Исследование процессов обработки

УДК 621.623

А. Ю. Филатов*, В. И. Сидорко, С. В. Ковалев, Ю. Д. Филатов, А. Г. Ветров

Институт сверхтвердых материалов им. В. Н. Бакуля НАН Украины, г. Киев, Украина **filatov@ism.kiev.ua*

Шероховатость полированных поверхностей оптико-электронных элементов из монокристаллических материалов

В результате исследований закономерностей формирования плоскостей монокристаллов с различной кристаллографической ориентацией установлено, что при полировании сапфира параметры шероховатости Ra, Rq, Rmax уменьшаются в ряду c > r > m > a при уменьшении диэлектрической проницаемости, коэффициента теплопроводности обрабатываемого материала, высоты частиц шлама и константы Лифшица, характеризующей энергию взаимодействия зерен полировального порошка с обрабатываемой поверхностью. Определены минимально допустимые значения параметров шероховатости атомарно гладких поверхностей, которые линейно зависят от межплоскостных расстояний и уменьшаются в ряду r > a > c > m.

Ключевые слова: полирование, частица шлама, параметры ше-

роховатости.

введение

Монокристаллические материалы, в том числе сапфир, карбид кремния, нитриды алюминия и галлия, находят все более широкое применение при производстве элементов для оптико-электронной техники (светоизлучающих диодов, диодов Шоттки, твердотельных лазеров, СВЧтранзисторов, энергосберегающих приборов). Финишная обработка монокристаллических материалов осуществляется при помощи алмазных и абразивных порошков в связанном состоянии, а также суспензий из полировальных порошков [1–3]. Операция полирования осуществляется в несколько переходов (грубое полирование, предварительное полирование, полирование, нанополирование, химико-механическое полирование) при помощи полировального инструмента [4–8], суспензий из алмазных и абразивных порошков [9, 10] и коллоидных систем из наночастиц полировальных порошков [1–13].

© А. Ю. ФИЛАТОВ, В. И. СИДОРКО, С. В. КОВАЛЕВ, Ю. Д. ФИЛАТОВ, А. Г. ВЕТРОВ, 2016

При полировании прецизионных поверхностей элементов и подложек из монокристаллов сапфира, карбида кремния, нитрида алюминия, оптической керамики и других оптических и полупроводниковых материалов необходимо стабильно во времени обеспечивать высокую точность формообразования и требуемую шероховатость обработанной поверхности. Наиболее важным показателем процесса полирования прецизионных поверхностей элементов оптико-электронной техники из монокристаллических материалов, в том числе пластин и подложек, является качество обработки, которое характеризуется шероховатостью, отражающей и рассеивающей способностью обработанной поверхности [14–17]. Кроме того, состояние обработанной поверхности характеризуется дефектами, возникающими на ней в процессе полирования в виде налета частиц шлама и частиц износа инструментального материала [18, 19].

Полированные поверхности оптических элементов должны удовлетворять требованиям по точности формы – 3–5 интерференционных колец, по шероховатости Rz = 0,05 мкм (ГОСТ 2789–73), оптической чистоте – РІІІ–РV (ГОСТ 11141–84) или по качеству обработанных поверхностей от 60–40 до 20–10 (U.S. Military Surface Quality Specification, MIL-PRF-13830B). Поверхности подложек, подготовленные под нанесение эпитаксиального слоя (ері-ready) должны удовлетворять требованиям, регламентирующим точность ориентации плоскости кристалла ($\pm 0,2-0,5^{\circ}$), плотность дислокаций ((1–4)·10³ см⁻²), плотность микропайпов (менее 30 см⁻²), структурное совершенство (FWHM – полуширина линии качания – 30–50 угл. сек), а также "оптическим" требованиям по неплоскостности (менее 10 мкм на диаметре 76,2 мм) и шероховатости (Ra = 0,3-1,0 нм).

Разработанные в последнее время инструменты со связанными полировальными порошками обеспечивают достаточно высокую производительность съема обрабатываемого материала, но, к сожалению, принципиально не могут удовлетворить требованиям, предъявляемым к качеству поверхностей элементов и подложек из монокристаллических материалов для оптико-электронной техники, в частности из-за возможности дефекто- и налетообразования (царапины, фрагменты налета) [18, 19]. Улучшение качества полированных прецизионных поверхностей элементов оптико-электронной техники из монокристаллических материалов может быть достигнуто только при использовании новых полировальных суспензий и коллоидных систем из наночастиц полировальных порошков, а также многостадийных технологических процессов, оптимизация характеристик которых является актуальной задачей.

Целью исследования является изучение влияния кристаллографической ориентации обрабатываемой плоскости элемента из монокристаллического материала на шероховатость обработанной поверхности.

ПОЛИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТЕЙ ЭЛЕМЕНТОВ ИЗ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Для изучения закономерностей формирования нанорельефа полированных поверхностей элементов оптико-электронной техники в настоящее время используется обобщенная модель съема обрабатываемого материала при полировании, основанная на кластерной модели износа твердых тел при трении и физико-статистической модели образования и удаления с обрабатываемой поверхности частиц шлама [6–8, 20]. Интенсивность съема материала Q с обрабатываемой поверхности при полировании при помощи суспензии полировальных порошков определяется по формуле [9, 10, 21] $Q = \eta L_{\rm T}$ (где η – коэффициент объемного износа [20, 21], $L_{\rm T}$ – длина пути трения элемента

обрабатываемой поверхности по поверхности полировальника). Коэффициент η объемного износа определяется методом компьютерного моделирования в зависимости от размеров d(i) частиц шлама, времени их контакта с поверхностью зерна полировального порошка t_{κ} , концентрации частиц шлама на обрабатываемой поверхности, площади поверхности *i*-ой частицы шлама S_i , среднего размера d зерен полировального порошка, площади контакта поверхностей полировальника и детали, коэффициента теплопроводности обрабатываемого материала, температуры в контактной зоне, номинального давления прижима полировальника к обрабатываемой детали, скорости их относительного перемещения [6, 9, 10, 20, 21].

Образование и удаление с обрабатываемой поверхности частиц шлама происходит вследствие накопления колебательной энергии E_c в кластере, состоящем из ξ молекулярных фрагментов, до уровня, превышающего энергию связи E_b обрабатываемого материала. Частица шлама представляет собой параллелепипед, стороны которого имеют длину, определяемую числами k_1 , k_2 , k_3 , и числом молекулярных фрагментов $\xi = k_1k_2k_3$ в частице шлама. Для определения объема снятого в процессе полирования материала наиболее вероятный размер частиц шлама определяется по минимальной площади S_0 поверхности, зависящей от структуры обрабатываемого материала и числа молекулярных фрагментов ξ , которая описывается распределением Пуассона P(i,v) с параметром $v = E_b/E_c$ [10, 16, 21]. При этом размер *i*-ой частицы шлама определяется как диаметр Фере, исходя из условия равенства площадей поверхности сферы и поверхности частицы шлама в соответствии с формулой $d(i) = [S_0(i+1)/\pi]^{1/2}$ [21].

При изучении нанопрофиля полированных поверхностей такой подход к оценке размеров частиц шлама является абсолютно неприемлемым, поскольку высота неровностей зависит не от трех чисел k_1 , k_2 , k_3 , а лишь от того числа, которое определяет число снятых слоев материала при полировании плоскостей с различной кристаллографической ориентацией и разными межплоскостными расстояниями. Поэтому высота неровностей профиля z(x) обрабатываемой поверхности определяется не размерами d(i) частиц шлама, а высотой соответствующих им параллелепипедов h(i), перпендикулярной обрабатываемой плоскости, и ее наиболее вероятным значением $h_v = \sum_i h(i)P(i,v)$.

Базовая длина для определения шероховатости поверхности определяется длинами проекций частиц шлама на обрабатываемую плоскость l(i). Эти параметры можно рассчитать, исходя из размеров элементарной ячейки кристаллической решетки (минимального по площади поверхности параллелепипеда) и чисел k_1 , k_2 , k_3 (таблица). Высота неровностей профиля z(x) в зависимости от координаты описывается формулами, приведенными в [10, 22], после замены d(i) на высоту h(i) частиц шлама и определяется уравнением

$$z(x) = h(k_0) \Phi_{k_0}^2 \left(\frac{x}{h(k_0)} \right) + \\ + \sum_{i \ge 1}^{G-1} \left[\frac{\Phi_{k_0}(\sqrt{2k_0 + 1})}{\Phi_{k_i}(\sqrt{2k_i + 1})} \sqrt{\frac{h(k_i)}{h(k_0)}} \right]^2 h(k_i) \Phi_{k_i}^2 \left(\frac{x - \frac{1}{2} \left[h(k_0) + \sum_i h(k_i) \sqrt{2k_i + 1} \right]}{h(k_i)} \right), \quad (1)$$

ISSN 0203-3119. Сверхтвердые материалы, 2016, № 3

65

где $x \in [0, L]$ – координата; $L = Gl_v$ – базовая длина модельной профилограммы; G – число частиц шлама; $l_v = \sum_i l(i)P(i, v)$ – наиболее вероятный размер проекций частиц шлама; k_i – случайная последовательность чисел, которая

проекций частиц шлама; k_i – случайная последовательность чисел, которая генерируется в соответствие с распределением Пуассона и определяет порядок образования и последовательность их расположения на обрабатываемой плоскости в направлении базовой длины; Φ_k – функция параболического цилиндра. Полученное уравнение (1) описывает наноразмерный рельеф в виде террасно-ступенчатой структуры, которая возникает вследствие удаления с обрабатываемой кристаллографической плоскости частиц шлама в форме параллелепипеда при условии, что ее параметры шероховатости близки к расстоянию между соседними подрешетками кристаллической ячейки [23, 24]. При помощи компьютерного моделирования нанопрофиля полированной поверхности определяются параметры шероховатости: среднее арифметиче-

ское отклонение профиля $Ra = \frac{1}{L} \int_{0}^{L} z(x) dx$, среднее квадратичное отклонение

профиля $Rq = \sqrt{\frac{1}{L} \int_{0}^{L} [z(x)]^2 dx} (rms)$ и наибольшая высота профиля Rmax.

