

УДК 621.928.4; 621.921.1:621.922.34

**Н. В. Новиков**, академик НАН Украины; **Г. А. Петасюк**, канд. техн. наук;**Г. П. Богатырева**, докт. техн. наук*Институт сверхтвердых материалов им. В. Н. Бакуля НАН Украины,  
г. Киев, Украина***КОМПЬЮТЕРНО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ ДИАГНОСТИКА УДЕЛЬНОЙ  
ПОВЕРХНОСТИ ПОРОШКОВ СВЕРХТВЕРДЫХ МАТЕРИАЛОВ**

*New method of determination of outer specific surface of superhard material powders has been presented. The method is based on 3D-simulation methodology with applying of affinity space mapping mathematics. The results of this method approbation on grind and micron powders of DSTU 3292-95 standard have been presented.*

**Введение**

Удельная поверхность является одним из основных атрибутов качества порошков сверхтвердых материалов (синтетического алмаза, кубического нитрида бора и др.). В зависимости от типа измерений, положенных в основу процедур определения удельной поверхности, используемые для этой цели методы можно разделить на три группы: методы физических измерений, методы геометрических измерений и методы математических моделей. Методы первой группы предполагают проведение измерений определенных физических величин с последующим расчетом по ним площади поверхности [1, 2]. Методы геометрических измерений базируются на допущении об однотипности и правильности формы частиц порошка. Их суть сводится к определению тем или иным способом характерного линейного размера частиц порошка и последующего расчета с его использованием площади поверхности и объема совокупности частиц. Методы третьей группы предусматривают использование методологии математического моделирования. Из этих трех групп наибольшей точностью отличаются методы первой группы. Однако их практическое применение весьма трудоемко.

Методы, базирующиеся на геометрических измерениях, предполагают возможность аналитического представления площади поверхности и объема зерен порошка. Показатель удельной поверхности вычисляется по зависимости, представляющей собой отношение площади поверхности определенного представительного количества частиц к их общей массе. В случае, когда порошок состоит из однородных по форме и одинаковых по геометрическим размерам частиц, такое отношение имеет вид [1,3]:

$$F_{уд.} = \frac{Q}{\rho \cdot L},$$

где  $L$  – характерный размер частиц порошка [1, 4];  $\rho$  – удельный вес материала;  $Q = \alpha_F / \alpha_V$  – параметр формы частицы,  $\alpha_F, \alpha_V$  – коэффициенты пропорциональности в выражениях для определения полной поверхности частицы ( $F$ ) и ее объема ( $V$ ):  $F = \alpha_F \cdot L^2$ ;  $V = \alpha_V \cdot L^3$ .

Для случая однородного по форме частиц порошка, состоящего из определенного количества ( $B$ ) фракций, в пределах которых характерный размер остается постоянным, а показатели зернового состава  $\beta_i$  ( $i=1,2, \dots, B$ ) заданы количеством зерен во фракциях, аналитическое выражение для расчета удельной поверхности получено в виде [1, 4]:

$$F_{уд.} = \frac{\alpha_F}{\alpha_V} \cdot \frac{\sum_{i=1}^B \beta_i \cdot L_i^2}{\sum_{i=1}^B \beta_i \cdot L_i^3} \quad (1)$$

### Постановка задачи исследования

В настоящей работе предлагается новый метод определения внешней удельной поверхности порошков сверхтвердых материалов. Он основывается на методологии геометрических измерений. Исходными данными для его реализации служат результаты диагностики размерных и морфологических (в совокупности морфометрических) характеристик порошка, в частности, таких как площадь, периметр, максимальный и минимальный диаметры проекции зерна, его высота. Процедура определения показателей указанных характеристик в настоящее время автоматизирована и осуществляется с помощью современных средств компьютерно-цифровой обработки изображений. Однако способ получения исходных данных в предлагаемом методе не является лимитирующим фактором.

