Министерство науки и высшего образования Российской Федерации Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тверской государственный университет»

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ, НАНОСТРУКТУР И НАНОМАТЕРИАЛОВ

PHYSICAL AND CHEMICAL ASPECTS OF THE STUDY OF CLUSTERS, NANOSTRUCTURES AND NANOMATERIALS

FIZIKO-HIMIČESKIE ASPEKTY IZUČENIÂ KLASTEROV, NANOSTRUKTUR I NANOMATERIALOV

выпуск 12

ТВЕРЬ 2020

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145 ББК Ж36:Г5+В379 Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения о рецензировании статей и материалов для опубликования в журнале «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

Официальный сайт издания в сети Интернет: https://www.physchemaspects.ru

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2020. – Вып. 12. – 908 с.

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС77-47789 от 13.12.2011.

Издание составлено из оригинальных статей, кратких сообщений и обзоров теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Журнал предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

Переводное название: Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials

Транслитерация названия: Fiziko-himičeskie aspekty izučeniâ klasterov, nanostruktur i nanomaterialov

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145 ББК Ж36:Г5+В379

Print ISSN 2226-4442 Online ISSN 2658-4360

[©] Коллектив авторов, 2020

[©] Тверской государственный университет, 2020

УДК 620.179.118.2:539.211

Оригинальная статья

НЕКОТОРЫЕ СТАТИСТИЧЕСКИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ, ХАРАКТЕРИЗУЮЩИЕ НАНОТОПОГРАФИЮ ТЕХНИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТЕЙ

В.В. Измайлов, М.В. Новоселова ФГБОУ ВО «Тверской государственный технический университет» 170026, Россия, Тверь, наб. А. Никитина, 22 iz2v@tvcom.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.609

Аннотация: Исследована нанотопография технических поверхностей деталей из высоколегированной термообработанной стали и электротехнического серебра после финишной механической обработки. Экспериментально определены функции плотности вероятности параметров нанотопографии – высот выступов и радиусов кривизны их вершин, которые необходимы для теоретического описания процессов контактного взаимодействия технических поверхностей (на примере поверхностей и стали). Установлено, что распределение указанных наношероховатости сильно асимметрично и далеко от нормального. Доказано, что для исследованных поверхностей плотность вероятности указанных наношероховатости адекватно описывается бета-распределением. Достоверность данного заключения подтверждается с помощью критериев согласия Пирсона γ^2 и Романовского.

Ключевые слова: поверхность, нанотопография, параметры, плотность вероятности, бета-распределение, критерии согласия.

1. Введение

Практически любое современное техническое устройство состоит из множества взаимодействующих между собой деталей. Это взаимодействие во многих случаях происходит при непосредственном контактировании деталей и заключается в передаче через контакт различных по физической природе потоков: силовых, энергетических (тепловых, электрических) и т.п. Очевидно, обеспечение качества изделия в целом невозможно без обеспечения качества этих многочисленных контактных соединений, которое в свою очередь в значительное степени является функцией качества контактирующих поверхностей. Не удивительно, что качеству поверхности уделяется большое внимание [1-4].

Среди ключевых факторов, определяющих качество поверхности различных деталей, не последнее место занимает топография поверхности. Как мы уже отмечали ранее, исследованию топографии технических поверхностей посвящено большое количество работ [5]. Большинство из них содержит результаты исследования топографии на микроуровне (шероховатость и волнистость), а наноуровень (так называемая субшероховатость, или наношероховатость) исследован меньше. Это объясняется историческим развитием технических средств измерения параметров топографии поверхности – от интерферометра и профилографа до сканирующего туннельного и атомного силового микроскопов. Данная

работа продолжает наши предыдущие исследования топографии технических поверхностей на наномасштабном уровне [5].

Как и большинство аналогичных работ, данная работа базируется на нанотопографии поверхности. статистическом описании распространенных подходов К такому описанию заключается представлении трехмерного объекта – технической поверхности – как ансамбля неровностей различного масштаба. Именно этот подход данной работе. Параметры, применяется характеризующие индивидуальную неровность, зависят от принятой модели последней. Это могут быть: высота неровности относительно некоторого базового уровня, радиус кривизны вершины неровности, угол наклона боковых сторон неровности и др. Все эти параметры по природе своей являются подчиняющимися случайными величинами, TOMV статистическому распределению.

