

ISSN 0023-1118

ХИМИЧЕСКИЕ ВОЛОКНА

Полимеры • Волокна • Текстиль • Композиты

KHIMICHESKIE VOLOKNA
POLYMERS • FIBRES • TEXTILES • COMPOSITS

www.khimvol.su



2022

УДК 66.023.2

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЛОКОН БУМАГИ И КАРТОНА С ПРИМЕНЕНИЕМ 3Д-ТЕХНОЛОГИИ

Н.П. Мидуков, В.С. Куров, М.В. Колосова

Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна; Высшая школа технологии и энергетики

Статья посвящена решению фундаментальной задачи достоверного определения объема целлюлозного волокна, его активной поверхности, параметры которых позволяют оценить или спрогнозировать свойства вырабатываемой бумаги или картона. Для этого с помощью современных методов подготовки образцов к электронной микроскопии в совокупности с возможностями профессионального мощного графического редактора конструируется 3Д-модель волокна, находящегося в бумаге или картоне. Задача по 3Д-моделированию включала в себя подготовку серии срезов микроструктуры бумаги с шагом не более 10 мкм с дальнейшим их преобразованием в трехмерное тело. Графическая программа векторного формата в разделе свойств объекта позволяет установить объем волокнистого материала, поверхность и массу. При правильном масштабировании 3Д-тела, в соответствии с размерами, указанными на микроскопических снимках, в свойствах объекта генерируются искомые показатели. Полученная 3Д-модель волокна позволяет также установить направление действия сил межволоконного взаимодействия в трехмерной системе координат. Отсутствие 3Д-модели волокна в реальных размерах до сих пор не позволяло оценить истинное значение межволоконных сил связей, которые кроме численного значения имеют направленность, так как являются векторными величинами.

Бумага и картон — это композиционные материалы на основе растительных волокон, которые, взаимодействуя между собой, образуют микроструктуру, от прочности связей в которой зависит прочность волокнистого материала. Если силовая характеристика связи волокон сегодня известна и представлена в цифровом выражении для частных случаев, то направления действия сил, зависящих от расположения поверхности волокна в пространстве, не изучено. Очевидно, что сила является векторной величиной и ее направление оказывает не менее важное влияние, чем ее значение. В связи с этим основные научные центры в мире по исследованию бумаги и картона занимаются проблемой моделирования волокна в трехмерном пространстве, которое позволит определить направления сил при контакте волокон, оценить объем и поверхность волокнистого материала, установить расположение в трехмерном пространстве контактирующих областей.

Современный уровень развития микроскопии позволяет создать 3Д-модель волокна. В совокупности с электронной и оптической микроскопией современные компьютерные программы позволяют получить новые данные для оценки характеристик волокна. Скандинавскими и американскими учеными были предложены методы создания 3Д-модели волокнистого материала [1]. Представленный ими принцип получения поперечных срезов подходит к формированию достоверной 3Д-модели волокна, при этом точность зависит от минимальной дискреции срезов. Однако в то время невозможно было получить срез достаточной чистоты и отсутствовало программное обеспечение, позволяющее смоделировать волокно в 3Д-проекциях с возможностью оценки объема, поверхности, изогнутости, а также площади соприкосновения областей.

Учеными шведского королевского университета была представлена 3Д-модель микроструктуры волокна, правильной формы с расположением фибрилл во внешней стен-

E-mail: mail@gturp.spb.ru

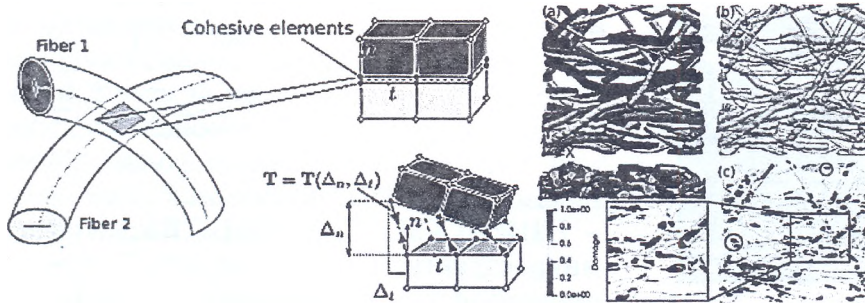


Рис. 1. Оценка поверхности контакта волокон в 3Д-микроструктуре бумаги и картона.

ке целлюлозного материала [2]. В работе использовалось волокно правильной формы (труба, цилиндр, эллипс) и не учитывалось, что в реальных условиях волокно может быть «сплюснuto», изогнуто после прохождения его через бумагоделательную машину. Полученная 3Д модель волокна не позволила сформировать микроструктуру бумаги и картона с достоверной геометрией волокон, которые переплетаются между собой и редко имеют прямую и правильную форму.

Подобная работа проводилась учеными немецкого технологического института Карлсруэ [3]. Она посвящена математическому описанию и не затрагивает вопросы 3Д-моделирования микроструктуры волокнистого материала. Волокна показаны без изгибов, правильно располагаются, что не соответствует реальной микроструктуре. Наиболее близкий к действительности вариант представлен в совместной работе ученых Австрии (Градский технологический университет) и Германии (Улмский университет) [4]. В их работе рассматривался поперечный срез бумаги, которая получена из волокон кольцеобразного поперечного сечения. Трехмерная модель формируется путем анализа изображений с высоким качеством в сочетании со статистическим расчетом. В результате исследователи получили неплохие результаты по оценке пористости бумаги и картона, а также определены масса, шероховатость по Бекку и по Герлею при прессовании бумаги и без него. Однако исследователи не разработали 3Д-модель микроструктуры бумаги, вероятно потому, что остановились лишь на изучении поперечного среза и показатели волокна измеряли на его основании.

