Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. Н. Аптуков, В. Ю. Митин, Фрактальные и механические свойства кристаллов сильвина и галита в микро- и нанодиапазоне, *Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки*, 2017, номер 3, 481–495

DOI: <https://doi.org/10.14498/vsgtu1553>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.197.217.227

26 апреля 2023 г., 02:53:11

Механика деформируемого твёрдого тела

УДК 51-7:51:548; 548.0:539.3/.8

Фрактальные и механические свойства кристаллов сильвина и галита в микро- и нанодиапазоне

*В. Н. Аптуков, В. Ю. Митин*Пермский государственный национальный исследовательский университет,
Россия, 614000, Пермь, Букирева, 15.

Аннотация

Приведены результаты обработки и анализа экспериментальных данных по сканированию рельефа поверхности и индентированию кристаллов соляных пород в микро- и нанодиапазоне, полученных на зондовом сканирующем микроскопе Dimension Icon на основе построенных математических моделей. Описаны основные методы исследования фрактальных свойств. Для оценки фрактальных свойств изучаемых кристаллов выбран метод минимального покрытия, показана его эффективность по сравнению с другими методами. Приведен алгоритм метода минимального покрытия и описано его обобщение на случай двумерных рядов. Вычислены значения индекса фрактальности и мультифрактальных параметров для поверхностей кристаллов сильвина и галита в нанодиапазоне на основе метода минимального покрытия в одномерном и двумерном варианте. Изучены эффекты анизотропии фрактальных свойств. Сопоставлены фрактальные свойства кристаллов на различных масштабных уровнях. Приведены оценки твердости и модуля упругости разных участков исследуемых кристаллов и исследована их корреляция с фрактальной размерностью. Указан характер влияния фрактальной размерности на трещиностойкость.

Ключевые слова: кристаллы соляных пород, фрактальная размерность, мультифракталы, метод минимального покрытия, наноиндентирование, твердость.

Получение: 11 июля 2017 г. / Исправление: 13 сентября 2017 г. /

Принятие: 18 сентября 2017 г. / Публикация онлайн: 28 сентября 2017 г.

Научная статья

Контент публикуется на условиях лицензии [Creative Commons Attribution 4.0 International](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.ru) (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.ru>)

Образец для цитирования

Аптуков В. Н., Митин В. Ю. Фрактальные и механические свойства кристаллов сильвина и галита в микро- и нанодиапазоне // *Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки*, 2017. Т. 21, № 3. С. 481–495. doi: [10.14498/vsgtu1553](https://doi.org/10.14498/vsgtu1553).

Сведения об авторах

Валерий Нагимович Аптуков <http://orcid.org/0000-0001-8048-3804>

доктор технических наук, профессор; заведующий кафедрой; каф. фундаментальной математики; e-mail: aptukov@psu.ru

Виктор Юрьевич Митин <http://orcid.org/0000-0003-2406-3009>

ассистент; каф. фундаментальной математики; e-mail: victormitin@ya.ru

Введение. В настоящее время основные научные сведения о свойствах соляных пород получают в ходе натурных наблюдений и экспериментов на макроуровне. Поскольку эти породы представляют из себя минеральные агрегаты, то их макроскопические свойства обусловлены свойствами зерен и межзеренных границ, а также механическими характеристиками кристаллов на микро- и наноуровне. Данные о свойствах кристаллов соляных пород [1] в микро- и нанодиапазоне могут быть использованы при верификации и развитии моделей деформирования и разрушения соляных пород, что достаточно актуально в свете существующих проблем безопасности при эксплуатации Верхнекамского месторождения калийно-магниевых солей.

Существует большое количество исследований различных солей в макродиапазоне (например, оценки предела прочности соляных пород и их модуля упругости [2], подробный обзор прочностных и деформационных свойств представлен в монографиях [1, 3]), однако экспериментальные данные в наномасштабе практически отсутствуют. Известно, что шероховатость поверхности может оказывать существенное влияние на различные физико-механические свойства соляных пород, например трещиностойкость [4, 5] и смачиваемость [5], поэтому наряду с изучением механических характеристик необходимо исследование статистических свойств рельефа поверхности, для которого в последнее время все чаще используются фрактальные методы [6].

В течение нескольких лет на кафедре механики сплошных сред и вычислительных технологий Пермского государственного национального исследовательского университета проводились эксперименты по сканированию рельефа и индентированию [7, 8] образцов кристаллов сильвина, карналлита и шпатовой соли в микро- и нанодиапазоне на зондовом силовом микроскопе Dimension Icon и установке NanoTest-600. В качестве меры шероховатости поверхности использовалась фрактальная размерность D , оцениваемая на основе эффективного и обладающего высокой скоростью сходимости численного метода минимального покрытия [9–11], в котором базовым параметром является индекс фрактальности $\mu = D - 1$. В настоящее время этот метод все чаще используется для фрактального анализа экспериментальных данных, например, в работах [12, 13]. Твердость и модуль упругости оценивались по авторской методике на основе математических моделей, описанных в статьях [14, 15].

