

# مروری بر توابع همبستگی آماری و بازسازی میکرو/نانوکامپوزیت‌ها

Original Article

مصطفی مهدوی (دانشجوی کارشناسی ارشد)

انسبه یوسفی (دانشجوی کارشناسی ارشد)

مجید بنی‌اسدی\* (استادیار)

دانشکده‌ی مهندسی مکانیک، دانشگاه تهران

توابع آماری  $n$  نقطه‌یی<sup>۱</sup> برای محاسبه‌ی خواص سیستم‌های ناهمگن استفاده می‌شوند. قدرت و فایده‌ی مهم روش پیوسته‌ی آماری ارتباط مستقیم به اطلاعات آماری ریزساختار دارد. توابع همبستگی دوقطه‌یی کم‌ترین مرتبه از توابع همبستگی‌اند که می‌توانند رابطه‌ی بین مورفولوژی و خواص ریزساختار را توصیف کنند. به صورت آزمایشگاهی توابع همبستگی جفت آماری با استفاده از میکروسکوپ الکترون روبشی یا روش‌های پراکندگی اشعه‌ی X زاویه کوچک به دست می‌آیند. توابع همبستگی مرتبه بالاتر باید محاسبه یا اندازه‌گیری شوند تا دقت روش پیوسته‌ی آماری افزایش یابد. در این مطالعه ضمن انجام مروری جامع بر توابع همبستگی آماری مورد کاربرد در ریزساختارها و نانوساختارها، بر بازسازی این ساختارها با استفاده از روش‌های آزمایشگاهی و عددی تمرکز شده است. توصیف و مشخصه‌سازی سیستم‌های ناهمگن نزد محققین دوره‌های گذشته اهمیت ویژه‌ی دارد و روش‌های مختلفی نیز برای دست‌یابی توصیف‌گرهای سه بعدی سیستم‌های ناهمگن توسعه یافته است.

mostafa.mahdavi70@gmail.com  
nc.yosefi@ut.ac.ir  
m.baniassadi@ut.ac.ir

واژگان کلیدی: توابع همبستگی آماری، نانوکامپوزیت‌های پلیمری، بازسازی.

## ۱. مقدمه

توابع همبستگی دوقطه‌یی، توابع آماری ابتدایی مورد نیاز برای سنجیدن خواص مؤثر/همگن شده ریزساختارها و نانوساختارها هستند.<sup>[۱-۵]</sup> روش‌های همگن‌سازی بر اساس مکانیک پیوسته‌ی آماری مانند راهکارهای اختلاف ضعیف یا اختلاف قوی<sup>۵</sup> قادرند خواص مؤثر را از توابع همبستگی  $n$  نقطه‌یی محاسبه کنند.<sup>[۸،۲۱-۱۵]</sup> مواد ناهمگن چندفازی با تغییر ناچیز خواص به‌طور نزدیکی قابل شبیه‌سازی با به کار بردن بسط‌های اختلاف ضعیف هستند.<sup>[۱]</sup> در حالتی که اختلاف زیادی بین خواص فازها وجود دارد، روش اختلاف قوی گزینه‌ی مناسبی برای هدف‌های مشخصه‌سازی فیزیکی است.<sup>[۱۶،۲۱]</sup> در مطالعه‌یی که لیو و همکارانش<sup>[۱۷]</sup> اخیراً انجام داده‌اند، با استفاده از عکس‌هایی از ساختار و نحوه‌ی قرارگیری ذرات درون پلیمر توانسته‌اند خواص نانوکامپوزیت را بررسی کنند.

بازسازی ریزساختاری یا نانوساختاری نیز یکی دیگر از کاربردهای با ارزش توابع همبستگی دوقطه‌یی (سوی مشخصه‌سازی فیزیکی) است. از مکانیک پیوسته‌ی آماری می‌توان برای فراهم کردن راه قوی پرتونگاری اشعه‌ی X برای بازسازی مواد ناهمگن بهره برد.<sup>[۲۱-۱۸،۲۲]</sup> بازسازی با استفاده از توابع همبستگی دوقطه‌یی بسیار آسان‌تر و کم‌هزینه‌تر از بقیه روش‌های مورد استفاده، مانند پرتوگرافی اشعه‌ی X است که در کارهای جدید نیز مطالعاتی در خصوص استفاده از توابع همبستگی برای لایه‌های مختلف یک نمونه انجام شده که با استفاده از اطلاعات آماری این عکس‌های دوبعدی نمونه‌ی سه‌بعدی بازسازی می‌شود.<sup>[۲۲،۲۱]</sup>

مواد ناهمگن به‌طور گسترده‌یی در طیف وسیعی از مواد ترکیبی مانند کامپوزیت‌ها یا مواد طبیعی مانند بافت‌های زنده یافت می‌شوند. توابع همبستگی آماری از بهترین توصیف‌گرهای ریزساختاری مواد ناهمگن هستند. مشخصه‌سازی خواص مکانیکی، گرمایی، الکتریکی و به‌طور کلی فیزیکی مواد ناهمگن را می‌توان مستقیماً از بعضی توصیف‌گرها که شناخته‌شده‌تر از توابع همبستگی  $n$  نقطه‌یی هستند، به دست آورد.<sup>[۱۸]</sup> توابع همبستگی یک نقطه‌یی کم‌ترین مرتبه‌ی توابع همبستگی آماری‌اند که فقط نسبت حجمی فازها را در ریزساختار توصیف می‌کنند ولی هیچ اطلاعاتی در مورد توزیع هندسی فازها ارائه نمی‌کنند.<sup>[۲۱]</sup> توابع همبستگی دوقطه‌یی<sup>۲</sup> (TPCF) مرتبه‌ی بالاتر از توابع همبستگی یک نقطه‌یی هستند که می‌توانند بخشی از ویژگی‌های هندسی ریزساختارها و نانوساختارها را شامل شوند. توابع همبستگی دوقطه‌یی مواد ناهمگن را می‌توان از اطلاعات پراکندگی اشعه‌ی X زاویه کوچک<sup>۳</sup> (SAXS) یا میکروسکوپ الکترون روبشی/انتقالی<sup>۴</sup> (SEM/TEM) از ریزساختارها و نانوساختارها به دست آورد.<sup>[۶-۳]</sup> به‌طور خاص، روش SAXS در به دست آوردن اطلاعات توزیع اندازه و قرارگیری فضایی اجزا کاربرد دارد.<sup>[۷،۳]</sup>

\* نویسنده مسئول

تاریخ: دریافت ۱۰/۱۳۹۵، اصلاحیه ۱۲/۴/۱۳۹۵، پذیرش ۲۲/۳/۱۳۹۶.

DOI:10.24200/J40.2018.6419

## ۲. مواد ناهمگن تصادفی

$n$  نقطه از نقاط تصادفی که در نانو ساختار یا ریزساختار پراکنده شده اند انتخاب می شود. زمانی که  $N$  به سمت بی نهایت می رود نسبت تعداد نقاطی که در فاز  $i$  قرار می گیرند  $(N_i)$  به  $N$  نشانگر نسبت حجمی آن فاز  $(v_i)$  است. برای ساختارهای چندفازی، روابط ریاضی بین توابع همبستگی یک نقطه ای و نسبت های حجمی مطابق رابطه ی ۳ بیان می شود: [۲۵]

$$P_i = \frac{N_i}{N} |_{N \rightarrow \infty} = v_i \quad (3)$$

و آنگاه:

$$\sum P_i = 1 \quad (4)$$

## ۲.۳. تابع همبستگی دونقطه ای (TPCF)

توابع احتمال دونقطه ای با انتخاب تعدادی از بردارهای تصادفی مانند  $\vec{r}$  با طول مشخص  $r = |\vec{r}|$  داخل نانو ساختار یا ریزساختار و سپس مشخص کردن احتمال قرار گرفتن انتهای هر یک،  $S_1$  و  $S_2$ ، در فاز مشخص محاسبه می شود. بسته به مکان دو انتهای پاره خط، برای ساختار  $K$  فازی  $K^2$  احتمال وجود خواهد داشت:

$$P_{ij}(\vec{r}) = \frac{N_{ij}}{N} |_{N \rightarrow \infty} \{ \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, (S_1 \in \phi_i) \cap (S_2 \in \phi_j) \} \quad (5)$$

که در آن  $N_{ij}$  تعداد بردارهایی است که از فاز  $i$  شروع می شوند  $(\phi_i)$  و نقطه ی انتهایی آن ها در فاز  $j$  است  $(\phi_j)$ :  $i, j = 1, 2, \dots, K$ . همچنین  $\vec{r}_1$  و  $\vec{r}_2$  نمایشگر بردارهایی هستند که ناحیه ی زمینه ی مرجع، به ترتیب  $S_1$  و  $S_2$  را متصل می کنند. ذکر این نکته ضروری است که طبق تعریف، TPCF هر ساختار ایزوتروپیک از جهت بردار قرار گرفته مستقل است. [۲۵]

