

文章编号: 1000-5471(2008)02-0044-05

基于玻璃基质离子扩散方程的数值解研究^①

陈 凯, 周自刚, 杨 坤, 何潭斌, 张 韧

西南科技大学 理学院, 绵阳 621000

摘要: 介绍了玻璃基质离子交换法制备变折射率光学器件中离子扩散方程的有限差分法模型. 该方法把连续的扩散方程转化为离散的差分方程, 将 MATLAB 程序中的矩阵运算用于迭代求解过程. 通过对正方形边界条件下扩散结果校验表明, 该方法可以得到较为精确的数值解, 所有数据计算误差小于 0.2%, 并且具有操作简单, 解的输出形式多样的优点. 对于正六边形和沟道边界扩散同样能给出较好的结果.

关键词: 离子扩散; 有限差分法; MATLAB

中图分类号: O435.1

文献标识码: A

为了得到具有变折射率特性的光学器件, 已经采用玻璃与熔盐离子交换, 改变玻璃中某种离子的浓度分布, 或改变离子电极化率, 以获得梯度折射率分布^[1-3]. 从理论上研究离子扩散, 即是求解定解条件下的扩散方程. 但是, 由于扩散边界条件的限制, 许多扩散方程很难求得其解析解, 如正六边形边界扩散; 而有的扩散方程虽然能够求得精确解, 但解的形式十分复杂, 不便于应用, 如正四边形边界和沟道扩散问题^[3,4]. 随着计算机技术的发展, 数值法已经成为求解包括扩散方程在内的定解问题的有效方法. 有限差分法作为一种数值计算方法, 首先是将连续的扩散方程转化为离散的差分方程, 然后在扩散区域的划分网格中进行迭代求解, 就能得到扩散区域离子浓度的数值解. 通过 MATLAB 软件可以将扩散区域划分网格抽象为二维矩阵, 不仅大大方便了定解条件定义, 而且易于实现迭代求解过程. 利用 MATLAB 强大的图形功能, 可以使结果直接输出, 也可以通过动画、三维图等方式展现, 有利于对扩散过程的深入了解. 本研究通过 MATLAB 编程求解得到了正四边形、正六边形和沟道边界扩散的数值解及相应图形, 取得了较好的结果, 适合于在工程计算中的应用.

1 扩散问题的有限差分法

有限差分法是一种求解定解问题的数值方法^[5,6], 可应用的工程领域包括扩散问题、结构分析和电磁场分析等. 它的基本思想是将求解区域划分为有限个网格, 将定解问题的微商用差商代替, 将偏微分方程直接转化为代数方程组, 然后利用网格迭代求数值解.

根据导函数定义式

$$\frac{dy}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{y(x + \Delta x) - y(x)}{\Delta x} \quad (1)$$

① 收稿日期: 2007-06-15

基金项目: 西南科技大学引进人才基金资助项目(053102).

作者简介: 陈 凯(1985-), 男, 四川自贡人, 硕士研究生, 主要从事方形自聚焦透镜及其阵列的理论研究.

通讯作者: 周自刚, 教授.

(1)式可以近似为

$$\frac{dy}{dx} \approx \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{y(x+\Delta x) - y(x)}{\Delta x} \quad (2)$$

即有限小的差分 Δy 除以有限小的差分 Δx 的商, 叫做差商. 同理,

$$\frac{d^2 y}{dx^2} \approx \frac{y(x+\Delta x) + y(x-\Delta x) - 2y(x)}{(\Delta x)^2} \quad (3)$$

离子交换时玻璃中的高极化率离子扩散进入熔盐, 浓度分布数学模型是相应定解条件下的扩散方程^[5]

$$\left(\frac{\partial^2 u(x, y, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x, y, t)}{\partial y^2} \right) = D \frac{\partial u(x, y, t)}{\partial t} \quad (4)$$

式中: D 是常扩散系数^[1]; x, y 和 t 是连续的空间与时间变量.

自变量 x, y 以步长 ξ 分割, 时间步长 t 取 τ , 根据(1)、(2)式, (4)式可以转换并简化为为差分方程

$$u(x_i, y_j, t_{k+1}) = \frac{\tau}{D\xi^2} (u(x_{i+1}, y_j, t_k) + u(x_{i-1}, y_j, t_k) + u(x_i, y_{j+1}, t_k) + u(x_i, y_{j-1}, t_k) - 4u(x_i, y_j, t_k)) + u(x_i, y_j, t_k) \quad (5)$$

从(5)式可以发现, 在位置 (x_i, y_j) , 时间 t_{k+1} 时的离子扩散浓度值 $u(x_i, y_j, t_{k+1})$ 可以根据前一时刻 t_k 时 (x_i, y_j) 邻接4个位置的浓度值迭加计算求得. 因此, 只要知道初始时刻 $u(x_i, y_j, t_0)$ 的值, 就可以依次推出 $t_1, t_2, t_3, \dots, t_k$ 时刻的浓度值 u , 实现了数值求解.

