

Відгук

офіційного опонента на дисертаційну роботу Красікової Ірини Євгеніївни «Нові кількісні методи визначення структури матеріалів у електронній мікроскопії»,

яку представлено на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук зі спеціальності 01.04.07 – фізика твердого тіла

Дисертаційна робота Красікової І.Є. присвячена вивченню способів характеристики структури матеріалу і створення методики математично визначеної кількісної характеристики структури матеріалу по його електронно-мікроскопічним зображенням.

Актуальність теми цього дослідження обумовлена кількома чинниками.

По-перше, це широке поширення різноманітних фізичних методів аналізу структури матеріалів, які засновані на зовнішньому впливі на матеріали (наприклад із застосуванням рентгенівського, видимого, ультрафіолетового, інфрачервоного випромінювання, впливу з боку іонів, атомів, нейтронів, тощо) із викликом певної реакції структури самого матеріалу. Відповідно до отриманої реакції матеріалу можна простежити функціональні залежності одного або кількох параметрів цього зовнішнього впливу (енергія, температура, вага, інтенсивність, час, кут, фаза) від параметрів структури матеріалу зразка. В практичному контексті ці залежності є надзвичайно важливими для оптимізації експлуатаційних характеристик цього матеріалу.

По-друге, з практичної точки зору в останні роки надзвичайно актуальною стала проблема вивчення зв'язку між структурою і фізико-механічними характеристиками нових синтезованих композиційних матеріалів. Варто зазначити, що у той час як кількість методів дослідження структур постійно збільшується, їх інформаційний потенціал в сенсі кількісної характеристики структури розкрито не в достатній мірі. Тому формування та визначення нових кількісних характеристик структури матеріалів — це одне з ключових завдань сучасної фізики твердого тіла. Процес створення нових та підвищення продуктивності існуючих матеріалів ґрунтується на вирішенні саме проблеми створення методики математично визначеної кількісної характеристики структури матеріалу.

З фундаментальної наукової точки зору надзвичайно важливими є результати, які стосуються дослідження методів та алгоритмів реалізації математичних моделей застосування фрактального та мультифрактального аналізу для обробки зображень елементів структури на електронно-мікроскопічних зображеннях поверхні матеріалу. Красиковій І.Є. вдалося розробити способи застосування цих математичних моделей до вивчення фрактальних та мультифрактальних характеристик структури матеріалів та дослідження їх зв'язку з їх фізико-механічними властивостями. Авторці вдалося успішно поєднати експериментальні дослідження (дані електронної

мікроскопії щодо структури матеріалів), чисельні розрахунки (методи фрактального та мультифрактального аналізу) та теоретичні уявлення (про наявність зв'язку між структурними елементами на різних масштабних рівнях). Це дало можливість Красиковій І.Є. розробити та обґрунтувати рекомендації по методиці отримання зображень структури матеріалів для статистично надійного обчислення фрактальних та мультифрактальних характеристик не тільки досліджуваних структур, але й виділеної системи границь зерен (за допомогою розробленого та реалізованого алгоритму, що дозволяє по зображенню структури виділити множину границь в структурі).

З практичної точки зору надзвичайно важливими є результати про створення нових інструментальних засобів, а саме програмного забезпечення, яке реалізує розроблені фундаментальні методи та алгоритми у вигляді зручної для користувача комп'ютерної програми для кількісної обробки зображень матеріалів. Загалом це дозволило автору вперше отримати кореляційну залежність між структурними характеристиками композиту $AlB_{12}-AlN$ та його мікротвердістю шліфів, встановити кореляційну залежність мультифрактальних характеристик зразків осажденного магнетронним розпиленням титану з твердістю і приведеним модулем пружності, встановити кореляційну залежність мультифрактальних характеристик зразків плівок хрому, які осажені в аргоні, з їх твердістю. Усі ці кількісні і статистично надійні результати дозволяють з якісно іншої точки зору розглянути природу зовнішнього впливу та функціональні залежності одного або кількох параметрів цього впливу на матеріали.

Стосовно загальної характеристики дисертаційної роботи Красикової І.Є. варто виділити наступні аспекти. У вступі чітко заявлено і обґрунтовано актуальність обраної теми, сформульовано мету і окреслено задачі дослідження, перераховано об'єкт, предмет і методи дослідження. Красикова І.Є. обґрунтувала наукову новизну і практичне значення одержаних результатів, а також навела інформацію про особистий внесок, апробацію результатів дослідження, публікацій за темою дисертації і структуру дисертації.