رابطه ی ۵ بیانگر تابع توزیع احتمال پیوسته برای حالت هایی است که دو نقطه ساخته می شوند؛  $S_1$  و  $S_2$  به عنوان دو انتهای بردار دلخواه  $\vec{r}$  هستند زمانی که به طور تصادفی  $N$  بار در ساختار قرار می گیرند. با جای گذاری این رابطه در فرم تابع احتمال شرطی خواهیم داشت: [۶]

$$P_{ij}(\vec{r}) = P\{(S_1 \in \phi_i) | (S_2 \in \phi_j)\} P(S_2 \in \phi_j) \quad (6)$$

برای طول بردار خیلی بزرگ،  $r \rightarrow \infty$ ، احتمال وقوع  $S_1$  بر  $S_2$  تأثیر نمی گذارد. به عبارت دیگر، وقتی  $r \rightarrow \infty$  تابع احتمال شرطی به تابع همبستگی یک نقطه ای کاهش می یابد؛ یعنی:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} P\{(S_1 \in \phi_i) | (S_2 \in \phi_j)\} = P(S_1 \in \phi_i) \quad (7)$$

در نتیجه، با بازنویسی رابطه ی ۶:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} P_{ij}(\vec{r}) = P(S_1 \in \phi_i) | (S_2 \in \phi_j) = v_i v_j \quad (8)$$

تعمیم استدلال بالا برای توابع  $n$  نقطه ای انجام شده است. [۲۵] از مطالب عنوان شده در این بخش می توان نتیجه گرفت که TPCF های هر ساختار  $k$  فازی به هم وابسته اند. برای مثال، در کامپوزیت سه فازی ۹ عدد TPCF متشکل از  $P_{11}, P_{12}, P_{13}, P_{21}, P_{22}, P_{23}, P_{31}, P_{32}, P_{33}$  وجود دارد. به علت شرایط تعامد روابط زیر فوراً ارضا می شود: [۲۵]

$$\sum_{j=1,2,3} P_{ij}(\vec{r}) = v_i \quad (9)$$

$$\sum_{i=1,2,3} \sum_{j=1,2,3} P_{ij}(\vec{r}) = 1 \quad (10)$$

ماده ی ناهمگن تصادفی دسته یی از مواد است که از مواد مختلف یا حالت های مختلف تشکیل شده است مانند کامپوزیت ها یا پلی کریستال ها. مقیاس طول میکروسکوپی بسیار بزرگ تر از مقیاس مولکولی اما بسیار کوچک تر از طول مشخصه ی نمونه ی ماکروسکوپی است. ماده ی ناهمگن را می توان در مقیاس میکروسکوپی پیوسته فرض کرد و در نتیجه خواص مؤثرش را محاسبه کرد. [۱] روش های آماری با استفاده از توابع همبستگی یکی از بهترین راه های عملی و قدرتمند برای تخمین خواص مواد ناهمگن هستند. [۱] خواص مواد را می توان با استفاده از مرتبه های مختلف توابع همبستگی آماری پیش بینی کرد. [۲۳، ۲۳، ۱] در مواد چندفازی مرتبه اول توابع همبستگی نشانگر نسبت حجمی فازهای مختلف است و اطلاعات دیگری درباره ی توزیع و مورفولوژی فازها نمی دهد. [۱] در ادامه موضوع توابع همبستگی آماری به تفصیل بررسی می شود.

## ۳. توابع همبستگی آماری

در ساختارهای دوفازی (ساختارهایی همانند نانولوله ی کربنی در پلیمر خالص که دو فاز کاملاً قابل تشخیص باشند) که هر فاز ناحیه یی از حجم را اشغال کرده است، فاز ۱ با ناحیه ی  $v_1(\omega)$  با نسبت حجمی  $\Phi_1$  و فاز ۲ با ناحیه ی  $v_2(\omega)$  و با نسبت حجمی  $\Phi_2$  را در نظر بگیرید. با توجه به این که این دو ناحیه مکمل یکدیگرند خواهیم داشت:  $v_1(\omega) \cap v_2(\omega) = \phi$  و  $v_1(\omega) \cup v_2(\omega) = 1$ .

در شکل ۱ نمونه یی دو بعدی دوفازی نشان داده شده است. در اینجا با معرفی تابع نشانگر  $I^{(i)}(x; \omega)$  که برای فاز  $i$  برای  $x \in v$  چنین تعریف می شود:  $\omega$  اتفاق قرار گرفتن در هر کدام از فازهای یک نمونه ی چندفازی است. [۲۵]

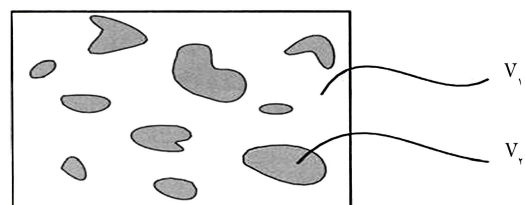
$$I^{(i)}(x; \omega) = \begin{cases} 1 & \text{اگر } x \in v_i \\ 0 & \text{در غیر این صورت} \end{cases} \quad (1)$$

برای یک ساختار دوفازی  $(i = 1, 2)$ ، این تابع در جاهایی که در فاز اول قرار می گیرد  $I^{(1)}(x, \omega) = 1$  و  $I^{(2)}(x, \omega) = 0$  و به عکس، وقتی در فاز دوم قرار می گیرد  $I^{(2)}(x, \omega) = 1$  و  $I^{(1)}(x, \omega) = 0$ ، در نتیجه همواره برای این ساختار داریم:

$$I^{(1)}(x; \omega) + I^{(2)}(x; \omega) = 1 \quad (2)$$

## ۱.۳. تابع همبستگی یک نقطه ای

برای اندازه گیری توابع همبستگی یک نقطه ای ریزساختارها یا نانو ساختارها، تعداد



شکل ۱. تصویر دو بعدی دوفازی؛ فاز ۱ فاز سفید رنگ با ناحیه ی  $v_1$ ؛ فاز ۲ فاز خاکستری رنگ با ناحیه ی  $v_2$ . [۲۵]

در نمونه‌ی دوم که دیسک‌ها هم پوشانی دارند و به هم پیوسته‌اند دقیقاً از  $r = D$  به بعد (D شعاع دیسک‌هاست) کاملاً خطی صاف را مشاهده می‌کنیم و نوسانی نیست؛ این امر بیان‌گر آن است که تعداد قابل چشم‌گیری از ناحیه‌های فاز دوم بزرگ‌تر از  $D$  هستند. [۲۵]

### ۳.۳. توابع همبستگی n نقطه‌یی

برای  $x$  با اندازه‌ی ثابت، تابع نشان‌گر  $(I^{(i)}(x; \omega))$  فقط دو مقدار ممکن دارد، به عنوان مثال برای بعضی مقادیر  $\omega$  مقدار تابع نشان‌گر صفر و برای بعضی دیگر از مقادیر  $\omega$  مقدار تابع نشان‌گر ۱ است. توصیفی احتمالی از  $I^{(i)}(x; \omega)$  به سادگی برای این که  $I^{(i)}(x; \omega)$  معادل ۱ باشد به دست می‌آید:

$$P\{I^{(i)}(x; \omega) = 1\} \quad (11)$$

و بدین ترتیب احتمال به دست می‌آید:

$$P\{I^{(i)}(x; \omega) = 0\} = 1 - P\{I^{(i)}(x; \omega) = 1\} \quad (12)$$

متغیر تصادفی گسسته‌ی  $X$  را می‌توان به طور معادل با تابع توزیع متراکم  $F(x)$  آن مشخص کرد:

$$F(x) = P\{X \leq x\} \quad (13)$$

ویژگی‌هایی از قبیل غیرکاهشی بودن، تابعی پیوسته راست از  $x$  است که  $F(-\infty) = 0$  و  $F(+\infty) = 1$ . این نکته را نیز باید ذکر کرد که مقدار پیش‌بینی یا میانگین هر تابعی از  $f[I^{(i)}(x; \omega)]$  را می‌توان چنین بیان کرد:

$$f[I^{(i)}(x; \omega)] = P\{I^{(i)}(x; \omega) = 1\}f(1) + P\{I^{(i)}(x; \omega) = 0\}f(0) \quad (14)$$

که براکت‌های شکسته به معنی مجموع میانگین است. در عمل،  $f[I^{(i)}(x; \omega)] = I^{(i)}(x)$  بیان می‌دارد که:

$$S_{\nu}^{(i)}(x) = I^{(i)}(x) = P\{I^{(i)}(x) = 1\} \quad (15)$$

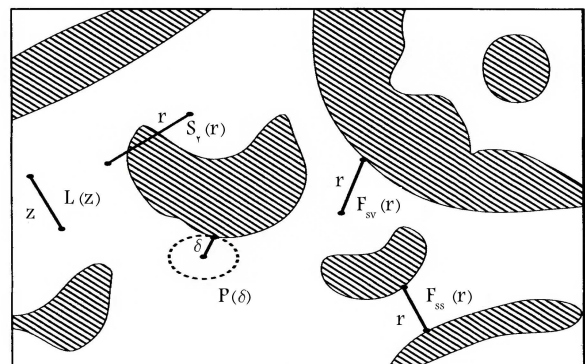
بنابراین، طبق ماهیت ۰ و ۱ تابع نشان‌گر  $I^{(i)}(x)$ ، عملکرد آن دقیقاً شبیه تابع احتمال  $P\{I^{(i)}(x) = 1\}$  است. تورگاتو و استل (۱۹۸۲)، در ادامه به  $S_{\nu}^{(i)}(x)$  به عنوان تابع احتمال یک نقطه‌یی برای فاز  $i$  ارجاع دادند، که این کار یافتن فاز  $i$  در مکان  $x$  را ممکن می‌سازد، و همچنین گاهی به عنوان تابع همبستگی یک نقطه‌یی به تابع نشان‌گر فاز ارجاع داده می‌شود.

