

01

Имитационная феноменологическая модель лазерно-индуцированных графитизированных структур в алмазе

© Д.Н. Бухаров¹, Т.В. Кононенко², А.О. Кучерик¹¹ Владимирский государственный университет им. А.Г. и Н.Г. Столетовых, Владимир, Россия² Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия

E-mail: buharovdn@gmail.com

Поступило в Редакцию 18 апреля 2024 г.

В окончательной редакции 1 августа 2024 г.

Принято к публикации 15 августа 2024 г.

Предложены модели роста лазерно-индуцированных графитизированных структур, формирующихся в микротрещинах алмаза. Модели реализованы в рамках клеточного автомата с окрестностью Неймана. Показано, что предложенные приближения не противоречат результатам экспериментального лазерного синтеза графитизированных структур и позволяют корректно описывать процесс графитизации образца.

Ключевые слова: графитизация алмаза, диффузионное приближение, клеточный автомат, моделирование.

DOI: 10.61011/PJTF.2025.01.59516.19964

Одной из уникальных особенностей алмаза является возможность его превращения при высокотемпературном нагреве в другую кристаллическую аллотропную форму — графит, обладающую кардинально отличающимися физическими и химическими свойствами [1]. Термоиндуцированный процесс фазовой трансформации начинается на поверхности и постепенно распространяется в глубь алмазного кристалла. Использование импульсного лазерного облучения [2–5] позволяет локализовать процесс трансформации алмаза в графит внутри субмикронной области, которую можно перемещать внутри кристалла в любом желаемом направлении. В конечном счете эта технология позволяет создавать в объеме алмаза трехмерные проводящие микроstructures различной формы, которые могут применяться как новая элементная база для детекторов ионизирующего излучения [6], фотонных кристаллов [7], интегрированных световодов оптического диапазона [8], фотопроводящих антенн, генерирующих ТГц-импульсы [9] и др.

Одной из наиболее распространенных разновидностей лазерно-индуцированных микроstructures являются нитевидные графитизированные области, которые формируются обычно путем равномерного перемещения лазерной каустики навстречу лазерному пучку [2–4]. Примеры подобных микроstructures, полученных при различных условиях лазерного облучения, представлены на рис. 1.

Возникновение характерных боковых выступов на микроstructures обусловлено растрескиванием алмазной матрицы в процессе лазерной модификации, что подтверждается результатами исследования внутренней структуры модифицированной области с помощью сканирующей электронной микроскопии [4]. Для объяснения наблюдаемой в эксперименте кинетики роста графитизированной области было выдвинуто предположение [4], что поверхность возникших микротрещин по-

крыта многочисленными „центрами активации“, каждый из которых инициирует распространение термостимулированной волны графитизации в окружающий объем алмаза.

Графитизированные структуры могут быть описаны в рамках феноменологической модели, когда явление представляется в общем виде [10,11] в рамках имитационного подхода с использованием диффузионного приближения, позволяющего в общем случае описывать процессы распространения различной природы [12,13]. Основу модели образует решение уравнения диффузии в дискретном случае, реализованное с использованием техники клеточного автомата [14,15]. И хотя наблюдаемые процессы не являются, строго говоря, диффузионными, образующиеся структуры могут быть с хорошей степенью надежности описаны именно диффузионными процессами.

Реализация процесса построения модельной фигуры проводилась в прямоугольной расчетной области с наложенной равномерной сеткой.

Основными параметрами модели служили скорость движения фокуса лазерного излучения v_f и вероятность ячейки расчетной области быть занятой s .

Начальным условием роста модели служило распределение зародышевых структур, под которыми подразумевались центры активации и от которых начинала распространяться графитизированная область. Характер стартовой структуры зависел от параметра критической скорости движения фокуса лазерного излучения v_{cf} в системе. В случае скорости v_f ниже критической v_{cf} в качестве стартовой структуры выбиралась непрерывная фигура (прямая или фрактальная система линий). Когда скорость движения фокуса лазерного излучения была выше критического значения, стартовой фигурой служило распределение удаленных друг от друга точек. По

