

激光衍射法测试颗粒形状的模拟

王清华, 简森夫, 张少明, 张传武

(南京工业大学材料科学与工程学院, 江苏南京 210009)

摘要: 对激光衍射法测试颗粒形状的原理、数学模型作了全面的介绍。在数值模拟的基础上论证了该法的可行性以及操作中应注意的问题, 指出该法与现代激光粒度仪的结合有望诞生新一代激光颗粒仪。

关键词: 激光衍射; 颗粒形状测试; 数值模拟

中图分类号: TH744.5 **文献标识码:** A **文章编号:** 1671-7643(2003)04-0060-04

超细粉体材料在现代化工业生产、国防建设和高科技领域中的地位越来越重要, 并广泛应用于医药、化工、冶金、电子、机械、轻工、食品、建筑及环保等行业。人们注意到颗粒的形状对颗粒群的很多性质的影响是不容忽视的, 例如颗粒的比表面、流动性、松装密度、成型性质、化学活性, 涂料的覆盖能力, 粉末层对流体透过的阻力, 以及颗粒在流体中的运动阻力等与颗粒形状有着密切的关系。根据粉体用途的不同, 对颗粒形状的要求也不同, 比如, 橡胶要求在各个方向上具有相同的耐磨性, 其填充料(粉体)常用球形颗粒, 而在油漆、涂料中则采用表面固着力强、反光效果好的薄片状颗粒^[1]。

目前, 对于颗粒形状测量尚无统一的方法, 比较典型的有借助光学显微镜对颗粒进行放大成像, 用形状因子或傅里叶系数去刻画颗粒的形状^[2]。上述方法只适用于单个粒子而限制了其应用。激光衍射法用于颗粒粒度测量的技术已比较成熟, 它具有快速、非接触、重现性高等优点而备受用户青睐。本文着重研究了激光衍射谱与颗粒形状的关系, 运用相关系数表征颗粒形状, 这是一种颗粒形状统计学意义上的测试。本文还进一步对该法的影响因素进行了模拟, 为开发集粒度、形状测量为一体的测试仪器打下基础。

1 测试原理分析

1.1 颗粒的形状与衍射谱的对应关系

用单色平行光垂直照射被测颗粒, 被测颗粒的

衍射光由一傅里叶透镜接受, 则在傅里叶透镜后焦面上将得到该颗粒的夫琅和费衍射图, 又称颗粒的衍射谱^[3]。

为说明方便, 假定颗粒是不透明的, 根据互补屏原理, 除了谱面中心极小零频区域外, 此颗粒衍射谱与一个有着相同轮廓的孔径的互补屏相同。设此屏的透过率函数为

$$G(r, \theta) = \begin{cases} 1 & r \leq R(\theta) \\ 0 & r > R(\theta) \end{cases} \quad (1)$$

如果透镜的口径足够大, 那么透过函数的二维傅里叶变换恰好就是此屏的衍射谱。

$$U(\rho, \varphi) = \iint_{-\infty}^{\infty} G(r, \theta) \exp[-i2\pi r \rho \cos(\theta - \varphi)] r dr d\theta \quad (2)$$

r, θ 是物面的极坐标; ρ, φ 是谱面的极坐标。

如果 ρ' 表示焦面的实际尺寸, 则:

$$\rho = \frac{\rho'}{\lambda f} \quad (3)$$

其中: λ 是光波波长; f 是傅里叶透镜焦距。

图 1 分别为投影面是球形、长径比为 2 的椭圆形、正方形、等边三角形的颗粒的衍射图样的数值模拟, 从图 1 中看出这几种典型形状的颗粒的衍射图样有着各自鲜明的特征, 它与颗粒的形状存在一一对应关系。所以通过颗粒的衍射图样中蕴含的信息, 可以刻画颗粒的形状。

