

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ**

На правах рукопису

**Швець Уляна Станіславівна**

УДК 538.971

**ВПЛИВ ПЛАСТИЧНОЇ ДЕФОРМАЦІЇ ТА ІОННОГО ОПРОМІНЕННЯ  
НА АМОРФІЗАЦІЮ І ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ СПЛАВІВ  
НА ОСНОВІ Fe і Ni**

01.04.07 – фізика твердого тіла

**ДИСЕРТАЦІЯ**

на здобуття наукового ступеня  
кандидата фізико-математичних наук

Науковий керівник:

**Карпуша Василь Данилович,**

кандидат фізико-математичних наук,

доцент

**СУМИ – 2014**

## ЗМІСТ

	стор.
<b>ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ.....</b>	<b>4</b>
<b>ВСТУП.....</b>	<b>5</b>
<b>РОЗДІЛ 1 ОСОБЛИВОСТІ БУДОВИ НЕВПОРЯДКОВАНИХ МАТЕРІАЛІВ ТА ВПЛИВ НА ЇХ СТРУКТУРУ ЗОВНІШНІХ ЧИННИКІВ (ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД) .....</b>	<b>10</b>
1.1. Особливі властивості аморфних сплавів .....	10
1.2. Моделі аморфного твердого тіла та методи дослідження електронної структури.....	12
1.3. Оптичні методи дослідження поверхневих властивостей .....	19
1.4. Умови аморфізації твердого тіла.....	21
1.5. Зв'язок атомно-електронної та фазової структури з фізичними властивостями аморфних сплавів.....	23
1.6. Вплив механічних напружень на фазові перетворення у твердому тілі ..	25
1.7. Вплив потоків мікрочастинок на атомно-електронну структуру поверхневого шару.....	28
Висновки до розділу 1 .....	31
<b>РОЗДІЛ 2 МЕТОДОЛОГІЯ ТА МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ.....</b>	<b>33</b>
2.1. Зразки та обладнання для дослідження аморфних сплавів .....	33
2.2. Обґрунтування методу розв'язування оберненої задачі еліпсометрії.....	35
2.3. Оцінка точності результатів чисельних методів.....	47
2.4. Побудова нейромережевої моделі визначення оптичних властивостей аморфних сплавів .....	51
Висновки до розділу 2 .....	55
<b>РОЗДІЛ 3 МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ВЗАЄМОДІЇ СВІТЛА З ПОВЕРХНЯМИ ДОСЛІДЖУВАНИХ ЗРАЗКІВ.....</b>	<b>56</b>
3.1. Особливості застосування оптимізаційного методу розв'язування оберненої задачі еліпсометрії .....	56

3.2. Розв'язування оберненої задачі еліпсометрії з використанням середньостатистичного значення функції помилки .....	67
3.3. Область визначення функції помилки .....	73
3.4. Визначення оптичних показників аморфних сплавів із використанням нейронних мереж.....	75
Висновки до розділу 3 .....	79
<b>РОЗДІЛ 4 ДОСЯЖНА ТОЧНІСТЬ ВИЗНАЧЕННЯ ОПТИЧНИХ ПАРАМЕТРІВ.....</b>	<b>80</b>
4.1. Виділення гармонічних складових спектральних залежностей оптичних параметрів.....	80
4.2. Модель взаємодії світлової хвилі з електромагнітним полем електрона.	88
4.3. Порівняння встановлених еліпсометрично значень довжин хвиль 3d-, 3p-, 4s-електронів з даними, отриманими іншими методами.....	92
Висновки до розділу 4 .....	94
<b>РОЗДІЛ 5 ВПЛИВ ЗОВНІШНІХ ЧИННИКІВ НА ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ТА ОБ'ЄМНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ АМОΡФНИХ МЕТАЛЕВИХ СПЛАВІВ.....</b>	<b>95</b>
5.1. Вплив деформаційної дії на оптичні параметри поверхневих шарів аморфних сплавів .....	95
5.2. Об'ємні частки фазових складових аморфних сплавів.....	97
5.3. Дослідження дії низькоенергетичного іонного бомбардування і полірування поверхні на оптичні параметри поверхневих шарів аморфних сплавів .....	110
5.4. Вплив введення легуючих елементів на оптичні характеристики.....	117
Висновки до розділу 5 .....	120
<b>ВИСНОВКИ .....</b>	<b>122</b>
<b>ДОДАТОК А.....</b>	<b>124</b>
<b>ПРИМІТКИ .....</b>	<b>132</b>
<b>СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ .....</b>	<b>133</b>

## ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ

АМС – аморфні металеві сплави;

НМ – нейронна мережа;

ОЗЕ – обернена задача еліпсометрії;

СЕ – спектральна еліпсометрія;

$\tilde{\varepsilon}$  – ефективна діелектрична функція гетерогенної системи;

$\rho$  – відношення комплексних амплітудних коефіцієнтів відбивання для  $p$ - та  $s$ -компонент поляризації;

$\psi$  – азимут відновленої лінійної поляризації;

$\varepsilon$  – діелектрична проникливість середовища;

$\lambda$  – довжина хвилі падаючого світла;

$\Delta$  – зсув фаз між ортогональними компонентами вектора поляризації;

$\sigma$  – оптична провідність середовища;

$\varphi_0$  – кут падіння світла на поверхню досліджуваного зразка;

$d$  – оптична товщина поверхневого шару;

$F$  – функція помилки, цільова функція;

$f$  – об'ємна частка включень одного матеріалу в іншому;

$I_{90}$ ,  $I_{45}$ ,  $I_0$  – інтенсивність світла при положеннях аналізатора  $\gamma_A = 0^\circ$ ,  $45^\circ$ ,  $90^\circ$  і фіксованому положенні поляризатора  $\gamma_P = 45^\circ$ ;

$k$  – показник поглинання;

$N$  – комплексний показник заломлення середовища;

$n$  – показник заломлення;

$T_{кр}$  – температура кристалізації.

## ВСТУП

**Актуальність теми.** Принципи створення багатофункціональних конструкційних матеріалів нового покоління, сучасний технічний прогрес висувають більш жорсткі вимоги до металевих матеріалів, які повинні комбінувати в собі механічні, фізичні та хімічні властивості, що, інколи, важко поєднуються між собою [1, 2]. На відміну від кристалічних матеріалів аморфні сплави мають комплекс унікальних фізико-механічних властивостей та відносно просту схему отримання, що обумовлює широку сферу їх використання та незгасаючий інтерес до вивчення [3, 4].

У науковому і прикладному аспектах важливим є виготовлення поверхонь із заздалегідь заданими параметрами [5]. Однак наявність хімічної та структурної неоднорідностей, що обумовлено зміною концентрації окремих атомів та надлишкового вільного об'єму, термічною нестабільністю, істотно впливає на експериментальні результати під час досліджень поверхневих явищ [6–9]. Останнім часом велику увагу приділяють дослідженню процесів формування рельєфу поверхні аморфних сплавів під дією механічних навантажень. Це обумовлено тим, що руйнування цих матеріалів починається саме з поверхні [10].

Багато задач, пов'язаних із вивченням та поясненням властивостей некристалічних твердих тіл, до цього часу не отримали однозначного розв'язку. Існують різні уявлення щодо зміни їх структури в процесі кристалізації, дії механічних навантажень, легування, опромінення тощо [11–17].

Вивчення реакції аморфних сплавів на подібні впливи є надзвичайно актуальною науковою проблемою, вирішення якої дозволить підвищити надійність систем, в яких використовуються аморфні металеві сплави (АМС).

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.** Дисертаційна робота виконана на кафедрі моделювання складних систем Сумського державного університету у межах держбюджетних тем: № 0104U002436 “Дослідження впливу структурних особливостей приповерхневих прошарків неупорядкованих систем на їх оптичні властивості”

(2004–2005 pp.), № 0107U001612 “Вплив зовнішніх факторів на оптичні параметри приповерхневих прошарків аморфних сплавів” (2007–2008 pp.), № 0109U004114 “Розв’язування оберненої задачі еліпсометрії в умовах похибки експерименту” (2009–2010 pp.), № 0111U007000 “Еліпсометричні дослідження низькорозмірних структур” (2011–2015 pp). Здобувач брала участь у виконанні зазначених НДР як виконавець наукових досліджень.

**Мета і задачі досліджень.** Мета дисертації полягає у встановленні впливу пластичної деформації, іонного опромінення та введення легуючих елементів на релаксаційні процеси у поверхневому шарі аморфних металевих сплавів.

Для досягнення мети роботи були вирішені такі наукові завдання:

- удосконалення методики спектроеліпсометричних досліджень оптичних властивостей поверхневих шарів аморфних сплавів;
- визначення спектральних залежностей оптичної товщини поверхневого шару, показників заломлення та поглинання поверхневого шару і підкладки аморфних сплавів  $Ni_{40}Fe_{40}B_{20}$ ,  $Ni_{40}Fe_{50}B_{10}$  із різним якісним станом поверхні;
- дослідження зміни структури та об’ємних часток фазових складових аморфного сплаву  $Ni_{85}C_{15}$  унаслідок деформації;
- вивчення впливу бомбардування поверхні низькоенергетичними іонами аргону на оптичні властивості аморфних сплавів  $Ni_{40}Fe_{40}B_{20}$ ,  $Ni_{40}Fe_{50}B_{10}$ ;
- дослідження взаємозв’язку температури кристалізації, оптичних провідності і товщини поверхневого шару при зміні вмісту Ni у сплавах  $Fe_{78-x}Ni_xSi_9B_{13}$  ( $x = 0, 1, 4, 8, 16, 21$  at. %) та типу легуючого елемента для сплавів  $Fe_{80}DM_5B_{15}$  (DM = Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni).

**Об’єкт дослідження** – релаксаційні процеси у поверхневих шарах аморфних сплавів під впливом механічних напружень, зміни елементного складу та іонного бомбардування.

**Предмет дослідження** – вплив пластичної деформації, опромінення іонами аргону та введення легуючих елементів на об’ємні частки фазових складових, температуру кристалізації та оптичні властивості аморфних сплавів на основі Fe та Ni.

**Методи дослідження.** Еліпсометрія, математичне моделювання відбивальної системи “однорідна плівка – однорідна підкладка”, чисельний розрахунок оптичних параметрів двошарової системи шляхом розв’язання оберненої задачі еліпсометрії; комп’ютерне моделювання гетерогенних систем з урахуванням наближень Масквелла – Гарнетта та Бруггемана – Ландауера.

**Наукова новизна одержаних результатів.** Проведене у роботі комплексне дослідження релаксаційних процесів у поверхневих шарах аморфних сплавів під впливом механічних напружень, зміни композиційного складу та низькоенергетичного іонного бомбардування дозволило отримати такі нові результати:

1. Установлено, що процентний вміст кристалічної фази біля поверхні аморфного сплаву  $Ni_{85}C_{15}$  вищий порівняно з об’ємними областями цього сплаву, це обумовлено процесами структурної релаксації, які відбуваються у поверхневому шарі раніше, ніж у решті об’єму.
2. Уперше показано, що пластична деформація збільшує об’ємну частку кристалічної фази біля поверхні аморфного сплаву  $Ni_{85}C_{15}$ , у результаті чого спектральні залежності оптичних параметрів і оптичної провідності наближаються до залежностей кристалічного сплаву аналогічного хімічного складу.
3. Уперше виявлено взаємозв’язок між оптичною товщиною поверхневого шару і температурою кристалізації аморфних сплавів  $Fe_{80}DM_5B_{15}$  ( $DM = Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni$ ) і  $Fe_{78-x}Ni_xSi_9B_{13}$  ( $x = 0, 1, 4, 8, 16, 21$  at%). Показано, що характер залежностей оптичної товщини поверхневого шару і температури кристалізації від типу легуючого елемента має подібний характер.
4. Виявлено ефект зменшення оптичної товщини поверхневого шару після бомбардування поверхні аморфних сплавів  $Ni_{40}Fe_{50}B_{10}$  і  $Ni_{40}Fe_{40}B_{20}$  низькоенергетичними іонами.
5. Установлено, що збільшення шорсткості поверхні зразка сплаву  $Ni_{40}Fe_{40}B_{20}$  приводить до зростання значення оптичної товщини, зменшення значень показників заломлення і поглинання поверхневого шару. Доведено, що

оптичні характеристики підкладки менш чутливі до змін, які відбуваються у поверхневому шарі.

6. Удосконалено методику розв'язання оберненої задачі еліпсометрії за результатами спектроеліпсометричних вимірювань методом Бітті – Кона. Уперше показано можливість апроксимації спектральних залежностей оптичних параметрів АМС гармоніками, що дозволило оцінити досяжну точність еліпсометричних вимірювань.

**Практичне значення отриманих результатів.** Отримані у роботі результати мають як фундаментальне, так і прикладне значення. Фундаментальне значення полягає у розширенні уявлень про релаксаційні процеси, що відбуваються в аморфних сплавах під впливом механічних напружень та іонного бомбардування. Це дозволило більш глибоко зрозуміти зв'язок між поверхневими та об'ємними характеристиками матеріалу. Встановлені закономірності можуть бути використані для пояснень і прогнозування властивостей аморфних сплавів, створення матеріалів із наперед заданими властивостями для застосування в різних галузях промисловості. У роботі показано, що вплив пластичної деформації у процесі технічної експлуатації зразка відбивається на структурній стабільності деталей, виготовлених з аморфних сплавів.

Результати дисертаційного дослідження впроваджено у навчальний процес Сумського державного університету кафедри моделювання складних систем при виконанні курсових та дипломних робіт для студентів спеціальності 7.04030101 “Прикладна математика”, викладанні дисциплін “Моделювання нелінійних динамічних систем”, “Моделювання фізичних процесів і систем”.

**Особистий внесок здобувача** полягає у самостійному пошуку та аналізі наукових джерел, створенні математичних моделей та дослідженні на їх основі оптичних характеристик і структурного складу сплавів. Постановку завдань дослідження, розроблення методик, формування математичної моделі, обговорення та узагальнення результатів здійснено разом із науковим керівником канд. фіз.-мат. наук, доц. Карпушою В. Д. В обговоренні



результатів цієї роботи брали участь д-р фіз.-мат. наук, проф. Проценко І. Ю., д-р фіз.-мат. наук, проф. Погребняк О. Д. Особисто автором підготовлено статті [18–20], тези доповідей [23, 28, 30]; у статтях [31–35] і тезах доповідей [21, 22, 24–27, 29] автором написано окремі розділи. Основна частина результатів доповідалася на наукових конференціях і семінарах.

**Апробація результатів дисертації.** Основні результати роботи доповідалися і обговорювалися на таких наукових конференціях: VI, VII, VIII, XI International Young Scientists Conference “Optics and High Technology Material Science” (Київ, 2005–2007, 2010); конференції молодих учених і аспірантів інституту електронної фізики НАН України “ІЕФ” (Ужгород, 2007); Міжнародних конференціях студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики “ЕВРИКА” (Львів, 2007–2010); Харківській нанотехнологічній асамблеї (Харків, 2008); IV Міжнародній науковій конференції “Фізика неупорядкованих систем” (Львів, 2008); VII Międzynarodowej naukowii-praktycznej konferencji “Perspektywiczne opracowania są nauką i technikami-2011” (Przemyśl, 2011); науково-технічних конференціях викладачів, співробітників, аспірантів і студентів факультету ЕліТ СумДУ (Суми, 2003–2008, 2010).

**Публікації.** Основні матеріали дисертації відображені у 18 [18–35] публікаціях, серед яких 6 статей [18, 19, 32–35] опубліковано у фахових наукових виданнях, а стаття [32] опублікована в іноземному виданні. Що індексується науко-метричною базою Scopus, 2 статті – у матеріалах конференцій [20, 31] та 10 – у тезах доповідей наукових конференцій [21–30]. Назви 18 робіт наведені у списку опублікованих праць у авторефераті.

**Структура і зміст роботи Структура і зміст роботи.** Дисертаційна робота складається із переліку умовних скорочень, вступу, п’яти розділів, висновків, списку використаних джерел, що містить 206 найменувань на 22 сторінках, і додатка на 8 сторінках. Дисертацію викладено на 154 сторінках, з яких 93 – основний текст, 48 рис. і 11 табл., у тому числі 21 рис. і 4 табл. – на окремих 20 аркушах.

# РОЗДІЛ 1

## ОСОБЛИВОСТІ БУДОВИ НЕВПОРЯДКОВАНИХ МАТЕРІАЛІВ ТА ВПЛИВ НА ЇХ СТРУКТУРУ ЗОВНІШНІХ ЧИННИКІВ (ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД)

### 1.1. Особливі властивості аморфних сплавів

Увага багатьох учених у наш час повернута до проблем дослідження структури і властивостей неупорядкованих конденсованих середовищ (НКС), до яких належать тіла з аморфною структурою, зокрема, аморфні металеві сплави. Початок інтенсивного вивчення аморфних металів і сплавів датується приблизно серединою ХХ століття. Не дивлячись на те, що вивченню НКС було присвячено чимало робіт, до цих пір виникає безліч нових проблем і питань, пов'язаних з їх властивостями.

Аморфними називають речовини, у яких відсутній дальній порядок у розташуванні атомів [36, 37]. Розрізняють дві великі групи АМС: метал–металоїд і метал–метал. Першу групу складають сплави перехідних і благородних металів (Fe, Co, Ni, Re, Ti, Pd та ін.) з металоїдами (B, C, P Si, Ge та ін.), атомний вміст яких дорівнює 15–25 %. До другої групи належать сплави: а) перехідних металів між собою (наприклад, Nb–Ni, Zr–Pd та ін.); б) простих металів між собою (Mg–Zn, Mg–Cu та ін.); в) простих металів із перехідними (Ti–Be, Zr–Be та ін.); г) простих металів із рідкісноземельними (La–Al, La–Be та ін.); д) перехідних металів з рідкісноземельними (Gd–Co, Tb–Co та ін.). Окрім бінарних сплавів, з цих самих елементів можуть бути утворені різноманітні багатокомпонентні аморфні сплави [38].

Підвищена увага до АМС викликана, перш за все, їх особливістю. Дослідження таких об'єктів розширює уявлення фізики конденсованих середовищ і дає можливість вивчати неупорядковані системи у твердому стані. З практичного погляду зацікавленість АМС обумовлена поєднанням у них унікальних фізичних властивостей. Наслідком існування аморфної структури є незвичайні магнітні, механічні, електричні властивості і корозійна стійкість

аморфних металевих сплавів [39–44]. Так, їх міцність може бути вищою в 5–10 разів, електричний опір вищим у 3–5 разів, ніж у кристалічних аналогів; температурний коефіцієнт електричного опору АМС може наближатися до нуля. Саме тому застосування аморфних матеріалів у сучасних технологіях дозволяє отримати унікальні фізичні характеристики виробів, які майже неможливо отримати, використовуючи тільки матеріали з кристалічною структурою [45, 46].

Лінійна залежність гігантського магнітного імпедансу аморфних металевих магнітних сплавів від зовнішнього поля, а також його чутливість до змін у зовнішньому магнітному полі, використовуються при виготовленні магнітних сенсорів для наукового і промислового застосування.

Серед факторів, що обумовлюють термічну стабільність АМС, відзначають [47, 48] співвідношення розмірів атомів компонентів, що входять до їх складу, електронегативність, відносну концентрацію валентних електронів, енергію зв'язку у сплаві, кореляційний зв'язок між температурою початку кристалізації АМС та відповідним значенням зміни ентальпії. Було виявлено, що чим менше значення зміни ентальпії, тим вище значення температури кристалізації, тобто стабільність матеріалу тим вища, чим менший термодинамічний стимул до його розпаду [46].

Критерієм стабільності АМС є температура, за якої відбуваються зміни будь-яких властивостей цих сплавів. Під час їх нагрівання спостерігається структурна релаксація [49] та кристалізація [46, 50, 51]. Релаксація характеризується певними змінами в АМС при збереженні аморфного стану. Під час кристалізації [52] розпадається аморфна фаза з утворенням кристалічних фаз. Кінетику та механізми релаксації і кристалізації аморфних сплавів визначають дефекти будови та поля напружень [53]; кінетику кристалізації АМС – кооперативні зміщення груп з 10–20 атомів на відстані, співрозмірні з міжатомними.

## **1.2. Моделі аморфного твердого тіла та методи дослідження електронної структури**

Аморфний стан твердого тіла – одна з найменш вивчених частин сучасної фізики твердого тіла. Він, у певній мірі, відповідає структурі рідини, тому під час досліджень повинні бути враховані флуктуації густини, локальне оточення та хімічний склад матеріалу, що надає опису структури імовірнісний та статистичний характер [45]. Проте тверді аморфні тіла за своєю атомною структурою відрізняються від рідини тим, що атоми і молекули не розподілені хаотично в усьому об'ємі, а розміщені певним чином, утворюючи так званий ближній порядок [54, 55]. Топологічний ближній порядок в аморфних сплавах не має аналогів у звичайних кристалах. Однак тенденція одних атомів збирати навколо себе інші така сама, як і у кристалах. Цю властивість називають хімічним (або композиційним) ближнім порядком. Проблема опису топологічного ближнього порядку в аморфних сплавах значно складніша за проблему хімічного впорядкування [55]. Крім того у наукових джерелах існують публікації [56] про так званий середній порядок – кореляції у розташуванні атомів на відстанях, що значно перевищують радіус декількох координаційних сфер.

Атомна структура аморфного тіла визначається не лише характером міжатомних сил, але й процесами його утворення. Виходячи з цього, аморфні тіла поділяються на два класи: перший – пов'язаний з кристалами, другий – із рідиною.

Найбільш вдало моделює та пояснює властивості аморфних тіл система з вільним об'ємом (модель Бернала), яка спочатку використовувалась для опису дифузійних процесів у рідині. Після удосконалення стала застосовуватися для пояснення дифузії та пластичної деформації АМС [57], переходу “тверде тіло – рідина – аморфне тіло”, для роз'яснення кінетики структурних змін під час відпалювання. Однак розрахунки за цим наближенням не завжди відповідали експериментальним даним. Удосконалення моделі призвело до того, що як елементи використовувалися “м'які” сфери, сукупності октаєдрів і тетраєдрів.

Характерним для цієї моделі є поняття наявності комірок, які містять вільний об'єм, а також сукупності факторів, що дозволяють встановити густину та розподіл таких комірок за тих чи інших умов. Модель вільного об'єму базується на наступних принципах: 1) вільний об'єм може перерозподілятися між комірками, причому перерозподіл відбувається без зміни сумарного вільного об'єму та вільної енергії тіла; 2) дифузійне перенесення атомів є можливим, коли об'єм сусідньої вільної порожнини перевищує деяке критичне значення, при цьому самі ці порожнини утворюються внаслідок флуктуаційного перерозподілу вільного об'єму; 3) кількість вільного об'єму може змінюватися зі зміною температури тіла поблизу температури скловання, а також під впливом напружень, викликаних пластичною деформацією. Модель вільного об'єму широко застосовується у фізиці аморфного тіла для пояснення процесів структурної релаксації, дифузії та деформації.

Є два пояснення процесу утворення вільного об'єму [45]. Перше використовує термодинамічний підхід. Вважається, що у тілі можуть виникати комірки, які містять (рідиноподібні) та не містять (твердотільні) вільний об'єм. Перехід аморфного тіла в рідину, за таких модельних уявлень, пов'язується з утворенням нескінченного рідиноподібного кластеру, який формується, коли концентрація рідиноподібних комірок сягає деякого критичного значення (0,15–0,30).

Другий підхід трактує аморфне тіло як систему випадково щільно упакованих куль, що має надлишковий (порівняно з кристалом) питомий об'єм на атом. Цей об'єм у вигляді надмірних атомних порожнин може довільним чином перерозподілятися між атомами без зміни сумарного вільного об'єму.

Розвиток рідинного підходу поклав початок моделюванню аморфної структури у вигляді елементів, кожний із яких містив центральний атом одного роду, до якого притягувалися і врешті-решт оточували атоми іншого роду. Такі елементи були названі “кластерами”. Для більшості аморфних металевих сплавів кластерна модель є адекватною. Розміри таких кластерів менші 10 нм.

Полікластерна модель базується на визначенні класу топологічно розупорядкованих структур. Полікластери мають більш досконалий локальний порядок у більшій частині об'єму (ніж система куль з випадковою щільною упаковкою) і це поєднується з сильним топологічним хаосом, з порушенням порядку у взаємному розташуванні атомів на нескінченних відстанях. Таке модельне уявлення про структуру аморфних тіл дозволяє аналізувати структурні дефекти та механізми перенесення атомів, механічний стан під дією зовнішніх сил та структурні флуктуації.

Структуру аморфних сплавів описують також як аморфну матрицю, в якій розміщені нанокристали. Існує модельне уявлення про аморфний сплав як про кристал, до якого введені певного виду дефекти – дисклинації. Заповнення кристала цими дефектами переводить його структуру у стан, близький до аморфного.

При використанні тієї або іншої моделі застосовуються певні обмеження. Наприклад, для металевого скла дисклинаційна модель мало ймовірна. Крім того, топологічний ближній порядок аморфного сплаву (політетраедричний) відрізняється від типового кристала (у природі поширені ОЦК і ГЦК ґратки). Отже, монокристалічна модель у цьому випадку не є прийнятною.

Глезер А. М. відзначає [55], що для опису структури аморфних сплавів найчастіше використовують псевдокристалічну (нанокристали), рідинну та кластерну моделі. Носкова Н. І. та ін. [58] вважають, що структура аморфного сплаву – це аморфна матриця (квазірідина) із включеннями дисперсних фаз. Дослідниками експериментально виявлені дисперсні кластери  $\alpha$ -Co і дисперсні фази  $\text{Co}_2\text{Si}$  та  $\text{Fe}_3\text{Si}$  (розміром менше 5 нм) в аморфній матриці сплаву  $\text{Fe}_5\text{Co}_{70}\text{Si}_{15}\text{B}_{10}$ , а також – дисперсні фази  $\alpha$ -Co,  $\beta$ -Co,  $\text{Co}_2$  (Mo, Zr) у аморфному сплаві  $\text{Co}_{81,5}\text{Mo}_{9,5}\text{Zr}_9$ .

У зв'язку з умовністю моделі атомної структури АМС виникають певні труднощі при візуалізації кристалів і окремих атомів. Використовуються дуже тонкі плівки (близько 1–5 нм) і спеціальні комп'ютерні програми для розрахунків і формування зображення на підставі розсіювання електронів.

Наприклад, Глезер А. М. отримав зображення атомної структури металевого скла  $\text{Fe}_{74}\text{B}_{26}$  [55]. Автор вважає, що у матеріалі присутні сукупності нанокристалів розміром близько 1 нм (що цілком імовірно, оскільки розміри нанокристала  $\alpha\text{-Fe}$  можуть бути в межах від 0,5 до 100 нм), проте це можуть бути і кластери, і дефекти.

У роботі [59] досліджувалися особливості ближнього порядку аморфних стрічок, виготовлених гартуванням з рідкого стану сплавів  $\text{Ni-Nb}$ – ( $\text{Ta}$ ,  $\text{V}$ ). За результатами рентгеноструктурного аналізу сплавів у аморфному стані та розрахунку середньозважених парних кореляційних функцій, у тому числі і парціальних, були виявлені області локального впорядкування зі структурою, характерною для досліджуваних сплавів у кристалічному стані. На підставі цього авторами була висунута модель конгруентного сполучення кластерів. Кластерний підхід до опису структури даних матеріалів припускає існування в них тополого-концентраційних неоднорідностей з елементами ближнього порядку, характерними для конкретних проміжних фаз. Розміри кластерів для дослідження сплавів були обрані порядку 2 нм. Саме тому науковцями були зроблені висновки про те, що кластери у досліджуваних аморфних сплавах можуть бути побудовані на основі ближнього порядку різних фаз  $\text{NiNb}_5$  та  $\text{Ni}_{6+x}\text{Nb}_{6-x}\text{C}$  одного структурного типу  $E_{93}$ . Імовірність взаємного сполучення кластерів на основі різних фаз одного структурного типу  $E_{93}$  істотно вища імовірнісних сполучень кластерів на основі другої рівноважної фази ( $\text{Ni}_3\text{Nb}$ ) вивчених сплавів.

Незважаючи на наявність різних моделей, все ж таки не існує єдиної, яка б дозволила адекватно описати структуру та усі властивості АМС [45]. Запропоновані моделі можуть добре моделювати тільки певні їх властивості та за певних умов дослідження. Найбільші складності моделювання полягають у відсутності трансляційної симетрії розташування атомів. Через малу вивченість структури аморфних сплавів використовуються усі їх модельні уявлення, хоча у кожному конкретному випадку – саме ті, які дозволяють найточніше описати

властивості аморфних сплавів. Результати дослідження топологічної структури аморфних сплавів не в змозі пояснити всю сукупність їх властивостей.

Безперечно, фізичні властивості аморфного стану безпосередньо пояснюються його електронною структурою. До прямих експериментальних методів дослідження заповненої частини загальної густини станів матеріалу належать ультрафіолетова фотоелектронна спектроскопія та рентгенівська фотоелектронна спектроскопія [60], метод оптичної спектроскопії [61]. Незаповнена частина станів, що знаходиться вище рівня Фермі  $E_f$ , може вивчатися за допомогою методу зворотної фотоемісії.

Основними методами вивчення локальної густини станів є спектроскопія м'якого рентгенівського випромінювання, оже-спектроскопія, а також аналіз основних рівнів у рентгенівській фотоелектронній спектроскопії. Інформація про локальну густину станів, що знаходиться вище рівня Фермі, може бути отримана при використанні методу спектроскопії утворення потенціалу під дією м'якого рентгенівського випромінювання [51, 62].

Для ідентифікації некристалічних структур використовується також дифракція рентгенівських променів [63], електронів чи нейтронів. Застосування цих методів до аморфних сплавів чи до кристалів дає суттєво різні результати, що дозволяє ідентифікувати некристалічний стан та отримати інформацію про його структуру. Існують методи, які використовують одночасно декілька типів випромінювання (рентгенівське, електронне, нейтронне, синхротронне), що надає, по-перше, можливість описувати кореляції у розташуванні атомів різних сортів, по-друге, значно збільшити точність розрахунків.

Останнім часом з'явилося чимало робіт, присвячених теоретичному та методологічному опису електронної структури та властивостей конденсованих середовищ, що пов'язано з прогресом у галузі обчислювальної фізики, можливістю кількісного аналізу фізичних параметрів складних систем [64].

Експериментальні дослідження свідчать про значну схожість функції радіального розподілу (ФРР) рідини та аморфної речовини. ФРР являє собою вагове число атомів у сферичній комірці радіусом  $r$  та товщиною, що дорівнює



одиниці. Так, для системи, що складається з атомів одного сорту, ФРР обчислюється за виразом [65]:  $W(r) = 4\pi r^2 \rho(r)$ , де  $r$  – відстань від фіксованого атома;  $\rho(r)$  – функція атомного розподілу чи парна функція атомного розподілу. Часто замість функції  $W(r)$  використовують зведену функцію радіального розподілу [56]  $G(r) = 4\pi r^2 (\rho(r) - \rho_0)$  чи функцію парного розподілу  $g(r) = \rho(r) / \rho_0(r)$ , де  $\rho_0(r)$  – середня атомна густина аморфного сплаву.

Для опису аморфних тіл, що складаються з атомів  $n$  різних елементів, ФРР набуває вигляду [66]:  $W(r) = 4\pi r^2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \omega_{ij} \rho_{ij}(r)$ , де  $\rho_{ij}(r)$  – парціальні функції атомного розподілу;  $\omega_{ij}$  – ваговий множник.

Структуру неупорядкованих систем, які знаходяться у термодинамічно рівноважному стані, можна дослідити, використовуючи функції розподілу в одно-, дво-, багаточастковому наближенні, тоді як для теоретичного аналізу структури нерівноважної системи поки що відсутні будь-які надійні системні підходи. До цього часу не існує загальної теорії електронних властивостей конденсованих середовищ, які складаються з атомних кластерів, хаотично розміщених у просторі. Тому проблема дослідження електронної структури неупорядкованих систем є достатньо складною [69–71].

Для атомної, молекулярної теорії та теорії конденсованих середовищ [64] застосовується опис електронних станів на принципах добре розвинутої теорії функції густини електронних станів. Формалізм цієї теорії дозволяє врахувати всі ефекти кореляції. Важливою перевагою цієї теорії є її універсальність.

Класичний метод молекулярної динаміки був розроблений у середині 50-х років ХХ століття. Суть його полягає у розрахунку за допомогою комп'ютерної техніки траєкторії руху частини, що моделює конкретний фізичний об'єкт [72]. Специфіка будь-якої системи виражається у формі потенціалу взаємодії сил між частинами. Розмір моделі визначається швидкістю та оперативною пам'яттю комп'ютера. У перших роботах моделі

були досить малі (біля 32 частинок) [73, 74]. Сьогодні вони можуть мати сотні тисяч та мільйони атомів. Що стосується потенціалів [75–77] між частинками, то проблема їх знаходження залишається актуальною до цього часу. Оскільки ці потенціали для реальних речовин або невідомі, або визначаються приблизно, то метод молекулярної динаміки дає приблизну модель речовини. Тому цей метод комбінується з розв'язуванням рівнянь квантової механіки – моделювання “з перших принципів”, або “*ab initio*” [78, 79]. Не дивлячись на великий розмір моделей, вдається розрахувати структурні та дифузні характеристики та густину електронних станів в аморфних матеріалах.