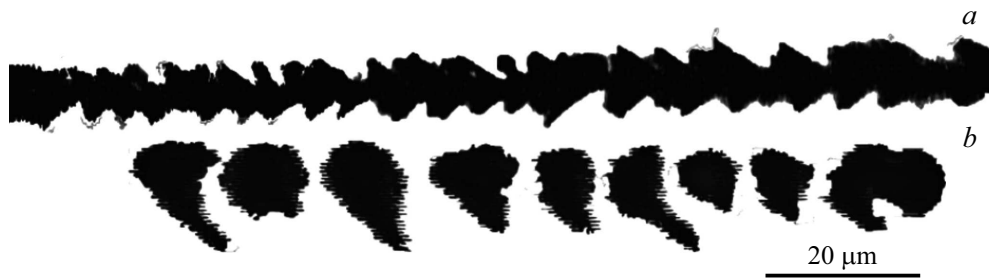


Рис. 1. Оптические фотографии нитевидных графитизированных областей, сформированных 140 fs лазерными импульсами при различной скорости движения каустики v : a — $30 \mu\text{m/s}$, b — $100 \mu\text{m/s}$ ($P = 1.53 \text{ mW}$, $f = 1 \text{ kHz}$).

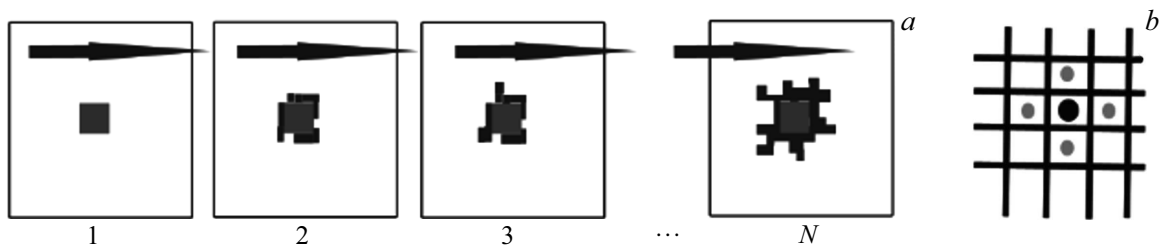


Рис. 2. Схема модели: a — итерации $1-N$ клеточного автомата, рост от стартовой структуры в центре; b — окрестность Неймана.

мере увеличения скорости движения фокуса лазерного излучения, превышающей критическое значение, расстояние между этими точками увеличивалось пропорционально v_f/v_{cf} .

Процедура построения модельной фигуры представляла собой динамический процесс оккупации ячеек, начинавшийся от стартовой структуры, представлявшей собой модельную микротрещину (рис. 2, a). Соседние ячейки расчетной области относительно текущей рассматривались в рамках окрестности Неймана (рис. 2, b) [15]. Текущая ячейка становилась „занятой“ в случае наличия хотя бы одной оккупированной ячейки в ее окрестности Неймана. Дополнительно к этому условию указанная ячейка могла стать занятой с заданной вероятностью, величину которой s можно считать пропорциональной температуре T , до которой она была нагрета.

Предложенная модель была реализована в среде MATLAB в относительных единицах, в качестве масштабного коэффициента выбирался линейный размер расчетной области. В качестве входных данных программная реализация модели использует скорость движения фокуса лазерного излучения, ее критическое значение, поле температур для расчетной области, размер расчетной области, количество итераций. После сравнения значений введенных скоростей происходит генерация начального распределения: из заранее подготовленного изображения или через генерацию определенных в программе фигур (прямая линия в центре расчетной области, система удаленных друг от друга точек). На рис. 3 приведены модели графитизированных областей при различных начальных условиях и различных вероятностях ячейки быть занятой за одинаковое

количество итераций клеточного автомата ($t = 800$ а.е.), когда $v_{cf} = 34 \mu\text{m/s}$ в случае изотермической расчетной области. На рис. 3, a приведен случай модели непрерывной структуры, сгенерированной от прямой линии при $v_f = 30 \mu\text{m/s}$ и $T = 4900^\circ\text{C}$. На рис. 3, b приведен случай модели структуры области графитизации с разрывами при $v_f = 100 \mu\text{m/s}$ и $T = 5000^\circ\text{C}$. Так, из рис. 3, a и b очевидна зависимость ширины модельных структур от параметра s : с его увеличением пропорционально увеличивается ширина. На рис. 3, c приведен случай модели структуры области графитизации, сгенерированной начиная с системы фрактальных линий, построенной по алгоритму DLA [16].

