

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

ІНСТИТУТ ПРОБЛЕМ МАТЕРІАЛОЗНАВСТВА Ім. І.М. ФРАНЦЕВИЧА

На правах рукопису

БЕЛІК Василь Денісович

РОЗРОБКА СТАТИСТИЧНИХ МЕТОДІВ АНАЛІЗА
ПОРОШКОВИХ СЕРЕДОВИЩ

Спеціальність - 05.16.06 - порошкова металургія і
композиційні матеріали

А в т о р е ф е р а т
дисертації на здобуття вченого ступеня
кандидата технічних наук

Київ - 1995

ст. 102
620.168

- АВ 33.59

Дисертація с рукописом

ЛННБ України ім.В.Стефаніка



00761603 (N)

Робота викона в Інституті проблем матеріалознавства НАН України І Інституті проблем матеріалознавства НАН України

Науковий керівник: доктор технічних наук
професор Б.А.Уряжов

Офіційні опоненти: доктор хімічних наук
М.М.Хворов
кандидат технічних наук
М.М.Крючков

Провідна організація: Одеський державний політехнічний університет

Захист відбудеться "25" грудня 1995 р. на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 01.88.01 при Інституті проблем матеріалознавства НАН України за адресою: 252180, м.Київ, вул. Крижанівського, буд. 3.

З дисертацією можна ознайомитися у бібліотеці Інститута проблем матеріалознавства НАН України.

Автореферат розісланий "20" листопада 1995 р.

Вчений секретар
Спеціалізованої вченої ради
доктор технічних наук

Р.В.Мінакова

ЛННБ ім. В. Стефаніка
АН України

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Останнім часом спостерігається все більш широкий розвиток енергозберігаючих технологій, обумовлений скороченням видобутку сировини. Одним з таких найбільш перспективних технологій є порошкова металургія, яка дозволяє вести безвідходне виробництво, зберігати енергію та матеріали, рівно скорочувати трудові затрати за рахунок зменшення кількості технологічних операцій та автоматизації технологічних процесів.

Як відомо, виробництво методами порошкової металургії можна представити у вигляді двох технологічних процесів – формування порошку з метою надання йому певної форми, розміру, щільності та подальшого спікання одержаної заготовки.

Тому, для розробки ефективних технологій, необхідно мати фізично обґрунтовану модель порошкових середовищ. Через відсутність подібної моделі навіть для такого ідеального середовища, як сухий пісок, досі немає адекватних визначаючих рівнянь.

Ціль даної роботи полягає в побудові моделі порошкових середовищ на основі застосування методів статистичної фізики. При цьому планувалось послідовне розв'язання задачі. Розпочавши із статистики, з опису внутрішньої геометрії порошків; розглянути далі перехід порошкових середовищ від статичної до динаміки.

Задачі дослідження включали:

- знаходження координатного числа порошку /середнього числа контактів між зернами / та функції розподілу його значень між частинами ;
- одержання рівнянь для функції розподілу напруг від зосередженого навантаження, знаходження на основі цього сили взаємодії між зернами порошку та розгляд процесу переходу порошкових середовищ із статичної в динаміку;
- розробка нових методик, які дозволяють застосувати одержані результати до реальних порошків.

Новизна роботи полягає в тому, що було введено поняття контакту між зернами порошку таким чином, що стало можливим застосування апарату статфізики для опису його внутрішньої геометрії. Були розроблені також дві методики, які дозволяють досліджувати реальні порошки: методика визначення зернового складу

полідисперсних мікропорошків та методика визначення координаційного числа порошку.

Наукова та практична цінність роботи. Результати досліджень можуть бути корисними при описуванні внутрішньої геометрії порошкових середовищ. Потреба у цьому виникає при моделюванні морфологічних, фізико-механічних властивостей спечених матеріалів. Одержані співвідношення для числа контактів зерен порошку із стінкою, кута природного укусу мають істотне значення для створення нових методик дослідження фізико-механічних властивостей порошку, форми і морфології поверхні його зерен. Методика визначення зернового складу полідисперсних мікропорошків дозволить досліджувати реальні порошки, їх процес подрібнення та активації.

Основні наукові результати, які винесені на захист:

- однопараметричність локальної щільності порошків; її зв'язок із координаційним числом порошку та із середньоквадратичним відхиленням його значень;
- максимально можливі значення щільності бінарної суміші куль;
- опис структури порошкових середовищ в допомозю локальної щільності;
- методики для знаходження координаційного числа порошків та визначення зернового складу мікропорошків;
- формула кута природного укусу для набору однорозмірних куль;
- якісний опис виникнення блочного руху зерен порошку на початковому стані його деформації.

Апробація роботи. Основні результати дисертації повідомлялись і обговорювались на XII Всесоюзній конференції молодих вчених /Київ, 1987р./, на XV Міжнародній конференції молодих вчених /Київ, 1990р./, на Всесоюзному семінарі "Реологічні моделі та процеси деформування пористих порошкових та композиційних матеріалів" /Одеса, 1991р./.

Об'єм роботи. Дисертація складається із вступу, чотирьох розділів, висновку та бібліографії / найменування/. Робота має сторінок машинописного тексту, малюнків, таблиць.

І ОСНОВНІ ПОЛОЖЕННЯ ДИСЕРТАЦІЇ

У вступі дана загальна характеристика роботи, яка включає обґрунтування актуальності теми, виклад нових результатів та перелік основних наукових положень, які виносяться на захист.

Перший розділ містить огляд робіт, присвячених опису порошкових середовищ. Почавши з робіт Кулона, порошки розглядалися як суцільні середовища. Ці ідеї були продовжені в працях Треска, Сен-Венана і в теперішній час знайшли широкий розвиток і застосування в інженерних розрахунках. Неясність фізичного змісту параметрів, які використовуються в моделях порошкових середовищ, являється недоліком усіх феноменологічних теорій.