Дослідження молекулярно-динамічних моделей показало, що в аморфних тілах існують невеликі пори, аналогічні вакансіям. Наприклад, на моделі аморфного заліза було виявлено, що після обміну місцями з сусідніми атомами, пора радіусом 80 пм зберігає свої розміри. У цьому випадку вона здатна до нового обміну місцями, тобто є вакансією і при обміні місцями не зникає. Проте іноді після обміну місцями вакансії зникають. У роботах [80, 81] показано, як за допомогою комп'ютерного моделювання методом молекулярної динаміки були досліджені структурні зміни у 3-х вимірному тілі при переході його з аморфного стану в кристалічне. Для опису силової взаємодії між атомами використовувався модифікований потенціал Леонарда – Джонса. Результати показали, що при загартуванні зразка з метою збереження його аморфної структури на певній стадії був отриманий полікристал з двошарових комірок ГЦК та ГПУ, симетричної структури з комірок п'ятого порядку симетрії, що визначає властивості зразка.

Методом молекулярної динаміки досліджена [82] атомна структура сплаву  $Ni_{80}Zr_{20}$  під час переходу з кристалічного в аморфний стан. Була встановлена значна різниця у глибині та положеннях потенціальних ям, які приводять до аморфізації. Аналіз парціальних функцій радіального розподілу атомів виявив, що найближча міжатомна відстань для пар атомів Ni–Ni становить 0,24 нм, для атомів Ni–Zr – 0,26 нм, а для атомів Zr–Zr – 0,29 нм. Ці дані корелюють з результатами експериментів за рентгенівською та

нейтронною дифракцією, EXAFS-спектроскопії, за виключенням дещо заниженого значення відстані Zr–Zr. Хоча метод псевдопотенціалу дає непогане узгодження результатів для простих металів, для 4d-металів узгодження може носити лише якісний характер.

Для дослідження електронної структури аморфних сплавів типу Ni–Pd–P авторами [83] використовувався модифікований метод когерентного потенціалу з урахуванням хаосу. Важливою характеристикою електронного спектру  $N(E)$  була наявність головного піку, що формувався за рахунок 3d станів. Ширина цього піку становить 4 еВ, а рівень Фермі, розташований у області зменшення  $N(E)$ , значно вищий, ніж максимум головного піку.

Значного поширення набули енергодисперсійний метод та метод з використанням дифракції нейтронів високих енергій, які дозволяють розраховувати структурний фактор  $a_{ij}(s)$  до  $s_{\max} > 3$  нм [84, 85].

У роботі [86] розглядається можливість зв'язку нерівноважної функції розподілу аморфного тіла з рівноважними розв'язанням рівнянь Орнштейна-Церніке. У висновку зазначається, що метастабільний стан характеризується зміною структури другого піка, а саме – його розширенням, який у подальшому трансформується у розщеплення при переході у аморфний стан. Методом молекулярної динаміки були досліджені структурні особливості у системі твердих дисків та твердих сфер у перехідній області “кристалізація – плавлення” і виявлено, що розщеплення другого максимуму пов'язане зі структурним показником, який вказує на гексагональну упаковку.

### **1.3. Оптичні методи дослідження поверхневих властивостей**

Особливе місце у вивченні поверхневих властивостей структурно і хімічно неоднорідних об'єктів займають оптичні методи [87–89], які характеризуються безконтактністю і високою чутливістю [90–92]. До них належить спектроеліпсометричний метод Бітті – Кона, що дозволяє отримувати дисперсійні залежності оптичних параметрів досліджуваних зразків та пов'язати їх із фізичними властивостями аморфних сплавів [93–97].

Як відомо, еліпсометрія – це оптичний метод, який вимірює і інтерпретує зміни стану поляризованого світла при відбитті його від поверхні [90, 98, 99]. Перевагою даного методу є його безконтактність: він дозволяє неруйнівним чином досліджувати об'ємні матеріали та тонкі плівки, у реальному часі вимірювати та контролювати багат шарові плівкові структури, поверхні під час їх виготовлення [100–104].

Спектральна еліпсометрія (СЕ) відзначається високою чутливістю до поверхневих шарів, товщиною меншою за 1 нм [94]. СЕ дає змогу визначати товщину та оптичні параметри, встановлювати зв'язки між оптичними та фізичними характеристиками діелектриків, напівпровідників, металевих тонких плівок [105–110].

У рамках одношарової моделі функціональний зв'язок еліпсометричних параметрів з параметрами досліджуваної системи виражається рівнянням Друде [111]

$$\rho = \operatorname{tg} \psi e^{i\Delta} = \frac{(r_{01p} + r_{12p} e^{-2i\beta})(1 + r_{01s} r_{12s} e^{-2i\beta})}{(r_{01s} + r_{12s} e^{-2i\beta})(1 + r_{01p} r_{12p} e^{-2i\beta})}, \quad (1.1)$$

де  $r_{01p}$ ,  $r_{12p}$  – коефіцієнти відбивання Френеля для  $p$ -компоненти електричного поля, що відносяться до меж розділення повітряного середовища і плівки, плівки і підкладки відповідно;

$r_{01s}$ ,  $r_{12s}$  – коефіцієнти відбивання Френеля для  $s$ -компоненти електричного поля, що відносяться до меж розділення повітряного середовища і плівки, плівки і підкладки відповідно;

$\beta$  – фазова товщина плівки.

Коефіцієнти Френеля можна подати через значення комплексних показників заломлення середовищ і кутів падіння [111]

$$r_{01s} = \frac{N_0 \cos \varphi_0 - N_1 \cos \varphi_1}{N_0 \cos \varphi_0 + N_1 \cos \varphi_1},$$

$$r_{12s} = \frac{N_1 \cos \varphi_1 - N_2 \cos \varphi_2}{N_1 \cos \varphi_1 + N_2 \cos \varphi_2},$$

$$r_{01p} = \frac{N_1 \cos \varphi_0 - N_0 \cos \varphi_1}{N_1 \cos \varphi_0 + N_0 \cos \varphi_1},$$

$$r_{12p} = \frac{N_2 \cos \varphi_1 - N_1 \cos \varphi_2}{N_2 \cos \varphi_1 + N_1 \cos \varphi_2},$$

де  $\varphi_0$  – кут падіння світла на зразок;

$\varphi_{1,2}$  – комплексні кути падіння світла на межі розділення “оточуючого середовище – плівка” і “плівка – підкладка” відповідно.

Враховуючи, що вираз  $N = \sqrt{\varepsilon\mu}$  є комплексна величина, яка визначається як  $\sqrt{\varepsilon\mu} = n - ik$ , комплексні показники заломлення для оточуючого середовища, плівки і підкладки [90]

$$N_0 = n_0 - ik_0,$$

$$N_1 = n_1 - ik_1,$$

$$N_2 = n_2 - ik_2.$$

#### 1.4. Умови аморфізації твердого тіла

Аморфний стан є безумовно нерівноважним. Термодинамічно його можна охарактеризувати як стан, який не перебуває у локальному мінімумі вільної енергії і який, у порівнянні з переохолодженою системою, постійно релаксує. Проте час релаксації, на відміну від неаморфних нерівноважних систем, може бути дуже довгим, практично нескінченним. Перехід в аморфний стан – це явище, у значній мірі, кінетичне [112], яке виникає на перетині швидкості охолодження системи та часу структурної перебудови.

Методи виготовлення розупорядкованих металевих матеріалів можуть належати до однієї із трьох наступних груп: 1) швидке загартування розплаву

металу; 2) осадження металу із газової фази; 3) введення дефектів до металевого кристалу [67, 68]. Найбільш поширеним є методи гартування із металевого розплаву [47, 50, 113]. Для промислового виготовлення аморфних металів у вигляді порошку перспективним вважається кавітаційний метод.

При відцентровому гартуванні, гартуванні на диску, що обертається, (спінінгування розплаву) та прокочуванні розплаву між двома валками відбувається плавлення металу при електричному чи індукційному нагріванні; витискання розплаву із сопла під дією газу; затвердіння на охолоджуваній поверхні (на холодильнику). Швидкість охолодження залежить від товщини шару розплаву на холодильнику, характеристик холодильника та від властивостей самого розплаву (теплопровідності, теплоємності, в'язкості, густини). За різними оцінками критична швидкість охолодження розплаву складає  $\sim 10^5\text{--}10^6$  К/с.

При розпиленні висока швидкість охолодження ( $> 10^6$  К/с), що властива цій групі методів, дозволяє отримувати ряд аморфних металевих матеріалів, які неможливо виготовити гартуванням із розплаву.

За останні роки були розвинені методи твердофазної аморфізації, коли неупорядкований стан отримується безпосередньо з кристалічного. При цьому перехід від кристалічного стану до аморфного відбувається під впливом високого тиску [114, 115].

У процесі структурної релаксації здійснюються атомні переміщення, що призводить до змін: а) міжатомної відстані між найближчими сусідами; б) середньої міжатомної відстані; в) середнього хімічного порядку.

Аморфний стан у металевих системах займає проміжну позицію між рідиною та кристалічним станом речовини [46]. Незважаючи на різні способи отримання АМС, зазначимо, що практично всі вони мають однакові фізичні властивості, збігаються визначені експериментально у різних лабораторіях значення ентальпії кристалізації АМС, мають однакову залежність від хімічного складу температура кристалізації і максимальна швидкість охолодження. Вважається, що аморфні сплави успадковують дефектну

структуру рідкого розчину [116]. Додатковий об'єм рідини, у порівнянні з об'ємом твердого тіла, пояснюється наявністю мікропорожнин. Утворені пори із розмірами від 20 до 100 нм мають форму еліпса зі співвідношенням півосей від 1,13 до 1,15 та займають приблизно 1 % об'єму сплаву.

Таким чином, перехід в аморфний стан металевих систем можливий із твердого, рідинного та газоподібного станів, але механізми аморфізації за цих умов є різними. Однак загальним для них є те, що утворення аморфної фази відбувається лише тоді, коли вихідний стан речовини знаходиться далеко від рівноважного.

### **1.5. Зв'язок атомно-електронної та фазової структури з фізичними властивостями аморфних сплавів**

Підвищену міцність, температурну стабільність та пластичність у вихідному (швидкозагартованому) стані виявляють аморфні сплави на базі заліза, в яких міститься до 40 % Cr та Ni, до 35 % V, до 8 % Mo, а також різні сполучення C, P, Si. Введення нікелю сприяє більшій пластичності розчинів та комплексів типу  $Fe_3V$  [117]. Відмічається позитивний вплив [118] мікролегування домішками (0,5–2,0 ат. %) алюмінію та міді сплавів системи Fe–Ni–Cr–P–Si–V на їх механічні властивості та технологічність.

У роботі [119] доведено вплив концентрації рідкісноземельного компонента аморфних сплавів  $Al_{88}Ni_6Y_6$ ,  $Al_{88}Ni_{10}Y_2$  на еволюцію аморфної фази та параметри нанокристалічної структури, що утворюється під час кристалізації. Показано, що при збільшенні концентрації ітрію розміри нанокристалів збільшуються, а частина нанокристалічної складової структури зменшується.

Яцишин Б. П. проводив дослідження оптичних властивостей та особливостей температурної залежності електропровідності аморфних плівок “рідкісноземельний метал – перехідний метал – напівпровідник”  $\{(Y, La, Sc) - (Fe) - (Ge)\}$ , які були отримані методом узгодженого випаровування компонент і дискретного випаровування сплавів [120]. Було встановлено, що властивості та

характеристики аморфних тонких плівок перебувають у сильній кореляції з умовами їх отримання та складом (домішками) плівки. Загалом, при збільшенні концентрації металу у конденсаті провідність зростала, а зміна механізмів провідності проходила при більш низьких температурах. Вагомість впливу рідкісноземельних матеріалів на зміну механізмів провідності в аморфних конденсатах при заміщенні атомів заліза зростала в ряді Sc, Y, La, і, в основному, пов'язувалась зі швидшим збільшенням густини локалізованих станів та незначним збільшенням ширини забороненої зони матеріалу. Конденсатам із високими швидкостями росту, відповідав вищий початковий питомий електроопір та більші значення температурного коефіцієнту. Установлені зміни електропровідних характеристик пов'язуються з флуктуаціями ближнього порядку, які більш значні при концентраційних змінах, ніж при зміні умов нанесення плівок.

У дослідженнях Бетехтіна В. І. та ін. [121, 122] визначальна роль у процесах структурної релаксації АС надається вільному об'єму. Під час спіннігування розчину утворюються нанопорожнини ( $\sim 10\text{--}100$  нм), параметри яких (розміри та форма, концентрація) суттєво впливають на міцність, мікротвердість, температуру в'язкокрихкого переходу, закономірності кристалізації та ін. [123].

Об'ємні АМС – це багатокомпонентні сплави з низьким значенням критичної швидкості охолодження 1, ..., 500 К/с та, відповідно, великою критичною товщиною – до 40 мм. Вони були отримані в системах на базі Zr, Ti, Al, Mg, La та перехідних металів. Відомі об'ємні аморфні сплави товщиною до 10 мм на основі заліза, виготовлені з промислового ливарного чавуну з домішками бору [46].

Відомо, що фізичні властивості аморфного сплаву безпосередньо пояснюються його електронною структурою [124, 125]. Залежність між температурою кристалізації та густиною електронних станів на рівні Фермі описується критерієм Нагеля – Таука, проте використання цього критерію щодо металічних аморфних сплавів на основі перехідних металів залишається досить



дискусійним питанням. М. Бабіч та ін. дослідили зв'язок між електронною структурою та термічною стабільністю аморфних сплавів  $\text{Fe}_{85-x}\text{DM}_x\text{B}_{15}$  ( $\text{DM} = \text{Co}, \text{Cr}$ ) [124]. Розрахунки густини електронних станів були виконані методом когерентного потенціалу з урахуванням топологічного хаосу. Авторами розглядалися лише  $3d$  та  $4s$  стани Fe. У результаті досліджень встановлено, що домішки Co та Cr збільшують температурний інтервал стабільності аморфного стану. Проведені розрахунки густини електронних станів  $N(E)$  виявили, що рівень Фермі знаходиться у локальному максимумі кривої  $N(E)$ , а домішки Co та Cr зменшують значення  $N(E)$ .

Розробка методів аналізу фізичних властивостей і особливостей електронної структури аморфних сплавів дозволить розширити загальні знання про природу неупорядкованих металів та створювати для практичного використання нові аморфні сплави з покращеними характеристиками.

## **1.6. Вплив механічних напружень на фазові перетворення у твердому тілі**

При різних типах деформування (вигин, розтягування, гідростатичне стиснення), залежно від рівня напруження та системи сплавів, спостерігались як прискорення, так і затримка кристалізації [126, 127]. Холодна пластична деформація може призвести як до зміцнення аморфних сплавів, так і до зменшення їх міцності. Деформаційне зміцнення під час холодного волочіння спостерігав Такаяма [38], який пояснив його перетином ліній ковзання. В іншому випадку, при холодній прокатці, міцність аморфного сплаву  $\text{Pd}_{80}\text{Si}_{20}$  зменшувалась після обтискання. Майже на 30 % підвищувалась м'якість аморфного сплаву  $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$  при стисканні в умовах плоскої деформації. Як стверджували Кімура та Масумото, подібне розупорядкування неможливо пояснити, спираючись на механіку ідеальної пластичної течії. Воно може бути наслідком структурних змін усередині ліній ковзання [38].

Одним із методів впливу на структуру аморфних сплавів став метод інтенсивної пластичної деформації (ІПД) [128]. Метод полягає у значному

деформуванні матеріалу при відносно низьких температурах (меншими за 0,5 від температури плавлення) з великою гідростатичною компонентою, що заважає руйнуванню зразка. Як показали останні роботи, у процесі ПД утворюються нанокристали [129, 130]. Гундеровим Д. В. у результаті дослідження впливу ПД на аморфні сплави  $Ti_{50}Ni_{25}Cu_{25}$  та  $Nd-Fe-B$  було встановлено, що відбувається нанокристалізація у вихідній аморфній фазі [130, 131]. Він пояснює це явище збільшенням дифузійної активності, викликане підвищенням концентрації областей вільного об'єму. У своїй роботі науковець висуває припущення, що під час ПД у всьому об'ємі аморфного матеріалу відбуваються процеси релаксації шляхом формування областей з атомним порядком. Основний матеріал під час структурного аналізу сприймається за аморфний через те, що сучасні методи дослідження не розрізняють кристалічні утворення, менші за 2 нм.

У роботі [132] був досліджений вплив інтенсивної пластичної деформації в камері Бріджмена на магнітні властивості аморфних сплавів метал-металоїдів типу  $Ni_{44}Fe_{29}Co_{15}Si_2B_{10}$ ,  $Fe_{74}Si_{13}B_9Nb_3Cu_1$ ,  $Fe_{57.5}Ni_{25}B_{17.5}$ ,  $Fe_{49.5}Ni_{33}B_{17.5}$  і  $Fe_{70}Cr_{15}B_{15}$ , отриманих з розплаву. Встановлено, що намагніченість насичення значно змінювалась (збільшувалась або зменшувалась) в залежності від кількості феромагнітних і антиферомагнітних компонентів в сплаві. Дуже високі напруги зсуву викликають внутрішньофазові декомпозиції в аморфній матриці в нанорозмірних областях, збагачений або збіднений феромагнітними компонентами.

Абросимова Г. Є. та ін. досліджували механізми нанокристалізації у двокомпонентному сплаві  $Fe_{80}B_{20}$  під час інтенсивного кручення під тиском  $P = 4$  ГПа при температурі 293 та 473°K [112]. Було виявлено, що деформація за цих температур призводила до утворення кристалів  $\alpha-Fe$ , розміром 5,5–6 нм. Дослідження аморфних сплавів на базі заліза  $Fe-Si-B$  і  $Fe-B$ , що були деформовані при кімнатній та підвищених температурах (293 та 473, 673°K) показали, що у всіх сплавах була сформована нанокристалічна структура, проте розподіл їх у зразку залежав від складу сплаву [129]. Причому за кімнатної

температури локалізація кристалізаційного процесу відбувалася на лініях зсуву, для інших випадків характерним був рівномірний розподіл нанокристалів у аморфній матриці. Причини таких структурних перетворень автори пов'язують із можливим локальним підвищенням температури на лініях зсуву чи підвищенням у них дифузії тепломасоперенесення внаслідок зміни структури (збільшення концентрації вільного об'єму).

У роботі [133] автори виявили, що деформування (плющення між валами при відносному стисненні за товщиною на 10–38 %) аморфного сплаву  $\text{Pd}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{20}$  призводить до зміни структури аморфної фази, причому ці зміни більш виражені у поверхневих шарах зразків.

Головін Ю. І. та ін. [134] показали, що процес неперервного локального деформування аморфного сплаву  $\text{Pd}_{40}\text{Cu}_{30}\text{Ni}_{10}\text{P}_{20}$  супроводжується скачкоподібними модам пластичної течії як при навантаженні, так і при розвантаженні. Відмічається, що під час наноіндетування паладієвого аморфного сплаву з низькою швидкістю при кімнатній температурі утворюються нанокристали в зонах локалізованого зсуву.

У роботі [135] автори відмічають, що під час пластичної деформації, навпаки, можлива аморфізація матеріалу. Наприклад, при крученні під високим тиском за кімнатної температури Ni–Ti сплавів, залежно від початкового стану, формуються різні структури: аустенітна початкова структура призводить до нанокристалізації, мартенситна – до аморфної структури.

Неоднозначність інтерпретації експериментальних результатів, напевно, пов'язана із значною кількістю факторів. У кожному випадку це можуть бути різні механізми і параметри [112]: тип кристалізації (первинна, евтектична, поліморфна); співвідношення температури експерименту та характеристичних температур сплаву; перебіг процесів структурної релаксації; тип, ступінь та швидкість деформації та ін.

Таким чином, характер зміни властивостей аморфних сплавів (ефект анізотропії пластичної деформації в ізотропних аморфних сплавах [136], аморфізація або структурне впорядкування) залежно від зміни структури при

пластичній деформації не є встановленим фактом і вимагає подальшої експериментальної перевірки і підтвердження.

Не зважаючи на достатньо великий обсяг наявних експериментальних даних [137–140], чіткого уявлення про вплив механізму деформації на стабільність аморфного стану і процес кристалізації не існує.

Аналіз спектральних залежностей оптичної товщини поверхневого шару, оптичної провідності аморфного, деформованого і кристалічного сплавів дозволяє визначити вплив деформаційної дії на їх структуру.

### **1.7. Вплив потоків мікрочастинок на атомно-електронну структуру поверхневого шару**

АМС при температурі 291°К можуть зберігати свої фізичні властивості протягом від 10 тис. до 100 тис. років [141], але вони знаходяться у термодинамічному нерівноважному стані [142]. За певних зовнішніх умов відбувається перехід у кристалічну фазу, що супроводжується зміною фізичних властивостей [143, 144]. Зовнішні впливи, такі як опромінювання частинками різної природи [145, 146], кріообробка [147, 148] та інші змінюють структуру зразків і, як наслідок, – їх властивості. Так під час низькотемпературного відпалювання [149] об'єм стрічки АС залишається аморфним, а у поверхневих шарах відбулася часткова кристалізація з утворенням нанокристалів.

Атомні домішки, які можуть бути імплантовані у поверхневий шар при іонному бомбардуванні, дозволяють створювати унікальні аморфні поверхні. Можуть бути отримані матеріали, які складаються із повністю нерозчинних у рівноважних умовах матеріалів Cu–Mo, Cu–W [150]. Іонна імплантація (швидкість охолодження  $\sim 10^{14}$  К/с) – це метод модифікації поверхні, оскільки іон, що імплантується, втрачає свою енергію у результаті послідовних зіткнень з атомами у матеріалі мішені біля її поверхні.

Явище емісії поверхневих атомів твердого тіла під час бомбардування його поверхні потоком енергетичних часток відоме давно [151]. Уперше цей

ефект спостерігав Гроув у 1853 р. Протягом довгого часу цей процес вважався небажаним, оскільки призводив до руйнування катодів. Інтерес до вивчення цього явища обумовлений можливістю використання ефекту поверхневого видалення шару, що є актуальним для різних галузей науки і техніки. Серед сучасних методів обробки матеріалів квантова технологія займає визначне місце – керовані пучки часток дозволяють формувати поверхні заданого рельєфу (іонна обробка) [151–153].

Іон, що падає, потрапляє у приповерхневий шар мішені і стикається з її атомом, викликаючи його зміщення. Як правило, цей зміщений атом розпилюється не сам, викликає вторинні зміщення, стикаючись із сусідніми атомами. Ці вторинні зміщені атоми мають можливість розсіятися з поверхні з енергією, достатньою для подолання сил поверхневого зв'язку. Таким чином, розпилення є процесом багаторазових зіткнень, що містить каскад рухомих атомів мішені. Цей каскад може займати значну область усередині мішені, але для процесу розпилення викликають інтерес перетини атомів з поверхнею мішені [154].

Типова крива залежності коефіцієнта розпилення  $S$  від енергії частки  $E$ , що падає на мішень, утворюється при бомбардуванні іонами аргону зразка із міді [151]. Спочатку коефіцієнт розпилення збільшується із зростанням енергії іона, а потім зростання  $S$  сповільнюється. В області 10–100 кеВ  $S$  приблизно постійний і при подальшому зростанні енергії  $S$  починає зменшуватися.

Теоретичні та експериментальні дослідження багатьох авторів показали, що енергія іонів пучка не повинна перевищувати 500 еВ, оскільки при вищих енергіях спостерігається процес розігрівання деталі і появи радіаційних дефектів у поверхневому шарі.

Зміну мікрорельєфу поверхні називають іонним поліруванням. Виявилось, що під дією іонного бомбардування шорсткість шліфованої поверхні знижується. Проте, після досягнення певного значення, стабілізується, і подальша обробка не дає істотних змін якості поверхні. Отримати поверхню з параметрами полірованої шляхом бомбардування шліфованої не вдається.

Видалення дефектного шару методом іонної обробки дозволяє отримувати поверхні, наближені за складом, структурою і властивостями до матеріалу об'єму. Іонне бомбардування полірованих поверхонь скла з середньою висотою мікронерівностей 5–10 нм, при видаленні поверхневого шару до 20 мкм, не призвело до зростання висоти мікронерівностей [151, 152, 154].

У той же час іонне бомбардування створює у поверхневому шарі так званий “змінений” шар. Для різних матеріалів можна підібрати такий режим обробки, при якому глибина зміненого шару буде мінімальною. Створення таких практично бездефектних поверхонь потрібне при виготовленні елементів силової оптики, інтегральної оптики, при дослідженні поверхонь твердих тіл оптичними методами і для цілого ряду інших застосувань.

Бомбардування поверхні твердого тіла іонами може супроводжуватися дисоціацією хімічних сполук. Порівняно нестійкі оксиди в умовах бомбардування втрачають кисень. При обробці скла із вмістом свинцю [154] у поверхневому шарі відбувається дисоціація оксиду свинцю, що призводить до появи електричної провідності скла, підвищення показника заломлення з 1,48 до 1,73.

Застосовуються потужні іонні пучки зі щільністю потоку енергії від 1 до 100 Дж·см<sup>-2</sup>·имп<sup>-1</sup> (сотні кеВ наносекундної і мікросекундної тривалості) [155]. Іонні пучки здатні створити у приповерхневих шарах металів надшвидкий нагрів і надшвидке охолодження ( $\Delta T/\Delta t \sim 10^8\text{--}10^{11}$  К/с). Градієнт температур при цьому на поверхні і в приповерхневих шарах мішені може складати 10<sup>9</sup> К/м. При мінімальному тепловідводі це призводить до унікальних змін структури і властивостей оброблюваних матеріалів. Так, наприклад, за допомогою створеної в Японії технології ІВЕ (*Ion Beam Evaporation*) можна формувати аморфні і кристалічні шари із заданою структурою. Потужні іонні пучки здатні змінювати трибологічні характеристики матеріалів.

Після тривалого опромінення низькоенергетичними нейтронами (енергія  $\sim 1$  меВ, потік  $\sim 7 \cdot 10^{11}$  нейтронів/(см<sup>2</sup>·с), час  $\sim 12$  годин) аморфного сплаву

$\text{Fe}_{70}\text{Cr}_{15}\text{B}_{15}$  зменшилися показники заломлення  $n$  та поглинання  $k$ . Спектральні залежності дійсної  $\varepsilon_1$  та уявної  $\varepsilon_2$  частин комплексної діелектричної проникності стали відмінними від друдеподібних [156]. Зміна оптичних властивостей у цьому випадку пояснюється релаксацією (зменшенням внутрішніх напружень). Відомі наукові результати [157], які вказують на те, що оптичні властивості поверхні після експонування іонами змінюються за рахунок зміни її електронної структури.

Поверхня мішені після іонного бомбардування змінює як свою структуру, так і склад. Іонне бомбардування може призводити до розупорядкування поверхневого шару шляхом його аморфізації.

### **Висновки до розділу 1**

1. Аморфні тіла за рахунок поєднання в них унікальних фізико-механічних властивостей є перспективними матеріалами для використання у сучасних технологіях. Комплекс їх властивостей безпосередньо пов'язаний з атомно-електронною структурою зразків, проте не існує єдиної моделі, яка б дозволила повністю описати їх структуру та властивості. Оптичні методи є високочутливими та безконтактними методами контролю та дослідження поверхні, що дозволить поєднати складну атомно-електронну структуру АМС з їх властивостями.
2. При використанні деталей, виготовлених з АМС, відбувається їх деформація. Нині недостатньо вивчено вплив деформації на стабільність сплавів. У даній роботі будуть проведені дослідження, які дозволять розширити уявлення про процеси аморфізації та кристалізації у поверхневих шарах АМС, що відбуваються після пластичної деформації.
3. Стан якості поверхні відіграє значну роль під час інтерпретації результатів дослідження поверхневих явищ. Вивчення впливу бомбардування АМС низькоенергетичними іонами як методу очищення поверхні, надасть можливість проаналізувати якість поверхні та поверхневі явища після такої обробки.

4. Визначення взаємозв'язку температури кристалізації та оптичних характеристик в сплавах, до яких введенні легуючі елементи, розширить уявлення про термічну стабільність та структурну релаксацію АМС.



## РОЗДІЛ 2

### МЕТОДОЛОГІЯ ТА МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

#### 2.1. Зразки та обладнання для дослідження аморфних сплавів

У роботі досліджувалися такі зразки аморфних сплавів:  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$ ,  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{50}\text{B}_{10}$ ,  $\text{Ni}_{85}\text{C}_{15}$ ,  $\text{Fe}_{80}\text{DM}_5\text{B}_{15}$  (DM = Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni),  $\text{Fe}_{78-x}\text{Ni}_x\text{Si}_9\text{B}_{13}$  ( $x = 0, 1, 4, 8, 16, 21$  at. %).

Зразки  $\text{Ni}_{85}\text{C}_{15}$  виготовлені методом плазмового напилення, зразки  $\text{Fe}_{78-x}\text{Ni}_x\text{Si}_9\text{B}_{13}$ ,  $\text{Fe}_{80}\text{DM}_5\text{B}_{15}$ ,  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$ ,  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{50}\text{B}_{10}$  – методом спінінгування розплаву (надшвидке гартування) із швидкістю охолодження  $V = 10^6$  K/с. Останній метод отримання АМС характеризується різним станом боків стрічки: контактної з диском (внутрішньої) – тією, що контактувала з охолоджувачем у процесі виготовлення, та безконтактною (зовнішньою) – тією, що залишалася вільною у процесі гартування розплаву. Контроль ступеня аморфності зразків здійснювався на дифрактометрі ДРОН-3.

Для отримання дзеркальної поверхні зразків аморфного сплаву застосовувалося механічне полірування з використанням пасти АСМ 1/0 НВМ ГОСТ 25593-83, яку рекомендовано використовувати для полірування і доводки зразків до  $R_a = 20\text{--}250$  нм [158]. Оптичні вимірювання виконувалися (якщо не вимагали спеціальні умови досліджень) тільки на тій поверхні зразка, яка не контактувала у процесі виготовлення з охолоджувальним диском.

Багатокомпонентні сплави були представлені у вигляді стрічок, товщиною 40 мкм та шириною 2 см. Ширина стрічок з  $\text{Fe}_{80}\text{DM}_5\text{B}_{15}$  дорівнювала 1–2 мм. Для збільшення площі відбивальної поверхні зразків стрічки однакового сплаву довжиною 2 см щільно розміщувалися на залізній підкладці шириною 1–2 см за допомогою контактної спаювання.

Структурна релаксація і кристалізація аморфних сплавів досягалися ізотермічним відпалюванням у вакуумі,  $p \approx 1,33 \cdot 10^{-4}$  Па. Після відпалювання зразки додатково полірувалися для видалення забруднень і порушеного поверхневого шару, які утворилися при високотемпературному відпалюванні.

Пластична деформація зразків  $\text{Ni}_{85}\text{C}_{15}$  здійснювалась шляхом холодного плющення їх між двома валами при відносному стисненні за товщиною на 20–30 %.

Температура кристалізації, що вимірювалася методом дилатометрії, для аморфних сплавів  $\text{Fe}_{78-x}\text{Ni}_x\text{Si}_9\text{B}_{13}$ ,  $\text{Fe}_{80}\text{DM}_5\text{B}_{15}$  була взята за паспортними даними зразків.

Шорсткість поверхні, оксиди і забруднення впливають на отримані еліпсометричним методом дисперсійні залежності оптичних характеристик. Для очищення поверхні зразків використовувалося також розпилювання поверхневого шару іонами інертних газів. Бомбардуючі іони починають розпилювати поверхню металу, коли їх кінетична енергія перевищує деяке порогове значення ( $\approx 20\text{--}50$  еВ). Іони з більшою енергією модифікують поверхневий шар (імплантація іонів у глиб зразка, порушення ближнього порядку в атомній структурі, зміна компонентного складу сплавів). Найбільш оптимальним методом очищення поверхні для оптичних вимірювань є бомбардування іонами інертного газу в аномально жевріючому розряді. Зразки для виконаних у роботі досліджень бомбардувалися іонами спектрально чистого аргону, з енергією декілька 10–20 еВ. Використовувалися такі режими: *A* – час бомбардування 1 хв; *B* – 3 хв; *C* – 5 хв.

Оптичні константи для вихідних сплавів були виміряні спектроеліпсометричним методом Бітті – Кона. У спектральному інтервалі 0,50–5,0 еВ використовувалося обладнання, виготовлене на основі подвійного монохроматора ДМР–4 зі змінними кварцовими та скляними призми; в області 0,12–0,60 еВ – зібране на основі інфрачервоного спектрометра зі змінними призми із скла Ф–І, LiF, NaCl.

В якості джерела світла у першому устаткуванні були використані галогенова лампа КИМ–100 та дейтерієво-неонова газорозрядна лампа ДНУ–170, що живилися стабілізованим джерелом світла. В якості поляризатора та аналізатора були застосовані поляризаційні призми Глана, приймачів випромінювання – фотоелектронні помножувачі ФЭУ–39А, ФЭУ–62, фотоопір

ФМ–3А, кожний з яких відповідно використовувався в області найбільшої спектральної чутливості: 240–600; 550–1000; 1200–2500 нм.

Джерелом світла в другому устаткуванні був сіліт, що живився джерелом напруги, який входив до складу спектрометра ИКС–12. В якості поляризаторів в цьому обладнанні були використані ґратки-поляризатори на поліетиленовій та фторопластових підкладках з числом штрихів 1200 та 2400 на 1 мм відповідно.

