

УДК 544.226; 544. 016

АНАЛИЗ, ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СВОЙСТВ, ПОДБОР ОПТИМАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ НАНОЧАСТИЦ ФЕРРИТОВЫХ МАТЕРИАЛОВ

ANALYSIS, PROGNOZIROVANIE PROPERTIES, SELECTION OF OPTIMAL PROCESS PARAMETERS FOR PRODUCING NANOPARTICLES OF FERRITE MATERIALS

С.В. Блажевич, Т.Г. Кузьмичева
S.V. Blazhevich, T.G. Kuzmicheva

Белгородский государственный национальный исследовательский университет, Белгород, Россия
308015, ул. Победы, д. 85;

National Research University "Belgorod State University" (NRU "BelSU"),
Pobedy 85 Belgorod, Russia, 308015

E-mail: blazh@bsu.edu.ru

Аннотация

Проведено прогнозирование свойств и подбор оптимальных параметров процесса получения наночастиц ферритовых материалов.

Abstract

The prediction of properties and the selection of optimal parameters for the process of obtaining nanoparticles of ferrite materials are done.

Ключевые слова: гексаферрит, ферритовые наночастицы, прогнозирование свойств, метод анализа иерархий.

Keywords: hexaferrite, ferrite nanoparticles, the prediction of the properties, method of analysis of hierarchies.

Введение

Востребованность использования магнитных наносистем в современных высокотехнологических устройствах обуславливает перспективность их развития.

Магнитные нанокристаллические частицы ферритовых материалов обладают уникальными свойствами, которые зависят от их размеров. Малые размеры наночастиц, большая величина отношения площади поверхности наночастиц к объему, изменение их свойств в зависимости от размера приводит к тому, что ферритовые наноструктуры обладают множеством новых свойств, не характерных для объемных материалов и обусловленных проявлением квантовых эффектов. В силу названных преимуществ, эти материалы имеют широкое разнообразие областей использования, например, в качестве носителей информации, магнитных жидкостей, в электронной промышленности, в биомедицине для целевой доставки лекарств и гипертермии раковых клеток. Получение и исследование нанокристаллических материалов является важным звеном в создании техники нового поколения.

Разнообразие и уникальность свойств наночастиц ферритовых материалов зависит от их состава, размера частиц, технологии получения, магнитных характеристик, времени и температуры ферритизации.

Выбор технологии получения ферритовых материалов зависит от таких параметров, как коэрцитивная сила H_c и поле магнитной анизотропии H_a . Используя разные технологии, получают ферритовые порошки с разными выходными характеристиками.

Сравнительный анализ результатов, полученных при использовании различных технологий, показал, что некоторые из них не позволяют получать материалы, обладающие свойствами суперпарамагнетизма и соответствующим размером частиц, близким к критическому. Проведенное имитационное моделирование позволяет предположить, что в результате синтезирования порошков феррита бария криохимическим методом удастся получить магнитные характеристики, близкие к теоретическим.

Анализируя литературные источники, авторы пришли к выводу, что наиболее важными процедурами для характеристики параметров получаемых материалов являются [1, 2]:

- сравнение и выбор необходимой технологии путем подбора оптимального сочетания получаемых параметров с учетом различной степени их важности;
- использование метода анализа иерархий для оценивания показателей предпочтительности указанных технологий для получения высокодисперсных порошков с оптимальными значениями параметров.

Иерархия для выбора оптимальной технологии получения ферритовых материалов с определенными свойствами имеет вид:

