

УДК 621.382.049.77

## Изучение влияния примесей на процессы формообразования синтетического алмаза в зоне термического влияния лазерного излучения

В.А. ЕМЕЛЬЯНОВ, Е.Б. ШЕРШНЕВ, А.Н. КУПО, С.И. СОКОЛОВ

В работе представлены результаты математического моделирования процесса термохимической обработки алмаза. Изучено влияние теплофизических свойств синтетического алмаза, зависящих от температуры, на динамику протекания физико-химических процессов в зоне лазерного воздействия.

**Ключевые слова:** лазерная обработка, алмаз, диффузия, углерод.

The paper presents the results of mathematical modeling of the process of thermochemical treatment of diamond. The influence of thermal-physical properties of synthetic diamond, which depend on the temperature, on the dynamics of physical and chemical processes in the laser treatment zone is studied.

**Keywords:** laser processing, diamond, diffusion, carbon.

**Введение.** В настоящее время алмаз и алмазоподобные материалы широко применяются в различных областях микроэлектроники и лазерной техники, благодаря стабильной работе в критических условиях устройств, созданных на их основе. В частности, в качестве теплоотводов в линейках полупроводниковых лазеров и мощных мультичиповых модулях. Лазерная обработка имеет существенные преимущества перед другими способами обработки кристаллов алмаза, за счет малой ширины реза и минимальной зоны термического влияния, при этом сам процесс обработки отличается высокой производительностью по сравнению с механическими методами обработки. Среди различных способов обработки алмаза термохимический способ обработки является по-прежнему наиболее перспективным [1]–[2].

**Принцип термохимического способа обработки алмаза.** В основе термохимического способа обработки алмаза лежит процесс каталитического взаимодействия углерода, входящего в состав алмаза с водородом или смесями водорода с водяным паром и углекислым газом [3]. Однако, несмотря на высокую производительность и технологичность, обработка лазером не всегда приводит к нужному результату. На практике оказывается, что при выборе синтетического алмаза, в частности алмазота, без видимых в микроскоп включений вероятность произвольных расколов достигает 10 %, что приводит к значительными финансовым затратам. Поэтому, для оптимизации процесса термохимической обработки алмаза и выявления факторов, влияющих на термохимическую реакцию, необходимо комплексное исследование физико-химических механизмов указанного процесса, в том числе методами математического моделирования. Для обеспечения локализации процесса термохимической обработки в качестве поверхностного теплового источника используется лазерное излучение, которое поглощается металлом. Принципиальная схема процесса термохимической обработки алмаза представлена на рисунке 1.

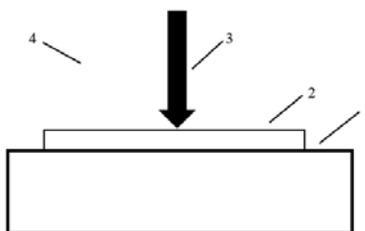


Рисунок 1 – Схема термохимической обработки алмаза с помощью лазерного излучения: 1 – алмаз (обработываемый материал); 2 – металлическое покрытие; 3 – лазерное излучение; 4 – газовая среда

Процесс термохимической обработки включает следующие стадии:

- 1) абсорбция атомов углерода из алмаза в металлическое покрытие;
- 2) диффузионная транспортировка атомов углерода через металл к поверхности;
- 3) диссоциация водорода каталитически активными атомами металла-катализатора;
- 4) гидрогенизация растворенного углерода на внешней поверхности металла атомарным водородом.

**Моделирование.** Авторами ранее в работе [4] были получены решения нестационарной нелинейной задачи тепломассопереноса в системе алмаз–металл–водород. Однако, полученные решения не учитывают связи между особенностями дефектно-примесного состава синтетических алмазов и вероятностью их разрушения при лазерном облучении.

