

Применение вейвлет-преобразования при изучении изменения фрактальных свойств поверхностей аморфных металлов под воздействием механической нагрузки

© В.Л. Гиляров, В.Е. Корсуков, П.Н. Бутенко*, В.Н. Светлов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

* Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,
195251 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: Vladimir.Hilarov@mail.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 9 марта 2004 г.)

Методом сканирующей туннельной микроскопии исследовано влияние механического растяжения на мультифрактальные характеристики латеральной поверхности аморфного сплава $\text{Fe}_{77}\text{Ni}_1\text{Si}_9\text{B}_{13}$. Установлено, что при небольших нагрузках происходит разглаживание поверхности, аналогичное разглаживанию смятого листа бумаги при его растяжении. При дальнейшем увеличении нагрузки возникает тенденция образования на поверхности фрактальной структуры.

Метод сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) широко применяется для исследования структуры поверхностей твердых тел на микро- и наномасштабных уровнях. Результатом эксперимента является поверхностный профиль — высота $z(x, y)$ в различных местах этой поверхности (точках (x, y)). Как правило, функция $z(x, y)$ является крайне нерегулярной, и для исследования ее геометрических свойств целесообразно применять статистические методы.

Среди статистических свойств в последнее время внимание исследователей привлекают фрактальные свойства поверхностей — самоподобное поведение профиля поверхности на разных масштабных уровнях [1]. Было исследовано много поверхностей различной физической природы, которые объявлялись фрактальными, по крайней мере в ограниченном диапазоне масштабов.

Интенсивно изучаются также фрактальные свойства поверхностей металлов и полупроводников при воздействии на них внешних факторов (например, механического растяжения [2–8]). Было обнаружено сильное влияние механического поля на геометрию поверхности, в частности на ее фрактальные свойства.

Схема растяжения, включающая образец, устройство для одноосного растяжения, сканирующий туннельный микроскоп, персональный компьютер и устройство его связи с микроскопом, представлена в [2]. Подготовка образцов из аморфного сплава железа $\text{Fe}_{77}\text{Ni}_1\text{Si}_9\text{B}_{13}$, исследованного в настоящей работе, изложена в [7]. На рис. 1 показан пример топограмм поверхности аморфного сплава железа, подвергнутого одноосному растяжению в разной степени.

Расчет фрактальной размерности (FR) производился различными методами. Метод а основан на использовании алгоритма „box counting“, или „по открытию“, для двух точек поверхности. Общий характер зависимости FR от нагрузки немоноотонен: сначала FR резко падает, а затем резко возрастает. Более того, необходимо отметить, что возрастание при увеличении нагрузки наблюдалось в соседних точках не всегда. Мы предполагаем,

что такой метод определения FR не полностью отражает наблюдаемую картину рельефа поверхности. Топограммы, полученные методом СТМ, содержали обычно 200 точек вдоль вертикального сечения (скана) и максимум 200 сканов (всего 40 000 точек). При покрытии поверхности размера L ячейками размера l их число растёт в зависимости от отношения размеров как $n = 2^{3i}$, где $i = L/l$. Отсюда при $i = 5$ $n = 32\,768$, т.е. при уменьшении масштаба всего в 5 раз требуется число ячеек, сравнимое с числом экспериментальных точек, и на более мелком масштабе ячейки будут заполнять нечем (база данных должна содержать значительно большее число экспериментальных точек). Поэтому алгоритм „по покрытию“ дает FR на больших масштабах, которая оказывается порядка 2. Аналогично обстоят дела и с методом нормирования размаха (метод b). В то же время метод спектрального анализа дает FR на другом масштабном уровне — на малых масштабах.

Спектральная FR, рассчитанная на основе спектра плотности мощности коррелятора (метод c) $C(\Delta x) = \langle z(x + \Delta x)z(x) \rangle$, т.е. величины

$$S(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} C(\Delta x) \exp(i\omega\Delta x) d\Delta x, \quad (1)$$

определяется ненадежно, поскольку величина $S(\omega)$ имеет большой разброс точек.

