

Математическое моделирование температурных зависимостей температуропроводности фторида кальция с примесью трифторида иттрия и неодима

Р. В. Горчаков, О. Ю. Коваленко, Ю. А. Журавлева, С. А. Микаева

Работа посвящена моделированию температурных характеристик температуропроводящих свойств некоторых перспективных лазерных кристаллических материалов на основе фторида кальция, которые представляют особый интерес в качестве активных элементов для создания принципиально нового класса волноводных лазеров. В качестве образцов для исследования температуропроводящих свойств использовались фторидные кристаллы системы $(x)CaF_2-(y)YF_3-(z)NdF_3$, выращенные методом вертикальной направленной кристаллизации (метод Бриджмена-Стокбаргера), имеющие следующий химический состав: № 1 – $93CaF_2-7YF_3$, № 2 – $95CaF_2-5YF_3$, № 3 – $90CaF_2-7YF_3-3NdF_3$. Получены модели экспериментальных кривых температуропроводности, произведен расчет температурных характеристик и предложено их использование для математического моделирования кривых температуропроводности в зависимости от процентного содержания примеси в некоторых кристаллах на основе фторида кальция.

Ключевые слова: моделирование температурных характеристик, лазерные материалы, фторид кальция.

Ссылка: Горчаков Р. В., Коваленко О. Ю., Журавлева Ю. А., Микаева С. А. // Успехи прикладной физики. 2020. Т. 8. № 5. С. 358.

Reference: R. V. Gorchakov, O. Yu. Kovalenko, Yu. A. Zhuravleva, and S. A. Mikaeva, Usp. Prikl. Fiz. 8 (5), 358 (2020).

Введение

В связи с интенсивным развитием лазерной техники в последнее время появилась возможность создания эффективных лазерных источников, работающих как в

режиме непрерывной генерации, так и генерации ультракоротких импульсов (УКИ) с высокой частотой их повторения. Потребность в создании такого типа лазерных источников в свою очередь вызвана активным развитием технологий микрообработ-

Горчаков Роман Витальевич¹, магистрант.
Коваленко Ольга Юрьевна¹, д.т.н., профессор.
Журавлева Юлия Алексеевна², к.т.н., доцент.
Микаева Светлана Анатольевна², д.т.н., профессор.

¹ ФГБОУ ВО «НИ МГУ им. Н. П. Огарёва».
Россия, 430005, г. Саранск, ул. Большевикская, 68.
E-mail: gorchakov.roman@inbox.ru, crystal2000@mail.ru

² МИРЭА – Российский технологический университет.
Россия, 119454, Москва, проспект Вернадского, 78.
E-mail: uypil@mail.ru, mikaeva_s@mirea.ru

Статья поступила в редакцию 05 октября 2020 г.

© Горчаков Р. В., Коваленко О. Ю., Журавлева Ю. А., Микаева С. А., 2020

ки и структурирования материалов, в т. ч. прозрачных, лазерной графики, систем визуализации, систем технического зрения, биомедицинской диагностики, высокоточных измерений частоты света и временных интервалов, и др. [1, 2].

В качестве одного из таких источников выступил волноводный лазер, объединяющий достоинства полупроводниковых и волоконных лазеров (широкий спектральный диапазон излучения, компактность, эффективность генерации, надежность конструкции и высокая частота повторения импульсов в режиме синхронизации мод) и уменьшающий известные недостатки данных лазеров (большие фазовые шумы, недостаточно высокие пиковые мощности генерации) [3].

Одной из фундаментальных проблем на пути к созданию волноводных лазеров с заданными свойствами стала проблема выбора активной среды. В последние годы у большого количества научных групп в мире появился интерес к использованию фторидных кристаллов в качестве активной среды, благодаря таким из свойств этого материала, как более узкий фоновый спектр и меньшая нелинейность показателя преломления по сравнению с ранее использовавшимися оксидными кристаллами [4]. В связи с этим была поставлена задача создания примесных фторидных кристаллов с оптимальными параметрами для планарных структур.