У спектральному інтервалі 0,50–5,0 еВ вимірювання були проведені в атмосфері аргону відразу після іонного бомбардування зразків; в діапазоні 0,12–0,60 еВ вимірювання були виконані в повітрі. Результати оптичних вимірювань наведені в таблицях А.1–А.14.

Помилки спектроеліпсометричних вимірювань обумовлені групою факторів, пов'язаних із конструкцією устаткування в цілому та окремих його частин, а також з якістю досліджуваної поверхні. З урахування усіх груп помилок похибка визначення оптичних констант в експерименті для першого устаткування складала не більше 3 %, для другого – не більше 10 %.

## **2.2. Обґрунтування методу розв'язування оберненої задачі еліпсометрії**

Під час еліпсометричних досліджень розрізняють пряму і обернену задачі еліпсометрії. Пряма задача полягає у виявленні вихідних даних за відомими вхідними параметрами. Суть оберненої задачі зводиться до відновлення вхідних параметрів, які описують оптичну систему, за відомими вихідними даними. Перша задача достатньо проста і не складає труднощів у своїй реалізації. Друга задача належить до класу некоректно поставлених, що і є її математичною особливістю [159]. Так, при вивченні абсолютно однакових шарів, різні дослідники отримують результати, які можуть відрізнятися один від одного на 5–50 % [160]. Ця ситуація пояснюється тим, що при визначенні оптичних характеристик тонкоплівкових систем з'являється необхідність у розв'язанні оберненої задачі еліпсометрії, а також некоректною інтерпретацією

отриманих результатів.

Поняття коректної і некоректної постановки задачі було використане у математичній фізиці Ж. Адамаром. Відповідно до цього, задача  $z = R(u)$  називається коректно поставленою, якщо вона задовольняє три умови [161]:

- при будь-якому  $u \in U$  її розв'язок існує;
- розв'язок один при кожному  $u \in U$ ;
- розв'язок стійкий при малих варіаціях  $u$ , тобто достатньо малі зміни величини  $u$  відповідають скільки завгодно малій зміні величини  $z$ .

Якщо задача не задовольняє хоч б однієї з вказаних вище умов, то вона називається некоректно поставленою.

Обернена задача еліпсометрії (ОЗЕ) полягає у визначенні невідомих параметрів ( $n$  – показника заломлення,  $k$  – показника поглинання,  $d$  – товщини плівки) досліджуваного об'єкту за вимірними значеннями еліпсометричних кутів  $\psi$  і  $\Delta$ . Труднощі, які виникають при практичній реалізації ОЗЕ, можна пояснити невідповідністю між реальною відбивальною системою і математичною моделлю, яка описує цю систему, а також наявністю похибок експериментальних даних [162].

До цього часу не існує універсальної і надійної методики розв'язування ОЗЕ. По-перше, на відміну від прямої задачі, навіть для простих відбивальних систем, вона не має аналітичного розв'язку і вимагає використання різних чисельних методів оптимізації, по-друге, якщо невідомих більше двох, ОЗЕ стає погано обумовленою. Тому, у зв'язку з неоднозначністю розв'язування оберненої задачі, необхідна апіорна інформація про припустиму область значень параметрів, яка б дозволяла зменшити область можливих розв'язків [163, 164].

Вирішення такого роду завдань стимулює розвиток нових підходів і методик. Роботи у цьому напрямку, як правило, поділяються за застосованими моделями шару і використаними для розв'язання оберненої задачі математичними методами.

ОЗЕ базується на основному рівнянні еліпсометрії

$$\rho = \frac{R_p}{R_s} = \operatorname{tg} \psi e^{i\Delta}, \quad (2.1)$$

де  $R_p$ ,  $R_s$  – комплексні коефіцієнти відбиття  $p$ -,  $s$ -компонент поляризованого світла відповідно;

$\psi$  – азимут відновленої лінійної поляризації;

$\Delta$  – зсув фаз між ортогональними компонентами вектора поляризації.

Через нелінійність та трансцендентність рівняння (2.1) його аналітичний розв’язок можливий лише у випадках таких моделей: чистій поверхні, тобто для моделі “середовище – підкладка” з відомим комплексним показником заломлення однієї з фаз, і, відповідно, невідомим комплексним показником заломлення другої; а також для моделі “середовище – плівка – підкладка” з відомими комплексними показниками заломлення усіх шарів і невідомою товщиною плівки.

Методи розв’язування ОЗЕ поділяються на багатокутові та імерсійні (рис. 2.1). Перші дозволяють виконувати вимірювання для товстих плівок в одному середовищі, але при різних кутах падіння світла. Так, у роботі [165] були продемонстровані результати еліпсометричних досліджень релаксаційних змін оптичних констант та величини неоднорідності тонких плівок склоподібного  $\text{As}_2\text{S}_3$ , товщиною  $\sim 2000$  нм. Слід зазначити, що для плівок товщиною меншою 30 нм багатокутові методи можуть виявитися зовсім не придатними. Імерсійні методи добре працюють з тонкими плівками при одному куті падіння, але у різних імерсійних середовищах. Проте наявність різних середовищ, які у свою чергу взаємодіють із зразком, порушує безконтактність та інформативність еліпсометричного методу. Точність багатокутових методів вимірювання суттєво нижча від імерсійних [166].

Залежно від того, чи розв’язується ОЗЕ, ґрунтуючись безпосередньо на точному представленні рівняння (2.1), чи на наближеному, існують різні методики (рис. 2.1).

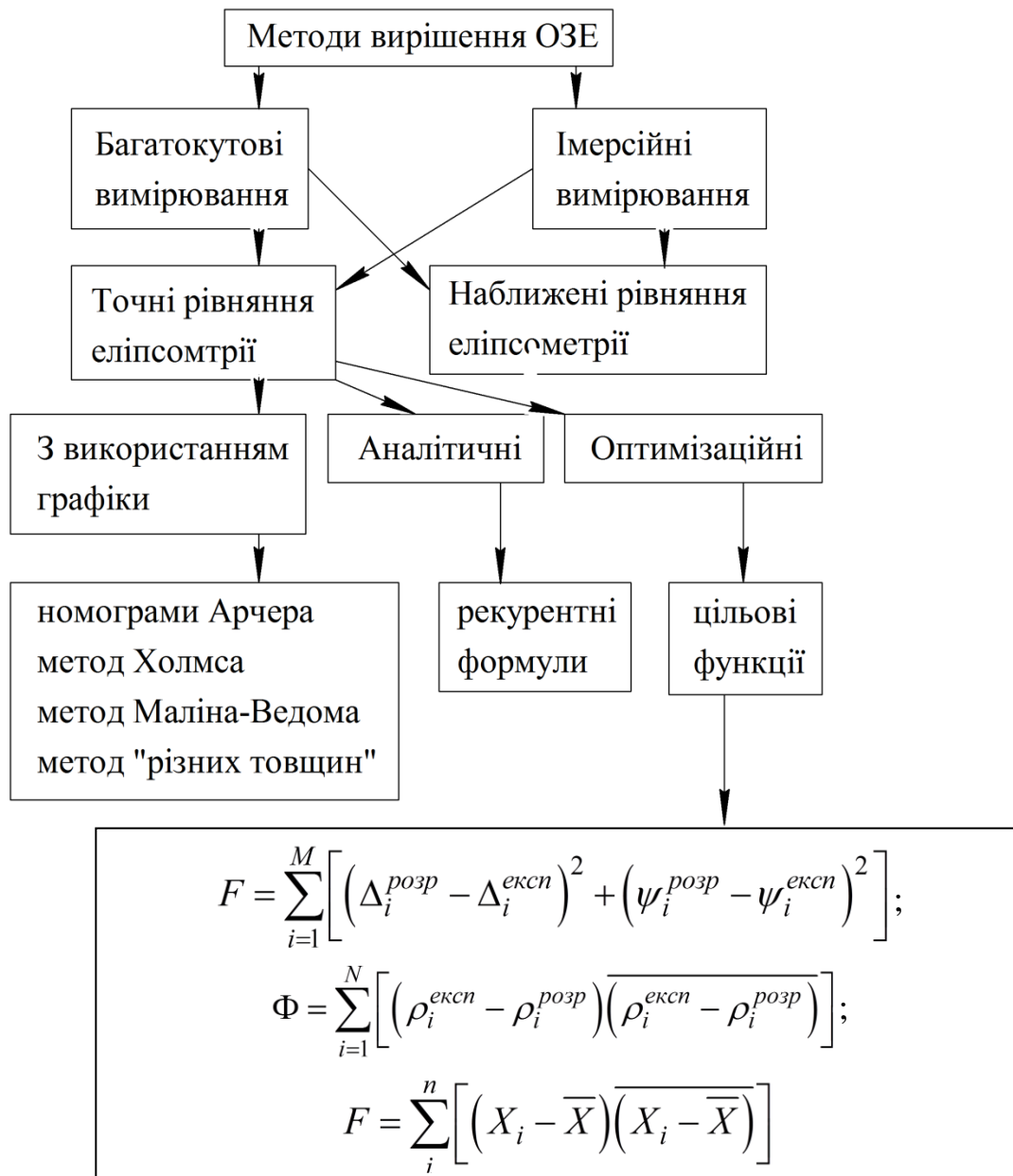


Рис. 2.1. Методи розв'язування оберненої задачі еліпсометрії

До групи наближених методів належать методи, які базуються на спрощеному представленні основного рівняння еліпсометрії (2.1). Так, наприклад, для одношарової моделі, коли товщина плівки набагато менша від довжини хвилі світла, що падає ( $d \ll \lambda$ ), використовується наближення Люсі, засноване на розкладанні  $e^{-2i\delta}$  у ряд за степенями  $d/\lambda$  і нехтуванням членами розкладання вищими першого степеня. Цей метод можливо застосовувати для знаходження значення комплексного показника заломлення поглинаючої плівки  $N_1$ , нанесеної на відому підкладку. Проте унаслідок достатньо малих значень товщини плівки доцільно проводити імерсійні вимірювання для розділення внесків, що дають показник заломлення  $n_1$  і товщина плівки  $d$ .

Використовуючи наближені і багатокутові методи, можна також визначити показник заломлення підкладки  $N_2$ , покритої тонким шаром.

Наближені методи можуть успішно застосовуватися для опису властивостей неоднорідних шарів [167]. У даній ситуації вони дозволяють досліджувати перехідні шари; контролювати якість обробки оптичних деталей безпосередньо у технологічному процесі або при скануванні поверхні; давати швидку попередню оцінку форми профілю; показника заломлення і його параметрів; визначати “грубе” значення шуканих параметрів з подальшим уточненням їх при вирішенні складніших задач еліпсометрії.

Застосування наближених методів розв’язування ОЗЕ є результатом спроб спрощення процесу отримання параметрів оптичної системи. Завдяки розвитку можливостей ЕОМ актуальність таких методик знижується.

До групи методів, які базуються на точному представленні рівняння (2.1), можна віднести, наприклад, імерсійний метод “різної товщини” [90], який дозволяє визначити оптичні характеристики підкладки та використовується у випадку оптично прозорих плівок, що обмежує його можливості. До недоліків цього методу слід віднести порушення безконтактності, громіздкість, неминучість похибок, пов’язаних із наявністю графічної побудови.

Для визначення товщини  $d$  і показника заломлення прозорої плівки  $n_1$  на відомій підкладці існує метод номограм Р. Арчера [168, 169], заснований на

рівнянні Друде (1.1). Вагомим недоліком даної методики є те, що вона може застосовуватися тільки для роботи з постійним зразком, оскільки кожен новий вимагає проведення окремих серій вимірювань і побудови своєї діаграми, що безпосередньо обумовлює наявність похибок, спричинених графічним представленням даних; а також використовується тільки для товстих оптично прозорих плівок (50–100 нм).

Для визначення товщини прозорої плівки на відомій підкладці використовується метод Д. Холмса [108, 170, 171]. Суть методу полягає у тому, що у разі прозорої плівки модуль експоненти у правій частині рівняння (1.1) завжди дорівнює одиниці і рівняння Друде легко подати у вигляді квадратного щодо невідомого  $X = e^{-2i\beta}$ .

Метод Маліна-Ведама, на відміну від попереднього, дозволяє визначити у межах одношарової моделі оптичні характеристики поглинаючих плівок [90]. На підставі квадратного представлення рівняння Друде (як і у попередньому випадку) можна обчислити значення комплексного показника заломлення плівки  $N_1$  і відповідно її товщини  $d$ . Але для виконання розрахунків, у зв'язку з тим, що число невідомих параметрів плівки більше, ніж число значень еліпсометричних величин, необхідно виконати багатокутові або імерсійні вимірювання.

Ефективність розглянутих методів, які вимагають графічної інтерпретації результатів, виявляється лише при масовому контролі однотипних зразків і незмінних умовах вимірювання.

Обернена задача еліпсометрії може бути розв'язана за допомогою аналітичного методу, заснованого на поняттях адмітансів [99]. Цей метод дозволяє знайти товщину  $d$  і комплексний показник заломлення  $N_1$  плівки, якщо відома підкладка або визначити значення комплексного показника заломлення підкладки  $N_2$  за умов відомої плівки. Метод рекурентних формул вимагає певного підбору і узгодження між кутами падіння світла і показниками заломлення імерсійних середовищ. У разі потреби визначення оптичних характеристик як плівки, так і підкладки, для використання даних формул слід



виконати еліпсометричне вимірювання у двох різних зовнішніх середовищах і в кожному з них – при двох кутах падіння [90].

Можливість аналітичного розв'язування оберненої задачі еліпсометрії для одношарової системи, що виникає при варіації параметрів зовнішнього середовища, представлена в роботах [172, 173]. Із сукупності можливих розв'язків вибирається такий набір значень  $(N_1, N_2, d)$ , що задовольняє формальним вимогам  $\text{Re}(N) > 0$  і  $\text{Im}(N) \leq 0$ . Проте отримання однозначного результату не завжди є можливим. Причиною може бути вплив обчислювальної похибки на точність визначення малого параметра, що найчастіше виявляється при малій товщині поверхневого шару. Ситуація, що склалася, вимагає наявності додаткової апріорної інформації про досліджувану оптичну систему або введення додаткового критерію відбору розв'язку. Таким критерієм може бути або мінімальне відхилення значень товщини, отриманої для двох кутів заломлення [172], або умова:  $\min|\text{Im}(d)|$  [173]. Запропонований метод може бути також реалізований і у разі багатошарових покриттів. Тоді обернена задача на кожному етапі розв'язується у межах одношарової моделі. Проте збільшення числа невідомих параметрів оптичної системи вимагає збільшення числа імерсійних вимірювань.

Автором роботи [174] визначені обвідні функції спектрів відбивання і пропускання багатошарових структур, що дозволили знайти аналітичні вирази для фазових товщин двох довільних шарів, які забезпечують нульове значення енергетичного коефіцієнта відбивання від всієї прозорої структури.

Поняття адмітансів використовується також для визначення оптичних характеристик плівки  $N=n-ik$ , нанесеної на багатошарову підкладку [175]. При цьому сумарні оптичні характеристики багатошарової підкладки замінюються еквівалентними значеннями  $N_{екв}=n_{екв}-ik_{екв}$ , залежними від  $i$ -го кута падіння світла і підставляються у рівняння для точного розв'язування. Еквівалентні значення підкладки визначаються методом пошуку у результаті мінімізації цільової функції  $\Phi$ , яка є вимогою незалежності параметрів плівки  $n, k, d$  і кутів падіння  $\varphi_i$  з точністю  $\delta d, \delta n, \delta k$

$$\Phi = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^m \sqrt{\left(\frac{d_i - d_{i+1}}{\delta d}\right)^2 + \left(\frac{n_i - n_{i+1}}{\delta n}\right)^2 + \left(\frac{k_i - k_{i+1}}{\delta k}\right)^2},$$

де  $m$  – кількість кутів падіння з відповідними  $n_{i \text{ екв}}$  і  $ik_{i \text{ екв}}$ .

Набутих еквівалентних значень підкладки  $N_{\text{екв}} = n_{\text{екв}} - ik_{\text{екв}}$  для даного кута падіння  $\varphi_i$  за умови  $\Phi \leq 1$  у поєднанні з  $\Delta_i$ ,  $\psi_i$  дають можливість визначити оптичні характеристики плівки ( $n$ ,  $k$ ,  $d$ ).

Для опису властивостей неоднорідних структур можна умовно їх розділити на багатошарові шари з постійними властивостями. Проте комп'ютерні експерименти для такої моделі, реалізовані на базі адмітансів, показали, що розв'язок цієї задачі не є стійким [162]. Близький до правильного розв'язок можна отримати тільки для одного шару. Це є наслідком рекурентного характеру обчислень. Помилки при обчисленні адмітансів накопичуються при переході від одного шару до іншого. Розглянутий вище метод є наслідком об'єднання аналітичних і оптимізаційних методів розв'язування ОЗЕ.

Для знаходження оптичних параметрів одношарової системи, використовуючи коефіцієнти Френеля при варіації товщини плівки  $d_i$  і кута падіння світла  $\varphi$ , можна отримати систему рівнянь з невідомою діелектричною проникністю плівки  $\varepsilon_1$  і підкладки  $\varepsilon_2$  [173, 176]. Отримана система не може бути розв'язана аналітично щодо цих невідомих – необхідно використовувати чисельні методи. Це може бути – ітераційний, Ньютонівський ітераційний метод, а також їх комбінації з метою підвищення точності розрахунків і швидкодії алгоритму. Метод Ньютон – Рафсона забезпечує точність при виборі початкового наближення, достатнього близького до шуканого розв'язку, але при вирішенні практичних завдань це вдається зробити не завжди [177].

Особливу підгрупу методів складають оптимізаційні методи [159, 178]. Метод підбору розв'язку некоректно поставлених задач полягає у тому, що для елементів  $z$  деякого підкласу можливих розв'язків, що заздалегідь задається

$M(M \subset F)$ , обчислюється оператор  $Az$ , тобто розв'язується пряма задача. Як наближений розв'язок приймається такий елемент  $z_0$  із множини  $M$ , на якому відхил  $\rho_U(Az, u)$  досягає мінімуму [161]. У даному випадку розв'язок ОЗЕ знаходиться як результат мінімізації деякої цільової функції (вибір виду якої є неоднозначним) у багатовимірному параметричному просторі, де величини, що підлягають визначенню, є безпосередньо незалежними змінними.

Алгоритм розв'язування оберненої задачі еліпсометрії, який дозволяє визначити параметри оптичної системи (такі як показники заломлення поверхневого шару  $n_1$  і підкладки  $n_2$ ; показники поглинання поверхневого шару  $k_1$  і підкладки  $k_2$ ; оптичну товщину  $d$  поверхневого шару), полягає у пошуку такого елемента, із множини заздалегідь обмеженого підкласу можливих розв'язків, на якому відхил цільової функції  $F$  досягає свого мінімального значення [99]

$$F = \sum_{i=1}^M \left[ \left( \Delta_i^{розр} - \Delta_i^{експ} \right)^2 + \left( \psi_i^{розр} - \psi_i^{експ} \right)^2 \right] \rightarrow \min, \quad (2.2)$$

де  $\Delta^{розр}$ ,  $\psi^{розр}$  – розраховані на основі заданої моделі еліпсометричні параметри;  
 $\Delta^{експ}$ ,  $\psi^{експ}$  – виміряні експериментально еліпсометричні параметри;  
 $i$  – кількість імерсійних або багатокутових вимірювань.

Це найбільш поширена цільова функція. Для визначення експериментальних значень поляризаційних кутів  $\Delta^{експ}$  і  $\psi^{експ}$  використовується спекроеліпсометричний метод Бітті – Кона, який належить до ненульових методів і базується на аналізі інтенсивності світла, що пройшло через систему “поляризатор – зразок – аналізатор” (рис. 2.2). У разі вимірювань при положеннях аналізатора  $\gamma_A = 0^\circ; 45^\circ; 90^\circ$  і при фіксованому положенні поляризатора  $\gamma_P = 45^\circ$  маємо три значення інтенсивності світла  $I_0, I_{45}, I_{90}$ , які подаються таким чином [67]:

$$I_0 = (I_0^1 R \cos^2 \psi) / 2,$$

$$I_{45} = (I_0^1 R (1 + \sin 2\psi \cos \Delta)) / 4,$$

$$I_{90} = (I_0^1 R \sin^2 \psi) / 2,$$

де  $I_0^1$  – інтенсивність світла після проходження через монохроматор;

$R = (r_p^2 + r_s^2) / 2$ ,  $r_p, r_s$  – френелівські коефіцієнти відбивання для межі поділу “повітря – зразок”.

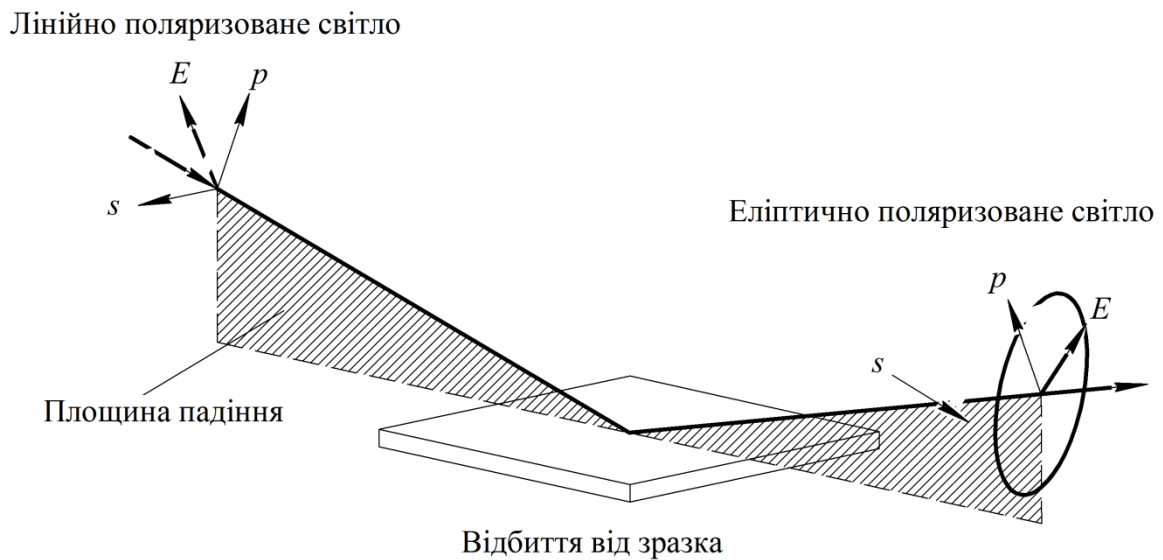


Рис. 2.2. Геометрія еліпсометричних вимірювань [105]

Звідки можна отримати формули для визначення азимута відновленої лінійної поляризації

$$\psi^{експ} = \arctg \left( \sqrt{\frac{I_{90}}{I_0}} \right)$$

і зсув фаз між  $p$ -,  $s$ -компонентами еліптично поляризованого світла

$$\Delta^{експ} = \arccos \left( \frac{2I_{45} - I_0 - I_{90}}{2\sqrt{I_0 I_{90}}} \right).$$

Розрахункові значення поляризаційних кутів  $\Delta^{розр}$ ,  $\psi^{розр}$  обчислюються із співвідношень

$$\Delta^{розр} = \arctg\left(\frac{\text{Im } \rho}{\text{Re } \rho}\right); \psi^{розр} = \arctg\left(\frac{\text{Re } \rho}{\cos \Delta}\right),$$

де  $\rho$  – відносний коефіцієнт відбиття, що описується основним рівнянням еліпсометрії.

Також може бути використана така цільова функція [111]

$$\Phi = \sum_{i=1}^N \left[ \left( \rho_i^{експ} - \rho_i^{розр} \right) \overline{\left( \rho_i^{експ} - \rho_i^{розр} \right)} \right], \quad (2.3)$$

де  $\rho_i^{експ} = \text{tg } \psi_i^{експ} e^{i\Delta_i^{експ}}$ ,  $\rho_i^{розр} = \text{tg } \psi_i^{розр} e^{i\Delta_i^{розр}}$ .

Обернену задачу, як правило, розв'язують методом покрокової мінімізації цільової функції. Математичні труднощі полягають у виборі нульового наближення досить близько до реального розв'язку, фільтрації помилкових мінімумів функціонала, а також у виборі відповідного критерію зупинки при наближенні до абсолютного мінімуму [18].

Важливою проблемою при розв'язуванні ОЗЕ є відповідність між точністю математичної моделі і точністю експериментальних даних  $\delta$ . Існує думка, що вибір чисельного методу оптимізації і прагнення максимально точно знайти мінімум цільової функції  $F$  не є основними критеріями [178]. Якщо  $F_{\min} \ll \delta$ , то точність експерименту недостатня для обраної математичної моделі. Якщо  $F_{\min} \gg \delta$ , то математична модель є грубою по відношенню до експериментальних даних. Модель узгоджується за точністю з експериментальними даними у випадку:  $F_{\min} \approx \delta$ . Питання оптимізації експериментальних умов з метою підвищення точності вимірювань, а, отже, і результатів обчислення, розглянуті в [92, 120].

Для отримання коректної математичної моделі згідно Тихонову А.Н. [161] необхідна апіорна або додаткова інформація. Так, наприклад, при побудові цільової функції  $F$  комплексно використовувалися результати еліпсометричних і фотометричних вимірювань [166]:

$$F = \sum_{i=1}^N \left[ \left( \Delta_i^{розр} - \Delta_i^{експ} \right)^2 + \left( \psi_i^{розр} - \psi_i^{експ} \right)^2 \right] + 2n \left( T^{розр} - T^{експ} \right)^2,$$

де  $T^{розр}$ ,  $T^{експ}$  – значення розрахованих і вимірених коефіцієнтів проникливості відповідно;

$2n$  – вагова добавка.

У роботі [169] запропоновано два обчислювальні методи для розв'язання ОЗЕ двошарової моделі відбивальної поверхні: графічний метод номограм та ітераційні розрахунки під час виконання мінімізації функції помилки методом Хук – Джеваса:

$$F = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{\left( \Delta_i^{розр} - \Delta_i^{експ} \right)^2}{\sigma\Delta} + \frac{\left( \psi_i^{розр} - \psi_i^{експ} \right)^2}{\sigma\psi} \right],$$

де  $\sigma\Delta$ ,  $\sigma\psi$  – експериментальні похибки еліпсометричних кутів.

Так, останні дослідження щодо вирішення цієї проблеми, свідчать про доцільність використання комбінації методів, що дає можливість отримати корисну інформацію та обійти обмеження кожного з них [105, 179].

Слід зазначити, що коло завдань сучасних досліджень безперервно розширюється, що приводить до необхідності вивчення більш складних об'єктів. Коректна інтерпретація результатів неможлива без моделювання відбивальної поверхні. Інтенсивний розвиток обчислювальної техніки дозволяє враховувати більшу кількість чинників, проте збільшення числа незалежних змінних природно викликає і збільшення часу розрахунку і вимагає додаткової

інформації, яка б дозволила звужити область можливих розв'язків. Якщо цього не враховувати, то є можливість отримати розв'язок, який не має реального фізичного змісту.

### 2.3. Оцінка точності результатів чисельних методів

Порівняння результатів обчислень, що отримуються оптимізаційним методом при використанні різних цільових функцій, виконане на підставі повторних вирішень завдань, представлених у роботах [111] і [180]. При розв'язуванні ОЗЕ застосовувався метод підбору. За тестові приклади були взяті системи з невідомими показником заломлення  $n_1$  і товщиною плівки  $d$  (табл. 2.1). Результати розрахунків з використанням цільової функції (2.2) представлені у табл. 2.2.

За тими самими вихідними даними (табл. 2.1) розв'язана обернена задача еліпсоїдності з використанням виразу (2.3), результати розрахунків наведені у табл. 2.3. Як видно, значення параметрів, установлених при використанні різних цільових функцій, відрізняються не набагато.

Таблиця 2.1

#### Вихідні дані

Величини	Приклад			
	1 [180]	2 [180]	3 [111]	4 [111]
Довжина хвилі падаючого світла ( $\lambda$ , м)	632,8·10 <sup>-9</sup>		54,6·10 <sup>-6</sup>	
Кут падіння світла ( $\varphi$ , °)	80	70	65	
Комплексний показник заломлення середовища ( $N_0$ )	1- $i0$			
Комплексний показник заломлення підкладки ( $N_2$ )	3,85- $i0,02$	5,4- $i0,77$	2,9- $i1,9$	
Показник поглинання плівки ( $k_1$ )	0	0,028	0	0
Зсув фаз між ортогональними компонентами вектора поляризації ( $\Delta^{експ}$ )	42,83	90	83,5	17,5
Азимут відновленої лінійної поляризації ( $\psi^{експ}$ )	28,04	5	19,0	9,5

Таблиця 2.2

**Порівняння розв'язків ОЗЕ для цільової функції (2.2) з літературними даними**

Величини		Приклад			
		1	2	3	4
Показник заломлення плівки	$n_1^{розр}$	1,46	3,91	2,84	3,33
	$n_1^{мест}$	1,47 [180]	4,05 [180]	3,30 [0111]	3,3 [111]
Товщина плівки	$d^{розр}$ , м	$4,96 \cdot 10^{-8}$	$3,17 \cdot 10^{-8}$	$1,72 \cdot 10^{-6}$	$2,06 \cdot 10^{-6}$
	$d^{мест}$ , м	$4,84 \cdot 10^{-8}$ [180]	$3,00 \cdot 10^{-8}$ [180]	$1,47 \cdot 10^{-6}$ [111]	$2,11 \cdot 10^{-6}$ [111]
Зсув фаз між ортогональними компонентами вектора поляризації ( $\Delta^{розр}$ , °)		42,8691	90,1346	83,5097	17,4383
Азимут відновленої лінійної поляризації ( $\psi^{розр}$ , °).		28,0600	4,9931	19,0601	9,4872
min (F)		0,001926	0,018156	0,003707	0,003974
Відносна похибка	$\Delta n_1, \%$	0,8826	3,4568	13,9394	0,9091
	$\Delta d, \%$	2,4793	5,6667	17,0068	2,3697



Таблиця 2.3

**Порівняння розв’язків ОЗЕ для цільової функції (2.3) з літературними даними**

Величини		Приклад			
		1	2	3	4
Показник заломлення плівки	$n_1^{розр}$	1,46	3,91	2,85	3,33
	$n_1^{мест}$	1,47 [180]	4,05 [180]	3,30 [111]	3,30 [111]
Товщина плівки	$d^{розр}, м$	$4,95 \cdot 10^{-8}$	$3,17 \cdot 10^{-8}$	$1,71 \cdot 10^{-6}$	$2,06 \cdot 10^{-6}$
	$d^{мест}, м$	$4,84 \cdot 10^{-8}$ [180]	$3,00 \cdot 10^{-8}$ [180]	$1,47 \cdot 10^{-6}$ [111]	$2,11 \cdot 10^{-6}$ [111]
Зсув фаз між ортогональними компонентами вектора поляризації ( $\Delta^{розр}, \circ$ )		42,8756	90,1346	83,5897	17,4383
Азимут відновленої лінійної поляризації ( $\psi^{розр}, \circ$ ).		28,0274	4,9931	18,9559	9,4872
min ( $ \Phi $ )		$2,59 \cdot 10^{-7}$	$5,69 \cdot 10^{-8}$	$1,03 \cdot 10^{-6}$	$8,51 \cdot 10^{-8}$
Відносна похибка	$\Delta n_1, \%$	0,8826	3,4568	13,6364	0,9091
	$\Delta d, \%$	2,2727	5,6667	16,3265	2,3697

Відносна похибка показника заломлення  $n_1$  і товщини плівки  $d$  (порівняно з результатами, узятими з тестових прикладів) була розрахована за формулами:

$$\Delta n_1 = \left| \frac{n_1^{мест} - n_1^{розр}}{n_1^{мест}} \right| \cdot 100\%; \quad \Delta d = \left| \frac{d^{мест} - d^{розр}}{d^{мест}} \right| \cdot 100\%,$$

де  $n_1^{мест}$ ,  $d^{мест}$  – тестові значення показників заломлення та товщини плівки, відповідно;

$n_1^{розр}$ ,  $d^{розр}$  – розраховані значення показників заломлення та товщини плівки, відповідно.

Отже, використання залежностей (2.2) або (2.3) дозволяє отримувати близькі за значенням результати.

Виходячи з того, що найбільш поширеним методом розв'язування ОЗЕ є оптимізаційний з використанням цільової функції помилки між вимірними та розрахованими еліпсометричними кутами (2.2) і його точність не поступається іншим подібним методам, для подальших досліджень вибрано саме цей метод.

Алгоритм розрахунку з використанням цільової функції (2.2) наведений на рис. 2.3.