Для исследования кристаллов соляных пород разработан комплекс программ, зарегистрированных в ОФЭРНиО: программа FrInd (рег. № 19598 от 30.10.2013), позволяющая вычислять индекс фрактальности модельных и экспериментальных рядов при различном выборе последовательности аппроксимаций в методе минимального покрытия; программа NanoSearch H&E (рег. № 19599 от 30.10.2013) для оценки твердости и модуля упругости в нанодиапазоне на основе данных индентирования путем построения и анализа графиков зависимости «усилие – глубина проникания» с помощью разработанных математических моделей.

Первые данные о фрактальной размерности в микродиапазоне для зерен сильвина были получены на основе метода Херста. Далее [16] были рассчитаны индексы фрактальности для различных областей кристаллов сильвина, карналлита и шпатовой соли, обнаружены эффекты анизотропии и изучена взаимосвязь фрактальных свойств и структуры кристаллов. Значения твер-

дости и модуля упругости для исследованных образцов рассчитаны в микро-диапазоне и в нанодиапазоне.

В работе [5] рассмотрены новые типы кристаллов соляных пород, для которых рассчитаны значения фрактальных и механических параметров в нанодиапазоне и исследован характер влияния фрактальной размерности на трещиностойкость и смачиваемость кристаллов.

В данной статье представлены результаты изучения новых образцов этих кристаллов, сопоставления их фрактальных (индекс фрактальности) и механических (твердость, модуль упругости) свойств. Сравниваются значения индекса фрактальности кристаллов молочно-белого сильвина для различных масштабных уровней.

1. Описание экспериментов. Изучены 3 типа кристаллов (молочно-белый сильвин (milk-white sylvite) с примесью сероводорода, красный сильвин (red sylvite), перистый галит (halite)), для которых выполнено сканирование участка 20×20 мкм с помощью зондового микроскопа Dimension Icon с разрешением 384×384 точек, шаг сканирования $h = 52.1$ нм. Образцы готовились путем скола по поверхности спайности. Изображения микрорельефа кристаллов приведены на рис. 1.

Рис. 1. Микрорельеф поверхностей кристаллов: слева — молочно-белый сильвин, посередине — красный сильвин, справа — перистый галит (онлайн в цвете)

[Figure 1. (Color online) The microrelief of crystal surfaces for milk-white sylvite (left), red sylvite (center), and halite (right)]

На поверхностях рассматриваемых кристаллов в областях 20×20 мкм были выполнены 25 индентаций в узлах квадратной сетки 5×5 с шагом 2.8 мкм (на фотографиях рис. 1 отчетливо просматриваются следы от индентаций). Для исследования зависимости фрактальных свойств от масштаба измерения было осуществлено сканирование другого участка поверхности кристалла молочно-белого сильвина размером 30×30 мкм (область A) с разрешением 768×768 точек ($h = 39.1$ нм), в пределах которого выбрана область 3×3 мкм (область B), которая была просканирована с разрешением 384×384 точек ($h = 4.3$ мкм) (см. рис. 2).

Выполнено сканирование микрорельефа поверхности зерна молочно-белого сильвина в микродиапазоне с помощью установки NanoTest-600 вдоль 4-х параллельных линий (рядов) длиной 870 мкм, расстояние между которыми составляло 50 мкм. Длина каждого ряда составляла около 2500 точек. Для увеличения количества исследуемых масштабов на основе этих линий можно

Рис. 2. Микрорельеф областей *A* и *B* для кристалла молочно-белого сильвина
 [Figure 2. (Color online) The microrelief of regions *A* and *B* for a milk-white sylvite crystal]

построить последовательность рядов: первый ряд — исходный; во второй ряд включается каждая вторая точка исходного ряда; далее аналогично в p -тый ряд включается каждая p -тая точка исходного ряда. Придавая параметру p натуральные значения от 1 до 7, получим семь масштабных уровней в микродиапазоне, на каждом из которых проведен фрактальный анализ на основе метода минимального покрытия.

2. Метод минимального покрытия и его мультифрактальное обобщение. Существует большое количество подходов к оценке фрактальной размерности [4, 17, 18], из них наиболее часто используются метод клеточного покрытия [19] и метод нормированного размаха [20, 21]. При небольшой длине ряда выбор метода является немаловажным, поскольку он может существенно влиять на адекватность фрактальной модели. В частности, алгоритм метода Херста ориентирован на анализ временных рядов и описывает эффекты долговременной памяти, что не соответствует особенностям объекта моделирования. Действительно, для рядов данных, описывающих микрорельеф поверхности, все точки являются равноправными, а направление обхода ряда несущественно, в то время как для временных рядов обычно рассматривается одно направление — от прошлого к будущему, а предыдущие значения измеряемой величины могут влиять на последующие.

Метод клеточного покрытия, в котором используются покрытия квадратами (кубами), удобно применять в том случае, когда порядки величин высотного размаха и размеров области сканирования сопоставимы, при этом полученное фрактальное множество равномерно заполняет квадрат. Для экспериментальных данных характерная амплитуда неровностей значительно меньше размеров исследуемого участка поверхности кристаллов. Это приводит к дополнительной задаче выбора подходящей нормировки данных, вследствие чего может резко увеличиваться погрешность оценки фрактальной размерности (например, при наличии больших перепадов высот).

Алгоритм метода минимального покрытия для одномерных рядов выглядит следующим образом.