Сущность метода сводится к 3D- моделированию зерна порошка и последующему численному определению площади его поверхности и объема. Полученная таким образом 3D-модель представляет собой пространственное эллипсоидоподобное тело Т (рисунок 1, а), образованное

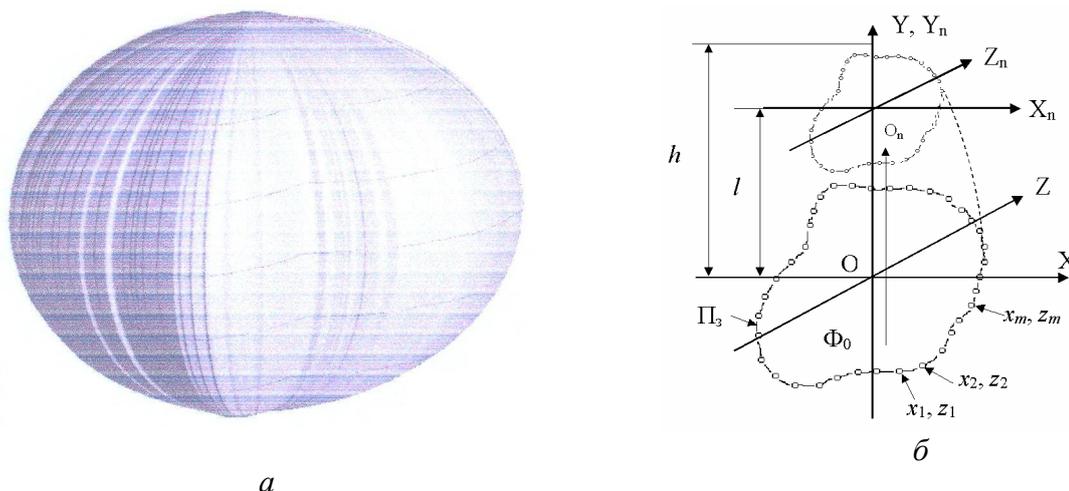


Рис. 1. 3D-модель зерна (а) и схема ее образования (б).

однопараметрическим отображением замкнутой плоской кривой, называемой прообразом. Фактическим прообразом этого отображения был контур изображения зерна  $\Pi_3$  (рисунок 1, б). В процессе выбора подобного геометрического аналога зерна исходили из того, что эллипсоид является его наиболее адекватной, идеализированной пространственной формой [5]. Плоскую фигуру, образованную замкнутой кривой  $\Pi_3$ , обозначим  $\Phi_0$ .

Теоретические основы конструирования поверхностей методом отображения аффинного пространства и используемый для этого математический аппарат описаны в работе [6]. Применительно к решаемой задаче такое отображение включает плоскую гомотетию и параллельный перенос. Аффинным параметром первого преобразования является коэффициент гомотетии  $g$ , второго - длина вектора переноса  $l$ . Оба эти преобразования осуществляются относительно репера  $X, Y, Z$  (рисунок 1, б), причем параллельный перенос происходит в направлении, составляющем с осями  $X_n, Y_n, Z_n$  углы  $\pi/2, 0$  и  $\pi/2$  соответственно.

Гомотетия и перенос происходят одновременно. В качестве независимого параметра принимается длина вектора переноса  $l$ , а коэффициент гомотетии функционально связывает-

ся с ней. Плоскость, в которой лежит изображение зерна, совмещается с плоскостью  $Y=0$  (рисунок 1, б). Поскольку аналитическое описание изображения контура зерна затруднительно, то прообраз задается дискретно, в виде набора пар чисел, являющихся  $x, z$  координатами фиксированного количества его точек. Процедура оцифровки контура изображения осуществлялась с использованием программы WINDIG.

Для получения в аналитическом виде взаимосвязи аффинных параметров поступаем следующим образом. Предполагаем, что траекторией переноса каждой из  $M$  дискретных точек прообраза  $(x_m, z_m)$ ,  $(m=1,2,3,\dots,M)$  является эллипс с полуосями:  $h$  в направлении оси  $Y$ , общей для всех точек прообраза, и  $a_m = \sqrt{z_m^2 + x_m^2}$  в плоскости  $Y=0$ . Уравнение такого эллипса, проходящего через дискретную точку с номером  $m$ , записывается в виде:

$$(x_m / a_m)^2 + (y_m / h)^2 = 1. \quad (2)$$

Выражение (2) представляет собой  $M$  уравнений в каждой из систем координат  $X_m, Y_m$ , полученных поворотом системы  $X_1, Y_1$  на угол  $\alpha = \arctg(z_m/x_m)$ . Искомую связь между аффинными параметрами получим, задаваясь в (2) длиной вектора переноса  $l$ :