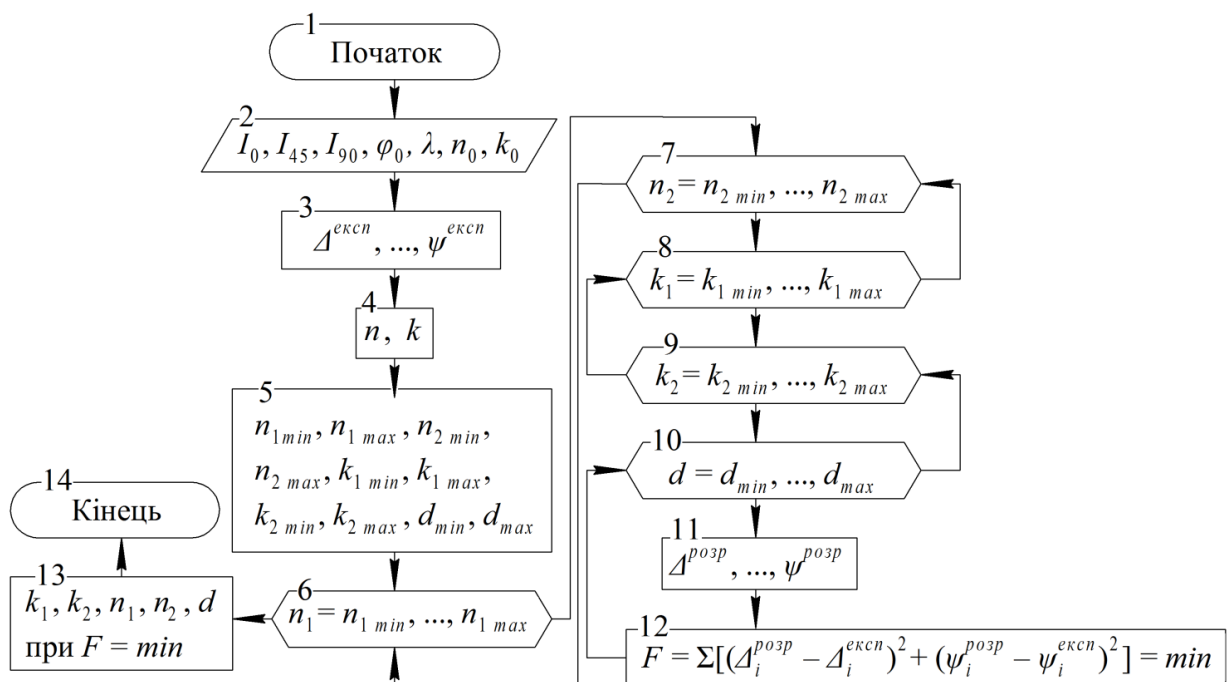


Рис. 2.3. Алгоритм розрахунку оптичних характеристик відбивальної системи

## 2.4. Побудова нейромережевої моделі визначення оптичних властивостей аморфних сплавів

В останні десятиліття бурхливо розвивається нова прикладна галузь математики, що спеціалізується на штучних нейронних мережах (НМ). Актуальність досліджень у цьому напрямку підтверджується масою різних застосувань НМ: автоматизація процесів розпізнавання образів, адаптивне управління, апроксимація функціоналів, прогнозування, створення експертних систем, організація асоціативної пам'яті і багато інших [181, 182].

Метод НМ припускає наявність засобів, які заздалегідь установлюють відповідність між входами і виходами системи, що моделюються, для деяких обмежених умов завдання. Слід зазначити, що використання НМ при визначенні оптичних параметрів досліджуваної системи не дозволяє отримати її розв'язок без наявності навчальних пар. Проте цей метод є потужним інструментом, що створює апроксимувальну модель, на підставі якої з мінімальною витратою розрахункових ресурсів можна обробляти різні експериментальні результати. Таким чином, використання нейронних мереж для моделювання оптичних параметрів є ефективним у комбінації з іншим методом, що формує навчальні пари, наприклад, оптимізаційним.

Методологія нейронних мереж (НМ) для задач, що не формалізуються, ґрунтується на наявності деякої множини прикладів (*casebased*). Необхідну кількість прикладів визначає точність розв'язку [182–184].

Основу кожної НМ складають прості (у більшості випадків однотипні) елементи, які імітують роботу мозку. Такий елемент називається штучним нейроном. Кожний нейрон характеризується своїм станом, аналогічно до нервових клітин. Нейрон має безліч входів (синапсів) та один вихід (аксон) (рис. 2.4). Синапси поєднані з виходами інших нейронів.

Кожен синапс характеризується величиною синаптичного зв'язку або його вагою  $w_i$ . Поточний стан нейрона визначається як сума добутків входів на

відповідні синапси 
$$S = \sum_{i=1}^n x_i \cdot w_i.$$

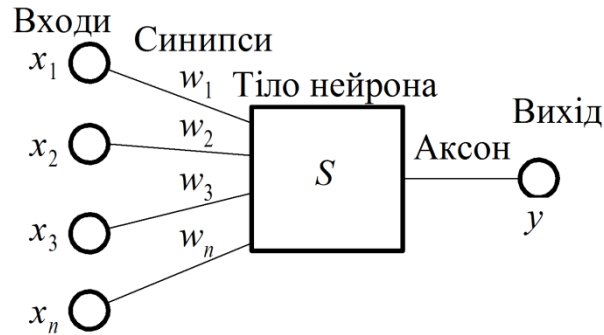


Рис. 2.4. Штучний нейрон [184]

Вихід нейрона – це деяка функція від суми  $S$ , активаційна функція [184]  $y = f(S)$ . Як активаційна використовуються різноманітні функції. Найчастіше застосовується сигмоїд  $f(S) = \frac{1}{1 + e^{-\alpha S}}$ , оскільки має простий вираз для її похідної  $f'(S) = \alpha \cdot f(S) \cdot (1 - f(S))$  і вона має властивість підсилювати слабкі сигнали краще, ніж сильні.

Об'єднання великого числа нейронів у так звані шари і з'єднання певним чином нейронів різних шарів дозволяє проводити паралельну обробку сигналів. Проста мережа складається із групи нейронів, що утворюють шар (рис. 2.5) [183, 184].

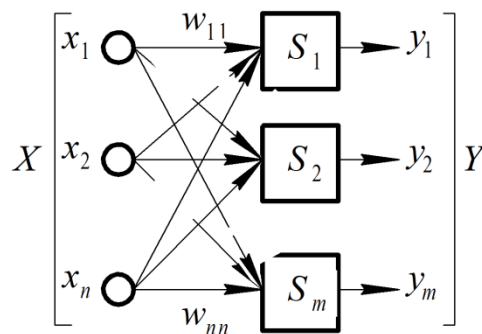


Рис. 2.5. Одношарова нейронна мережа [184]

Кожен елемент із вхідної множини  $X$  ( $x_i \in X$ ,  $i = 1, \dots, n$ ) через синапс сполучений з кожним штучним нейроном. Нейрон має один вихід, тому у такої мережі кількість виходів дорівнює числу нейронів. Вагу окремого синапсу

можна представити як елемент матриці  $W$  розмірністю  $n \times m$ , де  $n$  – число рядків або входів,  $m$  – число стовпців або нейронів. Вихідний вектор  $Y$  ( $y_j \in Y$ ,

$$j = 1, \dots, m) \text{ дорівнює } Y = XW, \text{ а } y_j = f\left(\sum_{i=1}^n x_i w_{ij}\right).$$

Така мережа здатна сприймати (*perception*), тому отримала назву “персептрон”. Робота персептрона має деякі обмеження, тому використовують взаємодію двох і більше персептронів.

Багатошарові мережі мають більші можливості у порівнянні з одношаровими. Вихід попереднього шару є входом для наступного (рис. 2.6). Активаційна функція між шарами лінійна. Обчислення виходу кожного наступного шару полягає у добутку його вагової матриці на виходи попереднього шару.

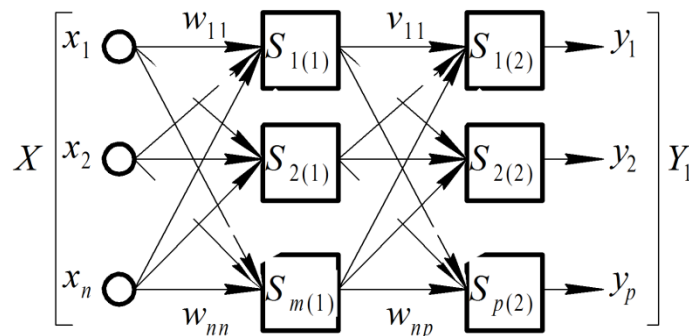


Рис. 2.6. Двошарова нейронна мережа [184]

Результат роботи двошарової нейронної мережі (множина  $Y_1$ ) залежить від вхідної множини  $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$  і перетворень при русі значень вектора  $X$  від входу до виходу  $Y_1 = F(x_1, x_2, \dots, x_n)$ .

Вихідний вектор такої мережі  $Y_1$ , ( $y_k \in Y_1, k = 1, \dots, p$ ) дорівнює  $Y_1 = YV$ , а  $k$ -й вихід відповідно

$$y_k = \sum_{j=1}^m v_{jk} f\left(\sum_{i=1}^n x_i w_{ij}\right), \quad (2.4)$$

де  $n$  – кількість входів;

$m$  – число нейронів у першому шарі;

$p$  – число нейронів у другому шарі.

Використовуючи теорему А. Н. Колмогорова, згідно якої будь-яка безперервна функція багатьох змінних  $R(x_1, x_2, \dots, x_n)$  може бути представлена операціями додавання цих змінних, доведено [184], що таку процедуру із заданою точністю можна виконати за допомогою двошарової нейронної мережі

$$|R(x_1, x_2, \dots, x_n) - F(x_1, x_2, \dots, x_n)| \leq \varepsilon, \quad (2.5)$$

де  $\varepsilon > 0$  – скільки завгодно мале число.

Для досягнення нерівності (2.5) необхідно у виразі (2.4) підібрати числа  $m$  і  $n$  та матриці з чисел  $w_{ij}$  і  $v_{jk}$  – навчити нейронну мережу.

Навчання відбувається у результаті настроювання вагів. Ваги поступово стають такими, щоб кожен вхідний вектор виробляв вихідний з допустимою похибкою.

Навчання з учителем припускає, що для кожного вхідного вектора відомий вихідний вектор (цільовий). Разом вони складають навчальну пару. Повинно бути декілька таких пар  $(X_k, Y_k)$ ,  $k = 1, \dots, p$ . Для кожного вхідного вектора обчислюється вихідний, порівнюється з цільовим і помилка, за допомогою зворотного зв'язку, поступає у мережу, де, відповідно до прийнятого алгоритму, змінюються ваги. Ваги підстроюються для кожного вектора доти, доки помилка в усіх парах не досягне необхідного значення.

Побудова нейронної мережі виконується в два етапи: вибір типу (архітектура) нейронної мережі; підбір вагів (навчання) нейронної мережі.

Існує декілька десятків різних нейромережевих архітектур. Найбільш популярні і вивчені архітектури – це багатшаровий перцептрон, нейронна мережа із загальною регресією, нейронні мережі Кохонена та інші.

На другому етапі слід “навчити” вибрану нейронну мережу, тобто підібрати значення її вагів. Для багатьох архітектур розроблені спеціальні алгоритми навчання. Найбільш популярний з цих алгоритмів – метод зворотного розповсюдження помилки (*Error Back Propagation*).

## **Висновки до розділу 2**

1. Розглянуто способи виготовлення та наступної обробки модельних аморфних металевих зразків  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$ ,  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{50}\text{B}_{10}$ ,  $\text{Ni}_{85}\text{C}_{15}$ ,  $\text{Fe}_{80}\text{DM}_5\text{B}_{15}$  (DM = Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni),  $\text{Fe}_{78-x}\text{Ni}_x\text{Si}_9\text{B}_{13}$  ( $x = 0, 1, 4, 8, 16, 21$  at. %).
2. Досліджено існуючі на даний час методи розв’язування оберненої задачі еліпсометрії, межі їх застосування, переваги та обмеження, що дозволило побудувати математичну модель вихідних аморфних сплавів.
3. Доведена можливість визначення оптичних параметрів сплавів шляхом розв’язання оберненої задачі еліпсометрії оптимізаційними методами, які базуються на пошуку таких значень оптичних параметрів системи, за яких функція помилки досягала свого мінімального значення.
4. Розглянуто принцип побудови та використання нейронних мереж як оптимізаційного методу, що може бути використаний при розв’язанні оберненої задачі еліпсометрії в умовах наявності відомих навчальних пар.

### РОЗДІЛ 3

## МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ВЗАЄМОДІЇ СВІТЛА З ПОВЕРХНЯМИ ДОСЛІДЖУВАНИХ ЗРАЗКІВ

### 3.1. Особливості застосування оптимізаційного методу розв’язування оберненої задачі еліпсометрії

Основною моделлю проведених досліджень аморфних сплавів є двошарова модель відбивальної системи “ізоотропна плівка – ізоотропна підкладка”. Поверхня АМС характеризується оптичною товщиною поверхневого шару  $d$  (рис. 3.1). Фізичний зміст останньої величини полягає у тому, що її значення визначає такий шар, для якого оптичні властивості істотно

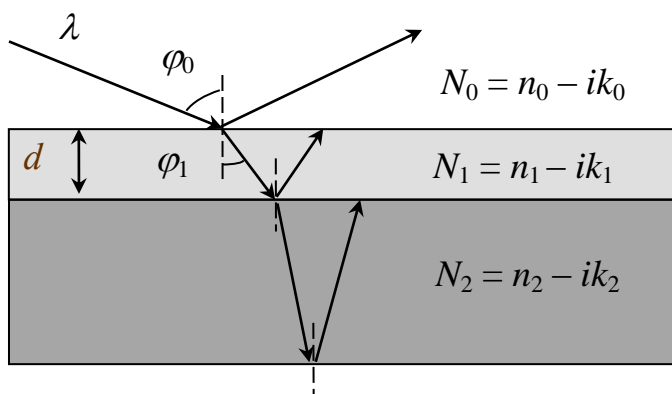


Рис. 3.1. Модель відбивальної системи

відрізняються від властивостей усього матеріалу в цілому [33, 151]. Оптичні параметри плівки позначаються індексом 1, а підкладки – 2. Для визначення оптичних параметрів відбивальної моделі за встановленими експериментально  $\psi$  і  $\Delta$  необхідно розв’язати

обернену задачу.

Відомо, що обернена задача еліпсометрії належить до класу некоректно поставлених задач [161, 185], що, у свою чергу, обумовлює її чутливість до вибору початкового наближення. Для його знаходження використовується модель “напівнескінченного середовища” [98]

$$n^2 - k^2 = \sin^2 \varphi_0 \left( 1 + \operatorname{tg}^2 \varphi_0 \frac{\cos^2 2\psi - \sin^2 2\psi \sin^2 \Delta}{(1 + \sin 2\psi \cos \Delta)^2} \right),$$



$$2nk = \sin^2 \varphi_0 \operatorname{tg}^2 \varphi_0 \frac{\sin 4\psi \sin \Delta}{(1 + \sin 2\psi \cos \Delta)^2},$$

де  $n$  – ефективне значення показника заломлення всієї системи;

$k$  – ефективне значення показника поглинання системи;

$\varphi_0$  – кут падіння світла на поверхню досліджуваного зразка.

Позначимо

$$a = \operatorname{tg}^2 \varphi_0 (\cos^2 2\psi - \sin^2 2\psi \sin^2 \Delta);$$

$$b = 1 + \sin 2\psi \cos \Delta;$$

$$A = \sin^2 \varphi_0 \left(1 + \frac{a}{b^2}\right);$$

$$B = \frac{\sin^2 \varphi_0 \operatorname{tg}^2 \varphi_0 \sin 4\psi \sin \Delta}{b^2}.$$

$$\text{Тоді } n = \frac{B}{2k}; \quad k^2 = \frac{B^2}{4k^2} - A.$$

Останній вираз перепишемо як рівняння з невідомим в 4 ступені

$$k^4 + Ak^2 - \frac{B^2}{4} = 0.$$

$$\text{Нехай } k^2 = x, \text{ отже маємо рівняння } x^2 + Ax - \frac{B^2}{4} = 0.$$

Корені цього квадратного рівняння

$$x_{1,2} = \frac{1}{2} \left( -A \pm \sqrt{A^2 + B^2} \right), \text{ звідки } k_{1,2} = \pm \frac{\sqrt{-A \pm \sqrt{A^2 + B^2}}}{\sqrt{2}}.$$

Показник поглинання набуває значень  $k \geq 0$ . Враховуючи, що значення  $k$  є дійсним числом, під коренем може утворитися позитивна величина тільки при

позитивному значенні  $\sqrt{A^2 + B^2}$ . Всі ці умови виконуються. Насправді,  $A > 0$  і  $B > 0$ , тому  $\sqrt{A^2 + B^2} > 0$  і  $|\sqrt{A^2 + B^2}| > |A|$ . З чотирьох можливих значень  $k$  цим вимогам відповідає наступний вираз:

$$k = \frac{\sqrt{\sqrt{A^2 + B^2} - A}}{\sqrt{2}}.$$

Межі області визначення шуканих оптичних параметрів  $(n_1, k_1, n_2, k_2)$  встановлені як  $\pm 1$  відносно відповідних ефективних значень системи:

$$(n_{1\max, \min}; n_{2\max, \min}) = n \pm 1; (k_{1\max, \min}; k_{2\max, \min}) = k \pm 1. \quad (3.1)$$

Оптична товщина поверхневого шару обмежена  $d \leq 100$  нм. При розв'язанні ОЗЕ оптимізаційним методом показники заломлення  $n_{1,2}$  і поглинання  $k_{1,2}$  циклічно змінюються з кроком 0,1, а оптичній товщині поверхневого шару задаються дискретні значення з кроком 1 нм. Проте, якщо при визначених за формулами (3.1) мінімальні значення цих параметрів будуть такі, що  $k_{1,2} < 0$  і  $n_{1,2} < 1$ , то втрачається їх фізичний зміст. Тому, у разі розрахункового значення  $(n_{1\min}; n_{2\min}) < 1$  приймаємо  $(n_{1\min}; n_{2\min}) = 1$ , а при встановленому розрахунками  $(k_{1\min}; k_{2\min}) < 0$  приймаємо  $(k_{1\min}; k_{2\min}) = 0$ .

При взаємодії електромагнітної хвилі з електричним полем електронів поверхні зразка повна зміна вектора вільної енергії негативна [186]

$$d\bar{F} = -\int d\varepsilon \frac{\bar{E}^2}{8\pi} dV,$$

де  $\varepsilon$  – діелектрична проникність;

$\bar{E}$  – вектор напруженості;

$V$  – об'єм.

Тому повна вільна енергія фотона при взаємодії з аморфним зразком зменшується.

Якщо вважати, що електричне поле зразка однорідне, то

$$dF \approx -\frac{1}{2} \bar{P} \cdot \bar{E},$$

де  $\bar{P} = \chi \bar{E}$  – вектор поляризації ( $\chi = \frac{\varepsilon - 1}{4\pi}$  – коефіцієнт поляризації).

Тоді

$$d\bar{F} = -\frac{\varepsilon - 1}{8\pi} \bar{E}^2. \quad (3.2)$$

З цього виразу випливає, що зміна вільної енергії буде негативною величиною тільки за умови  $\varepsilon > 1$ .

Розглянемо відбивання і заломлення монохроматичної плоскої хвилі на межі розділення між двома середовищами. Вісь  $z$  спрямована вглиб другого середовища і співпадає з нормаллю до її поверхні (рис. 3.2). Вважаємо, що

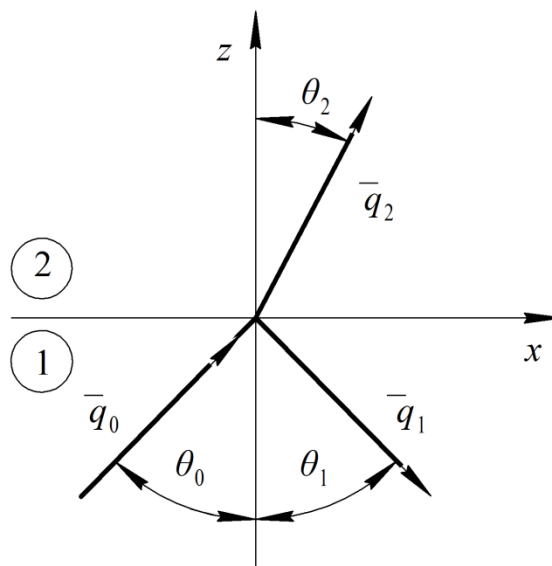


Рис. 3.2. Відбивання та заломлення променя світла

властивості матеріалів в площині  $xy$  (поверхня поділу середовищ) повністю однорідні. Тому компоненти  $\bar{q}_x$  і  $\bar{q}_y$  хвильових векторів для падаючої, відбитої і заломленої хвиль однакові. Отже, їх модулі рівні

$$q_{0x} = q_{1x} = q_{2x},$$

де 0, 1, 2 – індекси для падаючого, відбитого і заломленого променів світла.

Модулі компонент відбитого і заломленого векторів у напрямі осі  $z$  такі [186]:

$$q_{1z} = -q_{0z} = -\frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon_1} \cos \theta_0;$$

$$q_{2z} = \sqrt{q_2^2 - q_{2x}^2}; \quad q_2^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_2; \quad q_{2x}^2 = q_{0x}^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_1 \sin^2 \theta_0; \quad q_{2z} = \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_2 - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_1 \sin^2 \theta_0};$$

$$q_{2z} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon_2 - \varepsilon_1 \sin^2 \theta_0},$$

де  $\omega$  – кругова частота;

$c$  – швидкість світла.

Якщо вектор  $\bar{q}_0$  дійсний, то дійсний і вектор  $\bar{q}_1$ . Величина  $q_{2z}$  у поглинаючому середовищі комплексна і, у зв'язку з тим, що заломлена хвиля затухає вглиб другого середовища [186], маємо

$$\text{Im} q_{2z} > 0. \quad (3.3)$$

Комплексний показник заломлення  $N_2 = \sqrt{\varepsilon_2}$ , а модуль заломленого вектора пучка світла  $q_2 = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon_2}$ . Тоді  $q_2 \frac{c}{\omega} = N_2$ , з чого виходить, що уявні частини цих комплексних величин приймають знак ( $\pm$ ) у суворій відповідності

один до одного, оскільки відрізняються тільки величиною дійсного множника  $\omega/c$ .

Величина  $\beta$ , що входить до показника степені виразу (1.1), або фазова товщина плівки, є комплексною величиною і визначається таким чином [111]:

$$\beta = \operatorname{Re} \beta \pm \operatorname{Im} \beta, \quad (3.4)$$

$$\text{де } \operatorname{Re} \beta = \frac{\pi d \sqrt{2}}{\lambda} \sqrt{\sqrt{m^2 + u^2} + m^2}; \quad \operatorname{Im} \beta = \frac{\pi d \sqrt{2}}{\lambda} \sqrt{\sqrt{m^2 + u^2} - m^2}; \quad u = 2n_1 k_1;$$

$$m = n_1^2 - k_1^2 - n_0^2 \sin^2 \varphi_0.$$

У зв'язку з тим, що при взаємодії світлової хвилі з поверхнею аморфного сплаву її енергія зменшується (3.2), уявна частина вектора заломленої хвилі углиб зразка величина позитивна (3.3), тому і вираз (3.4) запишеться як

$$\beta = \operatorname{Re} \beta + \operatorname{Im} \beta.$$

На основі вище зазначеного моделювання оптичних властивостей аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$  після спектроеліпсометричних вимірювань (довжина хвилі падаючого світла  $\lambda = 700$  нм, кут падіння світла  $\varphi_0 = 72^\circ$ , інтенсивності світла  $I_0 = 149$  Вт/м<sup>2</sup>,  $I_{45} = 224$  Вт/м<sup>2</sup>,  $I_{90} = 536$  Вт/м<sup>2</sup>) дозволило отримати наступні його оптичні характеристики:  $n_1 = 2,395$ ;  $k_1 = 4,067$ ;  $d = 51$  нм;  $n_2 = 3,295$ ;  $k_2 = 2,267$ . При цьому значення функції помилки становило  $F = 2,848 \cdot 10^{-9}$ . Проте цей результат неоднозначний і для складання остаточного уявлення про оптичні властивості досліджуваної системи необхідно отримати додаткові відомості про фізичну модель процесу. Так, графіки залежностей  $F(k_1, n_1)$   $F(k_2, n_2)$  показують (рис. 3.3, 3.4), що функція помилки не є гладкою, має безліч екстремальних значень. Проте, у межах множини розрахованих оптичних показників поверхневого шару і підкладки, її

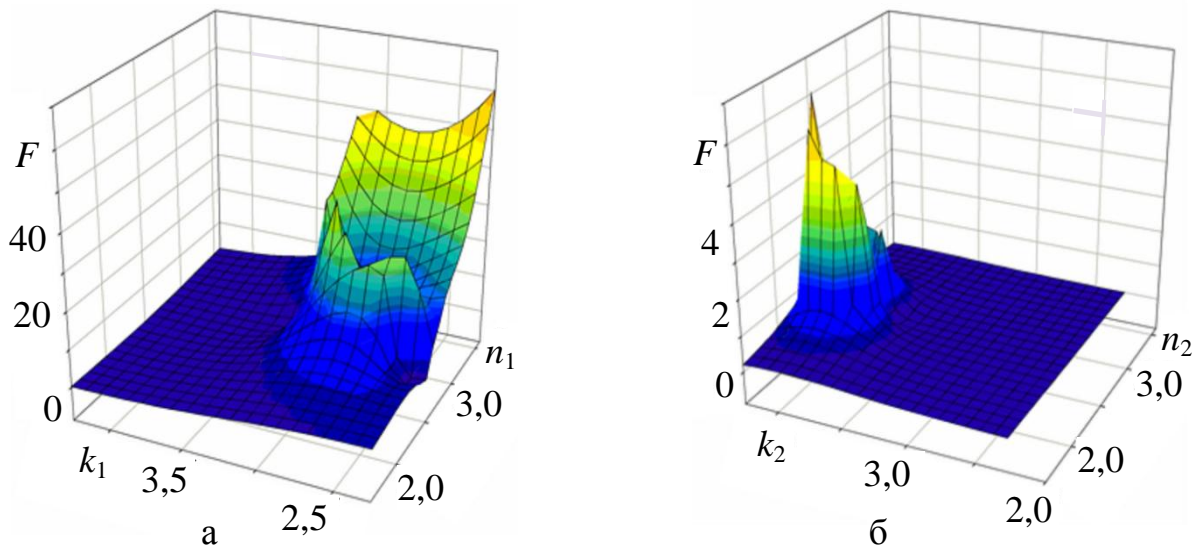


Рис. 3.3. Залежність функції помилки від оптичних характеристик поверхневого шару (а) та “підкладки” (б)

значення розташовуються на поверхні, близькій до площини. Це, з одного боку, може внести помилку до значень оптичних показників, оскільки незначні зміни значення функції помилки можуть привести до істотних відмінностей результату. З іншого боку (рис. 3.5), у функції помилки в межах розрахованих значень оптичних показників при достатньому збільшенні все-таки вирізняється чіткий мінімум, що дозволяє припустити принципову можливість “точного” розв’язання оберненої задачі при зменшенні значення кроку у циклах програмної реалізації.

Розрахунок спектральних залежностей оптичних показників аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$  за даними експериментальних вимірювань (табл. А.3, А.4) при використанні методу розв’язування ОЗЕ, як пошуку мінімального значення функції помилок  $F$  серед усіх набутих значень  $F$  в обмеженій області варійованих змінних  $(n_1, k_1, n_2, k_2, d)$ , дає значний розкид значень (рис. 3.6, 3.8 а, б). В експерименті аналізуються контактна та безконтактна поверхні зразка. У цілому, можна відзначити збільшення оптичної товщини  $d$  оптичного шару і інших показників із збільшенням довжини хвилі  $\lambda$  падаючого світла.

Вивчена взаємодія світлових хвиль з контактною та безконтактною поверхнями аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$  після їх полірування. Результати

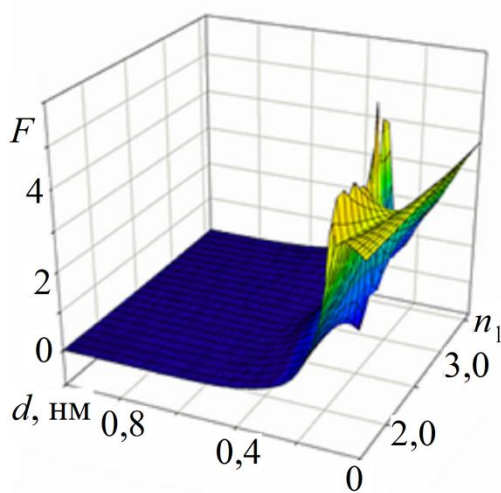


Рис. 3.4. Залежність функції помилки від оптичної товщини  $d$  та показника заломлення поверхневого шару  $n_1$

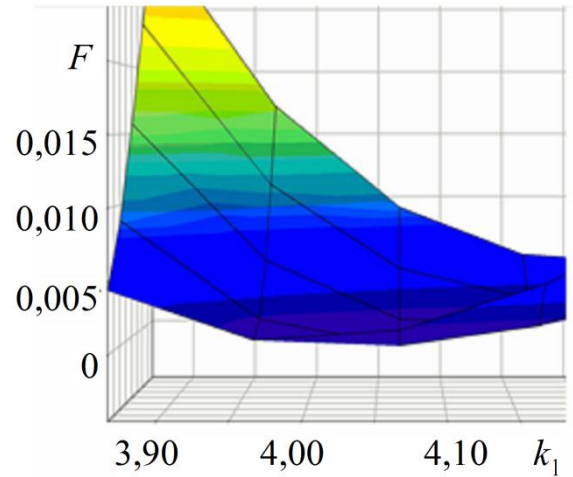


Рис. 3.5. Глобальний мінімум функції помилки в залежності від оптичних показників поверхневого шару

еліпсометричних вимірювань наведені в табл. А.5, А.7, а відповідні залежності оптичних параметрів на рис. 3.7, 3.8 в, г.

Аналіз отриманих залежностей  $d = f(\lambda)$  залежності оптичних параметрів на рис. 3.9, що в інтервалі довжин хвиль від 500 нм до 1200 нм тренд графіків може бути прямою лінією (рис. 3.9 в)

$$d = D + \eta\lambda. \quad (3.5)$$

Наявність залежності (3.5) значно спрощує розв'язання оберненої задачі еліпсометрії для аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{V}_{20}$  у зазначеній області спектру, завдяки можливості виключення циклу за  $d$ .

Відзначимо, що коефіцієнт  $\eta$  на всіх графіках відрізняється мало і середнє його значення становить  $\eta_{\text{сер}} = 0,038$  (рис. 3.9 в).

Поверхневий шар, до складу якого входить і шорсткість поверхні, є проникливішим для світлової хвилі, ніж суцільний матеріал. Тому збільшення шорсткості підвищує в цілому товщину оптичного шару  $d$ .