1. Выбирается последовательность разбиений исходного ряда длины n на частичные интервалы, содержащие по m точек (последний интервал содержит меньше точек, если n не делится нацело на m).
2. Для всех интервалов любого разбиения вычисляются локальные размахи, равные разности между максимальным и минимальным значени-

ем ряда, их сумма по всем интервалам — полная амплитудная вариация $V(\delta)$, соответствующая разбиению с диаметром $\delta = m/n$.

3. Индекс фрактальности μ оценивается при аппроксимации зависимости $V(\delta) = \delta^{-\mu}$, как угловой коэффициент линии регрессии в двойном логарифмическом масштабе и связан с фрактальной размерностью соотношением $D = \mu + 1$.

Для фрактального моделирования на основе метода нормированного размаха необходимо, чтобы исходный ряд содержал несколько тысяч точек [21]. Напротив, метод минимального покрытия позволяет быстро выходить на асимптотический режим при анализе рядов меньшей длины. На рис. 3 приведен график сходимости для одного из экспериментальных рядов, содержащих 384 точки.

С помощью вычислительных экспериментов со случайными рядами установлено, что на оценочные значения индекса фрактальности не оказывают существенного влияния малая погрешность измерений, наличие одиночных выбросов, отличающихся от значений в точках ряда не более чем на порядок, выбор последовательности аппроксимаций в установленных пределах.

Метод минимального покрытия может быть обобщен на двумерные ряды. В этом случае для множества точек ряда строится покрытие, минимальное в классе правильных четырехугольных призм, основанием которых является квадрат со стороной δ . Полная амплитудная вариация является суммой локальных размахов в каждом квадрате разбиения, а индекс фрактальности оценивается из соотношения $V(\delta) \sim \delta^{-(\mu+1)}$. При этом фрактальная размерность выражается формулой $D = 2 + \mu$.

В статье [9] предложен вариант мультифрактального анализа на основе метода минимального покрытия. Скейлинговая функция $\tau(q)$ определяется аналогично индексу фрактальности для вариации $V(q, \delta)$, равной сумме q -тых степеней локальных размахов, при этом $\mu = \tau(1)$. Для одномерных рядов обобщенные размерности R_q определяются по формуле

$$R_q = \frac{\tau(q) + 2q - 1}{q}.$$

Если $q = 1$, то это будет соответствовать обычной фрактальной размерности $R_1 = D = \mu + 1$.

Рис. 3. Зависимость амплитудной вариации V от масштабного параметра δ
 [Figure 3. Dependence of the amplitude variation V on the scale parameter δ]

О степени выраженности мультифрактальных свойств можно судить по разности величин R_q при изменении параметра q .

Величины R_q при $q > 1$ характеризуют шероховатость участков рельефа с большим перепадом высот, а при $q < 1$ — с малым перепадом высот, поскольку такие слагаемые вносят больший вклад в амплитудную вариацию.

3. Фрактальная размерность и эффекты анизотропии различных кристаллов соляных пород. Результаты фрактального анализа показывают, что исследуемые кристаллы обладают близкими значениями фрактальной размерности в диапазоне $0.1 \div 0.25$. Ранее в статье [5] были получены более низкие значения индекса фрактальности для участков кристаллов видов 2 и 3 на поверхности спайности — в диапазоне $0 \div 0.1$.

Средние значения индекса фрактальности для каждого кристалла (на основе горизонтальных и вертикальных рядов) приведены в табл. 1.

Таблица 1

Средние значения индекса фрактальности для рассматриваемых кристаллов
[The mean values of the fractal index for the crystals under consideration]

Milk-white sylvite		Red sylvite		Halite	
rows	columns	rows	columns	rows	columns
0.17	0.20	0.13	0.19	0.20	0.21

Зависимость индекса фрактальности от номера строки (для горизонтальных линий) представлена на рис. 4.

Рис. 4. Значения индекса фрактальности для рассматриваемых кристаллов (по строкам)
[Figure 4. Values of the fractal index for the crystals under consideration (rows)]

Для всех графиков свойственны значительные колебания значений индекса фрактальности (наибольший размах значений достигается для молочно-белого сильвина — около 0.25), однако они, как правило, не превышают 0.3 (абсолютный максимум составляет 0.33 для перистого галита).

На рис. 5 построены графики в полярных координатах, где длина радиус-вектора каждой точки соответствует индексу фрактальности одномерного ряда в данном направлении.

Результаты вычислений показывают, что для исследуемых кристаллов характерна зависимость индекса фрактальности от направления (эффекты анизотропии), в наибольшей степени она выражена для перистого галита (размах значений достигает 0.2).

Рис. 5. Зависимость индекса фрактальности от направления одномерного среза в полярных координатах [Figure 5. Dependence of the fractal index on the direction of a linear cut in the polar coordinates]

При исследовании фрактальных свойств для всей поверхности в целом с помощью двумерного алгоритма метода минимального покрытия получены следующие значения индекса фрактальности: для белого сильвина — 0.12, для красного сильвина — 0.16, для перистого галита — 0.21. Все полученные оценки также попадают в диапазон 0.1÷0.25.

В сравнении с ранее полученными оценками фрактальной размерности для различных кристаллов соляных пород [5, 16, 22] данные значения можно считать невысокими. Согласно результатам, полученным в работе [5], небольшим значениям фрактальной размерности соответствует низкий уровень трещиностойкости.