Трехмерную модель микроструктуры волокнистого материала представили ученые Королевского института технологии (Шве-

ция) [5]. В работе рассчитаны случайные волокнистые сети и смоделирована микроструктура в объеме материала. Целью работы не являлось реальное построение микроструктуры волокнистых материалов и поэтому на основании их результатов не представляется возможным оценить необходимые геометрические показатели волокон микроструктуры.

Представленные 3Д-модели микроструктуры волокнистых материалов не позволяют оценить достоверно объем, поверхность, а также площадь контакта волокон. В работе ученых Дармштадского университета (Германия) представлены 3Д-модели волокон и поверхности их взаимодействия (рис. 1) [6]. Важным результатом является то, что по такой 3Д-модели можно оценить равномерность распределения этих областей и геометрические параметры микроструктуры бумаги и картона.

На рис. 1 показаны поверхности, по которым волокна контактируют между собой, что дает возможность косвенно прогнозировать физико-механические характеристики, так как чем больше контактирующих поверхностей, тем прочнее бумага или картон. На прочность также будет влиять равномерность распределения поверхности контакта. Положительным моментом работы является также построение 3Д-модели микроструктуры при различной ориентации волокон. Для каждого из вариантов были определены механические характеристики. Недостатком работы является идеальная форма волокон. Волокна в представлении круглые в сечении, слабо переплетены, поэтому по представленным 3Д-моделям невозможно достоверно оценить объем материала, площадь поверхности объемного тела, поверхность контакта волокнистого материала. Для этого необходимо использовать микрострук-



Рис. 2. Микроструктура поперечного среза, полученная методом ионного травления.

туру волокон реального материала, изображение поперечного среза которого выполнено в высоком качестве и может обрабатываться современными графическими компьютерными программами. Описание методики получения поперечных срезов высокого качества и параметры бумаги и картона, которые могут быть определены, представлены в работах [7-10].

Качественное изображение поперечного сечения может быть использовано для построения 3Д-микроструктуры бумаги и картона (рис. 2). С учетом сложности их форм рекомендуется использовать метод, представленный в работе [7], для формирования 3Д-микроструктуры волокон по поперечным срезам, современные графические компьютерные программы, использованные в работах [7-10] с учетом многократного применения технологии ионной резки для получения поперечного среза.

Для моделирования микроструктуры бумаги и картона предварительно необходимо создать и отработать принцип 3Д-моделирования волокна с помощью наиболее адаптированных для этих целей графических программ. Из всего разнообразия графических программ не каждая позволяет смоделировать сложную форму волокон и не все программы позволяют рассчитать объем и поверхность волокна по его 3Д-модели.

В качестве материала была использована бумага, в которой находятся вторичные волокна различной природы. Образец был изготовлен в лаборатории центра коллективного пользования биорефайнинга и нанотехнологий Санкт-Петербургского государственного университета промышленных технологий и дизайна.

Микроструктуру образцов волокнистого материала, отобранного после различных стадий подготовки бумажной массы, исследовали с помощью сканирующей электронной микроскопии в центре коллективного пользования НИЦ «Курчатовский институт» – ЦНИИ КМ «Прометей». Визуализация микроструктуры подготовленных образцов производилась с помощью сканирующего микроскопа Tescan Mira3 LMN. Характеристики микроскопа следующие: электронная колонна (FEG sem) с источником электронов на основе катода Шоттки, ускоряющее напряжение 200 В – 30 кВ, ток зонда 2 пА – 200 нА, разрешение 1 нм (при 30 кВ), увеличение до 1 000 000, детекторы вторичных электронов (SE, In-Beam SE), детектор отраженных электронов (BSE) [11, 12]. Подробно особенности оценки микроструктуры волокнистых материалов, на примере покровного слоя картона тест-лайнера были представлены в работах [7-10].

3Д-модель волокна была сконструирована в программе Inventor, в которой были использованы команды, позволяющие создать сечения и операции их выдавливания для формирования цифрового образа твердого тела [13, 14]. Для проектирования взаимодействий различных твердотельных 3Д-моделей можно также использовать программный комплекс систем автоматизированного проектирования SolidWorks. Этот комплекс позволяет проектировать сложные структуры, а также получать готовые выходные данные по отдельным элементам проектирования.

По результатам критического анализа современных работ, посвященных созданию 3Д-модели волокон, был предложен оптимальный алгоритм, который заключается в формировании поперечных срезов волокна бумаги с наименьшим шагом. На первом этапе моделирования получают поперечные сечения бумаги (в соответствии с рис. 2). Для этого используются современные способы подготовки образцов для электронной микроскопии. Результатом первого этапа является получение изображения поперечных сечений бумаги, выполненные с шагом не менее 10 мкм (чем меньше шаг,