Для оценки точности моделирования проводилось сравнение фрактальных размерностей изображений моделей и реальных образцов. Фрактальная размерность оценивалась методом подсчета ячеек (box-counting) [17], что позволило в безразмерном виде сравнить плотность распределения элементов структуры на плоскости. В качестве образцов для оценки точности модели рассматривались образец, представленный на рис. 1, a , и модель, приведенная на рис. 3, a . Расчетные фрактальные размерности реального образца и модели составили 1.27 и 1.21 соответственно. Очевидно, что разница фрактальных размерностей не превосходит 5%. Это свидетельствует о хорошей степени соответствия модели реальному образцу. Таким образом, соответствие фрактальных размерностей позволяет надеяться на соответствие свойств, обусловленных топологией (например, электрофизических или оптических). Кроме того, переход к абсолютным единицам позволил оценить среднюю ширину графитизированной области. Так, в случае, когда длина стороны ячейки расчетной области составляет

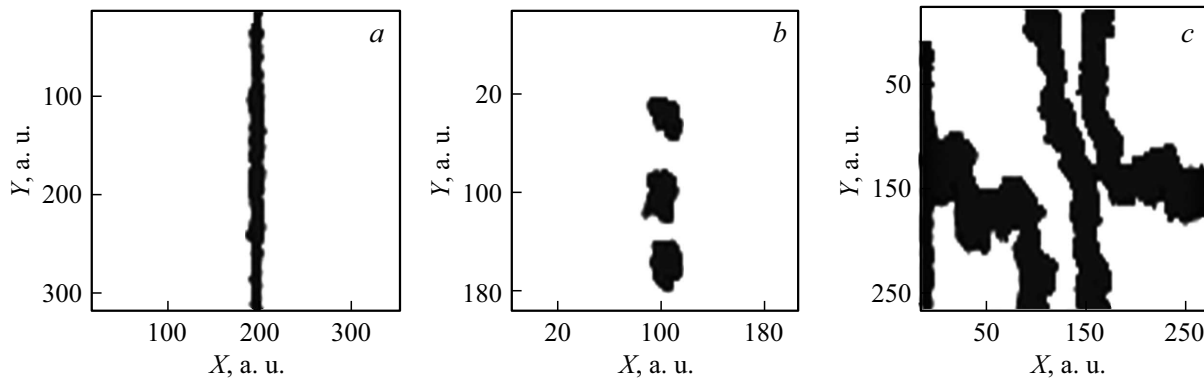


Рис. 3. Результаты моделирования графитизированной области. *a* — при $s = 0.075$ и $v_f < v_{cf}$, стартовая структура — прямая линия; *b* — при $s = 0.25$ и $v_f > v_{cf}$, стартовая структура — набор точек; *c* — при $s = 0.5$ и $v_f < v_{cf}$, стартовая структура — система фрактальных линий.

величину $1 \mu\text{m}$, ширина модельного образца в среднем составляет $10 \mu\text{m}$, что не противоречит результатам измерения реальной структуры.

Предложенная модель позволяет провести оценку влияния управляющих параметров экспериментального синтеза на модельные образцы. Связь модели и этих параметров организована через значение вероятности s как относительное значение температуры. Так, например, исследования структуры образцов графитизированных областей, полученных благодаря лазерному импульсному воздействию, свидетельствуют о том, что одним из управляющих параметров является длительность импульса, увеличение которой приводит к росту критической скорости фокуса, сопровождающемуся появлением разрывов области графитизации. Так, температуру в зависимости от длительности импульса τ в первом приближении можно оценивать как [18]:

$$T(\tau) = \frac{2AP\sqrt{\alpha\tau}}{\pi^{3/2}kr_0} + T_s,$$

где A — поглощательная способность, P — мощность излучения, α — коэффициент температуропроводности, k — коэффициент теплопроводности, T_s — начальная температура. Тогда связь модели и управляющих параметров можно задать как $s(T) \sim T/S$, где S — площадь расчетной области.

Таким образом, можно заключить, что предложенная модель может быть применена в качестве первого приближения для описания лазерно-индуцированных графитизированных структур в алмазе.

Экспериментальное исследование процессов формирования графитизированных микроструктур в алмазе проведено Т.В. Кононенко. Реализация моделей и расчеты модельных структур выполнены Д.Н. Бухаровым и А.О. Кучериком.