4. Зависимость индекса фрактальности от масштаба для молочно-белого сильвина. В отличие от идеальных фрактальных множеств, где можно рассматривать предел фрактальной меры при стремлении масштаба разбиения к нулю, для экспериментальных рядов существует минимальный масштаб, определяемый шагом сканирования; количество точек ряда также ограничено характеристиками микроскопа. Фрактальные свойства и структурные особенности кристаллов на разных масштабных уровнях могут быть неодинаковыми. Например, в статье [22] при изучении кристаллов шпатового галита на трех масштабных уровнях (с шагом сканирования около 40 нм, 200 нм и 1 мкм) показано, что как величина индекса фрактальности, так и характер ее зависимости от направления различаются.

4.1. Фрактальные свойства в нанодиапазоне. Следующие результаты получены при исследовании молочно-белого сильвина при шаге сканирования около 40 нм (область А) и около 8 нм (область В). Средние значения индекса фрактальности по строкам и столбцам приведены в табл. 2.

Из данных табл. 2 следует, что для области А и ее подобласти В харак-

Таблица 2

Средние значения индекса фрактальности для кристалла молочно-белого сильвина [The mean values of the fractal index for a milk-white sylvite crystal]

Region A, rows	Region A, cols	Region B, rows	Region B, cols
0.11	0.60	0.17	0.28

терно неустойчивое фрактальное поведение, зависящее от направления. Для столбцов величины индекса фрактальности близки к нулю, а для строк они изменяются в широком диапазоне $0 \div 0.4$.

Таким образом, фрактальное поведение поверхности изучаемых кристаллов на двух масштабных уровнях обладает некоторыми чертами сходства (малые значения индекса фрактальности для строк, более высокие и неустойчивые для столбцов).

4.2. Фрактальные свойства в микродиапазоне. В табл. 3 приведены значения индекса фрактальности, вычисленные на основе экспериментальных данных, полученных на установке NanoTest-600 для различных масштабных уровней в микродиапазоне.

Таблица 3

Зависимость индекса фрактальности поверхности кристаллов молочно-белого сильвина от масштаба в микродиапазоне [The dependence of fractal index of milk-white sylvite crystal surface on the scale in microrange]

Step, h	Line 1	Line 2	Line 3	Line 4
0.34 μm	0.10	0.07	0.11	0.11
0.68 μm	0.11	0.07	0.11	0.10

Из данных табл. 3 следует, что в исследуемом диапазоне фрактальные свойства поверхности кристаллов молочно-белого сильвина практически не изменяются, с ростом шага наблюдается лишь незначительное повышение индекса фрактальности. Все значения индекса фрактальности попадают в интервал $0.06 \div 0.16$. В нанодиапазоне (табл. 1) для поверхности кристаллов молочно-белого сильвина средние значения индекса фрактальности немного выше (0.17 для строк, 0.20 для столбцов).

5. Мультифрактальные свойства кристаллов соляных пород. Для каждого из рассматриваемых кристаллов выбран одномерный ряд, для которого рассчитаны значения R_q при $q = 1$, $q = 2$, $q = 5$. Результаты вычислений приведены в табл. 4.

Таблица 4

Средние значения индекса фрактальности R_q для рассматриваемых кристаллов [The mean values of the fractal index R_q for the crystals under consideration]

Milk-white sylvite			Red sylvite			Halite		
$q = 1$	$q = 2$	$q = 5$	$q = 1$	$q = 2$	$q = 5$	$q = 1$	$q = 2$	$q = 5$
1.16	1.41	1.65	1.19	1.38	1.65	1.23	1.32	1.41

Для всех кристаллов значения R_q значительно увеличиваются с ростом q , таким образом, их поверхность обладает мультифрактальными свойствами. Для кристалла перистого галита их степень выраженности меньше, чем для остальных образцов. Значения R_q при $q = 2$ и $q = 5$ для кристалла галита ниже, чем для кристаллов сильвина, несмотря на то, что индекс фрактальности (при $q = 1$) для поверхности перистого галита ниже. Относительные отклонения значений R_q от индекса фрактальности для рассматриваемых кристаллов при $q = 2$ составляют 21.5 % (для молочно-белого сильвина),

16 % (для красного сильвина) и 7.3 % (для перистого галита); при $q = 5$ соответственно 42.2 %, 38.7 %, 14.6 %.

Для участков областей A и B мультифрактальное поведение изменяется в различных частях поверхности кристаллов. Для некоторых линий мультифрактальные свойства практически не проявляются, для других могут быть значительны. Например, для строк области B существует диапазон, в котором значения обобщенных размерностей, в частности R_2 , возрастают скачкообразно, а вне этого диапазона они остаются низкими. В области A характер мультифрактального поведения остается неоднозначным.

Ранее в работе [23] был проведен мультифрактальный анализ аналогичных кристаллов соляных пород на основе метода клеточного покрытия, где также было установлено наличие слабовыраженных мультифрактальных свойств в особенности для неоднородных областей кристаллов, индекс фрактальности которых значительно изменяется в пределах исследуемого участка или зависит от направления.

6. Твердость кристаллов соляных пород и ее корреляция с индексом фрактальности. Твердость кристаллов соляных пород определялась на основе данных индентирования по формуле

$$H = k \frac{P}{L^2},$$

где P — прикладываемое усилие, L — глубина проникания кантилевера в образец, константа $k = 0.18$ получена путем моделирования реальной геометрии кантилевера и нахождения площади поверхности отпечатка с помощью разработанной программы NanoSearch H&E.