$$(x_{ml} / a_m)^2 + (l / h)^2 = 1. \quad (3)$$

Коэффициент гомотетии представляет собой отношение  $x_{ml}/a_m$ . Определяя  $x_{ml}$  из (3) и составляя такое отношение, после упрощения получаем:

$$g = (\sqrt{h^2 - l^2}) / h. \quad (4)$$

Анализ выражения (4) показывает, что в его правую часть входят только  $l$  и  $h$ , т. е. коэффициент гомотетии  $g$  не зависит от координат  $(x_m, z_m)$ , контура изображения зерна. С учетом этого, а также некоторых допущений, которые будут оговорены ниже, процедура оцифровки осуществляется только для визуализации принятого геометрического аналога зерна. При вычислении же объема и площади поверхности зерна, которое проводится с использованием имеющейся информации по площади и периметру его проекции, в этом нет необходимости.

### Алгоритм вычисления объема и площади поверхности зерен

При численном решении задачи вычисления суммарных объема и площади поверхности зерен высота тела  $T$  отождествляется с высотой зерна. Принимая во внимание симметрию тела  $T$  относительно плоскости  $Y=0$ , необходимые вычисления достаточно провести только для одной из двух его частей, например, для верхней. Алгоритм численного решения такой задачи сводится к следующему. Разобьем полуось  $OY$  точками  $y_0=0, y_1, y_2, \dots, y_{N-1}, y_N=h$  ( $N$  – число точек разбиения) на ряд отрезков. Длину  $\Delta_n$  каждого из таких отрезков определяем как разность  $y_{n+1} - y_n$ . Эта длина должна быть постоянной для каждого из  $M$  эллипсов (2) и переменной при переходе от  $y_n$  к  $y_{n+1}$  ( $n=1, 2, \dots, N$ ). Критерием выбора значения  $\Delta_n$ , удовлетворяющего второе из этих условий, является требование  $(x_{m,n} - x_{m,n+1}) \leq \epsilon$ . Данное требование может быть трансформировано в зависимость  $y_{n+1} = f(y_n, \epsilon)$ . Для этого следует принять во внимание следующие обстоятельства. Обе точки  $x_{m,n}$  и  $x_{m,n+1}$  являются точками эллипса с полуосями  $a_m$  и  $h$ . Полуось  $h$  является общей для всех эллипсов. Поэтому если условие  $(x_{m,n} - x_{m,n+1}) \leq \epsilon$  выполняется для эллипса, проходящего через точку с минимальным значением  $a_m$ , то оно будет выполняться и для всех остальных эллипсов, проходящих через точки контура  $\Pi_3$ . Обозначим это минимальное значение  $a_m$  через  $a$  и будем выполнять указанное условие именно для эллипса с этой полуосью. Поскольку минимальный диаметр изображения зерна  $d_{min}$  известен, то можно принять  $a = d_{min}/2$ . С учетом вышеизложенного:

$$x_n = a \cdot \sqrt{1 - (y_n / h)^2}; \quad x_{n+1} = a \cdot \sqrt{1 - (y_{n+1} / h)^2}.$$

Составляя разность  $x_n - x_{n+1}$  и приравнивая ее  $\varepsilon$  (наиболее неблагоприятный крайний случай), после соответствующих преобразований получаем зависимость  $y_{n+1} = f(y_n)$  в виде:

$$\Delta y_{n+1} = y_n - \sqrt{h^2 - \left( \sqrt{1 - \frac{y_n^2}{h^2}} - \frac{h}{a} \varepsilon \right)^2}.$$

Плоскостями, параллельными плоскости  $Y=0$  и проходящими через точки  $y_0, y_1, y_2, \dots, y_{N-1}, y_N$ , разделим рассматриваемую часть тела  $T$  на ряд сечений. Каждое сечение будет представлять собой плоскую фигуру, аналогичную фигуре  $\Phi_0$ , но уменьшенную на коэффициент гомотетии. Каждые два следующих друг за другом сечения образуют пространственное тело - эллипсоидоподобный пояс, верхнее и нижнее основания которого повторяют форму фигуры  $\Phi_0$ . Приближенное определение объема и боковой поверхности такого пояса будем проводить, заменяя его усеченным коническим телом с площадями и периметрами нижнего и верхнего основания  $s_{i,n} = S_0 \cdot g^2(y_n)$ ,  $l_{i,n} = L_0 \cdot g(y_n)$  и  $s_{i,n+1} = S_0 \cdot g^2(y_{n+1})$ ,  $l_{i,n+1} = L_0 \cdot g(y_{n+1})$  соответственно и высотой  $\Delta_n = y_{n+1} - y_n$ . Здесь и ниже индекс  $i$  указывает на номер анализируемого зерна. Объем рассматриваемого конического тела выразится формулой:

$$v_{i,n} = S_0 \cdot \Delta y_n \cdot [g^2(y_n) + g^2(y_{n+1}) + g(y_n) \cdot g(y_{n+1})] / 3.$$