دانستن مفهوم  $v_i(\omega)$  شبیه دانستن  $I^{(i)}(x)$  برای همه‌ی  $x$ ها در  $v$  است، بنابراین ممکن است از دسته‌یی تصادفی از  $v_i(\omega)$  به جای همه‌ی متغیرهای  $I^{(i)}(x; \omega)$  برای  $x \in v$  استفاده شود. در نتیجه قانون احتمال برای  $v_i(\omega)$  با توزیع فرایندهای تصادفی  $x \in v$ :  $I^{(i)}(x)$  که دارای بعدی محدود است توصیف می‌شود. به عبارت دیگر توصیف احتمالی از  $v_i(\omega)$  با توزیع انصالی از  $I^{(i)}(x_1)I^{(i)}(x_2) \dots I^{(i)}(x_n)$  به ازای  $n \geq 1$  که متغیری عدد صحیح است و  $x_1, x_2, \dots, x_n$  روی  $v$  تغییر می‌کند، چون مقدار  $I^{(i)}(x)$  برابر صفر یا ۱ است، مشخص کردن احتمالات را فراهم می‌کند:

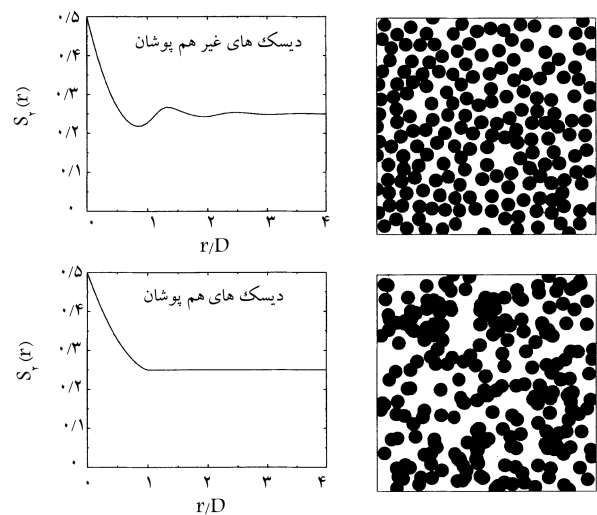
$$P\{I^{(i)}(x_1) = j_1, I^{(i)}(x_2) = j_2, \dots, I^{(i)}(x_n) = j_n\} \quad (16)$$

برای TPCF های متقارن،  $P_{ij} = P_{ji}$  تنها سه TPCF مستقل برای مثال ساختار سه فازي بالا باقی می‌ماند. در حالت کلی، برای ساختار  $k$  فازي وقتی که  $K \geq 3$ ،  $\frac{1}{k}(k^2 - k)$  TPCF مستقل باقی می‌ماند. پرواضح است که وقتی

$r \rightarrow 0$  آن‌گاه  $P_{ij}$  تابع همبستگی یک نقطه‌یی حاصل می‌شود:  $P_i = v_i$ . تابع دوقطه‌یی  $S_{\nu}(r) = S_{\nu}^{(1)}(r)$  برای ساختار همگن آماری را می‌توان با انداختن تصادفی یک قطعه پاره‌خط با طول  $r = |r|$  و راستای خاص و محاسبه‌ی تعداد دفعاتی که نقاط انتهایی خط درون فاز ۱ قرار می‌گیرد، محاسبه کرد (شکل ۲). در ساختارهای ایزوتروپیک، بیشینه‌ی  $S_{\nu}(r)$  به  $\Phi_i$  در  $r = 0$  می‌رسد و سرانجام با ادامه‌ی افزایش طول پاره‌خط به صورت نمایی به مقدار  $\Phi$  می‌رسد. شکل ۳ شامل اطلاعاتی ( $S_{\nu}(r)$ ) در مورد ویژگی‌های ناخالصی‌ها یا ذرات درون ساختار است؛ برای مثال دو نمونه از توابع همبستگی برای سیستم ذره‌ی ایزوتروپیک و شکل ساختاری در این شکل آورده شده است. در نمونه‌ی اول که دیسک‌های درون ساختار هم‌پوشانی ندارند و جدا از هم هستند  $S_{\nu}(r)$  برای  $r$ های کوچک نوسانی است اما



شکل ۲. شماتیک تابع مرتبه پایین برای ساختار تصادفی یک ساختار دلخواه، که تابع احتمال دو نقطه‌یی  $S_{\nu}(r) = S_{\nu}^{(1)}(r)$  برای فاز ۱ (ناحیه‌ی سفیدرنگ) محاسبه می‌شود. [۲۵]



شکل ۳. تابع احتمال دو نقطه‌یی  $S_{\nu}(r)$  برای فاز ۱ (ناحیه‌ی سیاه‌رنگ) برای دو سیستم مختلف در  $\Phi_1 = \Phi_2 = 1/2$ ، برای سیستم دیسک‌های غیرهم‌پوشان (نمونه بالا) و سیستم با دیسک‌های هم‌پوشانی شده (نمونه پایین) در اینجا  $D$  قطر دیسک است. [۲۵]

توابع آماری از دو ترم اندازه و جهت تشکیل می‌شوند. اگر فقط یک جهت ملاحظه شود، حتی اگر ساختار آزمایشی تصادفی باشد، ممکن است غیرایزوتروپی ساختگی باشد. برای حل این مشکل، شیپان<sup>۹</sup> و تورگاتو جهت‌های بیشتری در توابع آماری معرفی کردند که به‌طور مؤثری غیر ایزوتروپی‌های ساختگی را حذف می‌کند. همه‌ی اطلاعات ورودی از عکس‌های دوبعدی به دست می‌آید. تورگاتو یک روش جدید برای بازسازی اشکال سه‌بعدی تصادفی با استفاده از اطلاعات قطعات دوبعدی توسعه داد. روش بازسازی تصادفی هیبرید برای بهینه‌سازی راه خطی تابع و توابع همبستگی دوبعدی در طول روش جوانه‌زنی توسعه یافت. همچنین شبیه‌سازی سه‌بعدی ساختار از ورقه‌های دوبعدی توسط پی‌یر<sup>۱۰</sup> و همکارانش مطالعه شد.<sup>[۳۰]</sup> اطلاعات آماری روی شکل‌شناسی و توزیع جهت کریستال از آنالیزهای پراش پراکنندگی الکترون به دست می‌آید. از این اطلاعات دوبعدی آزمایشگاهی به عنوان ورودی برای تولید ساختار سه‌بعدی پلی‌کریستال استفاده می‌شود، که شکل مرزهای دانه و غیر ایزوتروپی شکل دانه را لحاظ می‌کند.

برای بهبود شبیه‌سازی، روش‌های بهینه‌سازی مختلف نیز اعمال و مقایسه شده که در بین آنها روش تصادفی رواج و کاربرد بیشتری داشته است. علاوه بر کارهای تورگاتو، محققین دیگر نیز در کارهایی نظیر بازسازی ساختار آند سلول سوختی توسط سوزو،<sup>۱۱</sup> شیکانو<sup>۱۲</sup> و کاساگی<sup>۱۳</sup> از این روش استفاده کرده‌اند. یک کار بازسازی جذاب دیگر توسط فولود<sup>۱۴</sup> و همکارانش انجام شده است.<sup>[۳۲]</sup> در نمونه‌های زیادی توابع دونه‌قطبی روی توابع تحلیلی به درستی قرار می‌گیرند. برای دقت بیشتر در نمایش توابع دونه‌قطبی، فولود از انتقال فوریه‌ی سریع برای گسترش این توابع استفاده کرد.

