## Дослідження процесів обробки

УДК 621.923.7

Ю. Д. Філатов<sup>1,</sup> \*, В. І. Сідорко<sup>1</sup>, С. В. Ковальов<sup>1</sup>, А. Ю. Бояринцев<sup>2</sup>, В. А. Ковальов<sup>3</sup>, О. Я. Юрчишин<sup>3</sup> <sup>1</sup>Інститут надтвердих матеріалів ім. В. М. Бакуля НАН України, м. Київ, Україна <sup>2</sup>Інститут сцинтиляційних матеріалів НАН України, м. Харків, Україна <sup>3</sup>Національний технічний університет України "Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського", м. Київ, Україна \*filatov2045@gmail.com

# Розсіювання наночастинок шламу під час полірування полімерних оптичних матеріалів

В результаті дослідження закономірностей взаємодії наночастинок шламу з наночастинками зносу полірувального порошку і притира під час полірування полістиролу, поліметилметакрилату і поліаллілдігліколькарбонату за допомогою дисперсних систем з мікро- і нанопорошків на підставі ab initio розрахунків у відповідності до квантової теорії розсіювання встановлено, що наночастинки шламу пружно розсіюються на наночастинках зносу. Диференціальний переріз розсіювання має максимальне значення за кутів розсіювання 0 і  $180^{\circ}$ , яке перевершує його значення для інших кутів в  $2 \cdot 10^4 - 5 \cdot 10^4$  разів. Показано, що наночастинки шламу під час полірування рухаються вздовж вісі оптичного резонатора між оброблюваною поверхнею і поверхнею притира і розсіюються тільки вперед і назад. Встановлено, що повний переріз розсіювання наночастинок шламу експоненціально зростає за підвищення їхньої концентрації та суттево зменшується за збільшення розміру і кінетичної енергії наночастинок. За підвищення добротності резонатора від 7,9 до 105,5 повний переріз розсіювання наночастинок шламу експоненціально зменшується від 120,8 до 0,6 Мб. Показано, що розрахункові значення повного перерізу розсіювання наночастинок шламу з високим ступенем точності корелюють з експериментально визначеною швидкістю видалення матеріалу під час полірування.

**Ключові слова:** полірування, полімерні матеріали, розсіювання наночастинок, добротність резонатора.

## вступ

Під час полірування оптичних поверхонь деталей з неметалевих матеріалів, в тому числі оптико-електронних елементів з полімерних © Ю. Д. ФІЛАТОВ, В. І. СІДОРКО, С. В. КОВАЛЬОВ, А. Ю. БОЯРИНЦЕВ, В. А. КОВАЛЬОВ, О. Я. ЮРЧИШИН, 2023 оптичних матеріалів, зазвичай застосовують полірувальні дисперсійні системи з неабразивних мікро- та нанопорошків [1–3]. Підвищення продуктивності полірування та поліпшення якості оброблених поверхонь деталей з полімерних оптичних матеріалів можливі лише за удосконалення технології їхнього полірування та розробки нових полірувальних дисперсійних систем, які б забезпечували достатню швидкість зняття оброблюваного матеріалу та необхідну якість полірованої поверхні за повної відсутності нальоту та інших дефектів [4–6]. Саме тому вивчення закономірностей розсіювання наночастинок шламу та зносу полірувального порошку в системі оброблювана поверхня–дисперсна система–поверхня притира [7–9] і дослідження закономірностей утворення дефектів на полірованій поверхні та локалізації нальоту з наночастинок шламу і частинок зносу [10–12]  $\epsilon$  актуальними.

Метою даного дослідження є вивчення квантово-механічних закономірностей розсіювання наночастинок шламу на наночастинках зносу полірувального порошку і притира під час полірування полімерних оптичних матеріалів за допомогою полірувальних дисперсійних систем з мікро- та нанопорошків.

## МЕТОДИКА ДОСЛІДЖЕНЬ

Дослідження закономірностей розсіювання наночастинок шламу на наночастинках зносу полірувального порошку і притира здійснювали стосовно полірування плоских поверхонь деталей з оптичних полімерних матеріалів діаметром 60 мм на верстаті мод. 2ШП-200М за допомогою притира з пінополіуретану діаметром 100 мм за зусилля притискання деталі до притира 50 Н. частоти обертання притира 90 об/хв. змішення 30 мм та довжини штриха 80 мм. середньої температури в зоні контакту оброблюваної деталі та притира 298 К. Оброблювали полімерні матеріали, які використовують для виготовлення сцинтиляторів з полістиролу (ПС), контактних та інтраокулярних лінз з поліметилметакрилату (ПММА), лінз для окулярів з поліаллілдігліколькарбонату (CR-39) [13–17]. Полірування здійснювали за допомогою дисперсної системи з мікрота нонопорошків (ДС1) [18–20] та водяної суспензії двооксиду церію (ДС2) [1], яку традиційно застосовують для полірування оптичних матеріалів. Підготовку плоских поверхонь оптичних деталей для полірування здійснювали за допомогою тралиційних метолів тонкого та налтонкого шліфування [1, 5, 10, 21]. Частоти власних коливань молекулярних фрагментів частинок полірувального порошку лисперсної системи ЛС1. визначені за спектрами ІЧ-поглинання (Фур'є-спектрометр Nicolet 6700), складали 597, 733, 777, 850, 870, 943, 984, 1085 см<sup>-1</sup>, а дисперсної системи ДС2 – 465, 521, 848 см<sup>-1</sup> [22]. Частоту власних коливань молекулярних фрагментів полімерних оптичних матеріалів, що досліджували, визначали за відповідними ІЧ-спектрами: ПС – 537, 696, 753, 905, 1027 см<sup>-1</sup> [23, 24], ПММА – 481, 750, 840, 960, 1065 см<sup>-1</sup> [25–27], CR-39 – 495, 621, 792, 839 см<sup>-1</sup> [28-31]. Швидкість видалення оброблюваного матеріалу фіксували за зміною маси деталі до і після полірування за допомогою аналітичних терезів мод. АВД-200.

