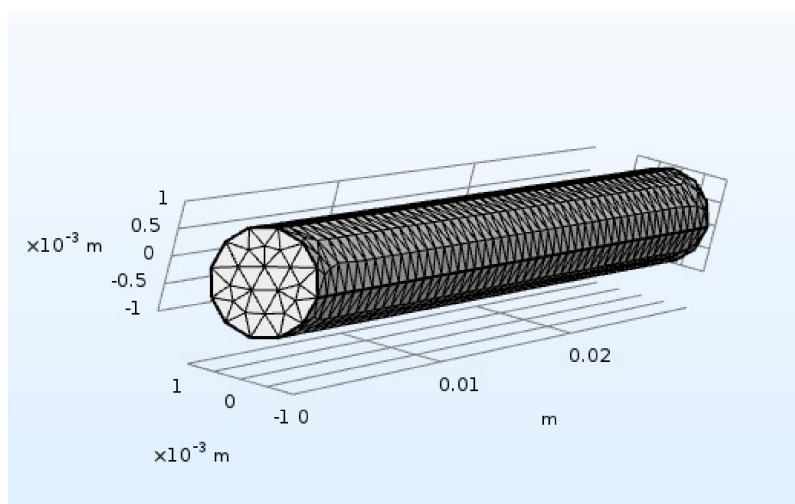


Рис. 4. Генерация сетки.

После задания основных характеристик модели можно проводить исследование. После запуска расчета модели в среде COMSOL Multiphysics получаем результат моделирования процесса распределения точечных дефектов в цилиндрическом образце лазерного кристалла (рис. 5).

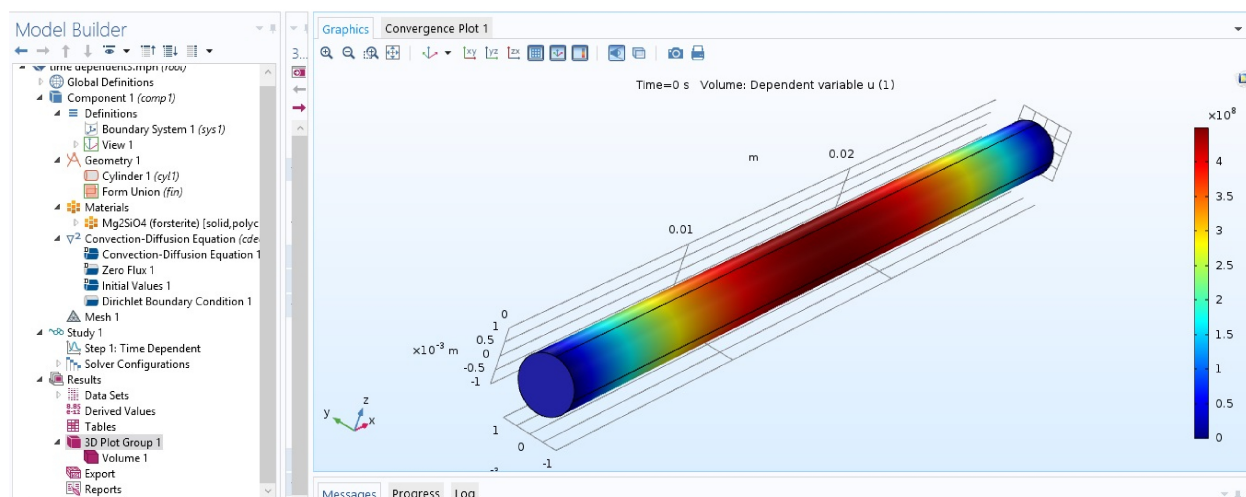


Рис. 5 Результат моделирования процесса в COMSOL Multiphysics.

Источник облучения воздействует на центральную часть цилиндрического образца, поэтому максимальное значение концентрации дефектов приходится на его центр. Сравнивая полученные значения с результатами, полученными в ППП Matlab, имеем небольшую погрешность.

Заключение

Проведена программная реализация модели в ППП Matlab. В среде компьютерного моделирования COMSOL Multiphysics был осуществлен расчет концентрации радиационных точечных дефектов в образце кристалла форстерита. Результаты численного и компьютерного моделирования коррелируют между собой и с данными, полученными экспериментально [2].

1. Красников, Г.Е., Нагорнов, О.В., Старостин, Н.В. Моделирование физических процессов с использованием пакета COMSOL Multiphysics. Учебное пособие. – М.: НИЯУ МИФИ, 2012. – 184 с.

2. Ванина, Е.А. Самоорганизация и упорядочение в оксидных и силикатных системах: Дис. ...д-ра физ.-мат. наук. – Благовещенск, 2006. – 195 с.