1.2 测试装置的组成

用于颗粒形状测试的装置组成借鉴了市场上的现有激光粒度仪的基本原理, 但在探测器的结构设

收稿日期: 2003-01-14

作者简介: 王清华(1976-), 男, 江苏盐城人, 博士生, 主要研究方向为粉体材料的测试。

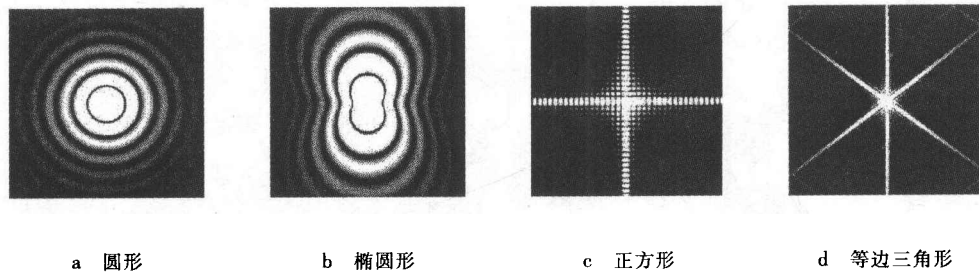


图1 不同投影形状的颗粒衍射图样的数值模拟

Fig.1 Simulated diffraction pattern for particles with different projected shapes

计上有着明显的差异。具体装置如图2所示,主要由激光光源、扩束准直系统、样品池、傅里叶变换透镜、楔形探测器、微型计算机系统组成。

通常的激光粒度仪的接收器由一组同心圆环组成,而这里为了辨别颗粒的形状特意将探测器做成

楔形(图2),它由一系列从中心呈放射状的楔形探测单元组成。这样按顺时针各楔形探测单元中测得的衍射光强呈现出某种规律性的强弱变化,而这种变化对应着特定的衍射花样,从而将反映出颗粒的形状。

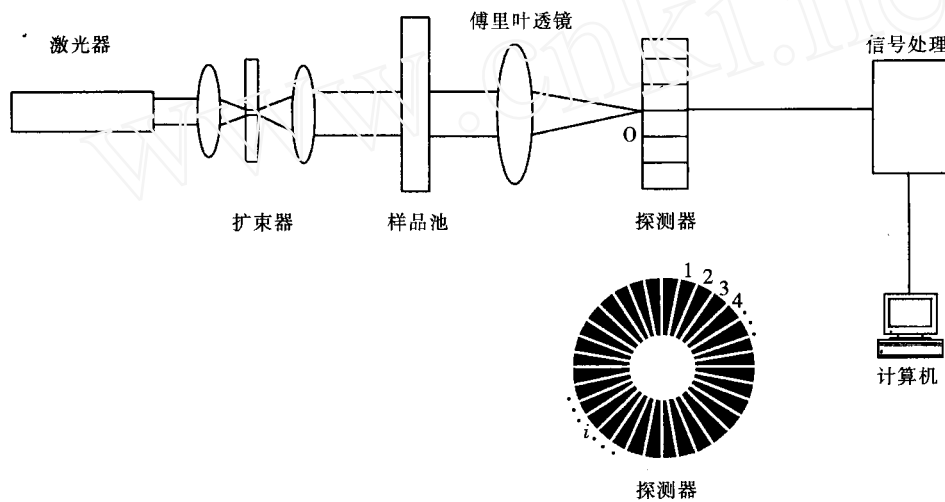


图2 测量装置组成图

Fig.2 Setup of the instrument

2 相关系数表征颗粒形状的数值模拟

2.1 相关系数表征颗粒形状的数学模型

图1显示的是单个颗粒在确定取向时的衍射图样,而在实际测量时颗粒的取向是随机的。在某一时间段连续测得多组楔形探测区上的光强,由于颗粒取向的变化每组光强数据会发生移位。如果象激光粒度仪那样简单地将多组数据加和取平均,势必掩盖了颗粒的形状信息,在这里将统计学中的相关系数^[4~6]用于显示各楔形探测单元所测光强之间的

关系。此处相关系数具体定义如下:

$$\rho_{ij} = \frac{\sum_{s=1}^{N_s} (L_{i,s} - \bar{L}_i)(L_{j,s} - \bar{L}_j)}{\sqrt{\sum_{s=1}^{N_s} (L_{i,s} - \bar{L}_i)^2 (L_{j,s} - \bar{L}_j)^2}} \quad (4)$$

