

**НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ПРОБЛЕМ МАТЕРІАЛОЗНАВСТВА
ім. І.М. ФРАНЦЕВИЧА**

КРАСІКОВА ІРИНА ЄВГЕНІВНА

УДК 530.191:539.211:539.25:514.86

**НОВІ КІЛЬКІСНІ МЕТОДИ ВИЗНАЧЕННЯ СТРУКТУРИ МАТЕРІАЛІВ
У ЕЛЕКТРОННІЙ МІКРОСКОПІЇ**

Спеціальність 01.04.07 — фізика твердого тіла

АВТОРЕФЕРАТ

дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Київ — 2021

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Інституті проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України, м. Київ.

Науковий керівник: кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник
Картузов Валерій Васильович,
Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України, завідувач відділу прикладної математики та обчислювального експерименту в матеріалознавстві.

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, професор
Прилуцький Юрій Іванович,
ННЦ “Інститут біології та медицини” Київського національного університету імені Тараса Шевченка, професор кафедри біофізики та медичної інформатики;

доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник

Гордієнко Юрій Григорович,
Національний технічний університет України “Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського”, професор кафедри обчислювальної техніки.

Захист відбудеться «__» вересня 2021 р. о __ годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 26.207.01 Інституту проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України.

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Інституту проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України за адресою: 03142, м. Київ, вул. Кржижановського, 3.

Автореферат розіслано «__» серпня 2021 р.

Вчений секретар

спеціалізованої вченої ради Д 26.207.01,
кандидат технічних наук

Н.П. Коржова

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Визначення характеристик структури матеріалів є одною з ключових задач сучасної фізики твердого тіла. На вирішенні цієї задачі базується процес створення нових та покращення експлуатаційних характеристик вже існуючих матеріалів. Наразі кількість методів дослідження структури, що застосовуються, постійно збільшується і інформаційна сміність цих методів неухильно зростає.

Існує багато фізичних методів аналізу структури матеріалів. Зокрема, це методи, засновані на дії зовнішніх факторів на матеріали (електрони, рентгенівські промені, іони, атоми, видиме світло, ультрафіолетове, інфрачервоне, нейтрони, звук та ін.), які здатні визвати інформаційний відгук від структури зразка. За отриманим відгуком можна відстежувати функціональні залежності одного або декількох змінних факторів цієї дії (енергія, температура, маса, інтенсивність, час, кут, фаза) від параметрів структури матеріалу зразка. Ці залежності, як правило, є визначальними для оптимізації експлуатаційних характеристик матеріалу. Ця чисельність методик характеристики структури матеріалу породжена двома ключовими положеннями, на яких стоїть актуальність проблеми:

- 1) визначальне значення структури матеріалу для рівня його експлуатаційних характеристик;
- 2) нестача методик кількісної оцінки структури матеріалу для повного опису її властивостей.

Важливість всебічного дослідження структури матеріалів диктує необхідність розвитку нових підходів до отримання та обробки електронних знімків адресно приготованих зразків, зокрема, до цифрової обробки отриманих знімків із застосуванням сучасних математичних методів.

Існуючи характеристики можуть бути істотно доповнені характеристиками, які засновані на досить новій парадигмі фрактальності, що застосована для кількісної характеристики геометричних та статистичних властивостей структури матеріалів. Тому не виникає сумнівів актуальність даної роботи, яка полягає в створенні методики дослідження фрактальних характеристик зображень структури матеріалу, яка включає розробку програмного забезпечення для обробки цифрових зображень (зокрема, отриманих за допомогою електронної мікроскопії), що дозволяє отримувати кількісний опис структури матеріалу.

У роботах вчених в галузі фрактальної геометрії і фрактальної фізики Б. Мандельброта, М. Шредера, Е. Федера, І.Ж. Буніна, І.Р. Кузяєва, В.С. Іванової, Г.В. Встовського, І.В. Золотухіна, Р.М. Кроновева розроблено математичні моделі фрактальної геометрії та, зокрема, методи обчислення такої чисельної характеристики об'єктів, як фрактальна розмірність. Цей параметр в задачах матеріалознавства вже використовується для опису різних структур, наприклад, таких як поверхні зламів, пористі структури, зони руйнування, структурні межі в'язко-крихкого переходу та ін. У роботах О.Г. Колмакова, Е.М. Грінберга, А.А. Оксогоєва, І.В. Петракова, О.О. Потапова, метод мультифрактального аналізу застосовується не тільки для числового опису цифрових зображень металографічних структур, але й для фрактограм поверхонь руйнування та деформації

реальних конструкційних матеріалів, а також карт розподілу механічних, фізичних властивостей по поверхні досліджуваного об'єкта.

В інституті надтвердих матеріалів імені В.Н. Бакуля НАН України ведуться роботи (М.В. Новіков, С.А. Клименко, Ю.О. Мельничук, М.Ю. Копейкіна) по застосуванню мультифрактального аналізу для оцінки структур твердих сплавів і їх зносостійкості. В роботах В.М. Мельник, В.Д. Рудя, Ю.А. Мельник (Луцький національний технічний університет, Східноєвропейський національний університет імені Лесі Українки (Луцьк)) запропоновано метод стереолого-морфологічного аналізу порового простору порошкових матеріалів. В цьому методі застосовуються вейвлет-перетворення та полігони Вороного (метод дискретних осей), вказується на рекомендації використання на практиці цифрової обробки РЕМ-зображень (РЕМ — растрова електронна мікроскопія) вейвлетів Хаара.

В Інституті металознавства імені Г.В. Курдюмова НАН України велись роботи під керівництвом д. ф.-м. н. О.Е. Засімчук та д. ф.-м. н. Ю.Г. Гордієнко по вивченню фрактальних структур на фольгах монокристалу алюмінію при невеликому циклічному розтягу.

Для обробки зображень з метою визначення фрактальних характеристик розроблені відповідні програмні продукти, найвідоміший з яких — програма MFRDrom (автор Г.В. Встовський, Інститут металургії і матеріалознавства імені О.О. Байкова РАН). На жаль, існуючі програмні продукти для визначення мультифрактальних характеристик зображень мають недоліки, такі як нестійкість використаного алгоритму (яка проявляється в залежності обчислених результатів від розміру цифрового зображення, його орієнтації та ін.) та інші, що часом просто унеможливають відтворення розрахунків іншим дослідником та призводить до сумнівів в їх достовірності.

Ось лише деякі з недоліків програмного комплексу MFRDrom — остання версія програмного комплексу розроблена ще за часів Windows 95 та погано працює на сучасних операційних системах; обмеженість розмірів зображень, що оброблюються (зокрема, потребує, аби розмір зображення був деяким ступенем натурального числа). Головний недолік програмного комплексу — нестійкість до різного роду спотворень зображення. Так, нами встановлено, що під час циклічного зміщення зображення килима Серпінського у 55,5% випадків програма MFRDrom дає нульове значення фрактальної розмірності D_0 ; в інших 44,5% випадків значення D_0 — від 1,893 до 1,930, а точне значення 1,893 виходить лише у 2,5% випадків.

Таким чином, широке розповсюдження фрактальних методів дослідження в матеріалознавстві при відсутності якісного інструментарію для їх застосування в дослідницькій діяльності робить безсумнівною актуальність розробки методики кількісної фрактальної характеристики структур з використанням стійких математичних методів і алгоритмів мультифрактального формалізму та їх програмної реалізації.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Робота виконувалася в рамках тем: “Моделювання та обчислювальний експеримент в дослідженні фізико-механічних властивостей, властивостей інтерфейса та стру-

ктурутворення в гетерофазних композитах включаючи евтектичні” (№ держреєстрації 0115U002253, 2015–2017 рр.); “Побудова моделей та виконання на їх основі обчислювальних експериментів, які спрямовано на визначення, дослідження та прогноз фізико-механічних властивостей і оптимізацію технологій одержання конструкційних та захисних композитних матеріалів на основі сполук з ікосаедричними структурними фрагментами $B_{12}C_3(B_4C)$, $B_{12}O_x(B_6O)$, $B_{12}Si_2(SIB_6)$, ALB_{12} ” (№ держреєстрації 0118U003061, 2018-2020 рр.); “Комп’ютерне конструювання нових перспективних ударостійких матеріалів на основі тугоплавких сполук” (№ держреєстрації 0120U100752, 2020-2021 рр.); проект SPS NATO 985070 “New shock-resisting boron-based ceramics: computer modeling, production, testing” (“Новітня ударостійка боридна кераміка: комп’ютерне моделювання, виробництво, тестування”), 2016-2019 рр.