ПОЛИРОВАНИЕ ПЛОСКОСТЕЙ САПФИРА С РАЗЛИЧНОЙ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ ОРИЕНТАЦИЕЙ

В процессе полирования монокристаллов сапфира (плотность $\rho = 3,98 \text{ г/см}^3$; энергия связи $E_b = 6,3$ эВ, постоянные решетки a = 0,4758 нм, c = 1,2991 нм [25]) с обрабатываемой поверхности отрываются частицы шлама, состоящие из $\xi = k_1k_2k_3$ молекулярных фрагментов. При полировании плоскостей с различной кристаллографической ориентацией образуются частицы шлама, площадь поверхности которых зависит от числа молекулярных фрагментов и межплоскостных расстояний. При полировании плоскостей c {0001}, m {1010}, a {1120} и r {1012} минимальная площадь поверхности частиц шлама определяется по формулам [21]

$$S_{0c} = a\xi \left(\frac{3a\sqrt{3}}{k_3} + \frac{c}{2k_2} + \frac{2c}{\sqrt{3}k_1} \right);$$
(2)

$$S_{0m} = a\xi \left(\frac{a\sqrt{3}}{2k_3} + \frac{2c}{3k_2} + \frac{7c}{3k_1} \right);$$
(3)

$$S_{0a} = a\xi \left(\frac{a\sqrt{3}}{k_3} + \frac{2\sqrt{3}c}{k_2} + \frac{c}{k_1} \right);$$
(4)

$$S_{0r} = a\xi \left(\frac{3\sqrt{3a^2 + c^2}}{k_3} + \frac{c\sqrt{3}}{k_2} \sqrt{\frac{c^2 + 4a^2}{c^2 + 3a^2}} + \frac{ac\sqrt{3}}{k_1\sqrt{3a^2 + c^2}} \right),$$
(5)

а межплоскостные расстояния составляют $l_c = 0,2165$ нм, $l_m = 0,1374$ нм, $l_a = 0,2379$ нм и $l_r = 0,3479$ нм [21]. Исходя из минимума поверхностной энер-

www.ism.kiev.ua/stm

гии в соответствии с принципом Гиббса-Кюри о равновесной форме кристалла [21, 26], для граней *c*, *m*, *a* и *r* определены значения чисел k_1 , k_2 , k_3 , по формулам (2)–(5) рассчитаны минимальные площади S_0 поверхности частиц шлама, а также их наиболее вероятные значения $S = \sum_i S_0(i+1)P(i,v)$ (см.

таблицу).

Характеристика обрабатываемой поверхности и частиц шлама, параметры взаимодействия сапфира с полировальным порошком cBN и параметры шероховатости полированных поверхностей

Характеристика, параметр	Обрабатываемая плоскость сапфира			
	<i>m</i> {1010}	c {0001}	a {1120}	r {1012}
Число молекулярных фрагментов	$k_1 = 16$	$k_1 = 4$	<i>k</i> ₁ = 5	$k_1 = 2 - 3$
в частице шлама	$k_2 = 4-5$	$k_2 = 3$	$k_2 = 9 - 10$	$k_2 = 4$
$\xi = k_1 k_2 k_3 = 72$	$k_3 = 1$	$k_3 = 6$	$k_3 = 1 - 2$	$k_3 = 7 - 8$
Размеры элементарной ячейки, Å	Lx = 1,374	<i>Lx</i> = 7,137	<i>Lx</i> = 8,241	<i>Lx</i> = 15,384
	<i>Ly</i> = 7,137	<i>Ly</i> = 8,241	<i>Ly</i> = 2,379	<i>Ly</i> = 7,137
	<i>Lz</i> = 12,991	<i>Lz</i> = 2,165	<i>Lz</i> = 12,991	<i>Lz</i> = 3,479
Высота частицы шлама h_v , нм	2,997	3,543	3,082	3,559
Проекция частицы шлама на обрабатываемую плоскость <i>l_v</i> , нм	4,724	5,150	6,216	6,532
Константа Лифшица <i>A_L</i> , 10 ⁻²¹ Дж (мэВ)	5,6 (35)	9,3 (58)	5,6 (35)	7,7 (48)
Площадь поверхности частицы шлама <i>S</i> , нм ²	53,4	68,0	86,0	104,6
Коэффициент объемного износа η, м ² /с	1,7.10 ⁻¹¹	1,9.10 ⁻¹¹	2,5.10 ⁻¹¹	2,8.10-11
Плотность колебательной энергии $\gamma_k \cdot 10^5$, Дж/м ²	10,4	13,7	6,5	7,4
Шероховатость полированной поверхности				
<i>Ra</i> , нм	6,8±0,2	8,2±0,1	6,7±0,2	8,0±0,2
<i>Rq</i> , нм	7,2±0,3	8,8±0,1	7,3±0,3	8,6±0,3
Rmax, нм	12,1±1,5	14,8±1,4	12,9±1,0	14,4±1,7
Минимально допустимые				
параметры шероховатости				
Ra_0 , Å	0,687	1,083	1,190	1,740
$Rq_0,$ Å	0,971	1,531	1,682	2,460
Rmax ₀ , Å	1,374	2,165	2,379	3,479