При вычислении площади боковой поверхности эллипсоидоподобного пояса будем исходить из того, что образующими заменяющего его усеченного конического тела являются дуги эллипсов. Надлежащим выбором  $\varepsilon$  погрешность такой замены можно свести к минимуму. Длину  $t_n^{d_{\max}}$ ,  $t_n^{d_{\min}}$  дуг эллипсов с полуосями  $d_{\max}/2, h$  и  $d_{\min}/2, h$  соответственно как образующих усеченных некруговых прямых конусов определяли численно, используя представление эллиптических интегралов 2-го рода  $E(\varphi_{n+1}^{d_{\max}}, k)$ ,  $E(\varphi_n^{d_{\max}}, k)$  в виде бесконечных рядов [7]. В частности,  $t_n^{d_{\max}}$  может быть представлено в виде:

$$t_n^{d_{\max}} = E(\varphi_{n+1}^{d_{\max}}, k) - E(\varphi_n^{d_{\max}}, k), \quad (5) \text{ где}$$

$$\varphi_{n+1}^{d_{\max}} = \arctg \frac{y_{n+1}}{d_{\max} \cdot \sqrt{1 - \frac{y_{n+1}^2}{h^2}}}, \quad \varphi_n^{d_{\max}} = \arctg \frac{y_n}{d_{\max} \cdot \sqrt{1 - \frac{y_n^2}{h^2}}}; \quad k = \frac{\sqrt{d_{\max}^2 - h^2}}{d_{\max}}.$$

Формулы для  $t_n^{d_{\min}}$ ,  $\varphi_{n+1}^{d_{\min}}$  и  $\varphi_n^{d_{\min}}$  получаются из (5) заменой  $d_{\max}$  на  $d_{\min}$ .

При малых  $\Delta_n$  можно принять  $t_n^{d_{\max}} \approx t_n^{d_{\min}}$ . Поэтому в качестве приведенной образующей эллипсоидоподобных поясов будем принимать среднее арифметическое величин  $t_n^{d_{\max}}$  и  $t_n^{d_{\min}}$ . Тогда выражение для площади боковой поверхности эллипсоидоподобного пояса можно записать в виде:

$$s_{i,n} = \frac{t_n^{d_{\max}} + t_n^{d_{\min}}}{2} \cdot \frac{g(y_n) + g(y_{n+1})}{2} \cdot L_0.$$

Площадь поверхности и объем одного зерна выражаются зависимостями:

$$S_i = 2 \cdot \sum_{n=1}^N s_{i,n}; \quad V_i = 2 \cdot \sum_{n=1}^N v_{i,n},$$

а удельная поверхность порошка в целом может быть представлена формулой:

$$F_{y\delta} = \frac{1 \sum_{i=1}^I S_i}{\rho \sum_{i=1}^I V_i} = \frac{\sum_{i=1}^I \sum_{n=1}^N s_i}{\sum_{i=1}^I \sum_{n=1}^N v_i}, \quad (6)$$

где  $I$  – число зерен в пробе,  $N$  – количество эллипсоидоподобных поясов. Формула (6) позволяет расчетным путем определять внешнюю удельную поверхность порошков сверхтвердых материалов. Для ее практического применения создано компьютерно-программное обеспечение.

### Апробация метода

Апробация разработанного метода диагностики внешней удельной поверхности проводилась на образцах стандартных по ДСТУ 3292-95 шлиф- и микропорошков синтетического алмаза. В качестве эталонного (контрольного) значения удельной поверхности использовались данные, полученные на приборе ДУП-2 [8]. Этот метод дает наиболее точное значение внешней удельной поверхности.