عموماً در تحقیق‌های قبلی در زمینه‌ی بازسازی ساختار، از شبیه‌سازی ساختار با استفاده از اطلاعات آماری استفاده می‌شد. بیشتر تحقیق‌های انجام شده در زمینه‌ی ساختار تصادفی بود تا زمانی که توابع همبستگی کامل در جهت‌های مختلف یکی نمی‌شدند. در بیشتر نمونه‌ها فقط یک تابع با جهت خاص که با راستای تصادفی نمایش داده می‌شد، کاربرد داشت. همچنین طیف گسترده‌ی از خواص مؤثر پیش‌بینی شده حتی برای ساختارهایی که از توابع همبستگی یکسانی بازسازی شده بودند، توضیح داده شده است. علاوه بر این، بیشتر کار به دو بعد محدود می‌شد، و قابل گسترش به سه بعد نبود. ریزساختارها و رفتار شبیه‌سازی شده در دو بعد با آنهایی که سه‌بعدی بودند تفاوت بسیاری خواهد داشت. دلیل دیگر برای ناپایداری ساختار بازسازی شده از تعداد کمی از ویژگی‌ها در شکل‌های شبیه‌سازی شده می‌آید. شبیه‌سازی رفتار با استفاده از روش‌های جبری نیازمند شکل‌های زیاد با تعداد زیادی المان‌های نمایش‌گر حجم است.

بازسازی عددی و تجربی مواد ناهمگن برای به دست آوردن ساختاری دقیق می‌تواند برای مشخصه‌سازی و بهینه‌سازی مواد ناهمگن مورد استفاده قرار گیرد. روش‌های آزمایشی زیادی مانند پرتوگرافی اشعه‌ی X یا پرتو یون متمرکز/میکروسکوپ الکترونی روبشی<sup>۱۵</sup> (SEM/FIB) وجود دارند که می‌توان از آن برای بازسازی ریزساختارهای سه‌بعدی استفاده کرد. برای بازسازی‌های عددی، اطلاعات آماری از ریزساختار ماده‌ی ناهمگن به دست می‌آید و می‌تواند ریزساختارهای سه‌بعدی را بسازد.<sup>[۳۷-۳۳،۱]</sup>

#### ۱.۴. پرتونگاری رایانه‌ی اشعه‌ی X<sup>۱۶</sup>

پرتونگاری رایانه‌ی اشعه‌ی X یک روش غیرمخرب است که می‌تواند برای بازسازی مواد ناهمگن در مقیاس میکرو، مانند کامپوزیت‌های پایه فلزی مورد استفاده قرار گیرد.

که در آن مقدار هرکدام از  $j_k$  ها برابر صفر یا ۱ است. پیش‌بینی حاصل  $I^{(i)}(x_1)I^{(i)}(x_2) \dots I^{(i)}(x_n)$  یک میانگین مهم است. در ادامه:

$$S_n^{(i)}(x_1, x_2, \dots, x_n) = \langle I^{(i)}(x_1)I^{(i)}(x_2) \dots I^{(i)}(x_n) \rangle \\ = P\{I^{(i)}(x_1) = 1, I^{(i)}(x_2) = 1, \dots, I^{(i)}(x_n) = 1\} \quad (17)$$

= احتمال اینکه  $n$  نقطه در مکان‌های  $x_1, x_2, \dots, x_n$  در فاز  $i$  باشند.  $S_n^{(i)}$  به عنوان تابع احتمال  $n$  نقطه‌ی برای فاز  $i$  ارجاع داده می‌شود؛ همچنین می‌تواند به عنوان تابع همبستگی  $n$  نقطه‌ی هم ارجاع داده شود.<sup>[۳۵]</sup>

#### ۴. بازسازی

هدف بازسازی ساختاری، ایجاد ساختار شبیه‌سازی شده برای نمایش آماری ساختار با استفاده از گروهی از توصیف‌گرهای ساختاری است. در زمینه‌های دیگر نیز، برای ساختن یک ساختار سه بعدی واقعی از دسته‌ی از عکس‌های دوبعدی حاصل از آزمایش استفاده می‌شود، مانند آزمایش‌های پرتو یون متمرکز.

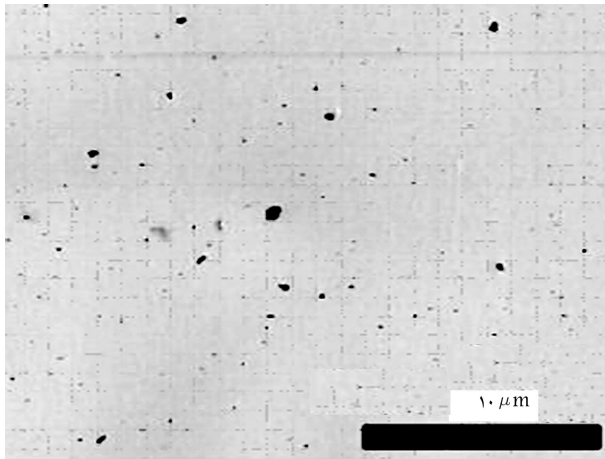
اهمیت روش‌های بازسازی ساختار در دهه‌های اخیر به‌طور چشمگیری با توسعه‌ی طراحی مواد گوناگون افزایش یافته است. راه حل‌های ریاضی برای ساختارهایی با خواص معین نیازمند نمایشی مناسب از ساختار با استفاده از گروهی از المان‌های قرار گرفته درون ساختار است. در کامپوزیت نانولوله‌ی کربنی توصیف‌گرهایی که می‌توانند ساختار را به خوبی نمایش دهند شامل نسبت حجمی نانولوله‌ها، طول نانولوله‌ها، نسبت طول به قطر نانولوله‌ها، انحنای نانولوله‌ها و نحوه‌ی توزیع نانولوله‌ها درون ساختار است. این توصیف‌گرها ممکن است در سلسله ترتیب‌های توابع آماری همبستگی، یا توابع آماری چندنقطه‌ی ذخیره شوند. در نهایت ساختار با توصیف‌گرهای مواد که از ویژگی‌های گفته شده استفاده می‌شود نمایش داده می‌شود.

یک انگیزه‌ی دیگر برای بازسازی ساختار، اجرای شبیه‌سازی‌هایی است که برای به دست آوردن خواص ضروری است.<sup>[۲۶-۲۹]</sup> از توصیف‌گرهایی همانند توابع آماری چندنقطه‌ی، خواص مکانیکی، مغناطیسی، الکتریکی و گرمایی ممکن است مستقیماً شبیه‌سازی انجام شود. نکته‌ی دیگر در بازسازی ساختار توصیف‌گرها با استفاده از روش اجزای محدود آن است که خواص مؤثر ممکن است شبیه‌سازی شود. از این روش ممکن است برای تأیید ساختارهای شبیه‌سازی شده استفاده شود که نقش اصلی در طراحی مواد دارد.

بازسازی با تعداد بسیار زیادی از روش‌های شبیه‌سازی دنبال شده است، بیشتر آن‌ها از اطلاعات آماری بر پایه‌ی تابع یک‌نقطه‌ی، همانند اندازه دانه، نسبت حجمی، شکل ایده‌آل، ساختار تصادفی و موارد دیگر استفاده کرده‌اند.

اطلاعات مشخصه‌های غیر ایزوتروپی، توزیع جهت‌ها، شکل و هندسه ملاحظه نشده است، اگرچه این ویژگی‌ها ممکن است در توابع آماری ملاحظه شده باشد، شبیه‌سازی از توابع آماری مهم است اما همزمان مشکلاتی را نیز معرفی می‌کند.

تورگاتو<sup>[۲۵،۲۱]</sup> مطالعه‌ی بازسازی ساختارها را با استفاده از توابع آماری شروع کرد. ساختارهای ناهمگن تصادفی از توابع آماری مرتبه‌پایین با بهینه‌سازی تصادفی بازسازی شدند. چندین مثال از ساختارهای یک‌بعدی و دوبعدی نشان داده شد که قابلیت روش بازسازی برای مرتبه طیف کوچک را نشان می‌دهد. یک فرمول‌بندی ریاضی دقیق از الگوریتم بازسازی بیان شده است. تورگاتو همچنین نشان داد که توابع دونه‌قطبی به تنهایی نمی‌توانند نشان‌گر ماده دوفازی ناهمگن باشند. و لذا جواب‌های بازسازی، اگر شرایط اولیه فقط توابع آماری مرتبه پایین باشند، یکسان نخواهد بود.