### РЕЗУЛЬТАТИ ТА ОБГОВОРЕННЯ

У відповідності до сучасних уявлень про механізм полірування неметалевих матеріалів [32–34] зняття оброблюваного матеріалу, зношування частинок полірувального порошку та зношування робочої поверхні притира відбуваються в оптичному резонаторі, який утворений двома паралельними поверхнями оброблюваного матеріалу та притира, і є наслідком ферстерівського резонансного перенесення енергії (FRET) [35–39] між ними. Під час полірування полімерних оптичних матеріалів наночастинки шламу (ЧШ), а також наночастинки зносу полірувального порошку (ЧП1 і ЧП2) та зносу притира (ЧЗ), що утворюються в околі оброблюваної поверхні й поверхні притира відповідно, рухаються вздовж вісі оптичного резонатора в напрямках оброблюваної поверхні ("вверх") і поверхні притира ("вниз"). Наночастинки ЧШ, ЧП1, ЧП2 і ЧЗ, які генеруються в системі оброблювана поверхня-дисперсна система-поверхня притира, є квантовими частинками і характеризуються довжиною хвилі ( $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$ ,  $\lambda_3$ ,  $\lambda_4$ ), кінетичною енергією ( $E_1$ ,  $E_2$ ,  $E_3$ ,  $E_4$ ), швидкістю (v<sub>1</sub>, v<sub>2</sub>, v<sub>3</sub>, v<sub>4</sub>), розміром (a<sub>1</sub>, a<sub>2</sub>, a<sub>3</sub>, a<sub>4</sub>) і концентрацією (N<sub>1</sub> N<sub>2</sub>, N<sub>3</sub>, N<sub>4</sub>) (табл. 1). Моди стоячих хвиль для обмежених у просторі оптичного резонатора наночастинок є станами з певною енергією та невизначеним імпульсом, оскільки він залежить не тільки від маси і швидкості руху частинки, а і від його напрямку. Якщо вважати, що імпульси наночастинок є додатними під час руху вверх і від'ємними під час руху вниз, можна оцінити невизначеність імпуль- $2\hbar/\lambda_2$ ,  $2\hbar/\lambda_3$ ,  $2\hbar/\lambda_4$  ( $\hbar = 1,054 \cdot 10^{-34}$  Дж с – стала Планка), а невизначеність розташування наночастинок – як довжину резонатора l<sub>0</sub>. Добуток цих невизначеностей для наночастинок ЧШ, ЧП1, ЧП2 і ЧЗ має значення порядку  $\hbar$  у повній відповідності до співвідношення невизначеності Гайзенберга [40, 41]. Це означає, що вивчення взаємодії наночастинок шламу та наночастинок зносу полірувального порошку і притира під час полірування полімерних оптичних матеріалів на основі класичної теорії розсіювання частинок є некоректним, а спроби визначення траєкторій їхнього руху, кутів та перерізу розсіювання [7, 41-43] не мають фізичного змісту і не відповідають реальному механізму розсіювання квантових частинок.

У разі квантово-механічного розгляду взаємодії наночастинок шламу з наночастинками зносу полірувального порошку і притира в системі оброблювана поверхня–дисперсна система–поверхня притира хвильова функція розсіяння частинок є суперпозицією падаючої та розсіяної хвиль, яка задовольняє рівнянню Шредінгера і має вигляд

$$\varphi(r) = e^{ikz} + \frac{f(\vartheta)e^{ikr}}{r},$$

де  $k = \frac{mv}{\hbar}$  – хвильове число; m – маса частинки; v – швидкість частинки;  $\vartheta$  –

кут розсіювання;  $f(\vartheta)$  – амплітуда розсіяної хвилі. Диференціальний переріз розсіювання і повний ефективний переріз розсіювання визначають у відповідності до формул [40–42]

$$I(\vartheta) = |f(\vartheta)|^2;$$
  
$$\sigma = 2\pi \int_{0}^{\pi} |f(\vartheta)|^2 \sin \vartheta d\vartheta.$$

За допомогою методу парціальних хвиль можна визначити амплітуду розсіювання наночастинок:

$$f(\vartheta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)P_l(\cos\vartheta)(\eta_l-1),$$

де l – азимутальне квантове число, яке визначає кутовий момент;  $P_l(\cos \vartheta)$  – поліноми Лежандра;  $\eta_l = \exp(2i\delta_l)$  – комплексне число, яке характеризує процес пружного і непружного розсіювання наночастинок;

 $\delta_l = -\int_{r_0}^{l_0} \frac{mU(r)dr}{\hbar^2 \sqrt{k^2 - \frac{(l+1/2)^2}{r^2}}}$  – фазовий зсув хвильових функцій наночастинок

в полі розсіяння U(r);  $l_0$  – довжина резонатора [18, 38, 43];  $r_0 = \frac{\sqrt{l(l+1)}}{k}$  –

відстань граничного зближення наночастинок, яка відповідає радіусу ефективної дії потенціалу розсіювання *U*(*r*) [5, 10, 38, 40–42].