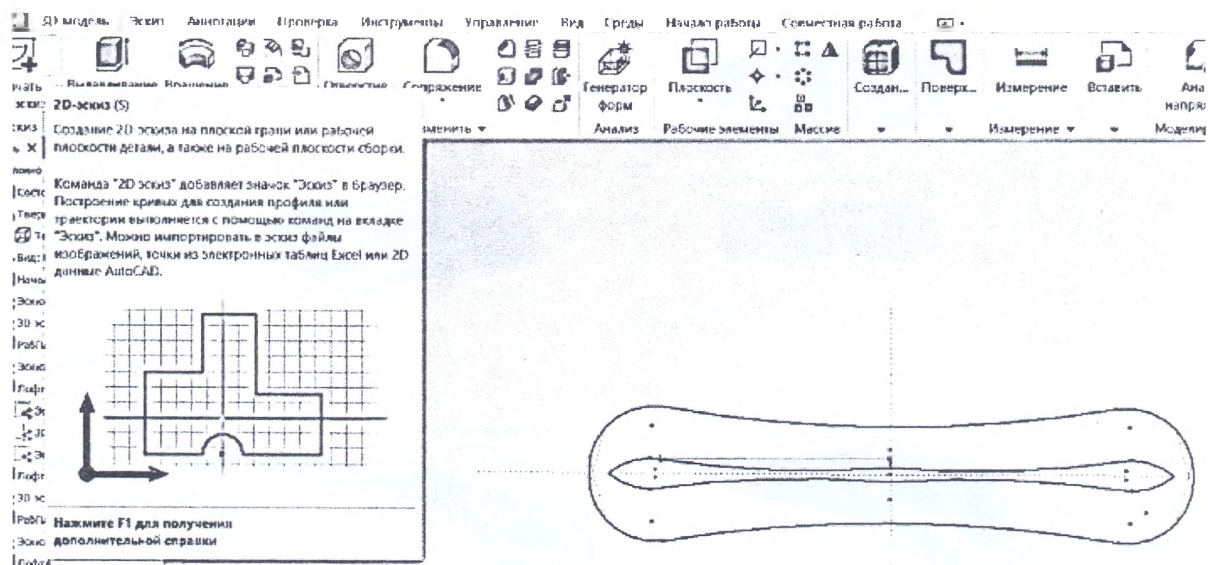


Рис. 3. Создание 2Д-эскиза поперечного сечения волокна.

тем выше точность 3Д-модели). Если увеличить расстояние, которое разделяет близлежащие поперечные сечения, то достоверность расчетов объема и поверхности волокна будет снижена, на больших расстояниях волокно в бумаге может быть сильно изогнуто или деформировано. Область изгиба и деформации не будет учтена, что снизит качество поверхности. На втором этапе изображения поперечных срезов импортируются в программу векторного формата работы с файлами, после чего контур среза волокна обводится для того, чтобы впоследствии сформировать область сечения. Количество сечений определяется заданной областью исследования бумаги или картона. В данном случае выбран фрагмент волокна, который имеет сложную конфигурацию, а сечения

смещены и развернуты относительно осей X , Y , Z .

Команда 2Д-эскиз в программе Inventor позволяет обвести контур среза волокна в 2Д-пространстве с высокой точностью. Полученное изображение области среза волокна в векторном формате имеет свой центр, координаты X , Y которого зафиксированы и установлены при получении среза, а координата Z определяется шагом (дистанцией между близлежащими срезами) не менее 10 мкм. Смещение центра среза одного волокна в разных сечениях относительно осей X , Y , Z , а также изменение в геометрии области среза влияют на форму 3Д-модели в последующем при выдавливании по 2Д-эскизам (команда «Лофт») и формировании твердого тела.

На рис. 4 представлен 2Д-эскиз одного из последующих срезов, который существенно отличается по форме от предыдущего. Программа Inventor позволяет создать объект по сечениям сложной формы, используя математические алгоритмы сглаживания и соединения областей.

Чем больше 2Д-эскизов сечений волокна будет загружено и создано в программе Inventor, тем выше будет точность построения 3Д-модели, а следовательно, выше будет достоверность определяемых показателей (объема, площади, массы волокна). В

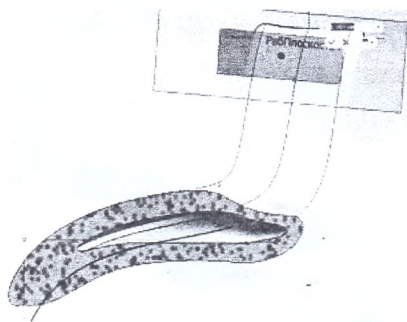


Рис. 4. Построение эскиза второго сечения и формирования 3Д-модели фрагмента волокна.