У першому розділі дисертаційної роботи Красикова І.Є. наводить літературні дані в контексті наукової проблеми і теми дослідження, де вона продемонструвала високоякісне знання наукової літератури і наукову ерудицію, що впливає із представленого автором літературного огляду і критичного аналізу наявних результатів і методів дослідження.

У другому розділі дисертаційної роботи Красикова І.Є. описує об'єкти та методики фрактальних та мультифрактальних характеристик зображень структури матеріалу. Детально описано принципи та засоби створення програмного забезпечення, яке реалізує розроблені фундаментальні методи та алгоритми у вигляді зручної для користувача комп'ютерної програми для

кількісної обробки зображень матеріалів. Особливу увагу присвячено методам оцінки систематичних і випадкових похибок в рамках дослідження. Варто відзначити надзвичайно важливий аспект, а саме вивчення впливу різноманітних чинників експерименту на стійкість алгоритму обчислення параметрів мультифрактального аналізу: кількості розрахункових точок, зсуву зображення, долі цільового об'єкту на зображенні ("забіленні"), розміру об'єкту, повороту об'єкту, тощо. Ця частина роботи є надзвичайно важливою з у фундаментальному та практичному контексті. З фундаментальної точки зору доводиться стійкість та статистична надійність запропонованої методики математично визначеної кількісної характеристики структури матеріалу по його електронно-мікроскопічним зображенням та розробленого інструментального засобу (програмного забезпечення) на його основі. З практичної точки зору автор пропонує кількісні параметри статистичної надійності методики (через обчислення таких статистичних параметрів, як середнє, дисперсія, стандартне відхилення, тощо), які дозволяють обґрунтовано робити кількісний порівняльний аналіз експериментальних даних, про що йдеться у наступних розділах.

Третій розділ дисертаційної роботи присвячено вивченню мультифрактальних характеристик електронно-мікроскопічних зображень на декількох прикладах практичного застосування.

Приводяться результати дослідження мультифрактальних характеристик електронно-мікроскопічних зображень осажденного методом магнетронного розпилення титану, та його механічних характеристик, а саме твердості і приведенного модуля пружності. Знайдено, що з ростом значень значення твердості та приведенного модуля пружності, ростуть і мультифрактальні розмірності структури плівок титану, осаженного методом магнетронного розпилення. Надзвичайно цікавим результатом є те, що кореляція фрактальних характеристик з приведеним модулем пружності виявилася меншою, ніж кореляція з твердістю.

Розглянуто мультифрактальні характеристики плівок хрому, осаджених в аргоні на кремнієвих підкладках. Доведено існування позитивної кореляції мультифрактальних характеристик зразків плівок хрому, осаджених в аргоні при різних температурах, з твердістю (з ростом значень твердості ростуть і відповідні значення мультифрактальних розмірностей).

Досліджено мультифрактальні характеристики гарячепресованих композитів $AlB_{12}-AlN$. Продемонстровано і доведено, що мультифрактальні розмірності зображень гарячепресованих композитів $AlB_{12}-AlN$ демонструють монотонну залежність від кількості AlN в складі композиту. На основі порівняння отриманих мультифрактальних і фізичних характеристик гарячепресованих композитів $AlB_{12}-AlN$ зроблено висновок про те, що з фізичними характеристиками можуть бути пов'язані не тільки

мультифрактальні розмірності площини фотографій, але і мультифрактальні розмірності побудованих на їх основі систем границь.

Варто зазначити, що аналіз і статистичну обробку експериментальних результатів, які було отримано автором було доповнено розвитком власних модельних уявлень про перебіг процесів і фізичну природу виявлених явищ. Усе це свідчить про достовірність одержаних результатів і достатньо високу наукову кваліфікацію автора.