## Таблиця 1. Характеристики наночастинок шламу і наночастинок зносу полірувального порошку та притира, які утворюються під час полірування полімерних оптичних матеріалів

	Оброблюваний матеріал							
Характеристика	ПС	ПММА	ПММА	CR-39				
наночастинок		система						
		ДС1		<u>Д</u> С2				
Довжина хвилі, мкм	14,37	13,33	12,63	13,28	11,91	12,62		
$\lambda_1$								
$\lambda_2$	13,64	13,64	16,76	11,80	21,51	21,51		
$\lambda_3$		13,64		21,51				
$\lambda_4$		13,07		20,0				
Кінетична енергія, еВ								
$\operatorname{HIII} - E_1$	8,8	21,6	4,0	1,0	5,3	4,3		
$\Psi\Pi 1 - E_2$	30,8	43,7	9,0	5,8	12,1	2,0		
ЧП2 — $E_3$		4,38		8,13				
$43 - E_4$		0,50		8,75				
Швидкість руху, м/с								
$\Psi I I I - v_1$	215	196	193	166	50	193		
$\Psi\Pi 1 - v_2$	60	43	49	136	98	74		
$\Psi \Pi 2 - v_3$		4,5		8,4				
$43 - v_4$		9,0		57,3				
Розмір, нм								
$\operatorname{HIII}$ , $a_1$	5,2	7,1	3,9	3,0	14,3	4,1		
ЧП1, <i>a</i> <sub>2</sub>	11,9	16,7	9,1	3,3	5,3	3,8		
ЧП2, <i>a</i> <sub>3</sub>		8,6		3,4				
ЧЗ, <i>a</i> <sub>4</sub>		3,7		2,3				
Концентрація, $10^{14} \text{ м}^{-2} \text{c}^{-1}$								
$\operatorname{HIII} - N_1$	1,2	0,8	1,5	1,9	0,1	0,9		
$\Pi \Pi 1 - N_2$	0,6	0,5	0,6	1,1	0,3	0,5		
ЧП2 — $N_3$		1,1		1,0				
$43 - N_4$		0,2		0,5				

Потенціал взаємодії між наночастинками шламу і наночастинками зносу полірувального порошку ЧП1 і ЧП2 та притира ЧЗ можна визначити у відповідності до формули [44–46]

$$U_{ij}(r) = -\frac{AL_{ij}}{16\pi r} \cdot \frac{a_i a_j}{a_i + a_j} - \frac{AL_{ij}}{8\pi} \ln\left[\frac{a_i a_j}{r(a_i + a_j)}\right],\tag{1}$$

де *i*, *j* =  $\overline{1,4}$  – номери наночастинок ЧШ, ЧП1, ЧП2 і Ч3;  $AL_{ij} = 2\pi c\hbar E_{ds} \frac{|\lambda_i - \lambda_j|}{\lambda_i \lambda_j}$  – сталі Ліфшиця [1, 7, 19, 47] (табл. 2); *c* – швидкість

світла;  $E_{ds}$  – функція діелектричних проникностей [42, 47]; r – відстань між наночастинками.

Таблиця 2. Параметри взаємодії наночастинок шламу з наночастинками
зносу полірувального порошку і притира в системі оброблювана
поверхня–дисперсна система–поверхня притира

	Оброблюваний матеріал								
Параметри взаємодії	ПС	ПММА	CR-39	ПС	ΠΜΜΑ	CR-39			
наночастинок	Полірувальна дисперсна система								
		ДC1		ДС2					
Стала Ліфшиця, зДж									
$AL_{12}$	0,60	0,26	2,56	0,96	3,65	2,66			
$AL_{13}$	0,60	0,26	0,79	3,07	3,86	2,90			
$AL_{14}$	1,25	0,26	0,41	4,59	5,97	4,41			
Диференціальний переріз розсіювання, Гб ср <sup>-1</sup>									
$I_{12}$	58,4	8,0	222,5	623,6	0,7	0,4			
$I_{13}$	1,0	8,0	72,0	208,4	8,7	153,5			
$I_{14}$	0,7	3,2	77,9	340,0	2,7	31,1			
Повний переріз розсіювання наночастинок, Мб									
$\sigma_{12}$	2,4	0,3	9,5	53,9	0,03	0,3			
$\sigma_{13}$	0,04	0,3	3,0	26,6	0,4	6,8			
$\sigma_{14}$	0,05	0,2	4,9	40,3	0,2	2,3			
Довжина резонатора <i>l</i> <sub>0</sub> , мкм	4,5	4,1	4,6	6,9	6,0	5,4			
Добротність резонатора $q_1$	18,7	27,7	10,2	7,9	105,5	14,2			
Продуктивність полірування $Q$									
Розрахунок: <i>Q</i> , 10 <sup>-13</sup> м <sup>3</sup> /с	35,8	138,1	3,2	0,2	717,7	2,4			
Експеримент: <i>Q</i> , 10 <sup>-13</sup> м <sup>3</sup> /с	39,3	150,7	3,4	_	725,0	2,5			
Q, мкм/год	5,0	19,2	0,4	_	92,0	0,3			