Полирование пластин из сапфира с различной кристаллографической ориентацией (цилиндрических окон диаметром 25 мм), закрепленных на блоке диаметром 230 мм на окружностях диаметром 105 мм и 175 мм, осуществляли при помощи суспензии порошка кубического нитрида бора КМ 0,5/0 на полировальнике диаметром 350 мм при частоте вращения 40 об/мин, частоте вращения блока деталей 36 об/мин, частоте осциллирующего движения 45 дв. ход./мин, давлении прижима детали к инструменту 26,2 кПа, смещении штриха 30 мм, несимметрии штриха 5 мм, длине штриха 160 мм и средней температуре в зоне контакта 300 К. Частоты собственных колебаний молекулярных фрагментов сапфира – 573, 642 и 748 см⁻¹, полировального порошка сВN – 1056, 1100 и 1304 см⁻¹ [10, 13, 27]. Статическая диэлектрическая проницаемость плоскостей *m*, *a*, *r* и *c* сапфира – 9,3, 9,3, 10,5 и 11,5, а коэффициенты теплопроводности – 30,3, 30,3, 31,5 и 32,5 Вт/(м·К) соответственно [21, 25]. Статическая диэлектрическая проницаемость сВN – 2,5 [10]. Результаты расчета параметров взаимодействия поверхностей сапфировых пластин с различной кристаллографической ориентацией с полировальным порошком сВN приведены в таблице.

В результате компьютерного моделирования взаимодействия между кластерами на зернах полировального порошка и на обрабатываемой поверхности при полирования плоскостей сапфира с различной кристаллографической ориентацией установлено, что параметры шероховатости Ra, Rq, Rmax обработанных поверхностей линейно возрастают при увеличении диэлектрической проницаемости ε и коэффициента теплопроводности λ . Зависимости параметров шероховатости Ra, Rq, Rmax от диэлектрической проницаемости кристалла в направлении перпендикулярном соответствующей плоскости аппроксимированы линейными функциями вида

$$\begin{pmatrix} Ra\\ Rq\\ R\max \end{pmatrix} = \alpha_1 \varepsilon + \beta_1,$$

где $\alpha_1 = \begin{pmatrix} 0,71\\0,76\\1,11 \end{pmatrix}$ нм, $\beta_1 = \begin{pmatrix} 0,25\\0,30\\0,27 \end{pmatrix}$ нм – коэффициенты, определенные при помо-

щи метода наименьших квадратов; погрешность аппроксимации – 2–3 % (рис. 1).



Рис. 1. Зависимость параметров шероховатости $Ra(\circ)$, $Rq(\bullet)$, $Rmax(\Box)$ плоскостей сапфира с различной кристаллографической ориентацией от диэлектрической проницаемости.

www.ism.kiev.ua/stm

Зависимости параметров шероховатости плоскостей *m*, *c*, *a* и *r* сапфира от коэффициента теплопроводности кристалла в перпендикулярном к ним направлении аппроксимированы линейными функциями вида

$$\begin{pmatrix} Ra \\ Rq \\ R \max \end{pmatrix} = \alpha_2 \lambda - \beta_2 ,$$

где $\alpha_2 = \begin{pmatrix} 0,7\\0,8\\1,1 \end{pmatrix} \cdot 10^{-9}$ Вт⁻¹м²*K*, $\beta_2 = \begin{pmatrix} 14,6\\15,6\\21,1 \end{pmatrix}$ нм – коэффициенты, определенные

при помощи метода наименьших квадратов; погрешность аппроксимации – не более 3 % (рис. 2).



Рис. 2. Зависимость параметров шероховатости $Ra(\circ)$, $Rq(\bullet)$, $Rmax(\Box)$ плоскостей сапфира с различной кристаллографической ориентацией от коэффициента теплопроводности.

При полировании плоскостей монокристаллов с различной кристаллографической ориентацией полировальной суспензией, образование и удаление частиц шлама в виде параллелепипедов с высотой, кратной соответствующим межплоскостным расстояниям, происходит в результате взаимодействия между обрабатываемой поверхностью и поверхностью притира, на которой закреплены зерна полировального порошка, которое характеризуется флуктуационными силами Лифшица [28]. При взаимодействии плоскостей сапфира и слоя полировального порошка (КМ 0,5/0) на притире толщина зазора между ними составляет $l_0 \approx 0,5$ мкм. Длина волны, соответствующая диапазону собственных колебаний молекулярных фрагментов сапфира и полировального порошка сВN 573–1304 см⁻¹ [13, 27], составляет $\lambda_0 = 7,7-17,5$ мкм. При условии $l_0 \ll \lambda_0$ сила Лифшица $F_L = \frac{A_L}{8\pi^2 l_0^3}$ (A_L – константа Лифшица [10, 28, 29]) составляет ~ 0,5 мН/м². Постоянная Лифшица A_L [Дж] характеризует энергию взаимодействия между кластерами на зернах полировального

порошка и на обрабатываемой поверхности сапфира и оценивается величинами десятков мэВ (см. таблицу).