Це являється стимулом для розвитку моделей порошків, які ґрунтуються на описуванні їх структури. Перші роботи в цьому напрямку були в основному експериментальними. Значним імпульсом використання методів статистики для описування випадкових упаковок послужила праця Бернала, яка була опублікована в 1959 р. В цій роботі рідину пропонувалось розглядати як набір випадково щільно упакованих куль. Використання методів статистики виявилось ефективним при описанні швидких течій порошку. У випадку повільних течій, в яких основну роль грає тертя Кулона, не було одержано помітних результатів.

Далі при постановці задачі відмічається, що використання звичайних функцій розподілу частинок не дозволяє знайти середнє число контактів. З їх допомогою можна одержати тільки число найближчих сусідів.

Це зумовлене тим, що порошки істотно відрізняються від інших середовищ. Між їх зернами виникають принципово нові зв'язки – контакти, які локалізуються в мікроскопічно малому об'ємі. Цей об'єм при обумовленій ідеалізації можна прийняти як завгодно малим. Відомо, що імовірність знаходження частинки в якій-небудь області пропорційна об'єму цієї області. Отже, імовірність реалізації контакту, яка обчислюється з допомогою двочасткової функції розподілу частинок, буде прямувати до нуля.

Для подолання цих труднощів пропонується при описанні порошків використовувати локальну щільність порошку / $\rho_{\text{л}} /$,

яка вводиться таким чином. Візьмемо якусь пробну частинку і проведемо навколо неї на відстані r від поверхні переріз $S(r)$ /мал.І/. Ту частину площі S , яка пересікає тверду фазу, позначимо через $S^T(r)$. Як локальну щільність порошку приймемо відношення:

$$\eta(r) = \langle S^T(r) / S(r) \rangle \quad / 1 /$$

яке збігається при $r \rightarrow \infty$ в щільність порошку $\bar{\eta}$ /середньої по всьому об'єму /.

Єкові дужки означають середнє значення по всім частинкам порошку, які однотипні пробні. Це усереднення будемо проводити дотримуючись методу ансамблів Гіббса, колифений порошок розглядається як представник великої кількості копій порошкових середовищ, що мають однаковий зерновий склад і коефіцієнт $\bar{\eta}$. Очевидно, при $r \rightarrow 0$ ЛЦП пропорціональна координаційному числу. Тому, знайшовши $\eta(r)$, можна знайти розподіл контактів між частинками.

Другий розділ присвячений пошуку ЛЦП I II в'язку із координаційним числом порошку. Знаходження ЛЦП спочатку проводиться при $r \gg 1$. В цьому випадку $S(r) \approx 4\pi r^2$, $S^T(r) \approx 4\pi r^2 \bar{\eta}$. В той же час $S^T = N_S \cdot \langle S_c \rangle$. Тут N_S - число частинок, які перетинають $S(r)$. $\langle S_c \rangle$ - середня площа перерізу однієї частинки. Порівнюючи ці два співвідношення, одержуємо $\langle N_S \rangle = 4\pi r^2 \bar{\eta} / \langle S_c \rangle$.

Згідно / 1 /, вихилення N_S від $\langle N_S \rangle$ обумовляє відхилення $\eta(r)$ від $\bar{\eta}$. Так як частинки упаковані хаотично, то їх флуктуація $\delta N_S^2 = \langle N_S \rangle$, $\delta S^T = \sqrt{\langle N_S \rangle} \cdot \langle S_c \rangle$, використовуючи / 1 /, далі знаходимо:

$$\left| 1 - \eta(r) / \bar{\eta} \right| \approx \left(\frac{\langle S_c \rangle}{4\pi r^2 \bar{\eta}} \right)^{1/2} \quad / 2 /$$

Аналізуючи / 2 /, можна дійти висновку, що ЛЦП не залежить від типу пробної частинки: $\eta(r) = \bar{\eta} f(\lambda r)$, де λ - деякий параметр, який характеризує порошкове середовище. Згідно експериментальних даних, функція f має слідуучу структуру:

$$f = 1 - \frac{\sin \varepsilon(\lambda r)}{\lambda r} \quad /3/$$

де $\varepsilon(\lambda r)$ - невідома функція, яка буде одержана у четвертому розділі. Порівняючи /3/ з /2/, одержуємо:

$$\lambda = \left(4\pi \bar{\eta} / \langle S_c \rangle \right)^{1/2} \quad /4/$$

де $\langle S_c \rangle = \sum_{k=1}^m P_{vk} \langle S_{ck} \rangle$; P_{vk} , $\langle S_{ck} \rangle$ - об'ємна доля та середня площа перерізу k -их частинок відповідно; m - кількість типів частинок у порошку, який розглядається.

Далі перевірялась гіпотеза про однопараметричність $\eta(r)$. Для цього були використані результати машинного моделювання випадкової упаковки однорозмірних та бінарних сумішей куль при різних значеннях $\bar{\eta}$. При обчислюванні $S^T(r)$ брався до уваги внесок усіх частинок, які попадали у зону перерізу $S(r)$. Кількість таких частинок визначалась за допомогою радіальної функції розподілу куль. Обчислення були проведені згідно формул /1/, /4/; одержані значення були нанесені на діаграму $f - \lambda r$ (мал.2). Як видно з графіку на мал.2, усі точки розміщені на одній кривій, що підтверджує однопараметричність $\eta(r)$.

Далі було проведено розрахунок $\langle S_{ck} \rangle$ для найбільш простих типів частинок. Так, для кулі з радіусом ℓ переріз $\langle S_c \rangle = \frac{2}{3} \pi \ell^2$; для витягнутого еліпсоїда з напів-осями $1, \beta$

$$\langle S_c \rangle = \frac{4}{3} \pi \beta^2 \left(1 + \frac{\beta^2}{\sqrt{1-\beta^2}} \ln \left| \frac{1+\sqrt{1-\beta^2}}{\beta} \right| \right)^{-1}$$

для прямокутних паралелепіпедів зі сторонами a, b, c середня площа перерізу $S_c = abc / (a+b+c)$. Для еліпсоїдів з різними a, b, c обчислення $\langle S_c \rangle$ було

проведено на основі машинного моделювання /мал.3/.