Из рассмотренных методик только первая является по-настоящему трехмерной. Две остальные основаны на исследовании двумерных кривых — вертикальных сечений поверхностных профилей вдоль выбранных направлений. Результаты расчета FR поверхностей, выполненные с помощью методов а и b, оказываются близкими и в пределах 10% не отличаются от 2.0, что соответствует размерности плоской поверхности, и в то же время отличаются значительно от FR, рассчитанной методом c (величины порядка 2.5). Такое различие

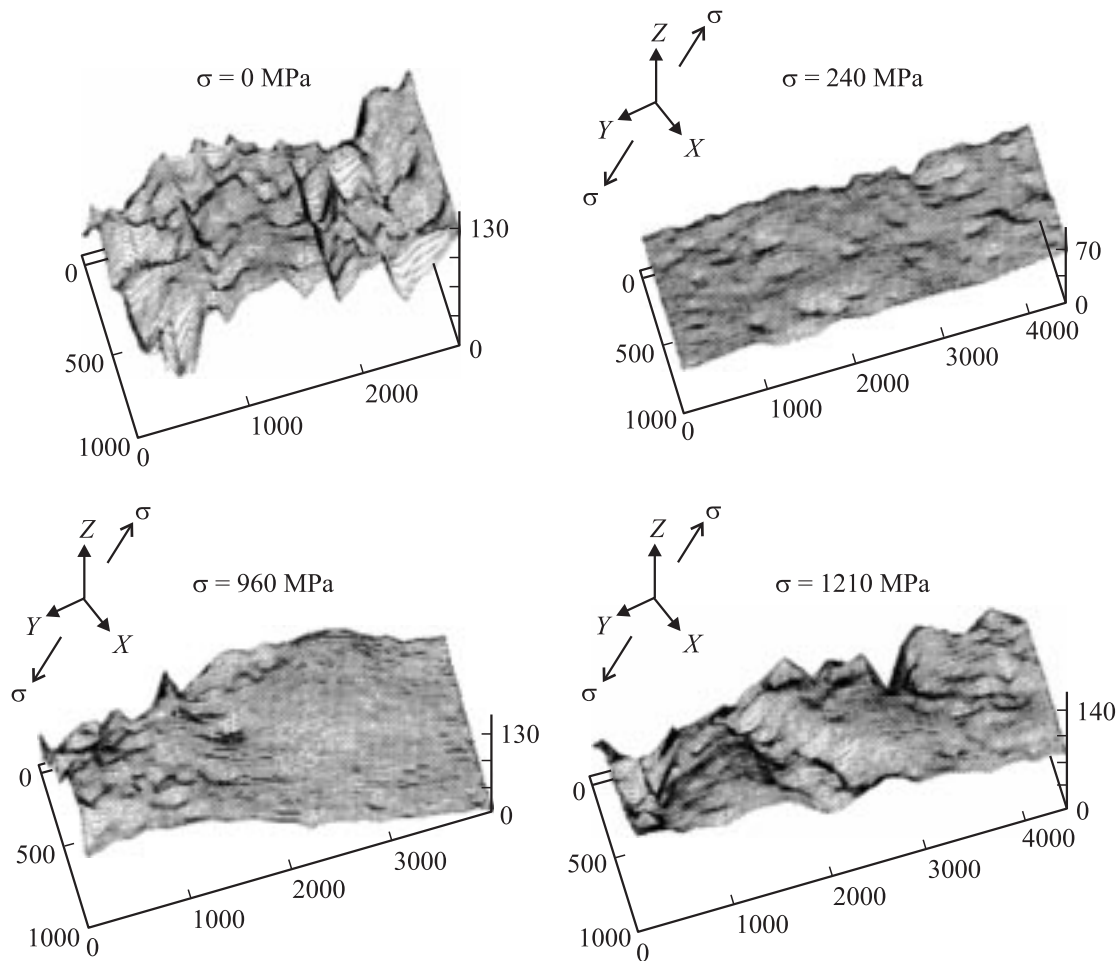


Рис. 1. Изменение геометрии поверхности аморфного сплава, подвергнутого возрастающему одноосному растяжению. Топограммы зафиксированы с помощью СТМ.

