

## Моделирование лазерной обработки кристаллов алмаза

Е. Б. ШЕРШНЕВ, Ю. В. НИКИТЮК, А. Е. ШЕРШНЕВ

Проведено численное моделирование процесса лазерной обработки кристаллов алмаза с учетом их графитизации при воздействии лазерного излучения. Расчет температурных полей, формируемых в кристаллах алмаза в результате лазерного нагрева, выполнен с использованием четырех различных вариантов моделирования: I – трехмерный анализ при воздействии лазерного излучения вдоль оси симметрии второго порядка ( $L_2$ ), II – трехмерный анализ при воздействии лазерного излучения вдоль оси симметрии третьего порядка ( $L_3$ ), III – трехмерный анализ при воздействии лазерного излучения вдоль оси симметрии четвертого порядка ( $L_4$ ), IV – трехмерный анализ без учета графитизации при воздействии лазерного излучения. Полученные результаты могут быть использованы для оптимизации процесса лазерной обработки кристаллов алмаза.

**Ключевые слова:** лазерная обработка, алмаз, графит, метод конечных элементов.

The article deals with numerical simulation of diamond crystal laser treatment with its graphitization when exposed to laser radiation. Calculation of temperature fields formed in diamond crystals as a result of laser heating is performed in four different options: I – a 3D analysis with laser radiation along the second order axis of symmetry ( $L_2$ ), II – a 3D analysis with laser radiation along the third order axis of symmetry ( $L_3$ ), III – a 3D analysis with laser radiation along the fourth order axis of symmetry ( $L_4$ ), IV – a 3D analysis without graphitization with laser radiation. The results obtained can be used to optimize the diamond crystal laser treatment.

**Keywords:** laser treatment, diamond, graphite, finite element method.

### Введение

Алмаз является одним из наиболее перспективных материалов для создания новых поколений техники. Его уникальные физические свойства обеспечивают стабильную работу в критических условиях устройств, созданных на его основе [1]. Анализируя современное состояние технологии обработки сверхтвердых материалов, можно сделать вывод о том, что лазерная обработка имеет существенные преимущества перед другими способами резки кристаллов алмаза. К достоинствам данной технологии в первую очередь необходимо отнести высокую плотность мощности и локальность воздействия, достигаемые при фокусировке лазерного излучения на обрабатываемом материале, что обеспечивает возможность получения узких резов с минимальной зоной термического влияния в сочетании с высокой производительностью процесса размерной обработки. Кроме этого, необходимо отметить высокую технологичность лазерного излучения, вследствие которой возможна автоматизация процесса обработки с обеспечением высокого ее качества [2].

Как указано в [3], особый интерес представляет изучение эффективности лазерной обработки алмазов в различных кристаллографических направлениях: при воздействии лазерного излучения вдоль осей симметрии третьего и четвертого порядка. К сожалению, в цитируемой работе моделирование температурных полей выполнено при одномерной постановке задачи, что значительно снижает достоверность полученных численных оценок.

В статье [4] представлены результаты трехмерного моделирования процесса формирования лунок при воздействии лазерного излучения вдоль осей симметрии третьего и четвертого порядка кристаллов алмаза.

В данной работе выявлены особенности воздействия лазерного излучения на кристаллы алмаза в трех различных кристаллографических направлениях (вдоль осей симметрии второго, третьего и четвертого порядка) при относительном перемещении лазерного пучка и обрабатываемой поверхности.

## 1 Физическая модель процесса лазерной обработки кристаллов алмаза

Лазерное воздействие на кристаллы алмаза при их размерной обработке приводит к значительному увеличению температуры, сопровождаемому фазовыми переходами. На рисунке 1 приведена обобщенная схема фазовых превращений кристаллов алмаза под воздействием лазерного излучения [3].