Сегодня большое количество ученых пытается решить эту задачу, однако в большинстве случаев исследования проводятся не комплексно, без подробного анализа и контроля химического состава, без анализа природы примесных центров, формируемых в кристалле примесными ионами и т. д.

Особый интерес в применении фторидных материалов в качестве активной среды волноводного лазера вызывают их теплофизические свойства [5–7].

В этой связи ранее в лаборатории института физики и химии Мордовского го-

сударственного университета была проведена серия экспериментов по исследованию теплопроводящих свойств фторидных кристаллов системы $\text{CaF}_2\text{-YF}_3\text{-NdF}_3$ и получены характерные кривые. В результате исследования теплопроводности было выявлено, что увеличение концентрации примеси в двух- и трехкомпонентных системах CaF_2 ведет к снижению теплопроводности, что хорошо согласуется с данными, полученными в ходе экспериментов различными научными группами, а также с теоретическими данными. Тем не менее, открытым остается вопрос о количественном составе двух- и трехкомпонентных фторидных систем с целью получения кристаллов с оптимальной концентрацией примеси для получения конкретных теплопроводящих свойств. В результате была предпринята попытка создать математическую модель для полученных ранее температурных кривых, которая хорошо бы согласовывалась с экспериментальными данными и могла бы послужить теоретической базой для дальнейших исследований в данном направлении.

Экспериментальная часть

В качестве образцов для исследования теплопроводящих свойств использовались фторидные кристаллы системы $(x)\text{CaF}_2\text{-(y)YF}_3\text{-(z)NdF}_3$, выращенные методом вертикальной направленной кристаллизации (метод Бриджмена-Стокбаргера), имеющие следующий химический состав: № 1 – $93\text{CaF}_2\text{-7YF}_3$, № 2 – $95\text{CaF}_2\text{-5YF}_3$, № 3 – $90\text{CaF}_2\text{-7YF}_3\text{-3NdF}_3$. Экспериментальная проверка полученных ранее расчетных зависимостей коэффициентов теплопроводности кристаллов проведена с применением метода лазерной вспышки, реализуемом на приборе *LFA 427* фирмы *NETZSCH Gerätebau GmbH*. Относящийся к группе нестационарных методов, он обладает достаточно высокой точностью и

основан на решении одномерной задачи теплопроводности для бесконечной пластины при кратковременном воздействии лазерного импульса.

Измерения проводились в интервале температур 20–800 °С с шагом 50 °С. При каждом значении температуры проведено 5 измерений. Отклонение температуры от заданного программой прибора значения не превышало в эксперименте $\pm 0,5$ оС.

Согласно проведенному эксперименту были получены следующие температурные зависимости температуропроводности исследуемых образцов (рис. 1).

Исходя из этих температурных зависимостей, а также из расчетных данных, полученных в результате эксперимента,

была предпринята попытка аппроксимировать исходные зависимости с помощью методов компьютерного моделирования и вычислительных методов [8–10]. В качестве аппроксимирующего выражения была предложена экспоненциальная функция вида:

$$D(T) = Ae^{bT} \quad (1)$$

где $D(T)$ – коэффициент теплопроводности; T – температура; A, b – коэффициенты пропорциональности.

В результате аппроксимации получены зависимости вида (рис. 2).