Среднее значение твердости по 25-ти индентированиям при $L = 60$ нм для молочно-белого сильвина дает значение 3.34 ГПа, а для красного сильвина — 2.38 ГПа. Для всех исследуемых кристаллов обнаружены размерные эффекты: твердость убывает с увеличением глубины индентирования вследствие размерного эффекта [24,25]. Графики зависимости твердости от глубины индентирования для одной из силовых линий кристаллов молочно-белого сильвина и красного сильвина приведены на рис. 6.

Вычислены средние значения твердости по пяти вертикальным линиям и пяти горизонтальным линиям, проходящим через точки индентирования и им поставлены в соответствие значения индекса фрактальности соответствующих одномерных рядов. Результаты приведены в табл. 5.

Рис. 6. Зависимость твердости от глубины индентирования
[Figure 6. Dependence of hardness on depth of indentation]

Таблица 5

Средние значения твердости H и индекса фрактальности μ для кристаллов сильвина
[The mean values of the hardness J and the fractal index μ for the sylvite crystals]

Milk-white sylvite	H , GPa	μ	Red sylvite	H , GPa	μ
Vertical line 1	3.02	0.20	Horizontal line 1	3.10	0.20
Vertical line 2	3.03	0.22	Horizontal line 2	3.30	0.16
Vertical line 3	2.96	0.25	Horizontal line 3	3.48	0.20
Vertical line 4	3.78	0.21	Horizontal line 4	3.42	0.22
Vertical line 5	3.92	0.14	Horizontal line 5	3.43	0.16

Таблица 6

Средние значения модуля упругости E (ГПа) для кристалла молочно-белого сильвина
[The mean values of the elastic modulus (E , GPa) for the milk-white sylvite crystal]

Vertical line 1	25.05	Horizontal line 1	23.97
Vertical line 2	25.42	Horizontal line 2	23.86
Vertical line 3	25.34	Horizontal line 3	26.66
Vertical line 4	25.79	Horizontal line 4	24.53
Vertical line 5	25.57	Horizontal line 5	28.14

Коэффициент линейной корреляции между твердостью и индексом фрактальности равен (-0.57). Таким образом, для кристаллов молочно-белого сильвина обнаружена обратная зависимость между твердостью и фрактальной размерностью. Аналогичный вывод ранее был сделан для искусственных кристаллов поваренной соли.

7. Модуль упругости кристаллов соляных пород и его корреляция с индексом фрактальности. Значение эффективного модуля упругости для кристаллов молочно-белого сильвина вычислялось по авторской методике, описанной в статьях [14, 15]. Значение коэффициента Пуассона полагалось равным 0.4. Для кристалла молочно-белого сильвина были получены следующие результаты (см. табл. 6).

Таким образом, величины модуля упругости в различных участках кристалла являются близкими. Значение коэффициента корреляции между модулем упругости и индексом фрактальности составляет (-0.19), следовательно, корреляция между этими параметрами практически отсутствует. В связи с близостью получаемых значений E и μ окончательный вывод о взаимосвязи фрактальных и механических параметров может быть получен на основе большой совокупности опытов.

Закключение. Исследование фрактальных и механических свойств кристаллов соляных пород на основе построенных математических моделей с использованием разработанного комплекса программ привело к следующим основным результатам. Численный метод минимального покрытия является эффективным для изучения фрактальных свойств кристаллов, обладает высокой скоростью сходимости. Значения фрактальной размерности одномерных срезов поверхности изучаемых кристаллов обычно не превышают 0.3 и проявляют зависимость от направления (более выраженные эффекты анизотропии отмечены для перистого галита). Исследованные профилограммы также обладают мультифрактальными свойствами. Фрактальное пове-

дение рядов микрорельефа на разных масштабных уровнях является самоподобным. Оценочные значения микротвердости при $L = 60$ нм расположены в диапазоне 2–4 ГПа, для всех кристаллов наблюдаются размерные эффекты (с ростом глубины индентирования уменьшается твердость). Для кристаллов молочно-белого сильвина получена обратная корреляция между твердостью и индексом фрактальности. Корреляция между индексом фрактальности и модулем упругости практически отсутствует.

Конкурирующие интересы. Мы не имеем конкурирующих интересов.

Авторский вклад и ответственность. Все авторы принимали участие в разработке концепции статьи и в написании рукописи. Авторы несут полную ответственность за предоставление окончательной рукописи в печать. Окончательная версия рукописи была одобрена всеми авторами.

Финансирование. Исследование выполнялось без финансирования.

Благодарности. Авторы выражают искреннюю благодарность сотрудникам кафедры МСС и ВТ ПГНИУ И. А. Морозову, А. П. Скачкову и В. Н. Солодько за помощь в проведении экспериментальных работ.

