

Владимир Семёнович ШЕЙНКМАН¹
Олег Анатольевич СИМОНОВ²
Юлия Юрьевна ЕРИНА³

УДК 551.79 + 550.93

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ КВАРЦЕВОЙ ЧАСТИЦЫ*

¹ кандидат географических наук, ведущий научный сотрудник,
Институт криосферы Земли, Тюменский научный центр СО РАН
vlad.sheinkman@mail.ru

² кандидат физико-математических наук, заместитель директора,
Тюменский научный центр СО РАН
s_o_a@ikz.ru; ORCID: 0000-0003-2362-3588

³ магистрант, Тюменский государственный университет; инженер-исследователь,
Институт криосферы Земли, Тюменский научный центр СО РАН
erina.yulya@inbox.ru; ORCID: 0000-0002-8577-1044

Аннотация

Одним из широко используемых методов исследования минералов является термолюминесцентный (ТЛ) метод, который используется для датирования осадочных горных пород четвертичного возраста. Обычно сложность применения ТЛ-датирования заключается в недостатке информации о структуре используемого в эксперименте минерала. Для объективно надежной интерпретации экспериментальных данных авторы применили метод цифрового двойника. В этом случае моделируются все этапы преобразования используемого минерала от его захоронения в составе осадочных горных пород до стимулирования в нем выплеска ТЛ-сигнала в лабораторных условиях

* Исследования выполнены при поддержке ресурсов госзадания № 0296-2021-0012.

Цитирование: Шейнкман В. С. Численное моделирование термолюминесценции кварцевой частицы / В. С. Шейнкман, О. А. Симонов, Ю. Ю. Ерина // Вестник Тюменского государственного университета. Физико-математическое моделирование. Нефть, газ, энергетика. 2021. Том 7. № 3 (27). С. 136-151
DOI: 10.21684/2411-7978-2021-7-3-136-151

на специальных установках с учетом неравномерности теплопереноса внутри навески этого минерала.

В работе приведены результаты численного моделирования ТЛ-сигнала от сферической частицы природного кварца. Моделирование проводилось в два этапа. На первом этапе определялось влияние времени захоронения кварца в толще осадочных горных пород на его ТЛ-сигнал. Для этого была поставлена задача о накоплении кристаллической решеткой кварца информации о времени его нахождения в естественном радиационном поле. На втором этапе моделировался ТЛ-сигнал от сферической частицы, которая нагревалась на экспериментальной установке с поверхности по линейному закону. Было выяснено, что, во-первых, время захоронения кварца влияет на форму ТЛ-кривой и, следовательно, минерал применим для датирования. Во-вторых, следует проводить контроль режима нагрева навески кварца, так как при высоких скоростях нагрева у частиц большого радиуса существенны неравномерности теплопереноса. Это также влияет на форму ТЛ-сигнала и, как следствие, может затруднять получение возрастных определений или искажать их. Для оценки влияния неравномерности теплопереноса был предложен безразмерный параметр подобия, который связывает радиус частиц и скорость нагрева.

Ключевые слова

Термолюминесценция, абсолютное датирование осадочных горных пород, зонная модель полупроводника, электронные ловушки, центры свечения, дефекты кристаллической структуры кварца.

DOI: 10.21684/2411-7978-2021-7-3-136-151

Введение

Существуют минералы, имеющие особенности структуры кристаллической решетки, которые позволяют накапливать информацию о времени нахождения их образца в поле радиоактивного излучения, а также считывать ее по свечению минерала, стимулированному нагревом, электрическим полем, излучением различного спектра и т. д. Это свечение называют люминесценцией.

Стимуляция люминесценции возможна различными способами, но один из наиболее простых в реализации — термический, от которого получил название метод исследования минералов — метод термостимулированной люминесценции (термолюминесценции, или ТЛ-метод). Соответственно, свечение, наблюдаемое при нагреве образца, называют термолюминесцентным сигналом.

В данной работе, являющейся продолжением статьи [6], предлагается подход к совершенствованию процедуры ТЛ-метода, что реализуется через постановку и решение обратной задачи, которая кроме датирования позволила бы многосторонне исследовать свойства изучаемого минерала. Суть этой задачи — определение ряда характеристик образца и восстановление истории его преобразования в толще пород по стимулируемому в нем ТЛ-сигналу. Решение задачи

осуществлялось с помощью «цифрового двойника», который является моделью физических процессов в реальном минерале, зависящих от его фракционного состава, плотности, характеристик прибора (например, области нагрева) и прочих параметров.

Постановка задачи

Поскольку целью работы является моделирование ТЛ-сигнала образца кварца с учетом неравномерности тепловых процессов внутри образца, а также с учетом особенностей накопления информации кварцем в период его захоронения в толще осадочных горных пород, задача ставилась для достижения этой цели.

При моделировании ТЛ кварца использовалась зонная модель его кристаллической решетки (рис. 1) [7], которая описывает ее структуру с точки зрения энергетических зон.

В соответствии с теорией, в идеальном кристалле кварца свободные носители заряда (электроны и дырки) не могут находиться в области между верхней границей валентных уровней и зоной проводимости. Эту часть пространства называют запрещенной зоной. В реальном кристалле из-за примесей или механических повреждений возникают дефекты его структуры, которые представляют собой локальные уровни захвата электронов и дырок в запрещенной зоне.

