



VILNIAUS UNIVERSITETAS
MATEMATIKOS IR INFORMATIKOS FAKULTETAS
INFORMATIKOS INSTITUTAS
KOMPIUTERINIO IR DUOMENŲ MODELIAVIMO KATEDRA

Kompiuterinio modeliavimo antro kurso magistro baigiamasis darbas

Kietafazės YAG sintezės reakcijos parametrų nustatymas kompiuteriniais modeliais

Determination of reaction parameters for solid-phase YAG synthesis using computer models

Atliko:

Arnas Vaicekauskas

parašas

Vadovas:

asist. dr. Rokas Astrauskas

Vilnius

2026

Turinys

Santrauka	3
Summary	4
Įvadas	5
1. Literatūros apžvalga	6
Išvados ir rekomendacijos	7
Ateities tyrimų planas	8
Literatūros šaltiniai	9
Priedai	10
A. Pirmojo priedo pavadinimas	11
B. Antrojo priedo pavadinimas	12

Santrauka

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit, sed do eiusmod tempor incididunt ut labore et dolore magnam aliquam quaerat voluptatem. Ut enim aequale doleamus animo, cum corpore dolemus, fieri tamen permagna accessio potest, si aliquod aeternum et infinitum impendere malum nobis opinemur. Quod idem licet transferre in voluptatem, ut postea variari voluptas distinguere possit, augeri amplificarique non possit. At etiam Athenis, ut e patre audiebam facete et urbane Stoicos irridente, statua est in quo a nobis philosophia defensa et collaudata est, cum id, quod maxime placeat, facere possimus, omnis voluptas assumenda est, omnis dolor repellendus. Temporibus autem quibusdam et.

Summary

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit, sed do eiusmod tempor incididunt ut labore et dolore magnam aliquam quaerat voluptatem. Ut enim aequaleam animo, cum corpore dolemus, fieri tamen permagna accessio potest, si aliquod aeternum et infinitum impendere malum nobis opinemur. Quod idem licet transferre in voluptatem, ut postea variari voluptas distinguique possit, augeri amplificarique non possit. At etiam Athenis, ut e patre audiebam facete et urbane Stoicos irridente, statua est in quo a nobis philosophia defensa et collaudata est, cum id, quod maxime placeat, facere possimus, omnis voluptas assumenda est, omnis dolor repellendus. Temporibus autem quibusdam et aut officiis debitis aut rerum necessitatibus saepe eveniet, ut et voluptates repudiandae sint et molestiae non recusandae. Itaque earum rerum defuturum, quas natura non depravata desiderat. Et quem ad me accedis, saluto: 'chaere,' inquam, 'Tite!' lictores, turma omnis chorusque: 'chaere, Tite!' hinc hostis mi Albucius, hinc inimicus. Sed iure Mucius. Ego autem mirari satis non queo unde hoc sit tam insolens domesticarum rerum fastidium. Non est omnino hic docendi locus; sed ita prorsus existimo, neque eum Torquatum, qui hoc primus cognomen invenerit, aut torquem illum hosti detraxisse, ut aliquam ex eo est consecutus? – Laudem et caritatem, quae sunt vitae sine metu degendae praesidia firmissima. – Filium morte multavit. – Si sine causa, nollem me ab eo delectari, quod ista Platonis, Aristoteli, Theophrasti orationis ornamenta neglexerit. Nam illud quidem physici, credere aliquid esse minimum, quod profecto numquam putavisset, si a Polyaeno, familiari suo, geometrica discere maluisset quam illum etiam ipsum dedocere. Sol Democrito magnus videtur, quippe homini erudito in geometriaque perfecto, huic pedalis fortasse; tantum enim esse omnino in nostris poetis aut inertissimae segnitiae est aut fastidii delicatissimi. Mihi quidem videtur, inermis ac nudus est. Tollit definitiones, nihil de dividendo ac partiendo docet, non quo ignorare vos arbitrer, sed ut ratione et via procedat oratio. Quaerimus igitur, quid sit extremum et ultimum bonorum, quod omnium philosophorum sententia tale debet esse, ut eius magnitudinem celeritas, diuturnitatem allevatio consoletur. Ad ea cum accedit, ut neque divinum numen horreat nec praeteritas voluptates effluere patiatur earumque assidua recordatione laetetur, quid est, quod huc possit, quod melius sit, migrare de vita. His rebus instructus semper est in voluptate esse aut in armatum hostem impetum fecisse aut in poetis evolvendis, ut ego et Triarius te hortatore facimus, consumeret, in quibus hoc primum est in quo admirer, cur in gravissimis rebus non delectet eos sermo patrius, cum.