На рис. 3 представлены зависимости параметров шероховатости *Ra*, *Rq*, *R*max полированных плоскостей *m*, *c*, *a* и *r* сапфира от константы Лифшица *A*_L, которые можно аппроксимировать линейными функциями вида

$$\begin{pmatrix} Ra \\ Rq \\ R max \end{pmatrix} = \alpha_3 A_L + \beta_3,$$
где $\alpha_3 = \begin{pmatrix} 4,2 \\ 4,5 \\ 6,6 \end{pmatrix} \cdot 10^{11} \, \mathrm{H}^{-1}, \ \beta_3 = \begin{pmatrix} 4,5 \\ 4,8 \\ 8,9 \end{pmatrix} \mathrm{HM} - \mathrm{коэффициенты};$ погрешность аппрок

симации - 2-3 %.



Рис. 3. Зависимость параметров шероховатости Ra (\circ), Rq (\bullet), Rmax (\Box) обработанных плоскостей сапфира с различной кристаллографической ориентацией от константы Лифшица.

Зависимости параметров шероховатости плоскостей m, c, a и r сапфира от наиболее вероятного значения высоты h_v частиц шлама (проекции в перпендикулярном к ним направлении) аппроксимированы линейными функциями вида

$$\begin{pmatrix} Ra \\ Rq \\ R \max \end{pmatrix} = \alpha_4 h_v - \beta_4$$

где $\alpha_4 = \begin{pmatrix} 2,6\\ 2,8\\ 4,2 \end{pmatrix}$, $\beta_4 = \begin{pmatrix} 1,1\\ 1,3\\ 0,2 \end{pmatrix}$ нм – коэффициенты, определенные при помощи

метода наименьших квадратов; погрешность аппроксимации не более 2 % (рис. 4).

www.ism.kiev.ua/stm



Рис. 4. Зависимость параметров шероховатости $Ra(\circ), Rq(\bullet), Rmax(\Box)$ плоскостей *m*, *c*, *a* и *r* сапфира от высоты частиц шлама.

При полировании монокристаллических материалов одновременно происходят: съем обрабатываемого материала – процесс переноса массы, характеризуемый коэффициентом объемного износа $\eta [m^2/c]$, который линейно зависит от наиболее вероятного значения площади поверхности частиц шлама *S* [21] (см. таблицу), и формирование нанорельефа поверхности – процесс удаления частиц шлама с обрабатываемой поверхности, характеризуемый параметрами шероховатости *Ra*, *Rq*, *R*max, которые линейно зависят от константы Лифшица (см. рис. 3). Отношение параметров η/Ra , характеризующих эти процессы, определяется формулой

$$\frac{\eta}{Ra} = \alpha_5 \frac{S}{A_L} = \frac{\alpha_5}{\gamma_k},$$

где α_5 – коэффициент пропорциональности, $\gamma_k = \frac{A_L}{S}$ – плотность колебательной энергии взаимодействия полировального порошка с обрабатываемым материалом.

На рис. 5 приведена зависимость η/Ra от γ_k^{-1} (см. таблицу). В обратных координатах эта зависимость является линейной и может быть аппроксимирована линейной функцией вида

$$\frac{\eta}{Ra} = \alpha_5^* \gamma_k^{-1} + \beta_5 ,$$

где $\alpha_5^* = 1,9 \cdot 10^{-7}$ H/c, $\beta_5 = 8,4 \cdot 10^{-4}$ м/c – коэффициенты, определенные при помощи метода наименьших квадратов; погрешность аппроксимации не более 4 %. Из рис. 5 следует, что при увеличении плотности колебательной энергии взаимодействия полировального порошка с обрабатываемым материалом, которая характеризуется энергией взаимодействия между кластерами на зернах полировального порошка и на обрабатываемой поверхности (константой Лифшица [29]), отнесенной к площади поверхности частиц шлама, величина отношения η/Ra уменьшается по гиперболическому закону.



Рис. 5. Зависимость отношения η/Ra от плотности колебательной энергии взаимодействия полировального порошка с обрабатываемым материалом.

Шероховатость обработанной поверхности при полировании плоскостей *a*, *m*, *r* и *c* сапфира с различной кристаллографической ориентацией (по отношению к плоскости *c*, перпендикулярной оптической оси кристалла) $R = Ra/Ra_c$ характеризуется соотношением: $R_a:R_m:R_r:R_c = 0.81:0.83:0.97:1.00$.

При изучении закономерностей полирования плоскостей *a*, *r* и *c* сапфира при помощи алмазных порошков *RDDM* 0,25–0,50 на полировальниках из каучукового материала [30] показано, что значения параметра шероховатости *Ra* этих плоскостей составляют: 5,4, 6,2 и 7,5 нм, а их соотношения – $R_a:R_r:R_c$ = 0,72:0,83:1,00 и Ra_a/Ra_r = 0,87, которые подтверждают полученные соотношения $R_a:R_r:R_c$ = 0,81:0,97:1,00 и Ra_a/Ra_r = 0,84 (соответствующие величины отклонения экспериментальных и расчетных данных составляют – 16, 12 и 4 %). При исследовании влияния кристаллографической ориентации обрабатываемой плоскости сапфира на производительность обработки и шероховатость обработанной поверхности при химико-механическом полировании в [12] установлена общая закономерность уменьшения интенсивности съема обрабатываемого материала и параметров шероховатости в ряду *c* > *r* > *a*, который соответствует приведенному выше соотношению.