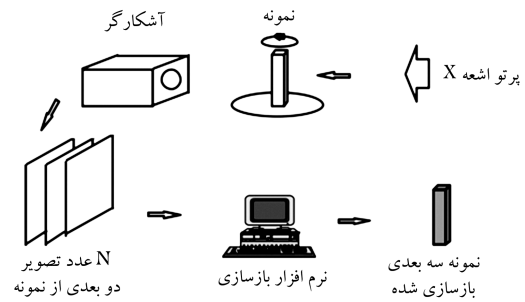


شکل ۵. نمونه‌یی از عکس SEM از یک نانوکامپوزیت با ذرات کربنی.<sup>[۳]</sup>

### ۳.۴. پراکندگی اشعه‌ی X زاویه کوچک

نظریه‌ی پیوسته‌ی آماری، مورفولوژی<sup>۱۸</sup> ریزساختار را به خواص فیزیکی برای مواد ناهمگن از طریق توابع همبستگی ارتباط می‌دهد. در این کار توابع همبستگی  $n$  نقطه‌ی آماری، نمایش ریاضی مورفولوژی مواد ناهمگن را فراهم می‌کنند.<sup>[۴۰]</sup> توابع همبستگی یک نقطه‌یی عملاً اطلاعاتی درباره‌ی نسبت حجمی هر فاز از ماده‌ی ناهمگن ارائه می‌دهد.<sup>[۴۰]</sup> توزیع، جهت‌گیری و شکل فازهای ماده‌ی ناهمگن با توابع همبستگی دوقطه‌یی یا مرتبه‌بالتر توصیف می‌شود، که معمولاً می‌تواند از اندازه‌گیری‌های ریزساختار مناسب به دست آید.<sup>[۴۱]</sup> این اندازه‌گیری‌ها باید نمایانگر مورفولوژی ماده باشد؛ مثلاً اطلاعات تجربی باید همه‌ی تغییرات توزیع فاز داخل ماده را منعکس کند. ناهمگنی در نانوکامپوزیت‌های پایه‌ی پلیمر معرفی می‌شود، که می‌تواند با: الف) توزیع کلی نانوذرات در زمینه‌ی پلیمر؛ ب) ناهمگنی مکانی نانوذرات که حالت پراکندگی نامیده می‌شود، نمایش داده شود.<sup>[۴۲]</sup> این امر نشان می‌دهد که خواص ماده در واقع حالت پراکندگی نانوذرات است و پراکندگی نانوذرات در زمینه‌ی پلیمر پارامتر توزیع، کلیدی برای محاسبه‌ی نظریه‌ی آماری است.

برای داشتن اطلاعات در مورد پراکندگی ذرات، می‌توان از میکروسکوپ الکترونی عبوری<sup>۱۹</sup> (TEM) یا پراکندگی اشعه‌ی X استفاده کرد.<sup>[۴۳]</sup> اگرچه در نمونه‌ی آنالیز TEM، عکس‌های TEM فقط زمانی نتیجه‌ی مطلوب دارد که همه‌ی مشخصات پراکندگی نانوذرات در آن نمایش داده شده باشد.<sup>[۴۴]</sup> در عمل، پراکندگی یکسان نانوذرات معمولاً به دست نمی‌آید. در این مورد، ریزساختار با مخلوطی از تک‌ذرات و دسته‌یی که شامل بیشتر از یک ذره است شکل یافته است. قابل توجه است که اندازه دسته‌ی نانوذرات ممکن است به چندصد نانومتر برسد که بستگی به اندازه‌ی نانوذره، روش فرایند و برهم‌کنش شیمیایی بین زمینه و نانوذره دارد. علاوه بر این، توابع همبستگی محاسبه شده (برای عکس‌های به دست آمده با روش TEM، اطلاعات توابع همبستگی یک نقطه‌یی و دوقطه‌یی را مطابق توضیحات ارائه شده برای شکل ۲ می‌توان به دست آورد) به شدت به بزرگ‌نمایی عکس‌های TEM ثبت شده بستگی دارد. استفاده از بزرگ‌نمایی زیاد، تابع همبستگی به محلی از ماده‌ی ناهمگن است که عکس‌های میکروسکوپی گرفته‌اند (برای مثال این که آیا عکس‌های TEM انتخابی شامل دسته‌های نانوذرات است یا نه).<sup>[۴۵]</sup> به عبارت دیگر، وضوح تصویر می‌تواند بالا باشد اما مساحت (یا حجم) نماینده خیلی از عکس انتخاب شده بزرگ‌تر باشد.<sup>[۴۵]</sup> به عکس، استفاده از بزرگ‌نمایی کم، اطلاعات نمایش‌دهنده بیشتری درباره‌ی پراکندگی نانوذرات به دست می‌دهد. در این مورد آمارها زیاد است



شکل ۴. اصول پرتونگاری اشعه‌ی X.<sup>[۳۷]</sup>

در این روش، پرتوهای اشعه‌ی X به نمونه‌ی چرخان برخورد کرده و تصاویر دوبعدی با استفاده از یک آشکارگر در طرف دیگر نمونه ثبت می‌شوند (شکل ۴).<sup>[۳۶]</sup> در پرتونگاری کلاسیک (پرتونگاری میرایی) بازسازی سه بعدی با ترکیب تصاویر دوبعدی انجام می‌شود. این روش دارای برخی محدودیت‌هاست.<sup>[۳۶]</sup>

-- دقت تصویر به محدوده‌ی ۱۰۰۰ تا ۲۰۰۰ برابر قطر مقطع عرضی محدود است؛

-- مرزهای مواد مات است؛

-- حجم اطلاعات زیاد است و به تصویر کشیدن و تفسیر کردن آن سخت است.

اگرچه این روش دارای نقاط قوتی نیز هست:<sup>[۳۶]</sup>

-- عکس بردای غیرمخرب سه بعدی

-- آماده‌سازی آسان نمونه

### ۲.۴. میکروسکوپ الکترونی متمرکز (SEM)

در این میکروسکوپ‌ها ابتدا باید یک ستون الکترون ایجاد شود که برای این کار از تفنگ‌های الکترونی استفاده می‌شود. هرچه تعداد این الکترون‌ها بیشتر و در عین حال قطر این ستون کم‌تر باشد، مطلوب‌تر خواهد بود. هم‌سرعت بودن این الکترون‌ها نیز از دیگر خصوصیات مثبت آنها تلقی می‌شود.<sup>[۳۸]</sup> پس از تولید این ستون از الکترون‌ها، برحسب شرایط مورد نظر کاربر با ایجاد یک میدان الکتریکی به آن‌ها شتاب داده می‌شود و به کمک چندین لنز الکترومغناطیسی شعاع آن را تا حد مطلوب کوچک می‌کنند. در این راه از روزه‌های تعبیه شده در مسیر عبور الکترون‌ها نیز استفاده می‌شود. پس از این که الکترون‌ها به سرعت مورد نظر دست یافتند و شعاع ستون نیز تنظیم شد، این ستون از الکترون‌ها تحت کنترل کامل با نقطه‌ی خاصی از جسم برخورد می‌کنند. نتیجه‌ی اندرکنش آن‌ها با نمونه توسط حسگرهای خاص ثبت می‌شود. البته واضح است که برای ثبت هر اندرکنش حسگر خاص نیز لازم است. پس از ثبت این آثار، ستون الکترون به نقطه‌ی مجاور نقطه‌ی فعلی هدایت شده و آثار اندرکنش این نقطه نیز ثبت می‌شود و این کار برای یک شبکه‌ی دوبعدی روی سطح جسم و به‌ازای تک‌تک نقاط (و البته با سرعت بسیار بالا) صورت می‌پذیرد. از نمایش نتایج حاصل روی یک نمایشگر، تصویری شکل می‌گیرد که همانند تصویر تلویزیون همواره در حال جاروب کردن صفحه‌ی نمایشگر است به این ترتیب و بسته به اندرکنشی که خواص آن ثبت شده، تصویری حاصل می‌شود که می‌تواند خصوصیات مورفولوژی یا ترکیب نمونه در لایه‌های سطحی آن را بیان کند.<sup>[۳۹]</sup> نمونه‌یی از این عکس برداری در شکل ۵ نشان داده شده است؛ چنان که ملاحظه می‌شود می‌توان از این عکس‌ها پراکندگی ناهمگنی‌ها و دیگر ویژگی‌های ساختار را مشاهده کرد.