式中: $L_{i,s}$ 指第 i 个楔形探测单元第 s 次测量光强值; \bar{L}_i 为 i 个楔形探测单元的平均测量光强值; N_s 为测量次数。

设楔形探测单元个数为 n , 上述相关系数为一 $n \times n$ 维的三角对称矩阵, 式5表示了该对称矩阵的形式, 主对角线元素全为1。为了表述方便, 这里把

主对角线称为0对角线,左下方相邻的各对角线依次称为1对角线,2对角线,等等。则所有 m 对角上元素的值代表了相邻编号差为 m 的楔形探测单元之间的相关性。

$$\rho(n \times n) = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ \rho_{2,1} & 1 & & & & \\ & \ddots & \rho_{3,2} & 1 & & \\ \rho_{1+m,1} & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \rho_{n,1} & \cdots & \rho_{n,n-m} & \cdots & \rho_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix} \quad (5)$$

从编号1到编号 n 的楔形探测单元构成了一圆周,从而编号差为 m 的以及编号为差 $n-m$ 楔形探测单元间的间隔是一样的,所以采用经平均化了的(6)式表征楔形探测单元的相关性是合适的。

$$\rho_m = \frac{\sum_{i-j=m}^{n-m} \rho_{ij} + \sum_{i-j=n-m}^m \rho_{ij}}{n} \quad (6)$$

2.2 楔形探测单元上光强相关系数的数值模拟

为了考察(6)式对颗粒形状表征的可行性,本文对几种典型形状的颗粒进行了数值模拟。首先假定样品池中分别存在投影面是正方形(边长 $400 \mu\text{m}$)、椭圆形(长轴 $400 \mu\text{m}$ 、短轴 $200 \mu\text{m}$)、球形(直径 $400 \mu\text{m}$)的单个粒子,在平行激光的照射下产生衍射,通过一焦距为 100mm 的傅里叶透镜在楔形探测上形成夫琅和费衍射花样。楔形探测单元的内环半径为 0.2mm ,外环半径为 3mm ,共有72个楔形探测单元,每次测量10组数据。图3绘出在上述假定条件

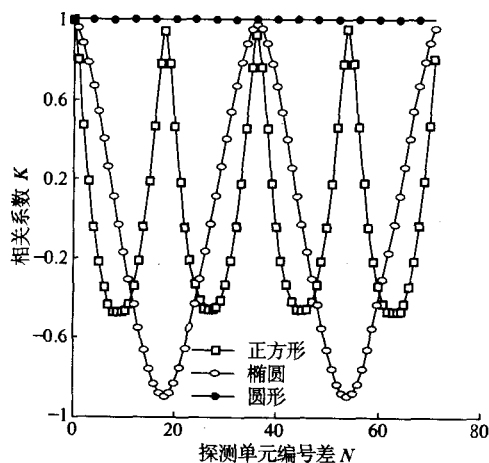


图3 几种典型投影形状的单颗粒散射谱的相关系数模拟图

Fig.3 Simulated particle wedge spectrum for one particle of typical shapes

下的3种典型形状颗粒的相关系数与楔形探测单元编号关系的数值计算图。

从图3中看出,不同形状颗粒的相关系数曲线差异特征明显:投影面为球形颗粒的相关系数曲线为一直线;投影面为椭圆形颗粒的相关系数曲线呈现3个波峰2个波谷;投影面为正方形颗粒的相关系数曲线呈现5个波峰4个波谷。因此可方便地由相关系数曲线起伏特征识别单颗粒的形状。