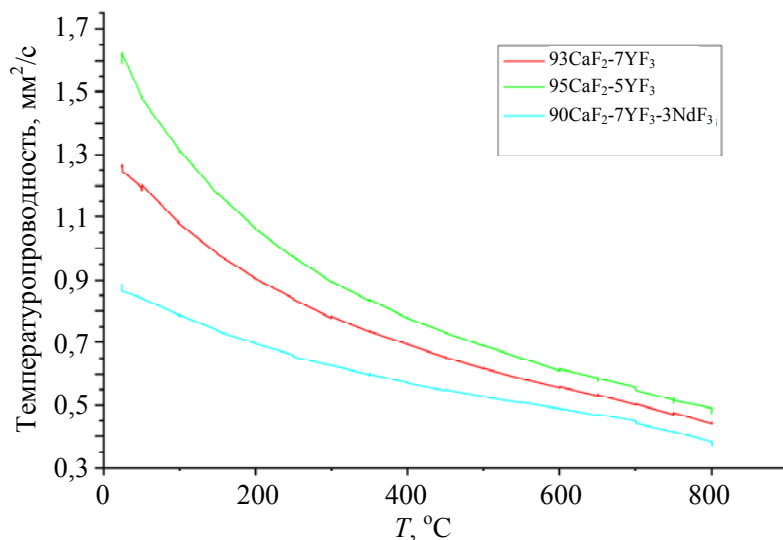


Рис. 1. Температурные зависимости температуропроводности кристаллов CaF_2 двух- и трехкомпонентного составов.

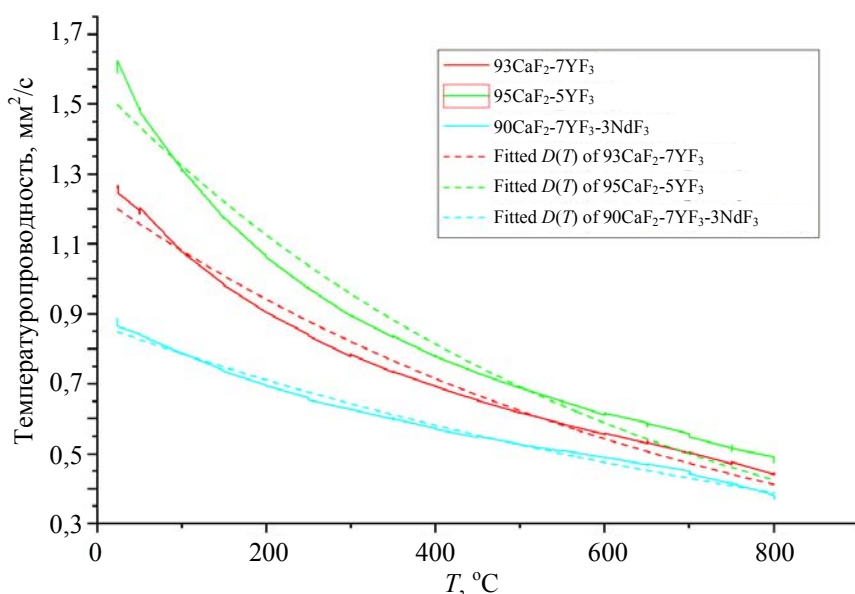


Рис. 2. Температурные зависимости температуропроводности кристаллов CaF_2 двух- и трехкомпонентного составов с экспоненциальной аппроксимацией.

Согласно уравнению (1) были вычислены коэффициенты A и b , значения которых приведены в табл. 1. Статистические данные аппроксимированных кривых представлены в табл. 2.

Как видно из табл. 1, значения параметра A монотонно убывают с увеличением содержания процентной доли примеси в структуре $(x)\text{CaF}_2-(y)\text{YF}_3-(z)\text{NdF}_3$.

Данное обстоятельство свидетельствует о взаимозависимости параметра A с процентной концентрацией примеси в кристаллах двух- и трехкомпонентного составов. Стандартное отклонение параметра от действительного при этом не превышает 1 %.

О конкретной связи параметра b с процентным содержанием примесных компонентов говорить сложно в данном случае. Однако можно предположить, что изменение параметра b может быть однозначно связано с изменением концентрацией примеси в трехкомпонентных система. Для проверки этого предположения требуются

дополнительные данные значения параметра b для других концентраций трехкомпонентных кристаллов системы $(x)\text{CaF}_2-(y)\text{YF}_3-(z)\text{NdF}_3$.