результатов связано с тем, что поверхности не являются фрактальными объектами, а представляют собой объекты самоаффинные. Фрактальные объекты являются структурами, которые „выглядят одинаково“ (статистически эквивалентны) при преобразовании подобия вида

$$z(\lambda x) = \lambda z(x), \quad (2)$$

т.е. при масштабировании координаты x вдоль одного направления и таком же масштабировании координаты z вдоль другого направления. Плоские поверхности с шероховатостью не обладают таким свойством, поскольку направления вдоль поверхности и поперек ее не эквивалентны. Эти поверхности остаются статистически эквивалентными при аффинном преобразовании вида

$$z(\lambda x) = \lambda^H z(x), \quad (3)$$

где величина коэффициента Херста $0 \leq H \leq 1$.

Самоаффинные поверхности не обладают единой FR. На больших масштабах их размерность „по покрытию“ ~ 2 , что соответствует размерности плоской поверхности. В то же время на малых масштабах FR определяется

коэффициентом H ($d = 2 - H$ или $1/H$ в зависимости от определения).

Метод вейвлет-преобразований (wavelet transform), позволяющий построить характеристики, аналогичные (1), для расчета FR [9], лишен многих недостатков, имеющих в методах а, b и с. В отличие от Фурье-преобразования, где в качестве базисных функций преобразования используются функции вида $\exp(ix) = \cos x + i \sin x$, являющиеся композицией синусоидальных волн с различными частотами и делокализованные в пространстве, для вейвлет-преобразования используются существенно локализованные солитонобразные функции. В качестве такой функции выбиралась функция вида „сомбреро“, сконструированная из второй производной функции Гаусса

$$\psi(x) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right). \quad (4)$$

Базис вейвлет-преобразования строится путем непрерывных масштабных преобразований и переносов $\psi(x)$ вида

$$\psi_{a,b}(x) = \psi\left(\frac{x-b}{a}\right).$$

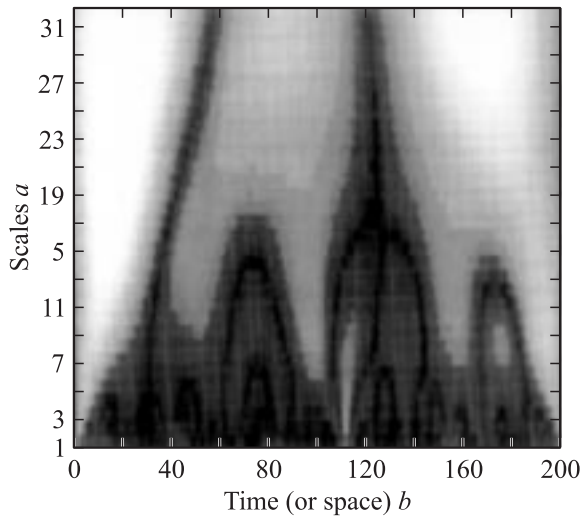


Рис. 2. Вейвлет-преобразование поверхностного рельефа.