Одним из факторов, влияющих на вероятность разрушения синтетических алмазов при лазерном облучении, является концентрация дисперсного азота (С-дефект), который в свою очередь влияет на теплофизические параметры кристалла [5]. Градиент температуры, возникающий при локальном воздействии лазерного излучения, определяется в значительной мере коэффициентом теплопроводности. При этом теплопроводность зависит от типа кристалла, происхождения (природный либо искусственный) и температуры, что в свою очередь определяет распределение температурных полей в кристалле при его лазерной обработке. Вследствие этого при увеличении теплопроводности будет снижаться и величина температурного градиента, поэтому большую вероятность разрушения будут иметь кристаллы с большим количеством примесей за счет своей низкой теплопроводности. Таким образом, учет зависимости теплопроводности от температуры при математическом моделировании указанных процессов является одним из определяющих факторов, позволяющих оптимизировать процесс лазерной обработки алмаза.

При моделировании воздействия лазерного излучения на кристаллы алмаза был применен метод интерполяции экспериментальных данных полиномом зависимости теплопроводности от температуры [6] для различных видов алмаза как натуральных, так и искусственных. Пример такой зависимости представлен на рисунке 2.

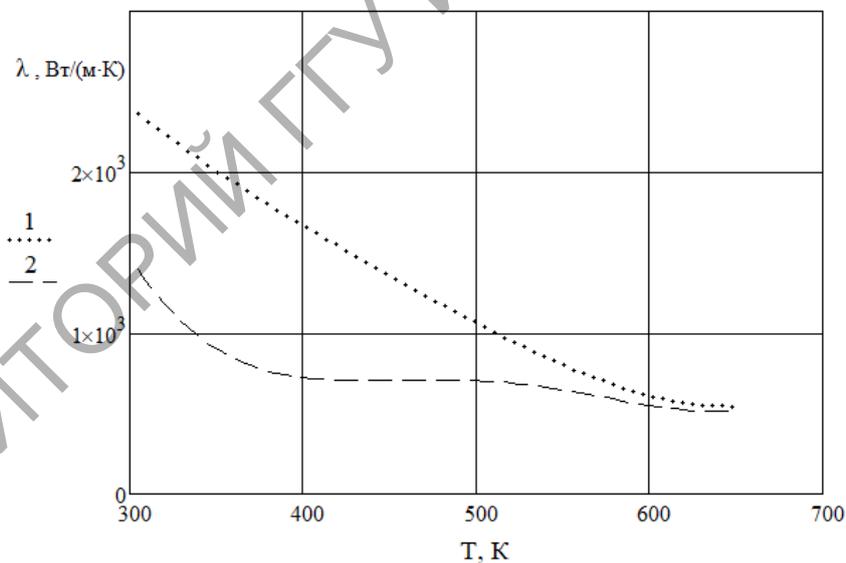


Рисунок 2 – Зависимость теплопроводности от температуры: 1 – природного алмаза типа Па; 2 – синтетического алмаза с концентрацией азота  $1,5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$

**Результаты моделирования.** Известны решения уравнения теплопроводности для системы металлическая плёнка-подложка в предположении равномерного распределения интенсивности по сечению лазерного пучка для полубесконечной мишени (алмаза) [7]. Однако в этой модели теплофизические константы полагаются неизменными и заменяются усреднёнными параметрами. Учет зависимости теплопроводности от температуры, которая, очевидно, влияет на динамику термохимических процессов, позволяет уточнить значение температуры в зоне лазерного воздействия на поверхность алмаза (рисунок 3).