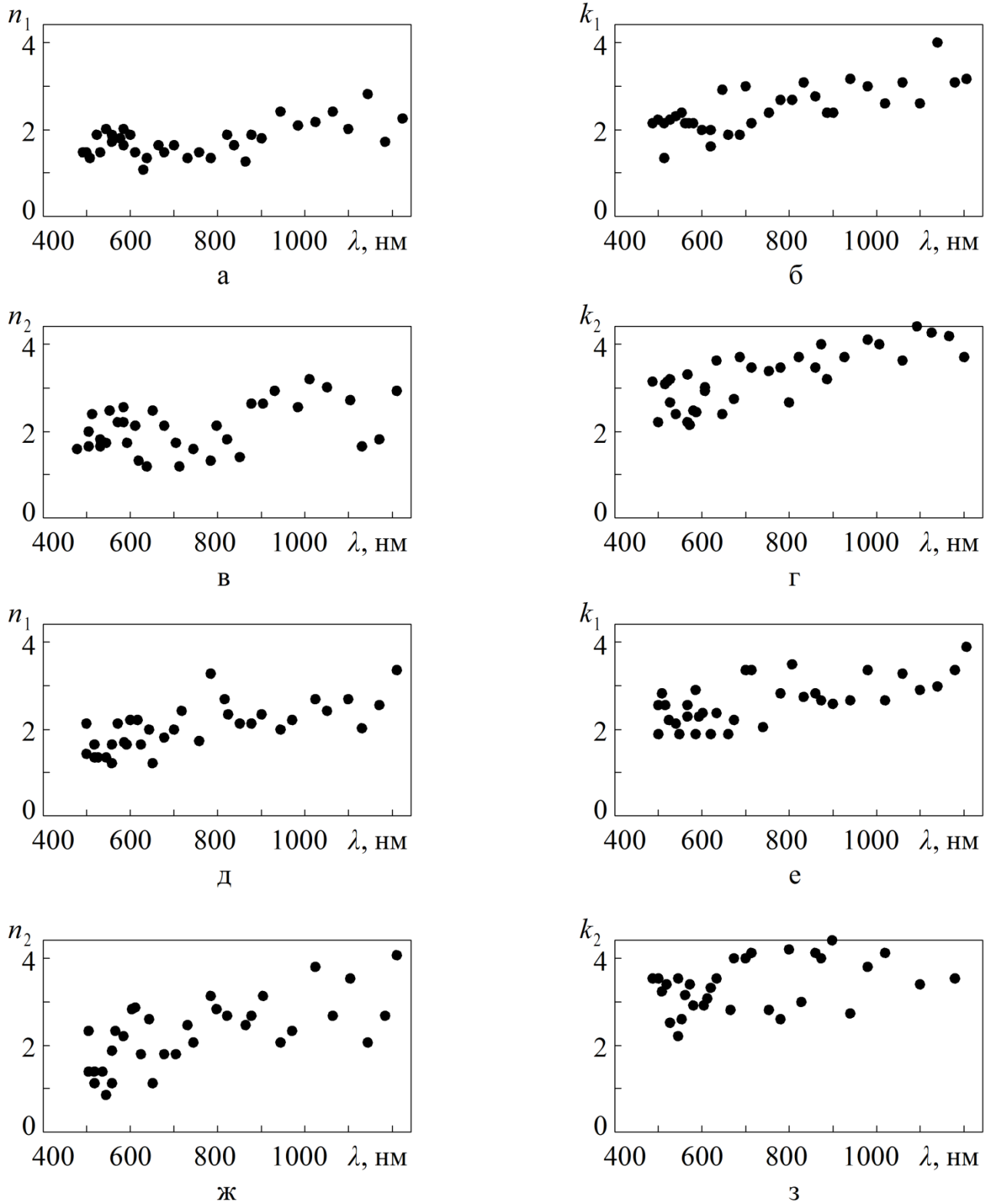


Рис. 3.6. Спектральні залежності оптичних показників контактної (а–г) та безконтактної (д–з) поверхонь аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$



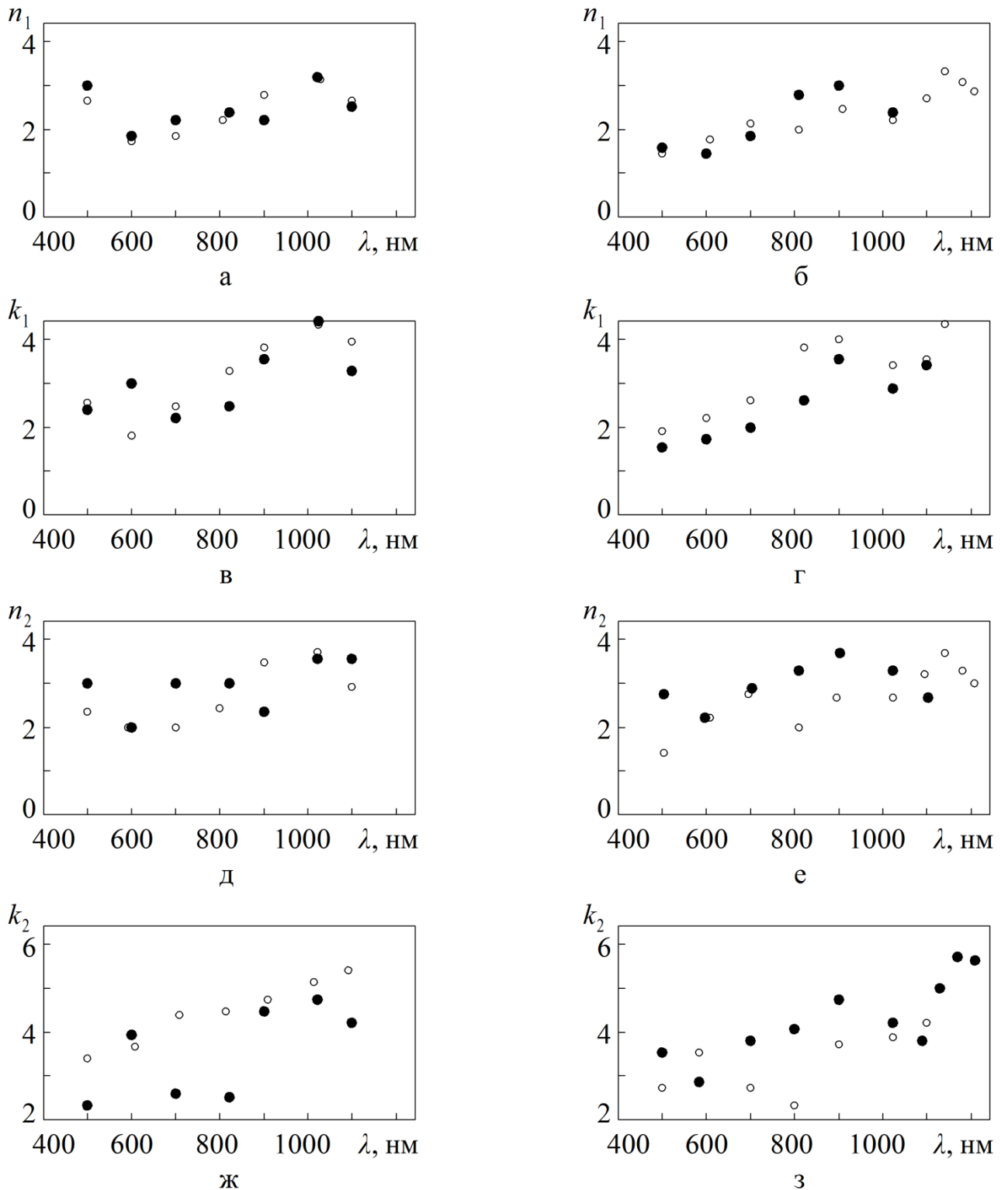


Рис. 3.7. Спектральні залежності оптичних показників полірованих безконтактних (а, в, д, ж) та контактних (б, г, е, з) поверхонь аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$  (● – експеримент 1; ○ – експеримент 2)

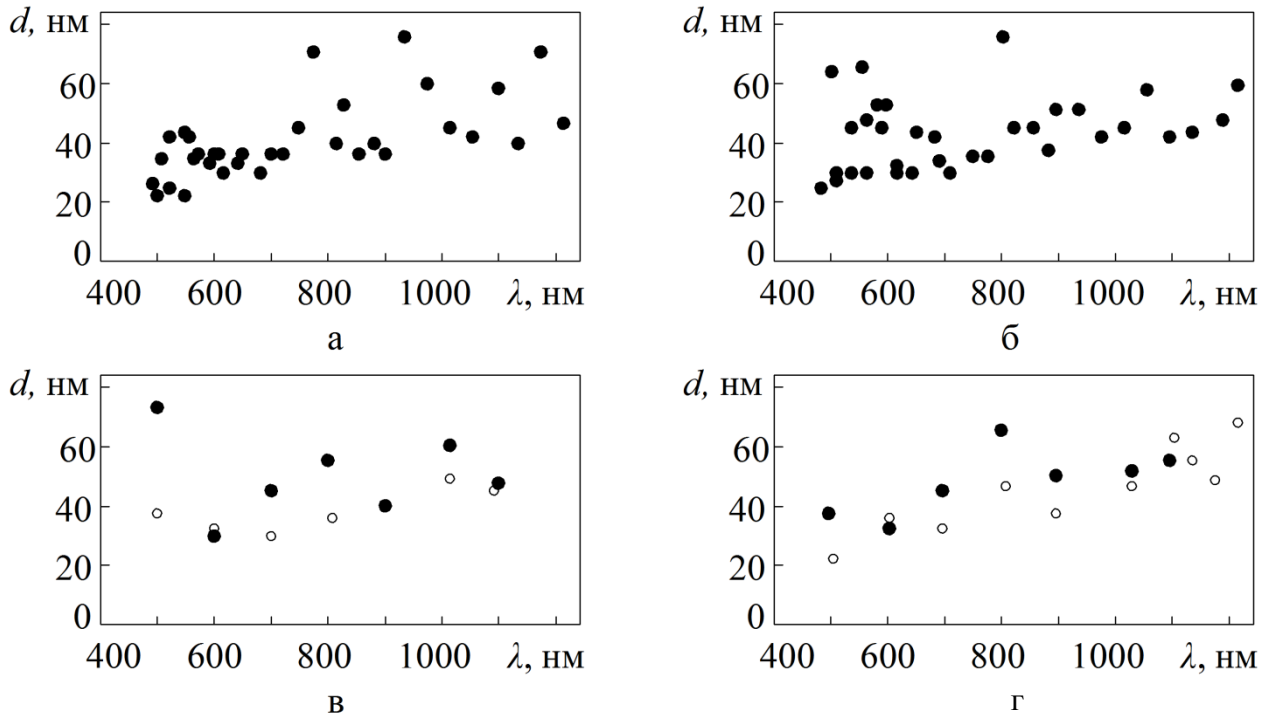


Рис. 3.8. Спектральні залежності оптичних товщин поверхневого шару  $d$  аморфних сплавів  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$  (а – безконтактна поверхня; б – контактна поверхня; в – безконтактна полірована поверхня; г – контактна полірована поверхня; ● – експеримент 1; ○ – експеримент 2)

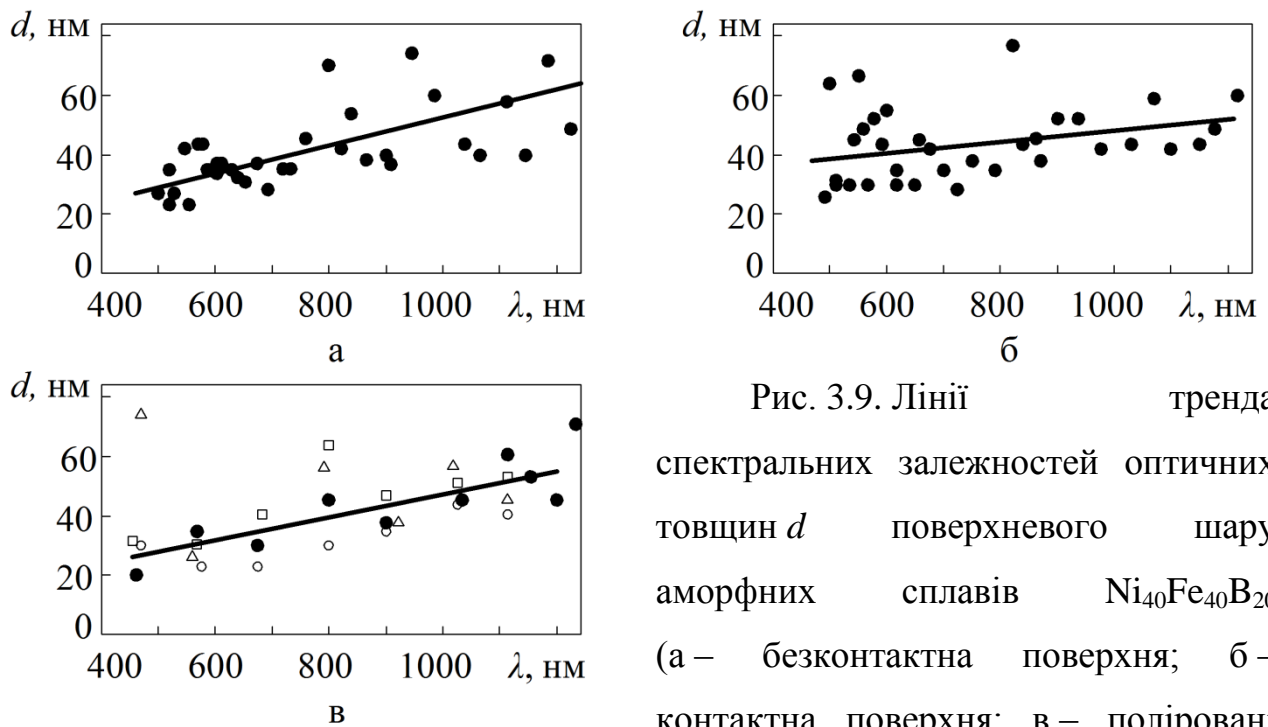


Рис. 3.9. Лінії тренда спектральних залежностей оптичних товщин  $d$  поверхневого шару аморфних сплавів  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$  (а – безконтактна поверхня; б – контактна поверхня; в – поліровані поверхні)

Цей взаємозв'язок може мати практичне застосування. Встановивши, що для полірованої поверхні аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$

$$D_{\text{пол}} = d_{\text{пол}} - \eta_{\text{сер}} \lambda.$$

Визначивши  $D$  для поверхні досліджуваного зразка, отримаємо приріст параметра шорсткості  $\Delta D$ :

$$\Delta D = D - D_{\text{пол}}.$$

Виконавши тарування, визначаємо функціональну залежність між  $\Delta D$  і відмінністю параметра шорсткості даної поверхні від полірованої  $\Delta R_a = f(\Delta D)$

Відомо [158], що полірована поверхня має  $R_{a \text{ пол}} = (0,05, \dots, 0,1)$  мкм. Тоді параметр шорсткості поверхні, дослідженої еліпсометричним методом, дорівнює

$$R_a = R_{a \text{ пол}} + f(\Delta D).$$

### **3.2. Розв'язування оберненої задачі еліпсометрії з використанням середньостатистичного значення функції помилки**

У зв'язку з тим, що обернена задача належить до класу некоректно поставлених, для яких характерна нестійкість розв'язку (невелике відхилення початкових даних може призвести до великого “розкиду” результатів (рис. 3.3, 3.4), актуальним є питання пошуку методики, найбільш прийнятної для конкретних умов. Теоретично розв'язання такого роду задач досягається за умови рівності нулю відхиленню функції помилки. Проте, при розв'язанні оберненої задачі чисельним методом з використанням ЕОМ, можливе

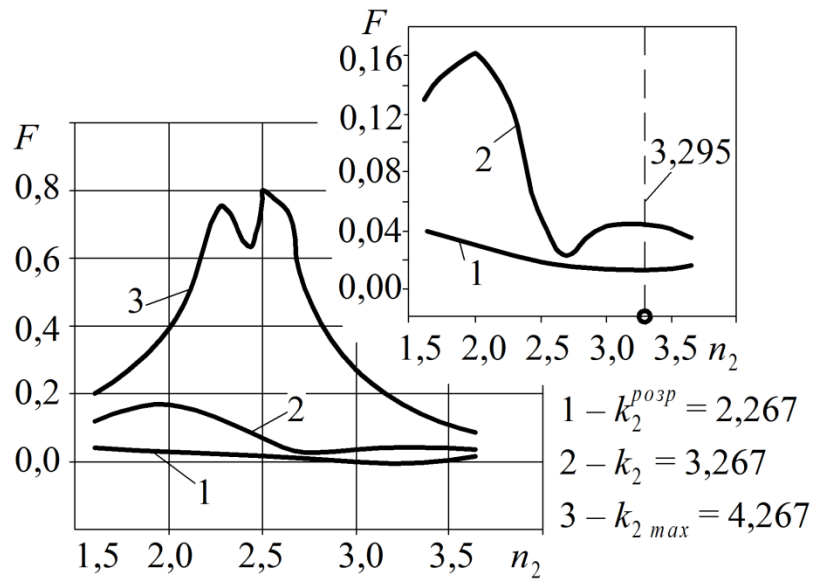
визначення лише наближеного значення, що обумовлюється дискретною зміною оптичних параметрів при комп'ютерній реалізації моделі.

У результаті еліпсометричного моделювання оптичних властивостей аморфного сплаву були отримані залежності функцій помилки від оптичних параметрів системи. При цьому граничні значення параметрів відрізнялися від знайдених для напівнескінченного середовища на  $\pm 1$ . Отримані перетини функції помилки площинами, паралельними площині  $Fn_2$  на рівнях розрахованого значення  $k_2^{pozp}$ , ефективного значення показника поглинання всієї системи  $k$  і граничного значення  $k_{2max}$  (рис. 3.10 а).

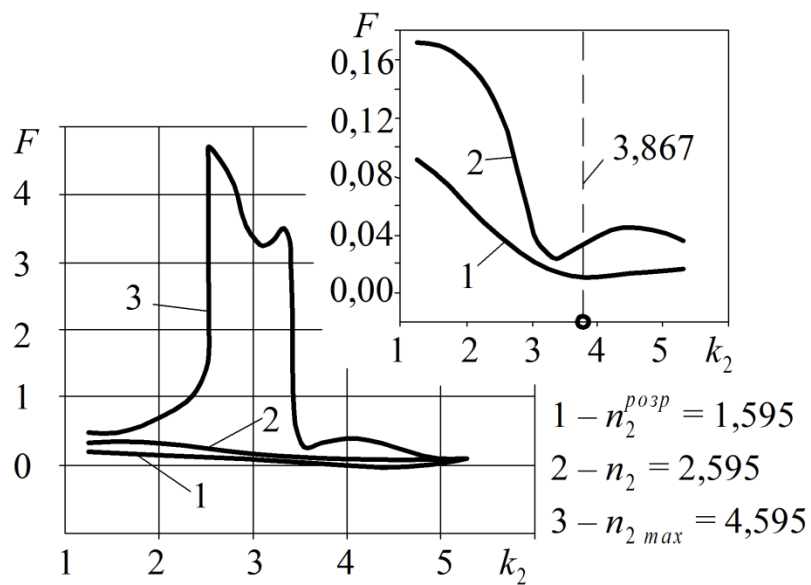
Також було виконано моделювання при розширеній області визначення оптичних параметрів системи (граничні значення відрізнялися від обчислених для напівнескінченного середовища на  $\pm 2$ ). Для цих умов побудовані перетини отриманої при цьому функції помилки  $F$  площинами, паралельними площині  $Fk_2$  на рівнях розрахованого значення  $n_2^{pozp}$ , ефективного значення показника заломлення всієї системи  $n$  і граничного його значення  $n_{2max}$  (рис. 3.10 б).

Аналіз графіків (рис. 3.10) засвідчує, що в обох випадках поверхня “долини” навколо встановленого мінімуму функції  $F(n_1, n_2, k_1, k_2, d)$  не є гладкою. Враховуючи те, що розв’язок формується у результаті дискретного надання значень оптичним параметрам, при інших межах і кроці зміни цих параметрів не виключається можливість появи додаткових локальних мінімумів або глибшого глобального мінімуму. Тому поліпшення результатів розрахунку можливе, як вже наголошувалося раніше, за рахунок зменшення значень кроків у розрахункових циклах або при використанні математичної статистики [185].

Наявність у функції помилки численних локальних мінімумів виключає застосування різних оптимізаційних методів, таких як градієнтний спуск чи медіанний фільтр. Встановлений за допомогою градієнтного спуску мінімум може виявитися локальним, вийти з якого не завжди під силу наявними математичними прийомами. Методика медіанного фільтру виключає



а



б

Рис. 3.10. Перетини поверхні функції помилки  $F$  площинами, паралельними площині  $Fn_2$  в діапазоні  $k_2 = 2,267\text{--}4,267$  (а), площині  $Fk_2$  в діапазоні  $n_2 = 1\text{--}4,595$  (б)

максимальні і мінімальні розрахункові значення функції, що обмежує достовірність результатів, оскільки знайдене мінімальне значення може бути не наслідком помилок під час розрахунку або експерименту, а дійсно найбільш близьким до глобального мінімуму значенням. Для підвищення стійкості результатів необхідно шукати розв'язок, який відповідає середньостатистичному значенню декількох значень функції помилки, що прямують до нуля, однакового порядку. Кількість використовуваних мінімальних значень функції помилки, що дозволяє знайти розв'язок оберненої задачі, можна визначити з таких міркувань. Точність оцінки середнього значення залежить від кількості значень досліджуваної величини [187]. Вона повинне бути такю, щоб вірогідність відхилення вибіркового середнього (середнього арифметичного) від генерального середнього (математичного сподівання) на величину, більшу від  $\Delta F$ , була меншою від заданого числа  $p$ .

Середнє арифметичне

$$F_{\text{сеп.а.}} = \frac{1}{u} \sum_{i=1}^u F_i,$$

де  $u$  – загальне число значень величини  $F$ .

Математичне сподівання дискретної випадкової величини

$$M\{F\} = \sum_{i=1}^m F_i p\{F_i\},$$

де  $m$  – число можливих різних значень випадкової величини  $F_i$ ;

$p\{F_i\}$  – вірогідність значень  $F_i$ .

Відносне відхилення середнього арифметичного від математичного сподівання апроксимується формулою

$$t = \frac{F_{\text{сер.а.}} - M\{F\}}{S\{F_{\text{сер.а.}}\}}. \quad (3.6)$$

Розподіл величин  $t$  при різному значенні ступеня вільності  $f = u - 1$  знайдене Стьюдентом. Значення  $t_{kp}$  при відповідній надійній імовірності  $p = 1 - \alpha$  для різних  $f$  наведені у таблицях критерія Стьюдента для нормального розподілу [187]. Середнє квадратичне відхилення середнього арифметичного взаємно незалежних випадкових величин

$$S\{F_{\text{сер.а.}}\} = \frac{S}{\sqrt{u}}, \quad (3.7)$$

де  $S$  – середнє квадратичне відхилення кожної із випадкових величин.

Відхилення вибіркового середнього від генерального середнього визначимо як

$$\Delta F = F_{\text{сер.а.}} - M\{F\}. \quad (3.8)$$

Підставивши (3.8) і (3.7) в (3.6), після перетворень, отримаємо вираз для необхідної кількості значень функції помилки однакового порядку

$$u = \left( \frac{t_{kp} S}{\Delta F} \right)^2. \quad (3.9)$$

Точність і повторюваність результатів характеризується коефіцієнтом варіації

$$r = \frac{S}{F_{\text{сер.а.}}}.$$

Виразимо  $\Delta F$  через коефіцієнт  $\gamma$ , який означає відношення граничної помилки до середнього арифметичного величини  $\Delta F = \gamma F_{\text{сер.а.}}$ .

Підставляючи визначені таким чином  $r$  і  $\Delta F$  у формулу (3.9), отримуємо вираз для оцінки необхідного числа випадкових величин при заданій вірогідності відхилення їх середнього значення від математичного сподівання

$$u = \frac{t_{\text{кр}}^2 r^2}{\gamma^2}. \quad (3.10)$$

При значенні ймовірності  $p = 95\%$  для ступеня вільності від 7 до 30, критерій Стюдента дорівнює  $t_{\text{кр}} \approx 2$ . Приймаючи  $r = 0,2$ , за формулою (3.10) побудуємо графік  $u = f(\gamma)$  (рис. 3.11).

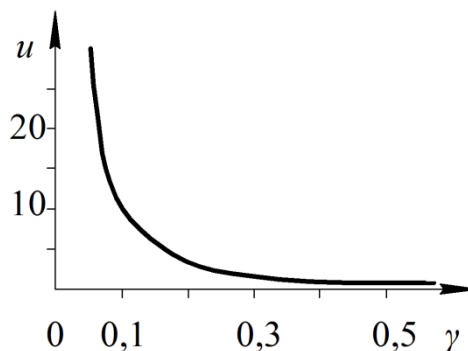


Рис. 3.11. Залежність величини вибірки від ймовірності відхилення випадкової величини від математичного сподівання

З графіка робимо висновки, що при необхідності досягнення такої точності результатів, при якій вони відхиляються від деякого середнього арифметичного на 10%, достатньо використовувати  $u \approx 10$  найменших значень функції помилки.

Розв'язування ОЗЕ при визначенні значення функції помилки  $F$ , як середнього статистичного декількох найменших її значень, дозволило отримати чіткіші залежності оптичних показників від довжини хвилі  $\lambda$  падаючого світла



(рис. 3.12 а, б) у порівнянні з результатами, установленими при використанні  $F_{\min}$  (2.2).

Відомо, що стан вільних електронів нікелю і заліза (характеризується енергетичними підрівнями) – величина ймовірнісна. Отже, результати еліпсометричних вимірювань відображають взаємодії фотонів з випадковими значеннями електронної густини. Цим пояснюється підвищення інформативності графіків, отриманих при використанні методів математичної статистики, – обробка результатів експерименту відповідає моделі взаємодії фотона з електронною хмарою.

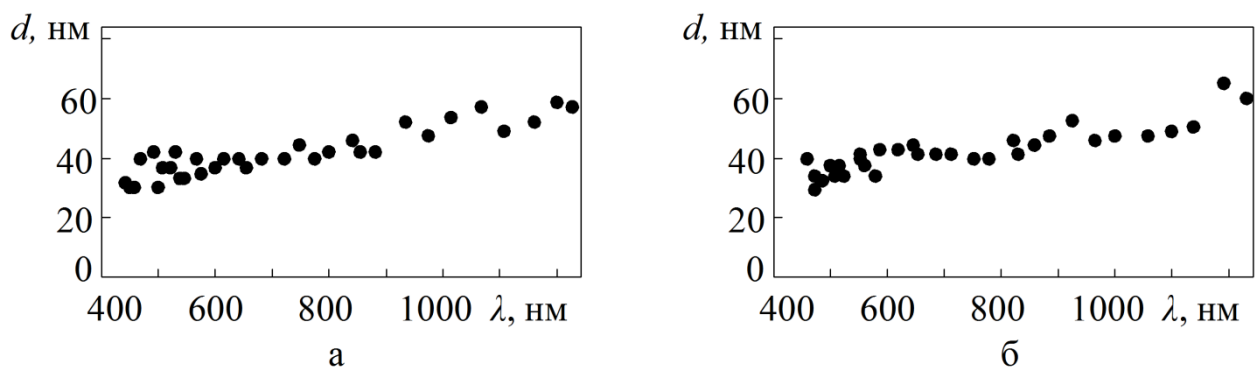


Рис. 3.12. Спектральні залежності оптичної товщини  $d$  поверхневого шару аморфних зразків  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$ , визначені за середньостатистичним значенням  $F_{\min}$  для безконтактної (а) та контактної (б) поверхонь

### 3.3. Область визначення функції помилки

При детальному дослідженні математичної моделі визначення оптичних властивостей безконтактної поверхні полірованого аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$  (табл. А.7) при довжині хвилі падаючого світла  $\lambda = 700$  нм виявилось, що функція помилки  $F$  має деяку множину локальних мінімумів навіть в межах отриманого розв'язку (див. рис. 3.10). Так, в області допустимих значень оптичних параметрів ( $n_1, k_1, n_2, k_2, d$ ), визначених виразом (3.1), мінімум функції помилки приймає значення  $F = 2,848 \cdot 10^{-9}$  (табл. 3.2). Розширення цієї області ( $n_{\max, \min} = n \pm \delta, k_{\max, \min} = k \pm \delta, \delta = 2, d \leq 100$  нм) дає

глибший мінімум,  $F=8,831 \cdot 10^{-10}$ . Тому необхідно досліджувати всю можливу область визначення функції  $F(n_1, n_2, k_1, k_2, d)$ .

Призначимо  $k_{1\min}, k_{2\min} = 0$ , а  $n_{1\min}, n_{2\min} = 1$ , виходячи з того, що  $k \geq 0$  і  $n \geq 1$ . Верхню межу можна визначити з попередніх експериментальних результатів (табл. 3.1, 3.2). Проте, за інших умов експерименту, глобальний мінімум може знаходитися за призначеними верхніми межами оптичних показників. У разі, коли знайдений параметр співпадає з граничним його значенням, алгоритм повинен передбачати можливість розширення області визначення відповідного параметра і виконання повторних обчислень.

Таблиця 3.1

**Значення розрахункових оптичних параметрів поверхневого шару при різних областях визначення**

$\delta$	$n_{1\min}$	$n_1$	$n_{1\max}$	$k_{1\min}$	$k_1$	$k_{1\max}$	$d$ , нм
$\pm 1$	1,595	2,395	3,595	2,267	4,067	4,267	51
$\pm 1,2$	1,395	3,695	3,795	2,067	2,967	4,467	62
$\pm 2$	1,095	3,695	4,595	1,267	2,967	5,267	62

Таблиця 3.2

**Значення розрахункових оптичних параметрів підкладки і функції помилки  $F$  при різних областях визначення**

$\delta$	$n_{2\min}$	$n_2$	$n_{2\max}$	$k_{2\min}$	$k_2$	$k_{2\max}$	$F$
$\pm 1$	1,595	3,295	3,595	2,267	2,267	4,267	$2,848 \cdot 10^{-9}$
$\pm 1,2$	1,395	1,595	3,795	2,067	3,867	4,467	$8,831 \cdot 10^{-10}$
$\pm 2$	1,095	1,595	4,595	1,267	3,867	5,267	$8,831 \cdot 10^{-10}$

Зміна розрахункових значень оптичних показників поверхневого шару і підкладки при зміні меж області визначення функції  $F$  свідчить про можливість наявності чисельних локальних мінімумів. Причому, зі зменшенням значень нижніх меж, функція помилки зменшується, прямує до нуля. Тому у розрахунках слід використовувати не встановлені апріорі мінімальні значення

меж, а найменші їх значення, що допускаються фізичним змістом вирішуваного завдання  $k_{1\min}, k_{2\min} = 0$ , а  $n_{1\min}, n_{2\min} = 1$ .

Таким чином, мінімальною межею вхідних параметрів функції  $F$  будуть ті значення, які є допустимими, виходячи з реальності складеної фізичної моделі. Відкритим залишається питання про верхні межі. Оцінити їх можна за наслідками розрахункового експерименту.

### 3.4. Визначення оптичних показників аморфних сплавів із використанням нейронних мереж

У роботі була використана нейронна мережа, створена у середовищі математичної програми *Matlab*, додаток *Neural Networks Toolbox*. Була вибрана двошарова НМ зворотного розповсюдження помилки з двадцятьма нейронами у прихованому шарі. Мережа має чотири входи, що відповідало кількості експериментальних величин ( $\lambda, I_{90}, I_{45}, I_0$ ), і п'ять виходів – шукані значення оптичних параметрів поверхневого шару і підкладки ( $n_1, k_1, n_2, k_2, d$ ) (рис. 3.13).

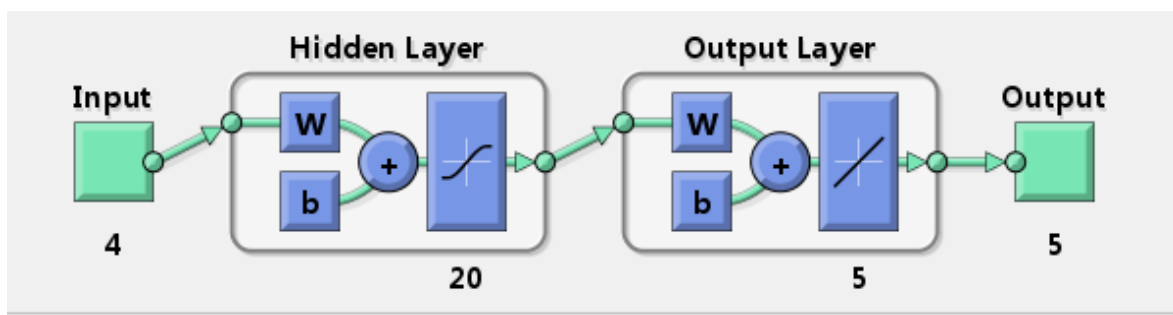


Рис. 3.13. Архітектура нейронної мережі у середовищі математичної програми *Matlab* із використанням додатку *Neural Networks Toolbox*

Застосовувалося “навчання з учителем” за наявності  $m = 14$  навчальних пар ( $P^{14}, T^{14}$ ) за методом Левенберга – Марквардта (табл. 3.3, 3.4). Цей метод, на відміну від інших методів високих порядків визначення напрямків мінімізації використовує замість градієнта якобіан, що дозволяє отримати більше інформації про рельєф функції помилки, ніж її градієнт [159].

Таблиця 3.3

**Входи нейронної мережі**

$m$	1	2	3	4	5	6	7
$\lambda, \text{нМ}$	540	600	640	680	700	810	860
$I_0$	977	547	501	880	395	896	1138
$I_{45}$	580	297	259	431	191	386	466
$I_{90}$	290	154	142	246	111	254	323
$m$	8	9	10	11	12	13	14
$\lambda, \text{нМ}$	880	900	980	1020	1060	1100	1215
$I_0$	865	907	685	399	163	524	67
$I_{45}$	350	362	258	148	53	187	22
$I_{90}$	249	264	200	118	49	160	21

Таблиця 3.4

**Виходи нейронної мережі**

$m$	1	2	3	4	5	6	7
$n_1$	2,034	2,204	2,363	2,235	2,388	2,371	2,584
$k_1$	2,374	2,533	2,687	2,931	3,178	3,174	3,472
$n_2$	2,104	1,764	2,183	2,005	2,238	1,861	2,134
$k_2$	2,374	1,663	1,767	2,101	2,098	1,784	2,252
$d, \text{нМ}$	77	74	82	85	70	86	81
$m$	8	9	10	11	12	13	14
$n_1$	2,729	2,802	2,612	2,649	3,084	2,686	2,895
$k_1$	3,280	3,617	3,852	3,535	4,055	4,073	4,361
$n_2$	1,909	2,242	2,162	1,829	2,694	2,276	3,015
$k_2$	1,780	2,627	1,972	1,195	2,175	2,553	2,081
$d, \text{нМ}$	76	83	78	87	85	83	90

Результати розрахунку оптичних параметрів аморфного сплаву  $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{B}_{20}$  за допомогою НМ для навчальних пар (табл. 3.3, 3.4) представлені у таблиці 3.5.

Таблиця 3.5

## Результати навчання НМ

$m$	1	2	3	4	5	6	7
$n_1$	2,034	2,338	2,363	2,235	2,498	2,371	3,321
$k_1$	2,374	2,707	2,687	2,931	2,877	3,174	4,114
$n_2$	2,104	2,347	2,183	2,005	2,081	1,861	2,569
$k_2$	2,374	2,192	1,767	2,101	1,383	1,784	4,234
$d, \text{нм}$	77	80	82	85	81	86	82
$m$	8	9	10	11	12	13	14
$n_1$	2,562	2,802	2,612	2,649	3,084	2,686	2,895
$k_1$	3,425	3,617	3,852	3,535	4,055	4,073	4,361
$n_2$	2,069	2,242	2,162	1,829	2,694	2,276	3,015
$k_2$	2,054	2,627	1,972	1,195	2,175	2,553	2,081
$d, \text{нм}$	84	83	78	87	85	83	90

Створена таким чином НМ була використана для визначення оптичних показників аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$  (табл. А.3) для усього масиву вихідних експериментальних даних. Спостерігається (рис. 3.14) збіг із результатами, визначеними під час оптимізаційного розв'язування ОЗЕ, виконаному раніше (див. рис. 3.6, 3.8).