Коэффициент a называют масштабным коэффициентом, коэффициент b — параметром сдвига. Тогда вейвлет-преобразование определяется как интегральное преобразование вида

$$W(a, b) = \frac{1}{\sqrt{a}} \int_{-\infty}^{\infty} z(x) \psi \left(\frac{x-b}{a} \right) dx. \quad (5)$$

Результатом вейвлет-преобразования является функция двух переменных (a и b), несущая информацию о распределении неоднородностей различных масштабов (размеров дефектов) в пространстве. Пример вейвлет-преобразования для исходной поверхности, изображенной на рис. 1, представлен на рис. 2

Непосредственно из вида коэффициентов вейвлет-преобразования можно судить о наличии разнообразных статистических закономерностей дефектной структуры поверхности. Существуют характерные „отпечатки“ различных типов дефектов в спектре коэффициентов вейвлет-преобразования, полученные для модельных систем и описанные в многочисленных обзорах (см., например, [10,11]). Не вдаваясь в детали, заметим, что на рис. 2 видна характерная древовидная структура, которая свойственна самоподобным фрактальным системам.

В предыдущем рассмотрении молчаливо предполагалось, что на поверхности существует фрактальная структура, которая характеризуется единой FR. Это предположение эквивалентно тому, что шероховатость поверхности не зависит от места, выбранного на этой поверхности. Очевидно, что это упрощенное предположение реально вряд ли выполняется, поскольку более вероятно, что существуют пространственные флуктуации шероховатости. При этом, как известно [1], систему нельзя больше характеризовать единым параметром регулярности (FR) и вместо нее следует вводить локальную характеристику, меняющуюся от точки к точке, — показатель Гельдера $h(x)$. Такие системы на-

зываются самоаффинными мультифракталами. Вейвлет-анализ позволяет эффективно исследовать эти системы. Если функция, описывающая систему, имеет в точке x_0 особенность с показателем Гельдера $h(x_0)$, то ее вейвлет-преобразование на малых масштабах обладает скейлингом вида

$$W(x_0, b) \sim b^{h(x_0)}. \quad (6)$$

Такой скейлинг имеет место в том случае, если анализирующий вейвлет выбран удачно, т.е. число его нулевых моментов $n_\psi > h(x_0)$,

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^m \psi(x) dx = 0, \quad \forall m: 0 \leq m < n_\psi.$$

Вейвлет-анализ позволяет выявлять количественные характеристики мультифрактальных систем, такие как спектр мультифрактальных размерностей $D(q)$, мультифрактальный спектр $f(h)$ и другие с ними связанные. Для этой цели можно использовать аппарат фрактальной термодинамики (см. работу [12] и ссылки в ней). Этот аппарат основан на принципе максимума модуля вейвлет-преобразования. В основе его лежит построение функции распределения вейвлет-коэффициентов вида

$$Z(q, a) = \sum_{b_i(a)} |W(a, b)|^q \propto a^{\tau(q)}. \quad (7)$$

Сумма в (7) берется по тем точкам пространства, в которых модуль вейвлет-преобразования принимает максимальные значения (по локальным максимумам модуля). Показано [9], что скелет, построенный из линий максимума модуля, содержит всю информацию о распределении особенностей исходной поверхности.

В работах [12–14] указано, что существует глубокая аналогия между мультифрактальным формализмом и термодинамикой. Так, величина $\tau(q)$ играет роль свободной энергии, а величина q — роль обратной температуры. Роль энергии играет величина показателя Гельдера h , а роль энтропии — спектр сингулярностей $f(h)$.

Расчет мультифрактальных свойств профилей поверхностей, полученных методом СТМ, проводился вдоль сканов топограмм с последующим усреднением по сканам. Из (7) можно рассчитать зависимость $\tau(q)$, используя линейную аппроксимацию $\log Z(q, a) - \log a$, а по известной зависимости $\tau(q)$ найти спектр $f(h)$. Для этой цели использовался пакет программ Wavelab 8.02 разработки Стэнфордского университета. Пример рассчитанных зависимостей $\tau(q)$ и $f(h)$ приведен на рис. 3.

Для этой поверхности зависимость $\tau(q)$ не является линейной, а спектр $f(h)$ уширен по сравнению со спектром для броуновской кривой. Значение максимума спектра $f(h) \approx 1$, что свидетельствует о том, что носителем меры опять выступает прямая линия, а сама поверхность представляет собой самоаффинный мультифрактал.