Įvadas

Itrio aliuminio granatas (YAG) yra sintetinis kristalas, kuris pasižymi pageidaujamomis optinėmis savybėmis. Ši medžiaga naudojama įvairiose srityse, pavyzdžiui, aukštos energijos šviesolaidžiuose [7] ir aukštos energijos lazeriuose [1]. Konkrečiai sričiai pritaikyti YAG kristalai būna legiruoti su retųjų žemių metalų jonais, kurie suteikia kristalui papildomų savybių. Minėtuose šviesolaidžiuose naudojamas YAG būna legiruotas su erbio arba iterbio jonais, o lazerių aktyviosioms terpėms gaminti dažniausiai naudojamas YAG kristalas legiruotas su neodimiu arba ceriu.

YAG kristalai turi daugybę taikymų, todėl šios medžiagos sintezės būdai yra plačiai tiriama. Keletas iš žinomų sintezės būdų yra nusodinimas (*angl. co-precipitation*) [10], beslėgis sukepinimas (*angl. pressureless sintering*) [2], zolio-gelio metodas (*angl. sol-gel*) [8], tačiau šiame tyrime bus nagrinėjama kietafazė (*angl. solid-state*) sintezės reakcija, kuri išsiskiria paprastu praktiniu įgyvendinimu – itrio ir aliuminio oksidų mišinys yra kaitinamas aukštoje temperatūroje, kurioje pradeda formotis YAG kristalai.

Atlikti šią reakciją laboratorijoje reikalauja daug laiko ir energijos, tačiau kompiuterinis šios reakcijos modelis gali padėti greitai ir pigiai nustatyti optimalų reakcijos vykdymo laiką, temperatūrą ir pamatyti mikroskopinius procesus, kurių tiesiogiai matyti negalime dėl fizinių sąlygų reikalingų reakcijai vykdyti.

Šios reakcijos modelį sudaro keletas fizikinių parametru, kuriuos būtina nustatyti norint, kad modelio rezultatai atitiktų fizinius rezultatus. Šiam tikslui pasiekti bus naudojami eksperimentiniu būdu gauti reakcijos duomenys, kuriuos paruoš Vilniaus Universiteto Chemijos fakulteto mokslininkai.

Šio **darbo tikslas** – sudaryti kompiuterinį kietafazės YAG sintezės reakcijos modelį ir nustatyti jo fizinius parametrus naudojantis eksperimentiniais duomenimis bei įvertinti modelio tikslumą.

Šiam tikslui pasiekti buvo išskelti šie uždaviniai:

- Įgyvendinti kompiuterinį modelį pritaikytą MIF superkompiuteriui, kuris spręstų diferencialinių lygčių sistema aprašyta YAG sintezės reakciją.
- Patobulinti kompiuterinį modelį – modeliuoti sumažėjusią difuziją vietose, kuriose YAG koncentracija yra padidėjusi.
- Įgyvendinti programinį karkasą, kuris leistu atlikti parametru paiešką lygiagrečiai skaičiavimus tarp daugelio superkompiuterio skaičiavimo mazgų.
- Naudojant kompiuterinį modelį surasti optimalius modelio parametrus

1. Literatūros apžvalga

Kietafazės YAG sintezės modeliavimas nėra nauja sritis, šios reakcijos modeliai yra aktyviai tiriami [11]. Šis modelis yra pagrįstas F. Ivanausko et al. pasiūlytu reakcijos-difuzijos modeliu [4], kurio fiziniai parametrai buvo rasti susijusiuose tyrimuose [6, 3]. Šiame darbe modeliuojamas cheminis procesas atrodo štai taip: ruošiant eksperimentą yra sudaromas homogeniškas ir stoichiometrinis aliuminio (Al_2O_3) ir itrio (Y_2O_3) oksidų miltelių mišinys. Abiejų oksidų milteliai yra sutrinti taip, kad vidutinis dalelių tūris būtų $1 \mu\text{m}^3$. Mišinys yra kaitinamas krosnyje 1000°C , 1200°C , 1600°C temperatūrose kelias dešimtis valandų, per kurias susiformuoja YAG kristalai. Yra žinoma, kad mechaninis maišymas gali pagreitinti reakcijos trukmę, todėl naujesniuose tyrimuose šis procesas yra įtraukiamas į modelį [11]. Tyrimuose procesas yra modeliuojamas kaip trijų netiesinių diferencialinių lygčių sistema:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = D_i \nabla^2 c_i + \alpha_i k c_1 c_2, \quad \alpha = (-3, -5, 2), \quad i = 1, 2, 3$$

Čia $c_i = c_i(\mathbf{x}, t)$ yra medžiagų koncentracijos taške \mathbf{x} laiko momentu t . Medžiagos sunumeruotos taip: itrio oksidas ($i = 1$), aliuminio oksidas ($i = 2$) ir YAG ($i = 3$). D_i – medžiagų difuzijos konstantos, o k – reakcijos greičio konstanta.