Після знаходження ЛЩП було одержано співвідношення для координатного числа порошку \bar{n} . Для цього $\langle S^T \rangle$ була розрахована двома методами: з допомогою ЛЩП ($S^T(r) = S(r) \cdot 2(r)$) і з допомогою геометричних міркувань

$$\langle S^T \rangle = \bar{n} \int(r)$$

де $\int(r)$ - середня площа перерізу однієї частинки, яка контактує з пробною. Далі припускається, що зерна порошку мають гладку, випуклу форму. У цьому разі при $r \rightarrow 0$ переріз $\int(r) \approx ar$, де a - деякий коефіцієнт, який залежить від розміру та форми частинок, що контактують. Порівнюючи $\langle S^T \rangle$, яке було розраховано двома методами, одержуємо:

$$\bar{n}_i = c \lambda \bar{\eta} S_{ni} / a_i \quad /5/$$

де $c = f'(0)$ - невідома константа; Індекс i - вказує тип пробної частинки; S_{ni} - площа поверхні частинки i -го типу; $a_i = \sum_{k=1}^m P_{ik} \langle a_{ik} \rangle$ де P_{ik} - ймовірність зустрінути k -у частинку, яка контактує в i -ою пробною.

При одержанні P_{ik} було взято до уваги те, що S_i^T / S_i не залежить від i . Це означає що частка вкладу k -их частинок у це співвідношення однаково для усіх m типів пробних частинок і визначається тільки кількістю k -их частинок у порошку P_k :

$$P_{ik} = P_k S_{nk} / (B_i \langle a_{ik} \rangle) ; a_i = \frac{A}{B_i} \quad /6/$$

$$A = \sum_{k=1}^m P_k S_{nk} ; B_i = \sum_{k=1}^m P_k S_{nk} / \langle a_{ik} \rangle$$

З метою перевірки співвідношення /6/, розглядається граничний випадок, коли P_{ik} можливо знайти із геометричних міркувань. Це відбувається тоді, коли невзначна кількість куль радіус яких

дорівнює одиниці N_1 знаходяться у порошковому середовищі, яке складається із N_2 кулеподібних частинок із радіусом $d \ll 1$. З геометрикоімовірносних міркувань можна дійти висновку, що у цьому разі $P_{12} \rightarrow 1$, $P_{21} \sim N_1/(N_2 d^2)$, що погоджується із /6/.

Згідно експериментальним даним, для однорозмірних, випадково упакованих куль максимально можливе значення щільності є $\bar{\eta} = 0,637$, при цьому координаційне число складає $\bar{n} = 8,84$. Підстановка цих значень у /5/, та урахува, що $\alpha = \pi \ell$, $\lambda = \sqrt{6\bar{\eta}}/\ell$, $S_n = 4\pi \ell^2$, де ℓ - радіус частинок, дає: $c = 1,78$. Рівняння для середнього числа контактів проміж однаковими кулями набуває при цьому вигляді:

$$\bar{n} = 17,4 \bar{\eta}^{3/2}$$

Порівняння цієї формули з відомими експериментальними даними дає розходження, що не перевищувало 6 %.

З геометричних міркувань виходить, що при контактї куль з радіусами ℓ_1, ℓ_2 коефіцієнт $\alpha_{12} = 2\pi \ell_1 \ell_2 / (\ell_1 + \ell_2)$. Згідно /6/, для бінарної суміші куль $\alpha_i = 2\pi \bar{\ell}^2 \ell_i / (\ell_i \bar{\ell} + \bar{\ell}^2)$, де $\bar{\ell}^n = P_1 \ell_1^n + P_2 \ell_2^n$; P_1, P_2 - кількість куль I-го та 2-го типів відповідно. При цьому:

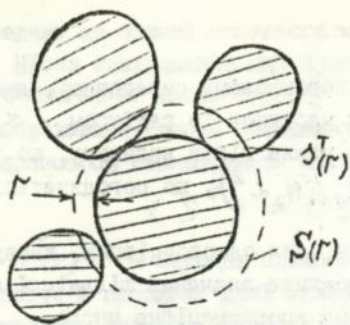
$$\bar{n}_i = 3,56 \bar{\eta} \lambda (\ell_i + \ell_i^2 \bar{\ell} / \bar{\ell}^2)$$

Це співвідношення порівнювалось з експериментальними даними, для яких при різних P_1, P_2 середнє число $\bar{n} = P_1 \bar{n}_1 + P_2 \bar{n}_2$ було постійним. Тому для зручності \bar{n}_i було зв'язано з \bar{n} :

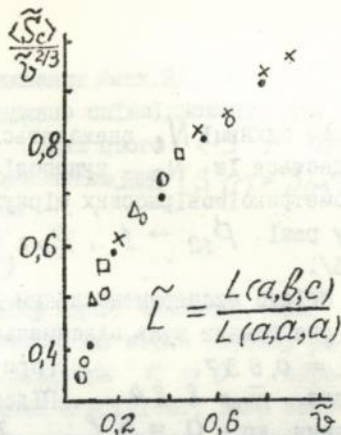
$$\bar{n}_i = \frac{1}{2} \bar{n} (\ell_i / \bar{\ell} + \ell_i^2 / \bar{\ell}^2) \quad /7/$$

Мал. 4 демонструє відповідність експериментальних даних в одержуванні за допомогою /7/ залежностей \bar{n}_1, \bar{n}_2 від P_2 при різних значеннях $d = \ell_2 / \ell_1$.