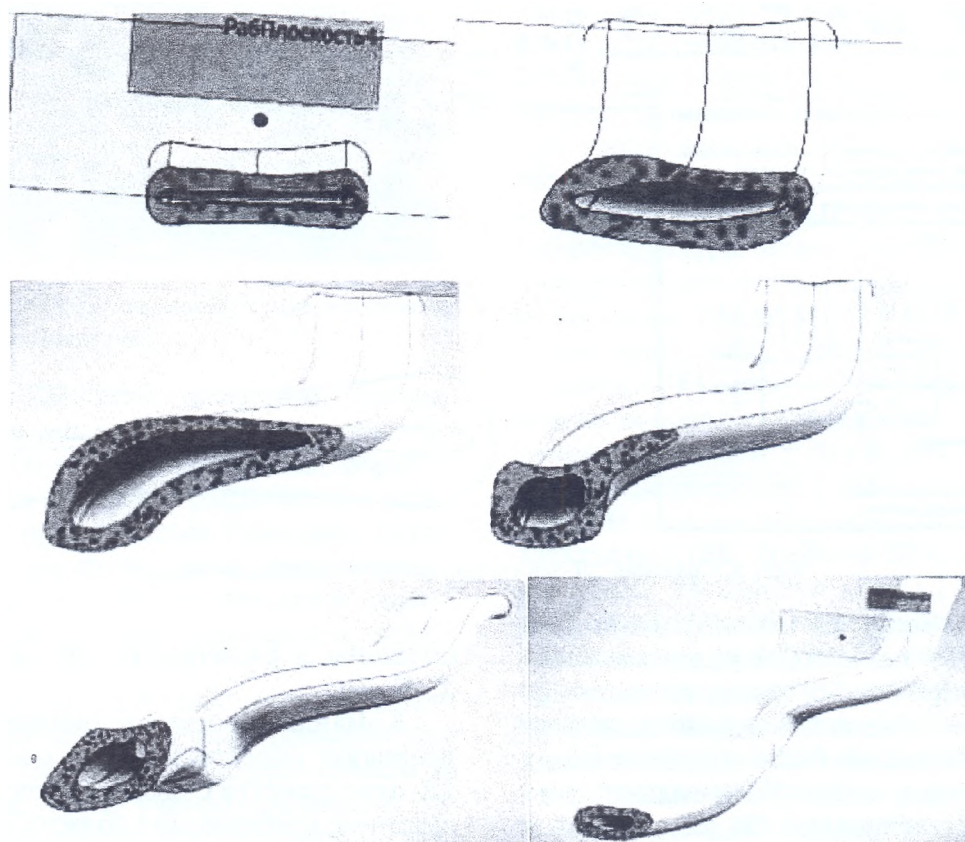


Рис. 5. Построение 3Д-тела по выдавливанию 2Д-эскизов в программе Inventor.

конечном итоге, был сформирован фрагмент волокна, представленный на рис. 6, который имеет сложную форму, изогнутость и сдвоен по оси Z , так как прошел стадию формования, а также скручен.

Представленная на рис. 6 3Д-модель позволяет оценить в программе Inventor ряд показателей, интересных для исследователей бумаги и картона. Например, объем, который в последствии позволит оценить пористость бумаги и картона, при формировании 3Д-микроструктуры волокнистого каркаса, а поверхность волокна позволит оценить активность материала, причем это прямой метод определения поверхности, по которому проходят физико-химические процессы между целлюлозой и реагентами, целлюлозой и водой. Эти процессы определяют физико-механические свойства бумаги и картона.

На рис. 7 представлена вкладка, которая отображает свойства объекта в программе Inventor. Необходимо отметить, что реаль-

ные размеры волокнистого материала измеряются в микронах, но построение 2Д-эскизов и в последующем 3Д-тела осуществлялись в миллиметрах, так как программа Inventor не позволяет осуществлять сложные операции над телами в мелких масштабах. После построения можно либо пересчитать значения учитывая, что объем необходимо уменьшить в 109, а площадь в 106 раз.

В данном случае представлен объем фрагмента волокна (длиной 260 мкм), который

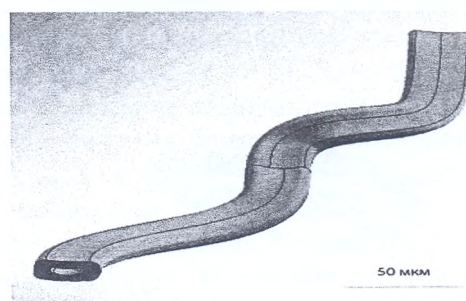


Рис. 6. 3Д-модель волокна, построенная с помощью программы Inventor.

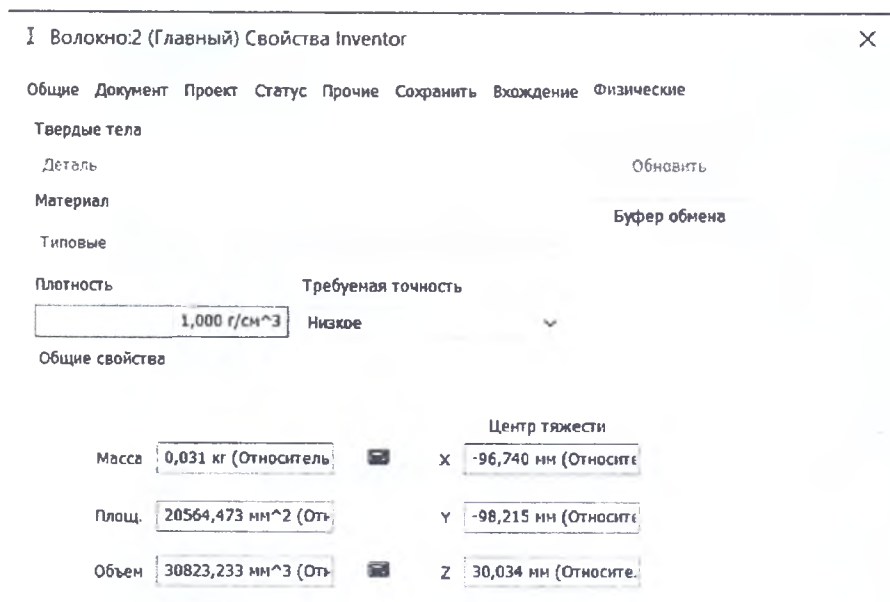


Рис. 7. Параметры волокна, определяемые с помощью программы Inventor.

