

УДК 679.8

Зависимость интенсивности механической обработки плоскости {100} синтетического алмаза от ориентации кристаллической решетки

С.А. Тереньтев¹, М.А. Доронин¹

¹ФГБНУ «Технологический институт сверхтвёрдых новых и углеродных материалов»

Изучением механической обработки алмаза исследователи занимаются достаточно давно. В прошлом столетии М. Толковским было проведено полноценное изучение механизмов механического микроскалывания во время шлифования алмаза. Он собрал и объединил практические знания алмазной механической обработки того времени: ввел понятие «мягкого» и «твёрдого» направлений в зависимости от кристаллографической плоскости обработки, определил плоскость раскалывания алмаза, установил азимутальное распределение интенсивности шлифования [1]. Термины «мягкое» и «твёрдое» направление используются для описания анизотропии механического износа алмаза. «Мягким» направлением обработки можно назвать обработку в кристаллографической плоскости {100} в направлении полировки $\langle 100 \rangle$, плоскости {110} в направлении $\langle 100 \rangle$, «твёрдым» направлением – практически все направления плоскости {111} и $\langle 110 \rangle$ в плоскости {100}, $\langle 110 \rangle$ в плоскости {110}. Подобные результаты были воспроизведены другими исследователями [2-5].

В этих работах анизотропия износа алмаза объясняется особенностями строения кристаллической решетки, исследования были проведены на природных кристаллах. Цель данной работы состоит в установлении зависимости интенсивности механической обработки синтетического алмаза от ориентации кристаллической решетки. Для этого была совершена экспериментальная работа по определению анизотропии интенсивности съема алмаза путем механического шлифования. Механическая обработка была проведена методом плоского шлифования с применением автоматических

полировочных машин Dialit Super Table на чугунных шлифовальных кругах, шаржированных алмазным порошком марки АСМ зернистости 10/7.

Экспериментальным образцом является синтетический монокристалл алмаза типа Па размером 3x3 мм в кристаллографической плоскости {100}. На основании полученных экспериментальных данных был построен график, изображенный на рис. 1.



Рис. 1. График зависимости интенсивности съема от направления обработки

Рассматривая анизотропию твердости износа алмаза, необходимо учитывать кристаллическую структуру. Атомы углерода в структуре алмаза образуют четыре ковалентные связи под углом $109^{\circ}28'$, длина связи составляет $1,54 \text{ \AA}$ [6]. Все связи направлены по {111}, каждый атом окружен четырьмя такими же атомами, расположенными в вершинах тетраэдра. В структуре есть плоскости (слои), упакованные плотнее, чем любые другие плоскости. На рис. 2 приведен вид на плоскость {111}, в котором видно, насколько плотно расположены атомы в данной плоскости. По плотности сеток кристаллографические плоскости располагаются примерно в следующей последовательности: $L_{111}:L_{110}:L_{100}=2,308:1,414:1$ [7]. На основании этих данных легко объясняются спайность и хрупкость алмаза – рис. 2б,

изображающий плоскости расколов, демонстрирует, что легче разорвать одну валентную связь между сетками, чем три.

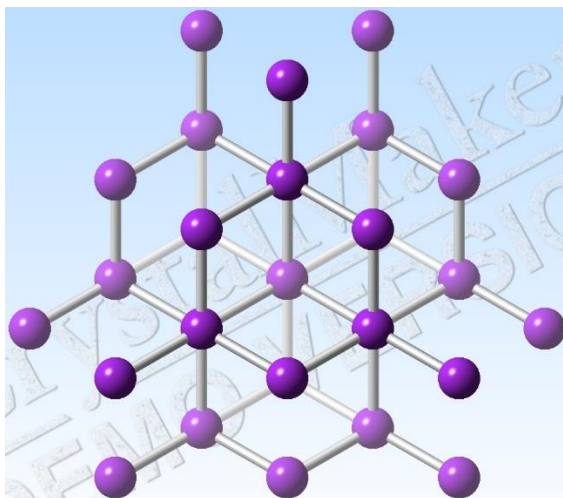


Рис. 2. Вид кристаллической структуры на плоскость $\{111\}$

Разрыв связи С-С происходит при сообщении энергии, превышающей значение энергии связи ($344 \text{ кДж} \cdot \text{моль}^{-1}$ [7]). Описать взаимодействие атомов углерода позволяет потенциал межатомного взаимодействия. Для наглядности воспользуемся потенциалом Леннарда-Джонса (рис. 3). На графике видно, что от небольших колебаний межатомного расстояния энергия взаимодействия изменяется значительно.