Рисунок 1 – Схема фазовых превращений алмаза под воздействием лазерного излучения

В соответствии с данной схемой, при лазерной резке кристаллов алмаза происходят не только их графитизация, испарение и рекристаллизация, но и образование поликристаллов алмаза. Учет всех вышеперечисленных превращений при моделировании представляет значительные трудности, поэтому в данной работе была использована упрощенная схема превращений алмаза под воздействием лазерного излучения: алмаз  $\Rightarrow$  фазовый переход  $\Rightarrow$  графит  $\Rightarrow$  испарение. При этом полагалось, что стадия интенсивной графитизации кристаллов алмаза наступает по достижении обрабатываемым материалом температуры 2300 К.

## 2 Постановка задачи для численного решения

Для анализа особенностей лазерной обработки кристаллов алмаза был использован метод конечных элементов [5].

Моделирование процесса фазового перехода алмаз – графит осуществлялось за счет циклической проверки условия достижения точками обрабатываемого материала температуры графитизации с последующим присвоением теплофизических свойств графита соответствующим областям конечно элементной модели. При этом учитывалась строгая ориентация гексагональных плоскостей графита параллельно плоскостям (111) кристаллов алмаза, независимо от ориентации падающего лазерного излучения.

При расчетах плотность, удельная теплоемкость, коэффициент теплопроводности алмаза и графита принимались равными соответственно:  $\rho_a = 3520 \text{ кг/м}^3$ ,  $\rho_r = 2300 \text{ кг/м}^3$ ;  $C_a = 854 \text{ Дж/кг}\cdot\text{К}$ ,  $C_r = 994 \text{ Дж/кг}\cdot\text{К}$ ;  $\lambda_a = 427 \text{ Вт/м}\cdot\text{К}$ ,  $\lambda_{r\perp} = 88 \text{ Вт/м}\cdot\text{К}$ ,  $\lambda_{r\parallel} = 355 \text{ Вт/м}\cdot\text{К}$  [3]. Символом  $\lambda_{r\perp}$  обозначен коэффициент теплопроводности графита в направлении, перпендикулярном гексагональным граням, а символом  $\lambda_{r\parallel}$  обозначен коэффициент теплопроводности графита в направлении, параллельном гексагональным граням.

Расчет температурных полей, формируемых в кристаллах алмаза в результате лазерного нагрева, был выполнен для четырех различных вариантов: I – трехмерный анализ при воздействии лазерного излучения вдоль оси симметрии второго порядка ( $L_2$ ), II – трехмерный анализ при воздействии лазерного излучения вдоль оси симметрии третьего порядка ( $L_3$ ), III – трехмерный анализ при воздействии лазерного излучения вдоль оси симметрии четвертого порядка ( $L_4$ ), IV – трехмерный анализ без учета графитизации при воздействии лазерного излучения.

Моделирование процесса лазерного нагрева кристаллов алмаза выполнялось в соответствии со схемой, представленной на рисунке 2. Цифрой 1 отмечен лазерный пучок, цифрой 2 – алмазный образец. Стрелкой, дополненной обозначением  $\vec{V}$ , на рисунке указано направление перемещения обрабатываемого изделия относительно лазерного пучка. На рисунке 3 представлено разбиение кристалла на конечные элементы.

Расчеты были выполнены для образца, имеющего форму прямоугольного параллелепипеда и геометрические размеры  $2 \times 3 \times 1,5$  мм, с использованием следующих значений технологических параметров обработки: плотность мощности лазерного излучения  $P_0 = 1,8 \cdot 10^{10}$  Вт/м<sup>2</sup>, радиус поперечного сечения лазерного пучка  $R = 0,05$  мм. Модуль скорости относительного перемещения лазерного пучка и образца  $V = 7$  мм/с.