составляет (с учетом масштаба, представленного на рис. 6) $30\,8223\text{ мкм}^3$, а площадь поверхности волокна будет равна 20564 мкм^2 . Массу волокна можно определить с помощью программы если задать правильно плотность, которая зависит от природы целлюлозного материала. Например, если задать плотность целлюлозного волокна в 1000 кг/м^3 масса фрагмента волокна длиной в 260 мкм и сложной конфигурацией поперечных сечений будет равна $0.037 \cdot 10^{-3}\text{ мг}$. По аналогии с результатами 3Д-моделирования микроструктуры бумаги, представленными на рис.1, в программе Inventor была отмечена область пересечения двух волокон, которая выделена на рис. 8 красным цветом.

В отличие от результата 3Д-моделирования, представленного на рис.1, предложенный метод позволяет определить площадь соединения двух волокон, чья форма максимально приближена к реальной. Если учи-

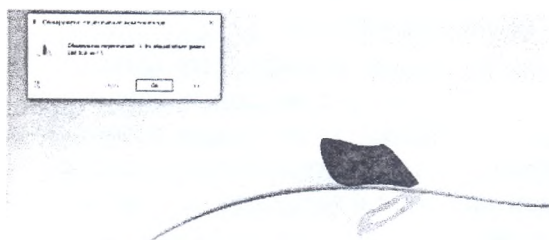


Рис. 8. Область пересечения волокон (отмечена красным цветом).

тывать, что волокна проникают друг в друга на глубину 1 мкм (задано программой), то площадь области, выделенной красным цветом, составляет $108.01/1=108\text{ мкм}^2$.

Еще одной программой, которая также позволяет создавать не только отдельные компоненты, но и их трехмерное взаимное расположение, является SolidWorks. В этой программе с помощью панели инструментов «Эскиз» можно управлять всеми аспектами создания эскиза. Команда «Сплайн» является удобным инструментом для создания эскизов сечения при переводе растровых изображений срезов волокон композиционных материалов в векторный формат трехмерных изображений (рис. 9).

Затем формируют дополнительные плоскости для создания необходимых сечений используя команды «Справочная геометрия» и «Плоскость». В зависимости от требуемой точности создается необходимое количество плоскостей. Затем на каждой из плоскостей добавляется эскиз сечения (рис. 10).

Для создания 3Д-модели по эскизам, нанесенным на каждой плоскости, используется команда «Бобышка по сечениям». Для этого последовательно соединяются каждые созданные ранее эскизы.

Для создания полости волокна в объекте применяется схожая с командой «Бобышка» функция «Вырез по сечениям». При его создании требования к эскизам сечения и точ-

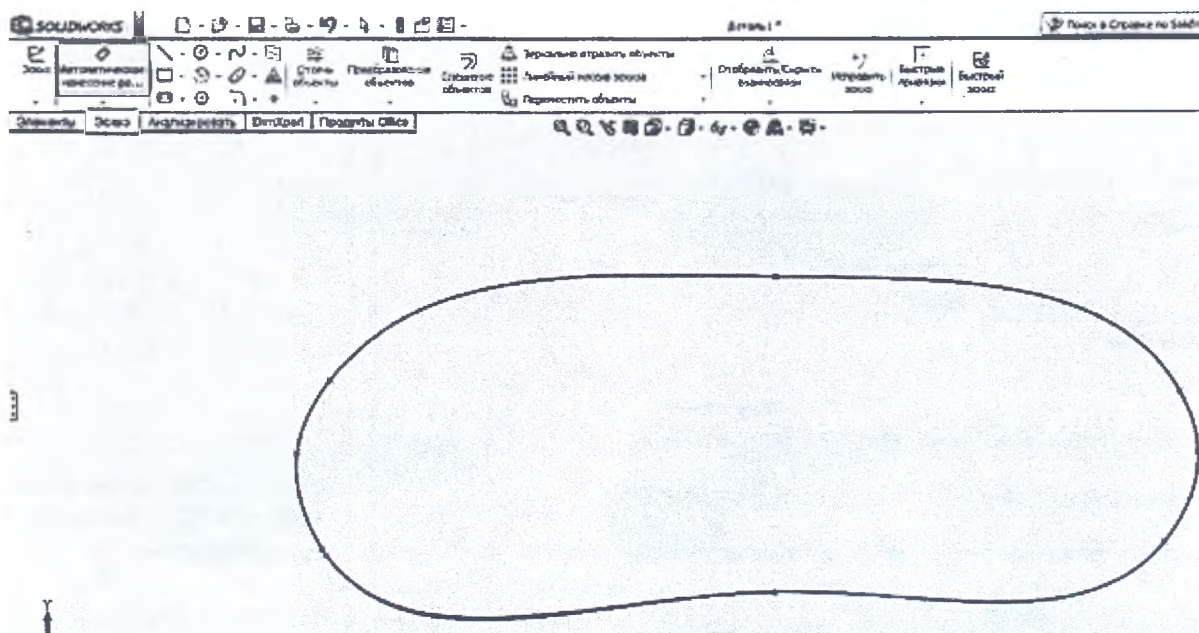


Рис. 9. Создание профиля сечения с использованием эскиза и команды «Сплайн».