Мета та задачі дослідження. Метою дисертаційної роботи є розробка методики математично визначеної кількісної характеризації фрактальних властивостей структури матеріалу по його електронно-мікроскопічному зображенню.

Досягнення поставленої мети дисертації вимагає розв’язання наступних основних задач:

- провести аналіз сучасних математичних методів, що застосовуються для характеризації фрактальних властивостей структури матеріалів за їх електронно-мікроскопічними зображеннями;
- розробити стійкий метод обчислення фрактальних та мультифрактальних характеристик електронно-мікроскопічних зображень структури матеріалів;
- реалізувати розроблений метод у вигляді комп’ютерної програми з інструкцією користування нею (робоче місце дослідника);
- провести верифікацію методики на модельних прикладах штучних регулярних фракталів;
- провести перевірку адекватності та ефективності запропонованої методики шляхом проведення порівняльного аналізу її результатів та результатів, одержаних із застосуванням традиційних методів електронної мікроскопії (у межах їхньої застосовності) для тестових матеріалів;
- розробити рекомендації по методиці спрямованого отримання зображень структури матеріалу для адекватного обчислення фрактальних та мультифрактальних характеристик структури, що досліджується.

Об’єкт дослідження — цифрові зображення структури матеріалу, отримані з застосуванням електронної мікроскопії.

Предмет дослідження — кількісні методи визначення фрактальних та мультифрактальних характеристик структури матеріалів за цифровими електронно-мікроскопічними зображеннями.

Методи дослідження. Для вирішення поставлених задач використовувалися такі методи: отримання зображень структури поверхні матеріалів за допомогою електронної мікроскопії; мультифрактальний аналіз зображень досліджуємих структур; метод чисельного моделювання; методи математичної обробки результатів експерименту (метод найменших квадратів, методи інтерполяції, методи математичної статистики); застосування методів математичної

обробки зображень для перетворення зображень у чорно-білі та для виділення границь на чорно-білих зображеннях; застосування мови програмування C++ і бібліотек для створення програм, які реалізують розроблені моделі та алгоритми обробки зображень та отримання їх фрактальних характеристик.

Наукова новизна отриманих результатів полягає в наступному:

- вперше розроблено стійкі методи та алгоритми реалізації математичних моделей застосування фрактального та мультифрактального формалізму для обробки елементів структури на електронно-мікроскопічних зображеннях поверхні матеріалу;
- вперше створено програмне забезпечення, яке реалізує розроблені методи та алгоритми у вигляді комп'ютерної програми для обробки цифрового представлення зображень матеріалів;
- вперше розроблена методика застосована до вивчення фрактальних та мультифрактальних характеристик структури матеріалів та дослідження їх зв'язку з фізико-механічними властивостями досліджуваних матеріалів (для тестових матеріалів);
- вперше розроблено та обґрунтовано рекомендації по методиці отримання зображень структури матеріалів задля надійного адекватного обчислення фрактальних та мультифрактальних характеристик досліджуваних структур, а також по налагодженню та використанню програмного забезпечення робочого місця користувача;
- запропоновано використання не тільки фрактальних характеристик зображень структури матеріалу, а й виділеної системи границь зерен. Розроблено та реалізовано алгоритм, що дозволяє виділити множину границь, існуючих в структурі, по її зображенню;
- вперше отримано кореляційну залежність між структурними характеристиками композиту AlB_{12} –AlN та його фізико-механічними характеристиками (зокрема, мікротвердістю);
- вперше встановлено кореляційну залежність мультифрактальних характеристик зразків осажденного магнетронним розпиленням титану з міцністними характеристиками (твердістю і приведеним модулем пружності);
- вперше встановлено кореляційну залежність мультифрактальних характеристик зразків плівок хрому, які осажені в аргоні, з їх твердістю.

Практичне значення одержаних результатів.

- Розроблені стійкі методи та алгоритми реалізації математичних моделей фрактального та мультифрактального формалізму обробки електронно-мікроскопічних зображень поверхні матеріалу, та створено відповідне програмне забезпечення
- Розроблені та обґрунтовані рекомендації по методиці отримання зображень структури матеріалів задля надійного адекватного отримання фрактальних та мультифрактальних характеристик досліджуваних структур
- Показана можливість застосування розроблених методів і програмного забезпечення для отримання мультифрактальних характеристик різнома-

нітних структур матеріалу, а також їх зв'язок з фізико-механічними властивостями досліджуваних матеріалів

- Встановлено важливу роль фрактальних характеристик виділеної системи границь зерен (фаз) в кількісній характеристиці структури матеріалу.

Особистий внесок здобувача. Дисертація є узагальненням результатів досліджень, які були виконані автором в Інституті проблем матеріалознавства НАН України під керівництвом к.ф.-м.н. В.В. Картузова. Наукові положення, що містяться в дисертації, отримані здобувачем самостійно. Автору належить розробка моделей та реалізація їх у вигляді програм, проведення обчислювального експерименту, обробка результатів та їх аналіз.

Постановка завдання роботи, обговорення результатів та формулювання висновків виконані спільно з науковим керівником к.ф.-м.н. В.В. Картузовим.

Електронно-мікроскопічні зображення досліджуваних зразків гарячепресованих композитів системи AlB_{12} -AlN з різним вмістом AlN та їх фізико-механічні характеристики — підготовка зразків для мікроструктурного аналізу, вимірювання твердості та механічних властивостей — були одержані співавторами публікацій к.х.н. В.Б. Муратовим та к.х.н. О.О. Васильєвим.

Електронно-мікроскопічні зображення досліджуваних зразків плівок, отриманих магнетронним розпиленням Ti та осадженням Cr в аргоні, були надані к.ф.-м.н. Т.Г. Рогуль.

При підготовці публікацій та доповідей на міжнародних конференціях автор особисто писала основний текст після обговорення отриманих результатів із співавторами.

Апробація роботи. Основні результати роботи доповідалися і обговорювалися на постійно діючих семінарах ІПМ НАН України і фахових конференціях: Второй междисциплинарный симпозиум ФиПС-01 “Фракталы и прикладная синергетика”, 26–30 ноября 2001 г., Москва; Третий междисциплинарный симпозиум ФиПС-03 “Фракталы и прикладная синергетика”, 17–20 ноября 2003 г., Москва; Четвертый международный междисциплинарный симпозиум “Фракталы и прикладная синергетика "ФиПС-2005"”. Москва, 14–17 ноября 2005 г.; Конференция «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов DFMN-2011, Москва, институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, 25-28 октября, 2011; 41st Int'l Conf & Expo on Advanced Ceramics & Composites (ICACC'17, 22-27 January, 2017 Daytona Beach, Florida, USA); Project meeting on April 5, 2018 during 2018 Much Conference, April 4-6, Annapolis, Maryland, USA; 10-th International Conference “Advanced Materials and Technologies: from idea to market”. 24–26 October, 2018, Ninghai, China; 6th International Conference HighMathTech 2019, October 28–30, 2019, Kyiv, Ukraine; VI наукова конференція “Нанорозмірні системи: будова, властивості, технології” НАНСИС–2019, Україна, Київ, 4–6 грудня 2019 р.; 1st International Research and Practice Conference “Nanoobjects & Nanostructuring” (N&N – 2020), September 20–23, 2020, Lviv, Ukraine.