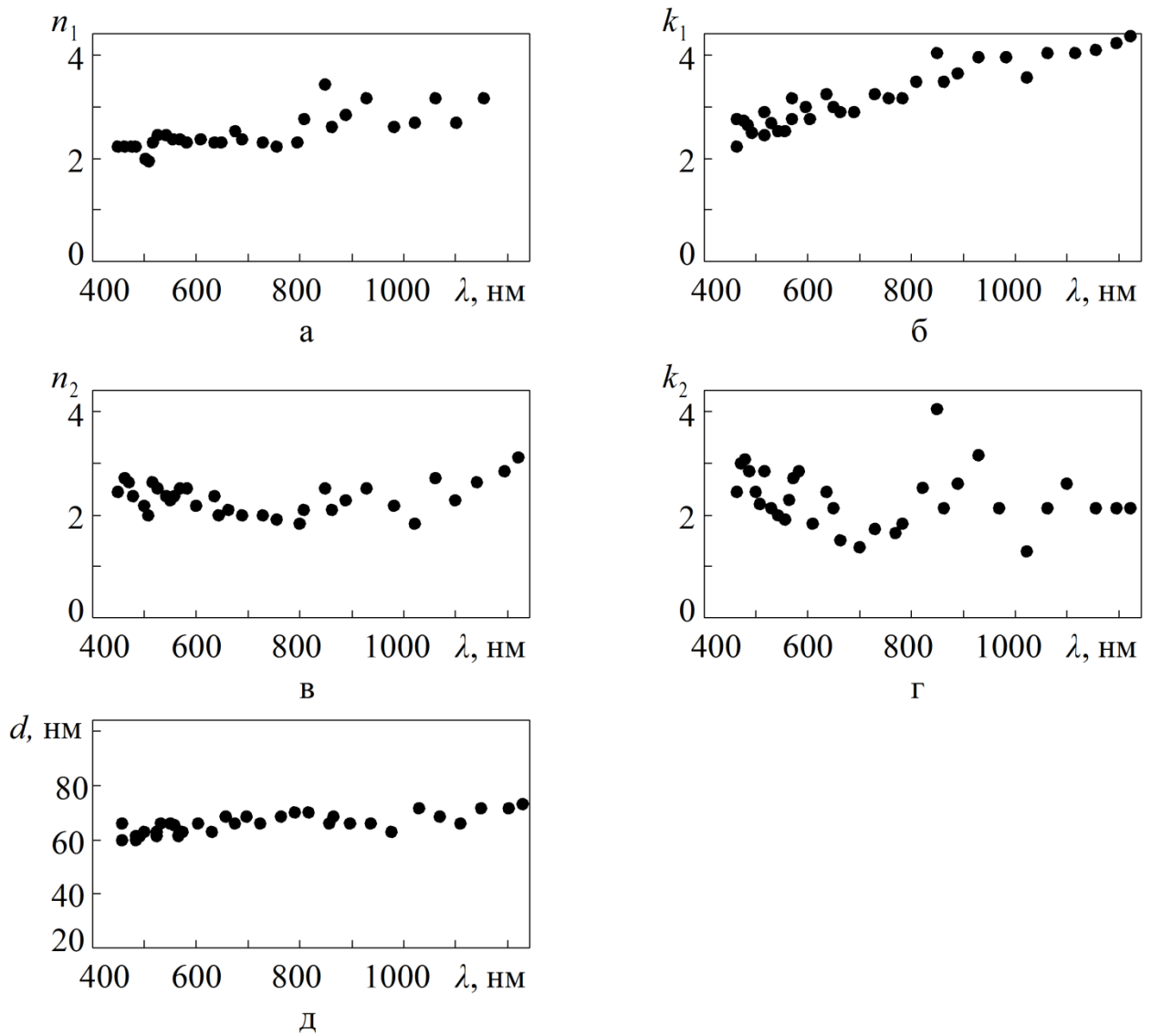


Рис. 3.14. Спектральні залежності оптичних показників безконтактної поверхні та підкладки аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$ , отримані з використанням НМ

### Висновки до розділу 3

1. Проведено моделювання досліджуваних аморфних металевих сплавів на основі моделі відбивальної системи “ізотропна плівка – ізотропна підкладка”. Отримані оптичні характеристики модельних зразків.
2. Проаналізовано поведінку функції помилки в ході розв’язання оберненої задачі еліпсометрії оптимізаційним методом. Межі області визначення шуканих оптичних параметрів встановлені як  $\pm 1$  по відношенню до відповідних ефективних значень системи, оптична товщина поверхневого шару обмежена значеннями  $d \leq 100$  нм.
3. Удосконалена методика розв’язування оберненої задачі еліпсометрії за рахунок використання середньостатистичного значення функції помилки, що дозволило зменшити дисперсію розрахункових значень оптичних параметрів.
4. Запропоновано обмежити область визначення функції помилки мінімально можливими значеннями початкових параметрів і їх верхніми значеннями, установленими на підставі наявних відомостей про об’єкт дослідження.
5. Метод нейронних мереж дозволив збільшити об’єм інформації, отриманої при “точному” розв’язуванні оберненої задачі еліпсометрії, при значному скороченні розрахункових ресурсів.

## РОЗДІЛ 4

## ДОСЯЖНА ТОЧНІСТЬ ВИЗНАЧЕННЯ ОПТИЧНИХ ПАРАМЕТРІВ

## 4.1. Виділення гармонічних складових спектральних залежностей оптичних параметрів

Аналіз залежностей оптичних параметрів сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$  від довжини хвилі падаючого світла показує, що положення переважної більшості точок спектральних залежностей показника заломлення апроксимується трьома гармоніками.

Частини гармонік проведені через найочевидніше розміщені точки. Окреслені таким чином ділянки кривих 1, 2, 3 (рис. 4.1) інтерпольовані на решту точок. Виявилось, що всі розраховані точки задовільно наближені до утворених кривих. Ці самі криві гармонік перенесені на графіки інших експериментів (рис. 4.2) і скрізь спостерігається переважне потрапляння розрахункових точок спектральних залежностей на лінії гармонік.

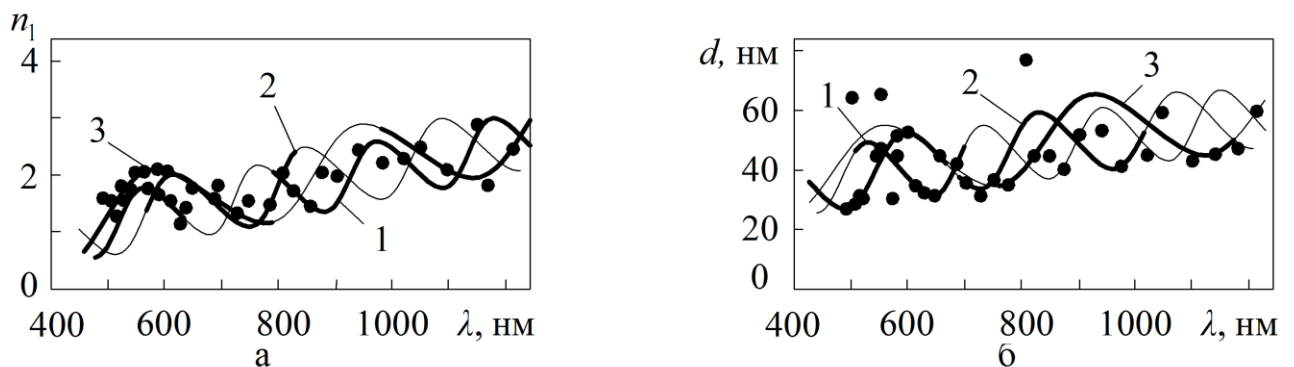


Рис. 4.1. Розміщення гармонік на розрахункових точках спектральних залежностей показника заломлення  $n_1$  (а) і оптичної товщини  $d$  (б) поверхневого шару контактної поверхні аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$

У зв'язку з цим можна припустити, що встановлене явище є наслідком деякої закономірності: кроки отриманих гармонік відповідають довжинам хвиль електромагнітних полів електронів на різних енергетичних підрівнях. Крива 1 відображає взаємодію світлової хвилі з  $3d$ -елекtrонами, крива 2 – з  $4s$ -елекtrонами, крива 3 – з  $3p$ -елекtrонами. Розбіжність положення деяких



точок зі встановленими гармоніками може бути пояснена похибкою експериментів, імовірнісним значенням розрахункових точок, а також ймовірнісним розмежуванням енергетичних рівнів. Можливо також, що ці точки є наслідком взаємодії світлової хвилі з  $2p$ -електронами бору, яких значно менше у порівнянні з електронами згаданих енергетичних рівнів нікелю і заліза (процентний вміст В в аморфному сплаві  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$  поступається Ni і Fe, а  $2p$ -електрон у бору всього один) або з  $3s$ -електронами нікелю і заліза.

Виявилось, що кроки гармонік і їх взаємне розташування при апроксимації спектральних залежностей всіх оптичних параметрів не змінюються. Це підтверджує їх хвильову природу та залежність від енергії електронів різних енергетичних підрівнів.

Аналіз встановлених закономірностей дозволяє зробити висновок, що у цьому інтервалі довжин хвиль середнє значення спектральної залежності кожного оптичного параметру аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$  знаходиться на середній лінії гармонік. При цьому спектральні залежності апроксимуються прямою лінією, а відхилення від неї (чи від середньої лінії гармонік) можна пояснити взаємодією фотонів з електромагнітним полем електронів різних енергетичних рівнів.

Середня лінія гармонік контактної поверхні на спектральних залежностях оптичної товщини  $d$  поверхневого шару проходить вище, ніж у безконтактної (рис. 4.1 б, 4.2 а). Полірування контактної та безконтактної поверхонь (рис. 4.2 в–е), а також бомбардування цих поверхонь іонами аргону (рис. 4.2 б) приводить до пониження середніх ліній гармонік.

Проведені дослідження виявили, що оптичні показники  $(n_1, k_1, n_2, k_2)$  вихідних поверхонь (контактної та безконтактної) характеризуються меншими значеннями для контактної поверхні відносно значень для безконтактної (рис. 4.3–4.6).

Після полірування контактних та безконтактних поверхонь спостерігалось збільшення значень показника заломлення  $n_1$  та поглинання  $k_1$  поверхневого шару (рис. 4.1 а, 4.3, 4.4).

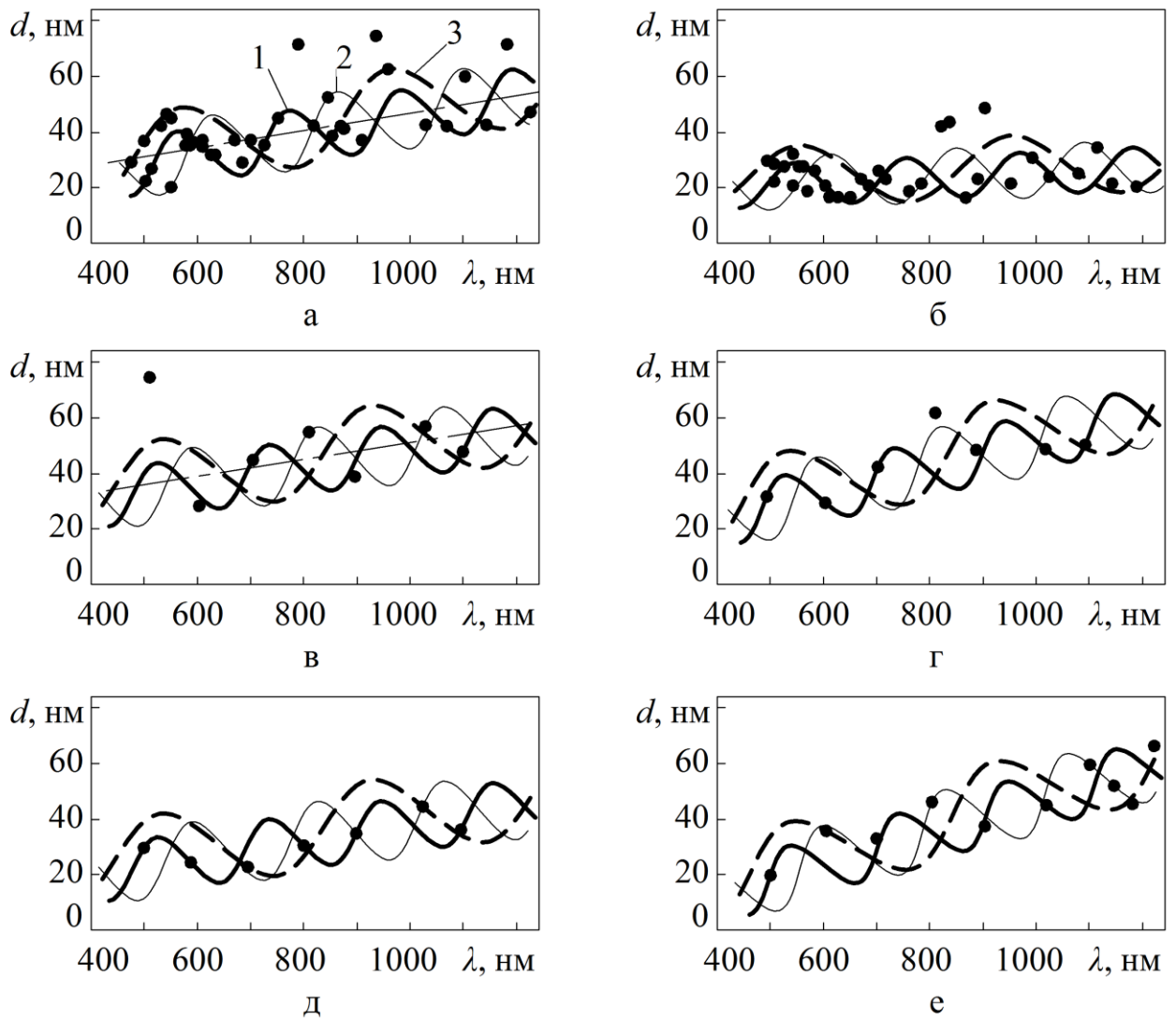


Рис. 4.2. Гармоніки на розрахункових точках спектральних залежностей оптичної товщини  $d$  безконтактної (а), бомбардованої (б), полірованих безконтактної (в) та контактної (г) в експерименті 1, полірованих безконтактної (д) та контактної (е) в експерименті 2 поверхонь стрічок аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$

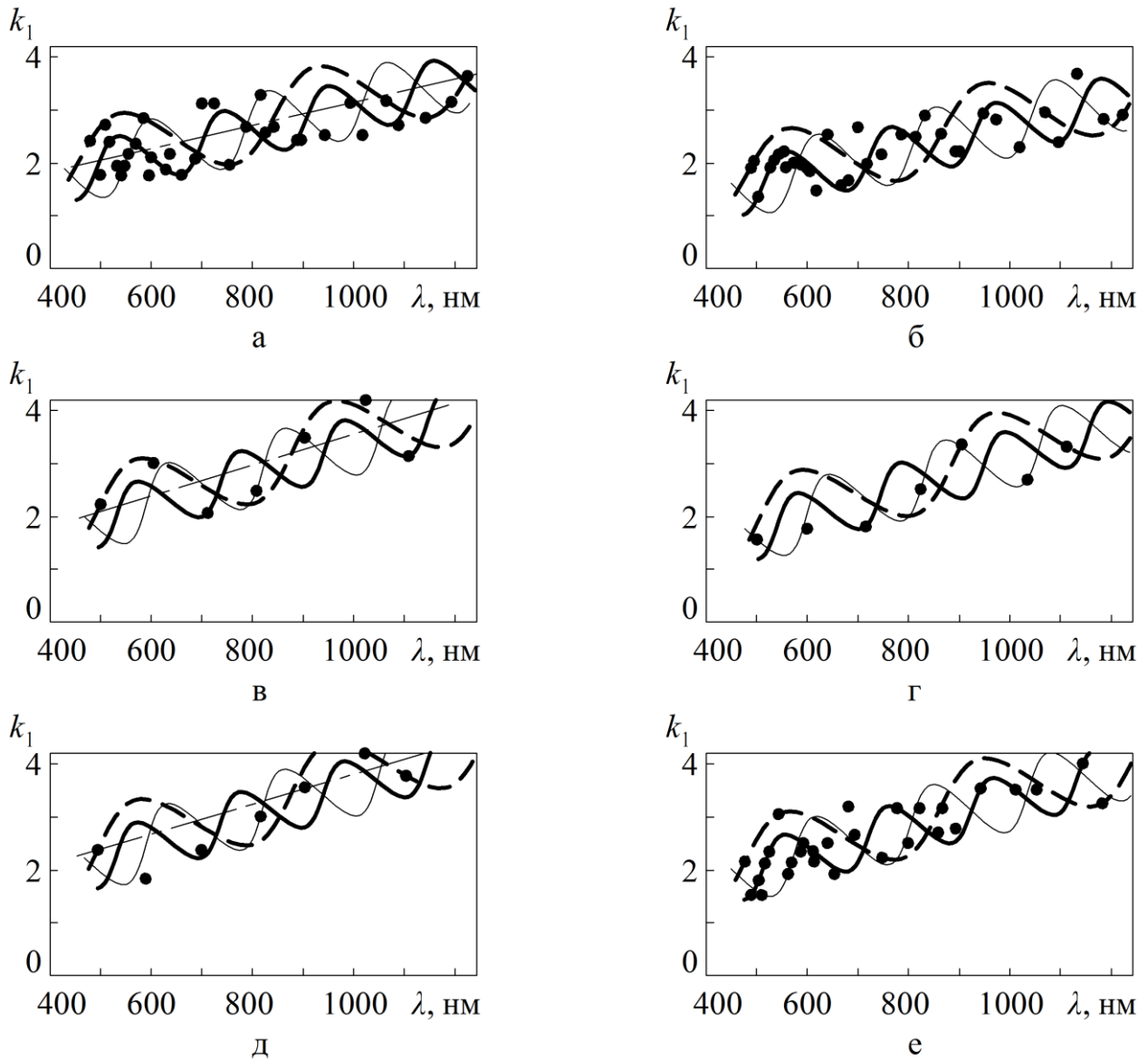


Рис. 4.3. Гармоніки на розрахункових точках спектральних залежностей показника поглинання  $k_1$  поверхневого шару безконтактної (а), контактної (б), полірованих безконтактної (в) та контактної (г) в експерименті 1, полірованої безконтактної в експерименті 2 (д), бомбардованої (е) поверхонь стрічок аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$

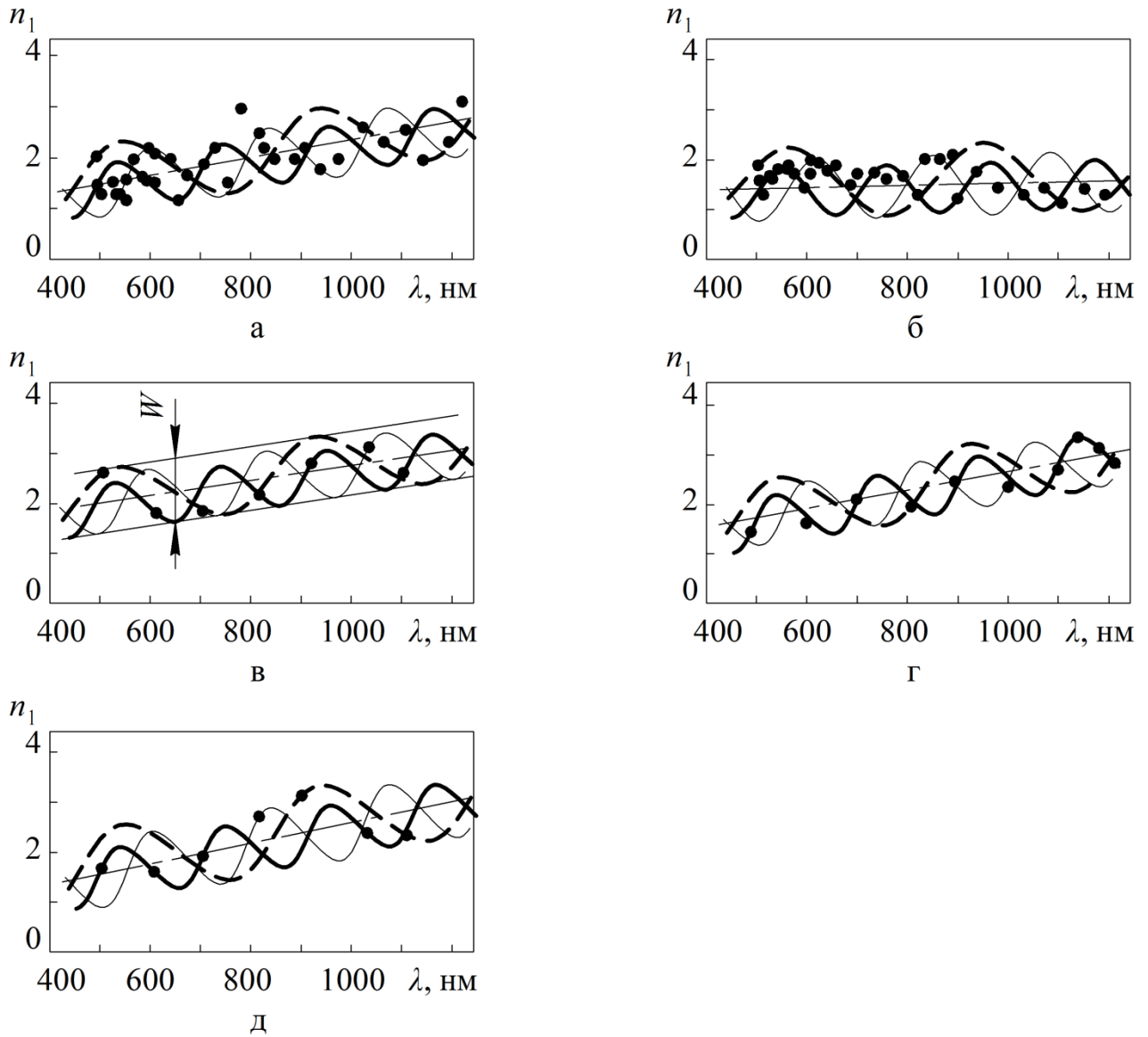


Рис. 4.4. Гармоніки на розрахункових точках спектральних залежностей показника заломлення  $n_1$  поверхневого шару безконтактної (а), бомбардованої (б), полірованих безконтактної (в) та контактної (г) в експерименті 2, полірованої контактної (д) в експерименті 1 поверхонь стрічок аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$

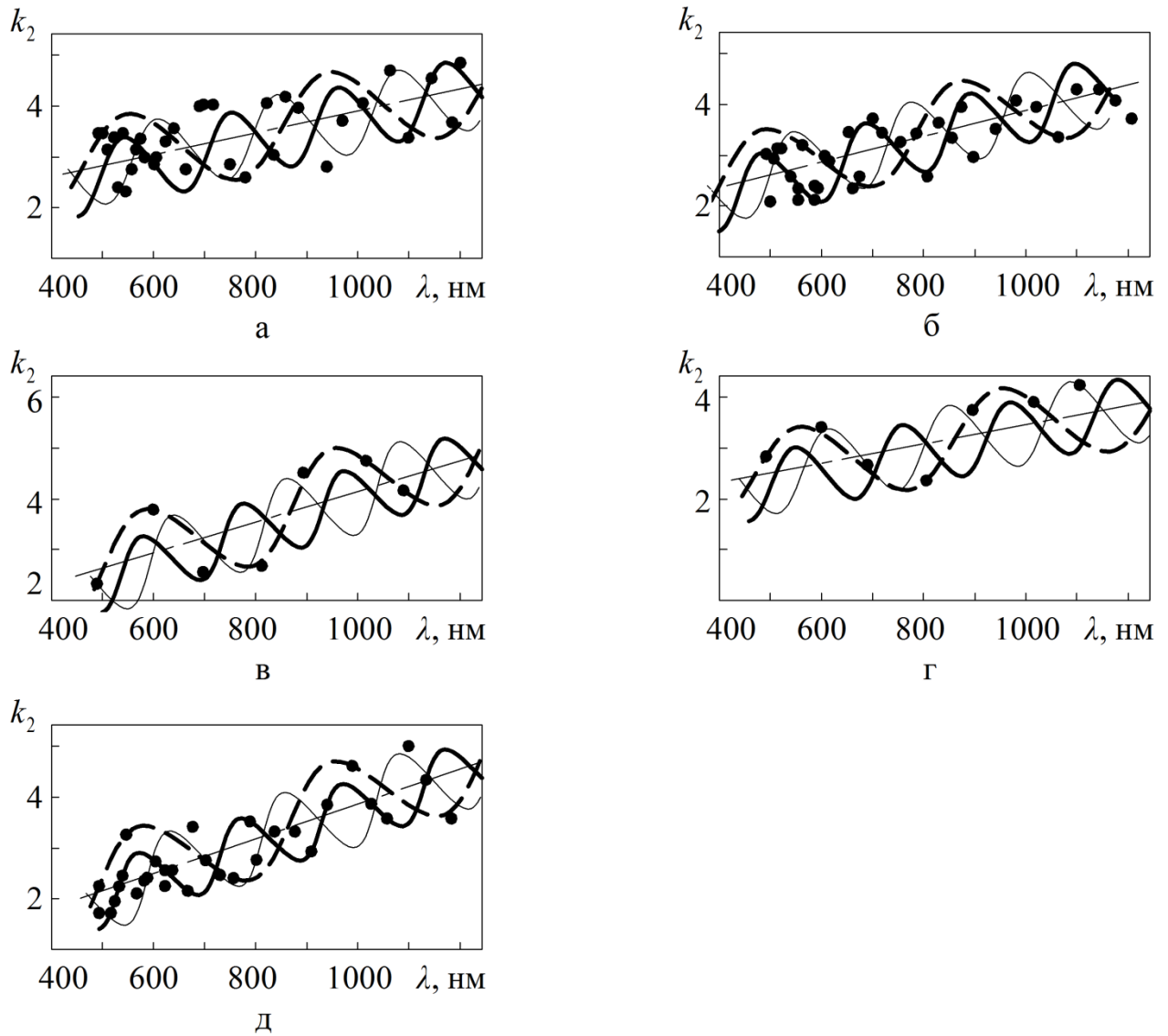


Рис. 4.5. Гармоніки на розрахункових точках спектральних залежностей показника поглинання  $k_2$  “підкладки” безконтактної (а), контактної (б), полірованих безконтактної (в) та контактної (г) в експерименті 1, бомбардованої (д) поверхонь стрічок аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$

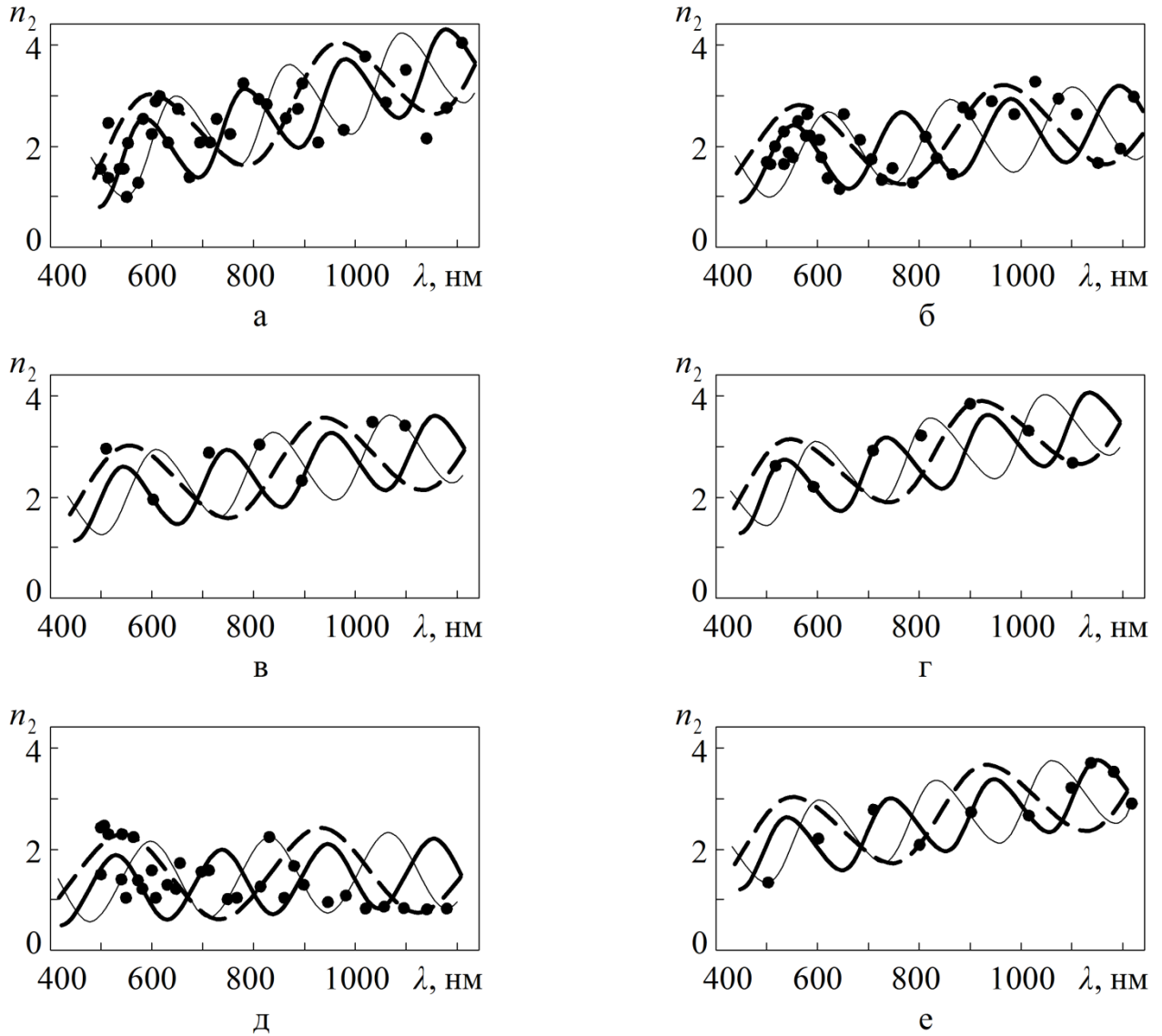


Рис. 4.6. Гармоніки на розрахункових точках спектральних залежностей показника заломлення  $n_2$  “підкладки” безконтактної (а), контактної (б), полірованих безконтактної (в) та контактної (г) в експерименті 1, бомбардованої (д), полірованої контактної в експерименті 2 (е) поверхонь стрічок аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$

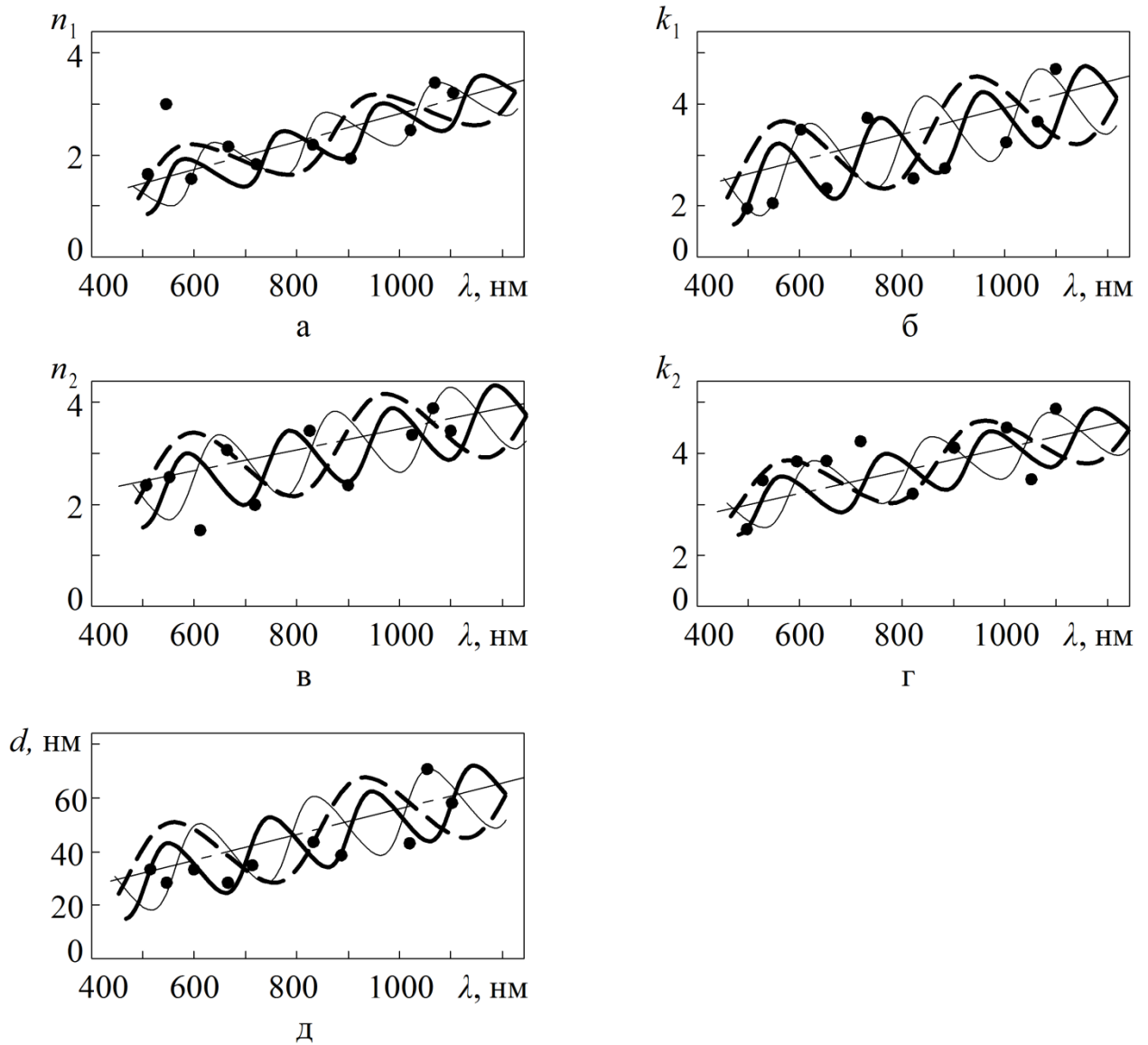


Рис. 4.7. Гармоніки на розрахункових точках спектральних залежностей показника заломлення поверхневого шару  $n_1$  (а), показника поглинання поверхневого шару  $k_1$  (б), показника заломлення “підкладки”  $n_2$  (в), показника поглинання “підкладки”  $k_2$  (г), оптичної товщини поверхневого шару  $d$  (д) стрічки аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{50}\text{B}_{10}$

Аналіз спектральних залежностей оптичних показників після бомбардування (рис. 4.2–4.6) засвідчив, що їх середні лінії на графіках розташовані нижче у порівнянні з вихідними поверхнями. При цьому в досліджуваному діапазоні хвиль майже не змінюється кут нахилу апроксимувальних прямих  $d = f(\lambda)$ ,  $n_1 = f(\lambda)$ ,  $n_2 = f(\lambda)$ .