为了考察颗粒浓度对相关系数曲线的影响程度,本文以边长 $400 \mu\text{m}$ 方形颗粒为例在不同浓度下进行模拟,模拟中假定在激光光照射区的 2mL 溶液中各个颗粒的取向完全是随机的。图4绘出了被照颗粒数为1、3、6时的相关系数曲线。从图中看出:随着颗粒数的增大,相关系数起伏程度减低。这是因为随着颗粒数的增加颗粒取向的随机性会在一定程度上掩盖颗粒的形状特征;但是相关系数的起伏总体特征没有改变。图5为图4中6颗粒模拟中用到的部分随机颗粒取向和相关的衍射花样,从图5中的衍射花样可见对于这样错杂的光强分布根据直观衍射特征判断已无从下手,而图4中相关系数的起伏程度虽然有所降低但特征尚十分明显。因此在实际测量中只要选择合适的颗粒浓度,用此法表征颗粒的形状是有效的。

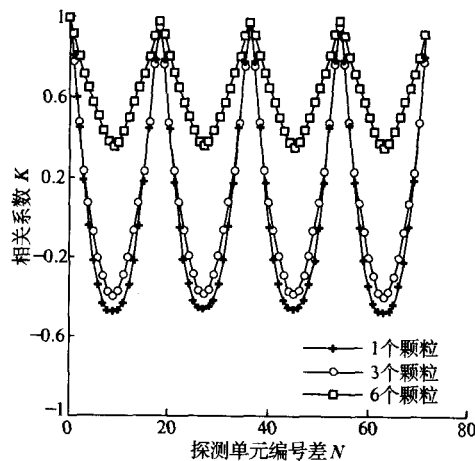


图4 投影形状为正方形的颗粒在不同浓度下的散射谱的相关系数模拟图

Fig.4 Simulated square particle wedge spectrum in different concentrations

3 结论

通过数值模拟认为通过激光衍射法用相关系数

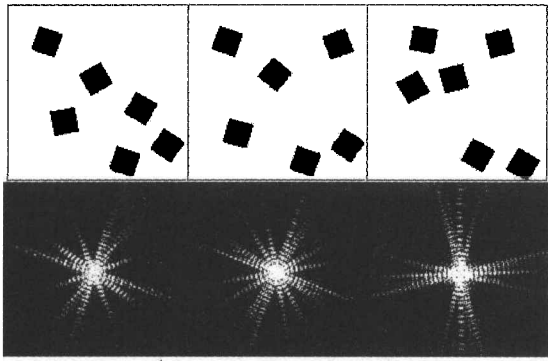


图5 投影面为正方形的6个颗粒随机取向分布及其对应模拟散射花样图

Fig.5 Square particles with random orientation and its corresponding diffraction

能够很好地表征颗粒的形状,它是一种颗粒形状统

计学意义上的测试。模拟进一步表明对于多粒子的测量同样也是有效的,但在测量时应避免颗粒浓度过高。

参考文献:

- [1] 张佑林,夏家华,黎国华,等. 粉体颗粒的形状与分维[J]. 武汉工业大学学报,1996, (18):53-56.
- [2] 童枯嵩. 颗粒粒度与比表面测量原理[M]. 上海:上海科学技术文献出版社,1989. 23-30.
- [3] 游明俊. 傅里叶光学[M]. 北京:兵器工业出版社,2000. 84-85.
- [4] 沈恒范. 概率论与数理统计[M]. 北京:高等教育出版社,1995,286-287.
- [5] Heffels C, Heitzmann D, Hirlman E D, et al. The use of azimuthal intensity variations in diffraction patterns for particle shape characterization[J]. Part Part Syst Charact,1994, (11):194-199.
- [6] Ma Zhenhua. Measurement of particle size and shape by laser light Scattering[D]. Netherlands: Delft University of Technology, 2002.

Simulation research for particle shape measurement with laser diffraction

WANG Qing-hua, JIAN Miao-fu, ZHANG Shao-ming, ZHANG Chuan-wu

(College of Materials Science and Engineering, Nanjing University of Technology, Nanjing 210009, China)

Abstract: The method of particle shape measurement with laser diffraction is illustrated. The numerical simulation, its feasibility and some notices are demonstrate. Added to this method, the modern laser sizer can be updated to a new particle measure instrument which can not only measure the size but also the shape of particles.

Key words: laser diffraction; particle shape measurement; numerical simulation