Библиографический список

1. Проскуряков Н. М., Пермяков А. С., Черников А. К. *Физико-механические свойства соляных пород*. Л.: Недра, 1973. 272 с.
2. Барях А. А., Асанов В. А., Паньков И. Л. *Физико-механические свойства соляных пород Верхнекамского калийного месторождения*. Пермь: ПГТУ, 2008. 198 с., <http://elbib.pstu.ru/vufind/Record/RUPSTUbooks126434>.
3. Короленко П. В., Маганова М. С., Меснякин А. В. *Новационные методы анализа стохастических процессов и структур в оптике*. М.: МГУ, 2014. 82 с.
4. Мосолов А. Б. Фрактальная гриффитсова трещина // *Журнал технической физики*, 1991. Т. 61, № 7. С. 57–60.
5. Аптуков В. Н., Митин В. Ю. Механические и фрактальные свойства поверхности кристаллов соляных пород в нанодиапазоне и их влияние на трещиностойкость и смачиваемость // *Физико-технические проблемы разработки полезных ископаемых*, 2016. № 4. С. 29–38.
6. Селяев В. П., Низина Т. А., Балыков А. С., Низин Д. Р., Балбалин А. В. Фрактальный анализ кривых деформирования дисперсно-армированных мелкозернистых бетонов при сжатии // *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика*, 2016. № 1. С. 129–146. doi: [10.15593/perm.mech/2016.1.09](https://doi.org/10.15593/perm.mech/2016.1.09).
7. Головин Ю. И. Наноиндентирование как средство комплексной оценки физико-химических свойств материалов в субмикрообъемах (обзор) // *Заводская лаборатория. Диагностика материалов*, 2009. Т. 75, № 1. С. 45–59.
8. Усеинов С. С. Особенности применения метода наноиндентирования для измерения твердости на наномасштабе // *Нанотехника*, 2008. № 13. С. 111–115.
9. Дубовиков М. М. Индекс вариации и его приложение к анализу фрактальных структур / Александр Гордон. *Научный альманах*, Т. 1. М.: Поматур, 2003. С. 5–33.
10. Калуж Ю. А., Логинов В. М. Показатель Хёрста и его скрытые свойства // *Сиб. журн. индустр. матем.*, 2002. Т. 5, № 4. С. 29–37.
11. Dubovikov M. M., Starchenko N. V., Dubovikov M. S. Dimension of the minimal cover and fractal analysis of natural time series // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 2004. vol. 339, no. 3. pp. 591–608. doi: [10.1016/j.physa.2004.03.025](https://doi.org/10.1016/j.physa.2004.03.025).
12. Васильев В. В. Вычисление индекса фрактальности временного ряда // *Вестник Тамбовского университета. Сер. Естественные и технические науки*, 2010. Т. 16, № 4. С. 1047–1049.

13. Владимирова Д. Б. Индекс фрактальности в исследованиях детерминированности временных рядов // *Наука и бизнес: пути развития*, 2015. № 8. С. 76–91.
14. Аптуков В. Н., Константинова С. А., Митин В. Ю., Скачков А. П. Механические характеристики зерна сильвина в нано- и микродиапазоне // *Физико-технические проблемы разработки полезных ископаемых*, 2012. № 3. С. 35–43.
15. Аптуков В. Н., Митин В. Ю., Молоштанова Н. Е., Морозов И. А. Механические характеристики карналлита, шпатовой соли и сильвинита в нанодиапазоне // *Физико-технические проблемы разработки полезных ископаемых*, 2013. № 3. С. 49–56.
16. Аптуков В. Н., Митин В. Ю. Сравнительные характеристики изрезанности рельефа поверхности зерен сильвина, шпатовой соли и карналлита в нанодиапазоне // *Физико-технические проблемы разработки полезных ископаемых*, 2013. № 1. С. 51–60.
17. Gallant J. C., Moore I. D., Hutchinson M. F., Gessler P. Estimating fractal dimension of profiles: A comparison of methods // *Mathematical Geology*, 1994. vol. 265, no. 4. pp. 455–481. doi: [10.1007/BF02083489](https://doi.org/10.1007/BF02083489).
18. Gneiting T., Ševčíková H., Percival D. B. Estimators of Fractal Dimension: Assessing the Roughness of Time Series and Spatial Data // *Statistical Science*, 2012. vol. 27, no. 2. pp. 247–277, arXiv: [1101.1444](https://arxiv.org/abs/1101.1444) [stat.ME]. doi: [10.1214/11-STS370](https://doi.org/10.1214/11-STS370).
19. Божокин С. В., Паршин Д. А. *Фракталы и мультифракталы*. Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2001. 128 с.
20. Константинова А. С., Аптуков В. Н. *Некоторые задачи механики деформирования и разрушения соляных пород*. Новосибирск: Наука, 2013. 192 с.
21. Feder J. *Fractals / Physics of Solids and Liquids*. Boston, MA: Springer, 1988. 283+xxv pp. doi: [10.1007/978-1-4899-2124-6](https://doi.org/10.1007/978-1-4899-2124-6).
22. Аптуков В. Н., Митин В. Ю. Исследование шероховатости поверхности кристаллов шпатового галита на микро- и наноуровне // *Вестник Пермского университета. Математика. Механика. Информатика*, 2014. № 1(24). С. 25–30.
23. Митин В. Ю. Исследование мультифрактальных свойств поверхности кристаллов соляных пород методом клеточного покрытия // *Вестник Пермского университета. Сер. Математика. Механика. Информатика*, 2016. № 3(34). С. 56–60. doi: [10.17072/1993-0550-2016-3-56-60](https://doi.org/10.17072/1993-0550-2016-3-56-60).
24. Дубовиков М. М., Крянев А. В., Старченко Н. В. Размерность минимального покрытия и локальный анализ фрактальных временных рядов // *Вестник Российского университета дружбы народов. Сер. Прикладная и компьютерная математика*, 2004. Т. 3, № 1. С. 30–44.
25. Мощенок В. И., Батыгин Ю. В. Размерный эффект в определении твердости материалов // *Вестник Харьковского национального автомобильно-дорожного университета*, 2010. № 48. С. 149–199.