Публікації за матеріалами дисертації. Основні результати дисертаційної роботи опубліковано у 11 друкованих статтях (у тому числі 5 у фахових наукових виданнях України (з них 1 стаття у виданні України, яке включено до між-

народних наукометричних баз даних), 2 статті у міжнародному виданні) та 7 тез наукових конференцій.

Структура та обсяг роботи. Дисертаційна робота складається зі вступу, 3 розділів, висновків, списку використаної літератури та 2 додатків. Загальний обсяг дисертації становить 137 сторінок, 45 рисунків та 4 таблиць, список використаних джерел (105 найменувань).

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** розкрито суть і стан наукової задачі, обгрунтовано актуальність роботи, сформульовано головну мету, задачі та методи досліджень, вказано на зв'язок з науковими програмами, визначено новизну отриманих результатів та обгрунтовано їхню практичну цінність. У **вступі** також висвітлено особистий внесок здобувача, наведено відомості про апробацію результатів роботи та кількість опублікованих праць, у яких відображено основний зміст роботи.

У **першому розділі** наведено короткий огляд літературних джерел за темою дисертаційної роботи, присвячених вивченню структури матеріалу та застосуванню для цієї мети методів фрактальної геометрії. Наведено приклади застосування фрактального та мультифрактального аналізу до зображень структури матеріалів, отриманих за допомогою електронної мікроскопії. Сформульовано суть фрактального підходу, яка полягає в обробці масштабуванням фрактальних структур і описів розподілу структурної характеристики при масштабуванні. Наводяться дані щодо того, що за допомогою фрактальної геометрії можливо описати структуру більш інформативно, ніж за допомогою інших методів опису структур. Вказується на зв'язок між фрактальними і мультифрактальними характеристиками та фізико-механічними властивостями матеріалу.

Існують різні методи дослідження структури матеріалів. За допомогою макроаналізу вивчають структуру, видиму неозброєним оком або при невеликому збільшенні за допомогою лупи. Макроаналіз дозволяє виявити різні особливості будови і дефекти (тріщини, пористість, раковини та ін.). Мікроаналізом називається вивчення структури за допомогою оптичного мікроскопа. Електронний мікроскоп з його рівнем збільшення дозволяє вивчати структуру до нанорозмірів.

Аналіз сучасних світових літературних джерел та досвід спеціалістів ПІМ НАНУ показує, що макроскопічна поведінка матеріалу при дії на нього зовнішніх факторів безпосередньо залежить від його мікроструктури.

Кількісний підхід при аналізі процесів експлуатації матеріалу дозволяє характеризувати ту оптимальну структуру, яка буде відповідати умовам його застосування. Дослідження можливостей та оцінки сучасного програмного забезпечення комп'ютерних засобів дослідження зображень матеріалів продиктовано науковими та виробничими задачами з метою визначення якісних та кількісних характеристик матеріалів.

У роботі наводяться дані щодо аналізу мікроструктури матеріалів, які надають нові можливості щодо кількісного оцінювання залежності їх фізико-

механічних властивостей від структури. Візуальний аналіз не забезпечує потрібної швидкодії та точності опрацювання, тому для вирішення задачі аналізу мікроструктури найдоцільніше використовувати методи оброблення цифрових зображень. Залежно від поставленої мети, задача аналізу мікроструктури полягає у пошуку та обчисленні метричних розмірів складників мікроструктури, оцінюванні їх форми, формуванні певної статистики тощо. Кількісний аналіз складових мікроструктури дає можливість відслідковувати стан матеріалів, описувати властивості існуючих матеріалів у процесах, що досліджуються.

На сьогоднішній день існує багато прикладних програм для аналізу зображень. Ці програми містять алгоритми обробки зображень: високочастотного та низькочастотного фільтрування, виділення меж зображень, арифметичних та логічних операцій, корекції яскравість/контраст та ін. Далі проводиться аналіз для одержання характеристик структури матеріалу. Кінцевою задачею аналізу вважається статистична обробка отриманих характеристик об'єкту, визначення середніх значень цих величин, а також побудова графічних залежностей для візуалізації процесу аналізу.

Але на даний час не існує повної точно визначеної уніфікованої множини чисельних характеристик для опису структури матеріалу, у кожному випадку дослідників цікавить якесь конкретне коло величин з цього списку, яке спирається на особистий досвід дослідника. Тому буде доцільним введення строго визначеної математично чисельної величини, яка дасть змогу кількісно характеризувати структуру матеріалу та порівнювати структурні чинники різних матеріалів, що і є метою роботи.

У **другому розділі** представлено розроблену методіку кількісної характеристики структури матеріалів по електронно-мікроскопічним зображенням як послідовність етапів цифрової обробки зображень з визначенням фрактальних та мультифрактальних характеристик. Представлено здійснене автором вдосконалення алгоритму обчислення характеристик фрактальних об'єктів і розроблену методіку проведення кількісного визначення параметрів структури матеріалу за його електронно-мікроскопічним зображенням. Реалізовано розроблений метод у комп'ютерну програму робочого місця користувача з чіткою інструкцією користування нею. Тестування розробленої методики проведено на серіях знімків електронно-мікроскопічних зображень, наданих колегами з ІПМ НАНУ та опублікованих у провідних матеріалознавчих виданнях. Проведено вивчення взаємозв'язку мультифрактальних характеристик означених структур з фізико-механічними характеристиками матеріалів, що досліджуються.

Більшість існуючих методів визначення структури матеріалів у електронній мікроскопії потребує втручання оператора у процес визначення кількісних характеристик структури (які визначаються емпірично) і спирається на його кваліфікацію та досвід і тому є суб'єктивними. Наразі пропонується стійкий метод обчислення фрактальних та мультифрактальних характеристик як структурних факторів електронно-мікроскопічних зображень композиційних матеріалів, який ґрунтується на чіткій математиці фрактальної геометрії і дає кількісні характеристики структур, що досліджуються.

Мультифрактальний аналіз в матеріалознавстві по суті являє собою математичний алгоритм визначення чисельних параметрів, придатних для опису характеристик таких представницьких елементів матеріалів, як поверхні зламів, пористі структури покриттів, зони руйнування та ін. Наведемо базисні положення фрактальної геометрії, які застосовуються для аналізу структури матеріалу.

Нехай є деякий об'єкт (представницький елемент матеріалу, що досліджується), що займає обмежену область ζ розміру L в евклідовому просторі розмірності d (наприклад, $d=0$ – точка, $d=1$ – лінія, $d=2$ – площина, $d=3$ – тривимірний простір, у якому ми живемо та працюємо). Об'єкт розглянуто як множину з $N \gg 1$ розподілених в цій області точок.

Розбиваємо всю область ζ на кубічні комірки зі стороною $\epsilon \ll L$ об'ємом ϵ^d . Далі розглядаємо тільки зайняті комірки, тобто ті комірки, в яких міститься хоча б одна точка об'єкту. Нехай номери зайнятих комірок i знаходяться в межах від 1 до $N(\epsilon)$ — сумарної кількості зайнятих комірок, яка залежить від розміру комірок ϵ .

Позначаємо через $n_i(\epsilon)$ кількість точок в i -ій комірці. Тоді величина

$$p_i(\epsilon) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{n_i(\epsilon)}{N} \quad (1)$$

є ймовірність того, що навмання взята точка об'єкта знаходиться в комірці з номером i , так що ймовірності p_i характеризують відносну заповненість комірок. З умови нормування ймовірності отримуємо

$$\sum_{i=1}^{N(\epsilon)} p_i(\epsilon) = 1. \quad (2)$$

Стандартний метод мультифрактального аналізу засновано на розгляді узагальненої статистичної суми $Z(q, \epsilon)$, де показник ступеня q може приймати будь-які значення в інтервалі $-\infty < q < +\infty$:

$$Z(q, \epsilon) = \sum_{i=1}^{N(\epsilon)} p_i^q(\epsilon). \quad (3)$$

Спектр узагальнених фрактальних розмірностей D_q (розмірностей Реньї) визначаємо за допомогою співвідношення

$$D_q = \frac{1}{q-1} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\ln \sum_{i=1}^{N(\epsilon)} p_i^q(\epsilon)}{\ln \epsilon}. \quad (4)$$

У разі, коли $D_q = D = const$ для всіх значень q , досліджувана множина точок являє собою монофрактал. Функція D_q показує, наскільки неоднорідною є досліджувана множина точок ζ .