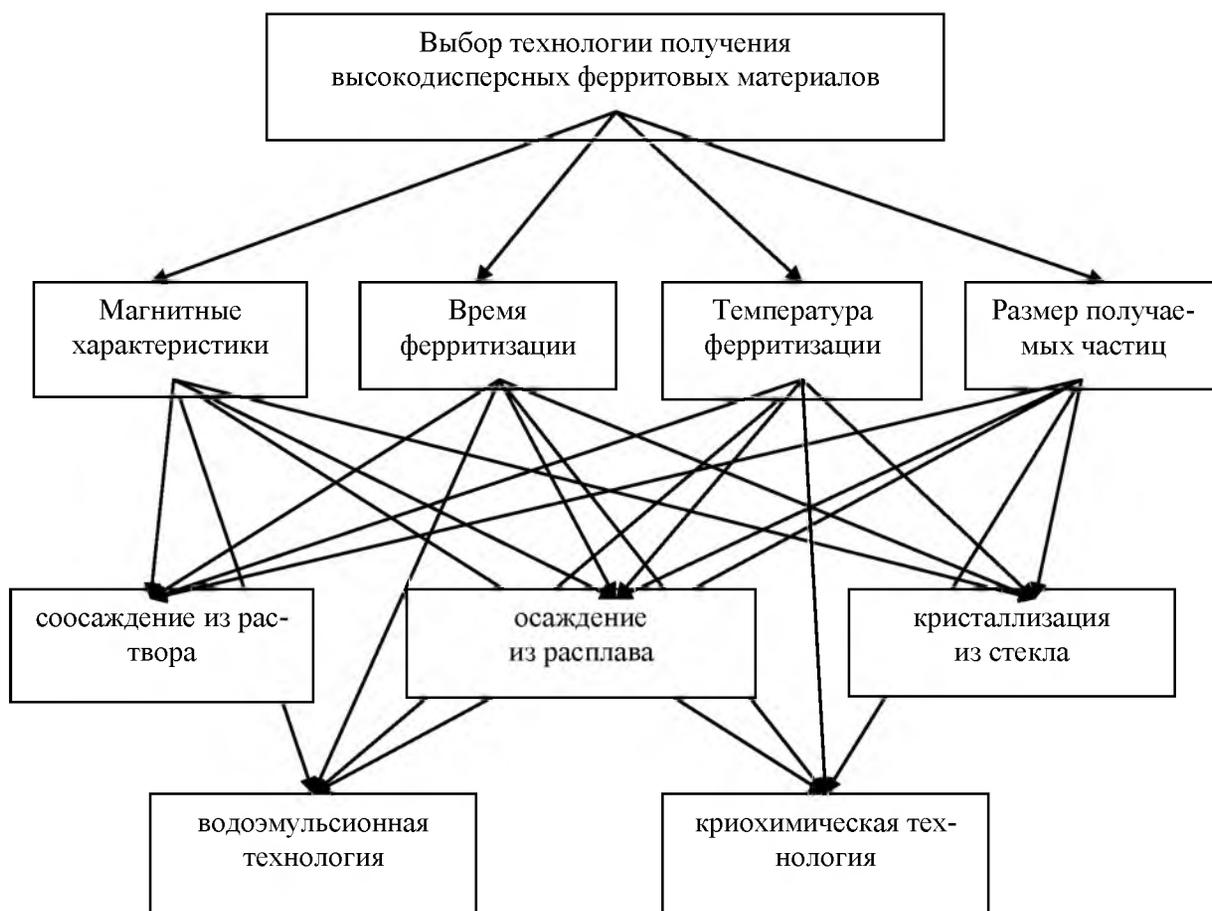


Рис. 1. Иерархия для выбора оптимальной технологии получения ферритовых материалов с определенными свойствами

Fig. 1. Hierarchy for the choice of optimum technology of receiving ferrite materials with certain properties



Произведем парное сравнение критериев для того чтобы определить, какой из них является наиболее важным при выборе технологии получения ферритовых материалов с заданными свойствами.

Для этой цели разработаны методы анализа иерархий (МАИ).

Метод анализа иерархий — математический инструмент системного подхода к сложным проблемам принятия решений.

МАИ позволяет в интерактивном режиме найти такой вариант (альтернативу), который наилучшим образом согласуется с его пониманием сути проблемы и требованиями к её решению.

МАИ позволяет понятным и рациональным образом структурировать сложную проблему принятия решений в виде иерархии, сравнить и выполнить количественную оценку альтернативных вариантов решения. Анализ проблемы принятия решений в МАИ начинается с построения иерархической структуры, которая включает цель, критерии, альтернативы и другие рассматриваемые факторы, влияющие на выбор. Эта структура отражает понимание проблемы.

Каждый элемент иерархии может представлять различные аспекты решаемой задачи, причем во внимание могут быть приняты как материальные, так и нематериальные факторы, измеряемые количественные параметры и качественные характеристики, объективные данные и субъективные экспертные оценки. Иными словами, анализ ситуации выбора решения в МАИ напоминает процедуры и методы аргументации, которые используются на интуитивном уровне.

Следующим этапом анализа является определение приоритетов, представляющих относительную важность или предпочтительность элементов построенной иерархической структуры, с помощью процедуры парных сравнений. Безразмерные приоритеты позволяют обоснованно сравнивать разнородные факторы, что является отличительной особенностью МАИ. На заключительном этапе анализа выполняется синтез (линейная свертка) приоритетов на иерархии, в результате которой вычисляются приоритеты альтернативных решений относительно главной цели. Лучшей считается альтернатива с максимальным значением приоритета.