Некоторые из дефектов, называемые ловушками, способны удерживать свободные носители заряда до тех пор, пока кристаллической решетке не будет сообщена дополнительная энергия в виде тепла, излучения и т. д. Другие дефекты — центры свечения — при захвате носителей заряда испускают квант света. Именно эти уровни делают люминесценцию возможной.

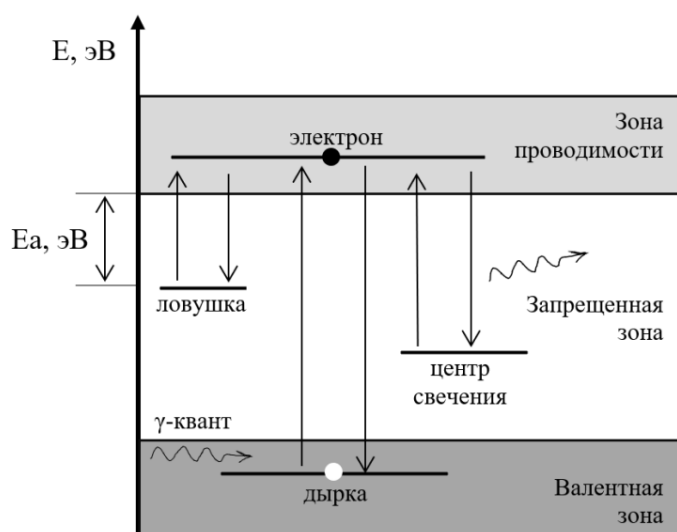


Рис. 1. Зонная модель кристаллической решетки диэлектрика/кварца

Fig. 1. Band model of the dielectric/quartz

В природном кварце дефекты появляются в основном при его возникновении на этапе породообразования [8] и присутствуют всегда. Пока песчинки кварца находятся в толще осадочных горных пород, радиоактивные частицы образуемого в ней поля (поскольку в этой толще всегда есть некоторое количество радиоактивных источников) выбивают электроны из валентной зоны, способствуя перемещению их в зону проводимости. Свободные электроны захватываются ловушками и удерживаются до тех пор, пока образцы кварца не извлекут из толщи пород и не начнут нагревать. В какой-то момент тепловой энергии будет достаточно, чтобы электроны высвободились и переместились в зону проводимости, а далее либо попали в другие ловушки и повторно из них вылетели, либо были захвачены центрами свечения с испусканием кванта света — с появлением люминесценции.

Дефекты кристаллической решетки, как правило, представляют собой точечные вакансии по кислороду, межузельные или примесные атомы [1]. Соответственно, в структуре минерала могут возникать ловушки или центры свечения разной природы, которые будут иметь разные характеристики и конкурировать друг с другом. Наличие нескольких типов уровней захвата иногда можно отследить по асимметричности получаемого ТЛ-сигнала или по наличию в нем нескольких пиков.

Метод решения

Для описания процесса накопления носителей заряда в кристаллической решетке кварца и его люминесценции при нагреве использовалась система уравнений [1, 3], в которой каждое уравнение описывает изменения концентрации носителей заряда в дефектах, зоне проводимости и валентной зоне.

Полагалось, что в выбранной модели структуры кварца ловушки и центры свечения представлены одним типом дефектов, сам образец — однородная сфера, в которой температура меняется как по времени, так и по пространственной координате.

Авторами была получена система уравнений (1)-(5), которая решалась совместно с уравнением теплопроводности в сферической системе координат (6):

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -h \cdot n_c \cdot \sigma_h \cdot \sqrt{\frac{3 \cdot k \cdot T}{m_e}} + (H - h) \cdot s_h \cdot e^{\frac{-E_{ah}}{k \cdot T}}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = (N - n) \cdot n_c \cdot \sigma_n \cdot \sqrt{\frac{3 \cdot k \cdot T}{m_e}} - n \cdot s_n \cdot e^{\frac{-E_{an}}{k \cdot T}}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial n_v}{\partial t} = B \cdot w - n_v \cdot n_c \cdot \sigma_v \cdot \sqrt{\frac{3 \cdot k \cdot T}{m_e}}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial n_c}{\partial t} = \frac{\partial h}{\partial t} - \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial n_v}{\partial t}, \quad (4)$$

$$I = h \cdot n_c \cdot \sigma_h \cdot \sqrt{\frac{3 \cdot k \cdot T}{m_e}}, \quad (5)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \left(\frac{2}{r} \cdot \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \right), \quad (6)$$

где h — концентрация свободных центров свечения, $1/\text{м}^3$; n и n_c — концентрация электронов в ловушках и зоне проводимости, $1/\text{м}^3$; n_v — концентрация дырок в валентной зоне, $1/\text{м}^3$; H и N — общая концентрация центров свечения и электронных ловушек, $1/\text{м}^3$; I — интенсивность ТЛ-сигнала, $\text{м}^{-3}\text{с}^{-1}$; t — время, с; k — постоянная Больцмана; T — температура, К; m_e — масса электрона; B — интенсивность излучения естественного радиационного поля осадочных горных пород, с^{-1} ; w — вероятность взаимодействия радиоактивной частицы поля с кристаллической решеткой кварца, м^{-3} ; E_{ah} , E_{an} и E_{av} — энергия активации центров свечения, ловушек и дырок в валентной зоне, эВ; s_h , s_n и s_v — частотный фактор центров свечения, ловушек и дырок в валентной зоне, с^{-1} ; σ_h , σ_n и σ_v — сечение захвата центров свечения, ловушек и дырок в валентной зоне, м^2 . Таким образом E_{ai} , s_i и σ_i — характеристики i -го типа уровня захвата, и, согласно [3], последние две величины связаны соотношением: $\sigma_i/s_i = \text{const} \approx 1,5 \cdot 10^{26}$.