З точки зору фізичного сенсу узагальнених фрактальних розмірностей D_q особливий інтерес представляють розмірності при значеннях $q = 0, 1, 2$.

При $q = 0$ величина D_0 являє собою звичайну гаусдорфову розмірність множини точок об'єкту ζ . Вона є найбільш грубою характеристикою об'єкта і несе узагальнену інформацію про розмірності простору, в якому він розташований і його несплошності в цілому.

Для $q = 1$:

$$D_1 = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\sum_{i=1}^{N(\varepsilon)} p_i(\varepsilon) \ln p_i(\varepsilon)}{\ln \varepsilon} \quad (5)$$

Інформаційна розмірність D_1 , яка визначається ймовірністю знайти цікаву для нас точку в межах певної комірки, характеризує ентропію фрактальної множини, або неоднорідність розподілу елементів мультифракталу в просторі.

При $q = 2$:

$$D_2 = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\ln \sum_{i=1}^{N(\varepsilon)} p_i^2(\varepsilon)}{\ln \varepsilon} \quad (6)$$

Кореляційна розмірність D_2 , яка визначається ймовірністю знаходження двох точок на певній відстані одна від одної, характеризує неоднорідність розподілу елементів мультифракталу в межах фрактальної множини.

Отримання мультифрактальних характеристик зображень (для яких $d = 2$), як набору значень D_q , ґрунтується на обчисленні для конкретного зображення узагальненої статистичної суми $Z(q, \varepsilon)$ і обчисленні на її основі значень D_q шляхом визначення кута нахилу графіка залежності $Z(q, \varepsilon)$ від ε в логарифмічних координатах із застосуванням методу найменших квадратів.

По суті, всі програмні рішення, що реалізують обчислення фрактальних характеристик зображень, засновані на статистичному підході, тобто на розбитті зображення на пробні бокси того чи іншого розміру, підрахунку кількості чорних і білих (поділ це певною мірою умовний) пікселів (мінімальний змістовний елемент зображення) в боксах і обчисленні тих чи інших статистичних характеристик — в першу чергу узагальненої статистичної суми $Z(q, \varepsilon)$. Потім, по набору статистичних даних будується відповідна залежність від розміру пробних боксів і на її основі за допомогою методів лінеаризації і найменших квадратів обчислюються значення узагальнених фрактальних розмірностей D_q .

Розроблений алгоритм обчислення мультифрактальних характеристик реалізовано у вигляді комп'ютерної програми, написаної на мові програмування Visual C++ 2019 з використанням вільно розповсюджуваної бібліотеки графічного інтерфейсу користувача wxWidgets. Програма працює під управлінням операційної системи MS Windows (робота програми гарантується для версії MS Windows 7 і старше).

Загальний вигляд головного вікна програми наведено на рис. 1.

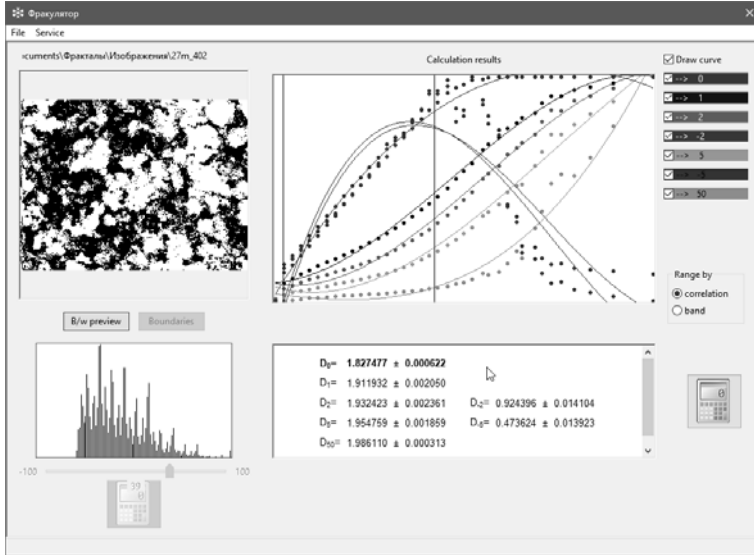
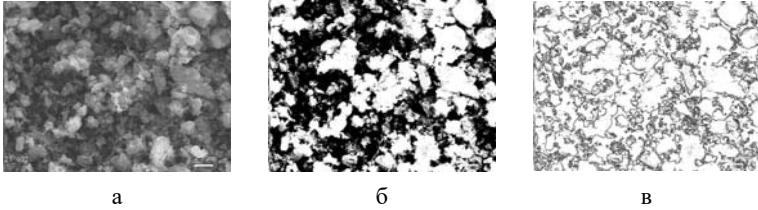


Рис. 1. Загальний вигляд вікна програми Fracalator. Верхня ліва панель — вихідне зображення, нижня — гістограма розподілу яскравості точок вихідного зображення. Праві панелі — результати обчислень в графічному та чисельному представленні

Програма може працювати з зображеннями в поширених графічних форматах (таких як JPG, BMP, TIFF, PNG), а в тестових і демонстраційних цілях може генерувати різні модельні зображення фракталів — такі як килим Серпінського або сніжинка Коха.

Оскільки загальновідомо, що фізико-хімічні властивості границь розділу фаз (компонентів) найчастіше відіграють визначальну роль у формуванні експлуатаційних характеристик композитів, що особливо справедливо по відношенню до наноматеріалів з розвиненими межами, слід очікувати, що структура (геометрія) меж, яка характеризується фрактальною розмірністю, також важлива при оптимізації експлуатаційних властивостей матеріалів. Тому розроблена програма дозволяє, окрім отримання звичайних мультифрактальних характеристик зображень структури фаз, виділяти на них границі і визначати мультифрактальні характеристики структури, сформованої системи границь фаз.

Після настройки і виконання графічних перетворень (рис. 2) запускається процес обчислення мультифрактальних характеристик.



а) початкове зображення структури; б) чорно-біле зображення;
в) зображення тієї ж структури після виділення границь

Рис. 2. Приклад перетворення зразка зображення на чорно-біле та виділення границь

Отримані результати у вигляді відповідних експериментальних кривих (результатів обчислювальних експериментів) виводяться в правій частині основного вікна програми (рис. 1), причому налаштування програми дозволяють вказати будь-який призначений для користувача набір значень q , для яких обчислюються розмірності D_q (до 64 значень); на екран при цьому виводяться тільки до 10 з них. Користувач може оперативнo включати і відключати виведення тих чи інших кривих.

Розраховані значення мультифрактальних характеристик виводяться на екран, а також можуть бути збережені в файл або виведені на друк. Програма може працювати і в автоматичному пакетному режимі, використовуючи поточні настройки і зберігаючи результати розрахунків в зазначений файл. Вона також максимально використовує наявні можливості апаратного забезпечення, дозволяючи прискорити обчислення шляхом використання можливостей сучасних багатоядерних та багатопроцесорних систем.

У **третьому розділі** із застосуванням розробленої методики для її верифікації проведено дослідження електронно-мікроскопічних зображень структури наступних матеріалів: електронно-мікроскопічні зображення зразків плівок, отриманих магнетронним розпиленням титану, плівок, отриманих осадженням хрому в аргоні, та гарячепресованих композитів системи $AlB_{12}-AlN$ з різним вмістом AlN .

Виявлені кореляції між фрактальними і фізичними характеристиками свідчать про можливість застосування методу мультифрактального формалізму до опису структурних властивостей матеріалу.

В якості тестового об'єкту були розглянуті мультифрактальні характеристики зразків осадженого магнетронним розпиленням титану, зображення яких показані на рис. 3.