1) Элементы вектора приоритетов находятся по формуле

$$V_i = \sqrt[n]{\prod_{j=1}^n a_{ij}} \quad (1)$$

Каждый вектора приоритетов должен быть нормализован путем деления каждого его элемента на сумму всех элементов:

$$V_i^{норм} = \frac{V_i}{\sum_{i=1}^n V_i} \quad (2)$$

2) Для нахождения λ_{max} суммируется каждый столбец суждений, затем сумма первого столбца умножается на величину первого элемента нормализованного вектора приоритетов, сумма второго столбца – на второй элемент и т.д. Затем полученные числа суммируются, в результате чего получаем λ_{max} .

3) ИС=(λ_{max} -n)/(n-1), где n – число сравниваемых элементов.

4) ОС=ИС/Случайную согласованность

Величину случайной согласованности можно получить из таблицы 1.



Табл. 1

Table 1

Величина случайной согласованности

The value of the random consistency

Размер матрицы	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Случайная согласованность	0	0	0,58	0,90	1,12	1,24	1,32	1,41	1,45	1,49

6) Нахождение отношения согласованности иерархии

7) Нахождение вектора глобальных приоритетов.

Значения ставятся по шкале Саати [4].

Используем метод анализа иерархий для задачи выбора оптимальной технологии создания магнитных наночастиц.

Табл. 2

Table 2

Матрица парных сравнений критериев

Matrix of paired comparisons of criteria

Выбор технологии	Магнитные характеристики	Время ферритизации	Температура ферритизации	Размер частиц	Нормированный вектор локальных приоритетов критериев
Магнитные характеристики	1	1	6	1/8	0.1330216
Время ферритизации		1	6	1/8	0.1330216
Температура ферритизации			1	1/9	0.0336915
Размер частиц				1	0.7002652

ИС= 0.1330418; ОС= 0.1478242,

Где ИС -это индекс согласования, ОС -это отношения согласованности.

Таким образом, среди выбранных критериев наибольшую важность имеет размер частиц.

Табл. 3

Table 3

Матрица сравнений критериев для магнитных характеристик

The matrix of comparisons of criteria for magnetic characteristics

Магнитные характеристики	Соосаждение из раствора	Соосаждение из расплава	Кристаллизация из стекла	Водоземulsionная технология	Криохимическая технология	Нормированный вектор локальных приоритетов альтернатив по критерию Магнитные характеристики
Соосаждение из раствора	1	1	4	3	1/6	0.1449571
Соосаждение из расплава		1	4	3	1/6	0.1449571
Кристаллизация из стекла			1	1/2	1/9	0.0406588
Водоземulsionная технология				1	1/8	0.0616273
Криохимическая технология					1	0.6077997

ИС= 0.0526844; ОС= 0.0470396



По критерию «Магнитные характеристики» наилучшей является криохимическая технология [3].

Табл. 4
Table. 4

Матрица сравнений критериев для количества времени процесса ферритизации
The matrix of comparisons of criteria for the amount of time the process of ferritization

Время ферритизации	Соосаждение из раствора	Соосаждение из расплава	Кристаллизация из стекла	Водоэмульсионная технология	Криохимическая технология	Нормированный вектор локальных приоритетов альтернатив по критерию Время ферритизации
Соосаждение из раствора	1	2	5	7	1/4	0.2243011
Соосаждение из расплава		1	3	6	1/5	0.1423240
Кристаллизация из стекла			1	3	1/8	0.0605078
Водоэмульсионная технология				1	1/9	0.0309957
Криохимическая технология					1	0.5418714

ИС= 0.0721647; ОС= 0.0644328

При использовании криохимической технологии затрачивается наименьшее количество времени на процесс ферритизации.

Табл. 5
Table. 5

Матрица сравнений критериев для температуры ферритизации
The matrix of comparisons of criteria for temperature ferritization

Температура ферритизации	Соосаждение из раствора	Соосаждение из расплава	Кристаллизация из стекла	Водоэмульсионная технология	Криохимическая технология	Нормированный вектор локальных приоритетов альтернатив по критерию Температура ферритизации
Соосаждение из раствора	1	4	3	4	5	0.4709871
Соосаждение из расплава		1	1/2	1	3	0.1293520
Кристаллизация из стекла			1	2	4	0.2199715
Водоэмульсионная технология				1	2	0.1192765
Криохимическая технология					1	0.0604130

ИС= 0.0276255; ОС= 0.0246656

Наименьшая температура ферритизации достигается при использовании технологии соосаждения из раствора.