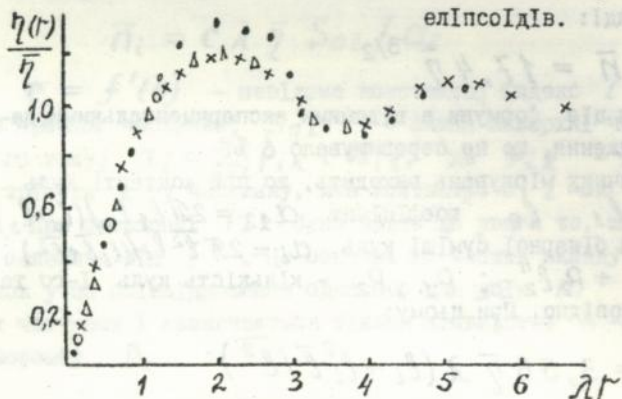
Очевидно, випадок $\ell_1 \rightarrow \infty, P_1 \rightarrow 0$ відповідає контакту порошка з плоскою поверхнею, яка його обмежує. При цьому, згідно /7/, середнє число контактів, яке приходить на одиницю



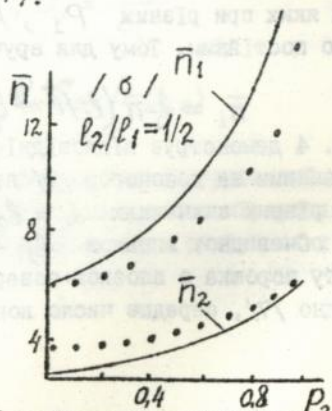
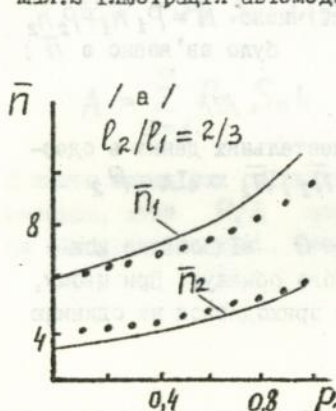
Мал.1 Введення локальної щільності порошку $\eta(r)$.



Мал.3 Залежність середньої площі перерізу від об'єму еліпсоїдів.



Мал.2 Ілюстрація автомодельності $\eta(r)$.



Мал.4 Число контактів /згідно з [7]/ у бінарній суміші куль.

поверхні $\bar{n}_{ст}$, можна виразити через середнє число контактів між зернами порошку \bar{n} :

$$\bar{n}_{ст} = \frac{\bar{n}}{2\pi\ell^2} \quad 1/8$$

Експериментальна перевірка підтверджує справедливості цього співвідношення.

Надалі розглядається порошок з зернами еліпсоїдальної форми. Для знаходження α_i спочатку знаходимо $\langle \alpha_{ik} \rangle$. При цьому використовується та обставина, що $S(0)$ є еквіпотенціальна поверхня для $f(0)$. Звідси маємо, що $P(x_i, x_k) \sim 1/\alpha_{ik}(x_i, x_k)$, де $P(x_i, x_k)$ - ймовірність реалізації контакту між i -тою та k -тою частинками у точках $x_i \in S_{ni}$, $x_k \in S_{nk}$. Враховуючи це, одержуємо:

$$\alpha_{ik} = \left(\frac{1}{S_{ni} S_{nk}} \iint \frac{dS_{ni} dS_{nk}}{\alpha_{ik}(x_i, x_k)} \right)^{-1}$$

Для розрахунку α_i у випадку еліпсоїдів обертання це співвідношення спростим, розглянувши їх контакт з площиною. При цьому будемо виходити з того, що для контактуючих куль з радіусами ℓ_i та $\ell_k \rightarrow \infty$ коефіцієнт $\alpha_{i\infty} = 2\pi\ell_i = 2\alpha_{ii}$. Використовуючи це співвідношення для витягнутих еліпсоїдів обертання в напіввосями $1, \beta$ одержано $\alpha_i = S_{ni}/\gamma$, де

$$\gamma = \frac{4\beta}{\sqrt{1-\beta^2}} \arctg \frac{\sqrt{1-\beta^2}}{\beta}$$

Враховані за допомогою цього співвідношення значення \bar{n} для набору однакових еліпсоїдів в $\beta = 1/3$ погоджуються з експериментальними даними.

У порошок, який складається з частинок кристалоподібної форми, реалізуються два типи контактів: перший - між гранню і ребром; другий - між гранню і вершиною, або між ребром та ребром. З геометричних міркувань випливає, що у першому разі $\gamma^{(1)} = \alpha^{(1)} r \ell$, а у другому - $\gamma^{(2)} = \alpha^{(2)} r^2$, де $\alpha^{(1)}, \alpha^{(2)}$ - коефіцієнти, які залежать від розміру та форми частинок, що контакту-

ють. Розкладаючи $f(\lambda r)$ в ряд Тейлора необхідно враховувати також квадратичний член по λr , а середнє число контактів \bar{n} розглядати як суму двох типів контактів:

$$\bar{n} = c_1 \bar{\eta} \lambda S_n / \rho a^{(1)} + c_2 \bar{\eta} \lambda^2 S_n / a^{(2)}$$

Враховуючи що $\lambda \sim \sqrt{\bar{\eta}} / \rho$, знаходимо:

$$\bar{n} = A \bar{\eta}^{3/2} \rho^{-2} (1 + \alpha \sqrt{\bar{\eta}}) \quad /9/$$

де коефіцієнти A, α залежать от форми та морфології поверхні зерен. У четвертому розділі подана експериментальна перевірка співвідношення /9/.

У третьому розділі ЛЦП було описано з допомогою методів статистики та одержано ряд відповідних результатів. Для вирішення цієї задачі було використана та обставина, що S^r / S означає ймовірність знаходження точки $x \in S$ в об'єму твердої фази. Цю ймовірність можна розрахувати з допомогою методів статистики. Для цього запроваджується формальне розбивання початкових частинок на як завгодно малі мікрочастинки. Можна доказати, що ймовірність зустрінути мікрочастинку в точці $x \in S$ дорівнює S^r / S .

Використання мікрочастинок дозволяє запровадити це поняття ще одним методом. Нехай $S(r)$ стягується до пробної частинки, доки r не зрівняється в розміром мікрочастинок (мал.5). При цьому козну мікрочастинку, яка опинилася між $S(r)$ і $S(0)$ можна ототожнити з наявністю контакту. Таким чином, опис внутрішньої геометрії порошку зводиться до досліджування статичних властивостей мікрочастинок.