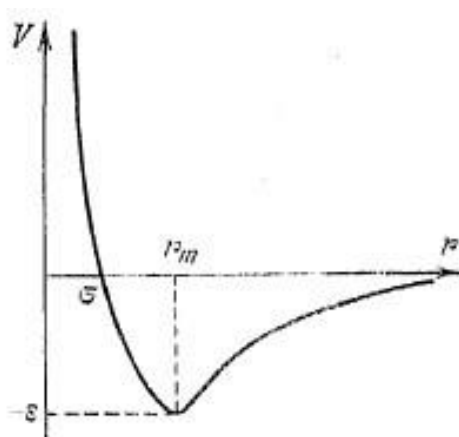


Рис. 3. Потенциал Леннарда-Джонса

Кристаллическая структура плоскости $\{100\}$ представляет собой послойное распределение атомов углерода (рис. 4). Во время процесса механической обработки алмазная поверхность контактирует с поверхностью

шлифовального круга. Происходит послойное удаление слоев, обработка поверхности алмаза в кристаллографической плоскости $\{100\}$ проходит послойно в два этапа.

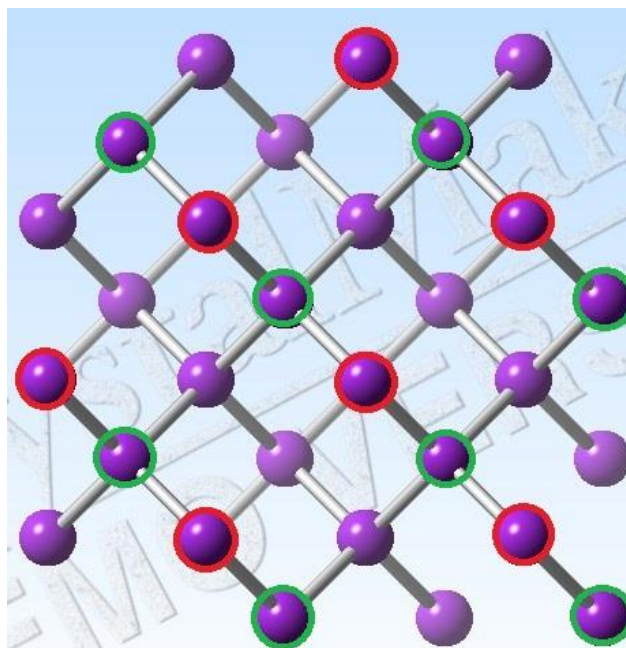
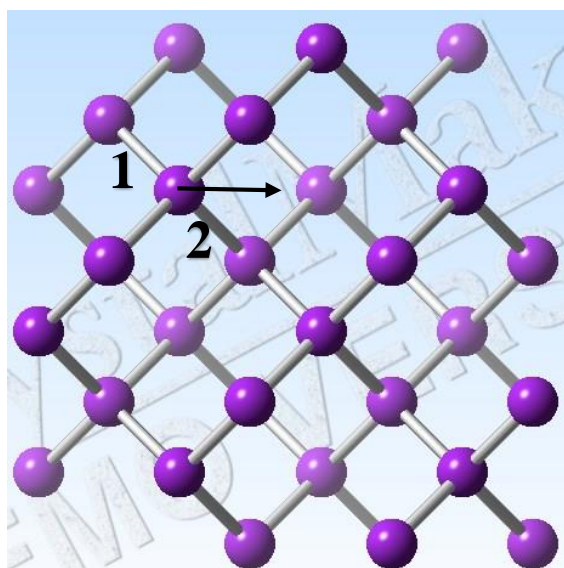


Рис. 4. Послойное распределение атомов углерода, где красным обозначены атомы, находящиеся на поверхности, зеленым – слой, располагающийся ниже

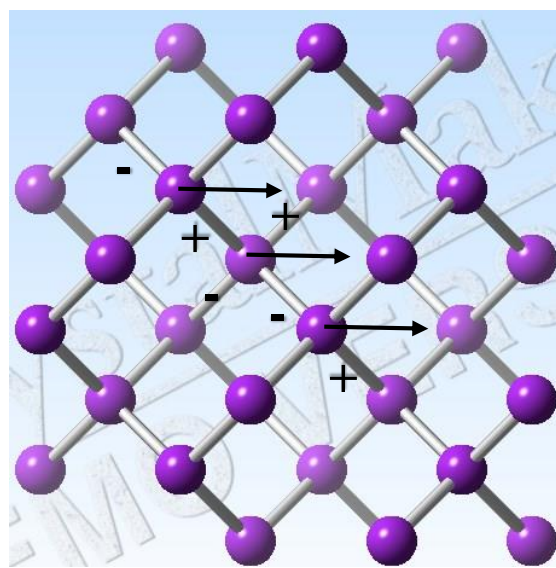
Теперь рассмотрим изменение положения монокристалла алмаза, как оно происходит во время механической обработки. Введем некоторые упрощения: пусть круг вращаясь в одном направлении, всегда одинаково воздействует на алмазную поверхность, пусть сьем алмаза характеризуется только механическим воздействием абразива, при отрыве атомов с поверхности не учитывается деформацию кристаллической решетки.