#### 4.2. Модель взаємодії світлової хвилі з електромагнітним полем електрона

Можливість виділення гармонічних складових спектральних залежностей оптичних показників аморфного сплаву можна пояснити проявом хвильових властивостей електрона і падаючого світла. Стан електрона в атомі описується рівнянням Е. Шредінгера для стоячої електромагнітної хвилі [188]

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{h^2}[E - U(x)]\psi = 0, \quad (4.1)$$

де  $m$  – маса електрона;

$h = 6,62 \cdot 10^{-34}$  – постійна Планка;

$E$  – повна енергія електрона в атомі;

$U(x)$  – потенційна енергія;

$\psi$  – хвильова функція.

Значення  $\psi$  може бути позитивним і негативним, а густина електронної хмари пропорційна квадрату хвильової функції. Таким чином, хвильова функція, що входить до рівняння Шредінгера, відображає циклічний процес. Відповідно до рівняння де Бройля довжина хвилі електрона дорівнює

$$\lambda_e = \frac{h}{mV}, \quad (4.2)$$

де  $V$  – швидкість електрона.



Коли збігаються максимуми світлової хвилі і хвилі електрона, відбувається збільшення амплітуди досліджуваного оптичного параметра. При подальшому поступовому збільшенні довжини світлової хвилі ці максимуми розходяться і чергове максимальне значення оптичного параметра можливе, коли знову збігаються максимум світлової хвилі і наступний максимум хвилі електрона (рис. 4.8).

Отже, різниця між довжинами світлових хвиль, які складають сусідні максимуми утвореної гармоніки на спектральній залежності того чи іншого оптичного параметру, відповідає довжині хвилі електрона  $\lambda_e$ . Згідно цьому змінюються оптичні параметри  $y$ , що відображають взаємодію світла з поверхнею аморфного сплаву (рис. 4.9).

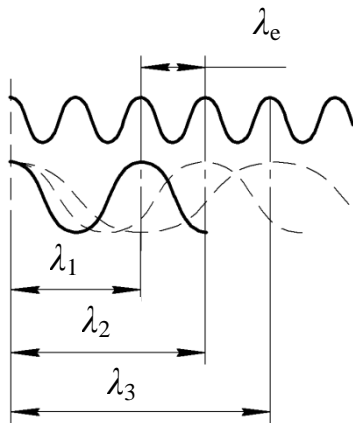


Рис. 4.8. Схема збігу максимумів різних хвиль

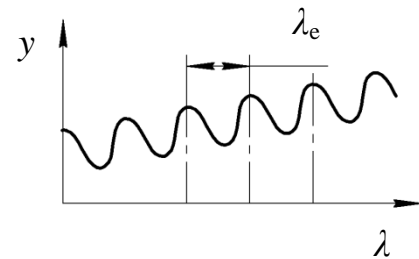


Рис. 4.9. Залежність коливання значень оптичних параметрів  $y$  від довжини хвилі електрона

Енергія електрона визначається як  $E = mV^2 / 2$ . Отримуючи з цього виразу  $V$ , підставляючи його до (4.2), знайдемо

$$\lambda_e = \frac{h}{\sqrt{2mE}}. \quad (4.3)$$

Отже, чим більша енергія електрона, тим менша його довжина хвилі. Розподіл електронів у атомах, що входять до складу аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$ , наведено у таблиці 4.1.

Рівні  $K$ ,  $L$ ,  $M$ ,  $N$  визначають деяку енергетичну зону, у межах якої точне значення енергії електрона визначається підрівнем. При цьому, відповідно до правила В. М. Клечковського заповнення орбіталей, збільшення енергії на енергетичних підрівнях відбувається у такому порядку [189]

$$3s < 3p < 4s < 3d. \quad (4.4)$$

Таблиця 4.1

#### Енергетичні рівні і підрівні в атомах Ni, Fe, B

	$K$	$L$		$M$			$N$
	$1s$	$2s$	$2p$	$3s$	$3p$	$3d$	$4s$
B	2	2	1				
Fe	2	2	6	2	6	6	2
Ni	2	2	6	2	6	8	2

Тому довжина хвилі  $3d$ -електронів, виходячи зі співвідношення (4.3), для перерахованих атомів найменша. Довжини хвиль електронів відповідних енергетичних підрівнів збільшуються згідно виразу (4.4). Отже, перша гармоніка є результатом взаємодії світлової хвилі з  $3d$ -електронами, друга гармоніка – з  $4s$ -електронами і третя гармоніка – з  $3p$ -електронами (див. рис. 4.1).

Апроксимація гармоніками результатів розрахунку оптичних параметрів дозволяє оцінити точність еліпсометричних розрахунків. Середнє квадратичне відхилення, що характеризує розсіювання значень, визначається виразом

$$s = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - y_{\text{сер}})^2}{n-1}}.$$

Найчастіше зустрічається і застосовується теоретичний закон розсіювання випадкової величини Гауса (нормальний закон). При цьому густина розподілу за нормальним законом визначається рівнянням

$$p(y) = \frac{1}{s\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(y_i - y_{\text{сер}})^2}{2s^2}}.$$

За величину поля розсіювання беруть зону, що дорівнює  $6s$ . У межах цієї зони знаходяться 99,73 всіх значень параметрів. Якщо вважати, що розподіл випадкових значень оптичних параметрів відбувається за нормальним законом, то

$$s = \frac{W}{6}, \quad (4.5)$$

де  $W$  – відстань між лініями, паралельними середній лінії і проведеними через максимуми і мінімуми гармонік (рис. 4.4 в).

Аналіз отриманих графіків (рис. 4.2–4.7) за допомогою виразу (4.5) дозволяє оцінити точність еліпсометричного методу, що залежить від середньоквадратичного відхилення досліджуваного оптичного параметра, яке визначається імовірнісним характером взаємодії фотонів і електронів.

Аналіз результатів досліджень (рис. 4.1–4.7) засвідчує, що середні значення величин полів розсіювання показників заломлення та поглинання дорівнюють:  $W_d = 25,711 \cdot 10^{-9}$  м;  $W_{k1} = 1,399$ ;  $W_{n1} = 1,194$ ;  $W_{k2} = 1,559$ ;  $W_{n2} = 1,611$ . Тоді середні квадратичні відхилення досліджуваних оптичних показників становлять:  $s_d = 4,285 \cdot 10^{-9}$  м;  $s_{k1} = 0,233$ ;  $s_{n1} = 0,199$ ;  $s_{k2} = 0,26$ ;  $s_{n2} = 0,268$ .

З іншого боку, дослідження експериментальних пар для кожного з цих оптичних параметрів показало (рис. 3.7, рис. 3.8 в, г), що максимальні розсіювання їх значень відповідно дорівнюють:  $w_d = 21,86 \cdot 10^{-9}$  м;  $w_{k1} = 1,195$ ;

$w_{n1} = 0,78$ ;  $w_{k2} = 1,533$ ;  $w_{n2} = 1,302$ . Ці значення попадають у межі визначених полів розсіювання.

### **4.3. Порівняння встановлених еліпсометрично значень довжин хвиль 3d-, 3p-, 4s-електронів з даними, отриманими іншими методами**

Збіг розрахункових точок, отриманих у ході моделювання аморфних сплавів  $Ni_{40}Fe_{40}B_{20}$  і  $Ni_{40}Fe_{50}B_{10}$  зі встановленими гармоніками вказує на можливість аналізу їх електронної структури методом еліпсометрії (рис. 4.1–4.7). Отримані закономірності дозволяють припустити, що довжина хвилі кожною з гармонік відповідає довжині хвилі електронів відповідних енергетичних підрівнів. Безпосереднє вимірювання на графіках дає наступні значення довжин хвиль:

- 3d-електрони –  $\lambda = 216$  нм;
- 4s-електрони –  $\lambda = 240$  нм;
- 3p-електрони –  $\lambda = 396$  нм.

Неповний збіг усіх точок з гармоніками можна пояснити впливом 3s-електронів металів і 2p-електронів бору, похибкою експерименту та ймовірнісною моделлю розташування енергетичних рівнів.

Апроксимація гармоніками спектральних залежностей досліджених аморфних сплавів дозволяє, при, здавалося б, хаотичному розміщенні розрахункових точок у відповідній системі координат, зробити висновки, що узгоджуються з логікою експерименту та загальнонауковими положеннями.

По-перше, оптичні характеристики поверхневого шару визначаються фізичним станом поверхні. Наприклад, чим вища шорсткість, тим більша товщина оптичного шару  $d$  і менше значення показників заломлення  $n_1$  і поглинання  $k_1$ .

По-друге, оптичні характеристики “підкладки” менш чутливі до змін, що відбуваються у поверхневому шарі, і збільшуються із збільшенням довжини хвилі падаючого світла  $\lambda$ . Тому, для конкретного аморфного сплаву, можна встановити середнє значення показників заломлення  $n_2$  і поглинання  $k_2$

“підкладки” для кожного значення  $\lambda$  (див. рис. 4.8, 4.9). При заданому  $\lambda$  їх можна розрахувати за залежностями типу (3.5).

Слід зазначити, що можливість виділення гармонічна спектральних залежностей оптичних показників досліджуваних сплавів пояснюються не процентним вмістом нікелю і заліза в сплавах, а саме їх електронною структурою, що підтверджується спектроеліпсометричним дослідженням зразка нікелю (рис. 4.10). Кроки гармонік на цьому рисунку збігаються з кроками раніше встановлених гармонік (рис. 4.1–4.7).

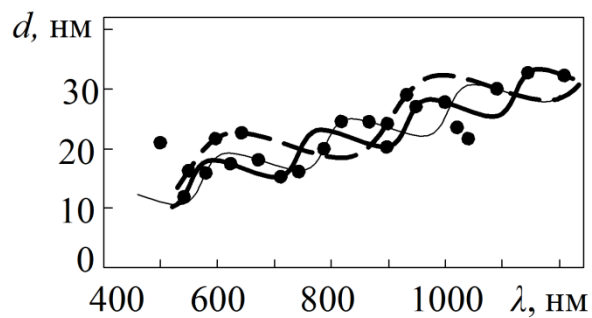


Рис. 4.10. Гармоніки на спектральній залежності оптичної товщини  $d$  поверхневого шару зразка нікелю

Залежність оптичних параметрів поверхневого шару від взаємодії світлової хвилі з електромагнітними полями електронів, що спостерігається на графіках спектральних залежностей, може бути доведена розрахунками. Для цього слід скористатися експериментальними результатами, взятими із наукових джерел.

Відомо, що енергії  $3d$ - і  $4s$ -електронів приблизно однакові, значення енергії для  $3d$ -електронів більші енергії  $4s$ -електронів. Так апроксимація хвилі  $4s$ -електрона дає довжину хвилі  $\lambda = 241$  нм, за якою можна розрахувати енергію  $E_{4s} = ch/\lambda = 5,2$  еВ, де  $c$  – швидкість світла,  $h$  – стала Планка. Енергія  $3d$ -електрона, при  $\lambda = 216,1$  нм становить  $E_{3d} = ch/\lambda = 5,7$  еВ.

Підтвердження факту приблизної рівності значень енергій підрівнів  $3d$ - та  $4s$ - і те що  $E_{3d} > E_{4s}$ , дозволяє стверджувати про правильність графічного визначення довжин хвиль електронів.

Згідно з роботою Ю. Н. Горностирєва [190], енергія  $3p$ -електронів менша 5 еВ. За наслідками проведених еліпсометричних досліджень довжина хвилі  $3p$ -електронів має значення  $\lambda = 396,1$  нм. Тоді енергія дорівнює  $E_{4s} = ch/\lambda = 3,13$  еВ, що менше 5 еВ.

Вище зазначене дозволяє стверджувати про правильність графічної апроксимації спектральних залежностей оптичних параметрів досліджених аморфних сплавів.

#### Висновки до розділу 4

1. Виявлено, що положення на графіках спектральних залежностей оптичних параметрів аморфних сплавів  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$ ,  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{50}\text{B}_{10}$  переважної більшості розрахункових точок апроксимується гармоніками з незмінним кроком і величиною відносного зсуву, які визначаються електронною структурою зразка. Отримані значення довжин хвиль:  $\lambda = 216$  нм ( $3d$ -електрони),  $\lambda = 240$  нм ( $4s$ -електрони),  $\lambda = 396$  нм ( $3p$ -електрони).
2. Проведена оцінка досяжної точності еліпсометричних вимірювань шляхом апроксимації гармоніками результатів експериментальних досліджень та прийняттям нормального закону їх розподілу:  $s_{k1} = 0,233$ ;  $s_{n1} = 0,199$ ;  $s_{k2} = 0,26$ ;  $s_{n2} = 0,268$ ;  $s_d = 4,285 \cdot 10^{-9}$  м.
3. Доведено спектроеліпсометричними дослідженнями зразків нікелю, що виділення гармонік на спектральних залежностях оптичних показників сплавів  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$ ,  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{50}\text{B}_{10}$  пояснюються не процентним вмістом нікелю і заліза в сплавах, а саме їх електронною структурою.
4. Установлено, що розміщення середніх ліній гармонік спектральних залежностей оптичної товщини, показників заломлення і поглинання поверхневого шару визначаються станом якості поверхні: чим вища шорсткість, тим вище розміщується середня лінія для оптичної товщини поверхневого шару  $d$  і нижче – для показників заломлення  $n_1$  і поглинання  $k_1$ .

## РОЗДІЛ 5

## ВПЛИВ ЗОВНІШНІХ ЧИННИКІВ НА ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ТА ОБ'ЄМНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ АМОРФНИХ МЕТАЛЕВИХ СПЛАВІВ

## 5.1. Вплив деформаційної дії на оптичні параметри поверхневих шарів аморфних сплавів

Аналіз спектральних залежностей оптичної товщини поверхневого шару, оптичної провідності аморфного, деформованого і кристалічного сплавів дозволяє визначити вплив деформаційної дії на їх структуру.

У результаті проведених експериментів у діапазоні довжин хвиль падаючого світла  $\lambda = (500-2500)$  нм (табл. А.12–А.14) і виконаних розрахунків отримано спектральні залежності оптичної товщини  $d$  поверхневого шару аморфного сплаву  $Ni_{85}C_{15}$  до і після деформації, а також матеріалу такого ж хімічного складу з кристалічною структурою.

Установлено, що досліджувані матеріали в різних умовах експерименту характеризуються значною дисперсією оптичних параметрів (рис. 5.1), тобто спостерігається перетин їх полів розсіювання. З метою подальшого аналізу було проведено усереднення цих результатів методом найменших квадратів.

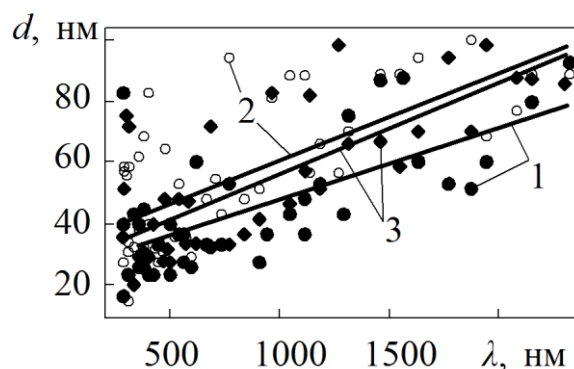


Рис. 5.1. Спектральні залежності оптичної товщини  $d$  поверхневого шару сплаву  $Ni_{85}C_{15}$  (1 – аморфний; 2 – деформований аморфний; 3 – кристалічний)

Видно, що залежності оптичної товщини  $d$  поверхневого шару від довжини хвилі падаючого світла для зразків після пластичної деформації і з кристалічною структурою змінюються однаково щодо вихідного зразка

(рис. 5.1). Таким чином, можна зробити висновок, що фізичні властивості зразків аморфного сплаву  $\text{Ni}_{85}\text{C}_{15}$  після пластичної деформації наближаються до властивостей матеріалу такого самого хімічного складу з кристалічною структурою. Це може бути результатом перетворення структури аморфного сплаву під впливом пластичної деформації на кристалічну структуру. Відомо [191], що структурні перетворення в аморфних тілах відбуваються при зміні інтенсивності руху атомів і відстані між ними. Оскільки аморфний стан не є стабільним і знаходиться в термодинамічно нерівноважному стані, то при підвищенні внутрішньої енергії, за рахунок виконання механічної роботи або передачі тепла, можливий початок процесу кристалізації. У роботах [119, 129] також наголошується, що механізм кристалізації пов'язаний із підвищенням температури на лініях зсуву. Отже, зближення значень оптичної товщини  $d$  пластично деформованого і кристалічного сплавів даної сукупності атомів (рис. 5.1) може бути ознакою утворення схожих структур. Тобто пластична деформація аморфного сплаву змінює його оптичні характеристики у бік властивостей сплаву того самого хімічного складу з кристалічною структурою. Це дозволяє стверджувати, що при деформації відбувається зростання кількості впорядкованих областей в аморфній матриці.

Вплив пластичної деформації на оптичну провідність  $\sigma$  аморфного сплаву  $\text{Ni}_{85}\text{C}_{15}$  (рис. 5.2) досліджений у діапазоні довжин хвиль  $\lambda = (200\text{--}2400)$  нм. Значення  $\sigma$  визначалося через оптичні константи провідного середовища співвідношенням  $\sigma = nkc / \lambda$  ( $c$  – швидкість світла).

Отримані результати також свідчать про те, що відбуваються зміни у спектрі оптичної провідності  $\sigma$  сплавів після їх пластичної деформації. У вихідному сплаві для спектра дисперсійної залежності оптичної провідності  $\sigma$  характерні широкі мінімуми при довжині хвилі  $\lambda_1 = (200\text{--}327)$  нм і  $\lambda_2 = (776\text{--}1034)$  нм. Після пластичної деформації зразків сплаву мінімуми у спектрі  $\sigma$  зміщуються у бік зменшення довжини хвилі. При цьому оптична провідність  $\sigma$  в ультрафіолетовій області спектра зростає, а в інфрачервоній області майже не



змінюється. Подібна залежність виявляється і в спектрах оптичної провідності зразків сплавів, що закристалізувалися: положення мінімумів зміщується в ультрафіолетову область спектра.

Таким чином, деформація зразків та їх кристалізація під час відпалювання приводить до однакових перетворень у структурі сплаву. А

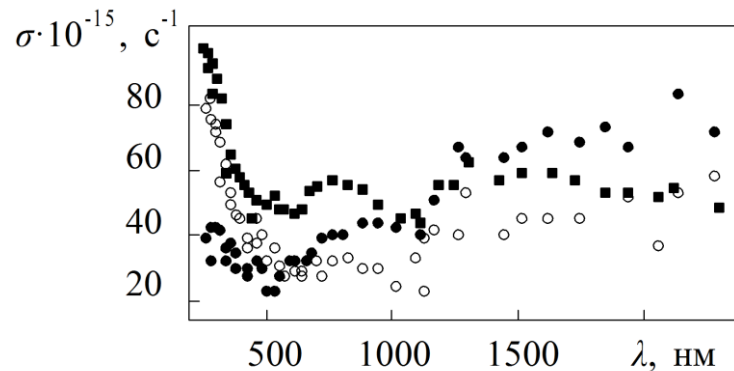


Рис. 5.2. Спектральні залежності оптичної провідності  $\sigma$  аморфного (●), деформованого аморфного (○) і кристалічного сплавів (■)  $\text{Ni}_{85}\text{C}_{15}$

оскільки при відпалюванні відбувається кристалізація, то це дозволяє припустити, що і пластична деформація аморфних сплавів викликає утворення кристалічних структур.

## 5.2. Об'ємні частки фазових складових аморфних сплавів

Відгук системи на зовнішнє електричне поле характеризується ефективною діелектричною функцією  $\tilde{\epsilon}$ . При цьому значення ефективної діелектричної функції  $\tilde{\epsilon}$  визначається локальною мікроструктурою матеріалу і не залежить від форми досліджуваного зразка. Розрізняють два основні різновиди мікроструктури (топології) гетерогенних систем [192, 193]: матричну і статистичну.

Матрична топологія припускає, що частинки дисперсної фази розподілені у безперервній матриці [194]. Співвідношення між ефективною діелектричною функцією  $\tilde{\epsilon}$  гетерогенної системи, діелектричними функціями матриці  $\epsilon_1$  і

дисперсних фаз  $\varepsilon_i$ , а також їх об'ємними частками  $f_i$  (співвідношення Максвелла – Гарнетта [195]) наступне

$$\frac{\tilde{\varepsilon} - \varepsilon_1}{\tilde{\varepsilon} + (D-1)\varepsilon_1} = \sum_{i=2}^n f_i \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_1}{\varepsilon_i + (D-1)\varepsilon_1}, \quad (5.1)$$

де  $D$  – розмірність гетерогенної системи.

Статистична топологія характеризується хаотичною флуктуацією у просторі окремих фаз, які вважаються рівноцінними. Для такої топології застосовується рівняння Бруггемана – Ландауера, що має вигляд

$$\sum_{i=1}^n f_i \frac{\varepsilon_i - \tilde{\varepsilon}}{\varepsilon_i + (D-1)\tilde{\varepsilon}} = 0. \quad (5.2)$$

При використанні середніх значень показників заломлення і поглинання, об'ємні частки фазових складових визначаються рівнянням Ліхтенекера [192]:

$$\tilde{\varepsilon}^2 = f_1 \varepsilon_1^x + f_2 \varepsilon_2^x + f_3 \varepsilon_3^x.$$

Граничні значення показника  $x \in [-1; 1]$  дають абсолютні вінерівські межі значенням  $\tilde{\varepsilon}$ . Для середніх значень комплексного показника заломлення  $N$  величина  $x = 0,5$ .

Ефективна діелектрична функція  $\tilde{\varepsilon}$  – величина комплексна  $\tilde{\varepsilon} = \text{Re} \tilde{\varepsilon} + i \text{Im} \tilde{\varepsilon}$ . Оскільки при взаємодії світла з поверхнею аморфного сплаву відбувається поглинання енергії, то  $\text{Im} \tilde{\varepsilon} > 0$ .

Гетерогенна система поверхневого шару аморфного сплаву може бути описана як аморфна матриця з кристалічними включеннями [34]. Це відповідає співвідношенню Максвелла – Гарнетта. Таке уявлення характерне при низькому процентному вмісті включень у безперервній матриці. При

збільшенні об'ємної частки включень (коли відсоток включення перевершує відсоток вихідної матриці) доцільним можна вважати використання співвідношень Бруггемана – Ландауера.

Для систем типу метал–метал успішно застосовується наближення Бруггемана. У той же час у випадку систем типу метал–діелектрик воно часто стає неспроможним у зв'язку із сильним впливом мікроструктури сплаву на його властивості і виникає необхідність використання симетризованого наближення Максвелла – Гарнетта, яке більш тонко враховує топологію досліджуваної системи [196].

Вирази (5.1) і (5.2) можна використовувати для аналізу об'ємного вмісту кристалічних включень і повітряної фази в аморфній матриці. Якщо  $\tilde{\varepsilon} = \text{Re } \tilde{\varepsilon} + i \text{Im } \tilde{\varepsilon}$ , то уявну і дійсну частину можна визначити за встановленими при розв'язанні оберненої задачі еліпсометрії значеннями показників поглинання і заломлення [98]:  $\text{Re } \varepsilon = n^2 - k^2$ ,  $\text{Im } \varepsilon = 2nk$ .

Тоді

$$\varepsilon = n^2 - k^2 + i2nk = (n + ik)^2. \quad (5.3)$$

Вираз (5.3) можна отримати також з формули комплексного показника заломлення поглинаючого середовища при  $\mu \approx 1$   $N = \sqrt{\varepsilon\mu} = n + ik$ .

Якщо індекси 1, 2, 3 надати відповідно матриці, фазі кристалічних включень і повітряній фазі, то співвідношення Максвелла – Гарнетта для деякого об'єму аморфного сплаву запишемо як

$$\frac{\tilde{\varepsilon}^{ам, деф} - \varepsilon_1^{ам}}{\tilde{\varepsilon}^{ам, деф} + 2\varepsilon_1^{ам}} = f_2 \frac{\varepsilon_2^{кр} - \varepsilon_1^{ам}}{\varepsilon_2^{кр} + 2\varepsilon_1^{ам}} + f_3 \frac{\varepsilon_3^{нов} - \varepsilon_1^{ам}}{\varepsilon_3^{нов} + 2\varepsilon_1^{ам}} \quad (5.4)$$

при цьому рівняння Бруггемана-Ландауера наступне

$$f_1 \frac{\varepsilon_1^{ам} - \tilde{\varepsilon}^{ам, деф}}{\varepsilon_1^{ам} + 2\tilde{\varepsilon}^{ам, деф}} + f_2 \frac{\varepsilon_2^{кр} - \tilde{\varepsilon}^{ам, деф}}{\varepsilon_2^{кр} + 2\tilde{\varepsilon}^{ам, деф}} + f_3 \frac{\varepsilon_3^{нов} - \tilde{\varepsilon}^{ам, деф}}{\varepsilon_3^{нов} + 2\tilde{\varepsilon}^{ам, деф}} = 0, \quad (5.5)$$

$$f_1 + f_2 + f_3 = 1, \quad (5.6)$$

де  $\tilde{\varepsilon}^{ам, деф} = \tilde{\varepsilon}^{ам, деф}(n_1^{ам, деф}, k_1^{ам, деф})$  – ефективне значення діелектричної проникливості;

$\varepsilon_1^{ам} = \varepsilon_1^{ам}(n_2^{ам}, k_2^{ам})$ ,  $\varepsilon_2^{кр} = \varepsilon_2^{кр}(n_2^{кр}, k_2^{кр})$ ,  $\varepsilon_3^{нов} = \varepsilon_3^{нов}(1, 0)$  – значення діелектричної проникливості аморфної, кристалічної і повітряної фаз відповідно;

$f_1, f_2, f_3$  – об'ємні частки аморфної, кристалічної, повітряної фаз відповідно.

$ам, деф, кр, нов$  – індекси, що відповідають аморфному, деформованому аморфному, кристалічному сплавам і повітряним включенням [31].

При цьому в залежностях (5.4) і (5.5) використані не безпосередньо розрахункові результати, а середні значення оптичних параметрів спектральних залежностей, отриманих апроксимацією середніх ліній гармонік (рис. 5.3, 5.4).

Якщо залежності будь-якого оптичного параметра аморфного сплаву від довжини світлової хвилі апроксимувати гармоніками, то тоді кожне з розрахункових значень є випадковою величиною, поле розсіювання якої обмежене їх амплітудами. Тому середню лінію гармонік можна вважати геометричним місцем середніх арифметичних значень встановлених оптичних параметрів, а область розміщення гармонік по обидва боки від середньої лінії – областю їх дисперсії. Оскільки середні лінії гармонік – прямі, то і геометричне місце середніх оптичних параметрів  $p_{сер}$  при зміні довжини хвилі падаючого світла  $\lambda$  – пряма лінія

$$p_{сер} = A + B\lambda. \quad (5.7)$$

У результаті експериментальних досліджень взаємодії світла з поверхнею встановлені постійні величини у виразі (5.7) для середніх значень показників

поглинання і заломлення поверхневого шару і “підкладки” аморфного сплаву  $Ni_{85}C_{15}$ , кристалічного сплаву  $Ni_{85}C_{15}$  і деформованого аморфного сплаву  $Ni_{85}C_{15}$  (табл.5.1).