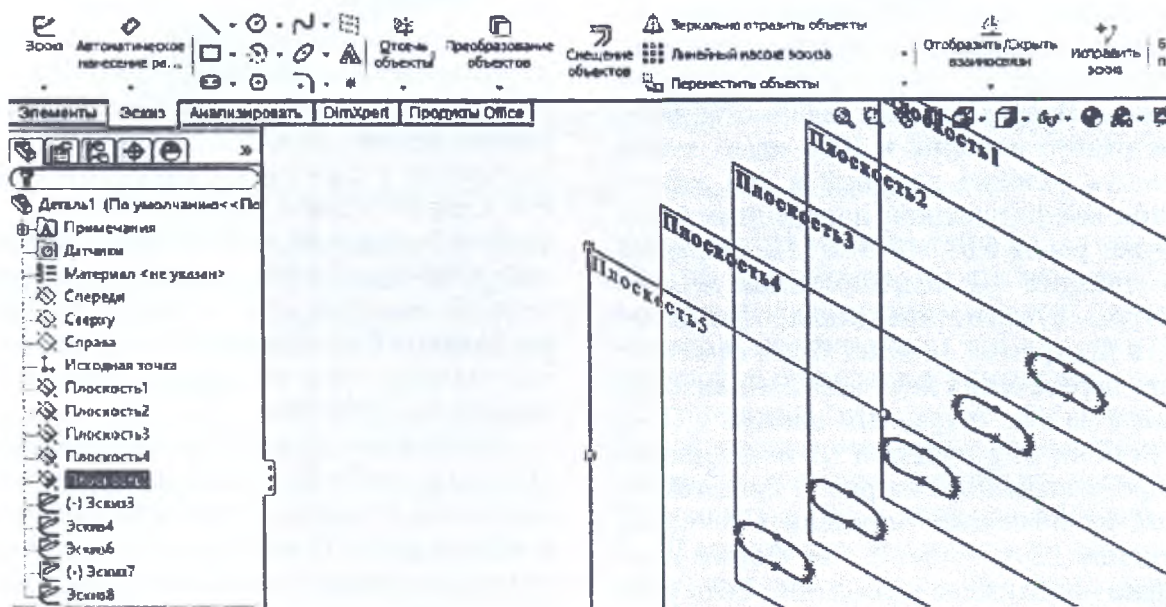


Рис. 10. Изометрия плоскостей с созданными эскизами.

кам соединения аналогичны (рис. 11 и 12).

Выбрав необходимый объект, его можно проанализировать для этого применяется команда «Массовые характеристики» из панели инструментов. В разделе «Единицы измерения массовых характеристик» указаны параметры, которые можно отобразить на экране, в частности «Плотность». Изменения, которые вносятся в окне «Свойства документа», будут применены ко всем ха-

рактеристикам в документе (рис.13). В панели «Параметры массовых характеристик» представляется возможным произвести настройку компонентов под пользователя: выбрать единицы измерения для свойств, относящихся к длине или к массе, задать объем, указать десятичные разряды для отображения.

SolidWorks с помощью команды «Сборка» позволяет создавать и анализировать вза-

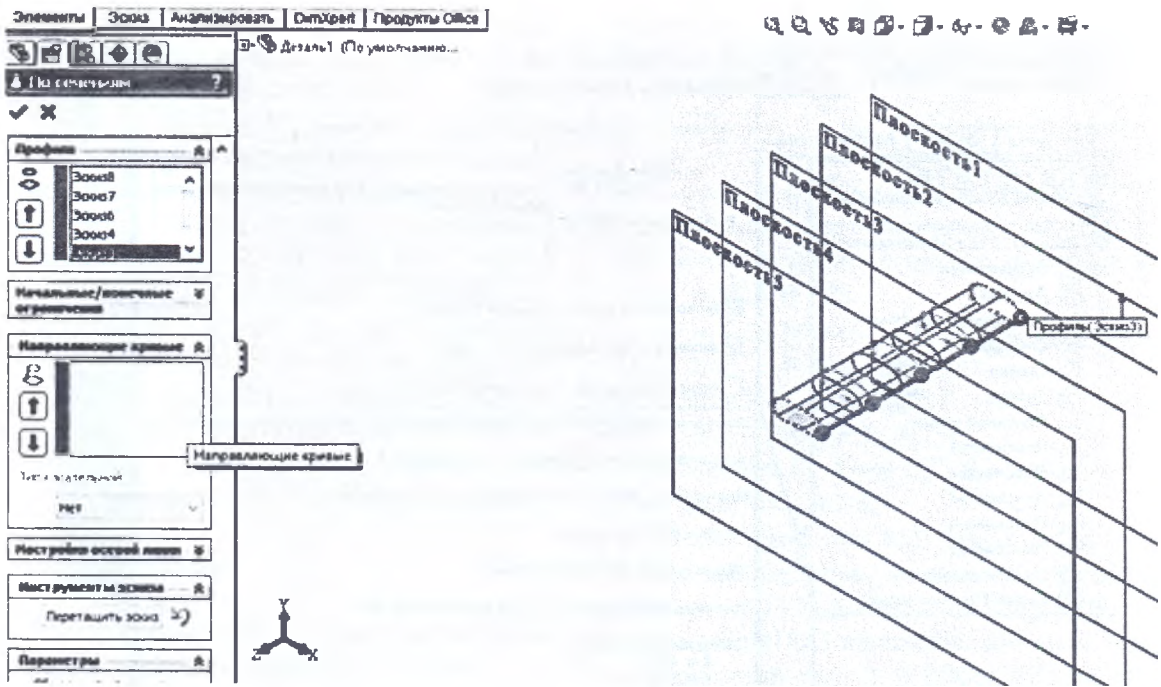


Рис. 11. Создание тела с использованием команды «Бобышка/основание по сечениям».