На рис. 5а изображено начальное положение алмазной поверхности в кристаллографической плоскости $\{100\}$ по направлению $\langle 110 \rangle$, схематически показано воздействие на атом, находящийся на поверхности. При этом связь 1 подвержена растяжению, а связь 2 – сжатию. На схеме обозначим растяжение за «-», сжатие за «+». Как было ранее замечено, сьем проходит в два этапа, поэтому рассматривать нужно два слоя (рис. 5б). Сумма сжатий и растяжений в данном положении равняется нулю. Аналогично построим схему алмазной поверхности после поворота на 45° (рис. 5в). В этом положении количество

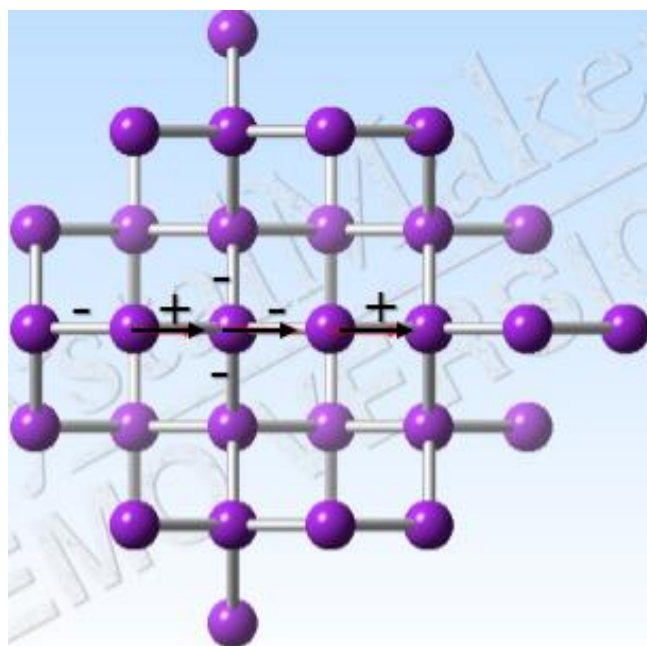
растягивающихся связей больше на 2 чем сжимающихся. Согласно межатомному потенциалу взаимодействия растяжение связи приводит к уменьшению энергии взаимодействия атомов, сжатие приводит к обратному эффекту, следовательно, в положении, в котором растягивающихся связей больше чем сжимающихся для разрыва связей требуется энергии меньше чем в первом случае. Поэтому начальное положение на рис. 5б можно назвать «твердым», а положение 5в – «мягким», что полностью соответствует экспериментальным данным: рис. 5б соответствует минимуму при 0° , 5в – максимуму при повороте на 45° от начального положения. Алмаз является кристаллом с кубической сингонией, для плоскости $\{100\}$ будет характерно чередование «мягкого» и «твердого» направления каждые 45° . Рассмотрение двух положений кристалла, расположенных через 45° будет достаточно для рассмотрения анизотропии в данной плоскости.



а



б



В

Рис. 5. Кристаллическая структура алмаза в плоскости $\{100\}$:

а – воздействие на атом углерода; б – сжатие и растяжение межатомных связей в направлении $\langle 100 \rangle$; в - сжатие и растяжение межатомных связей в направлении $\langle 110 \rangle$

В данной работе установлена зависимость интенсивности механической обработки от ориентации кристаллической решетки. Выдвинуто предположение о том, как можно оценивать и прогнозировать интенсивность механической обработки исходя из ориентации кристаллической решетки, которое соответствует экспериментальным данным. Это предположение содержит ряд упрощений, поэтому следующим шагом является дальнейшая проработка с использованием потенциала межатомного взаимодействия с большим количеством параметров, которые бы более точно описывали взаимодействия атомов углерода во время обработки, а значит следует рассмотреть больший массив атомов, т.к. взаимодействие верхних слоев, контактирующих с шлифовальным кругом, не будет ограничено двумя верхними слоями атомов. Абразивное зерно круга, контактирующее при обработке с алмазной поверхностью, надо рассматривать как алмаз с соответствующей структурой кристаллической решетки. Учитывая все эти поправки необходимо построить модель шлифования алмазной поверхности

на атомарном уровне для более точного представления механизмов традиционной обработки алмазного материала.

Литература

1. Tolkowsky, M. Research on the abrading, grinding or polishing of diamond. D. Sc: Thesis, University of London, 1920.
2. Бочаров А.М. Исследование технологических процессов обработки монокристаллов алмаза. – Смоленск: Кристалл, 1998. – 318 с.
3. Hird, J. R., & Field, J. E. A wear mechanism map for the diamond polishing process. *Wear*, 2005, № 258, pp. 18–25.
4. Grillo S. E., Field J. E., van Bouwelen F. M. Diamond polishing: the dependency of friction and wear on load and crystal orientation. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 2000 №33, pp. 985-990.
5. Wilks J., & Wilks E. *The Resistance of Diamond to Abrasion*. Clarendon Laboratory, Oxford, 1958.
6. Солодова Ю.П. Геммология алмаза: учебник. / Ю.П. Солодова, М.В. Николаев, К.К. Курбатов. - Москва, 2008. – 416 с.
7. Поляков В.П. Алмазы и сверхтвердые материалы: учебное пособие для вузов/ В.П. Поляков, А.В. Ножкина, Н.В. Чириков. – М.: Металлургия, 1990. – 327 с.