Из уравнения (6) r — радиальная координата, м; $\alpha = \alpha(u)$ — коэффициент температуропроводности, определяемый по формуле:

$$\alpha = \frac{\chi}{\rho \cdot C_p}, \quad (7)$$

где ρ — плотность кварца, $\text{кг}/\text{м}^3$; C_p — теплоемкость кварца, $\text{Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$; χ — теплопроводность кварца, $\text{Вт}/(\text{м} \cdot \text{К})$.

В качестве модельного материала выбран твердый поликристаллический кварц — диоксид кремния SiO_2 , теплофизические свойства которого значительно меняются при росте температуры от 293 К до 527 К. Изменение этих свойств описывается следующими полиномиальными зависимостями [5]:

$$\begin{aligned} \rho(T) = & 2672,472 - 0,1655731 \cdot T + 9,434743 \cdot 10^{-4} \cdot T^2 - \\ & - 3,391169 \cdot 10^{-6} \cdot T^3 + 4,850933 \cdot 10^{-9} \cdot T^4 - \\ & - 2,511325 \cdot 10^{-12} \cdot T^5, \text{ кг}/\text{м}^3; \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} C_p(T) = & 156,8049 + 1,899827 \cdot T + 0,0018682 \cdot T^2 - \\ & - 7,115139 \cdot 10^{-6} \cdot T^3 + 4,927861 \cdot 10^{-9} \cdot T^4, \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К}). \end{aligned} \quad (9)$$

Коэффициент теплопроводности в моделируемом диапазоне температур принимался постоянным и равным $\chi = 1,4 \text{ Вт}/(\text{м} \cdot \text{К})$.

Полагается, что кварцевая частица имеет радиус R . Температура ее поверхности меняется по линейному закону до некоторой предельной температуры T_k , а далее поддерживается постоянной:

$$T = \begin{cases} T_0 + vt, & T_0 + vt < T_k, \\ T_k, & T_0 + vt \geq T_k, \end{cases} \quad (10)$$

где T_0 и T_k — начальная и конечная температура нагрева, К; ν — скорость нагрева, К/с.

При решении системы (1)-(5) принимались следующие значения параметров кристаллической решетки кварца.

Центры свечения: энергия активации $Ea_h = 2$ эВ, частотный фактор $s_h = 10^{12} \text{ с}^{-1}$, общая концентрация $H = 0,5 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$. Принятая модель соответствует дефекту «самозахватывающийся экситон» (O = Si-) [8].

Электронные ловушки: энергия активации $Ea_n = 1,55$ эВ, частотный фактор $s_n = 10^{12} \text{ с}^{-1}$, общая концентрация $N = 0,5 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$. Выбранная модель ловушек соответствует дефекту «пероксидный мост», который является вакансией по кремнию (Si-O-O-Si) [8].

Дырки: частотный фактор $s_v = 10^{12} \text{ с}^{-1}$.

Описание наиболее вероятных дефектов в структуре природного кварца приводится в работах [2, 4, 8], авторы которых указывают на существование нескольких типов дефектов, которые отличаются друг от друга глубиной энергетического уровня. В данной работе рассматривается модель с одним типом ловушек и центров свечения. Включение дополнительных дефектов возможно через добавление еще одного уравнения в систему (1)-(5), аналогичного уравнению (1) или (2).

Численный эксперимент был реализован в программном пакете MatLab методом конечных элементов. Для решения задачи о переносе тепла в частице использовалась простая пространственная сетка, представляющая собой отрезки x_i по радиусу R . На каждом временном шаге t_j решалось уравнение теплопроводности (5) и определялось распределение температуры вдоль радиуса.

Для моделирования ТЛ одномерная сетка преобразована в совокупность концентрических оболочек: каждому отрезку $[x_i, x_{i+1}]$ в трехмерной задаче соответствует сферическая оболочка с наружным радиусом x_{i+1} и внутренним x_i (м). Температура в такой оболочке является уже известной функцией, зависящей только от времени. При этом считается, что оболочки не обмениваются свободными носителями заряда друг с другом или этот обмен незначителен. Это допущение связано с тем, что длина свободного пробега электронов много меньше толщины соответствующей оболочки.

Для каждой оболочки решалась система уравнений (1)-(5) и по уравнению (11) определялось количество вылетевших фотонов с учетом перерасчета на реальный объем:

$$I_i(t) = \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot (x_i^3 - x_{i-1}^3) \cdot \frac{dh_i}{dt}, \quad (11)$$

где I_i — интенсивность излучения от i -й оболочки, 1/с.

При допущении, что поглощения излучения внутри частицы нет, суммарная интенсивность ТЛ-излучения определялась по:

$$I(t) = \sum_{i=1}^{R/\Delta x} I_i(t). \quad (12)$$

Результаты и их обсуждение

1. Влияние времени захоронения кварца на форму ТЛ-сигнала

Сначала необходимо было проверить положение о том, что кварц мелко-песчаной фракции можно использовать для датирования осадочных горных пород. Для этого моделировалось накопление кварцем свободных носителей зарядов в условиях естественного радиоактивного поля. Обычно кварц захоронен в толще осадочных горных пород [6] при температуре, для которой частота вылета электронов в зону проводимости много меньше, чем при температуре в лабораторной ТЛ-установке. Если учитывать тот факт, что интенсивность поля невелика и постоянна, то система «кристаллическая решетка — внешнее поле» в некоторый момент времени должна прийти в равновесие. В этом состоянии концентрация электронов в ловушках и центрах свечения не меняется, потому что новые свободные электроны возвращаются в зону валентных уровней. При этом концентрация электронов в дефектах будет отличаться, так как они имеют разную природу и отличающиеся характеристики.