需要注意的是, 参数 $\frac{\tau}{D\xi^2}$ 不能太大^[5], 否则数值误差会在其后的计算中不断积累, 从而导致计算失败.

2 计算实例

2.1 程序设计

从上面的分析可知有限差分法涉及大量数值运算. 应用 Matlab 软件可以将正方形网格划分抽象为 $m \times m$ 的矩阵, 矩阵中每个元素就是网格的结点(图1).

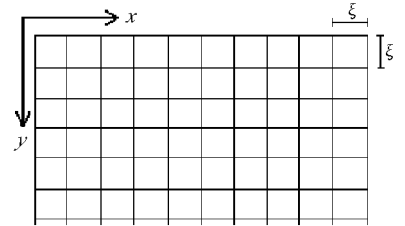
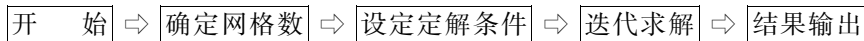


图1 网格划分

对此编程求解, 程序流程为



2.2 正方形边界扩散

为了提高自聚焦透镜阵列占空比, 已经制备出了 $1.38 \text{ mm} \times 1.38 \text{ mm}$ 正方形自聚焦透镜^[7], 其核心工艺就是将含铈正方形玻璃纤维放入含 K^+ 离子熔盐中进行 Tl^+ , K^+ 离子交换. 正方形边界条件下的扩散方程可以用分离变量法求解^[3].

$$U(x, y, t) = U_1 + \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} K_{mn} \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{a}y\right) \exp\left[-\left(\frac{m^2 + n^2}{a^2}\right)\pi^2 tD\right]$$

$$K_{mn} = \frac{4}{a^2} (c_0 - c_1) \int_0^a \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}y\right) dx dy \quad (7)$$

式中: U_1 为交换过程中边界高极化率离子浓度, U_0 为玻璃纤维中高极化率离子初始浓度, a 为方形玻璃纤维边长.

由(7)式可见解的形式比较复杂, 不便于实际应用.

利用有限差分法求解正方形边界条件下的扩散方程(4), 为方便与实验对比, 可以设置 138×138 的二维划分网格, 则距离步长 $\xi = 0.01 \text{ mm}$, 给出 Matlab 计算程序.

```
hx=138; hy=138; %网格划分
v=c0 * ones(hx, hy); %定义初始条件
```

```

for i=1 : 1 : hx
    v(1, i)=v(i, 1)=v(hx, i)=v(i, hy)=c1;
end
%定义边界条件
D=D1; bc=bc1; t=t1; Z=t1/D1 * bc^2; %参数设置
k=k1; %迭代次数
for t=1 : 850
    u=v;
    for i=2 : hx-1
        for j=2 : hy-1
            v(i, j)=u(i, j)+Z * [u(i+1, j)+u(i, j+1)+u(i-1, j)+u(i, j-1)-4 * u(i, j)];
        end
    end
end
contour(v, 20)
pause(0.01) %解的动画演示
end %迭代求解
contour(v, 30) %解三维输出
figure(2)
surf (v) %解曲面图输出

```

程序计算结果如图 2 所示, 图 3 是实验得到的方形自聚集透镜的干涉环, 它反映了实际的离子浓度分布情况, 对比两幅图中可以看到计算值与实验符合得很好. 另外, 从程序中可以看到, 解可以以多种方式输出, 对详细研究扩散进程提供了很大方便.