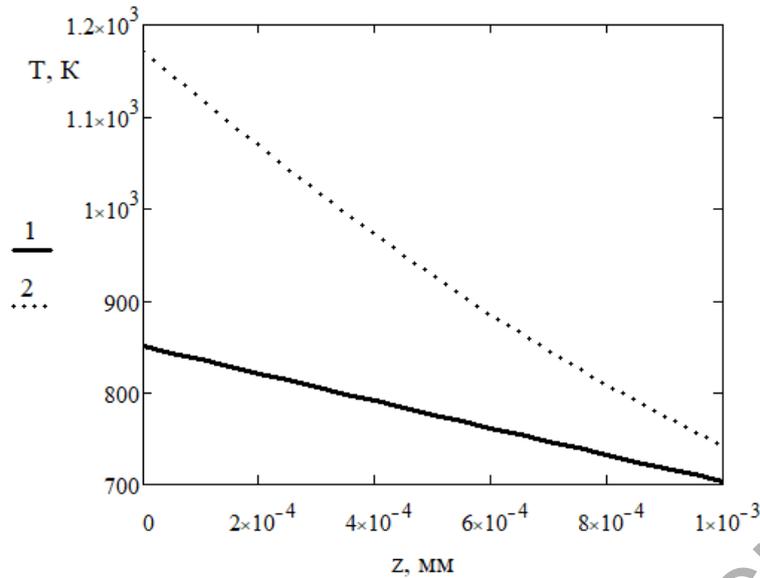


Рисунок 3 – Зависимость расчетной температуры  $T$  по глубине при обработке алмаза типа IIa: 1 – без учета зависимости теплопроводности от температуры; 2 – с учетом зависимости теплопроводности от температуры

Таким образом, учет зависимости теплопроводности от температуры приводит к значительному отличию расчетной температуры  $T$  в зоне обработки. Так, например, при плотности мощности  $50 \text{ Вт/мм}^2$  температуры в кристалле алмаза типа IIa, рассчитанные различными способами, отличаются на 15–25 %.

Для определения режимов обработки искусственных алмазов необходимо знать концентрацию дефектов в кристалле. Это позволит определить значения температур  $T$  и выявить влияние концентрации дефектов на динамику термических напряжений, приводящих к разрушению кристаллов в процессе обработки. По результатам построены зависимости температуры и механических напряжений по глубине в различные моменты времени обработки (рисунки 4, 5).

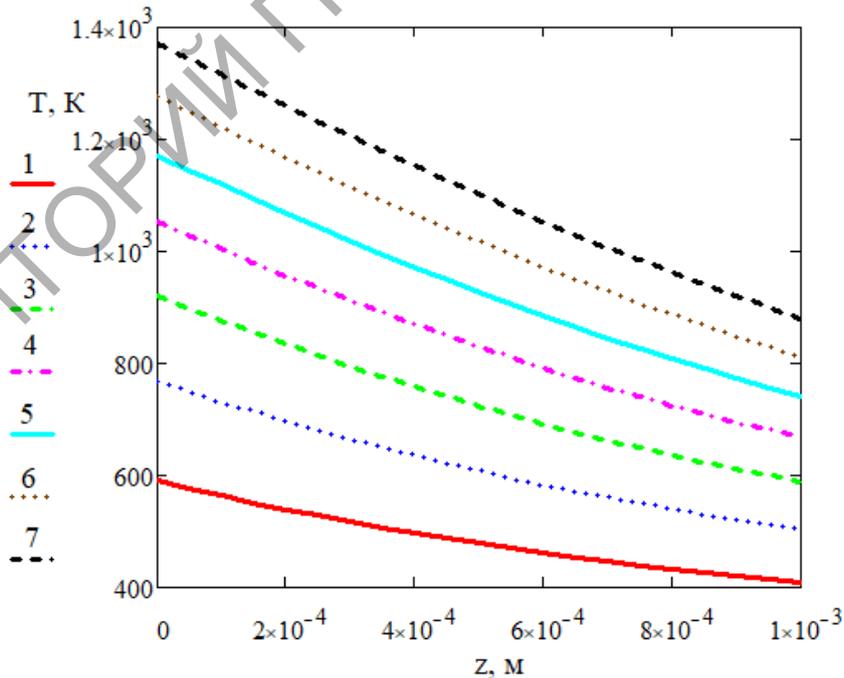


Рисунок 4 – Распределение температуры в алмазе по глубине в различные моменты времени после начала лазерного воздействия: 1 – 1 мс; 2 – 2 мс; 3 – 3 мс; 4 – 4 мс; 5 – 5 мс; 6 – 6 мс; 7 – 7 мс