Авторами были промоделированы ТЛ-сигналы от образцов с параметрами захоронения в осадочных горных породах условно разного возраста. Для численного моделирования выбрана частица радиусом $R = 1$ мм и скорость ее нагрева 1 К/сек. Время залегания песчинок кварца в радиационном поле варьировалось от 0,3 до 32 временных единиц. Так как авторы не ставили своей целью определение точного возраста, а также была использована упрощенная модель кварца, то расчет проводился в условных единицах времени.

На рис. 2 для каждого значения времени захоронения в осадочных горных породах приведен график зависимости интенсивности ТЛ-сигнала от температуры (далее — ТЛ-кривая) и определены параметры: максимальная интенсивность ТЛ, время (от начала нагрева) и соответствующая температура на поверхности частицы в момент максимума интенсивности.

Действительно, возраст моделируемого образца влияет на форму ТЛ-кривой: отличается ее ширина, высота и положение максимума пиков. Последняя характеристика регистрируется наиболее часто, так, она просто определяется по экспериментальной кривой и часто используется при расчете величин датировок — в целях возрастной диагностики изучаемых пород.

Температура максимума ТЛ-сигнала с увеличением времени захоронения песчинок кварца смещается в область низких температур (рис. 3), и за 32 усл. ед. времени смещение составляет около 8 градусов.

График зависимости максимума интенсивности ТЛ-сигнала от возраста ведет себя более сложным образом (рис. 4) и повторяет выводы, сделанные в работе [6]. Для простоты пользования можно классифицировать образцы, разделив их на условно молодые, зрелые и древние. Для образцов из первой категории интенсивность максимума ТЛ-сигнала линейно зависит от возраста, и, следовательно, ТЛ-датирование по положению этого максимума реализуемо. В то время как древние образцы находятся в состоянии равновесия и теряют часть информации о периоде их захоронения. Последнее отражается убывающей зависимостью между максимумом интенсивности ТЛ и возрастом образца — см. рис. 4.

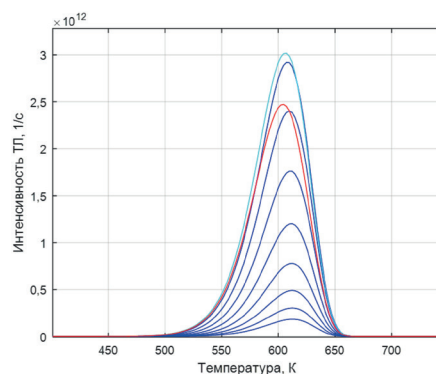


Рис. 2. Изменение формы ТЛ-кривой от времени захоронения кварца в осадочных горных породах. Диапазон времени от 10^{10} до 10^{12} с (или от 0,3 до 32 усл. ед.). Красный график — 10^{10} с, голубой — $1,1 \cdot 10^{11}$ с

Fig. 2. Change in the shape of the TL-curve by the time of burial quartz in sedimentary rocks. The time range is from 10^{10} to 10^{12} s (or from 0.3 to 32 conv. units). Red graph represents 10^{10} s, blue — $1,1 \cdot 10^{11}$ s

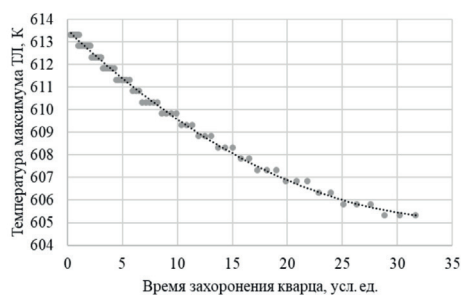


Рис. 3. Изменение температуры максимума ТЛ-сигнала от времени захоронения кварца в осадочных горных породах

Fig. 3. Changes in the maximum temperature of the TL-signal by the time of burial quartz in sedimentary rocks

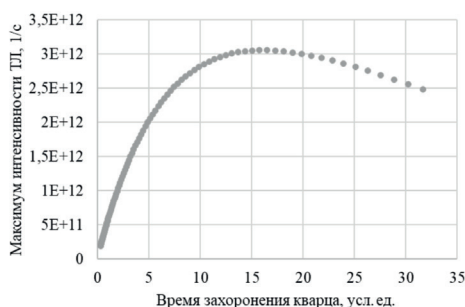


Рис. 4. Изменение интенсивности ТЛ-сигнала в точке максимума от времени захоронения песчинок кварца

Fig. 4. Change in the TL-signal intensity at the maximum point versus the burial time of quartz grains

2. Влияние режима нагрева песчинок кварца на форму ТЛ-кривой

Для оценки влияния неравномерности переноса тепла внутри частицы на ее ТЛ-кривую была проведена серия численных экспериментов, в которых моделируемые образцы кварца условно одного возраста имели одинаковую структуру кристаллической решетки, но отличались размером или нагревались при разных скоростях. Результаты экспериментов для изменяющейся скорости нагрева приведены на рис. 5, а для меняющегося радиуса частицы кварца — на рис. 6 и 7.