که اجازه می‌دهد  $I(h)$  را مطابق رابطه‌ی ۲۴ بازنویسی کنیم:

$$I(\vec{h}) = \iiint \tilde{\rho}^T(r) e^{-ihr} dV \quad (24)$$

قابل ذکر است که توزیع شدت در  $h$ ، به طور منحصر به فرد با ساختار میدان چگالی به دست می‌آید. با ملاحظه‌ی ایزوتروپی آماری، دمای  $21$  [۲۹، ۳۸] ثابت کرد:

$$\langle e^{-ihr} \rangle = \frac{\sin(hr)}{hr} \quad (25)$$

در نتیجه، شدت پراکندگی میانگین عبارت خواهد بود از:

$$I(h) = \int 4\pi r^2 \tilde{\rho}^T(r) \frac{\sin(hr)}{hr} dr \quad (26)$$

با استفاده از تابع خودهمبستگی،  $\gamma$ ، معادله‌ی ۲۶ را می‌توان چنین بازنویسی کرد:

$$I(h) = V n_0^2 \int 4\pi r^2 \cdot \gamma(r) \frac{\sin(hr)}{hr} dr \quad (27)$$

که در آن  $n_0$  چگالی میانگین الکترون‌هاست، یا:

$$\gamma(r) = \frac{1}{4\pi^2 V n_0^2} \int_0^\infty I(h) \frac{\sin(hr)}{hr} h^2 dh \quad (28)$$

این جا  $n_0$  یک مقدار ثابت است. با استفاده از معادله‌ی ۲۸، می‌توان معادله‌ی ۲۸ را بازنویسی کرد:

$$\begin{aligned} \gamma(r) &= P_r^{(1)}(r) - \phi_1^2 \\ &= \frac{1}{4\pi^2 V n_0^2} \int_0^\infty I(h) \frac{\sin(hr)}{hr} h^2 dh \end{aligned} \quad (29)$$

و  $P_r^{(1)}(r)$  تابع همبستگی احتمال دونقطه‌یی را نشان می‌دهد که توزیع فضایی ذرات (فاز ۱) را نشان می‌دهد.  $P_r^{(1)}(r)$  باید در شرایط زیر صدق کند.

$$\begin{aligned} P_r^{(1)}(r) &= \phi_1 \quad \text{when } r = 0 \\ P_r^{(1)}(r) &= (\phi_1)^2 \quad \text{when } r \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (30)$$

شرط دوم در معادله‌ی ۳۰، شاخص درجه‌ی همگنی توزیع ذرات در زمینه است (برای مثال، اگر شرط دوم برقرار نباشد، توزیع ذرات در زمینه همگن نیست).

با استفاده از معادلات ۱۸ تا ۳۰ می‌توان از نتایج آزمایشات اشعه‌ی  $X$  برای به دست آوردن توابع همبستگی دونقطه‌یی استفاده کرد که در بازسازی میکرورونانوساختارها بسیار حائز اهمیت است.

## ۶. بازسازی با استفاده از توصیف‌گرهای آماری

بازسازی تصادفی مواد ناهمگن با استفاده از اطلاعات ریزساختاری محدود (توابع همبستگی) یکی از مسائل معکوس جذاب در مهندسی است. روش‌های بازسازی مختلفی برای امکان استفاده از توابع همبستگی مرتبه پایین توسعه یافته است. [۳۴، ۵۵] در ادامه، یکی از مشهورترین روش‌های بازسازی که با روش بهینه‌سازی بازپخت  $2^2$  توسعه یافته است مورد بحث قرار می‌گیرد. با استفاده از گروهی از توابع همبستگی می‌توان قسمتی از اطلاعات مواد ناهمگن تصادفی را به دست آورد، این اطلاعات می‌تواند

ولی وضوح تصویر پایین است. به عنوان جایگزینی برای این روش، حالت پراکندگی نانوذرات در نانوکامپوزیت‌های پایه‌ی پلیمر می‌تواند با اندازه‌گیری پراکندگی اشعه‌ی  $x$  زاویه‌کوچک (SAXS) مشخصه‌سازی شود. [۴۶] SAXS یک روش آسان و سریع است که به حجمی به ابعاد چند میلی‌متر مکعب (آمار بالا) بدون از دست دادن وضوح اعمال می‌شود. سیگنال پراکندگی به دست آمده از نانوذرات، اندازه‌ی توزیع و شکل نانوذرات (از فاکتور) و موقعیت آن‌ها نسبت به یکدیگر (فاکتور ساختار) را نشان می‌دهد. از سیگنال SAXS می‌توان متعاقباً برای محاسبه‌ی توابع همبستگی دونقطه‌یی با دقت بالا - چون نمایش بسیار دقیقی از مورفولوژی ماده تولید می‌کند بهره‌برداری کرد. [۲۷-۵۰]

## ۵. ارتباط بین داده‌های SAXS و توابع همبستگی

### دونقطه‌یی

تکنیک پراکندگی اشعه‌ی  $x$  زاویه‌کوچک متکی به چگالی پراکنده شده از ذرات ناهمگن است که اندازه‌ی آن‌ها، بسته به شکل تجهیزات، معمولاً بین ۱ تا ۱۰۰۰ نانومتر قرار دارد. [۵۱-۵۳] چگالی پراکنده شده بستگی به اختلاف بین چگالی الکترونی محلی  $\rho$  از ناهمگنی‌های پراکنده شده و اطرافش دارد، که می‌تواند با چگالی میانگین  $\bar{\rho}$  نشان داده شود. تغییر محلی  $\eta$  برای چگالی الکترون را می‌توان چنین تعریف کرد:

$$\eta = \rho - \bar{\rho} \quad (18)$$

با فرض سیستم ایزوتروپیک آماری با مرتبه‌ی نه چندان وسیع، تابع همبستگی را که دامنه‌ی نوسان‌های چگالی را ملاحظه می‌کند، می‌توان چنین تعریف کرد:

$$\gamma(r) \langle \eta^2 \rangle = \langle \eta_A \eta_B \rangle \quad (19)$$

که در آن  $A$  و  $B$  دو نقطه‌ی جدا درون سیستم‌اند که با بردارهای  $r_1$  و  $r_2$ ،  $r = r_2 - r_1$  نمایش داده می‌شوند و تابع خودهمبستگی یا تابع مشخصه‌ی وابسته به موقعیت  $r$  است:

$$\gamma(r) = \langle \eta(r_1) \eta(r_2) \rangle \quad (20)$$

از توزیع تصادفی ناهمگنی‌ها، تابع خودهمبستگی  $\gamma(r)$  شرایط  $\gamma(r=0) = \langle \eta^2 \rangle$  و  $\gamma(r \rightarrow \infty) = 0$  را ارضا می‌کند. تعریف کوواریانس  $2^0$  فاز ۱ برای سیستم همگن آماری عبارت است از: [۱]

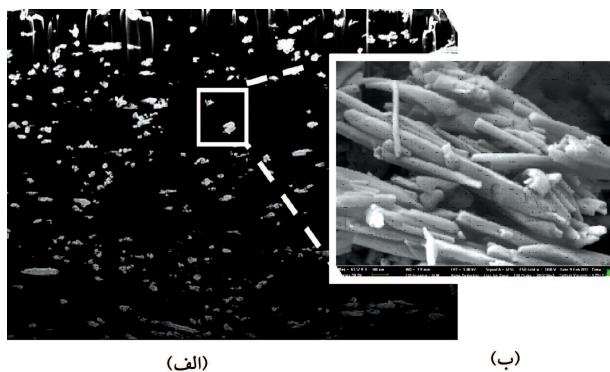
$$\gamma(r) = \langle \eta(r_1) \eta(r_2) \rangle = P_r^{(1)}(r) - \phi_1^2 \quad (21)$$

که در آن  $\phi_1$  نسبت حجمی فاز ۱ (پراکنده‌ها) و  $P_r^{(1)}$  تابع احتمال دونقطه‌یی است. همچنین  $\rho(r)$  تعداد الکترون‌ها در حجم واحد است؛ المان حجم  $dV$  در موقعیت  $r$  شامل  $\rho(r) \times dV$  الکترون خواهد بود. شدت پراکندگی اشعه‌ی  $x$ ،  $I$  به عنوان تابعی از بردار پراکندگی  $\vec{h}$  روی کل حجم  $V$  با انتگرال فوریه دست می‌آید: [۴۲]

$$I(\vec{h}) = \iiint \iiint \rho(r_1) \rho(r_2) e^{-ihr} dV_1 dV_2 \quad (22)$$

با جمع کردن همه‌ی جفت‌ها با فاصله‌ی نسبی یکسان، سپس انتگرال‌گیری روی همه‌ی فاصله‌های نسبی، به نظر می‌رسد مسیر منطقی باشد. تابع خودهمبستگی را می‌توان چنین تعریف کرد:

$$\tilde{\rho}^T(r) = \iiint \rho(r_1) \rho(r_2) dV_1 \quad (23)$$

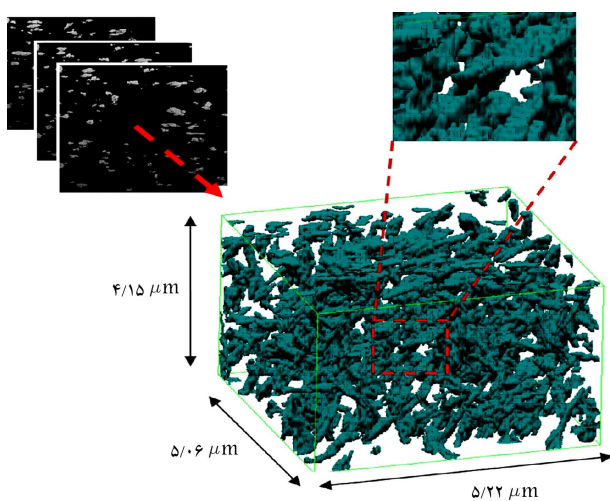


(الف) (ب)

الف) عکس تولید شده با لایه کامپوزیت؛

ب) نانو ذرات موجود در نانو کامپوزیت با میکروسکوپ الکترون روبشی آوریگا.