За виконання наближення Борна [40, 41], коли кінетична енергія частинки, яка налітає, значно більша від середньої енергії взаємодії між частинками, тобто за умови

$$rac{E_i}{U_{ij}(r_0)}$$
>>1,  
а також за виконання нерівності  $\left| rac{m U_{ij}(r_0)(l_0 - r_0)}{k\hbar^2} \right|$ >>1, коли порядок азиму-  
тального квантового числа  $l \approx kr_0$ >> 1, можна визначити диференціальний

переріз розсіювання  $I(\vartheta)$ , а також повний переріз розсіювання наночастинок за формулою

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l} (2l+1) \sin^2 \delta_l.$$

або у відповідності до оптичної теореми [5, 9–11, 40–42]

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im}[f(\vartheta = 0)]$$

Результати розрахунку сталих Ліфшиця, які визначають потенціали взаємодії між наночастинками шламу, зносу полірувального порошку і притира, диференціального і повного перерізу розсіювання наночастинок, параметрів оптичного резонатора, а також дані розрахунку та експериментального визначення продуктивності полірування полімерних оптичних матеріалів за допомогою дисперсних систем з мікро- і нанопорошків [38] наведено в табл. 2.

На підставі *ab initio* розрахунків у відповідності до квантової теорії розсіювання, виходячи з розв'язку рівняння Шредінгера, досліджено кутові залежності диференціального перерізу розсіювання наночастинок шламу на наночастинках зносу полірувального порошку ЧП1 ( $I_{12}$ ) і ЧП2 ( $I_{13}$ ) та зносу притира ЧЗ ( $I_{14}$ ) і показано, що його максимальних значень було досягнуто за кутів розсіювання  $\vartheta = 0$  (розсіювання вперед) і  $\vartheta = 180^{\circ}$  (розсіювання назад)  $I(0) = I(\pi)$ , що перевершує його значення для інших кутів в  $2 \cdot 10^4 - 5 \cdot 10^4$  разів, а фазовий зсув хвильових функцій наночастинок  $|\eta_l| = 1$  є характерним для чисто пружного розсіювання, коли абсолютні значення імпульсу і енергії частинки не змінюються, а змінюється лише напрям поширення [40]. Це означає, що квантові наночастинки шламу, які утворюються в системі оброблювана поверхня–дисперсна система–поверхня притира під час полірування, рухаються вздовж вісі оптичного резонатора між оброблюваною поверхнею і поверхнею притира, розсіюючись тільки вперед і назад.

В результаті аналізу повного перерізу розсіювання наночастинок шламу на наночастинках зносу полірувального порошку ЧП1 ( $\sigma_{12}$ ) і ЧП2 ( $\sigma_{13}$ ) та зносу притира ЧЗ ( $\sigma_{14}$ ) (див. табл. 2) показано, що повний переріз розсіювання наночастинок шламу  $\sigma_{1s} = \sigma_{12} + \sigma_{13} + \sigma_{14}$  суттєво зменшується зі збільшенням їхнього розміру (рис. 1) і зростає з підвищенням їхньої концентрації (рис. 2).



Рис. 1. Залежність повного перерізу розсіювання наночастинок шламу на наночастинках зносу полірувального порошку і притира від їхнього розміру: *I* – ДС1; *2* – ДС2.

Аналіз цих залежностей показує, що значення повного перерізу розсіювання наночастинок шламу  $\sigma_{1s}$  змінюється на два порядки і досягає максимального значення 120,8  $M6^1$ , характерного для полірування ПС за допомо-

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> 1 барн = 10<sup>-28</sup> м<sup>2</sup>.

гою дисперсної системи ДС2, яке в  $10^3-10^4$  разів менше, ніж розраховане на основі класичної теорії розсіювання [43]. Мінімальні значення повного перерізу розсіювання наночастинок шламу  $\sigma_{1s}$  характерні для полірування ПММА за допомогою дисперсних систем ДС1 і ДС2 (відповідно 0,9 і 0,6 Мб), під час якого утворюються найбільші за розмірами наночастинки шламу. Залежності повного перерізу розсіювання наночастинок шламу на наночастинках зносу полірувального порошку і притира від їхньої концентрації, які представлено в напівлогарифмічному масштабі (див. рис. 2), показують, що зі збільшенням концентрації наночастинок шламу N1 повний переріз їхнього розсіювання  $\sigma_{1s}$  зростає відповідно до експоненціальної функції, яка має вигляд

$$\sigma_{1s} = \sigma_0 \exp[\alpha N_1],$$

де  $\sigma_0 = \begin{cases} 0.12 \\ 0.51 \end{cases}$  Mб,  $\alpha = \begin{cases} 2.5 \\ 2.9 \end{cases} \cdot 10^{-14}$  – коефіцієнти, які визначено за методом

найменших квадратів, похибка апроксимації – 1 %). Встановлено також, що повний переріз розсіювання наночастинок шламу на наночастинках зносу полірувального порошку і притира суттєво зменшується зі збільшенням кінетичної енергії наночастинок шламу (рис. 3), що свідчить про те, що чим більше енергія частинок, що налітають, тим менше вони розсіюються.