Анализ морфометрических характеристик порошков, взятых для апробации, проводился на видеокомпьютерном комплексе DiaInspect.OSM. В число характеристик порошка, диагностируемых этим прибором, входит и высота зерен. Результаты расчета показателя внешней удельной поверхности с помощью разработанного метода приведены в таблице 1. Там же содержатся значения показателя внешней удельной поверхности, вычисленные нами согласно методикам работ [1, 4], формула (1) при  $Q=6$  по тем же исходным данным, а также ее контрольные значения.

Таблица 1. Значения ( $F_{y\delta}$ , м<sup>2</sup>/кг) и относительная погрешность ( $\delta$ , %) определения удельной поверхности разработанным и другими методами

Марка, зернистость (мкм)	$F_{y\delta}$ (эталон)	Методика работы [4]		Методика работы [1]		Разработанный метод	
		$F_{y\delta}$	$\delta$	$F_{y\delta}$	$\delta$	$F_{y\delta}$	$\delta$
АСМ 60/40	110,00	29,52	73,16	40,18	63,47	123,84	12,54
АСМ 28/20	260,00	57,01	66,53	78,32	69,88	249,94	3,87
АС4 160/125	37,00	5,39	80,00	9,22	75,00	36,18	2,22
АС6 63/50	78,00	16,62	78,69	22,04	71,74	69,49	10,90
АС15 100/80	50,00	11,68	81,46	15,14	75,97	48,22	3,56
АС32 400/315	12,00	3,42	71,50	4,09	66,00	11,46	4,67
АС20 315/250	–	4,14	–	5,23	–	19,38	–
АС100 315/250	–	4,77	–	5,53	–	15,09	–
АС50 400/315	–	3,39	–	4,17	–	10,43	–

Как показывает сравнительный анализ, погрешность определения удельной поверхности исследуемых порошков синтетического алмаза находится в интервале 2-13%. Такая точность определения в рассматриваемой области квалифицируется как достаточно высокая. Проводилось также определение разработанным методом удельной поверхности стандартных шлифпорошков некоторых марок и зернистостей без сравнения с данными, получаемыми на приборе ДУП-2 по причине отсутствия таковых. Результаты определения согласуются с общей тенденцией изменения [8] показателей внешней удельной поверхности порошков синтетического алмаза как при переходе от одной зернистости к другой в пределах одной марки, так и от одной марки к другой в пределах одной и той же зернистости.

### **Выводы**

Разработанный новый метод дает наиболее точные значения внешней удельной поверхности по сравнению с другими известными методами, основанными на концепции геометрических измерений. Поэтому он может быть использован для высокодостоверной диагностики внешней удельной поверхности порошков сверхтвердых материалов. Особая эффективность этого метода достигается в сочетании с использованием современных технических и компьютерно-программных средств автоматизированной диагностики размерных и геометрических характеристик порошков сверхтвердых материалов, основанных на цифровой обработке изображений, а также разработанных специальных компьютерных программ для автоматизации предусматриваемых вычислительных алгоритмов.

### **Литература**

1. Грег С., Синг К. Адсорбция, удельная поверхность, пористость / Перевод с английского под ред. К. В. Чмутова.– М.: Мир, 1970.– 407 с.
2. Бакуль В. Н., Дерягин Б. В., Никитин Ю. И., Федосеев Д. В. и др. Удельная поверхность алмазных порошков.– Киев, Наук. думка, 1975.–14 с.
3. Циборовский Я. Основы процессов химической технологии / Перевод с польского под ред. П. Г. Романкова.– Л.: Химия, 1967.–720 с.
4. Паничкина В. В., Уварова И. В. Методы контроля дисперсности и удельной поверхности металлических порошков.–Киев: Наук. думка, 1973.– 67 с.
5. Лавриненко В. И., Шепелев А. А., Петасюк Г. А. Модели формы зерен СТМ // Сверхтв. материалы.–1994.–№ 5/6.–С. 18–21.
6. Перепелица Б. А. Отображение аффинного пространства в теории формообразования поверхностей резанием.–Харьков: Высшая школа, 1981.–107 с.
7. Двайт Г. Б. Таблицы интегралов и другие математические формулы / Перевод с английского под ред. К. А. Семендяева.– М.: Наука, 1977.–224 с.
8. Никитин Ю. И. Технология изготовления и контроль качества алмазных порошков.– Киев: Наук. думка, 1984.– 264 с.

*Поступила 10.04.2006 г.*