При экспериментальной оценке шероховатости плоскостей *a* и *c* сапфировых окон, обработанных в описанных выше условиях, при помощи профилометра Mahr Federal MarSurf PS1 и бесконтактного интерференционного 3D профилографа Micron-alpha были получены значения параметра шероховатости Ra: 6,5±1,4 нм – для плоскости *a* и 8,6±0,7 нм – для плоскости *c*, отношение которых $Ra_a/Ra_c = 0,76$ незначительно отличается от расчетного значения 0,81 (отклонение 6–7 %).

При образовании и удалении с обрабатываемой поверхности плоскостей a, m, r и c сапфира частиц шлама, высота h_v которых составляет 3,0–3,6 нм (см. таблицу), состоящих из десятков элементарных фрагментов, формируется поверхность с шероховатостью, которая оценивается параметрами Ra = 6,7-8,2 нм, Rq = 7,2-8,8 нм, Rmax = 12,1-14,8 нм (см. таблицу). Иная ситуация происходит при образовании на обрабатываемой поверхности кристалла частиц шлама, состоящих из одного или нескольких элементарных фрагментов. При съеме обрабатываемого материала в процессе полирования, который, по сути, является обратным по отношению к процессу роста кристаллов, могут образовываться как атомарно шероховатые, так и атомарно гладкие поверхности в соответствии с критерием Джексона [31], согласно которому определяется фактор энтропии поверхности

$$\alpha = \frac{zw}{k_B T}$$

где *z* – общее количество возможных связей кластера с ближайшими соседями в кристалле; *w* – энергия взаимодействия между кластерами на зернах полировального порошка и на обрабатываемой поверхности; *T* – средняя температура в зоне контакта обрабатываемой детали и притира; $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К – постоянная Больцмана.

Обработанные поверхности, для которых $\alpha > 5,3$, являются атомарно гладкими, а поверхности, для которых $\alpha < 2$, являются атомарно шероховатыми. При полировании плоскостей *m*, *c*, *a* и *r* сапфира (полное число связей *z* = 4), когда *T* = 300 K, а энергия взаимодействия *w* = *A*_L (см. таблицу), расчетные значения фактора Джексона $\alpha = 5,4,9,0,5,4,7,4$ больше, чем 5,3. Это означает, что при полировании плоскостей *m*, *c*, *a* и *r* сапфира возможно формирование атомарно гладких поверхностей.

При химико-механическом полировании сапфира при использовании коллоидных систем из наночастиц полировальных порошков обеспечивается возможность получения поверхности с "ангстремной" шероховатостью: при полировании плоскостей m, a, c Rq = 3 Å [11]; Ra < 3 Å [12] и Rq = 2,3 Å [13]; Ra = 2,9 Å и Rq = 3,6 Å [32]. Для определения минимально допустимых значений параметров шероховатости атомарно гладких поверхностей следует принять очевидное допущение, что min{Ra, Rq, Rmax} соответствует минимальному количеству ступеней на плоскости – 1, а высота этой ступени h в точности равна (или кратна) межплоскостному расстоянию l, которое для плоскостей c, m, a и r сапфира составляет 2,165, 1,374, 2,379 и 3,479 Å соответственно. В связи с этим профиль такой поверхности представляется функцией

$$z(x) = \begin{cases} h, x < L/2; \\ 0, x \ge L/2, \end{cases}$$

а параметры шероховатости составляют $Ra_0 = h/2$, $Rq_0 = \frac{h}{\sqrt{2}}$ и $Rmax_0 = h$

соответственно. Для плоскостей *m*, *c*, *a* и *r* сапфира минимально допустимые значения параметров шероховатости приведены в таблице. Следует отметить, что при полировании плоскостей сапфира с различной кристаллографической ориентацией их шероховатость зависит от константы Лифшица и уменьшает-

ся в ряду c > r > m > a. В то же время, эта закономерность нарушается для минимально допустимых значений параметров шероховатости атомарно гладких поверхностей, для которых наблюдается линейная зависимость от величины межплоскостного расстояния и уменьшение в ряду r > a > c > m (рис. 6).

При нанополировании достигаются следующие минимально допустимые параметры шероховатости: $Ra_0 = 0,69-1,74$ Å, $Rq_0 = 0,97-2,46$ Å и $Rmax_0 = 1,374-3,479$ Å, которые не противоречат физическому смыслу и находятся в соответствии с параметрами кристаллической решетки сапфира. Приведенные в [11–13, 25, 30, 32] значения параметров шерохо-



Рис. 6. Зависимость предельно допустимых значений параметров шероховатости Ra_0 (\circ), Rq_0 (\bullet), $Rmax_0$ (\Box) от межплоскостного расстояния при полировании плоскостей *m*, *c*, *a* и *r* сапфира.