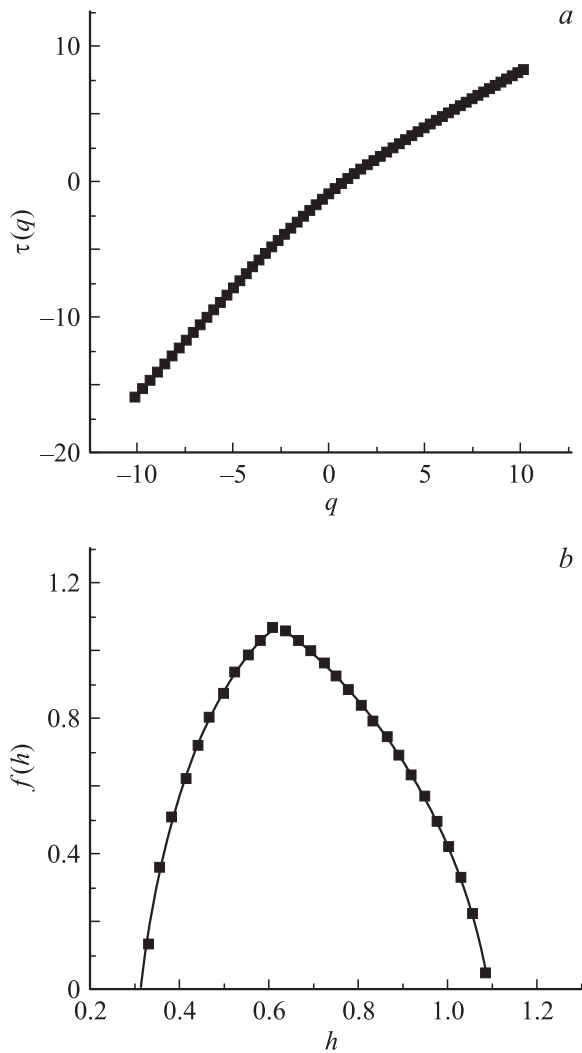


Рис. 3. Зависимость спектра показателей массы $\tau(q)$ (a) и мультифрактального спектра $f(h)$ (b).

Можно ожидать, что при приложении к образцам механического напряжения мультифрактальные спектры будут претерпевать изменения. В качестве численных характеристик, описывающих эти изменения, выбирались следующие параметры: FR — $D_S = 1 - \tau(1)$, полуширина мультифрактального спектра $\Delta = h_0 - h_{\min}$ и скейлинговый показатель спектральной плотности $\beta = 2 + \tau_2$.

Зависимости FR от нагрузки для двух серий экспериментальных данных в разных точках поверхности приведены на рис. 4.

Несмотря на сильный разброс данных, вызванный как чисто экспериментальными ограничениями (уход иглы сканирующего туннельного микроскопа из области наблюдения, измерения на воздухе), так и расчетными (200 сигналов на скан дают не очень хорошую статистику), можно отметить некоторые закономерности поведения FR при приложении нагрузки. На начальных стадиях механического нагружения наблюдается падение FR поверхности. При дальнейшем увеличении механической

нагрузки наблюдается увеличение FR (серия, представленная на рис. 4, a, так как для серии, приведенной на рис. 4, b, больших механических напряжений в базе данных нет).

Зависимости от нагрузки полуширин и положений максимума мультифрактального спектра приведены на рис. 5 для одной из серий экспериментальных данных, но в двух разных точках поверхности.

Из этих рисунков видно, что на начальной стадии нагружения при приложении механического напряжения весь спектр сингулярностей смещается в сторону больших значений показателя Гельдера. При этом ширина спектра увеличивается. Это означает, что на этой стадии происходит разглаживание поверхности (повышение ее регулярности), однако этот процесс идет неоднородно по плоскости поверхности, так как степень неоднородности, характеризующая ширину спектра, также увеличивается.