Ймовірність знаходження порошку у тому чи іншому стану описує функція $F_N(x_1, \dots, x_N)$ - нормована на одиницю густина розподілу в $3N$ -мірному просторі x_1, x_2, \dots, x_N , де x_j - декартові координати j -ої мікрочастинки; N - загальне число мікрочастинок. Усреднення по ансамблї деякої функції $g(x_1, \dots, x_N)$ означає: $\langle g \rangle = \int_V g F dx_1, \dots, dx_N$, де V - загальний об'єм порошку.

Згідно визначення, щільність порошку $\bar{\eta}$ означає відношення об'єму твердої фази до загального об'єму системи: $\bar{\eta} = N v_0 / V$, де v_0 - об'єм одної мікрочастинки. Якщо підставити сюди

замість середньої щільності числа мікрочастинок N/V їх мікроскопічну діїну щільність, можна одержати мікроскопічний коефіцієнт упаковки $\eta^M(x) = v_0 \sum_{k=1}^m \delta(x-x_k)$, де $\delta(x)$ - дельта-функція Дірака. Усреднюючи $\eta^M(x)$ по ансамблю Гіббса, одержуємо:

$$\langle \eta^M(x) \rangle = \bar{\eta} F_1(x)$$

Оскільки $\langle \eta^M(x) \rangle \equiv \bar{\eta}$, то $F_1(x) = 1$. Усреднимо тепер $\eta^M(x)$ в околі пробної частинки.хай $|x| = r$, де r - відстань від поверхні пробної частинки. Очевидно, у цьому випадку $\langle \eta^M(r) \rangle \equiv \eta(r)$. Оскільки пробна частинка при цьому фіксована, при усередненні з допомогою F_N по координатах її мікрочастинок інтегрування не проводиться. Через те, що ці мікрочастинки жорстко зв'язані між собою, достатньо зафіксувати одну з них. Приймемо, що це N -а мікрочастинка: $x_N = 0$. Усреднення в фіксованій координаті x_N еквівалентне звичайному усередненню в наступній замінній одночастковій функції розподілу на двочастинковій.

$$\langle \eta^M(r) \rangle_{x_N=0} = \eta(r) = \bar{\eta} F_2(r) \quad /10/$$

Порівнюючи /10/ з /1/, одержуємо статистичне трактування ЛЦП:
 $f(r) = F_2(r)$.

Далі обчислюється середньоквадратичне відхилення числа контактів $\zeta(N)$. Для цього була розрахована флюктуація об'єму твердої фази δV_S^T у шарі між $S(0)$ та $S(\varepsilon)$, $\varepsilon \ll 1$:

$$\langle (\delta V_S^T)^2 \rangle = \iint_{V_S} \langle \eta^M(x) \eta^M(x') \rangle_{x_N} - \langle \eta^M(x) \rangle_{x_N} \langle \eta^M(x') \rangle_{x_N} dV dV' /11/$$

При цьому N -а мікрочастинка фіксована. Усреднюючи по ансамблї так само, як при одержуванні /10/, маємо:

$$\langle \eta^M(x) \rangle_{x_N=0} = \bar{\eta} F_2(x)$$

$$\langle \eta^M(x) \eta^M(x') \rangle_{x_N=0} = v_0 \bar{\eta} F_2(x) \delta(x-x') + \bar{\eta}^2 F_3(0, x, x')$$

де v_0 - об'єм мікрочастинок.

Для знаходження F_3 скористуємся суперповищійним наближенням: $F_3(0, \lambda, \lambda') = F_2(x) F_2(x') F_2(\lambda, \lambda')$. Підставимо одержані співвідношення у /II/, враховуючи, що $F_2(r) \equiv f(\lambda r)$. При цьому варто до уваги, що $F_2(\lambda, \lambda')$ описує статистичний вплив мікрочастинок у точці λ' на мікрочастинок у точці λ . Хай λ знаходиться у мікрочастинок j -го типу (мал.5). Тоді $F_2(\lambda, \lambda') = f_2(\lambda r_j^*)$ де r_j^* - відстань від поверхні j -о частинки (яка контактує в пробній у точці λ) до точки λ' .

Далі, δV_S^T знаходиться із геометричних міркувань. Об'єм твердої фази у шарі між $S(0)$ і $S(\varepsilon)$ дорівнює $V_S^T = \pi a \varepsilon^2 / 2$. Звідси витікає зв'язок між δV_S^T та δn . Необхідно також урахувати, що $v_0 \approx a \varepsilon^2 / 2$. Оскільки при $a \varepsilon^2 / 2 \gg v_0$ у δV_S^T поряд в контактуючих будуть давати внесок також і флуктуації ближніх сусідів. Таким чином, було одержано співвідношення для $\sigma_i^2 = \langle \delta n_i^2 \rangle$:

$$\sigma_i^2 = \bar{n}_i \left[\left(\pi a_i \sum_{k=1}^m \rho_{vk} / \langle a_{ik} \rangle \right)^{-1} - \gamma_i \bar{n}_i \right] \quad /12/$$

$$\gamma_i = \sum_{k=1}^m \rho_{ik} \int_{S_{ni}} (1 - F_2(\lambda r_j^*)) d S_{ni} / S_{ni}$$

де i - Індексує тип пробної частинки.

Потім /12/ використовується для опису бінарної суміші куль за допомогою експериментально знайденої $f(\lambda r)$:

$$\sigma_i^2 = \bar{n}_i \left[\frac{1 + \ell_i \bar{\ell} / \bar{\ell}^2}{\pi (1 + \ell_i \bar{\ell}^2 / \bar{\ell}^3)} - 0,3 \bar{\eta} \right] \quad /13/$$

Для однорозмірних куль розходження теоретичних та експериментальних даних не перевищує 10 %.