Рис. 2. Залежність повного перерізу розсіювання наночастинок шламу на наночастинках зносу полірувального порошку і притира від їхньої концентрації: *1* – ДС1; *2* – ДС2.



Рис. 3. Залежність повного перерізу розсіювання наночастинок шламу на наночастинках зносу полірувального порошку і притира від їхньої кінетичної енергії: *1* – ДС1; *2* – ДС2.

На рис. 4 в напівлогарифмічному масштабі наведено залежності повного перерізу розсіювання наночастинок шламу на наночастинках зносу полірувального порошку і притира від добротності резонатора, утвореного поверхнями оброблюваного матеріалу і притира (див. табл. 2), які показують, що з підвищенням добротності резонатора  $q_1$  повний переріз їхнього розсіювання  $\sigma_{1s}$  швидко спадає відповідно до експоненціальної функції, яка має вигляд

$$\sigma_{1s} = \exp\!\left(\frac{\alpha_1}{q_1} - \beta_1\right),\,$$

де  $\alpha_1 = \begin{cases} 47,4 \\ 45,7 \end{cases}$ ,  $\beta_1 = \begin{cases} 52,4 \\ 51,6 \end{cases}$  – коефіцієнти, які визначено за методом найменших

квадратів, похибка апроксимації – <1 %).



Рис. 4. Залежність повного перерізу розсіювання наночастинок шламу на наночастинках зносу полірувального порошку і притира від добротності резонатора: *I* – ДС1; *2* – ДС2.

Варто зауважити, що існує зв'язок повного перерізу розсіювання наночастинок шламу на наночастинках зносу полірувального порошку і притира зі швидкістю зняття оброблюваного матеріалу, яка залежить від добутку об'єму наночастинок шламу на їхню концентрацію [48], оскільки відомо, що зі збільшенням добротності резонатора відбувається підвищення продуктивності полірування неметалевих матеріалів [38, 49]. На рис. 5 в логарифмічному масштабі наведено залежність повного перерізу розсіювання наночастинок шламу на наночастинках зносу полірувального порошку і притира від продуктивності полірування полістиролу, поліметилметакрилату і поліаллілдігліколькарбонату за допомогою дисперсних систем ДС1 і ДС2, яка може бути апроксимована лінійною функцією

$$\ln(\sigma_{1s}) = \alpha_2 \ln Q + \beta_2,$$

де  $\alpha_2 = -0.67$ ,  $\beta_2 = -67.18$  – коефіцієнти, які визначено за методом найменших квадратів, похибка апроксимації – 1 %.



Рис. 5. Залежність повного перерізу розсіювання наночастинок шламу від продуктивності полірування полімерних матеріалів.

Ця залежність демонструє, що значення повного перерізу розсіювання наночастинок шламу, розраховані у відповідності до квантової теорії розсіювання, з високим ступенем точності корелюють з макроскопічним параметром – експериментально визначеною швидкістю зняття оброблюваного матеріалу під час полірування полімерних оптичних матеріалів за допомогою дисперсних систем з мікро- та нанопорошків.

В результаті вивчення закономірностей розсіювання наночастинок шламу на наночастинках зносу полірувального порошку і притира встановлено, що чим більші розміри і кінетична енергія наночастинок шламу, чим більша добротність резонатора і чим менша їхня концентрація, тим менше вони розсіюються під час руху в системі оброблювана поверхня-дисперсна системаповерхня притира. Мінімальне (0,6 Мб) значення повного перерізу розсіювання спостерігається під час полірування ПММА за допомогою дисперсної системи ДС2 в резонаторі з добротністю 105,5, коли швидкість зняття оброблюваного матеріалу максимальна (92,0 мкм/год). Максимальне значення повного перерізу розсіювання (120,8 Мб) спостерігається під час полірування ПС за допомогою дисперсної системи ДС2 в резонаторі з добротністю 7,9, коли зняття оброблюваного матеріалу практично відсутнє (дані розрахунку [38] –  $0,2\cdot10^{-13}$  м<sup>3</sup>/с).

#### ВИСНОВКИ

В результаті дослідження закономірностей взаємодії наночастинок шламу з наночастинками зносу полірувального порошку і притира під час полірування ПС, ПММА і СR-39 за допомогою дисперсних систем з мікро- і нанопорошків на підставі *ab initio* розрахунків у відповідності до квантової теорії розсіювання встановлено, що наночастинки шламу пружно розсіюються на наночастинках зносу полірувального порошку і притира за диференціального перерізу розсіювання, максимальні значення якого за кутів розсіювання 0 і 180° перевершують значення для інших кутів в  $2 \cdot 10^4 - 5 \cdot 10^4$  разів.

Квантові наночастинки шламу під час полірування рухаються вздовж вісі оптичного резонатора між оброблюваною поверхнею і поверхнею притира і розсіюються тільки вперед і назад.