Для вивчення питання про взаємозв'язок структурних (фрактальних) і фізичних характеристик за допомогою програми Fracalator були отримані мультифрактальні характеристики наведених на рис. 3 зображень, а саме — розмірності D_0 , D_1 , D_2 і D_{-1} , отримані як для мікрофотографій зі стандартним порогом, так і для оброблених зображень, на яких були виділені границі.

Аналіз результатів показав наявність кореляції між цими фрактальними характеристиками і механічними властивостями зразків матеріалів — твердістю H і наведеним модулем пружності $E_r = E/(1 - \nu^2)$.

Досить високий ступінь кореляції спостерігається як при обчисленнях фрактальної розмірності самих мікрофотографій, так і для зображень виділених границь. Результати наведені в табл. 1 і 2. З ростом значень мультифрактальних розмірностей структури матеріалу ростуть і значення їх міцності, що цілком природно — в силу того, що зразки з більш високою фрактальною розмірністю ближчі до монолітних, ніж зразки з більш низькою розмірністю. Найбільш яскраво проявляється кореляція фізичних характеристик з розмірністю D_{-1} .

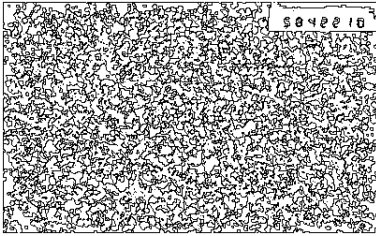
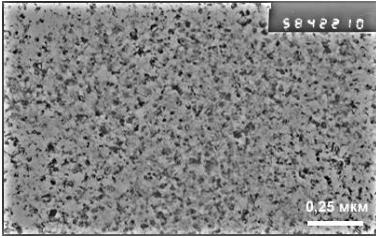
Таблиця 1. Мультифрактальні характеристики зразків осадженого магнетронним розпиленням титану

Зразок	D_0	D_1	D_2	D_{-1}	H , ГПа	E_r , ГПа
1	1,539	1,547	1,542	1,386	4,0	162
2	1,680	1,658	1,638	1,578	4,9	173
3	1,519	1,548	1,550	1,345	2,2	105
4	1,622	1,612	1,579	1,505	4,3	167

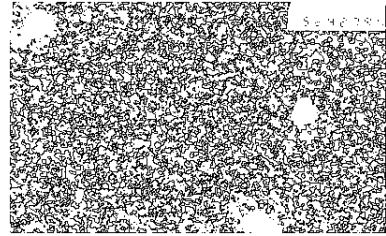
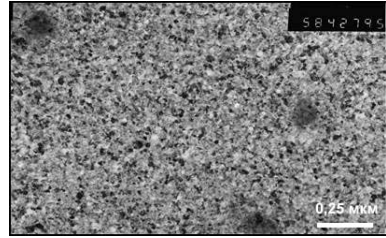
Таблиця 2. Кореляція мультифрактальних характеристик зразків осадженого магнетронним розпиленням титану з механічними характеристиками

	D_0	D_1	D_2	D_{-1}
Кореляція з H	0,838	0,767	0,687	0,864
Кореляція з E_r	0,736	0,649	0,543	0,771

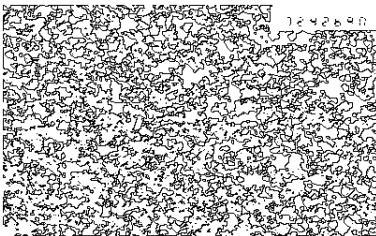
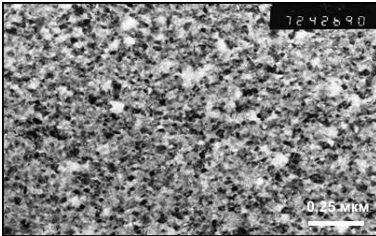
Як другий об'єкт розглядалися мультифрактальні характеристики плівок хрому, осаджених в аргоні на кремнієвих підкладках, в залежності від умов їх отримання. На рис. 4 показані зображення поверхні плівок хрому, отриманих осадженням в аргоні при різній температурі.



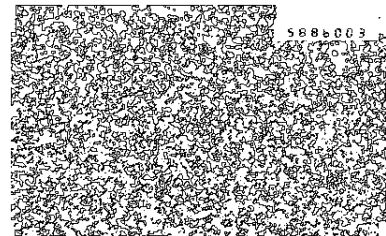
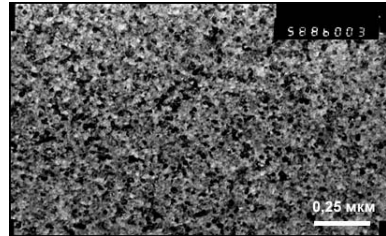
$H = 4,0$ ГПа, $E_r = 162$ ГПа



$H = 4,9$ ГПа, $E_r = 173$ ГПа



$H = 2,2$ ГПа, $E_r = 105$ ГПа



$H = 4,3$ ГПа, $E_r = 167$ ГПа

Рис. 3. Мікрофотографії зразків структур осадженого титану (фотографії і виділені границі) і їх механічні характеристики

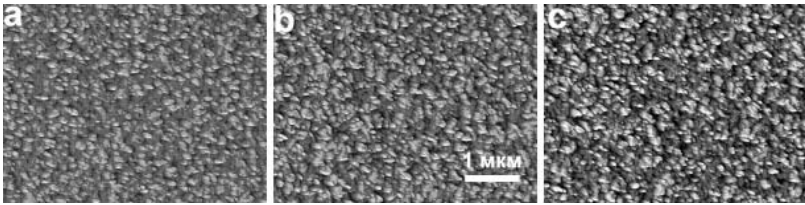


Рис. 4. Морфологія поверхні плівок хрому, осаджених при температурі 25 (а), 230 (b) и 400 (с) °С

Результати дослідження мультифрактальних характеристик і їх кореляції з твердістю наведені в табл. 3 і 4.

Таблиця 3. Мультифрактальні характеристики зразків плівок хрому, осаджених в аргоні

Зразок	D_0	D_1	D_2	D_{-1}	H , ГПа
1	1,613	1,618	1,610	1,497	11,0
2	1,617	1,611	1,601	1,516	11,3
3	1,527	1,568	1,577	1,347	10,4

Таблиця 4. Кореляція мультифрактальних характеристик зразків плівок хрому, осаджених в аргоні, з їх твердістю

	D_0	D_1	D_2	D_{-1}
Кореляція з H	0,957	0,895	0,825	0,9744

Як видно з наведених даних, в цьому випадку також є високий ступінь кореляції між мультифрактальними характеристиками (структурою матеріалу) та фізичними характеристиками плівок (їх твердістю), причому кореляція така ж позитивна, як і у випадку з осадженим титаном — при збільшенні фрактальних розмірностей структури виділених границь ростуть і значення твердості зразків.

Останнім об'єктом дослідження із застосуванням розробленої методики для її верифікації були гарячепресовані композити системи $AlB_{12}-AlN$ з різним вмістом AlN . Дослідження виконувалися в рамках проекту SPS NATO 985070 “New shock-resisting boron-based ceramics: computer modeling, production, testing” (“Новітня ударостійка боридна кераміка: комп'ютерне моделювання, виробництво, тестування”).

Система $AlB_{12}-AlN$ являє собою композит зі значними перспективами з точки зору стійкості під динамічним навантаженням, завдяки високим значенням основних механічних показників, порівняній простоті та доступності синтезу (є напівпродуктом синтезу додекабориду алюмінію) та технологічності при компактуванні. З точки зору розробки та вдосконалення методик фрактального

аналізу дана система є зручною завдяки відсутності хімічної взаємодії між компонентами та, як наслідок, суттєвій локалізації компонентів у зернах, які являють собою окремі фази та характеризуються високим контрастом на мікрофотографіях поверхні композиту. Еволюція мікроструктури в цьому разі зумовлена співвідношенням вмісту окремих компонентів у композиті, і саме за цим показником було передбачено варіювання при експериментальній підготовці зразків. Твердість, як одна із найбільш важливих характеристик, що визначає ударну стійкість матеріалу, була обрана у якості функції відгуку і, відповідно, експериментальні дослідження властивостей отриманих зразків було зосереджено на дослідженні саме цієї властивості матеріалу.