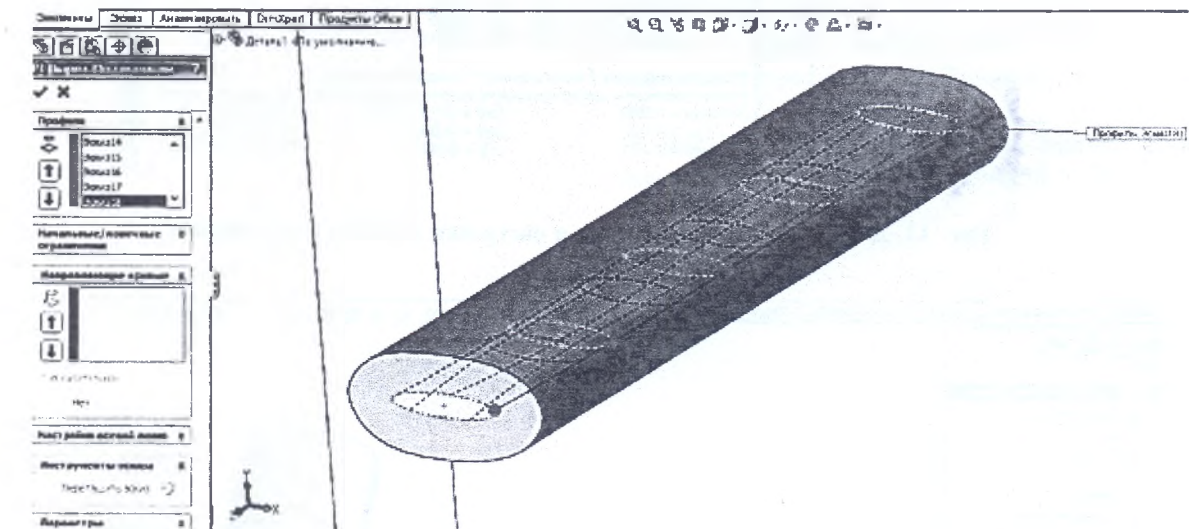


Рис. 12. Создание 3Д-модели волокна по сечениям.

имное трехмерное расположение объектов, в частности можно оценить площадь взаимодействия двух волокон.

Команда «Эскиз вдоль линии пересечения тел» открывает эскиз, затем рисует кривую пересечения двух поверхностей. Полученный эскиз также возможно проанализировать.

Таким образом, с помощью комбинации технологий электронной микроскопии и современных способов подготовки попереч-

ных сечений образцов бумаги и картона, а также графической программы, работающей в векторном формате, была создана 3Д-модель фрагмента волокна. Векторный формат 3Д-модели позволил установить объем волокна, площадь и массу, которые дают возможность оценить ряд физико-механических показателей бумаги и картона, таких как пористость, равномерность формования, плотность бумаги и картона, морфологию волокон. Представ-

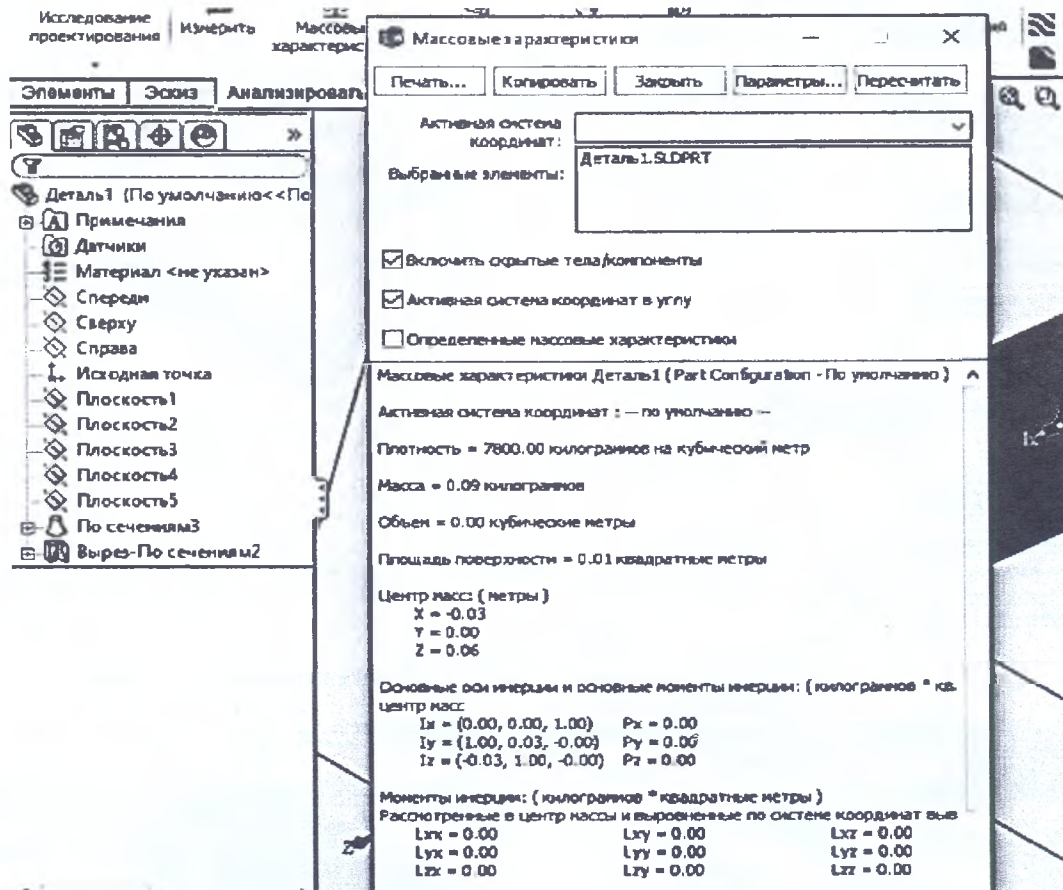


Рис. 13. Диалоговое окно просмотра и настройки характеристик объекта.