Laikoma, kad metalų dalelės yra tolygiai pasiskirsčiusios po erdvę, todėl modeliuojama tik maža, vienos dalelės dydžio sritis.

Straipsnyje sistema sprendžiama standartiniu Oilerio metodu (*angl. Euler method*), tačiau dviejų dimensijų modeliams egzistuoja efektyvesni metodai, pavyzdžiui neišreikštinis kintamosios krypties metodas (*angl. alternating direction implicit, ADI*), kurį pritaikius kartu su laiko žingsnio didinimo strategija galima efektyviai modeliuoti eksponentiškai didesnes erdves su tokia pačia diskrečių taškų rezoliucija [9]. Tyrime YAG sintezę modeliuosime remdamiesi šiuo matematiniu modeliu.

Yra žinoma, kad šioje sintezės reakcijoje formuojasi tarpiniai junginiai – itrio aliuminio perovskitas (YAP) bei monoklininis itrio aluminatas (YAM) [5], tačiau šis modelis į tai neatsižvelgia. Jei krosnies temperatūra nėra pakankamai aukšta, šie dariniai reakcijos eigoje nedingsta, kas ženkliai sumažina kristalo kokybę. Šiame tyrime taip pat buvo iširta kaip nuo dalelių dydžio priklauso galutinio produkto išeiga – nustatyta, kad optimaliausi dalelių dydžiai yra 110nm itrio oksido dalelėms, o aliuminio oksido – 90nm, tokiu atveju vykdant reakciją prie 1450°C galima pasiekti 93% YAG turinio pagal tūrį.

Išvados ir rekomendacijos

Ateities tyrimų planas

Literatūros šaltiniai

- [1] Kana Fujioka, Kenta Yagasaki, Takuya Sawada, Hisashi Minemoto, Hiroshi Fuji, ir Kazuhisa Yamamoto. AlN–Ce-doped yttrium aluminum garnet composite ceramic phosphor for high-power laser lighting. *Optical Materials*, 121:111507, 2021.
- [2] A Ikessue ir YL Aung. Synthesis of transparent YIG ceramics by pressureless sintering. *Journal of the European Ceramic Society*, 42(14):6762–6765, 2022.
- [3] Feliksas Ivanauskas, Aivaras Kareiva, ir Bogdan Lapcun. Computational Modelling of the YAG Synthesis. *Journal of Mathematical Chemistry*, 46(2):427–442, 2009.
- [4] Feliksas Ivanauskas, Aivaras Kareiva, ir Bogdanas Lapcun. On the Modelling of Solid State Reactions.Synthesis of YAG. *Journal of Mathematical Chemistry*, 37(4):365–376, 2005.
- [5] Elizabeth R Kupp, Sujarinee Kochawattana, Sang-Ho Lee, Scott Misture, ir Gary L Messing. Particle size effects on yttrium aluminum garnet (YAG) phase formation by solid-state reaction. *Journal of Materials Research*, 29(19):2303–2311, 2014.
- [6] Mažvydas Mackevičius, Feliksas Ivanauskas, Aivaras Kareiva, ir Darius Jasaitis. A Closer Look at the Computer Modeling and Sintering Optimization in the Preparation of YAG. *Journal of Mathematical Chemistry*, 50(8):2291–2302, 2012.
- [7] Yuli Pang, Xu Lu, Xin Zhang, Ziheng Miao, Min Sun, Guowu Tang, Jialong Li, Qilai Zhao, Changsheng Yang, Dongdan Chen, ir others. Recent advances in fabrication and applications of yttrium aluminum garnet-based optical fiber: a review. *Materials*, 17(14):3426, 2024.
- [8] Marc Singlard, Fabien Rémondière, Stéphane Oriol, Guisepe Fiore, Bruno Vieille, Michel Vardelle, ir Sylvie Rossignol. Sol-gel synthesis of yttrium aluminum garnet (YAG): effects of the precursor nature and concentration on the crystallization. *Journal of Sol-Gel Science and Technology*, 87(2):496–503, 2018.
- [9] Arnas Vaicekauskas. Maišymo proceso modeliavimas YAG reakcijose. Bakalauro darbas, Vilnius, 2025.
- [10] Hongzhi Wang, Lian Gao, ir Koichi Niihara. Synthesis of nanoscaled yttrium aluminum garnet powder by the co-precipitation method. *Materials Science and Engineering: A*, 288(1):1–4, 2000.
- [11] Vytenis Šumskas, Feliksas Ivanauskas, Aivaras Kareiva, Andrius Pakalniškis, ir Rokas Astrauskas. Yttrium aluminum garnet synthesis: Analysis of yield factors using modeling. *Chemical Engineering Research and Design*, 227:657–664, 2026.

Priedai

Dokumentą sudaro du priedai: Skyrius A priede ...

A. Pirmojo priedo pavadinimas

B. Antrojo priedo pavadinimas