Повний переріз розсіювання наночастинок шламу експоненціально зростає за підвищення їхньої концентрації та суттєво зменшується за збільшення розміру і кінетичної енергії наночастинок. З підвищенням добротності резонатора, який утворюється поверхнями оброблюваного матеріалу і притира, від 7,9 до 105,5 повний переріз розсіювання частинок шламу експоненціально зменшується від 120,8 до 0,6 Мб.

Розрахункові значення повного перерізу розсіювання наночастинок шламу з високим ступенем точності корелюють з експериментально визначеною швидкістю зняття оброблюваного матеріалу під час полірування полімерних оптичних матеріалів за допомогою дисперсних систем з мікро- та нанопорошків.

> Yu. D. Filatov<sup>1</sup>, V. I. Sidorko<sup>1</sup>, S. V. Kovalev<sup>1</sup>, A. Y. Boyarintsev<sup>2</sup>, V. A. Kovalev<sup>3</sup>, O. Y. Yurchyshyn<sup>3</sup>
> <sup>1</sup>Bakul Institute for Superhard Materials, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine
> <sup>2</sup>Institute for Scintillation Materials, National Academy of Sciences of Ukraine, Kharkiv, Ukraine
> <sup>3</sup>National Technical University of Ukraine
> "Kyiv Polytechnic Institute. Igor Sikorsky", Kyiv, Ukraine
> Scattering of sludge nanoparticles during polishing of polymer optics materials

As a result of the study of the regularities of the interaction of sludge nanoparticles with wear nanoparticles of polishing powder and lapping during the polishing of polystyrene, polymethylmethacrylate and polyallyldiglycolcarbonate using dispersed systems of micro- and nanopowders, based on ab initio calculations in accordance with the quantum theory of scattering, it was established that the sludge nanoparticles are elastically scattering on wear nanoparticles. The differential scattering cross section has a maximum value at scattering angles of  $0^{\circ}$  and 180°, which exceeds its value for other angles by  $(2-5) \cdot 10^4$  times. It is shown that during polishing, sludge nanoparticles move along the axis of the optical resonator between the treated surface and the lapping surface and scatter only forward and backward. It was established that the total scattering cross section of the scattering of sludge nanoparticles increases exponentially with an increase in their concentration and significantly decreases with an increase in the size and kinetic energy of the nanoparticles. As the Q factor of the resonator increases from 7.9 to 105.5, the full cross-section of sludge nanoparticle scattering decreases exponentially from 120.8 Mb to 0.6 Mb. It is shown that the estimated values of the total scattering cross section of sludge nanoparticles correlate with a high degree of accuracy with the experimentally determined of material removal rate during polishing.

*Keywords*: polishing, polymeric materials, scattering of nanoparticles, *Q* factor of the resonator.

- Filatov Y.D. Polishing of precision surfaces of optoelectronic device elements made of glass, sitall, and optical and semiconductor crystals: A review. *J. Superhard Mater.* 2020. Vol. 42, no. 1. P. 30–48.
- Filatov O.Yu., Sidorko V.I., Kovalev S.V., Filatov Yu.D., Vetrov A.G. Polished surface roughness of optoelectronic components made of monocrystalline materials. *J. Superhard Mater.* 2016. Vol. 38, no. 3. P. 197–206.
- Filatov O.Yu., Sidorko V.I., Kovalev S.V., Filatov Y.D., Vetrov A.G. Polishing substrates of single crystal silicon carbide and sapphire for optoelectronics. *Functional Mater.* 2016. Vol. 23, no. 1. P. 104–110.
- Filatov Yu.D., Sidorko V.I., Filatov A.Yu., Yashuk V.P., Heisel W., Storchak M. Surface quality control in diamond abrasive finishing. *Opt. Meas. Syst. Ind. Inspect. VI. Proc. SPIE.* 2009. Vol. 7389, art. 73892O.
- Filatov Yu.D., Filatov O.Y., Monteil G, Heisel U., Storchak M.G. Bound-abrasive grinding and polishing of surfaces of optical materials. *Proc. SPIE. Opt. Eng. Appl.* 2010. Vol. 7786. P. 77861–77869.
- Filatov Yu.D., Filatov O.Y., Heisel U., Storchak M.G., Monteil G. In situ control of roughness of processed surfaces by reflectometric method. *Proc. SPIE. Opt. Micro- Nanometrol.* 2010. Vol. 7718, art. 77181J.
- Filatov Yu. D. Interaction between debris particles and polishing powder wear particles in polishing optoelectronic components. J. Superhard Mater. 2018. Vol. 40, no. 4. P. 282–289.
- Filatov Yu.D., Filatov A.Yu., Syrota O.O., Yashchuk V.P., Monteil G., Heisel U., Storchak M. The influence of tool wear particles scattering in the contact zone on the workpiece surface microprofile formation in polishing quartz. *J. Superhard Mater.* 2010. Vol. 32, no. 6. P. 415– 422.
- Filatov O.Yu., Poperenko L.V., Yashchuk V.P., Sidorko V.I., Heisel W., Storchak M., Wear particles deposit formation on the polishing tool working surface. *J. Superhard Mater.* 2011. Vol. 33, no. 1. P. 44–53.
- Filatov Y.D., Filatov O.Y., Monteil G., Heisel U., Storchak M.G. Bound-abrasive grinding and polishing of surfaces of optical materials. *Opt. Eng.* 2011. Vol. 50, iss. 6. P. 063401–7.
- 11. Filatov Yu.D., Monteil G., Sidorko V.I., Filatov O.Y. Formation of a deposit on workpiece surface in polishing nonmetallic materials. *Proc. SPIE. Smart Sensors, Actuators, and MEMS VI.* 2013. Vol. 8763, art. 876336.
- 12. Filatov O.Yu., Sidorko V.I. Localization of fragments of a deposit on the workpiece surface in polishing nonmetallic materials. *J. Superhard Mater.* 2011. Vol. 33, no. 5. P. 340–351.
- 13. Mathur V., Sharma K. Thermal response of polystyrene/poly methyl methacrylate (PS/PMMA) polymeric blends. *Heat Mass Transfer*. 2016. Vol. 52. P. 2901–2911.
- Eissa M.F. Effect of transferred electronic energy density on optical, electrical and structural properties of polyallyl-diglycol carbonate (CR-39) polymer. J. Macromol. Sci. Part B. 2014. Vol. 53, no. 3. P. 529–540.