Выяснилось, что наибольшая неравномерность в распределении температуры наблюдается у крупных частиц, нагреваемых при высоких скоростях, и этот фактор существенно влияет на форму ТЛ-кривой (рис. 5-7). Действительно, любая конечная частица не может прогреться мгновенно, а неравномерность прогрева создает пространственную неравномерность концентрации электронов в ловушках.

Оценить это возможно, сравнив характерное время нагрева поверхности частицы с временем ее прогрева вдоль радиуса. Время нагрева τ_0 является функцией измерительной аппаратуры и оценивается как время, за которое температура поверхности частицы изменилась на некоторое характерное ΔT при заданной скорости нагрева ν , то есть:

$$\tau_0 = \Delta T/\nu. \quad (13)$$

Время прогрева частицы τ оценивается по ее радиусу и коэффициенту температуропроводности, имеющего размерность $\text{м}^2/\text{сек}$:

$$\tau = R^2/\alpha. \quad (14)$$

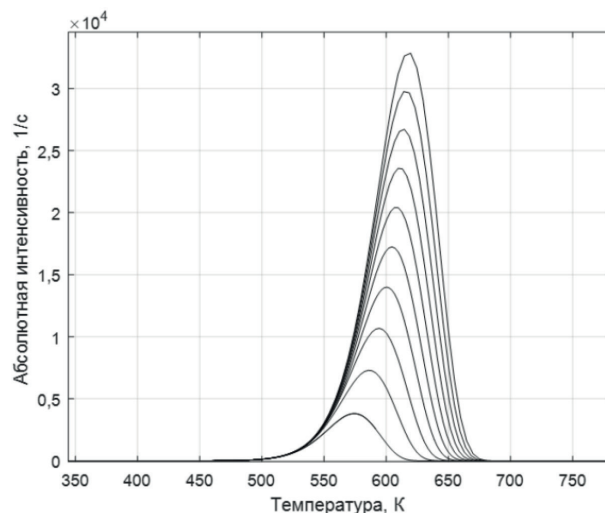


Рис. 5. ТЛ-сигнал для частицы, радиусом 1 мм при скоростях нагрева от 1 К/с до 10 К/с

Fig. 5. TL-signal for a particle with a radius of 1 mm at heating rates from 1 K/s to 10 K/s

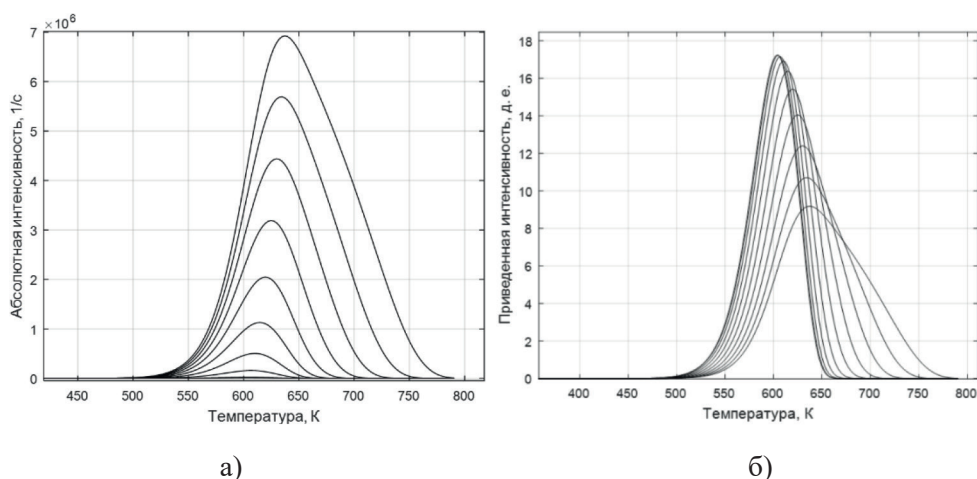


Рис. 6. Интенсивность ТЛ-сигнала для частиц радиусом от 0,1 мм (10^{-4} м) до 10 мм (10^{-2} м). Слева (а) — абсолютное значение интенсивности; справа (б) — приведенное к единице объема

Fig. 6. Intensity of the TL-signal for particles with a radius of 0.1 mm (10^{-4} m) to 10 mm (10^{-2} m). On the left (a) — the absolute value of the intensity; on the right (б) — reduced to the unit of volume