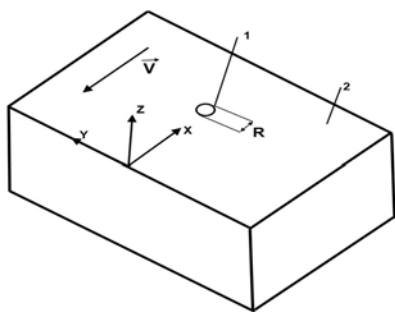


Рисунок 2 – Схема расположения лазерного пучка в зоне обработки

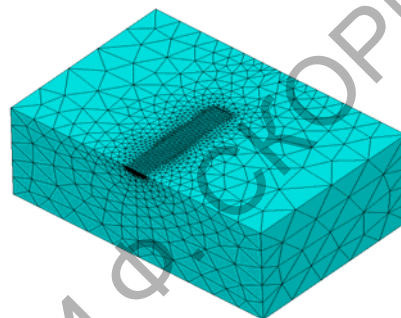
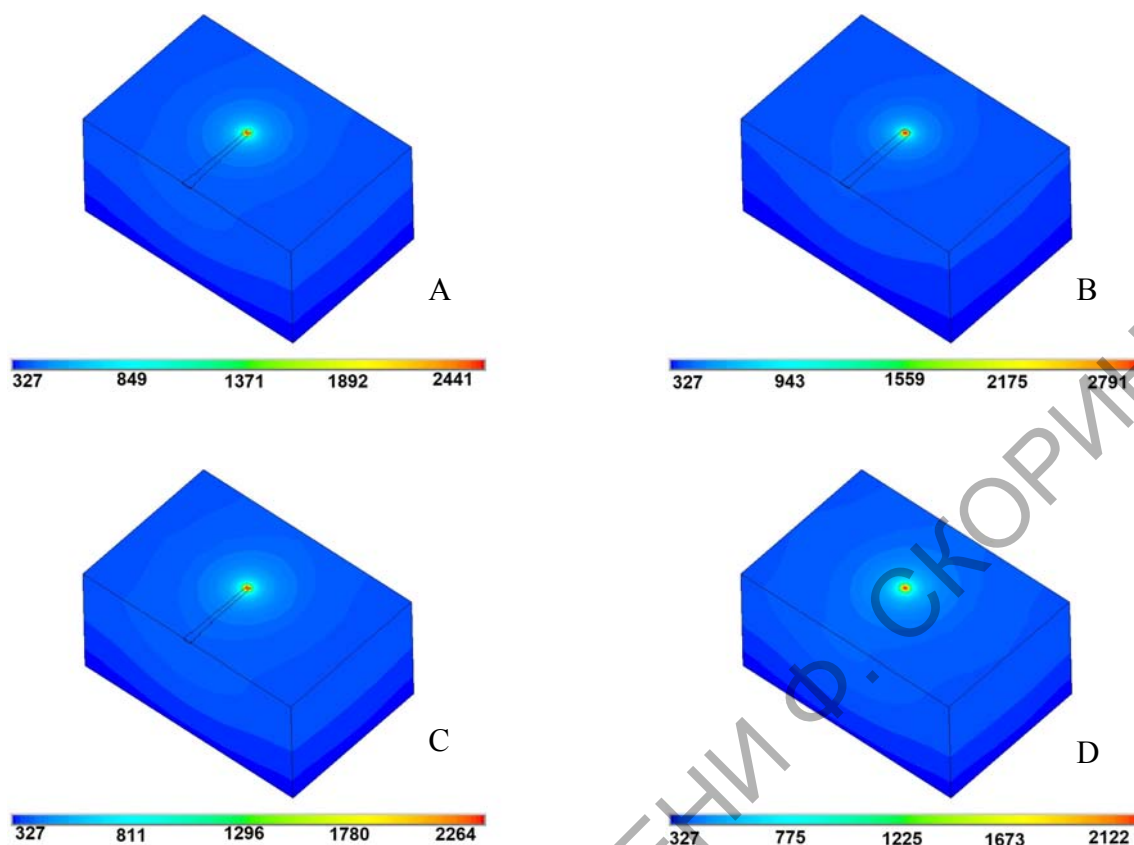