Серед основних найбільш вагомих наукових результатів, одержаних в роботі, варто відзначити наступні:

1. Створено, протестовано і застосовано (продемонстровано на кількох практичних прикладах) кілька нових кількісних методів та алгоритмів реалізації математичних моделей застосування фрактального та мультифрактального аналізу для обробки зображень елементів структури на електронно-мікроскопічних зображеннях поверхні матеріалу.
2. Розроблено та обґрунтовано рекомендації по методиці отримання зображень структури матеріалів для статистично надійного обчислення фрактальних та мультифрактальних характеристик не тільки досліджуваних структур, але й виділеної системи границь зерен (за допомоги розробленого та реалізованого алгоритму, що дозволяє по зображенню структури виділити множину границь в структурі).
3. Створено новий інструментальний засіб, а саме програмне забезпечення, яке реалізує розроблені фундаментальні методи та алгоритми у вигляді зручної для користувача комп'ютерної програми для кількісної обробки зображень матеріалів.
4. На практичному прикладі застосування створених методів та інструментальних засобів показано, що з ростом значень значення твердості та приведенного модуля пружності, ростуть і мультифрактальні розмірності структури плівок титану, осадженого методом магнетронного розпилення. Надзвичайно цікавим і важливим результатом є те, що продемонстровано надзвичайну чутливість створених методів та засобів, яка дозволяє виявити факт, що кореляція фрактальних характеристик з приведеним модулем пружності виявилася меншою, ніж кореляція з твердістю.
5. Також на практичному прикладі показано існування позитивної кореляції мультифрактальних характеристик зображень зразків плівок хрому, осаджених в аргоні при різних температурах, з твердістю (з ростом значень твердості ростуть і значення мультифрактальних розмірностей).
6. Одним з найбільш важливих та інтригуючих результатів отримано при дослідженні мультифрактальних характеристик гарячепресованих композитів $AlB_{12}-AlN$. З одного боку показано і доведено, що

мультифрактальні розмірності зображень гарячепресованих композитів $AlB_{12} - AlN$ демонструють монотонну залежність від кількості AlN в складі композиту. Але при більш детальному розгляді завдяки надзвичайно високій чутливості запропонованого методу вдалося навіть відтворити кореляцію між немонотонними залежностями отриманих мультифрактальних і фізичних характеристик від кількості AlN в складі композиту (Рис. 34) та немонотонними залежностями мікротвердості на оброблених зображеннях (Рис. 35). Зроблено надзвичайно важливий висновок про те, що з фізичними характеристиками можуть бути пов'язані не тільки мультифрактальні розмірності площини фотографій, але і мультифрактальні розмірності побудованих на їх основі систем границь. Тобто характеристики границь можуть мати більшу інформативну цінність, ніж характеристики необроблених зображень, в першу чергу для матеріалів, що володіють розвиненими межами, наприклад, для наноматеріалів, що дуже актуально в сенсі розуміння їх поведінки.

Ці та ряд інших результатів, одержаних Красіковою І.Є., без сумніву, оригінальні, мають фундаментальну наукову значимість і можуть бути використані як для розвитку методів визначення структури матеріалів у електронній мікроскопії, на процеси структуроутворення в матеріалах, визначення та розуміння функціональних залежностей одного або кількох параметрів зовнішнього впливу і параметрів структури матеріалу зразка.

Експериментальна частина дисертації є якісною і виконана на відмінному методологічному рівні, проте поряд із цією сукупністю оригінальних і надзвичайно корисних результатів у опонента (при їх детальному розгляді) з'явилося кілька зауважень і побажань.

Зауваження та побажання

1. При аналізі отриманих результатів дуже важливо мати уявлення про фізичний просторовий масштаб існування наявних фрактальних властивостей структури. На всіх експериментальних зображеннях вказані масштабні лінійки, але в межах інструментального засобу вказані лише кількості точок. На жаль, при аналізі результатів для розуміння просторового масштабу наявних фрактальних властивостей приходиться вручну перераховувати кількість точок у фізичні розміри (тобто спочатку зрозуміти в якому діапазоні розмірів боксів спостерігається фрактальність, а потім розміри боксів перерахувати у фізичні розміри). Це не дуже зручно і бажано автоматизувати цей процес у програмному забезпеченні із виведенням фізичних розмірів.

2. З огляду на достатньо високу стабільність та стійкість запропонованого алгоритму, що показано кількісними статистичними параметрами (обчисленням середніх та дисперсій) на Рис. 8, 9, 11, та наявність аналогічних статистичних

оцінок для експериментальних даних, наприклад на Рис. 35, було б більш зрозуміло, якби аналогічні кількісними статистичними параметрами (обчисленням середніх та дисперсій) супроводжувалися усі результати щодо обчислення параметрів фрактального та мультифрактального аналізу на Рис. 32 та Рис. 34, Таблиці 1 та 3. Це особливо важливо для аналізу тонких кореляційних залежностей, які наприклад було впевнено продемонстровано для немонотонних залежностей на Рис. 34 та Рис. 35.