Далі на основі співвідношень для \bar{n}_i , σ_i та з допомогою експериментального ентропійного принципу було знайдено фун-

кцїв розподїлу контактїв мїж частинками $\mathcal{F}(n_i)$:

$$\mathcal{F} = (2\pi\sigma_i)^{-1} \exp\left[-\frac{(n_i - \bar{n}_i)^2}{2\sigma_i^2}\right] \quad /14/$$

Показано, що /14/ погоджується з результатами експериментїв.

Розраховувачи конфїгурацїйну ентропїю $G = \int \mathcal{F}(n_i) \ln \mathcal{F}(n_i) dn$ для бїнарної сумїшї куль за допомогою /14/, одержано, що:

$$G = -P_2 \ln \sigma_2 - (1-P_2) \ln \sigma_1$$

Диференцювачи G по η прирівняючи одержане спїввїдношення нуль, було знайдено максимально можливе значення щїльностї порошку $\bar{\eta}_{\max}$. На мал.6 демонструє залежнїсть $\bar{\eta}_{\max}/\bar{\eta}_k$ вїд об'ємної кїлькостї дрїбних куль P_{V2} .

Потїм екстремальний ентропїйний принцип у поєднаннї з ЛШП було застосовано до опису структури порошку. Було знайдено флуктуацїю значень щїльностї порошку в залежностї вїд об'єму вибїрки. Припускалось, що при випадковому упакуваннї на поверхнї $S(r)$ (яка описується навколо пробної частинки) конфїгурацїйна ентропїя мїкročастинок G_S максимальна. При цьому було вьято до уваги, що мїкročастинки розподїляються на S групами, як набїр перерїзїв зерен порошку. Хай $\mathcal{F}(N, s)$ - ймовїрнїсть вустрїти N перерїзїв в площї s . Тод:

$$G_S = - \int_0^{s_m} ds \int_{N_1}^{N_2} \mathcal{F}(N, s) \ln \mathcal{F}(N, s) dN \quad /15/$$

де s_m - максимально можливий перерїз частинки при заданому $S(r)$; N_1, N_2 - мїнїмально ї максимально можливі числа перерїзаних частинок. При цьому \mathcal{F} задовольняє слїдуючим спїввїдношенням:

$$\iint \mathcal{F} dN ds = 1$$

/16/

$$\iint \mathcal{F} N s dN ds = S(r) \bar{\eta}(r)$$

Екстремалізуючи /15/, при виконанні /16/, одержуємо:

$$F = [\bar{\eta} S(r) f(\lambda r) \ln \frac{N_2}{N_1}]^{-1} \exp\left[-\frac{N_3}{\bar{\eta} S(r) f(\lambda r)}\right] \quad /17/$$

Візьмемо до уваги, що ймовірність $P_S(\eta)$ зустріти на S значення ЛЦП рівним η , пропорційна $\exp C_S(\eta)$. Розкладаючи $C_S(\eta)$ в ряд Тейлора навколо $\bar{\eta}_S = \bar{\eta} f(\lambda r)$, внаходимо:

$$P_S(\eta) = (2\pi\sigma_\eta^2)^{-1} \exp\left[-\frac{(\bar{\eta}_S - \eta)^2}{2\sigma_\eta^2}\right] \quad /18/$$

$$\sigma_\eta^2 = -\left(\frac{\partial^2 C_S}{\partial \eta^2}\right)^{-1} \bar{\eta}_S$$

Прирівнюючи $\langle (\bar{\eta}_S - \eta)^2 \rangle$ до одержаної у другому розділі флуктуації ЛЦП при $\lambda r \gg 1$, внаходимо:

$$f(\lambda r) \approx 1 + \frac{\sin(\lambda r)^{3/2}}{\lambda r} \quad \lambda r \gg 1$$

що погоджується з результатами експериментів.

Розглянемо вибірку порошку об'ємом V . Для цього навколо пробної частинки проведемо $S(R)$ на такій відстані R , щоб:

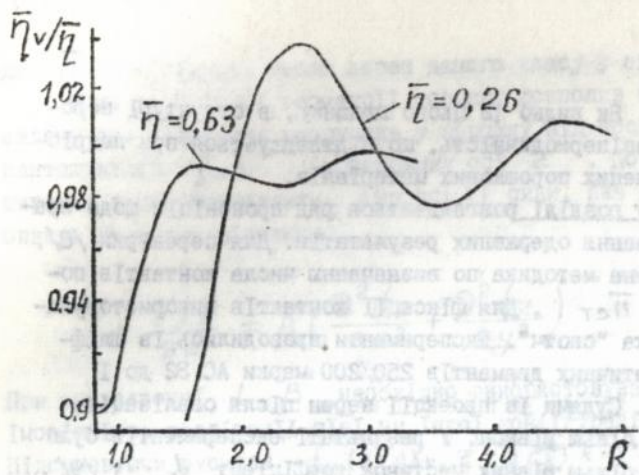
$$V = \int_0^R S(r) dr$$

Середній коефіцієнт упаковки $\bar{\eta}_V$ та конфігураційна ентропія C_V цієї вибірки визначаються як:

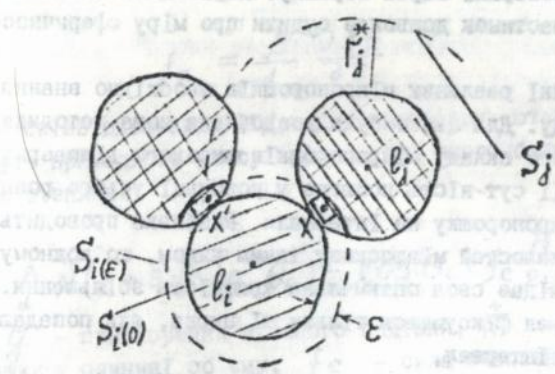
$$\bar{\eta}_V = \bar{\eta} V^{-1} \int_0^R S(r) f(\lambda r) dr$$