Підготовка зразків для мікроструктурного аналізу, вимірювання твердості та механічних властивостей (полірування) було виконано на полірувальній машині FORCIMAT фірми Metkon, після чого були отримані мікрофотографії структур цих зразків.

Вивчення мультифрактальних характеристик даних зображень, отриманих на електронному мікроскопі, виконувалося за допомогою розробленого програмного забезпечення Fraculator.

Виявилося, що очікування монотонної зміни фрактальної розмірності двовимірного зображення поверхні нанокompозиту при монотонній зміні відсоткового вмісту фази AlN було виправдано (рис. 5).

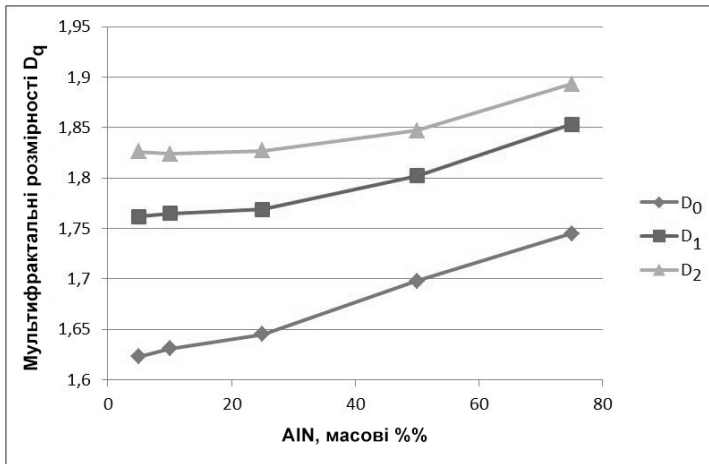
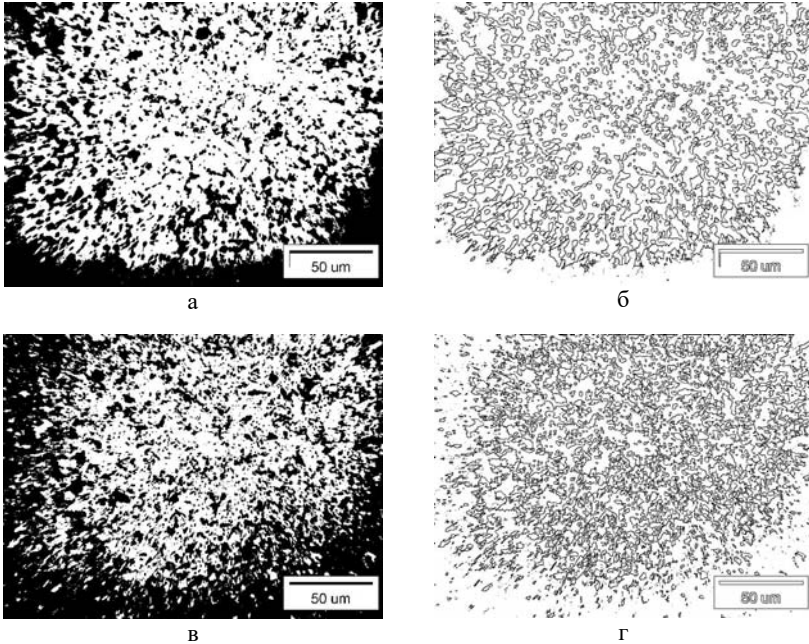


Рис. 5. Залежності фрактальних розмірностей D_0 , D_1 і D_2 від масової частки AlN в складі нанокompозиту

Приклади оброблених програмою і підготовлених для обчислення мультифрактальних характеристик зображень з виділеними на них границями наведені на рис. 6.



а, б — 5% AlN, в, г — 75% AlN

Рис. 6. Приклади оброблених програмою і підготовлених для обчислення мультифрактальних характеристик оригінальних зображень і системи виділених границь

Результати дослідження мультифрактальних характеристик системи виділених границь показані на рис. 7.

Дані мультифрактальні характеристики носять неадитивний характер, який, однак, корелює з характером залежності мікротвердості розглянутого накомполита від масової частки AlN в його складі. Результати дослідження мікротвердості шліфів, виконаного на мікротвердомірі ПМТ-3 під навантаженням 2 Н, показані на рис. 8.

Композит AlB_{12} (90%) + AlN (10%) має локально мінімальну мікротвердість, яка збігається з локальним екстремумом (максимумом) всіх трьох фрактальних характеристик зображень границь. Отриманий коефіцієнт кореляції між мікротвердістю та фрактальною розмірністю системи границь досягає 0,979, а сама залежність з великою точністю може бути описана формулою (див. рис. 9)

$$H = -148,1 D_0 + 230,4 \text{ ГПа.}$$

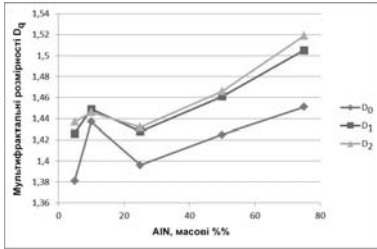


Рис. 7. Залежності фрактальних розмірностей D_0 , D_1 и D_2 зображень границь від масової частки AlN в складі композиту

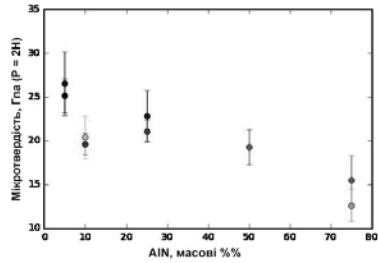


Рис. 8. Мікротвердість композиту AlB₁₂-AlN в залежності від вмісту нітриду алюмінію

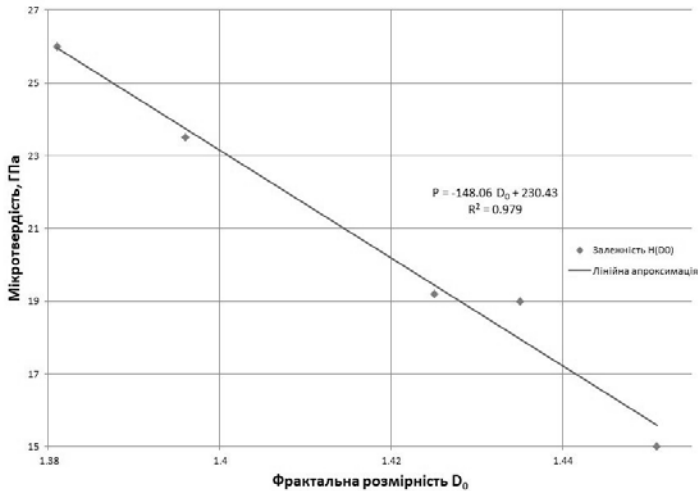


Рис. 9. Залежність мікротвердості зразків AlB₁₂-AlN з різним вмістом нітриду алюмінію від фрактальної розмірності D_0

Таким чином, можна зробити висновок, що з фізичними характеристиками можуть бути пов'язані не тільки мультифрактальні характеристики зображень структури фаз, але і (а можливо, в першу чергу) мультифрактальні характеристики виділених на них границь (границь зерен, границь фаз — в залежності від досліджуваного матеріалу). Крім того, ці характеристики можуть мати більшу інформативну цінність, ніж характеристики необроблених зображень, в першу чергу для наноматеріалів, що мають розвинені границі.

ВИСНОВКИ

У дисертації наведено узагальнення існуючих підходів та нове вирішення наукової задачі фізики твердого тіла, яка полягає в розробці методики кількісної характеристики фрактальних властивостей структури матеріалу по його електронно-мікроскопічним зображенням.