Рисунок 3 – Конечно-элементное разбиение расчетной области

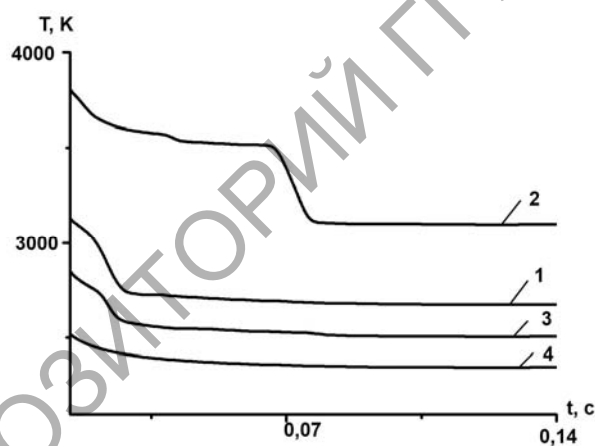
### 3 Результаты конечно-элементного анализа

Как уже отмечалось, моделирование было выполнено в четырех различных вариантах условий: I – лазерный пучок направлен вдоль оси  $L_2$ , II – лазерный пучок направлен вдоль оси  $L_3$ , III – лазерный пучок направлен вдоль оси  $L_3$ , IV – при моделировании не учитывался фазовый переход алмаз – графит. Результаты проведенных расчетов представлены на рисунках 4–7. На рисунке 4 представлены рассчитанные распределения температурных полей, формируемых в кристаллах алмаза при лазерной обработке, а на рисунках 5 и 6 – рассчитанные зависимости температуры от времени в центре поперечного сечения пучка. Анализируя данные, приведенные на рисунках 4 и 5, видим, что температура в зоне лазерного воздействия достигает наибольших значений, когда лазерный пучок параллелен оси  $L_3$  (максимальная температура при переходе на стационарный режим составляет 3099 К). При воздействии лазерным излучением вдоль осей  $L_2$  и  $L_4$  кристалла соответствующие значения максимальной температуры равны 2675 К и 2506 К. Температура в зоне лазерного воздействия оказалась наименьшей при моделировании без учета фазового перехода алмаз – графит (максимальная температура при выходе на стационарный режим составляет 2346 К). На рисунке 6 видно, что при выходе на стационарный режим резки уже на небольшом удалении от обрабатываемой поверхности вдоль оси лазерного пучка отсутствует существенное различие в значениях температуры, определенных во всех четырех вариантах моделирования.

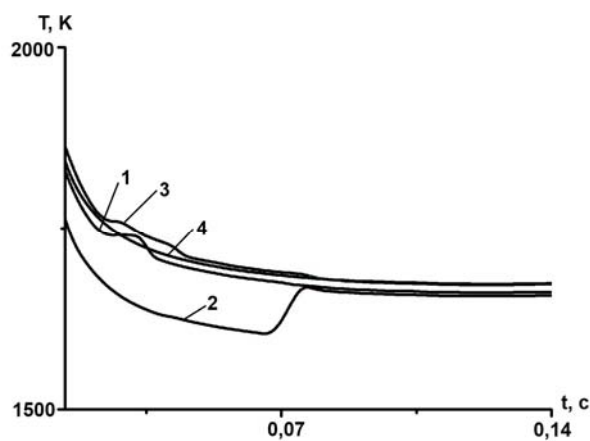
На рисунке 7 показаны рассчитанные формы зон графитизации на обрабатываемой поверхности кристалла алмаза. Видно, что наиболее широкий рез образуется, когда лазерный пучок параллелен оси  $L_3$ , а наименьшее значение ширины реза соответствует варианту обработки с облучением кристалла вдоль оси  $L_4$ . При этом следует отметить, что зона графитизации, формируемая при обработке вдоль оси  $L_4$ , заметно асимметрична относительно линии перемещения центра поперечного сечения лазерного пучка.