- Abdul-Kader A.M., Zaki M.F., Basma A.El-Badry. Modified the optical and electrical properties of CR-39 by gamma ray irradiation. *J. Radiat. Res. Appl. Sci.* 2014. Vol. 7, no. 3. P. 286–291.
- 16. Zhang H.Q, Jin Y., Qiu1 Y. The optical and electrical characteristics of PMMA film prepared by spin coating method. *Global Conf. on Polymer and Composite Materials (PCM 2015)*, IOP Conf. Series: *Mater. Sci. Eng.* 2015. Vol. 87, P. 1–5.
- Ashry A.H., Abou-Leila M., Abdalla A.M. Detection efficiency of alpha particles in CR-39 nuclear track detector: experimental study. *Adv. Sci. Eng. Med.* 2012. Vol. 4, no. 4. P. 341– 344.
- Filatov Y.D., Sidorko V.I., Kovalev S.V., Kovalev V.A. Effect of the rheological properties of a dispersed system on the polishing indicators of optical glass and glass ceramics. J. Superhard Mater. 2021. Vol. 43, no. 1. P. 65–73.
- 19. Filatov Y.D., Sidorko V.I., Kovalev S.V., Kovalev V.A. Effect of interaction between polishing powder particles and a treated material on polishing characteristics of optical surfaces. *J. Superhard Mater.* 2021. Vol. 43, no. 4. P. 296–302.
- Filatov Yu.D., Sidorko V.I., Kovalev S.V., Kovalev V.A. Effect of the processed material structure on the polishing quality of optical surfaces. *J. Superhard Mater.* 2021. Vol. 43, no. 6. P. 435–443.
- 21. Filatov Yu.D. Diamond polishing of crystalline materials for optoelectronics. *J. Superhard Mater.* 2017. Vol. 39, no. 6. P. 427–433.
- 22. Babitha K.K., Sreedevi A., Priyanka K.P., Sabu B., Varghese T. Structural characterization and optical studies of CeO<sub>2</sub> nanoparticles synthesized by chemical precipitation. *Indian J. Pure Appl. Phys.* 2015. Vol. 53. P. 596–603.
- 23. Mahasin F. Hadi Al-Kadhemy, Zahraa S. Rasheed, Sanaa R. Salim. Fourier transform infrared spectroscopy for irradiation coumarin doped polystyrene polymer films by alpha ray. *J. Radiat. Res. Appl. Sci.* 2016. Vol. 9, no. 3. P. 321–331.
- 24. Qionglin Luo, Shunqin Zeng, You Shu, Zaihui Fu, Hongran Zhaoc, Shengpei Su. A novel green process for tannic acid hydrolysis using an internally sulfonated hollow polystyrene sphere as catalyst. *RSC Adv.* 2018. Vol. 8. P. 17151–17158.
- 25. Aziz Sh. B., Abdullah O. Gh., Hussein Ah. M., Ahmed H.M. From insulating PMMA polymer to conjugated double bond behavior: green chemistry as a novel approach to fabricate small band gap polymers. *Polymers*. 2017. Vol. 9, no. 626. P. 1–15.
- 26. Tommasini F.J., da Cunha Ferreira L., Tienne L.G.P., de Oliveira Aguiar V., da Silva M.H.P., da Mota Rocha L.F., de Fatima Vieira Marques M. Poly (methyl methacrylate)-SiC nanocomposites prepared through in situ polymerization. *Mater. Res.* 2018. Vol. 21, no. 6, art. e20180086.
- 27. Sayyah S.M., El-Shafiey Z.A., Barsoum B.N., Khaliel A.B. Infrared spectroscopic studies of poly(methyl methacrylate) doped with a new sulfur-containing ligand and its cobalt(II) complex during γ-radiolysis. *Appl. Polym. Sci.* 2003. Vol. 91. no. 3. P. 1937–1950.
- Hussain A. Al-Jobouri, Nasreen R. Jber, Abbas H. Al-Shukrawi and Mazin K. Hamid, Physiochemical properties of crystalline etch products for CR-39 track detector after αparticles irradiation. *Adv. Appl. Sci. Res.* 2013. Vol. 4, no. 4. P. 501–507.
- 29. Zaki M.F., Elshaer Y.H., Taha D.H., Studying the Structural, Optical, Chemical and Electrochemical Etching Changes of CR-39 for Dosimetric Applications. *Radiat. Protect. Dosim.* 2017. P. 1–8.
- Jain R.K., Kumar A., Chakraborty R.N., Singh B.K., FTIR spectra of UV induced CR-39 Plastic Detector. *Proc. DAE-BRNS Symp. Nucl. Phys.* 2016. Vol. 61. P. 1006–1007.
- Yamauchi T., Nakai H., Somaki Y., Oda K., Formation of CO<sub>2</sub> gas and OH groups in CR-39 plastics due to gamma-ray and ions irradiation. *Radiat. Meas.* 2003. Vol. 36 (1–6). P. 99–103.
- 32. Filatov Yu.D. Polishing of aluminosilicate materials with tools with bound polishing powder. *Sverkhtverdye Mater.* 2001. No. 3. P. 36–49.
- Filatov Yu.D., Sidorko V.I., Boyarintsev A.Y., Kovalev S.V., Kovalev V.A. Transfer energy in the interaction of an optical surface with a polishing disperse system. *J. Superhard Mater*. 2022. Vol. 44, no. 2. P. 117–126.
- 34. Filatov Yu.D. Relationship between the transfer coefficients and transfer energy during the polishing of nonmetallic materials. *J. Superhard Mater.* 2022. Vol. 44, no. 3. P. 226–228.
- Du M., Martinez-Martinez L.A., Ribeiro R.F., Hu Z., Menon V., Yuen-Zhou J. Theory for polariton-assisted remote energy transfer. *Chem. Sci.* 2018. Vol. 9. P. 6659–6669.