Значения величины коэффициента зависимости обоих параметров показывает, что аппроксимация оптимальна по количеству использованных параметров, а сами параметры эффективно использованы в аппроксимирующей функции.

Из анализа статистических данных табл. 2 видно, что экспоненциальная модель кривых хорошо согласуется с кривыми, полученными в результате эксперимента, а сама модель является достаточной для описания температуропроводящих свойств в двух- и трехкомпонентных кристаллах $(x)\text{CaF}_2-(y)\text{YF}_3-(z)\text{NdF}_3$ благодаря близкому к единице значению R -квадрат. При этом значение модифицированного R -квадрата отличается менее, чем на 1 %, что подтверждает эффективность подобранных параметров и модели в целом.

Таблица 1

Значения параметров аппроксимированных кривых температуропроводности кристаллов системы $(x)\text{CaF}_2-(y)\text{YF}_3-(z)\text{NdF}_3$

$x-y-z$, мол. %	Параметр	Значение	Стандартное отклонение	Коэффициент зависимости
93-7-0	A	1,24048	0,00816	0,58908
	b	-0,00138	1,99054E-5	
95-5-0	A	1,55764	0,0142	0,56948
	b	-0,00162	2,95952E-5	
90-7-3	A	0,8697	0,00346	0,62285
	b	-0,00101	1,0872E-5	

Таблица 2

Статистических данные аппроксимированных кривых температуропроводности кристаллов системы $(x)\text{CaF}_2-(y)\text{YF}_3-(z)\text{NdF}_3$

Параметр	$x-y-z$, мол. %		
	93-7-0	95-5-0	90-7-3
Число точек	85	85	85
Степень свободы	83	83	83
R -квадрат (COD)	0,98466	0,97654	0,99104
Мод. R -квадрат	0,98447	0,97626	0,99093

Исходя из того, что значения параметра A связаны с конкретным содержанием процентной доли примеси в структуре $(x)\text{CaF}_2-(y)\text{YF}_3-(z)\text{NdF}_3$ найдем аналитическую зависимость. Для этого будем искать решение в виде системы линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных C_0, C_1, C_2 .

$$\begin{cases} A_1 = C_0 + C_1x + C_2y \\ A_2 = C_0 + C_1x + C_2y \\ A_3 = C_0 + C_1x + C_2y \end{cases} \quad (2)$$

Используя значения параметра A из табл. 1, найдем значение неизвестных C_0, C_1, C_2 с помощью СЛАУ (2) методом обратной матрицы. Найденные значения неизвестных приведены в табл. 3.

Таблица 3

Значения линейных коэффициентов связи C_0, C_1, C_2 параметра A с процентным содержанием компонентов (x, y, z) в кристаллах системы $(x)\text{CaF}_2-(y)\text{YF}_3-(z)\text{NdF}_3$

$x-y-z$, мол. %	C_0	C_1	C_2
93-7-0	-10,00879	12,35933	-3,49867
95-5-0			
90-7-3			

Заключение

В ходе исследования, полученные коэффициенты линейных зависимостей C_0, C_1, C_2 могут быть использованы для физического моделирования кривых температуропроводности кристаллов системы $(x)\text{CaF}_2-(y)\text{YF}_3-(z)\text{NdF}_3$ с другими процент-