При дальнейшем увеличении механической нагрузки характер поведения спектра сингулярностей, как пра-

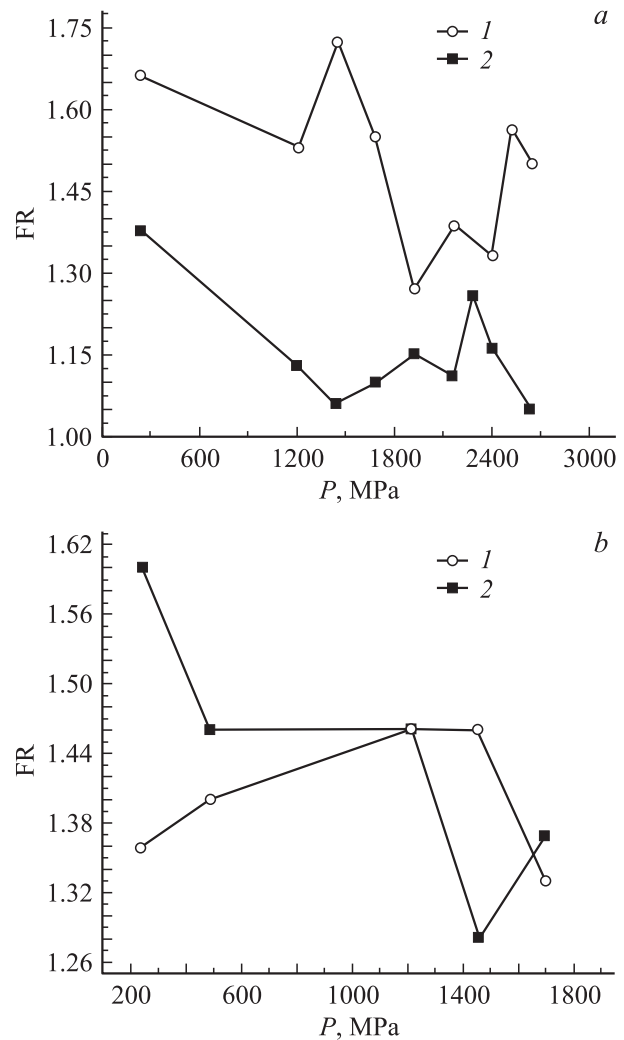


Рис. 4. Зависимости фрактальной размерности от нагрузки P в двух экспериментальных сериях (a, b) в разных точках поверхности (1, 2).