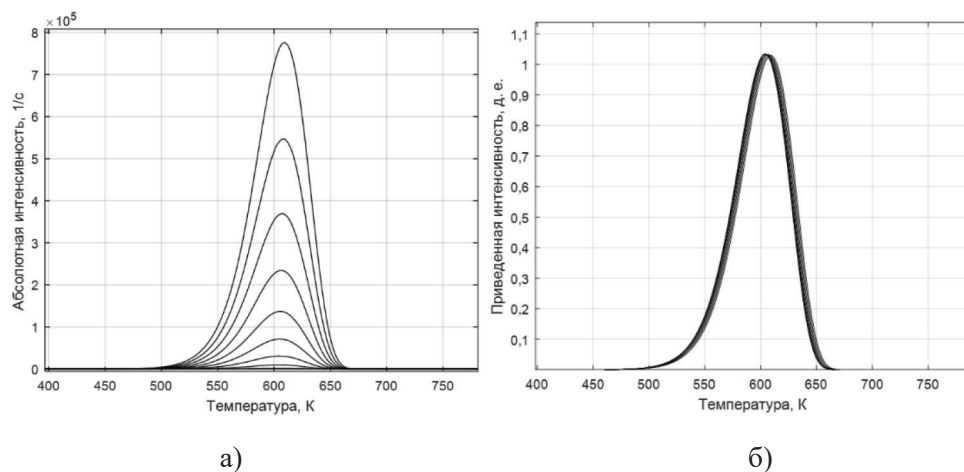


Рис. 7. Интенсивность ТЛ-сигнала для частиц радиусом от 0,1 мм (10^{-4} м) до 10 мм (10^{-2} м), полученные без учета теплопереноса в частице (только для задачи о моделировании ТЛ). Слева (а) — абсолютное значение интенсивности; справа (б) — приведенное к единице объема

Fig. 7. The intensity of the TL-signal for particles with a radius of 0.1 mm (10^{-4} m) to 10 mm (10^{-2} m) obtained without taking into account heat transfer in the particle (only for the beginning of TL modeling). On the left (a) — the absolute value of the intensity; on the right (б) — reduced to the unit of volume

Отношение введенных параметров является характеристикой неоднородности прогрева частицы:

$$K = \frac{\alpha \cdot \Delta T}{\nu \cdot R^2}. \quad (15)$$

Полученный параметр, с одной стороны, позволяет оценить суть неравномерности распространения тепла в частице: при K больше единицы время прогрева образца меньше времени нагрева его поверхности, люминесценция начинается сразу же во всем объеме, и поэтому можно полагать, что теплофизические процессы не влияют на ТЛ-сигнал. Однако при K меньше единицы неравномерность теплопереноса будет существенной, и это необходимо учитывать при анализе и моделировании ТЛ.

С другой стороны, K является безразмерным параметром подобия. Из формулы (15) следует, что произведение $\nu \cdot R^2$ определяет характерный для задачи градиент температуры. У частиц, которым соответствует одинаковое значение $\nu \cdot R^2$, распространение тепла будет подобно. Тем не менее это не означает, что подобны будут и кривые термовысвечивания. Действительно, как отмечалось выше, интенсивность свечения определяется не только температурой, но и тем, как долго частица находится при такой температуре. Однако ожидается, что при высоких скоростях нагрева (или при меньших радиусах) различия в кривых термовысвечивания должны уменьшаться.

Описанные положения подтверждают графики на рис. 8, полученные для трех различных значений параметра K . В первом ряду графиков показано изменение интенсивности люминесцентной вспышки от времени для трех значений K : 0,03, 1 и 30. Интенсивность вспышки нормирована на ее максимальную величину, а время — на время нагрева. На том же графике показаны изменения температуры на поверхности частицы (светло-зеленый график) и средней по объему температуры (темно-зеленый график). За нулевое значение температуры принималась начальная температура и проводилась нормировка на температуру нагрева: $(T - T_0)/T_{0k}$, в условиях моделирования $T_0 = 293$ К, а $T_{0k} = T_k - T_0 = 527$ К. По интенсивности люминесцентной вспышки определялись моменты времени (P_1, P_2, P_3, P_4, P_5), в которых интенсивность излучения равнялась 0,1; 0,5; 1; 0,5; 0,1 от I_{\max} соответственно. В эти моменты времени рассчитывалось распределение температуры (графики во второй строке рис. 8) и концентрации электронов (графики в третьей строке рис. 8) в зависимости от радиальной координаты (радиальная координата нормирована на радиус частицы r/R). Распределения температуры показаны в среднем ряду графиков на рис. 8, концентрации в нижнем. Линии на графиках помечены в соответствии с моментами времени P_1, P_2, P_3, P_4, P_5 .

В первом расчете (рис. 8а) скорость нагрева равнялась 1 К/сек, а радиус частицы 1 мм, безразмерный параметр $K = 30$. При таких значениях различия между средней температурой и температурой на поверхности частицы несущественны, кривизна в распределении температуры и концентрации по радиальной

координате не проявляется, пространственные неоднородности не влияют на люминесценцию частицы.

На рис. 8б приведены данные для $K = 1$, полученные для скорости нагрева 3 К/сек и радиуса частицы 3,2 мм, при таких параметрах расчета начинают быть значительными пространственные градиенты температур, проявляется разница между средней температурой и температурой на границе кварцевой частицы, что приводит к неоднородности люминесценции в пространстве и изменению формы кривой зависимости люминесцентной вспышки от времени.