MSC: 74E15

Fractal and mechanical micro- and nanorange properties of sylvite and halite crystals

V. N. Aptukov, V. Yu. Mitin

Perm State National Research University,
15, Bukireva st., Perm, 614000, Russian Federation.

Abstract

This article involves the treatment of micro- and nanorange scanning and indentation data for salt rock crystals obtained with help of the scanning microscope Dimension Icon using the mathematical models. It also describes the basic methods of fractal analysis. It shows the effectiveness of the method of minimal covering which is chosen to research the fractal properties of salt rock crystal surfaces. The article includes the algorithm of this method and the description of its generalization for the two-dimensional case. The values of fractal index and multifractal parameters have been calculated on the basis of the minimal covering method. The article also involves the anisotropy effects for fractal properties, comparison of fractal behavior on different scale levels. It gives the values of hardness for different parts of the crystals and studies the correlation between hardness and fractal index and describes the character of the influence of fractal dimension on roughness.

Keywords: salt rock crystals, fractal dimension, multifractals, method of minimal coverings, nanoindentation, hardness.

Received: 11th July, 2017 / Revised: 13th September, 2017 /

Accepted: 18th September, 2017 / First online: 28th September, 2017

Competing interests. We have no competing interests.

Authors' contributions and responsibilities. Each author has participated in the article concept development and in the manuscript writing. The authors are absolutely responsible for submitting the final manuscript in print. Each author has approved the final version of manuscript.

Research Article

The content is published under the terms of the [Creative Commons Attribution 4.0 International License](http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/) (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>)

Please cite this article in press as:

Aptukov V. N., Mitin V. Yu. Fractal and mechanical micro- and nanorange properties of sylvite and halite crystals, *Vestn. Samar. Gos. Tekhn. Univ., Ser. Fiz.-Mat. Nauki* [J. Samara State Tech. Univ., Ser. Phys. Math. Sci.], 2017, vol. 21, no. 3, pp. 481–495. doi: [10.14498/vsgtu1553](https://doi.org/10.14498/vsgtu1553) (In Russian).

Authors' Details:

Valery N. Aptukov <http://orcid.org/0000-0001-8048-3804>

Dr. Tech. Sci., Professor; Head of Department; Dept. of Fundamental Mathematics;
e-mail: aptukov@psu.ru

Victor Yu. Mitin <http://orcid.org/0000-0003-2406-3009>

Assistant; Dept. of Fundamental Mathematics; e-mail: victormitin@ya.ru

Funding. The research has not had any sponsorship.

Acknowledgments. The authors are sincerely grateful to the staff of the department of continuum mechanics and computational technologies of Perm state national research university, I. A. Morozov, A. P. Skachkov, V. N. Solod'ko for assistance in conducting experimental work.