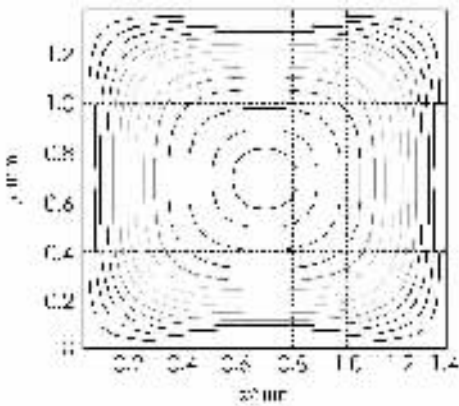


图 2 离子浓度计算结果

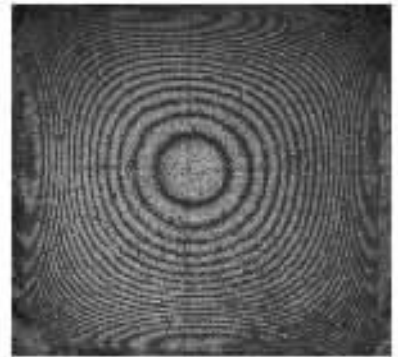


图 3 方形自聚集透镜的干涉环

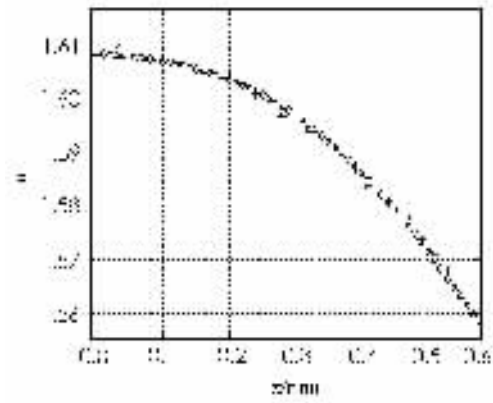
玻璃折射率分布与离子浓度呈线性关系, 因此, 可以把浓度表达式直接用折射率来表示^[1], 通过校验方形自聚焦透镜折射率分布实验值与有限差分法计算值, 发现该算法可以很好地计算方形自聚焦透镜折射率分布, 其误差小于 0.2%(图 4).

2.3 沟道离子扩散

随着离子交换工艺水平的不断提高而发展起来的变折射率分布结构, 受到人们的高度重视. 该结构有着诸多优点, 其中包括了可以通过调节玻璃含量和离子交换程度改变波导的一些重要性能^[8,9], 所以在离子扩散法制备过程中对离子交换程度与结果的了解非常重要.

使用有限差分法数值解可以对如图 5 的沟道离子扩散得到很好的计算结果, 图 6 是单沟道波导离子扩散浓度分布. 而在相邻沟道扩散中, 相邻离子扩散会相互影响, 造成沟道中间出现离子浓度互影响区, 这

一过程可以通过程序中的动画过程清晰地表现出来(图 7).



* 实验值; ☆ 计算值.

图 4 实验值和计算值

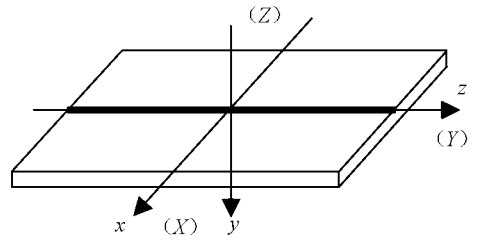


图 5 沟道波导

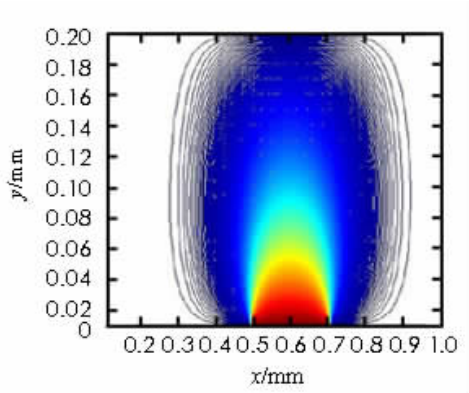


图 6 沟道波导离子浓度

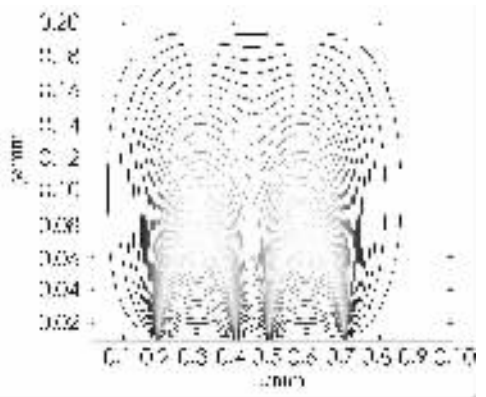


图 7 相邻沟道波导离子浓度二维动画

2.4 正六边形边界扩散

正六边形自聚焦透镜可以被紧密排列, 是提高透镜阵列占空比的研究方向之一. 但是在正六边形玻璃边界条件下(4)式无法用常规方法求得其精确解. 应用本文提出的限差分法计算机求解, 得到数值解及其输出图形.