$$C_V = - \int_0^R S(r) \ln[\bar{\eta} f(\lambda r)] dr$$

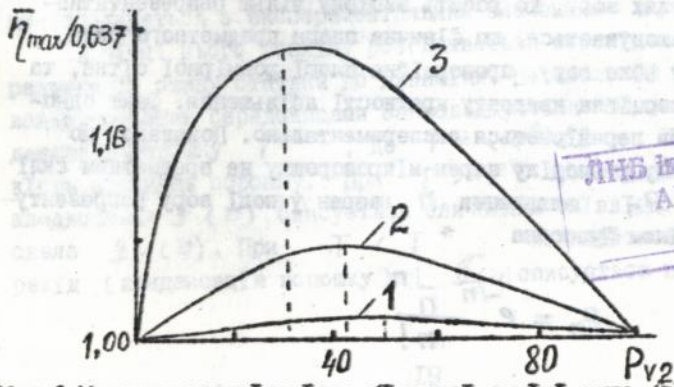
Підставляючи ці параметри замість $\bar{\eta}_S$ і C_S в /18/, одержуємо шуканий опис структури порошку. На мал.7 зображено залежності $\bar{\eta}_V/\bar{\eta}$ від R для однорозмірних куль з $\bar{\eta} = 0,63$ (1)



Мал.7 Доля твердої фази навколо пробної частинки.



Мал.5 Ілюстрація введення мікрочастинок.



Мал.6 Максимальна щільність бінарної суміші куль /Від долі дрібних/.

ЛНБ ім. В. Стефаника
АН України

I $\bar{\eta} = 0,26(2)$. Як видно із цього малюнку, в структурі порошку має місце квазіперіодичність, що підтверджується при подрібненні деяких спечених порошкових матеріалів.

У четвертому розділі розглядається ряд проповідей щодо практичного застосування одержаних результатів. Для перевірки /8/, /9/ була розроблена методика по визначенню числа контактів порошку з стінкою $\bar{N}_{ст}$. Для фіксації контактів використовувалась клейка плівка "скотч". Експерименти проводились із шліф-порошками в синтетичних діамантах 250/200 марки АС 32 до I після овалізації. Судячи із проекції зерен після овалізації, їх поверхня стає більш рівною. У результаті експериментів було показано, що для більш рівних частинок коефіцієнт α у /9/ прямує до нуля. Це дозволяє використовувати методику при вивченні морфології поверхні зерен порошку. Порівняння $\bar{N}_{ст}$ з /8/ для кулястих частинок дозволяє судити про міру сферичності зерен.

При дослідженні реальних мікропорошків необхідно знання їх зернового складу. Для цього була розроблена нова методика визначення зернового складу мікропорошків широкого діапазону під мікроскопом. Її сутність полягає у розбивці усього розмірного діапазону мікропорошку на інтервали. Розбивка проводиться в урахуванням можливостей мікроскопу таким чином, що кожному інтервалові відповідає своя оптимальна кратність збільшення. При підрахунку зерен фіксуються тільки ті зерна, які попадають у даний розмірний інтервал.

Однорідність таким чином проби дозволяє проводити виміру на кількох полях зору, що робить вибірку більш репрезентативною. Далі ураховується, що фізична площа предметного скла, яка попадає у поле зору, пропорційна площі розмірної сітки, та обернено пропорційна квадрату кратності збільшення. Факт однорідності проби перевіряється експериментально. Показано, що при випадковому розподілу зерен мікропорошку на предметном склі ймовірність P_n виявлення n зерен у полі зору репрезентується розподілом Пуассона

$$P_n = e^{-\bar{n}} \frac{\bar{n}^n}{n!}$$

де \bar{n} - середнє число зерен даного класу у одному полі зору.

Опис внутрішньої геометрії порошку дозволив також вирішити задачу про поширення напружень у порошок від восередненого навантажування f_z у напрямку осі Z . Показано, що поширення даної компоненти (на ось Z) сили, яка діє на зерно, описує наступне рівняння:

$$\alpha \frac{\partial f_z}{\partial z} = \beta \left(\frac{\partial^2 f_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f_z}{\partial y^2} \right) \quad /19/$$

При знаходженні α, β необхідно використовувати $F(n)$ та ймовірність реалізації тієї чи іншої конфігурації частинок. Підсумовуючи зусилля $f_z(x - \Delta x_k, z - \Delta z_k), k = 1, \dots, \frac{n}{2}$ від частинок, що контактують, знаходимо, що f_z викликає дію сили у напрямку осі X :

$$f_x = \frac{\beta}{\alpha} \frac{\partial f_z}{\partial z} \quad /20/$$

Потім співвідношення /19/, /20/ застосовуються для знаходження кута природного укосу θ_0 , для якого було знайдено наступне рівняння:

$$\frac{\beta}{\alpha} \tilde{N} (1 + 2 \frac{\beta}{\alpha} \operatorname{tg}^2 \theta_0) = \cos \theta_0 + f_c \frac{\bar{n}}{2g} \quad /21/$$

де g - прискорення вільного падіння; \tilde{N} - число частинок порошку у одиниці об'єму; f_c - сила зчеплення для одного контакту. Згідно /21/, для однорозмірних куль ($f_c = 0$): $\theta_0 \approx 22^\circ$, що погоджується з експериментальним значенням $\theta_{0 \text{ ек}} \approx 24^\circ$.

В кінці цього розділу розглядається перехід порошкових середовищ із стану статички до динаміки. По аналогії з другими конденсованими середовищами запроваджується "температура" конденсації порошку T^* , де $T = \langle v^2 \rangle / 2$; v - швидкість частинок порошку. При $T > T^*$ розподіл частинок за швидкостями $F(v)$ описується звичайним співвідношенням Максвелла $F_M(v)$. При $T < T^*$ починається фазовий перехід (конденсація порошку) і $F(v)$ описується наступним

співвідношенням :

$$F(v) = 1 - q(T) + q(T) F_m(v)$$

Де $1 - q$ означає частку частинок з швидкостю, що дорівнює нулю; а q - частка частинок, які підпорядковуються розподілу Максвелла. Це погоджується з експериментальними даними, які свідчать, що на початковому етапі деформування порошку його зерна рухаються блоками. У середині блоку частинки нерухомі одна відносно другої, тобто хаотична швидкість їх v дорівнює нулю. Очевидно, наявність пікового напруження на діаграмі "напруження-зміщення" також пояснюється фактом існування "температури" конденсації порошку.