References

1. Proskuryakov N. M., Permyakov A. S., Chernikov A. K. *Fiziko-mekhanicheskie svoystva solianyykh porod* [Physical and mechanical properties of salt rocks]. Leningrad, Nedra, 1973, 272 pp.
2. Bariakh A. A., Asanov V. A., Pan'kov I. L. *Fiziko-mekhanicheskie svoystva solianyykh porod Verkhnekamskogo kaliinogo mestorozhdeniia* [Physical and mechanical properties of salt rocks of the Verkhnekamskoe deposit]. Perm, Perm State Technical Univ., 2008, 198 pp. (In Russian), <http://elib.pstu.ru/vufind/Record/RUPSTUbooks126434>
3. Korolenko P. V., Maganova M. S., Mesnyakin A. V. *Novatsionnye metody analiza stokhasticheskikh protsessov i struktur v optike* [Innovative methods of analysis of stochastic processes and structures in optics]. Moscow, Moscow State Univ., 2014, 82 pp. (In Russian)
4. Mosolov A. B. Fractal Griffith fracture, *Zhurn. Tekhn. Fiziki*, 1991, vol. 61, no. 7, pp. 57–60 (In Russian).
5. Aptukov V. N., Mitin V. Y. Nanorange mechanical and fractal properties of rock salt crystal surface and their effect on fracture toughness and wettability, *Journal of Mining Science*, 2016, vol. 52, no. 4, pp. 638–646. doi: [10.1134/S1062739116041034](https://doi.org/10.1134/S1062739116041034).
6. Selyaev V. P., Nizina T. A., Balykov A. S., Nizin D. R., Balbalin A. V. Fractal analysis of deformation curves of fiber-reinforced fine-grained concretes under compression, *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2016, no. 1, pp. 129–146 (In Russian). doi: [10.15593/perm.mech/2016.1.09](https://doi.org/10.15593/perm.mech/2016.1.09).
7. Golovin Yu. I. Nanoindentation as means of complex estimation of physical and chemical properties of materials in submicrovolumes (Review), *Zavodskaya Laboratoriia. Diagnostika Materialov*, 2009, vol. 75, no. 1, pp. 45–59 (In Russian).
8. Useinov S. S. Characteristic features of nanoindentation technique for measuring hardness at the nanoscale, *Nanotekhnika*, 2008, no. 13, pp. 111–115 (In Russian).
9. Dubovikov M. M. The variation index and its applications to analysis of fractal structures, In: *Aleksandr Gordon. Nauchnyi al'manakh*, 1. Moscow, Pomatur, 2003, pp. 5–33 (In Russian).
10. Kalush Yu. A., Loginov V. M. Hurst coefficient and its hidden properties, *Sib. Zh. Ind. Mat.*, 2002, vol. 5, no. 4, pp. 29–37 (In Russian).
11. Dubovikov M. M., Starchenko N. V., Dubovikov M. S. Dimension of the minimal cover and fractal analysis of natural time series, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 2004, vol. 339, no. 3, pp. 591–608. doi: [10.1016/j.physa.2004.03.025](https://doi.org/10.1016/j.physa.2004.03.025).
12. Vasilyev V. V. Calculation of a fractal index of a time series, *Vestnik Tambovskogo Universiteta. Ser. Estestvennye Tekhnicheskie Nauki*, 2010, vol. 16, no. 4, pp. 1047–1049 (In Russian).
13. Vladimirova D. B. Fractal index in the study of discrete time series determinateness, *Nauka i Biznes: Puti Razvitiia*, 2015, no. 8, pp. 76–91 (In Russian).
14. Aptukov V. N., Konstantinova S. A., Mitin V. Y., Skachkov A. P. Nano- and micro-range mechanical characteristics of sylvite grain, *Journal of Mining Science*, 2012, vol. 48, no. 3, pp. 429–435. doi: [10.1134/S1062739148030045](https://doi.org/10.1134/S1062739148030045).
15. Aptukov V. N., Mitin V. Y., Moloshtanova N. E., Morozov I. A. Nano-range mechanical characteristics of carnallite, spathic salt and sylvite, *Journal of Mining Science*, 2013, vol. 49, no. 3, pp. 382–387. doi: [10.1134/S1062739149030052](https://doi.org/10.1134/S1062739149030052).
16. Aptukov V. N., Mitin V. Y. Comparative characterization of surface roughness of sylvite, spathic salt and carnallite gains in nanorange, *Journal of Mining Science*, 2013, vol. 49, no. 1, pp. 44–51. doi: [10.1134/S1062739149010061](https://doi.org/10.1134/S1062739149010061).

17. Gallant J. C., Moore I. D., Hutchinson M. F., Gessler P. Estimating fractal dimension of profiles: A comparison of methods, *Mathematical Geology*, 1994, vol. 265, no. 4, pp. 455–481. doi: [10.1007/BF02083489](https://doi.org/10.1007/BF02083489).
18. Gneiting T., Ševčíková H., Percival D. B. Estimators of Fractal Dimension: Assessing the Roughness of Time Series and Spatial Data, *Statistical Science*, 2012, vol. 27, no. 2, pp. 247–277, arXiv: [1101.1444](https://arxiv.org/abs/1101.1444) [stat.ME]. doi: [10.1214/11-STS370](https://doi.org/10.1214/11-STS370).
19. Bozhokin S. V., Parshin D. A. *Fraktaly i mul'tifraktaly* [Fractals and multifractals]. Izhevsk, Regular and Chaotic Dynamics, 2001, 128 pp. (In Russian)
20. Konsantinova A. S., Aptukov V. N. Nekotorye zadachi mekhaniki deformirovaniia i razrusheniia solianyykh porod [Some problems of mechanics of deformation and failure of salt rocks], 2013, 192 pp. (In Russian)
21. Feder J. *Fractals*, Physics of Solids and Liquids. Boston, MA, Springer, 1988, 283+xxv pp. doi: [10.1007/978-1-4899-2124-6](https://doi.org/10.1007/978-1-4899-2124-6).
22. Aptukov V. N., Mitin V. Yu., Moloshtanova N. E., Morozov I. A. Research of micro- and nanorange roughness of spathic halite crystals, *Vestnik Permskogo Universiteta. Ser. Matematika. Mekhanika. Informatika*, 2014, no. 1(24), pp. 25–30 (In Russian).
23. Mitin V. Yu. Investigation of multifractal properties of salt rock crystal surfaces using the box-counting method, *Vestnik Permskogo Universiteta. Ser. Matematika. Mekhanika. Informatika*, 2016, no. 3(34), pp. 56–60 (In Russian). doi: [10.17072/1993-0550-2016-3-56-60](https://doi.org/10.17072/1993-0550-2016-3-56-60).
24. Dubovikov M. M., Kryanev A. V., Starchenko N. V. Dimension of minimal covering and local analysis of time series, *Vestnik Rossiiskogo Universiteta Druzby Narodov. Ser. Prikladnaia i Komp'yuternaia Matematika*, 2004, vol. 3, no. 1, pp. 30–44 (In Russian).
25. Moshchenok V. I., Batygin Yu. V. Indentation size effect in determination of materials hardness, *Vestnik Khar'kovskogo Natsional'nogo Avtomobil'no-Dorozhnogo Universiteta*, 2010, no. 48, pp. 149–199 (In Russian).