ными соотношениями молярной концентрации компонентов. Наибольшую точность данная модель будет иметь при использовании молярной концентрации компонентов в следующих пределах: 90–95 мол. % для CaF_2 , 5–10 мол. % для $\text{YF}_3, \text{NdF}_3$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Madelung O. Semiconductors: Data Handbook. – Springer, 2004.
2. Triboulet R., Siffert P. CdTe and Related Compounds; Physics, Defects, Hetero- and Nano-Structures, Crystal Growth, Surfaces and Applications. – Elsevier, 2010.
3. Филинов В. В., Филинова А. В., Микаева С. А., Родюков М. С. // Российский технологический журнал. 2017. Т. 5. С. 114.
4. Fedorov P. P., Osiko V. V. In: Bulk crystal growth of electronic, optical and optoelectronic materials / Ed. P. Capper. Wiley series in materials for electronic and optoelectronic applications. John Wiley & Son, Ltd. 2005. P. 339.
5. Voronin B. M., Volkow S. V. // J. Phys. Chem. Solids. 2001. Vol. 62. P. 1349.
6. Могилевский Б. М., Тумпурова В. Ф., Чудновский А. Ф. // Инженерно-физический журнал. 1974. Т. 27. № 3. С. 482.
7. Могилевский Б. М., Тумпурова В. Ф., Чудновский А. Ф. // Инженерно-физический журнал. 1974. Т. 27. № 2. С. 287.
8. Красов В. И., Кринберг И. А., Паперный В. Л. Компьютерные технологии в физике. Часть 1. Компьютерное моделирование физических процессов: учебное пособие. – Иркутск: ИГУ, 2006.
9. Поттер Д. Вычислительные методы в физике. – М.: Мир, 1975.
10. Средин В. Г., Сахаров М. В., Запонов А. Э., Конради Д. С., Кузнецов И. В., Глазунов В. А., Серяков Ю. Д. // Прикладная физика. 2020. № 3. С. 46.

Mathematical modeling of temperature dependences of fluoride temperature conductivity calcium mixtured with yttrium and neodum triphoride

R. V. Gorchakov¹, O. Yu. Kovalenko¹, Yu. A. Zhuravleva², and S. A. Mikaeva²

¹Ogarev Mordovia State University
68 Bolshevistskaya st., Republic of Mordovia, Saransk, 430005, Russia

²MIREA – Russian Technological University
78 Vernadsky Ave., Moscow, 119454, Russia

Received October 05, 2020

The work is devoted to modeling the temperature characteristics of the heat-conducting properties of some promising laser crystalline materials based on calcium fluoride, which are of particular interest as active elements for creating a fundamentally new class of waveguide lasers. The models of experimental thermal diffusivity curves were obtained, the temperature characteristics were calculated and their use was proposed for mathematical modeling of thermal diffusivity curves depending on the percentage of impurity in some crystals based on calcium fluoride.

Keywords: modeling temperature characteristics, laser materials, calcium fluoride.

REFERENCES

1. O. Madelung, *Semiconductors: Data Handbook*. (Springer, 2004).
2. R. Triboulet and P. Siffert, *CdTe and Related Compounds; Physics, De-fects, Hetero- and Nano-Structures, Crystal Growth, Surfaces and Applications* (Elsevier, 2010).
3. V. V. Filinov, A. V. Filinova, S. A. Mikayeva, and M. S. Rodyukov, *Russian Technology Journal* **5**, 114 (2017).
4. P. P. Fedorov and V. V. Osiko, In: Bulk crystal growth of electronic, opti-cal and optoelectronic materials / Ed. P. Capper. Wiley series in materials for electronic and optoelectronic applications. John Wiley & Son, Ltd. (2005). P. 339.
5. B. M. Voronin and S. V. Volkow, *J. Phys. Chem. Solids*. **62**, 1349 (2001).
6. B. M. Mogilevsky, V. F. Tumpurova, and A. F. Chudnovsky, *Engineering Physics Journal* **27** (3), 482 (1974).
7. B. M. Mogilevsky, V. F. Tumpurova, and A. F. Chudnovsky, *Engineering Physics Journal* **27** (2), 287 (1974).
8. V. I. Krasov, I. A. Krinberg, and V. L. Paperny, *Computer technology in physics. Part 1. Computer modeling of physical processes - Study Guide* (ISU, Irkutsk, 2006).
9. D. Potter, *Computational methods in physics* (Mir, Moscow, 1975).
10. V. G. Sredin, M. V. Sakharov, A. E. Zaponov, D. S. Konradi, I. V. Kuznetsov, V. A. Glazunov, and Yu. D. Seryakov, *Applied Physics*, No. 3, 46 (2020).