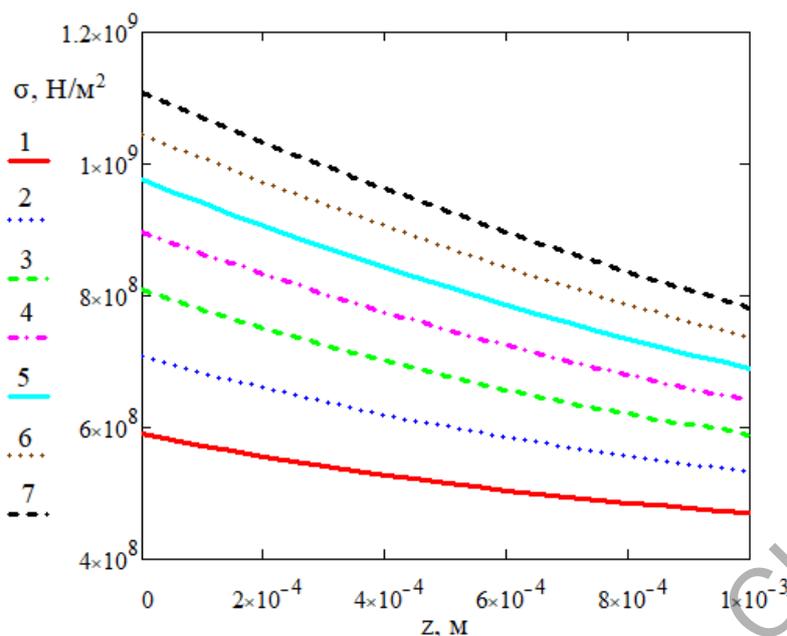


Рисунок 5 – Распределение механических напряжений в алмазе по глубине в различные моменты времени после начала лазерного воздействия: 1 – 1 мс; 2 – 2 мс; 3 – 3 мс; 4 – 4 мс; 5 – 5 мс; 6 – 6 мс; 7 – 7 мс

Результаты моделирования показали, что учет зависимости теплопроводности от температуры значительно влияет на динамику термохимических процессов, при этом полученное распределение температурных полей по глубине позволяет рассчитать механические напряжения в кристалле. Если рассчитанные напряжения больше предела прочности кристалла, то данные параметры лазерной обработки могут привести к растрескиванию кристалла.

**Заключение.** Разработанная математическая модель и проведенное моделирование позволяет провести расчет технологических параметров процесса термохимической обработки как натуральных, так и искусственных алмазов, учитывая при этом зависимость их теплофизических параметров от температуры. Полученная модель можно использовать для микроформообразования алмаза при лазерной полировке, литографии и созданию заданной топологии изделий из алмазов.

### Литература

1. Митягин, А. Ю. Технология и оборудование для обработки алмазных материалов современной техники / А. Ю. Митягин, А. А. Алтухов, А. Б. Митягина // Технология и конструирование в электронной аппаратуре. – 2009. – № 1. – С. 53–58.
2. Zaitsev, A. M. Thermochemical polishing of CVD diamond films / A. M. Zaitsev // Diamond and Related Materials. – 1998. – V. 7, i. 8. – P. 1108–1117.
3. Григорьев, А. П. Механизм гидрирования углерода в присутствии никеля, железа и платины / А. П. Григорьев, С. У. Лифшиц, П. П. Шамаев // Кинетика и катализ. – 1977. – Т. 18, № 4. – С. 948–952.
4. Емельянов, В. А. Изучение влияния параметров обработки на протекание поверхностных нанопроцессов при формообразовании синтетических алмазов / В. А. Емельянов, Е. Б. Шершнев, А. Н. Купо, С. И. Соколов // Известия ГГУ им. Ф. Скорины. – 2021. – № 6 (129). – С. 150–154.
5. Бокий, Г. Б. Природные и синтетические алмазы / Г. Б. Бокий, Г. Н. Безруков, Ю. А. Клюев [и др.]. – М. : Наука, 1986. – 221 с.
6. Оситинская, Т. Д. Влияние точечных дефектов на теплопроводность алмазов / Т. Д. Оситинская, А. П. Подоба, С. В. Шмегера // Сверхтвердые материалы. – 1992. – № 2. – С. 27–31.
7. Прохоров, А. М. Взаимодействие лазерного излучения с металлами / А. М. Прохоров, В. И. Конов, И. Урсу, Й. Михайлеску. – М. : Наука, 1988. – 537 с.