شکل ۷. عکس برداری چند مقیاسی از نانوکامپوزیت به وسیله میکروسکوپ الکترونی روبشی آریگا. [۵۶]



شکل ۸. بازسازی سه بعدی نانوکامپوزیت از عکس های دوبعدی تولید شده. [۵۶]

است. در نهایت در شکل ۷ عکس های واقعی ثبت شده با روش پرتو یون متمرکز نشان داده شده است.

سپس با استفاده از شصت عکس گرفته شده در این روش، و استفاده از نرم افزار VCAT مدلی سه بعدی که از به هم پیوستن عکس های دوبعدی تولید شده به صورت سه بعدی بازسازی می شود. (شکل ۸)

### ۸. نتیجه گیری

در این نوشتار مواد ناهمگن و کاربرد وسیع آن در صنعت مورد بحث قرار گرفت. نکته مهمی که در مقدمه و قسمت های اول تا سوم این مقاله مورد بحث قرار گرفت، نحوه استخراج اطلاعات آماری از یک ماده ناهمگن بود. همه محققان در نهایت به دنبال راهی برای ارتباط ساختار مواد ناهمگن و خواص آن ماده هستند که توابع همبستگی راهی قدرتمند و جامع برای استخراج اطلاعات آماری این مواد هستند.

همچنین انواع توابع همبستگی یک نقطه ای، دو نقطه ای و n نقطه ای مورد بحث قرار گرفت و برای هر کدام شکل کاربردی آن رسم شد. در ادامه راه های رسیدن از

برای بازسازی و مشخصه سازی مواد ناهمگن تصادفی مورد استفاده قرار گیرد. به طور کلی در یک روش بازسازی ما مایل به تولید یک میکرو/نانوساختار با تعداد مشخصی از توابع همبستگی دو نقطه ای هستیم. بازسازی عددی از مواد ناهمگن تصادفی می تواند برای حل مشکل بهینه سازی یک میکرو/نانوساختار تولید شده تصادفی استفاده شود. بازسازی مونت کارلو<sup>۲۳</sup> با استفاده از روش بازپخت یک روش بهینه سازی است که می تواند برای بازسازی مواد ناهمگن مورد استفاده قرار گیرد. [۵۵، ۳۴، ۲۱] در این روش در مرحله اول عکس های تصادفی با نسبت حجمی یکسان با نمونه ی مورد نظر تولید می شود؛ سپس روش بهینه سازی بازپخت برای جابجا کردن پیکسل هر فاز برای کمینه سازی خطا بین توابع همبستگی مدل به دست آمده و نمونه ی مورد نظر قرار می گیرد. تا زمانی که تابع یک نقطه ای شبیه نمونه ی هدف شود، یک پیکربندی تصادفی اولیه تولید می شود. سپس یک دمای اولیه با مورد نظر قرار دادن شرایط مرزی دوره ای انتخاب، و تابع همبستگی برای این پیکربندی محاسبه و سپس نتایج تابع همبستگی با نمونه ی هدف مقایسه می شود. دو پیکسل از فازهای مختلف به طور تصادفی انتخاب و بعد عوض می شود، البته با اطمینان از این که نسبت حجمی هر فاز حفظ شود. سپس توابع همبستگی یکسان محاسبه، و خطای مربع میانگین<sup>۲۴</sup> با توابع همبستگی مربوطه مقایسه می شود. در این روش الگوریتم متروپولیس<sup>۲۵</sup> به عنوان معیار پذیرش برای تعویض پیکسل ها انتخاب می شود و P احتمال پذیرش برای تعویض پیکسل است:

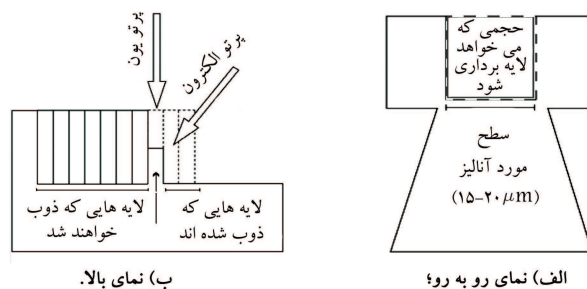
$$P(Error_{old} \rightarrow Error_{new}) = \begin{cases} 1 & \frac{\Delta Error}{T} < 0 \\ e^{-\frac{\Delta Error}{T}} & \frac{\Delta Error}{T} \geq 0 \end{cases} \quad (31)$$

از آنجا که  $\Delta Error = Error_{new} - Error_{old}$ ، تابع T براساس مرحله ی راه حل بازپخت تعریف می شود. این پروسه تا همگرایی توابع همبستگی مورد نظر تکرار می شود.

### ۷. بازسازی سه بعدی با استفاده از پرتو یون متمرکز -

#### میکروسکوپ الکترونی روبشی

شیدایی و همکارانش<sup>[۵۶]</sup> با استفاده از برش زنی و عکس برداری همزمان از نانوکامپوزیت و با استفاده دو ستون پرتو یون متمرکز شده - میکروسکوپ الکترون روبشی از نمونه ی مورد نظر عکس هایی دوبعدی تهیه کردند. برای شروع یک دوزنقه از کامپوزیت ذوب می شود؛ طرف کوتاه تر در حالتی قرار می گیرد که توسط پرتو الکترون عکس برداری شود. در شکل ۶ الف چگونگی لایه برداری و عکس برداری همزمان و در قسمت ب نمایی از نحوه ی ادامه کار برای عکس برداری از لایه های مختلف نشان داده شده



(ب) نمای بالا.

الف) نمای رو به رو؛

شکل ۶. نمایش نمای کلی لایه برداری چندتایی. [۵۶]

بیان شد توابع همبستگی نمایانگر ساختار ماده است و در این مرحله نشان داده شد که چطور می‌توان با انجام آزمایش به اطلاعات آماری مهمی دست پیدا کرد. در نهایت مروری بر بازسازی سه بعدی انجام شد که نشان می‌دهد حتی می‌توان از دو بعد فراتر رفت و بازسازی سه بعدی انجام داد.

توابع همبستگی به ساختار ماده نیز با عنوان بازسازی مطرح شد، اساساً در این مرحله اهمیت توابع همبستگی هرچه بیشتر نشان داده می‌شود، بدین صورت که می‌توان با داشتن این اطلاعات به صورت مستقیم به ساختار ماده دست پیدا کرد. سپس، راه‌های آزمایشگاهی برای به دست آوردن توابع همبستگی ارائه شد، چنانچه مفصلاً

### پانویسها

1. statistical N-point correlation functions
2. two-point correlation functions
3. small angle X-ray scattering
4. transmission/scanning electron microscopy
5. weak-contrast, strong contrast
6. two point correlation function
7. Stell
8. Torquato
9. Sheehan
10. St-Pierre
11. Suzue
12. Shikaono
13. Kasagi
14. Fullwood
15. focused ion beam/scanning electron microscopy
16. X-Ray computed tomography
17. scattering electron microscopy
18. morphology
19. transmission electron microscopy
20. covariance
21. debye
22. annealing optimization approach
23. Monte Carlo
24. mean square error
25. Metropolis