Цель данной работы — исследовать статистические законы распределения вероятности высот выступов наношероховатости и радиусов кривизны их вершин для типичных технических поверхностей после финишной механической обработки и обосновать применимость бета-распределения для описания плотности вероятности указанных параметров.

2. Образцы и методика исследования

В качестве объекта исследования выбраны плоские поверхности металлических образцов, полученные финишными методами обработки и малую микрошероховатость. Материал имеющие высоколегированная термообработанная сталь и технически чистое серебро для электрических контактов. Непосредственным объектом исследования были параметры профиля наношероховатости исследуемых поверхностей, конкретно – высота выступов (пиков) профиля и радиус кривизны их вершин. Напомним, что, согласно действующим стандартам на параметры структуры поверхности, выступом (пиком) профиля считается направленная вовне (из тела) часть оцениваемого профиля между двумя соседними точками пересечения его со средней линией. Профилограммы наношероховатости исследованных поверхностей получены с помощью атомного силового микроскопа Solver P47 фирмы «NT-MDT». Высота пиков измерялась непосредственно h_{\cdot} профилограмме (см. рис. 1), радиус кривизны вершин рассчитывался по формуле

$$r_i = \frac{d_i^2}{8\Delta h_i},\tag{1}$$

где d_i — длина сечения выступа линией, параллельной средней линии профиля, на расстоянии Δh_i от вершины (см. рис. 1).

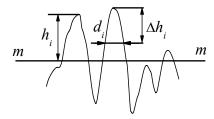


Рис. 1. Участок профилограммы. тт – средняя линия профиля.

Длина оценки (длина профилограммы, используемая для оценки изучаемого профиля) составляла 5 мкм для стальных образцов и 3 мкм для серебряных. Для каждой поверхности записано по 25 профилограмм.

Высота пиков профиля и радиус кривизны их вершин выбраны нами из многочисленных параметров топографии поверхности на том основании, что именно эти параметры используются во многих расчетных моделях различных процессов контактного взаимодействия деталей технических устройств [6,7].

3. Теоретические предпосылки

Исследованные параметры топографии поверхности – высота пика и радиус кривизны его вершины – представляют собой типичные случайные величины, ДЛЯ описания которых используются как числовые характеристики, так характеристики-функции: интегральная И дифференциальная функция распределения (плотность распределения, или вероятности). Среди множества применяемых плотность распределения характеристики топографии исследованных ДЛЯ двухпараметрическом поверхностей остановились бета-МЫ на распределении, плотность вероятности которого выражается формулой

$$f(x) = \frac{1}{B(\omega,\xi)} x^{\omega-1} (1-x)^{\xi-1},$$

где x — некоторая случайная величина, ω и ξ — параметры бетараспределения, $B(\omega,\xi)$ — бета-функция Эйлера.

Параметры ω и ξ рассчитываются по формулам [8]

$$\omega = \frac{\overline{x}^2 (1 - \overline{x})}{S^2} - \overline{x}; \quad \xi = \frac{\overline{x} (\overline{x} - 1)^2}{S^2} + \overline{x} - 1, \tag{2}$$

где \bar{x} и S^2 — выборочные оценки математического ожидания и дисперсии соответствующей случайной величины.

Наличие двух параметров делает бета-распределение очень гибким. В зависимости от их значений кривая плотности вероятности может иметь монотонный характер (как убывающий, так и возрастающий), экстремальный (как с максимумом, так и с минимумом), симметричный (при $\omega=\xi$) и асимметричный, при $\omega=\xi=1$ бета-распределение совпадает с

равномерным распределением. Таким образом, бета-распределение позволяет описать практически любое экспериментальное распределение случайной величины [9].

К достоинствам бета-распределения можно отнести также ограниченный интервал значений случайной величины x ($0 \le x \le 1$), что соответствует физической природе большинства случайных величин.