На підставі результатів проведеної роботи можна сформулювати такі основні висновки:

1. Існуючі математичні моделі фрактального та мультифрактального аналізу зображень можна успішно адаптувати до задачі визначення кількісних характеристик структури матеріалу по його електронно-мікроскопічним зображенням.
2. Розроблені та реалізовані у вигляді програмного забезпечення алгоритми, які базуються на адаптованій математичній моделі кількісної характеристики фрактальних властивостей структури матеріалу. На цій базі розроблена та апробована методика кількісної характеристики цифрових зображень структури матеріалів, отриманих з застосуванням електронної мікроскопії, яка дає змогу дослідження залежностей фізико-механічних властивостей матеріалу від його структурних характеристик.
3. Встановлено значну роль фрактальних характеристик виділеної системи границь зерен (фаз) в кількісній характеристиці структури матеріалу, що відкриває шляхи подальшого розвитку розробленої методики.
4. Виявлені кореляційні залежності між мультифрактальними структурними характеристиками:
 - осадженого магнетронним розпиленням титану і його твердістю та приведеним модулем пружності;
 - плівки хрому, які осаджені в аргоні, та їх твердістю;
 - композиту $AlB_{12}-AlN$ та його мікротвердістю;
 підтверджують адекватність адаптованих моделей та роботоздатність розробленого програмного забезпечення.
5. Комп'ютерна реалізація запропонованої методики дає принципову можливість включення її до існуючих програмних пакетів обробки електронно-мікроскопічних зображень в режимі реального часу.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ РОБІТ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Минаков Н.В. Исследование доэвтектических литых структур методами компьютерной обработки изображений / Н.В. Минаков, **И.Е. Красикова**, В.В. Картузов, С.А. Фирстов, И.Д. Горная // *Электронная микроскопия и прочность материалов*. — 2001. — Вып. 11. — С. 113–117.
2. **Красикова И.Е.** Корреляция значений фрактальных характеристик структуры материала по электронно-микроскопическим фотографиям поверхности образцов со значениями их физико-механических характе-

- ристик / **И.Е. Красикова**, В.В. Каргузов, И.В. Красиков // Электронная микроскопия и прочность материалов. — 2016. — Вып. 22. — С.3–9.
3. **Красикова И.Е.** Мультифрактальные характеристики горячепрессованных композитов из нанопорошков $AlB_{12}-AlN$ / **И.Е. Красикова**, И.В. Красиков, В.В. Каргузов, В.Б. Муратов, А.А. Васильев // Наносистемы, наноматериалы, нанотехнології. — 2020. — Том 18. — Випуск 1. — С. 89–96.
 4. **Krasikova I.E.** Using computation parallelization facilities in the 2D-image fractal dimension evaluation algorithm / **I.E. Krasikova**, I.V. Krasikov, V.V. Kartuzov // International Journal of Open Information Technologies. — 2015. — Vol 3. — No 12. — P.7–12.
 5. Galanov V.A. The modification of Hydrodynamic Model of Alekseevskii–Tate for Multilayered and Gradient Plates / V.A. Galanov, V.V. Kartuzov, S.M. Ivanov, **I.E. Krasikova** // Multilayered and Fibre-Reinforced Composites. 3. High Technology. — 1998. — Vol. 43. — P. 145–152.
 6. Каргузов В.В. Применение аппарата фрактальной геометрии для исследования структур материалов, полученных в условиях скоростного электронагрева. / В.В. Каргузов, **И.Е. Красикова**, Н.В. Минаков, В.Ю. Пучкова // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении: Зб. наук. праць. — Київ, ІПМ. Вип. 8. — Серія “Моделювання в матеріалознавстві”. — 2006. — С. 63–68.
 7. **Красикова И.Е.** Компьютерная реализация алгоритма вычисления фрактальной размерности структуры материала по изображениям, полученным при помощи электронной микроскопии / **И.Е. Красикова**, В.В. Каргузов, И.В. Красиков // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении: Зб. наук. праць. — Київ, ІПМ. Вип. 13. — Серія “Моделювання в матеріалознавстві”. — 2011. — С. 82–89.
 8. **Красикова И.Е.** Характеристики компьютерной реализации алгоритма вычисления фрактальной размерности двумерных изображений / **И.Е. Красикова**, В.В. Каргузов, И.В. Красиков // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении: Зб. наук. праць. — Київ, ІПМ. Вип. 15. — Серія “Моделювання в матеріалознавстві”. — 2013. — С. 69–73.
 9. **Красикова И.Е.** Компьютерная реализация алгоритма вычисления мультифрактальных характеристик структуры материала по двумерным изображениям / **И.Е. Красикова**, В.В. Каргузов, И.В. Красиков // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении: Зб. наук. праць. — Київ, ІПМ. Вип. 16. — Серія “Моделювання в матеріалознавстві”. — 2014. — С. 74–79.
 10. **Красикова И.Е.** Определение мультифрактальных характеристик изображений структур материалов / **И.Е. Красикова**, И.В. Красиков, **В.В. Каргузов** // Наукові нотатки. — 2017. — №57. — С.102–110.

11. **Красикова И.Е.** Применение мультифрактального анализа для изучения структур композиционных материалов / **И.Е. Красикова**, И.В. Красиков, В.В. Картузов // Вісник Українського матеріалознавчого товариства ім. І.М. Францевича. — 2019. — Вип. 12. — С. 35–41.
12. Минаков Н.В. Применение метода анализа-синтеза с переменной разрешающей способностью при подготовке изображений к расчету фрактальной размерности / Н.В. Минаков, **И.Е. Красикова**, В.В. Картузов // Второй междисциплинарный симпозиум ФиПС-01 “Фракталы и прикладная синергетика”. 26–30 ноября 2001 г., Москва. — С. 52–54.
13. Картузов В.В. Методы математической морфологии в генерации фрактальных структур. / В.В. Картузов, **И.Е. Красикова**, Н.В. Минаков // Третий междисциплинарный симпозиум ФиПС-03 “Фракталы и прикладная синергетика”. 17–20 ноября 2003 г., Москва. — С. 154–157.
14. **Красикова И.Е.** Унифицированный метод вычисления фрактальной размерности структуры материала по его электронно-микроскопическому изображению / **И.Е. Красикова**, И.В. Красиков, В.В. Картузов // Конференция “Деформация и разрушение материалов и наноматериалов” DFMN-2011. Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН. 25–28 октября 2011 г., Москва. — С. 914–915.
15. **Krasikova I.E.** Quantitative characterization of the structure of metallic films from their electron-photographic images / **I.E. Krasikova**, I.V. Krasikov, V.V. Kartuzov // 10th International Conference “Advanced Materials and Technologies: from idea to market”. Book of Abstracts. 24–26 October 2018, Ninghai, China. — p. 37.
16. **Krasikova I.E.** Application of multifractal analysis to investigation of structure of composite materials / **I.E. Krasikova**, I.V. Krasikov, V.V. Kartuzov // 6th International Conference HighMathTech 2019. Book of Abstracts. October 28–30 2019, Kyiv, Ukraine. — P. 178.
17. **Красикова И.Е.** Мультифрактальный анализ изображений структуры нанокompозитных материалов / **И.Е. Красикова**, И.В. Красиков, В.В. Картузов // VI наукова конференція “Нанорозмірні системи: будова, властивості, технології” НАНСИС–2019. 4–6 грудня 2019 р., Київ, Україна. — С.81.
18. **Krasikova I.E.** Multifractal analysis of electron microscopic images of nanomaterials / **I.E. Krasikova**, I.V. Krasikov, V.V. Kartuzov // 1st International Research and Practice Conference “Nanoobjects & Nanostructuring” (N&N – 2020). N&N – 2020. Book of Abstracts. September 20–23 2020, Lviv, Ukraine. — P. 97.

АНОТАЦІЯ

Красікова І.С. Нові кількісні методи визначення структури матеріалів у електронній мікроскопії. — Рукопис.

Дисертація на здобуття вченого ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 — фізика твердого тіла — Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України, Київ, 2021.