### منابع (References)

1. Torquato, S. Random heterogeneous materials: microstructure and macroscopic properties vol. 16: Springer Science & Business Media, pp.24-28 (2013).
2. Yves, R., Ahzi, S., Baniassadi, M. and et al., *Applied RVE Reconstruction and Homogenization of Heterogeneous Materials*: John Wiley & Sons, (2016).
3. Baniassadi, M., Addiego, F., Laachachi, A. and et al. "Using SAXS approach to estimate thermal conductivity of polystyrene/zirconia nanocomposite by exploiting strong contrast technique", *Acta Materialia*, **59**, pp. 2742-2748, (2011).
4. Baniassadi, M., Garmestani, H., Li, D. and et al. "Three-phase solid oxide fuel cell anode microstructure realization using two-point correlation functions", *Acta materialia*, **59**, pp. 30-43, (2011).
5. Hamedani, H.A., Baniassadi, M., Khaleel, M. and et al. "Microstructure, property and processing relation in gradient porous cathode of solid oxide fuel cells using statistical continuum mechanics", *Journal of Power Sources*, **196**, pp. 6325-6331, (2011).
6. Li, D., Baniassadi, M., Garmestani, H. and et al. "3D reconstruction of carbon nanotube composite microstructure using correlation functions", *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, **7**, pp. 1462-1468, (2010).
7. Debye, P., Anderson Jr, H. and H. Brumberger. "Scattering by an inhomogeneous solid. II. The correlation function and its application", *Journal of applied Physics*, **28**, pp. 679-683, (1957).
8. Kroner, E., "Statistical Modelling", Modeling Small Deformation of Polycrystals, Springer, Dordrecht, pp.229-291, (1986).
9. Dopazo, C. Edward E. O. "An approach to the autoignition of a turbulent mixture", *Acta Astronautica* (1974). Beran, M. "Statistical Continuum Theories Interscience Pub", *New York-London-Sydney*, p. 91, (1968).
10. Phan-Thien, N. and Milton, G. "New bounds on the effective thermal conductivity of N-phase materials", in *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, pp. 333-348, (1982).
11. Dederichs, P.H. and Zeller, R. "Variational treatment of the elastic constants of disordered materials", *Zeitschrift für Physik*, **259**, pp. 103-116, (1973).
12. Willis, J.R. "Variational and related methods for the overall properties of composites", *Advances in applied mechanics*, **21**, pp. 1-78, (1981).
13. McCOY, J.J. "On the calculation of bulk properties of heterogeneous materials", *Quarterly of Applied Mathematics*, **37**, pp. 137-149, (1979).
14. Torquato, S. "Effective electrical conductivity of two-phase disordered composite media", *Journal of Applied Physics*, **58**, pp. 3790-3797, (1985).
15. Sen, A.K. and Torquato, S. "Effective conductivity of anisotropic two-phase composite media", *Physical Review B*, **39**, p. 4504, (1989).
16. Brown Jr, W.F. "Solid mixture permittivities", *The Journal of Chemical Physics*, **23**, pp. 1514-1517, (1955).



17. Liu, Z., Moore, J.A., Aldousari, S.M. and et al. "A statistical descriptor based volume-integral micromechanics model of heterogeneous material with arbitrary inclusion shape", *Computational Mechanics*, **55**, pp. 963-981, (2015).
18. Bochenek, B. and Pyrz, R. "Reconstruction of random microstructures-a stochastic optimization problem", *Computational Materials Science*, **31**, pp. 93-112, (2004).
19. Liang, Z., Fernandes, C., Magnani, F. and et al. "A reconstruction technique for three-dimensional porous media using image analysis and Fourier transforms", *Journal of Petroleum Science and Engineering*, **21**, pp. 273-283, (1998).
20. Talukdar, M. and Torsaeter, O. "Reconstruction of chalk pore networks from 2D backscatter electron micrographs using a simulated annealing technique", *Journal of Petroleum Science and Engineering*, **33**, pp. 265-282, (2002).
21. Yeong, C. and Torquato, S. "Reconstructing random media", *Physical Review E*, **57**, p. 495, (1998).
22. Hasanabadi, A., Baniassadi, M., Abrinia, K. and et al. "3D microstructural reconstruction of heterogeneous materials from 2D cross sections: A modified phase-recovery algorithm", *Computational Materials Science*, **111**, pp. 107-115, (2016).
23. Torquato, S. "Effective stiffness tensor of composite media-I. Exact series expansions", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **45**, pp. 1421-1448, (1997).
24. Pham, D. and Torquato, S. "Strong-contrast expansions and approximations for the effective conductivity of isotropic multiphase composites", *Journal of applied physics*, **94**, pp. 6591-6602, (2003).
25. Torquato, S., *Random Heterogeneous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties* vol. 16: Springer Science & Business Media, pp.80-101 (2002).
26. Lin, S. and Garmestani, H. "Statistical continuum mechanics analysis of an elastic two-isotropic-phase composite material", *Composites Part B: Engineering*, **31**, pp. 39-46, (2000).
27. Garmestani, H., Lin, S., Adams, B.L. and et al. "Statistical continuum theory for large plastic deformation of polycrystalline materials", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **49**, pp. 589-607, (2001).
28. Garmestani, H., Lin, S. and Adams, B.L. "Statistical continuum theory for inelastic behavior of a two-phase medium", *International Journal of Plasticity*, **14**, pp. 719-731, (1998).
29. Lin, S, Garmestani, H. and Adams, B. "The evolution of probability functions in an inelastically deforming two-phase medium", *International Journal of Solids and Structures*, **37**, pp. 423-434, (2000).
30. St-Pierre, L., Heripre, E., Dexet, J., Crepin, G. and et al. "3D simulations of microstructure and comparison with experimental microstructure coming from O.I.M analysis", *International Journal of Plasticity*, **24**, pp. 1516-1532, (2008).
31. Suzue, Y., Shikazono, N. and Kasagi, N. "Micro modeling of solid oxide fuel cell anode based on stochastic reconstruction", *Journal of Power Sources*, **184**, pp. 52-59, (2008).
32. Fullwood, D.T., Niezgod, S.R. and Kalidindi, S.R. "Microstructure reconstructions from 2-point statistics using phase-recovery algorithms", *Acta Materialia*, **56**, pp. 942-948, (2008).
33. Principe, E.L. "How to use FIB-SEM data for 3-D reconstruction", *R&D Magazine*, **6**, pp. 29-30, (2008).
34. Jiao, Y., Stillinger, F. and Torquato, S. "Modeling heterogeneous materials via two-point correlation functions: Basic principles", *Physical Review E*, **76**, p. 031110, (2007).
35. Jiao, Y., Stillinger, F. and Torquato, S. "Modeling heterogeneous materials via two-point correlation functions. II. Algorithmic details and applications", *Physical Review E*, **77**, p. 031135, (2008).
36. Ketcham, R.A., and William D.C. "Acquisition, optimization and interpretation of X-ray computed tomographic imagery: applications to the geosciences", *Computers & Geosciences* (2001).
37. Roux, S. and et al. "Three-dimensional image correlation from X-ray computed tomography of solid foam" *Composites Part A: Applied science and manufacturing* (2008).
38. Todokoro, H. and Ezumi, M. "Scanning electron microscope", ed: Google Patents, U.S. Patent No. 5,872,358 (1999).
39. Hayat, M.A., *Principles and Techniques of Scanning Electron Microscopy. Biological Applications*, New York, NY: Van Nostrand Reinhold Co I, (1974).
40. Torquato, S., *Random heterogeneous materials: microstructure and macroscopic properties*. New York: Springer Verlag, pp.150-181 (2002).
41. Jiao. S.F., Torquato, Y.S. *Phys Rev*, E 79 (2007).
42. Alexandre M, D.P. "Polymer-layered silicate nanocomposites: preparation, properties and uses of a new class of materials", *Materials Science and Engineering*, R-Reports 28:1-2. (2000).
43. Kashiwagi, H.R., Zhang, T., Briber, X. and et al. "Polymer", ed, p. 45:881, (2004).
44. Kashiwagi, F.J., Douglas JF, T., Yamamoto, K. and et.al. "Polymer", ed, p. 48:4855, (2007).
45. Edraki. M. and Banimahd Keivani, M. "Study on the Optical and Rheological properties of polymer-layered Silicate Nanocomposites", *Journal of Physical & Theoretical Chemistry*, **10**, pp. 69-79, (2013).
46. Bandyopadhyay, J. and Ray, S.S. "The quantitative analysis of nano-clay dispersion in polymer nanocomposites by small angle X-ray scattering combined with electron microscopy", *Polymer*, **51**, pp. 1437-1449, (2010).
47. Guimer, A. and Fournet, G. and Walker, C.B. *Small angle scattering of X-rays*, J. Wiley & Sons, New York, pp. 268, (1955).
48. Debye P, A.H., *Appl Phys* p. 28:4, (1997).
49. Debye, P., Anderson, H.R., Jr. and Brumberger, H. "J. Appl. Phys", **28**, p. 679 (1957).

50. Frisch, H. and Stillinger, F.H. "Contribution to the statistical geometric basis of radiation scattering", *The Journal of Chemical Physics*, **38**(9), pp. 2200-2207, (1963).
51. Cullity, D.B., Stuart, S.R. "Elements of X-ray diffraction", Pearson Education (2014).
52. Brumberger, H. "Modern aspects of small-angle scattering", : *Springer Science & Business Media*, **451**, p.463 (2013).
53. Feigin, L.A., Svergun, D.I., and Taylor, G.W., *Determination of the Integral Parameters of Particles*, in Structure Analysis by Small-Angle X-ray and Neutron Scattering, ed: Springer, Boston, MA, pp.59-105 (1987), pp. 59-105.
54. Glatter, O. and Kratky, O. Small angle X-ray scattering: Academic press, (1982).
55. Jiao, Y., Stillinger, F. and Torquato, S. "Optimal packings of superdisks and the role of symmetry", *Physical review letters*, **100**, p. 245504, (2008).
56. Sheidaei, A., Baniassadi, M., Banu, M. and et al. 3-D microstructure reconstruction of polymer nano-composite using FIB-SEM and statistical correlation function", *Composites Science and Technology*, **80**, pp. 47-54, (2013).