4. Результаты исследования и их обсуждение

Распределение высот выступов. В данном случае случайная величина x представляет собой отношение высоты i го выступа к максимальной высоте выступов в выборке: $x_i = h_i / h_{max}$. Величина h_{max} не тождественна стандартной характеристике R_p — максимальной высоте пика профиля, поскольку последняя определяется на каждой отдельной базовой длине, а первая на всем массиве базовых длин. Значения h_{max} и усредненные по всем базовым длинам значения R_p для исследованных образцов приведены в Таблице 1. Там же приведены параметры бетараспределения ω и ξ , рассчитанные по формуле (2) на основании статистической обработки массива экспериментальных значений высот выступов наношероховатости.

Таблица 1. Параметры распределения высот выступов наношероховатости.

Материал образца	Параме	тры бета-р	аспределения	Среднее значение R_p , нм	
	ω	ξ	$h_{\scriptscriptstyle max}$, ${ m HM}$		
Сталь	1,28	3,05	10	7,6±0,5	
Серебро	1,22	3,54	10	5,5±0,8	

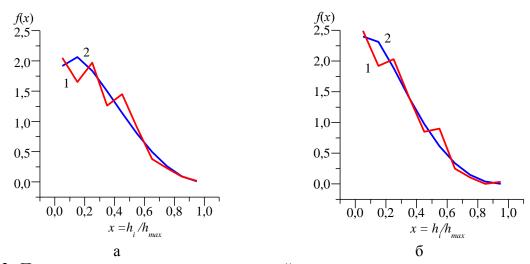


Рис. 2. Плотность вероятности относительной высоты выступов наношероховатости: a- стальной образец, б- серебряный образец. Линия 1- полигон частот, линия 2- бета-распределение.

Наглядное сравнение экспериментальной плотности вероятности относительной высоты выступов с теоретической функцией бетараспределения представлено на рис. 2.

Распределение радиусов кривизны вершин выступов. В этом случае случайная величина x равна отношению радиуса кривизны вершины i го выступа, рассчитанного по формуле (1), к максимальному значению этой величины в выборке: $x_i = r_i / r_{max}$. Значения r_{max} и параметры бетараспределения радиусов кривизны вершин выступов ω и ξ для исследованных образцов приведены в Таблице 2.

Таблица 2. Параметры распределения радиусов кривизны вершин выступов

наношероховатости.

M	Параметры бета-распределения				
Материал образца	ω	ξ	r_{max} , HM		
Сталь	0,88	2,70	1500		
Серебро	0,80	2,10	1300		

Наглядное сравнение экспериментальной плотности вероятности относительного радиуса кривизны вершин выступов с теоретической функцией бета-распределения представлено на рис. 3. Из рис. 2 и 3 видно, что распределение как высот, так и радиусов кривизны вершин выступов наношероховатости далеко от нормального. Бета-распределение визуально хорошо соответствует характеру экспериментальных распределений вероятности случайных величин.

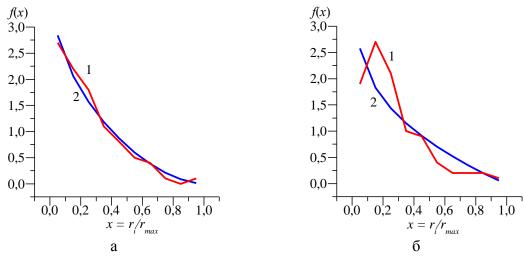


Рис. 3. Плотность вероятности относительного радиуса кривизны вершин выступов наношероховатости: а — стальной образец, б — серебряный образец. Линия 1 — полигон частот, линия 2 — бета-распределение.

Более строго степень соответствия бета-распределения экспериментальному распределению выступов по высоте проверялась с помощью критерия согласия χ^2 . Процедура проверки и ее результаты

описаны в следующем разделе.