3. Сучасна наукова спільнота сповідує принцип відкритих даних (open data) а щодо інструментальних засобів у вигляді програмного забезпечення — принцип відкритого коду (open source code) через його розміщення на майданчиках із відкритим доступом. З огляду на надзвичайно важливу вагу отриманих результатів і велику користь для всієї наукової спільноти, бажано було розмістити ці коди (та отримані результати на деяких тестових та практичних прикладах) на таких відкритих майданчиках.

4. Підрозділ “2.2.2.2. Характеристики розробленої програми” є надзвичайно важливим і цінним з урахуванням отриманих в ньому результатів і дуже шкода, що він викладений в дуже короткий, хоча і достатньо інформативній формі. Лише цей підрозділ міг би стати темою окремого наукового дослідження, особливо з урахуванням аспектів в іншому підрозділі “2.3.2.2. Використання програми обчислення мультифрактальних характеристик зображень структури матеріалів”, де перераховуються деякі вади зображень (Рис. 28), які суттєво можуть вплинути на отриманий результат.

5. Окрім цих зауважень варто ще вказати на декілька дрібних недоліків (більшою мірою стосуються оформлення та наукового літературного стилю):

- для деяких малюнків структур в рефераті не вказано масштаб, наприклад, Рис.1 (стор.10), Рис. 2 (стор. 11), Рис. 4 (стор.14), аналогічно в тексті дисертації Рис. 9, 11, 19, 20, 28, 30,
- загалом авторка подекуди намагалась використовувати дуже довгі і нечитабельні речення, наприклад: "Так, наприклад, оскільки в структурі речовини завжди можна виділити масштаб, рівний кореляційній довжині (тобто відстані, поза якою частки речовини поведуться статистично незалежно, і яка визначає верхню межу між інтенсивною і екстенсивною поведінками щільності множини точок об'єкта), можна говорити про масову фрактальну розмірність, яку можна визначити наступним чином." на стор.51,
- подекуди замість об'єктивних тверджень використовуються суб'єктивні оціночні судження, наприклад, "ап'іорні сподівання" на с.101 у реченні із власною авторською інтерпретацією отриманих результатів (“ап'іорні сподівання на те, що мультифрактальні розмірності даного матеріалу демонструватимуть монотонну залежність від кількості AlN в складі композитів, повністю підтвердилися.”).

Проте відмічені недоліки і висловлені зауваження та побажання стосуються тільки окремих деталей проведених досліджень та структури викладення їх результатів. Вони не позначаються на сутності роботи, не знижують наукової цінності одержаних результатів і не псують загального позитивного враження від роботи. Автореферат відображає зміст дисертації і відповідає своєму призначенню. В цілому дисертаційна робота Красікової Ірини Євгеніївни «Нові кількісні методи визначення структури матеріалів у електронній мікроскопії», заслуговує позитивної оцінки і є завершеним актуальним дослідженням, що має безперечне наукове і практичне значення. Тема дослідження є актуальною, а наукові положення і висновки роботи є обґрунтованими, достовірними і достатньо повно викладені в опублікованих працях. Дисертаційна робота виконана на високому експериментальному і теоретичному рівні, вона відповідає всім вимогам "Порядку присудження наукових ступенів", затвердженого відповідною постановою Кабінету Міністрів України від 24.07.2013 року №567, які висуваються до дисертацій на здобуття наукового ступеня кандидата фіз.-мат. наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла, а її авторка, Красікова Ірина Євгеніївна, заслуговує присудження їй вказаного ступеня.

Офіційний опонент:

професор кафедри обчислювальної техніки (ОТ)

Національного технічного університету України

“Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського”,

старший науковий співробітник,

доктор фізико-математичних наук



Гордієнко Ю.Г.

Підпис професора кафедри ОТ Гордієнка Ю.Г. засвідчую:

Завідувач кафедри обчислювальної техніки

Національного технічного університету України

“Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського”,

професор, доктор технічних наук



Стіренко С.Г.