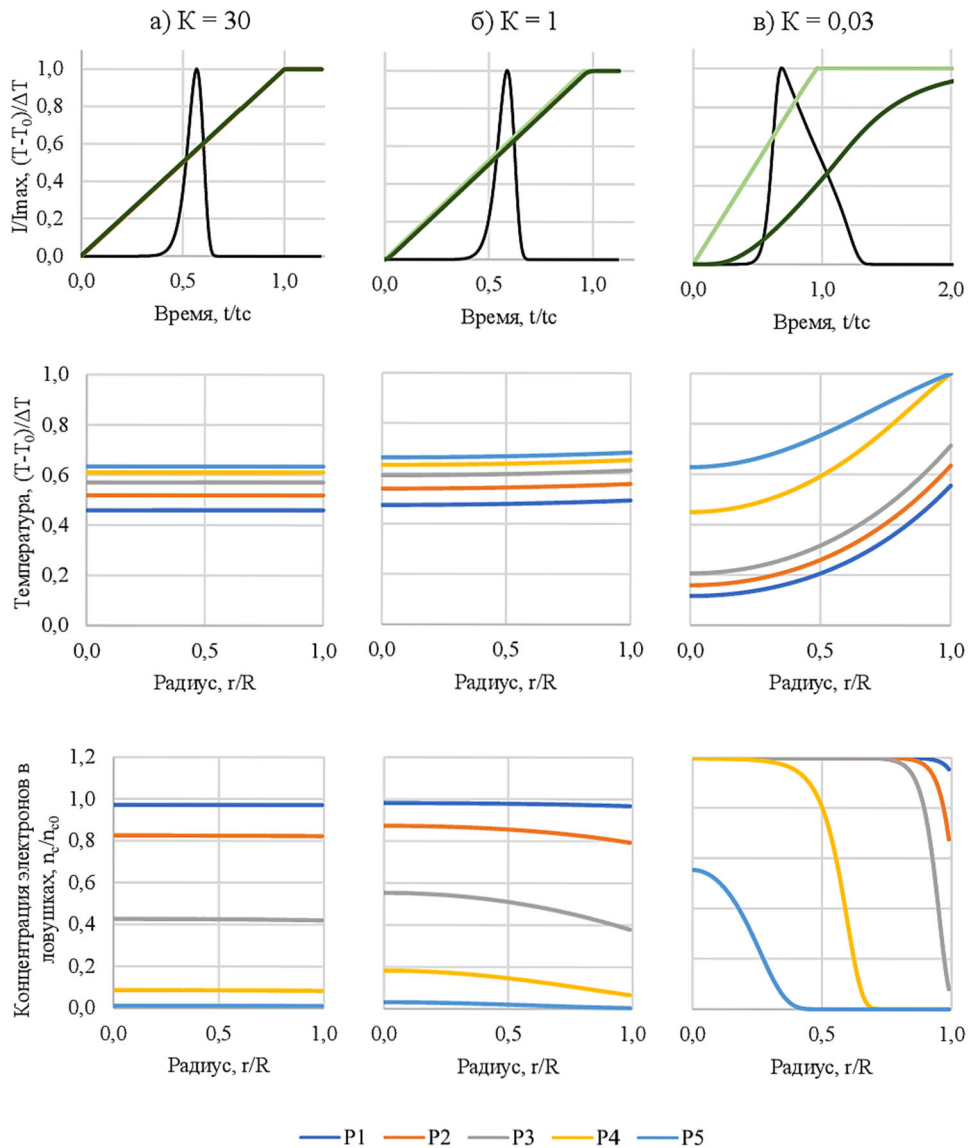


Рис. 8. Исследование параметра K

Fig. 8. Investigation of the parameter K

С уменьшением K пространственные неоднородности нарастают, что иллюстрируют графики, представленные на рис. 8в, полученные для скорости нагрева 10 К/сек и радиуса 10 мм. При таких значениях скорости нагрева и радиуса безразмерный параметр $K = 0,03$. При столь низком K значительны изменения температуры и концентрации электронов, что существенно изменяет зависимость интенсивности люминесцентного излучения от времени.

Заключение

Проведенное численное моделирование ТЛ круглой частицы кварца песчаной фракции позволяет сделать следующие выводы:

1. Скорость нагрева образца является значимым параметром, так как может существенно влиять на форму и, как следствие, на расшифровку ТЛ-сигнала: при высоких скоростях сказывается неравномерность переноса тепла вдоль радиуса частицы, а при низких возникают затруднения в однозначном определении ключевых характеристик ТЛ-сигнала, например точки максимума, которая в некоторых методиках является определяющей. Контроль и регистрация температуры образца в каждый момент времени значимы при ТЛ-исследовании минералов, так как обеспечивают повторяемость и достоверность получаемых данных.
2. Введенный безразмерный параметр K является способом первичной оценки необходимости решения теплофизической задачи, однако для более точных результатов нужно моделировать реальную навеску песка и термолюминесцентного отклика от нее.

Авторы выражают надежду, что описанные методы и оценки будут полезны для исследователей, изучающих люминесценцию минералов-таймеров осадочных горных пород.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Антонов-Романовский В. В. Кинетика фотолюминесценции кристаллофосфоров / В. В. Антонов-Романовский. М.: Наука, 1966. 325 с.
2. Гриценко В. А. Численное моделирование собственных дефектов в SiO_2 и Si_3N_4 / В. А. Гриценко, Ю. Н. Новиков, А. В. Шапошников, Ю. Н. Мороков // Физика и техника полупроводников. 2001. Том 24. № 9. С. 1041-1049.
3. Кюри Д. Люминесценция кристаллов / пер. с фр. Н. М. Лозинской; под ред. [и с предисл.] Н. А. Толстого. М.: Издательство иностранной литературы, 1961. 199 с.
4. Марфунин А. С. Спектроскопия, люминесценция и радиационные центры в минералах / А. С. Марфунин. М.: Недра, 1975. 287 с.
5. Пивинский Ю. Е. Кварцевая керамика / Ю. Е. Пивинский, А. Г. Ромашин. М.: Металлургия, 1974. 264 с.
6. Шейнкман В. С. Численное моделирование воздействия радиоактивного излучения на кварц с дефектами кристаллической структуры и анализ термолюминесцентного

- сигнала / В. С. Шейнкман, Ю. Ю. Ерина, О. А. Симонов // Вестник Тюменского государственного университета. Физико-математическое моделирование. Нефть, газ, энергетика. 2020. Том 6. № 4 (24). С. 158-178.
7. Bloch F. Uber die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern / F. Bloch // Zeitschrift für Physik. 1928. No. 52. Pp. 555-600.
 8. Griscom D. L. A minireview of the natures of radiation-induced point defects in pure and doped silica glasses and their visible/near-IR absorption bands, with emphasis on self-trapped holes and how they can be controlled / D. L. Griscom // Physics Research International. 2013. Vol. 2 (2-3). 14 pp.