5. Проверка гипотезы о бета-распределении параметров нанотопографии исследованных поверхностей

С помощью критерия согласия χ^2 (критерия К. Пирсона) H_0 : проверялась следующая гипотеза высоты выступов наношероховатости и радиусы кривизны их вершин подчиняются бетараспределению вероятностей. Выборочная статистика критерия рассчитывалась по формуле

$$\chi_B^2 = \sum_{i=1}^k \frac{(n_i - np_i)^2}{np_i},$$

где n_i — количество значений случайной величины, попавших в i — й интервал, k — количество интервалов случайной величины, p_i — теоретическая вероятность попадания случайной величины в i — й интервал, n — объем выборки. Гипотеза H_0 принимается на уровне значимости α , если

$$\chi_B^2 < \chi_{1-\alpha}^2 (k-l-1)$$
,

где $\chi^2_{l-\alpha}(k-l-1)$ — квантиль порядка $1-\alpha$ распределения χ^2 с (k-l-1) степенями свободы, l — число параметров распределения, оцениваемых по выборке. В нашем случае k=10, l=2 (два параметра бета-распределения), поэтому число степеней свободы равно 7. Значения χ^2_B и $\chi^2_{l-\alpha}(7)$ приведены в Таблице 3. Как видно из Таблицы 3, нет оснований отвергнуть нулевую гипотезу, т.е. можно считать, что расхождения теоретических и экспериментальных распределений случайны.

Таблица 3. Значения критерия согласия Пирсона χ^2 .

Материал образца	Выборочная с	гатистика χ_B^2	Значения квантиля $\chi^2_{1-\alpha}(7)$		
	для случайно	й величины	для различных уровней значимости		
	Высота h_i	Радиус r_i	$\alpha = 0,1$	$\alpha = 0.05$	$\alpha = 0.02$
Сталь	15,6	8,3	12.0	14,1	16,6
Серебро	7,3	13,4	12,0		

Воспользуемся дополнительно простым критерием Романовского [9], также основанным на использовании статистики χ_B^2 . Нулевая гипотеза принимается при выполнении условия

$$R = \frac{\left|\chi_B^2 - f\right|}{\sqrt{2f}} < 3,$$

где f — число степеней свободы (в нашем случае по-прежнему f = 7). Данные Таблицы 3 свидетельствуют, что для всех рассмотренных случаев R < 3.

Таким образом, есть веские основания утверждать, что распределение высот выступов наношероховатости и радиусов кривизны их вершин для исследованных поверхностей подчиняется бетараспределению вероятностей.

6. Заключение

Исследование нанотопографии технических поверхностей показало, что такие важные параметры качества поверхности, как высота выступов наношероховатости и радиус кривизны вершин выступов, представляющие случайные величины, типичные ΜΟΓΥΤ характеризоваться статистической функцией плотности вероятности, конкретно – бетараспределением. С помощью критериев согласия показана адекватность качестве теоретической функции бета-распределения в вероятности. Полученные результаты могут быть использованы для теоретического описания процессов контактного взаимодействия технических поверхностей.

Библиографический список:

- 1. **Уайтхауз, Д.** Метрология поверхностей. Принципы, промышленные методы и приборы / Д. Уайтхауз. Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2009. 472 с.
- 2. **Лич, Р.** Инженерные основы измерений нанометровой точности / Р. Лич. Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2012. 400 с.
- 3. **Григорьев, А.Я.** Физика и микрогеометрия технических поверхностей А.Я. Григорьев. Минск: Беларуская навука, 2016. 247 с.
- 4. **Суслов, А.Г.** Инженерия поверхности деталей / А.Г. Суслов, В.Ф. Безъязычный, Ю.В. Панфилов и др. ; под. ред. А.Г. Суслова. М.: Машиностроение, 2008. 320 с.
- 5. **Измайлов, В.В.** О параметрах нанотопографии технической поверхности и ее профиля / В.В. Измайлов, М.В. Новоселова // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2018. Вып. 10. С. 313-321. DOI: 10.26456/pcascnn/2018.10.313.
- 6. **Thomas, T.R.** Rough surfaces / T.R. Thomas. London: Imperial College Press, 1999. 278 p.
- 7. **Попов, В.Л.** Механика контактного взаимодействия и физика трения. От нанотрибологии до динамики землетрясений / В.Л. Попов. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2013. 352 с.
- 8. **Хан, Г.** Статистические модели в инженерных задачах / Г. Хан, С. Шапиро. М.: Изд-во Мир, 1969. –396 с.
- 9. **Кобзарь, А.И.** Прикладная математическая статистика. Для инженеров и научных работников / А.И. Кобзарь. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. 816 с.