ватости различных плоскостей сапфира, достигаемые на различных стадиях процесса полирования, хорошо согласуются с приведенными выше значениями.

выводы

Исследование закономерностей полирования поверхностей оптикоэлектронных элементов из монокристаллических материалов на примере сапфира и компьютерное моделирование процесса формирования плоскостей с различной кристаллографической ориентацией показало, что параметры шероховатости Ra, Rq, Rmax обработанных поверхностей линейно возрастают при увеличении диэлектрической проницаемости, коэффициента теплопроводности, высоты частиц шлама и константы Лифшица, которая характеризует энергию взаимодействия зерен полировального порошка с обрабатываемой поверхностью. Установлено, что при полировального порошка с обрабатываемой поверхностью энергии взаимодействия полировального порошка с обрабатываемым материалом величина отношения коэффициента объемного износа к среднеарифметическому отклонению профиля η/Ra уменьшается по гиперболическому закону.

При изучении закономерностей полирования плоскостей a, m, r и c сапфира с различной кристаллографической ориентацией показано, что параметры шероховатости обработанных поверхностей характеризуются соотношением: 0,81:0,83:0,97:1,00, и установлена общая закономерность уменьшения шероховатости в ряду c > r > m > a. Показано также, что для рассматриваемых плоскостей сапфира фактор энтропии поверхности Джексона превышает значение 5,3, что подтверждает возможность формирования атомарно гладких поверхностей в процессе полирования. Определены минимально допустимые значения параметров шероховатости атомарно гладких поверхностей, формируемых при нанополировании плоскостей сапфира с различной кристаллографической ориентацией, которые линейно зависят от межплоскостных расстояний и уменьшаются в ряду r > a > c > m.

В результаті дослідження закономірностей формування площин монокристалів з різною кристалографічною орієнтацією встановлено, що при поліруванні сапфіру параметри шорсткості Ra, Rq, Rmax зменшуються в ряду c > r > m > a при зменшенні діелектричної проникності, коефіцієнта теплопровідності оброблюваного матеріалу, висоти частинок шламу та константи Ліфшиця, що характеризує енергію взаємодії зерен полірувального порошку з оброблюваною поверхнею. Визначено мінімально припустимі значення параметрів шорсткості атомарно гладких поверхонь, які лінійно залежать від міжплощинних відстаней та зменшуються в ряду r > a > c > m.

Ключові слова: полірування, частинка шламу, параметри шорсткості.

The studies of regularities of formation planes of single crystals with different crystallographic orientations found that in polishing sapphire roughness parameters Ra, Rq, Rmax decrease in the number of c > r > m > a with a decrease in the dielectric constant, thermal conductivity of the material being processed, the height of the sludge particles and the Lifshitz constant, characterizing the interaction energy grain polishing powder with treated surface. Determine the minimum allowable values atomically smooth surface roughness, which are linearly dependent on the interplanar distances and decrease to a number r > a > c > m.

Keywords: polishing, slime particle, roughness parameters.

1. Филатов А. Ю., Сидорко В. И., Филатов Ю. Д. Особенности формирования макро- и микрорельефа плоских поверхностей деталей из неметаллических материалов при алмазном шлифовании // Сверхтв. материалы. – 2007. – № 6. – С. 48–57.