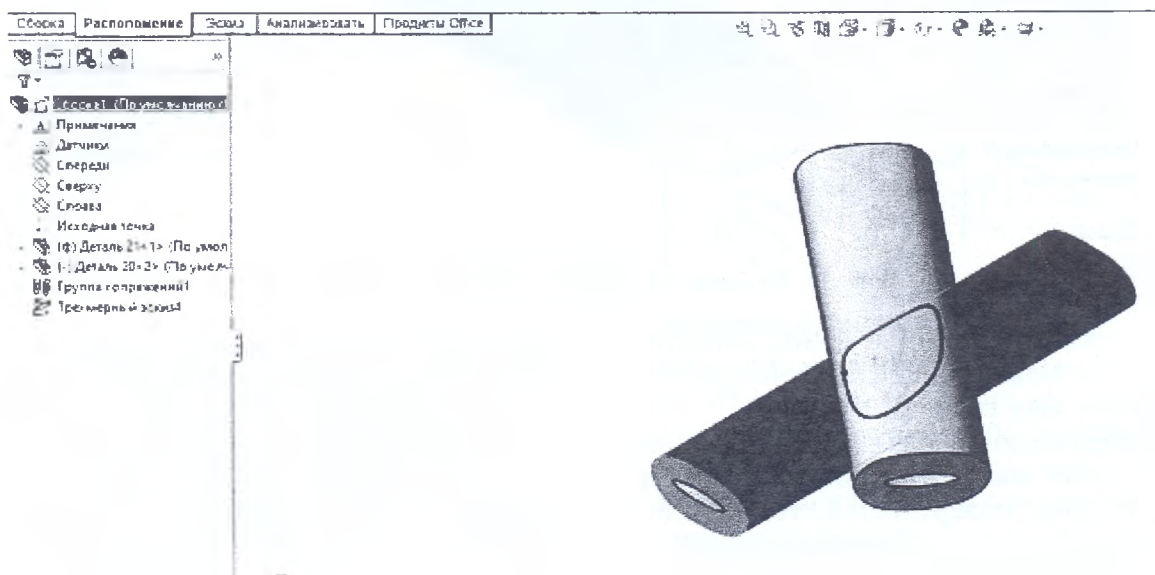


Рис. 14. Область пересечения двух волокон.

лена возможность определения поверхности взаимодействия волокон, позволяющая оценить физико-механические показатели. Известно, что по поверхности контакта волокон действуют силы межволоконных связей, которые во многом определяют прочность бумаги и картона. Важно отметить, что получаемые ранее числовые значения сил связей никогда прежде не дополнялись направлением вектора сил в 3Д-пространстве. С появлением возможности создания 3Д-микроструктуры по предложенному принципу можно оценить расположение поверхностей волокон в пространстве, а значит, и направления векторов сил межволоконного взаимодействия.

Библиографический список

1. Richard E.M., Hanberger C.C., e. a. Handbook of physical testing of paper. – New York; Basel, 2012. – 1040 p.
2. Tojaga V., Kulachenko A., Stlund S., Christian T. Gasser // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. Stockholm, 2021. – P. 1-18.
3. Iacoviello W., Du F., e. a. // Communications materials. London, 2021. – P. 69-79.
4. Borodulina S., Kulachenko A., Tjahjanto D.D. // Computational Materials Science. – Stockholm, 2015. – P. 227-240.
5. Wicht D., Schneider M., Buhlke T. Int. J. for Numerical Methods in Engineering. – Karlsruhe, 2021. No. 122. – P. 2287-231.
6. Lin B., Bai Y., Xu B.-X. Materials and Design. Darmstadt, 2021. – P. 1-10.
7. Мидуков Н.П., Куров В.С. и др. А. с. 2723972 РФ. Способ подготовки поперечного среза для контроля параметров целлюлозосодержащего материала // БИ. 2020. № 17. – С. 22.
8. Kurov V.S., Midukov N.P. // Fiber Chemistry. V. 53. No 2. 2021. – P. 115-119.
9. Midukov N.P., Kazakov Ya.V., e. a. // Fiber Chemistry. V. 52. No. 1. 2020. – P. 51-57.
10. Мидуков Н.П., Куров В.С. // Химия растит. сырья. 2021. № 4. – С. 361-371.
11. Tescan: Детекторы BSE [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.tescan.ru/products/> (дата обращения: 13.09.2022).
12. Tescan: MIRA3 microscope. Download Brochure [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.tescan-uk.com/tecnology/sem/mira3> (дата обращения: 13.09.2022).
13. Autodesk Inventor [Электронный ресурс]: Википедия. Свободная энциклопедия. – Режим доступа: https://en.wikipedia.org/wiki/Autodesk_Inventor (дата обращения: 13.09.2022).
14. Зиновьев Д. В. Основы проектирования в Autodesk Inventor. / Изд. 2-е – М., 2017. – 256 с.