

УДК 004.942

ДИФФУЗИОННАЯ МОДЕЛЬ ОБЛАСТИ ГРАФИТИЗАЦИИ В ИСКУССТВЕННОМ АЛМАЗЕ

Д. Н. Бухаров, Д. А. Пахомов, студент гр. ПМИМ-123, II курс, Н. Ю. Голяков, студент гр. ПМИМ-123, II курс, Д. А. Федорино студент гр. ПМИМ-123, II курс

Научный руководитель: Бухаров Д.Н., к.ф-м.н., доцент

Владимирский государственный университет им. А. Г. и Н. Г. Столетовых
ВлГУ

г. Владимир

Материалы на основе качественных искусственных алмазов, полученных CVD или HPHT методами, имеют хорошую перспективу как элементы с сенсорными поверхностями для датчиков различных типов, имеющих возможность работы в экстремальных условиях [1].

Для синтеза таких чувствительных поверхностей в алмазе возможно применять управляемую лазерную модификацию [2]. Такой метод позволяет достаточно быстро и удобно сформировать качественную графитизированную область как на поверхности алмаза, так и внутри. Так, области графитизации, сформированные в толще алмаза могут применяться как сенсоры радиации, в то время как графитизированные области на поверхности могут служить сенсорами газа.

Применение лазерной модификации CVD-алмаза [2] позволило нашей научной группе синтезировать графитизированные области внутри алмаза нитевидного и пластинчатого типа (рис.1).

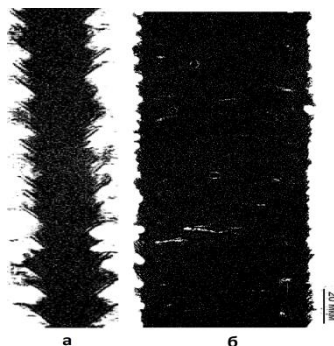


Рис. 1. Образцы областей графитизации: нитевидный(а), пластинчатый (б)

Для описания их геометрических особенностей, а также обусловленных ими свойств (оптических и электрофизических) с возможностью прогнозирования результатов синтеза была предложена модель, принимающая во внимание основной управляющий процесс – тепловую диффузию. Такая модель основывалась на диффузионном приближении [2,3], заключавшемся в решении уравнения диффузии. Указанное уравнение рассматривалось в рамках дискретной расчетной области и решалось с использованием метода клеточного автомата в рамках окрестности Немана[4]. Область графитизации моделировалась в ходе интеграционного процесса, когда ячейка расчетной области на каждой итерации становилась графитизированной с определенной вероятностью (рис.2), пропорциональной температуре нагрева. Коэффициентом пропорциональности служила площадь расчетной области.

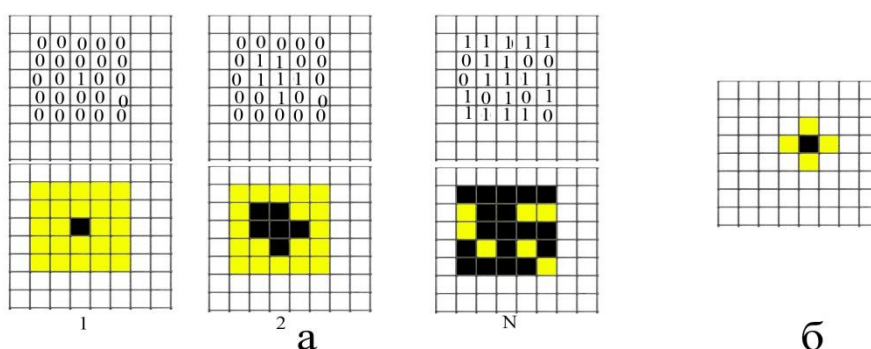


Рис. 2. Схема модели: 1-N итерации: маркированная система (сверху) 1 – графитизированная ячейка, 0 - свободная, соответствующая цветовая маркировка (снизу) (а), окрестность Неймана (б)

Более того значение этой вероятности определяло связь параметров модели и схемы лазерного синтеза через поле температуры. Модель была реализована в относительных единицах, что придало ей универсальность. На рис.3 приведены модели таких областей, соотносимые с реальными образцами из рис. 2. Здесь в качестве температуры расчетной области полагалось значение 5500°C , гарантировавшее реализацию процесса графитизации. Переход к абсолютным единицам позволил оценить размеры реальных структур на основе модельных. Их соотношение не было противоречивым. Кроме этого, адекватность модели оценивалась на основе соотношений фрактальных размерностей до величин порядка 0.01, вычисленных по методу boxcounting [5]. Разница величин размерностей образца и модели не превосходила 10%, что свидетельствовало о хорошей адекватности модельного приближения.

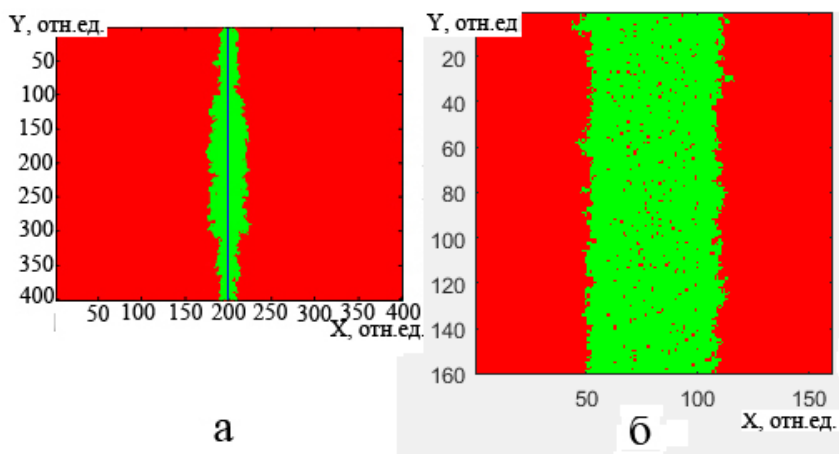


Рис. 3. Результаты моделирования: нитевидная область (а), пластинчатая область (б)

Таким образом, предложенное модельное приближение может использоваться для описания геометрических особенностей графитизированных областей в алмазе.

Список литературы:

1. Adam, W. New developments in CVD diamond for detector applications [Текст]/ W. Adam, E. Berdermann, P. Bergonzo //Eur Phys J. – 2004. –V. 33. – PP. 1014-1016.
2. Бухаров, Д.Н. Имитационная феноменологическая модель лазерно-индуцированных графитизированных структур в алмазе [Текст]/ Д.Н. Бухаров, Т.В. Кононенко, А.О. Кучерик // Письма в ЖТФ. –2025. – Т. 51, вып. 1. – С 26-29.
3. Евсеев, А. А. Клеточно-автоматное моделирование диффузионных процессов на триангуляционных сетках [Текст]/А. А. Евсеев, О. И. Нечаева // ПДМ. – 2009. –№ 4. – С. 72–83.
4. Zaitsev, D. A. A generalized neighborhood for cellular automata [Текст]/ Zaitsev D. A. // Theoretical Computer Science. –2017. –V. 666. – PP. 21-35.
5. Gonzato, G. A practical implementation of the box counting algorithm [Текст]/ G. Gonzato //Computers & Geosciences. – 1998. –№ 24. – PP. 95-100.