- Dovzhenko D., Lednev M., Mochalov K., Vaskan I., Rakovich Yu., Nabiev I. Polaritonassisted manipulation of energy relaxation pathways: donor-acceptor role reversal in a tuneable microcavity. *Chem. Sci.* 2021. Vol. 12. P. 12794–12805.
- 37. Nabiev I., Strong light-matter coupling for optical switching through the fluorescence and FRET control. *PhysBioSymp* 2019. *J. Phys.: Conf. Ser.* 2021. Vol. 2058, art. 012001.
- 38. Filatov Yu.D., Sidorko V.I., Boyarintsev A.Y., Kovalev S.V., Kovalev V.A. Performance efficiency of the polishing of polymer optical materials. *J. Superhard Mater.* 2022. Vol. 44, no 5. P. 358–367.
- 39. Filatov Yu. D., Sidorko V.I., Sokhan' S.V., Kovalev S.V., Boyarintsev A.Y., Kovalev V.A., Yurchyshyn O.Ya. Roughness of polished surfaces of optoelectronic components made of polymeric optical materials. *J. Superhard Mater.* 2023. Vol. 45, no 1. P. 54–64.
- 40. Юхновський І.Р. Основи квантової механіки: Навч. посібник. Київ: Либідь, 2002. 392 с.
- Эйринг Г., Лин С.Г., Лин С.М. Основы химической кинетики: Пер. с англ. Москва: Мир, 1983. 528 с.
- 42. Filatov Yu.D., Sidorko V.I. Statistical approach to wear of nonmetallic workpiece surfaces in polishing. *Sverkhtverdye Materialy*. 2005. no. 1. P. 58–66.
- 43. Filatov Yu. D., Sidorko V.I., Kovalev S.V., Boyarintsev A.Y., Kovalev V.A. Yurchyshyn O.Ya. Interaction of sludge particles and wear particles of polishing powder in the process of polishing of polymeric optical materials. *J. Superhard Mater.* 2023. Vol. 45, no 3. P. 199– 207.
- 44. Filatov Yu.D., Rogov V.V. Features of a glass-polishing process using a tool with bonded polishing powder. *Opt. Spectrosc.* 1993. Vol. 74, no. 6. P. 727–730.
- 45. Кац Е.И. Силы Ван-дер-Ваальса, Казимира и Лифшица в мягкой материи. УФН. 2015.
   Т. 185, № 9. С. 964–969.
- 46. Дерягин Б.В., Абрикосова И.И., Лифшиц Е.М. Молекулярное притяжение конденсированных тел. *VФH*. 2015. Т. 185, № 9. С. 981–1001.
- 47. Filatov Yu.D., Sidorko V.I., Boyarintsev A.Y., Kovalev S.V., Kovalev V.A. Effect of the dielectric characteristics of a treated material, a polishing powder, and a disperse system on the energy of their interaction in the polishing of optical surfaces. *J. Superhard Mater.* 2022. Vol. 44, no. 4. P. 276–284.
- 48. Filatov Y.D. Mechanism of surface microrelief formation during glass treatment. Sov. J. Superhard Mater. (Sverkchtverdye Materialy). 1991, no. 5. P. 61–65.
- 49. Filatov Yu.D. New patterns of polishing surfaces of parts made of nonmetallic materials. *J. Superhard Mater.* 2023. Vol. 45, no 2. P. 140–149.

Надійшла до редакції 08.09.22

Після доопрацювання 28.10.22

Прийнята до опублікування 03.11.22