Матрица сравнений критериев для размера частиц
The matrix of comparisons of criteria for the particle size

Размер частиц	Соосаждение из раствора	Соосаждение из расплава	Кристаллизация из стекла	Водоземulsionная технология	Криохимическая технология	Нормированный вектор локальных приоритетов альтернатив по критерию Размер частиц
Соосаждение из раствора	1	1/2	3	1/4	1/5	0.0795977
Соосаждение из расплава		1	5	6	1/8	0.1999404
Кристаллизация из стекла			1	1/8	1/7	0.0347562
Водоземulsionная технология				1	1/4	0.1415390
Криохимическая технология					1	0.5441667

ИС= 0.3333516; ОС= 0.2976353

Таким образом, криохимическая технология дает наименьший размер частиц.
Вектор глобальных приоритетов технологий:

соосаждение из раствора – 0.1207271
осаждение из расплава – 0.1825840
кристаллизация из стекла – 0.0452071
водоземulsionная технология – 0.1154543
криохимическая технология – 0.5360275
Общая согласованность иерархии: 0.1901063

Таким образом, наиболее приемлемой технологией получения ферритовых порошков с магнитными характеристиками, близкими к теоретическим, является криохимическая технология.

Модели регрессионного анализа и аппарат временных рядов можно использовать для анализа процесса ферритизации и прогноза значений.

Регрессионный анализ позволяет оценить зависимость характеристики от составляющих ее значение факторов, определить, как будет меняться зависимая величина при изменении значений фактора.

Анализ зависимости размера частиц от времени процесса ферритизации показал, что она может быть задана уравнением парной линейной регрессии.

При исследовании меняющегося во времени процесса, наилучшим методом его анализа и прогноза является построение временного ряда.

Зависимость однофазности от времени может быть задана кривой с насыщением. При этом должна быть установлена нижняя или верхняя граница изменения уровней ряда. В качестве такой кривой могут быть использованы гиперболы вида:

$$y = a + \frac{b}{t}; \text{ либо } y = a + \frac{b}{c+t}. \quad (3)$$



Равносторонняя гипербола ($y = a + \frac{b}{t}$) при $b > 0$ означает, что уровни ряда снижаются во времени и асимптотически приближаются к параметру a .

Если $b < 0$, то уравнение тренда $y = a + \frac{b}{t}$ характеризует тенденцию к росту уровней ряда с асимптотической границей, равной параметру a .

Таким образом, изучение фундаментальных свойств синтезированных порошков позволит установить механизмы их формирования и возможности управления ими. А это позволит нам выбрать наиболее эффективные методы создания микро- и наноразмерных магнитных порошков с заданными характеристиками.

Список литературы

References

1. Блажевич С.В., Кузьмичева Т.Г., Ольховик Л.П., Камзин А.С., Черников Н.В., Ткаченко С.В. 2011. Синтез высокодисперсного гексаферрита кальция и исследование его структурных и магнитных параметров. *Физикохимия поверхности и защита материалов*, 47(5): 534-540.

Blazhevich S. V., Kuz'micheva T. G., Olkhovyk L. P., Kamzin A. S., Chernikov N.V., Tkachenko S. V. 2011. Synthesis of highly dispersed hexaferrite calcium and study its structural and magnetic parameters, physical chemistry of surfaces and protection materials, 47(5): 534-540.

2. Blazhevich S.V., Kuzmicheva T.G., Ol'khovik L.P., Kamzin A.S., Chernikov S.V., Tkachenko N.V. 2011. Synthesis of Fine-Grained Calcium Hexaferrite and Investigation of Its Structural and Magnetic Parameters, *Protection of Metals and Physical Chemistry of Surfaces*, 47(5): 638-644.

3. Саати Т.Л. 1989. Принятие решений. Метод анализа иерархий. М.: Радио и связь, 316 с.

Saaty T. L. 1989. Decision Making. Method of analysis of hierarchies. M.: Radio and communication, 316.

4. Mozul K.A., Ol'khovik L.P., Shurinova E.V., Blazhevich S.V., Kuzmicheva T.G., Chernikov S.V., Kamzin A.S. 2011. Magnetic Properties of Nanodispersed Ferrite Powders with Cryochemical Prehistory, *Physics of the Solid State*, 53(11): 2284-2289.