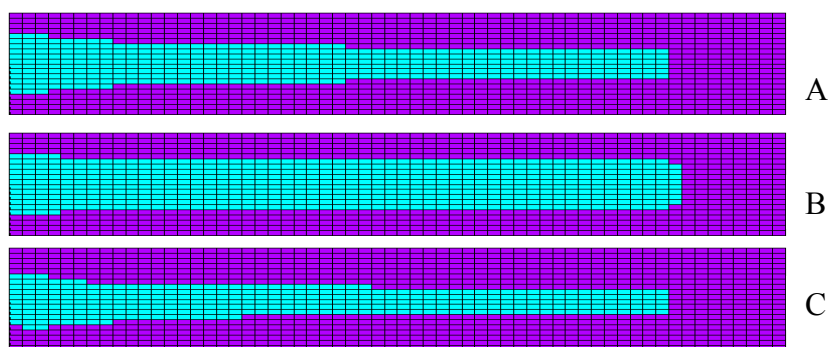
А – I вариант обработки, В – II вариант обработки,  
 С – III вариант обработки, D – IV вариант обработки  
 Рисунок 4 – Распределение температур в кристалле алмаза, К



( $Z = 0, Y = 0$ )  
 1 – I вариант обработки,  
 2 – II вариант обработки,  
 3 – III вариант обработки,  
 4 – IV вариант обработки  
 Рисунок 5 – Рассчитанная зависимость температуры от времени в центре поперечного сечения пучка



( $Z = -2 \cdot 10^{-5}, Y = 0$ )  
 1 – I вариант обработки,  
 2 – II вариант обработки,  
 3 – III вариант обработки,  
 4 – IV вариант обработки  
 Рисунок 6 – Рассчитанная зависимость температуры от времени в центре поперечного сечения пучка



А – I вариант обработки, В – II вариант обработки, С – III вариант обработки

Рисунок 7 – Рассчитанная форма зоны графитизации на обрабатываемой поверхности кристаллов алмаза

Выявленные особенности формирования температурных полей и зон графитизации объясняются тем, что при моделировании учитывалась строгая ориентация гексагональных граней графита параллельно плоскостям (111) алмаза. Именно анизотропия теплофизических свойств графита является причиной того, что температура в зоне обработки и ширина реза достигают наибольших значений при распространении лазерного излучения вдоль оси  $L_3$ , а наименьших значений – при ориентации вдоль оси  $L_4$ . Значения температур и параметров зоны графитизации, соответствующие варианту обработки кристалла алмаза лазерным излучением, распространяющимся вдоль оси  $L_2$ , занимают промежуточное положение между значениями, полученными в двух других названных здесь вариантах обработки. Указанное различие в значениях температур и параметров вещества в зоне графитизации должно учитываться при выборе параметров лазерной обработки.

### Заключение

Полученные в данной работе результаты позволяют сделать вывод о необходимости учета процесса графитизации и ориентации кристаллов при моделировании процессов лазерной обработки алмазов. Результаты моделирования могут быть использованы для оптимизации процесса лазерной обработки кристаллов алмаза.

### 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 Григорьянц, А.А. Лазерная техника и технология: учеб. пособие для вузов; в 7 кн. / А.Г. Григорьянц, А.А. Соколов; под ред. А.Г. Григорьянца. – М.: Высшая школа, 1988. – Кн. 4: Лазерная обработка неметаллических материалов. – 191 с.
- 3 Шкадов, А.И. Физические основы лазерной обработки алмазов: учеб. пособие для вузов; в 15 кн. / А.И. Шкадов; под ред. А.М. Бочарова. – Смоленск, 1997. – Кн. 3: Физические основы лазерной обработки алмазов. – 288 с.
- 4 Shalupaev, S.V. Dependence of the diamond laser processing efficiency on crystallographic directions / S.V. Shalupaev, E.B. Shershnev, Y.V. Nikitjuk, V.V. Sviridova // SPIE. – 2001. – V. 4358. – P. 329–333.
- 5 Шабров, Н.Н. Метод конечных элементов в расчетах деталей тепловых двигателей / Н.Н. Шабров. – Л.: Машиностроение, 1983. – 212 с.