- 2. Филатов Ю. Д., Сидорко В. И., Филатов А. Ю. и др. Шероховатость поверхностей при финишной алмазно-абразивной обработке // Там же. 2009. № 3. С. 68–74.
- Filatov Y. D., Sidorko V. I., Filatov O. Yu. et al. Surface quality control in diamond abrasive finishing // Proc. SPIE: Optical Measurement Systems for Industrial Inspection VI. – 2009. – 7389. – P. 73892O (9).
- Li Y., Wu Y., Wang J., et al. Tentative investigation towards precision polishing of optical components with ultrasonically vibrating bound-abrasive pellets // Optics Express. – 2012. – 20, N 1. – P. 568–575.
- Zhou C., Zhang Q., He C., Li Y. Function of liquid and tool wear in ultrasonic bound-abrasive polishing of fused silica with different polishing tools // Optik-Int. J. Light Electron Optics. – 2014. – 125, N 15. – P. 4064–4068.
- 6. Филатов Ю. Д. Полирование прецизионных поверхностей деталей из неметаллических материалов инструментом со связанным полировальным порошком // Сверхтв. материалы. 2008. № 1. С. 59–66.
- Filatov Y. D., Filatov O. Y., Monteil G. et al. Bound-abrasive grinding and polishing of surfaces of optical materials // Opt. Eng. 2011. 50, art. 063401 (7).
- Filatov Y. D., Filatov O. Yu., Monteil G. et al. Bound-abrasive grinding and polishing of surfaces of optical materials // Proc. SPIE: Current Developments in Lens Design and Optical Engineering XI; and Advances in Thin Film Coatings VI. 2010. 7786. P. 778613 (9).
- Филатов Ю. Д., Ветров А. Г., Сидорко В. И. и др. Закономерности финишной алмазноабразивной обработки монокристаллического карбида кремния // Сверхтв. материалы. – 2013. – № 5. – С. 63–74.
- 10. Филатов Ю. Д., Ветров А. Г., Сидорко В. И. и др. Полирование элементов оптикоэлектронной техники из монокристаллического карбида кремния // Там же. – 2015. – № 1. – С. 63–71.
- Zhu H., Tessaroto L. A., Sabia R. et al. Chemical mechanical polishing (CMP) anisotropy in sapphire // Appl. Surface Sci. – 2004. – 236, N 1–4. – P. 120–130.
- Budnikov A. T., Vovk E. A., Krivonogov S. I. et al. Anisotropy of sapphire properties associated with chemical-mechanical polishing with silica // Functional Mater. 2010. 17, N 4. P. 488–494.
- Wang Y., Liuu S., Peng G. et al. Effects of surface treatment on sapphire substrates // J. Crystal Growth. – 2005. – 274. – P. 241–245.
- 14. Филатов Ю. Д., Ящук В. П., Филатов А. Ю. и др. Оценка шероховатости и отражательной способности поверхностей изделий из неметаллических материалов при финишной алмазно-абразивной обработке // Сверхтв. материалы. – 2009. – № 5. – С. 70–81.
- Filatov O. Yu., Poperenko L. V. In situ ellipsometry of surface layer of nonmetallic transparent materials during its finish processing // Appl. Surface Sci. – 2006. – 253, N 1. – P. 163–166.
- Filatov Yu. D., Filatov O. Yu., Heisel U. et al. In situ control of roughness of processed surfaces by reflectometric method // Proc. SPIE: Optical Micro- and Nanometrology III. – 2010. – 7718, art. 77181J (9).
- 17. Филатов Ю. Д., Филатов А. Ю., Сирота О. О. и др. Влияние рассеяния частиц износа инструмента в контактной зоне на формирование микропрофиля обработанной поверхности при полировании кварца // Сверхтв. материалы. 2010. № 6. С. 68–77.
- 18. Филатов А. Ю., Сидорко В. И. Локализация фрагментов налета на обрабатываемой поверхности при полировании неметаллических материалов // Там же. 2011. № 5. С. 73–87.
- Filatov Yu. D., Monteil G., Sidorko V. I., Filatov O. Yu. Formation of a deposit on workpiece surface in polishing nonmetallic materials // Proc. SPIE: Smart Sensors, Actuators, and MEMS VI. – 2013. – 8763, art. 876336 (15).
- Филатов Ю. Д., Сидорко В. И. Статистический подход к износу поверхностей деталей из неметаллических материалов при полировании // Сверхтв. материалы. – 2005. – № 1. – С. 58–66.
- 21. Филатов А. Ю., Сидорко В. И., Ковалев С. В. и др. Производительность полирования анизотропных монокристаллических материалов для оптоэлектроники // Там же. 2016. № 2. С. 65–76.
- 22. Филатов Ю. Д. Механизм образования микрорельефа поверхности при обработке стекла // Там же. 1991. № 5. С. 61–65.
- 23. Бахолдин С. И., Маслов В. Н. Моделирование поверхностных энергий кристаллов сапфира // Физика твердого тела. 2015. 57, вып. 6. С. 1213–1219.

- Vodenitcharova T., Zhang L. C., Zarudi I. et al. The effect of anisotropy on the deformation and fracture of sapphire wafers subjected to thermal shocks // J. Mater. Proc. Tech. – 2007. – 194. – P. 52–62.
- 25. Добровинская Е. Р., Литвинов Л. А., Пищик В. В. Энциклопедия сапфира. Харьков: Ин-т монокристаллов, 2004. 508 с.
- 26. Барыбин А. А., Томилин В. И., Шаповалов В. И. Физико-технологические основы макро-, микро- и наноэлектроники. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2011. 784 с.
- Kadleikova M., Breza J., Vesely M. Raman spectra of synthetic sapphire // Microelectronics J. – 2001. – N 32. – P. 955–958.
- 28. Файнер Н. И., Косинова М. Л., Румянцев Ю. М. Тонкие пленки карбонитридов кремния и бора: синтез, исследование состава и структуры // Рос. хим. ж. об-ва им. Д. И. Менделеева. 2001. XLV, № 3. С. 101–108.
- 29. *Рехвиашвили С. Ш.* Применение дробного интегродифференцирования для расчета термодинамических свойств поверхностей // Физика твердого тела. 2007. **49**, вып. 4. С. 756–759.
- 30. *Герасимов С. А., Дмитриева Н. М., Косарева Т. А.* Исследование процесса механической обработки лейкосапфира // Научн.-техн. журн. "Контенант". 2013. **12**, № 2. С. 84–89.
- 31. Волошин А. Э., Рашкович Л. Н., Руднева Е. Б., Маноменова В. Л. Выращиваем кристаллы // Природа. 2014. № 10. С. 62–72.
- Rogov V. V., Filatov Y. D., Kottler W., Sobol V. P. New technology of precision polishing of glass optic // Opt. Eng. – 2001. – 40, N 8. – P. 1641–1645.

Поступила 06.06.15