IWM

Fraunhofer Institut Werkstoffmechanik

Jahresbericht 2008

Warum kann man Diamant polieren? Die Lösung eines alten Rätsels

Leistungsbereich
Physikalische Werkstoffmodellierung

Prof. Dr. Michael Moseler
79108 Freiburg
Telefon +49 761 5142-332
michael.moseler@iwm.fraunhofer.de

Mit physikalischen Modellen, numerischen Methoden und der Quantenmechanik wird das Werkstoffverhalten modelliert und vorhergesagt. Materialstrukturen und -funktionen werden optimiert. Einflüsse von Defekten im atomaren Maßstab auf das Materialverhalten im Großen lassen sich aufdecken und dazu nutzen, in gezielter Weise Stoffe zu kombinieren und technische Systeme zu verbessern.

Leistungsbereich
Physikalische Werkstoffmodellierung

Prof. Dr. Michael Moseler
michael.moseler@iwm.fraunhofer.de

Warum kann man Diamant polieren? Die Lösung eines alten Rätsels

Nicht erst seit Marilyn Monroes Erfolg »Diamonds are a girls best friend« sind Diamanten der Inbegriff von Perfektion. Auch viele technische Anwendungen verlassen sich auf die Eigenschaften von Diamant. Obwohl in Europa und Indien bereits seit Jahrhunderten Diamanten kunstvoll geschliffen werden, ist immer noch unklar, wie aus den wenig ansehnlichen Rohdiamanten funkelnde Brillanten werden.

Vorgehensweise

Die Technik ist seit Jahrhunderten unverändert: In eine Stahlscheibe, die sog. »Scaife«, wird Diamantpulver eingelassen. Diese Scheibe wird dann in schnelle Rotation versetzt und der Rohdiamant darauf gepresst – Diamant poliert also Diamant. Die Kristalloberflächen lassen sich in bestimmte Richtungen leicht und in andere nur schwer polieren: weiche beziehungsweise harte Richtungen. Polieren in harte Richtungen führt zum Herausbrechen von Diamantsplittern und damit einer schlechten Oberflächenqualität. Der Diamantschleifer erkennt dies an einem unangenehmen Quietschen der Apparatur.

Ergebnisse

Am Fraunhofer IWM konnte dieser Prozess nun durch atomistische Simulationen erklärt werden. Durch eine eigens entwickelte Beschreibung der Wechselwirkung von Kohlestoffatomen wurde zum ersten Mal gezeigt, dass zwei reibende Diamantoberflächen in der Reibebene eine Zone amorphen Kohlenstoffs ausbilden. Die Dicke dieser Zone hängt von den Randbedingungen ab – dem zwischen den Oberflächen herrschenden Druck, der Reibgeschwindigkeit und der Ausrichtung der Oberflächen gegeneinander. Hier ist die Erklärung für die Anisotropie des Polierens zu finden: Kristallographische Richtungen, die zu einer dicken amorphen Schicht führen, stimmen mit den weichen Richtungen überein. Ergibt sich hingegen nur eine dünne amorphe Schicht, so handelt es sich um harte Richtungen (Abbildung 1). Nun stellt sich die Frage, wie das abgeriebene Material von der Oberfläche entfernt wird. Der dahinterstehende Mechanismus ist ein Ätzprozess, wobei als Ätzgas der natürliche Sauerstoff in der Luft dient. Werden die beiden Reibpartner voneinander entfernt, so enthält die oberste Schicht viele Kohlenstoffketten. Diese sind aber instabil gegen Oxidation durch Sauerstoff. Das Edukt dieses Prozesses, Kohlendioxid, ist flüchtig und muss daher nicht aufwändig entfernt werden (siehe Abbildung 2). Mit Hilfe von quantenchemischen Methoden konnte am Fraunhofer IWM die Energiebarriere für die Oxidation dieser Kettenmoleküle bestimmt werden. Diese ist so niedrig, dass die Oxidation bereits bei Raumtemperatur abläuft. Damit kann der Prozess des Polierens von Diamant zusammengefasst werden: Durch den Reibkontakt zweier Diamanten entsteht auf deren Oberfläche eine nanometerdünne amorphe Schicht, welche im Weiteren durch den Luftsauerstoff angeätzt und wegoxidiert wird. Durch wiederholte Reibkontakte kann so der Diamant mit einem Abtrag von etwa einer Atomlage pro Kontakt poliert werden.

Stefan Moser, Lars Pastewka

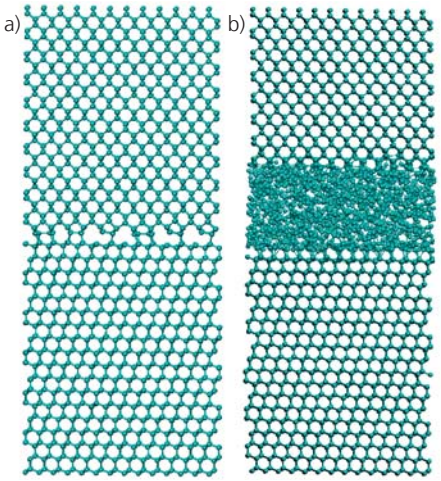

Abb. 1
Die weiche (100)-Oberfläche (oben) wird gegen die harte (111)-Oberfläche gerieben (unten). a) zeigt den Ausgangszustand und b) den stationären Zustand mit einer amorphen Zone zwischen den Reibpartnern. Hierbei ist zu erkennen, dass die gesamte Amorphisierung in der weichen Oberfläche stattfindet.

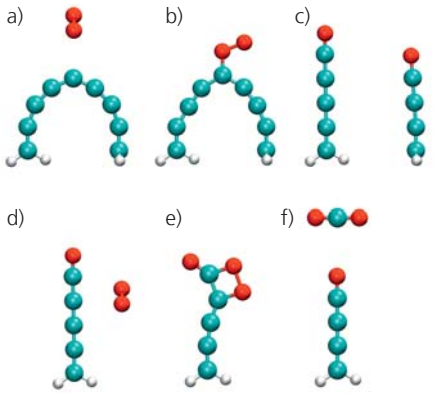

Abb. 2
Vorgeschlagener Reaktionsmechanismus für die Oxidation von Kohlenstoffketten. (a) Der Sauerstoff bindet an die Kette (b) und führt schließlich zu ihrer Aufspaltung (c). Die einzelne Kette mit einem Sauerstoff (d) wird weiter oxidiert (e) und führt schließlich zur Abspaltung eines CO_2.