Финансирование работы

Исследование выполнено в рамках государственного задания ВлГУ „Разработка методов поверхностной ла-

зерной модификации пленок из синтетического алмаза и широкозонных композиций на его основе для управления оптическими и электрофизическими свойствами структурированных материалов“ (FZUN-2023-0003).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] L. Muniraj, M. Ardron, J.M. Fernández-Pradas, M. Duocastella, P. Serra, R.L. Reuben, D.P. Hand, *Sensors Actuators A*, **373**, 115442 (2024). DOI: 10.1016/j.sna.2024.115442
- [2] M. Shimizu, Y. Shimotsuma, M. Sakakura, T. Yuasa, H. Homma, Y. Minowa, K. Tanaka, K. Miura, K. Hirao, *Opt. Express*, **17**, 46 (2009). DOI: 10.1364/oe.17.000046
- [3] T.V. Kononenko, M.S. Komlenok, V.P. Pashinin, S.M. Pimenov, V.I. Konov, M. Neff, V. Romano, W. Lüthy, *Diamond Relat. Mater.*, **18**, 196 (2009). DOI: 10.1016/j.diamond.2008.07.014
- [4] K.K. Ashikkalieva, T.V. Kononenko, E.E. Ashkinazi, E.A. Obratsova, A.A. Mikhutkin, A.A. Timofeev, V.I. Konov, *Diamond Relat. Mater.*, **128**, 109243 (2022). DOI: 10.1016/j.diamond.2022.109243
- [5] B. Sun, P.S. Salter, M.J. Booth, *Appl. Phys. Lett.*, **105**, 231105 (2014). DOI: 10.1063/1.4902998
- [6] L. Anderlini, M. Bellini, V. Cindro, C. Corsi, K. Kanxheri, S. Lagomarsino, C. Lucarelli, A. Morozzi, G. Passaleva, D. Passeri, S. Sciortino, L. Servoli, M. Veltri, *Sensors*, **22**, 8722 (2022). DOI: 10.3390/s22228722
- [7] E. Granados, M. Martinez-Calderon, M. Gomez, A. Rodriguez, S.M. Olaizola, *Opt. Express*, **25**, 15330 (2017). DOI: 10.1364/OE.25.015330
- [8] A.N. Giakoumaki, G. Coccia, V. Bharadwaj, J.P. Hadden, A.J. Bennett, B. Sotillo, R. Yoshizaki, P. Olivero, O. Jedrkiewicz, R. Ramponi, S.M. Pietralunga, *Appl. Phys. Lett.*, **120**, 020502 (2022). DOI: 10.1063/5.0080348
- [9] S. Lepeshov, A. Krasnok, A. Krasnok, E. Rafailov, P. Belov, *Laser Photon. Rev.*, **11**, 160 (2017). DOI: 10.1002/lpor.201600199

- [10] Н.И. Плюснин, ФТТ, **61** (12), 2421 (2019). DOI: 10.21883/FTT.2019.12.48567.07ks [N.I. Plusnin, Phys. Solid State, **61** (12), 2431 (2019). DOI: 10.1134/S1063783419120394].
- [11] Н.А. Агафонова, Вестн. ИГЭУ, № 4 (2007).
- [12] T. Trifonova, M. Arakelian, D. Bukharov, S. Abrakhin, S. Abrakhina, S. Arakelian, Water, **14**, 1405 (2022). DOI: 10.3390/w14091405
- [13] Т.В. Рыжова, Д.Н. Бухаров, С.М. Аракелян, Наука и техника, № 4, 333 (2023). DOI: 10.21122/2227-1031-2023-22-4-333-34
- [14] С.К. Саруханян, А.Г. Масловская, Математические структуры и моделирование, № 2 (70), 63 (2024). DOI: 10.24147/2222-8772.2024.2.63-79
- [15] E. Agyingi, L. Wakabayashi, T. Wiandt, S. Mangelakis, Processes, **6**, 207 (2018). DOI: 10.3390/pr6110207
- [16] J. Mroczka, M. Woźniak, F.R.A. Onofri, Metrol. Meas. Syst., **19**, 459 (2012). DOI: 10.2478/v10178-012-0039-2
- [17] J. Yan, Y. Sun, S. Cai, X. Hu, J. Appl. Anal. Comput., **6**, 1114 (2016). DOI: 10.11948/2016073
- [18] Y. Xu, R. Wang, S. Ma, L. Zhou, Y.R. Shen, C. Tian, J. Appl. Phys., **123**, 025301 (2018). DOI: 10.1063/1.5008963