Дисертаційна робота присвячена розробці методики математично визначеної кількісної характеристики структури матеріала за його електронно-мікроскопічним зображенням.

У роботі виконана адаптація математичної моделі мультифрактального формалізму для визначення кількісних характеристик зображень структури матеріалів, і на її основі розроблено відповідне програмне забезпечення, яке дає стійкі результати їх обчислень. Висока продуктивність розробленого програмного забезпечення допускає принципову можливість включення її до існуючих програмних пакетів обробки електронно-мікроскопічних зображень в режимі реального часу, в тому числі до програмного забезпечення, яке вбудовано в електронні мікроскопи.

За допомогою представленої методики з метою верифікації моделей і розробленого програмного забезпечення проведено дослідження отриманих мультифрактальних і фізичних характеристик гарячепресованих композитів $AlB_{12}-AlN$, яке дозволяє зробити важливий висновок про те, що з фізичними характеристиками можуть бути пов'язані не тільки мультифрактальні характеристики зображень структури фаз, але і мультифрактальні характеристики виділених на них систем границь (границь зерен, границь фаз — в залежності від досліджуваного матеріалу). Отримано результати розрахунків фрактальних характеристик плівок хрому, осаджених в аргоні при зміні температури осадження та в залежності від доданків кисню. Показана наявність кореляції фрактальної розмірності та фізичних характеристик плівок хрому — твердістю H та наведеним модулем пружності $E_r = E/(1 - \nu^2)$. Досить високий ступінь кореляції спостерігається як при обчисленнях фрактальної розмірності площини фотографій, так і для систем виділених границь.

Ключові слова: *електронно-мікроскопічне зображення, структура матеріалу, межі зерен, кількісна характеристика, фрактальна розмірність, мультифрактальні характеристики.*

АННОТАЦИЯ

Красикова И.Е. Новые количественные методы определения структуры материалов в электронной микроскопии. – Рукопись.

Диссертация на получение ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 — физика твердого тела — Институт проблем материаловедения им. И.Н. Францевича НАН Украины, Киев, 2021.

Диссертационная работа посвящена разработке методики математически определенной количественной характеристики структуры материала по его электронно-микроскопическому изображению.

В настоящее время имеется множество различных методов анализа структуры материалов, поскольку именно структурные характеристики являются определяющими для получения материалов с высокими эксплуатационными параметрами. Большое количество методик характеристики структуры материала порождено двумя ключевыми положениями, которые определяют актуальность данной работы. Это определяющее значение структуры материала для уровня его эксплуатационных характеристик и нехватка методик количественной оценки структуры материалов для полного описания ее свойств. В качестве такой количественной оценки структуры материалов могут выступать ее мультифрактальные характеристики.

В работе выполнена адаптация математических моделей фрактальной геометрии и мультифрактального формализма для определения количественных характеристик изображений структуры материалов, включая разработку устойчивых алгоритмов обработки изображений и проведения вычислений мультифрактальных размерностей изображений, а также создание соответствующего программного обеспечения, дающего устойчивые результаты вычислений. Программное обеспечение разработано на языке C++ (компилятор Visual Studio, библиотека графического интерфейса пользователя wxWidgets) и предназначено для работы в операционной системе не ниже Windows 7. Высокая производительность разработанного программного обеспечения, включая возможность использования многопоточности для повышения производительности, допускает принципиальную возможность включения его в существующие программные пакеты обработки электронно-микроскопических изображений в режиме реального времени, включая встроенное программное обеспечение электронных микроскопов. Разработанное программное обеспечение прошло всестороннее тестирование на модельных объектах, таких как ковер Серпинского, и продемонстрировало устойчивую работу относительно различного вида искажений, вносимых в модельные изображения. На основании проведенных вычислительных экспериментов для получения надежных и адекватных результатов разработаны требования, предъявляемые к изображениям, получаемым методами электронной микроскопии.

При помощи представленной методики, с целью верификации моделей, алгоритмов и разработанного программного обеспечения, было проведено изучение фрактальных характеристик пленок хрома, осажденных в аргоне при различных температурах осаждения и в зависимости от добавок кислорода. Как показали проведенные исследования, программное обеспечение дает адекватные значения мультифрактальных размерностей, коррелирующие со значениями микротвердости полученных пленок (коэффициент корреляции для значений размерностей Реньи $D_{-1}-D_2$ находятся в диапазоне от 0,974 до 0,825). Аналогичное исследование, проведенное для пленок титана, осажденных магнетронным распылением, выявило наличие корреляции значений размерностей Реньи со значениями микротвердости и приведенного модуля упругости $E_r = E/(1-\nu^2)$. Так, корреляция между значениями D_0 и микротвердости H составляет 0,838, а между значениями D_0 и значениями приведенного модуля упругости — 0,736. Выполнено также исследование мультифрактальных и физических характеристик горячепрессованных композитов $AlB_{12}-AlN$, которое позволило обнаружить корреляции с физическими характеристиками как мультифрактальных размерностей площадей фотографий поверхности (монотонное возрастание значений D_0-D_2 при увеличении массовой доли AlN в составе композита), так и мультифрактальных размерностей систем выделенных на изображениях границ. Полученный коэффициент корреляции между микротвердостью и фрактальной размерностью D_0 системы границ достигает 0,979, а сама зависимость с большой точностью может быть описана формулой $H = -148,1 D_0 + 230,4$ ГПа. Таким образом, в работе сделан вывод о том, что с физическими характеристиками могут быть связаны не только мультифрактальные характеристики изображений структуры фаз, но и мультифрактальные характеристики выделенных на них систем границ (границ зерен, границ фаз — в зависимости от исследуемого материала). Высокая степень корреляции между мультифрактальными и физическими характеристиками наблюдается как при вычислениях фрактальной размерности плоскости фотографий, так и для систем выделенных границ.

Ключевые слова: *электронно-микроскопическое изображение, структура материала, границы зерен, количественная характеристика, фрактальная размерность, мультифрактальные характеристики.*

ABSTRACT

Krasikova I.E. New quantitative methods for determining the structure of materials in electron microscopy. — Manuscript.

A dissertation for the degree of candidate of physical and mathematical sciences in the specialty 01.04.07 — solid state physics — I.N. Frantsevich Institute for Problems of Materials Science of National Academy of Sciences of Ukraine, Kiev, 2021.

The dissertation work is devoted to the development of a methodology for a mathematically defined quantitative characterization of the structure of a material based on its electron microscopic image. In the dissertation work, the adaptation of the mathematical model of the multifractal formalism to determine the quantitative characteristics of images of the structure of materials is carried out. The corresponding software, which gives stable calculation results, has been developed based on this adaptation. The high performance of the developed software makes it possible, in principle, to include it in existing software packages for processing electron microscopic images in real time, including the embedded software of electron microscopes. Using the presented technique, a study of the obtained multifractal and physical characteristics of hot-pressed AlB_{12} -AlN composites was carried out in order to verify the adaptation of models and the developed software. These studies allow to draw an important conclusion that physical characteristics can be associated not only with the multifractal characteristics of images of the phase structure, but also multifractal characteristics of the boundaries cut out on them (boundaries grains, phase boundaries — depending on the test material). The results of calculations of the fractal characteristics of chromium films deposited in argon with a change in the deposition temperature and depending on the addition of oxygen are presented. It is shown that there is a correlation between the fractal dimension and the physical characteristics of chromium films — the hardness H and the reduced modulus of elasticity $E_r = E/(1 - \nu^2)$. A high degree of correlation is observed both for calculating the fractal dimension of the micrographs themselves, and for systems of distinguished boundaries.

Keywords: *electron microscopic image, material structure, grain boundaries, quantitative characterization, fractal dimension, multifractal characteristics.*

Підписано до друку Формат 60×90/16
Ум. друк. арк. 0,9. Обл.-вид. арк. 0,9
Тираж прим. Замовлення №

Дільниця оперативної поліграфії
Інституту проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича
НАН України

03142, м. Київ, вул. Кржижановського, 3