Vladimir S. SHEINKMAN¹

Oleg A. SIMONOV²

Yuliya Yu. ERINA³

UDC 551.79 + 550.93

NUMERICAL SIMULATION OF THERMOLUMINESCENCE QUARTZ PARTICLE*

¹ Cand. Sci. (Geogr.), Leading Researcher,
Institute of Earth Cryosphere, Tyumen Scientific Center Siberian Branch
of the Russian Academy of Sciences
vlad.sheinkman@mail.ru

² Cand. Sci. (Phys.-Math.), Deputy Director of Tyumen Scientific Center
Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences
s_o_a@ikz.ru; ORCID: 0000-0003-2362-3588

³ Master Student, University of Tyumen; Research Engineer,
Institute of Earth Cryosphere, Tyumen Scientific Center Siberian Branch
of the Russian Academy of Sciences
erina.yulya@inbox.ru; ORCID: 0000-0002-8577-1044

Abstract

One of the widely used methods for studying minerals is the thermoluminescent (TL) method, which is used to date Quaternary sedimentary rocks. Usually, the difficulty in using TL dating is the lack of information about the structure of the mineral used in the experiment. For reliable interpretation of experimental data, the authors applied the digital twin method. In this case, all stages of the transformation of the mineral used are modeled from its burial in sedimentary rocks to the stimulation of the TL-signal splash in it under laboratory conditions on special installations, taking into account the unevenness heat transfer inside the sample of this mineral.

* The work was carried out according to the resource support by the State order No. 0296-2021-0012.

Citation: Sheinkman V. S., Simonov O. A., Erina Yu. Yu. 2021. "Numerical simulation of thermoluminescence quartz particle". Tyumen State University Herald. Physical and Mathematical Modeling. Oil, Gas, Energy, vol. 7, no. 3 (27), pp. 136-151
DOI: 10.21684/2411-7978-2021-7-3-136-151

The paper presents the results of numerical simulation of the TL signal from a spherical particle of natural quartz. The modeling was carried out in two stages. At the first stage, the influence of the burial time of quartz in the sedimentary rocks on its TL signal was determined. For this, the problem was posed of the accumulation of the crystal lattice

quartz, information about the time of its presence in the natural radiation field. At the second stage, the TL signal from a spherical particle was simulated, which was heated in an experimental setup from the surface according to a linear law. It was found that, firstly, the burial time of quartz affects the shape of the TL-curve and, therefore, the mineral is applicable for dating. Secondly, it is necessary to control the heating mode of the quartz sample, since at high heating rates, heat transfer irregularities are significant for particles with a large radius. It also affects the shape of the TL signal and, as a result, can make it difficult to obtain age definitions or distort them. To assess the effect of non-uniformity of heat transfer, a dimensionless similarity parameter was proposed, which connects the radius of the particles and the heating rate.

Keywords

Thermoluminescence, dating of sedimentary rocks, semiconductor band model, electron traps, luminescence centers, defects in the crystal structure of quartz.

DOI: 10.21684/2411-7978-2021-7-3-136-151

REFERENCES

1. Antonov-Romanovsky V. V. 1966. Kinetics of Photoluminescence of Crystal Phosphors. Moscow: Nauka. 325 p.
2. Gritsenko V. A., Novikov Yu. N., Shaposhnikov A. V., Morokov Yu. N. 2001. "Numerical modeling of intrinsic defects in SiO_2 and Si_3N_4 ". Semiconductor physics and technology, vol. 24, no. 9, pp. 1041-1049. [In Russian]
3. Curie D. 1961. Luminescence of Crystals. Translated from French by N. M. Lozinskaya. Edited by N. A. Tolstoy. Moscow: Izdatelstvo inostrannoy literatury. 199 p. [In Russian]
4. Marfunin A. S. 1975. Spectroscopy, Luminescence, and Radiation Centers in Minerals. Moscow: Nedra. 287 p. [In Russian]
5. Pivinsky Yu. E. 1974. Quartz Ceramics. Moscow: Metallurgiya. 264 p. [In Russian]
6. Sheinkman V. S., Erina Yu. Yu., Simonov O. A. 2020. "Numerical modeling of radiation exposure on a quartz crystal structure defects and signal analysis thermoluminescent". Tyumen State University Herald. Physical and Mathematical Modeling. Oil, Gas, Energy, vol. 6, no. 4 (24), pp. 158-178. [In Russian]
7. Bloch F. 1928. "Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern". Zeitschrift für Physik, no. 52, pp. 555-600.
8. Griskom D. L. 2013. "A minireview of the natures of radiation-induced point defects in pure and doped silica glasses and their visible/near-IR absorption bands, with emphasis on self-trapped holes and how they can be controlled". Physics Research International, vol. 2, pp. 1-14.