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ І ВИСНОВКИ

1. Введення локальної щільності порошку ρ дозволило визначити координаційне число порошку. Установлено, що ρ є однопараметрична функція. Аналітично знайдена поведінка ρ на безконечності.

2. Через розподіл / формальним способом / початкових частинок на мікрочастинки одержано опис ρ в допоміжних методах статистики. Це дозволило знайти середньоквадратичне відхилення значень координаційного числа порошку; знайдено максимально можливе значення щільності бінарної суміші куль.

3. Одержано опис структури порошку, залежність флуктуації щільності порошку від об'єму його вибірки. Виявлено існування квазіперіодичності в структурі порошку.

4. Розроблені дві методики: по визначенню форми та морфології поверхні зерен порошку / через підрахунок їх числа контактів із стінкою /, і по визначенню зернового складу полідисперсних мікропорошків.

5. Одержано рівняння, яке описує розподіл напруг у порошку від восередженого навантаження. Знайдена формула кута природного укосу для набору однорозмірних куль. Якійсно розглянуто перехід порошку із стану статичного до динамічного. Дано пояснення наявності блочного руху зерен порошку на початковому етапі навантаження.

Основні положення дисертації опубліковано в роботах:

1. Велик В.Д. Применение методов статистической физики к исследованию внутренней геометрии порошкообразных сред. - В кн.: Получение и использование сверхтвердых материалов.: Тез. докл. XII Всесоюзной конференции молодых ученых.; 23-24 апр., 1987г.; АН УССР ИСМ.-К., 1988. - с. 121-123.

2. Велик В.Д. Связь между плотностью упаковки и координационным числом порошковых смесей. I. Двухчастичная функция микрочастиц и ее геометрическая интерпретация. // Порошковая металлургия. - 1989. - № 6. - с. 21-24.

3. Велик В.Д. Связь между плотностью упаковки и координационным числом порошковых смесей. II. Нахождение среднего числа контактов и их среднеквадратичного отклонения. // Там же. - 1989. - № 8. - с. 18-22.

4. Велик В.Д. Уравнение для силы взаимодействия между зернами порошка. - В кн.: Получение, свойства и использование сверхтвердых материалов.: Тез. докл. XV Международной конференции молодых ученых., 25-27 апр., 1990г.; АН УССР ИСМ.-К., 1991. - с. 212-214.

5. Крымский М.Д., Катрус О.А., Никитин Ю.И., Велик В.Д. Размол композиционных магнитно-абразивных материалов // Порошковая металлургия. - 1982. - № 9. - с. 82-85.

6. Гнесин Г.Г., Кислим П.С., Никитин Ю.И., Осипова И.И., Велик В.Д. Получение шлифпорошков из материала на основе нитрида кремния // Порошковая металлургия. - 1987. - № 12. - с. 26-31.

7. Велик В.Д., Никитин Ю.И. Новая методика определения гранулометрического состава полидисперсных микропорошков // Порошковая металлургия. - 1995. - № 1-2. - с. 89-93.

Основні наукові результати, які винесені на захист, апробовані в роботах 1-4. Експериментальна апробація теоретичних результатів по опису структури порошкових середовищ в допомозі локальної щільності та розробки методики визначення зернового складу мікропорошків була викона разом в Гнесіним Г.Г., Катрусом О.А., Кислим П.С., Крымським М.Д., Нікітніним Ю.І. та Осиповою І.І., що нашло своє відображення в роботах 5-7.

Велик

Abstract

Belik V.D. Development of the statistical methods for the analysis of powders (with the manuscript rights).

Dissertation for the award of candidate degree technical sciences on speciality 05.16.06 - powder metallurgy and composite materials. Institute for Problem of Material Science of the National Academy of Sciences of the Ukraine, city of Kiev, 1995.

In dissertation there is presented theoretical model describing of internal powder geometry by means of statistical physics methods. Analysis is based on introduction of local coefficient of packing /LCP/. There was found that LCP is described by automodeling function of distance from surface of trial particle. It was found: the function of distribution of contacts number; the maximum possible value of packing coefficient of a binary ball mixture; the distribution of hard phase around the trial particle; two new methodics.

АННОТАЦІЯ

Белик В.Д. Розробка статистических методів аналізу порошкових серед / на правах рукописи /.

Дисертація на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.16.06 - порошковая металлургия и композиционные материалы, Институт проблем материаловедения НАН Украины, Киев, 1995г.

В диссертационной работе представлена теоретическая модель, описывающая внутреннюю геометрию порошков с помощью методов статистической физики. Анализ основывается на введении локального коэффициента упаковки /локальной относительной плотности/. Установлено, что локальная относительная плотность является автомодельной функцией расстояния от пробной частицы. Найден: Функция распределения числа контактов; максимально возможный коэффициент упаковки бинарной смеси шаров; распределение твердой фазы в окрестности пробной частицы; разработаны две новые методики.

Ключові слова: порошок, число контактів /координатне число/, локальна щільність, статистична фізика.

Підп. до друку 26.10.1995 р.; формат 60x84/16. Папір офс.
друк. офс. Умов. друк. л. 1,5 . Умов.фарб.-відб. 1,6
Обл.-вид.л. 1,09. Тираж 100 прим. Зам. 8/4

Інститут проблем матеріалознавства
ім. І.М.Францевича АН України
252660 Київ 680, дСП, вул.Кржижанівського,3.
дільниця Оперативної поліграфії
Інституту проблем матеріалознавства
ім. І.М.Францевича АН України
252660 Київ 680, дСП, вул.Кржижанівського,3.

946901

AB 33.591

AB 33.591