References:

1. Whitehouse, D. Surfaces and their measurement / D. Whitehouse. - Oxford: Elsevier Science & Technology, 2004.-432 p.

Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. — 2020. — Вып. 12

- 2. **Leach, R.K.** Fundamental principles of engineering nanometrology / R.K. Leach. Oxford, UK, Burlington USA: Elsevier Inc., 2010. 352 p. DOI: 10.1016/C2009-0-20339-4.
- 3. **Grigor'ev, A.Ya.** Fizika i mikrogeometriya tekhnicheskikh poverkhnostei [Physics and microgeometry of engineering surfaces] / A.Ya. Grigor'ev. Minsk: Belaruskaya navuka, 2016. 247 p. (In Russian).
- 4. **Suslov, A.G.** Inzheneriya poverkhnosti detalei [Engineering of machine parts surfaces] / A.G. Suslov, V.F. Bez"yazychnyi, Yu.V. Panfilov i dr.; ed. by A.G. Suslov. M.: Mashinostroenie, 2008. 320 p. (In Russian).
- 5. **Izmailov, V.V.** O parametrakh nanotopografii tekhnicheskoi poverkhnosti i ee profilya [On nanotopographic parameters of engineering surface and its profile] / V.V. Izmailov, M.V. Novoselova // Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials. 2018. I. 10. P. 313-321. DOI: 10.26456/pcascnn/2018.10.313. (In Russian).
- 6. **Thomas, T.R.** Rough surfaces / T.R. Thomas. London: Imperial College Press, 1999. 278 p.
- 7. **Popov, V.L.** Contact mechanics and friction. Physical principles and applications / V.L. Popov. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag GmbH, 2017. XVII, 391 p. DOI: 10.1007.978-3-662-53081-8.
- 8. **Hahn, G.J.** Statistical models in engineering / G.J. Hahn, S.S. Shapiro. New York: John Wiley & Sons Inc., 1967. 355 p.
- 9. **Kobzar, A.I.** Prikladnaya matematicheskaya statistika. Dlya inzhenerov i nauchnykh rabotnikov [Applied mathematical statistics. For engineers and scientists] / A.I. Kobzar. M.: FIZMATLIT, 2006. 816 p. (In Russian).

Original paper

SOME STATISTICAL DISTRIBUTIONS, WHICH DESCRIBE THE NANOTOPOGRAPHY OF TECHNICAL SURFACES

V.V. Izmailov, M.V. Novoselova Tver State Technical University, Tver, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.609

Abstract: The nanotopography of engineering surfaces of machine parts made of high alloy heattreated steel and electric silver after finishing mechanical treatment was studied. The probability density functions of the nanotopography parameters – the heights of peaks and the radii of curvature of their vertices – were experimentally determined. These parameters are necessary for theoretical description of processes of the contact interaction of engineering surfaces (exemplifying on surfaces of silver and steel). It is established that the distributions of the above mentioned nanoroughness parameters are essentially asymmetrical and are far from normal ones. It has been proved that for the studied surfaces the probability densities of the above mentioned nanoroughness parameters are adequately described by the beta-distribution. The validity of this conclusion is confirmed by the fitting criteria such as χ^2 (K. Pearson's criterion) and Romanovsky's criterion.

Keywords: surface, nanotopography, parameters, probability density, beta-distribution, fitting criteria.

Измайлов Владимир Васильевич – д.т.н., профессор кафедры прикладной физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный технический университет»

Новоселова Марина Вячеславовна — к.т.н., доцент кафедры прикладной физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный технический университет»

Vladimir V. Izmailov – Dr. Sc., Professor, Department of Applied Physics, Tver State Technical University Marina V. Novoselova – Ph. D., Docent, Department of Applied Physics, Tver State Technical University

Поступила в редакцию/received: 10.04.2020; после рецензирования/revised: 15.05.2020; принята/ассерted 20.05.2020.