从图 8 和图 9 中可以看到, 正六边形边界条件下扩散离子浓度在边界上近似于正六边形分布, 靠近中心浓度分布趋于圆形, 这与正方形边界条件下的离子扩散特点相似.

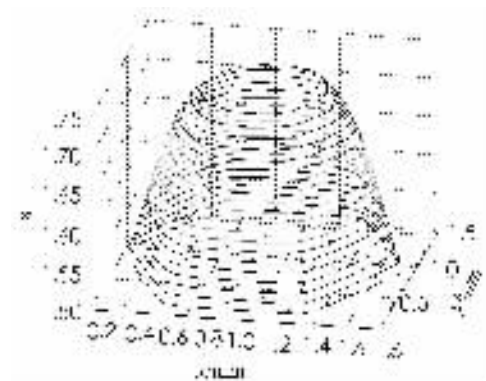


图 8 正六边形边界离子扩散三维效果

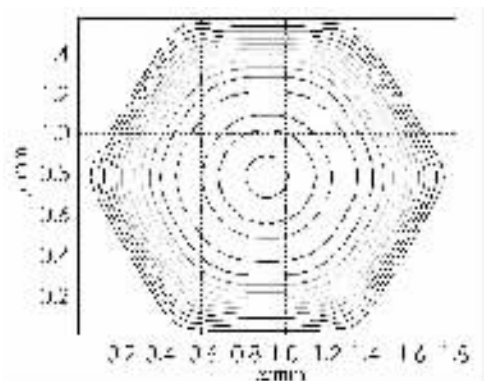


图 9 正六边形边界离子扩散一维效果

3 结 论

利用有限差分法对离子扩散问题进行数值求解,可以较好地解决复杂边界条件下扩散方程求解困难,或解析解过于复杂而不便应用的问题.通过 MATLAB 编程计算使该方法操作简单,运算便捷准确,同时结果可以以多种方式输出,有利于对扩散过程的深入分析.基于有限差分法模型,使用 MATLAB 软件编程求解了正四边形,正六边形和沟道离子扩散问题,校验了正四边形数值解正确性,表明该方法在离子交换法制备这些变折射率光学器件中有一定的使用价值.另外,通过定义不同边界条件可求得其它边界条件下的扩散问题,使其具有推广价值.

参考文献:

- [1] 刘德森. 变折射率介质理论及其技术实践 [M]. 重庆: 西南师范大学出版社, 2005.
- [2] 朱少丽, 徐秋霜, 刘德森. 自聚焦透镜在光纤准直器中的应用分析 [J]. 西南师范大学学报(自然科学版), 2004, 29(3): 379 - 382.
- [3] 陈 凯, 韩艳玲, 周自刚. 方形自聚焦透镜折射率分析 [J]. 光子学报, 2008, 36(3). 已录用.
- [4] 李庆辉, 陈才和. Ti 扩散 Er^{3+} : LiNbO_3 沟道波导的模式分析 [J]. 光子学报, 1999, 28(4): 302 - 305.
- [5] 梁昆森. 数学物理方法 [M]. 北京: 高等教育出版社, 2004.
- [6] 何红雨, 保宗悌, 陆 晓. 正六边形二维场域电位的有限差分算法 [J]. 西南师范大学学报(自然科学版), 2004, 29(5): 831 - 835.
- [7] 韩艳玲. 方形自聚焦透镜理论分析和制作工艺 [D]. 重庆: 西南师范大学, 2005: 30 - 31.
- [8] Saurav D. MMI splitters by ion-exchange in Glass [J]. Proc SPIE, 2000, 3936: 239 - 246.
- [9] Leuthold J. Multimode interference Couplers with Tunable Power Splitting Ratios [J]. Light Tech, 2001, 32(5): 700 - 707.

The Study on Numerical Calculation of Glasses Ion Diffusion Equation Equation

CHEN Kai, ZHOU Zi-gang, YANG Kun,
HE Tan-bin, ZHANG Ren

School of Science, Southwest University of Science and Technology, Mianyang 621000, China

Abstract: The Finite Difference Method model is used in the field of glass substrate ion exchange for producing the Gradient refractive index optical devices. The matrix of MATLAB program is used for the iteration process. The square boundary conditions proliferation calibration results show that this method can get a more accurate numerical solution, All data calculation error is less than 0.2%, and is simple, the output solutions variety of advantages. For hexagonal borders and the proliferation of the same channel can provide better results.

Key words: ion diffusion equation; the Finite Difference Method; MATLAB