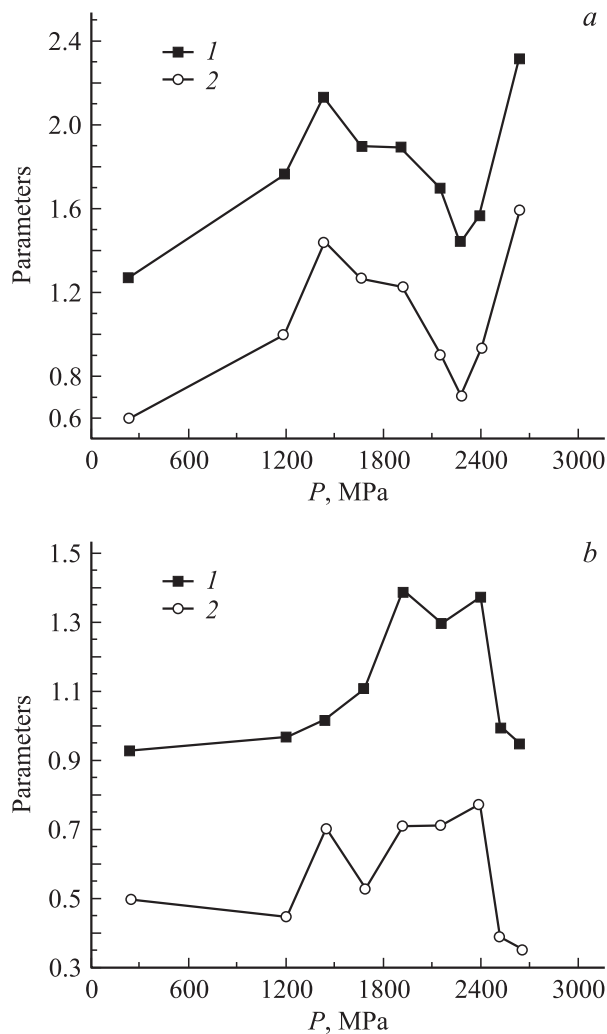


Рис. 5. Зависимости от нагрузки положений максимума (1) и полуширин (2) мультифрактального спектра для одной экспериментальной серии в точках поверхности 1 (а) и 2 (б).

вило, меняется на обратный — ширина и положение спектра смещаются в сторону меньших значений. Это свидетельствует о том, что на данной стадии нагружения система стремится к образованию новой монофрактальной структуры.

Нам представляется, что разглаживание поверхности при приложении небольших механических напряжений связано с тем, что исходная поверхность аморфного сплава формировалась в сильно неравновесных условиях (методом спиннингования из расплава). Поэтому она имеет повышенную шероховатость. Действие растягивающего механического напряжения на такую поверхность аналогично разглаживанию смятого листа бумаги при его растяжении за края. Стремление к формированию новой фрактальной структуры при более высоких напряжениях отражает начальную стадию разрушения поверхности. Конечной стадией разрушения часто является состояние самоорганизованной критичности, для которого характерны самоподобные фрактальные структуры.

Список литературы

- [1] Е. Федер. Фракталы. Мир, М. (1991). 254 с.
- [2] С.Н. Журков, В.Е. Корсуков, А.С. Лукьяненко, Б.А. Обидов, В.Н. Светлов, А.П. Смирнов. Письма в ЖЭТФ **51**, 6, 324 (1990).
- [3] В.Е. Корсуков, А.С. Лукьяненко, Б.А. Обидов, В.Н. Светлов. Письма в ЖЭТФ **55**, 10, 595 (1992).
- [4] В.Е. Корсуков, А.С. Лукьяненко, Б.А. Обидов, В.Н. Светлов, Е.В. Степин. Письма в ЖЭТФ **57**, 6, 343 (1993).
- [5] V. Korsukov, A. Lukyanenko, B. Obidov. Surface Rev. Lett. **5**, 1, 37 (1998).
- [6] Н.Н. Горобей, С.А. Князев, В.Е. Корсуков, А.С. Лукьяненко, Б.А. Обидов, В.Е. Харциев. Письма в ЖТФ **28**, 1, 54 (2002).
- [7] В.И. Бетехтин, П.Н. Бутенко, В.Л. Гиляров, В.Е. Корсуков, А.С. Лукьяненко, Б.А. Обидов, В.Е. Харциев. Письма в ЖТФ **28**, 1, 60 (2002).
- [8] В.И. Бетехтин, Н.Н. Горобей, С.А. Князев, В.Е. Корсуков, А.С. Лукьяненко, Б.А. Обидов, А.Н. Томилини. Письма в ЖТФ **28**, 7, 63 (2002).
- [9] S. Mallat, W.L. Hwang. IEEE Trans. Inf. Theory **38**, 617 (1992).
- [10] V.V. Zverev, A.G. Zalazinski, V.I. Novozhonov, A.P. Polyakov. J. Appl. Mech. Tech. Phys. **42**, 363 (2001).
- [11] Н.М. Асгафьева. УФН **166**, 1145 (1996).
- [12] A. Arneodo, E. Bacry, J.F. Muzy. Physica A **213**, 232 (1995).
- [13] P. Collet, J. Lebowitz, A. Porsio. J. Statist. Phys. **47**, 609 (1987).
- [14] M.J. Feigenbaum. J. Statist. Phys. **46**, 919 (1987).