Таблиця 5.1

**Залежності середніх значень оптичних параметрів  $p_{сер}$  від довжини хвилі  $\lambda$  світла**

$p_{сер}$	Сплав $Ni_{85}C_{15}$									
	аморфний		кристалічний				деформований			
			експ. №1		експ. №2		експ. №1		експ. №2	
	$A$	$B \cdot 10^6$	$A$	$B \cdot 10^6$	$A$	$B \cdot 10^6$	$A$	$B \cdot 10^6$	$A$	$B \cdot 10^6$
$k_{1 сер}$	1,27	1,878	0,853	1,591	0,955	1,434	0,926	1,404	0,888	1,646
$n_{1 сер}$	1,263	0,969	1,325	1,004	1,196	1,058	1,491	0,803	1,328	1,002
$k_{2 сер}$	1,869	1,682	1,935	0,955	2,039	1,103	2,724	1,433	1,174	1,685
$n_{2 сер}$	1,157	1,245	0,968	1,969	1,825	1,136	1,224	1,422	1,452	1,219

На підставі функціональних залежностей оптичних параметрів типу (5.7), використовуючи наближення Максвелла – Гарнетта, отримаємо функціонал  $F_{M\_Г}$

$$F_{M\_Г} = A_{M\_Г} - f_2 \cdot B_{M\_Г} - f_3 \cdot C_{M\_Г},$$

$$\text{де } A_{M\_Г} = \frac{\tilde{\varepsilon}^{ам, деф} - \varepsilon_1^{ам}}{\tilde{\varepsilon}^{ам, деф} + 2\varepsilon_1^{ам}}; B_{M\_Г} = \frac{\varepsilon_2^{кр} - \varepsilon_1^{ам}}{\varepsilon_2^{кр} + 2\varepsilon_1^{ам}}; C_{M\_Г} = \frac{\varepsilon_3^{нов} - \varepsilon_1^{ам}}{\varepsilon_3^{нов} + 2\varepsilon_1^{ам}};$$

та функціонал  $F_{B\_Л}$  за наближенням Бруггемана – Ландауера (5.5)

$$F_{B\_Л} = f_1 \cdot A_{B\_Л} + f_2 \cdot B_{B\_Л} + f_3 \cdot C_{B\_Л},$$

$$\text{де } A_{B\_Л} = \frac{\varepsilon_1^{ам} - \tilde{\varepsilon}^{ам, деф}}{\varepsilon_1^{ам} + 2\tilde{\varepsilon}^{ам, деф}}; B_{B\_Л} = \frac{\varepsilon_2^{кр} - \tilde{\varepsilon}^{ам, деф}}{\varepsilon_2^{кр} + 2\tilde{\varepsilon}^{ам, деф}}; C_{B\_Л} = \frac{\varepsilon_3^{нов} - \tilde{\varepsilon}^{ам, деф}}{\varepsilon_3^{нов} + 2\tilde{\varepsilon}^{ам, деф}}.$$

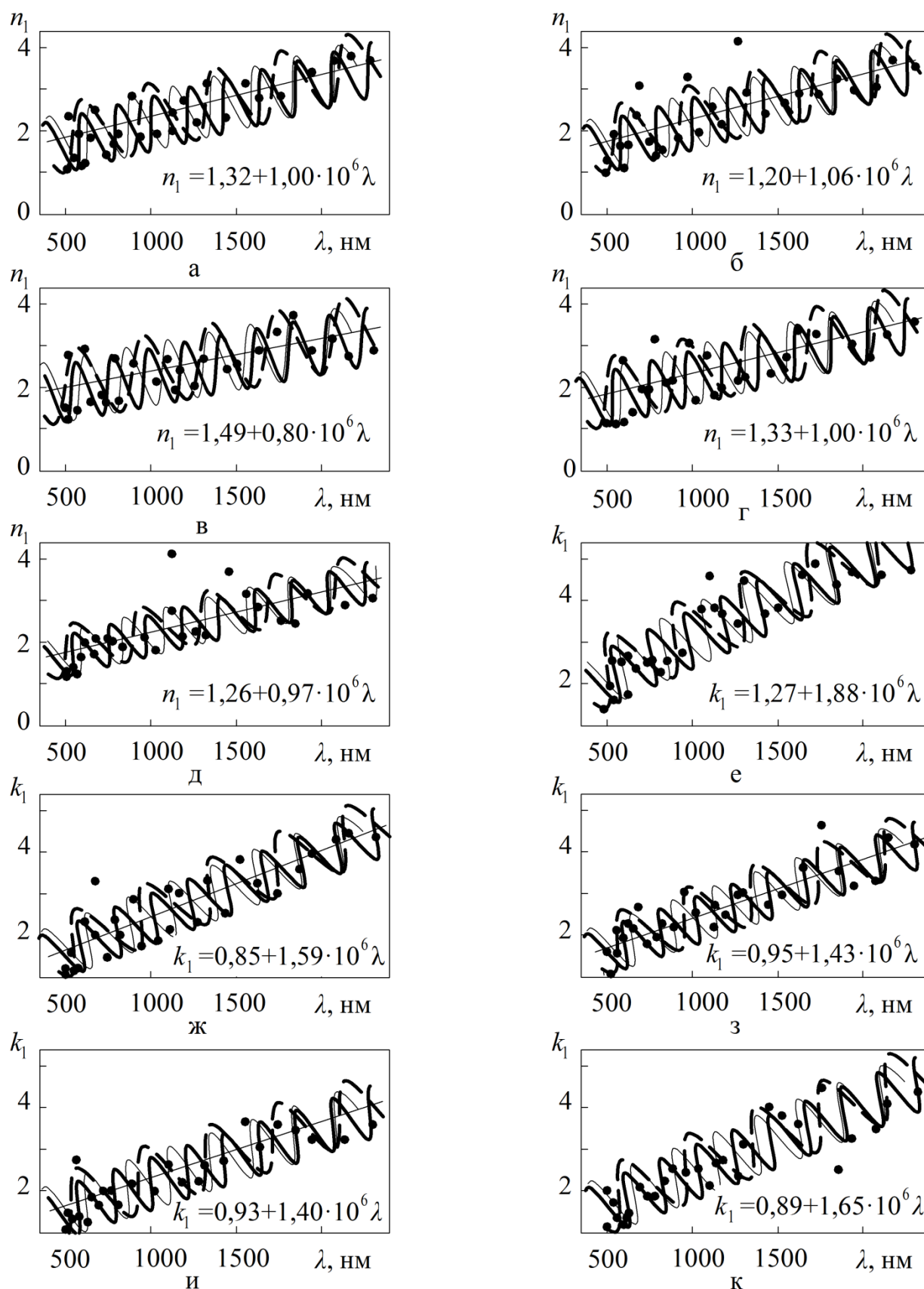


Рис. 5.3. Положення середніх ліній гармонік спектральних залежностей показника заломлення  $n_1$  (а–д) та показника поглинання  $k_1$  (г–к) поверхневого шару кристалічного (а, б, ж, з), деформованого аморфного (в, г, и, к) та аморфного (д, е) сплавів  $Ni_{85}C_{15}$

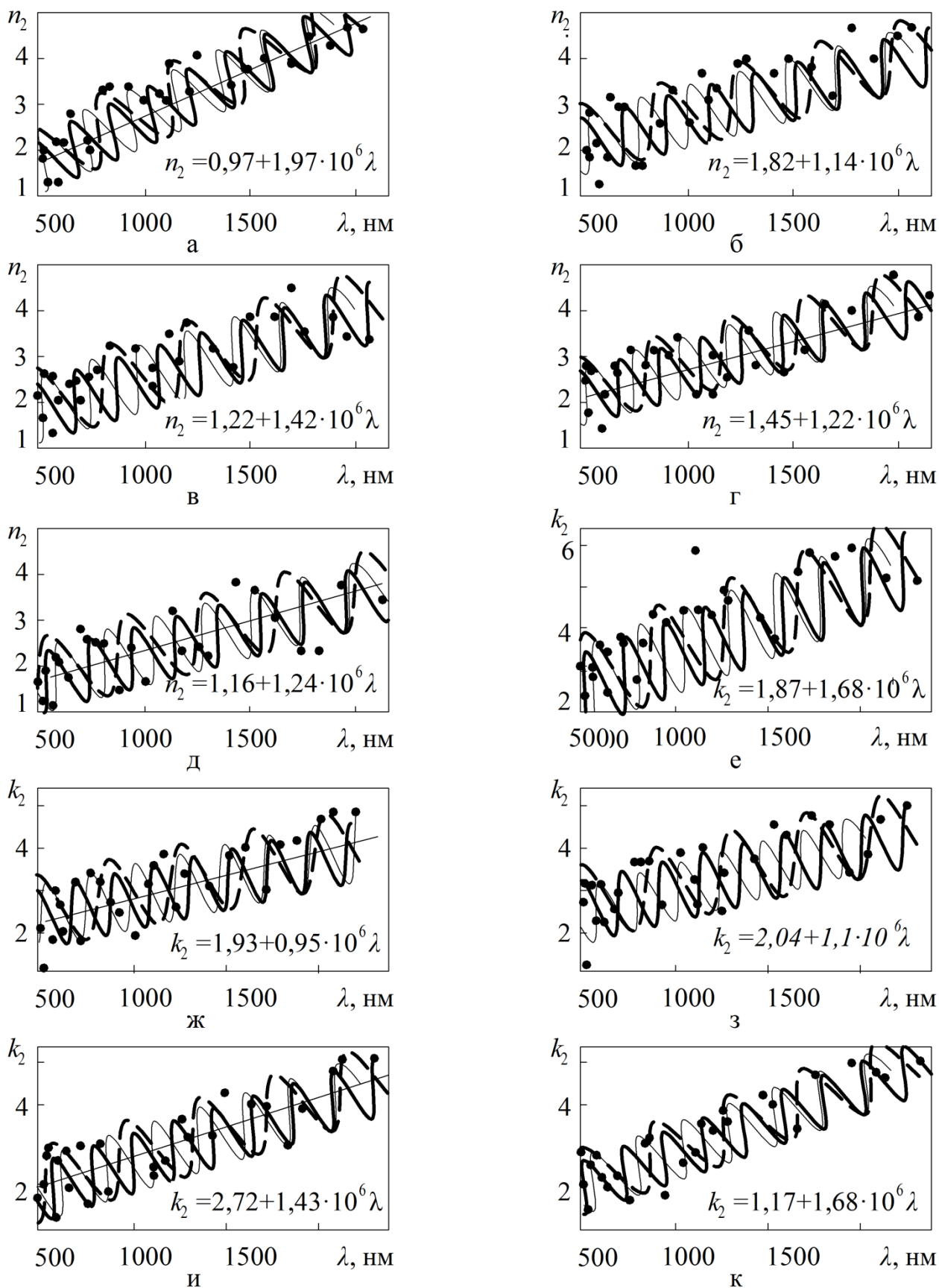


Рис. 5.4. Положення середніх ліній гармонік спектральних залежностей показника заломлення  $n_2$  (а–д) та показника поглинання  $k_2$  (г–к) “підкладки” кристалічного (а, б, ж, з), деформованого аморфного (в, г, и, к) та аморфного (д, е) сплавів  $Ni_{85}C_{15}$

Для знаходження об'ємної частки окремих фаз  $f_i$  в області їх визначення  $f_i \in [0;1]$  необхідно розв'язати обернені задачі, для яких відхили цільових функцій досягають своїх мінімальних значень  $F_{M_\Gamma} \rightarrow \min$ ,  $F_{B_\Delta} \rightarrow \min$ , при цьому повинна виконуватися обов'язкова умова  $f_1 + f_2 + f_3 = 1$ .

Отже, розподіл об'ємної частки  $f_i$  окремих фаз розрахований за наслідками еліпсометричних досліджень аморфного сплаву  $Ni_{85}C_{15}$ . Моделювання структури поверхневого шару проведене в межах моделі ефективного середовища, згідно якої вона представляє собою аморфну матрицю з кристалічними включеннями. Отримані залежності розподілу об'ємної частки кристалічної і аморфної фаз сплаву для наближень Максвелла – Гарнетта і Бруггемана – Ландауера наведені на рис. 5.5.

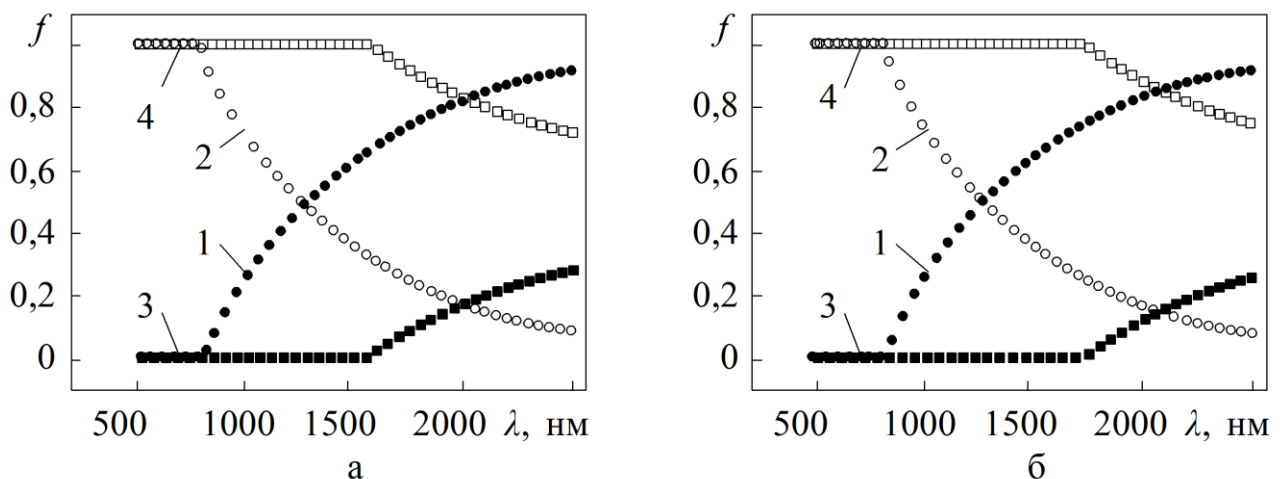


Рис. 5.5. Розподіл об'ємної частки кристалічної (2, 4) і аморфної фаз (1, 3) у поверхневому шарі аморфного сплаву  $Ni_{85}C_{15}$  до (1, 2) і після (3, 4) деформації згідно з наближенням Максвелла – Гарнетта (а) та Бруггемана – Ландауера (б)

Таке модельне подання ефективного середовища до деформації показує, що із збільшенням довжини хвилі падаючого світла  $\lambda$ , зменшується об'ємна частка кристалічної фази і збільшується кількість аморфної складової.

Спектроеліпсометричні дослідження, виконані нами раніше [33], підтверджують наявні уявлення про розповсюдження електромагнітної хвилі у середовищі: із збільшенням довжини хвилі падаючого світла  $\lambda$  збільшується



оптична товщина поверхневого шару  $d$ . Виходячи з цього, можна стверджувати, що у достатньо малому поверхневому шарі переважає кристалічна фаза (рис. 5.5). Це повністю узгоджується з прагненням системи до термодинамічної рівноваги і перетворення її структури у структуру з більшим порядком. Установлено [49, 197, 198], що для аморфних сплавів характерна безперервна структурна релаксація, крім того, з наукових джерел відомо [149], що кристалізація у поверхневих шарах аморфного зразка починається дещо раніше, ніж у решті об'єму.

Розрахунок за такою самою моделлю спектральних залежностей об'ємних часток окремих фаз деформованого аморфного сплаву показав різке збільшення об'ємної частки кристалічної фази біля поверхні (див. рис. 5.5).

Слід зазначити, що врахування лише двох фаз (кристалічної та аморфної) є не зовсім коректним. Як відомо [199, 200], для аморфних сплавів характерна наявність вільного об'єму, що займає 1–2 % всього об'єму зразка, розмірами від частки атомного діаметру до сотень нанометрів. Крім того, досліджуваний нами поверхневий шар, природно, характеризується, деякою шорсткістю поверхні, що неминуче пов'язане з процесами отримання зразка і підготовкою його поверхні до вимірювань [201–203]. Відомо, що полірування поверхні дозволяє зменшити значення параметра шорсткості  $R_a$  до 50–100 нм [158], а товщина досліджуваного нами поверхневого шару має той же порядок. Тому до використаної моделі була введена повітряна фаза, як результат об'єднання вільного об'єму і западин шорсткості.

Залежності, отримані за іншою моделлю (з урахуванням повітряної фази), наведені на рис. 5.6, 5.7. Аналіз залежностей дозволяє припустити, що деформаційна дія впливає на структурні перетворення сплаву, а саме, сприяє його впорядкуванню. Раніше проведені дослідження інтенсивної пластичної деформації сплаву  $Fe_{80}B_{20}$  [129, 137] також свідчать про його нанокристалізацію у результаті деформації.

Як видно із рис. 5.6, 5.7, отримані результати не співпадають із результатами для моделі без урахування повітряної фази (див. рис. 5.5) і,

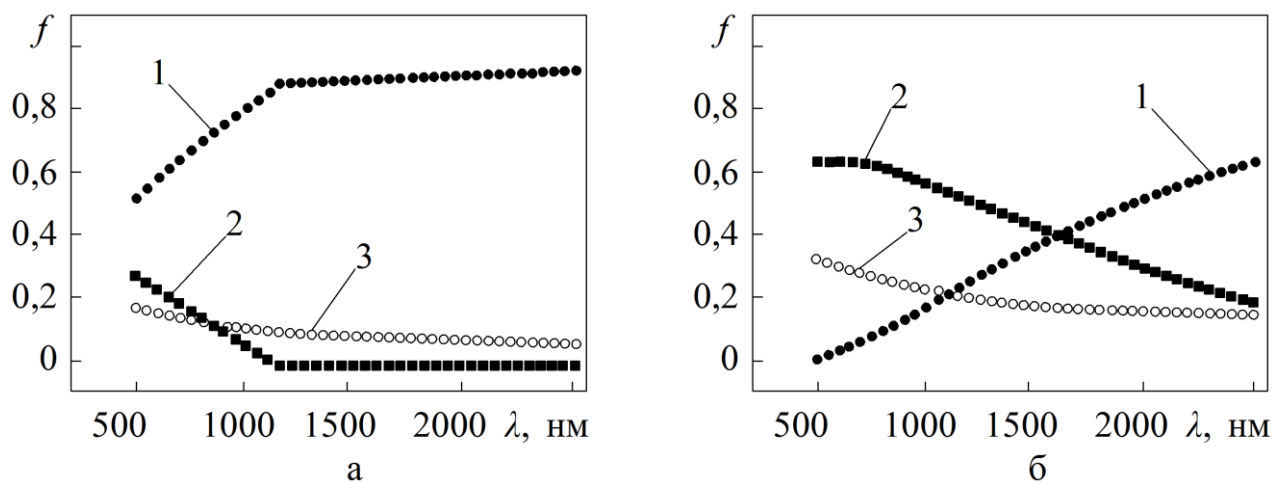


Рис. 5.6. Розподіл окремих фаз аморфного (а) та деформованого аморфного (б) сплавів  $Ni_{85}C_{15}$  згідно з наближенням Бруггемана – Ландауера (1 – аморфна фаза; 2 – кристалічна фаза; 3 – повітряна фаза)

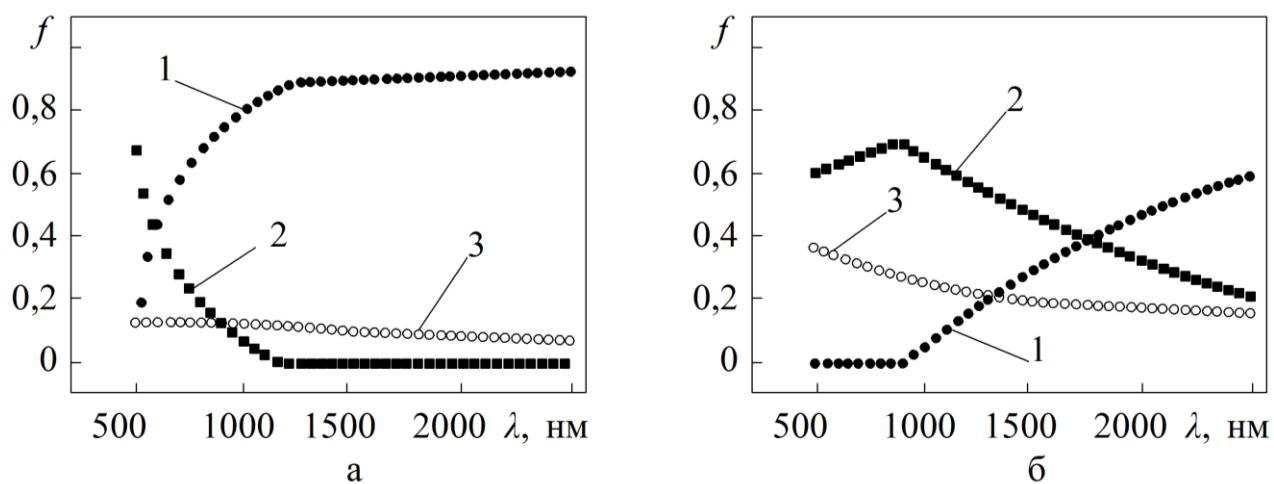


Рис. 5.7. Розподіл окремих фаз аморфного (а) та деформованого аморфного (б) сплавів  $Ni_{85}C_{15}$  згідно з наближенням Максвелла – Гарнетта (1 – аморфна фаза; 2 – кристалічна фаза; 3 – повітряна фаза)

на перший погляд, протирічать установленому зростанню кристалізації аморфних сплавів під впливом пластичної деформації. Проте аналіз фізичних процесів, що відбуваються, підтверджує достовірність отриманих результатів і вказує на те, що модель, яка враховує наявність повітряної фази (у тому числі і шорсткість поверхні), більш інформативна.

Уже наголошувалося, що аморфні сплави знаходяться у структурно-нерівноважному стані, унаслідок чого в них протікають незворотні процеси. При цьому було встановлено [49, 197], що релаксаційні процеси відбуваються у декілька стадій, а за деяких певних умов деформації можуть носити “зворотний” характер.

Перша стадія релаксації спостерігається у вихідному зразку при невеликих деформаціях (2–4 %), приводить до впорядкування структури, що пояснюється релаксацією внутрішніх напружень. Подальше збільшення навантаження веде до повного завершення першої стадії і переходу до другої, при якій матеріал повертається до ступеня релаксації, характерного для вихідних зразків. Збільшений процентний вміст повітряної і аморфної фаз біля поверхні зразка (криві 3 і 1 рис. 5.6 б) можна пояснити підвищенням шорсткості і створенням умов для “зворотної” релаксації (згідно [197]).

Усі реальні поверхні характеризуються деякою величиною шорсткості [204]. Так, при пластичному зміцненні кулькою  $\varnothing 4$  мм на поверхні зразка створюється хвиля з матеріалу, який знаходиться під дією високих напружень (рис. 5.8 а). Залежно від умов контакту (тертя, швидкість відносного руху, зусилля втискування) формується різна шорсткість поверхні (рис. 5.8 б, г). Дослідження під електронним мікроскопом (500:1) показує (рис. 5.8 в), що нерівності присутні навіть на поверхні без видимих при невеликому збільшенні дефектів.

Поверхневий шар знаходиться у складному напруженому стані. При цьому розподіл напружень у глибину зразка визначається виразом [205]:

$$\eta = \frac{2p \cos \theta}{\pi r}, \quad (5.8)$$

де  $p$  – сила, що припадає на одиницю довжини;

$i$  – кут відхилення положення точки від напрямку дії сили;

$r$  – відстань від точки прикладення сили до точки в матеріалі деталі.

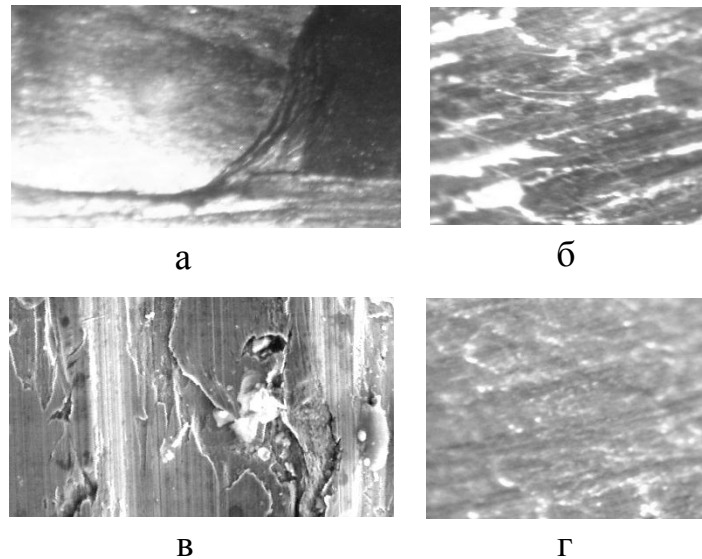


Рис. 5.8. Поверхня зразка після пластичної деформації металу (а, б, г – БМІ-1; 60:1; в – РЕМ-100У; 540:1)

З виразу (5.8) випливає, що значне напруження біля поверхні інтенсивно зменшується у глибину сплаву (рис. 5.9).

Але підвищені навантаження на матеріал, можливо, створюють у його верхніх шарах умови “зворотної” релаксації. Механізм її формування на цій стадії може бути наступний. Під впливом зовнішнього навантаження виникає пластична деформація, що супроводжується виділенням тепла. Високий тиск і тепло біля поверхні переводять деякий її об’єм в області  $d_a$  в аморфний стан. Одночасно критичні напруження викликають зміну механічних властивостей матеріалу (підвищується твердість, міцність, знижується пластичність), утворюється тонкий крихкий шар, який руйнується під впливом високих напружень. Тріщини і нерівності формують шорсткість поверхні на деякій глибині  $d_r$ . Цим пояснюється різке зростання повітряної фази біля поверхні

зразка. При збільшенні товщини інформативного поверхневого шару об'ємна частка кристалічної фази починає переважати.

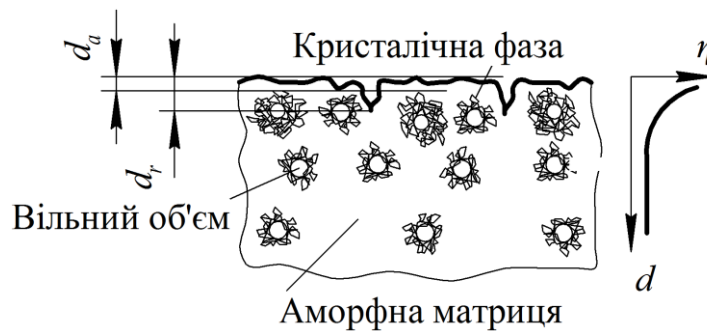


Рис. 5.9. Утворення дефектної аморфної плівки і збільшення кристалічної фази внаслідок пластичної деформації

У цілому можна бачити (див. рис. 5.6, 5.7), що вміст кристалічних включень в аморфній матриці після деформації зростає. Для наближення Бруггемана – Ландауера спостерігається збільшення об'ємної частки кристалічної фази в аморфному деформованому сплаві  $\text{Ni}_{85}\text{C}_{15}$  ( $f = 0,67-0,18$ ) щодо вихідного аморфного сплаву ( $f = 0,27-0$ ). Це дозволяє стверджувати, що відбувається впорядкування структури матеріалу. Так, дослідження впливу деформаційної обробки на релаксаційні процеси [197] показали виникнення двох додаткових піків внутрішнього тертя. Автори детально не досліджують ці піки, проте відзначають, що вони за багатьма параметрами схожі із піками Хасигуті в кристалах.

Установлено, що процентний вміст кристалічної фази біля поверхні аморфного сплаву  $\text{Ni}_{85}\text{C}_{15}$  (за наближенням Максвелла – Гарнетта) вищий порівняно з іншими областями цього сплаву. У діапазоні довжин хвиль від  $\lambda = (500-1000)$  нм зменшується від 67 до 0 %. Цей факт свідчить про настання структурної релаксації у поверхневому шарі раніше, ніж у решті об'єму.

Інтенсивність цих процесів (зворотна та незворотна релаксація, концентрація повітряної фази) змінюється у напрямку від поверхні у глибину зразка відповідно до зміни напружень, які визначаються формулою (5.8).

Слід зазначити, що деякі відмінності результатів, отриманих при використанні наближень Максвелла – Гарнетта і Бруггемана – Ландауера, обумовлені особливостями їх теоретичних передумов. Якщо гетерогенна система аморфного сплаву представлена як аморфна матриця з кристалічними включеннями, то це відповідає співвідношенню Максвелла – Гарнетта. Таке уявлення характерне при низькому процентному вмісті включень у безперервній матриці. При збільшенні об'ємної частки включень (коли відсоток включення перевершує відсоток вихідної матриці) більш точним можна вважати співвідношення Бруггемана – Ландауера [192]. Таким чином, аморфний сплав відповідає ефективному середовищу Максвелла – Гарнетта (рис. 5.7 а), а деформований – Бруггемана – Ландауера (рис. 5.6 б).

Проведені дослідження залежності оптичної провідності від довжини хвилі падаючого світла, а також залежностей розподілу окремих фаз показали, що пластична деформація аморфних сплавів змінює їх оптичні властивості у бік властивостей подібних сплавів з кристалічною структурою. Характер зміни фізичних властивостей аморфних сплавів дозволяє припустити, що у результаті енергетичного впливу під час пластичного деформування нестабільна аморфна структура набуває кристалічних включень і середня об'ємна частка кристалічної фази в поверхневому шарі збільшується.

Переважання аморфної фази на межі міжфазного розділення “деформований поверхневий шар – навколишнє середовище” може бути пояснене дією критичних напружень. Математична модель опису поверхневого шару аморфного сплаву, що враховує наявність кристалічних і повітряних включень в аморфній матриці дозволяє якісно оцінити шорсткість поверхні.

### **5.3. Дослідження дії низькоенергетичного іонного бомбардування і полірування поверхні на оптичні параметри поверхневих шарів аморфних сплавів**

У науковому і прикладному аспектах важливим є виготовлення поверхонь із заздалегідь заданими властивостями. Однак наявність хімічної та

структурної неоднорідностей у АМС суттєво впливає на експериментальні результати під час досліджень поверхневих явищ. У технологічних процесах велику роль відіграє стан поверхні зразка, який досягається за рахунок використання методів очищення в поєднанні з методами діагностики поверхні [154, 206].

На поверхні оптичного елемента після механічної обробки завжди існує дефектний шар, глибина якого відповідає розмірам зерна абразиву та утвореним тріщинам. Видалення цього шару методом іонної обробки дозволяє отримувати поверхні, які за складом, структурою і властивостями близькі до матеріалу у глибині зразка. При цьому іонне бомбардування впливає на відбиття світла від поверхні. Це є наслідком того, що, по-перше, відбувається зміна геометрії рельєфу, а, по-друге, відбиття світла змінюється за рахунок зміни коефіцієнта заломлення середовища. Отже, іонне бомбардування створює у поверхневому шарі так званий “змінений” шар [151].

Використання бомбардування поверхні зразка іонами інертного газу в аномально жевріючому розряді є найбільш оптимальним способом очищення поверхні. У цій роботі бомбардування здійснювалося іонами чистого аргону. Бомбардуючі іони починають розпилювати поверхню металу, коли кінетична енергія перевищує деяке порогове значення (для чистих металів порядку 20–50 еВ). Розпилювання іонами високих енергій приводить до помітної модифікації поверхневого шару [206]. Спостерігається погіршення якості поверхні, проте при жевріючому розряді імплантація іонів інертного газу у матеріал практично не відбувається, тому можливим є поліпшення якості поверхні.

Для експериментальної перевірки впливу бомбардування на оптичні властивості поверхні використані такі режими:  $A$  – час бомбардування 1 хв;  $B$  – 3 хв;  $C$  – 5 хв.

Результати експериментального дослідження аморфного сплаву  $Ni_{40}Fe_{50}B_{10}$  (рис. 5.10 а) показали, що бомбардування поверхні низькоенергетичними іонами приводить до зменшення значень оптичної

товщини  $d$  поверхневого шару, що пов'язане зі зниженням шорсткості поверхні. Видно, що зміна і стабілізація цієї характеристики у процесі бомбардування відбувається упродовж перших 3-х хвилин, подальше збільшення часу впливу змін не викликає. Подібні результати отримані і при дослідженні аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$  (рис. 5.10 б). У діапазоні довжин хвиль  $\lambda = (400\text{--}1200)$  нм оптична товщина  $d$  зменшується від 0 до 41 % для сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{50}\text{B}_{10}$  та від 59 до 74 % – для сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$ .

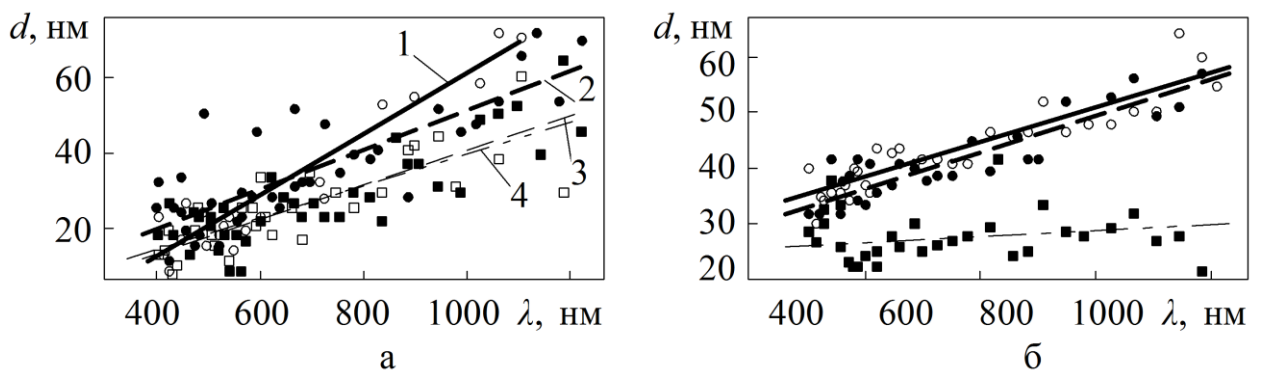


Рис. 5.10. Спектральні залежності оптичної товщини  $d$  поверхневого шару до і після бомбардування аморфних сплавів  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{50}\text{B}_{10}$  (а) (○–1 – вихідний зразок; ●–2 – режим А; □–3 – режим В; ■–4 – режим С) та  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$  (б) (○ – контактна поверхня вихідного зразка; ● – безконтактна поверхня вихідного зразка; ■ – після бомбардування)

На рис. 5.11, 5.12 наведені спектральні залежності величин еліпсометричних кутів  $\Delta$  та  $\psi$  для досліджуваних зразків.

Установлено, що отримані спектральні залежності зсуву фаз  $\Delta$  між  $p$ - та  $s$ -компонентами еліпса поляризації для аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{50}\text{B}_{10}$  (рис. 5.11 а) практично збігаються; дещо більший розкид вони мають для сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$  (рис. 5.12 а). Проте для обох випадків залишається характерним розміщення залежності для бомбардованого зразка нижче щодо вихідного. Тобто бомбардування в аномально жевріючому розряді приводить до зменшення значень  $\Delta$ .



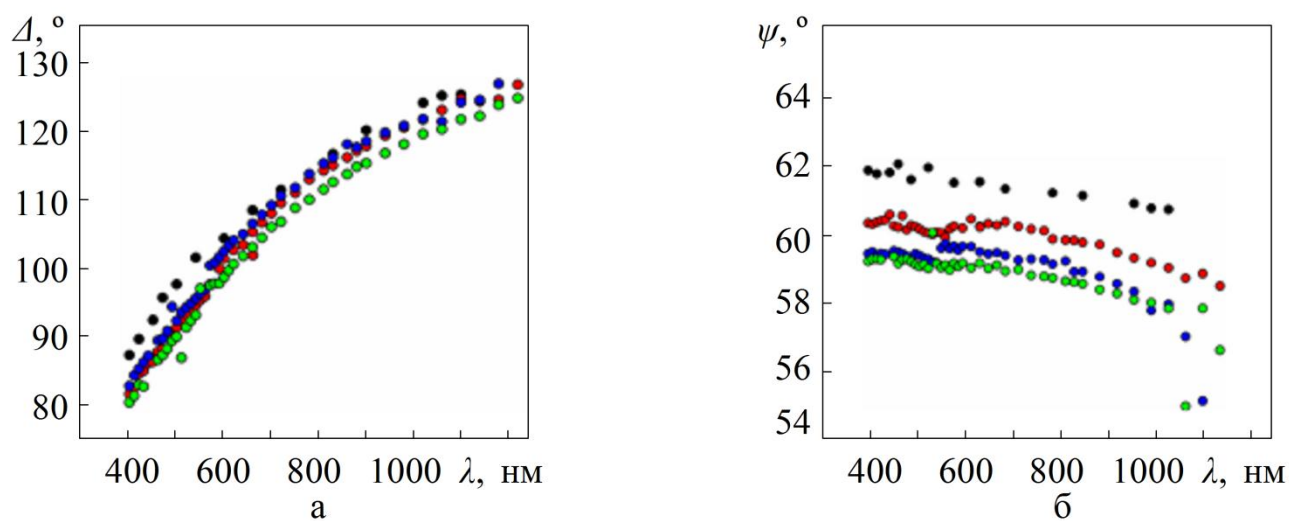


Рис. 5.11. Спектральні залежності еліпсометричних кутів аморфного металевого сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{50}\text{V}_{10}$  до і після бомбардування (● – вихідний зразок; ● – режим *A*; ● – режим *B*; ● – режим *C*)

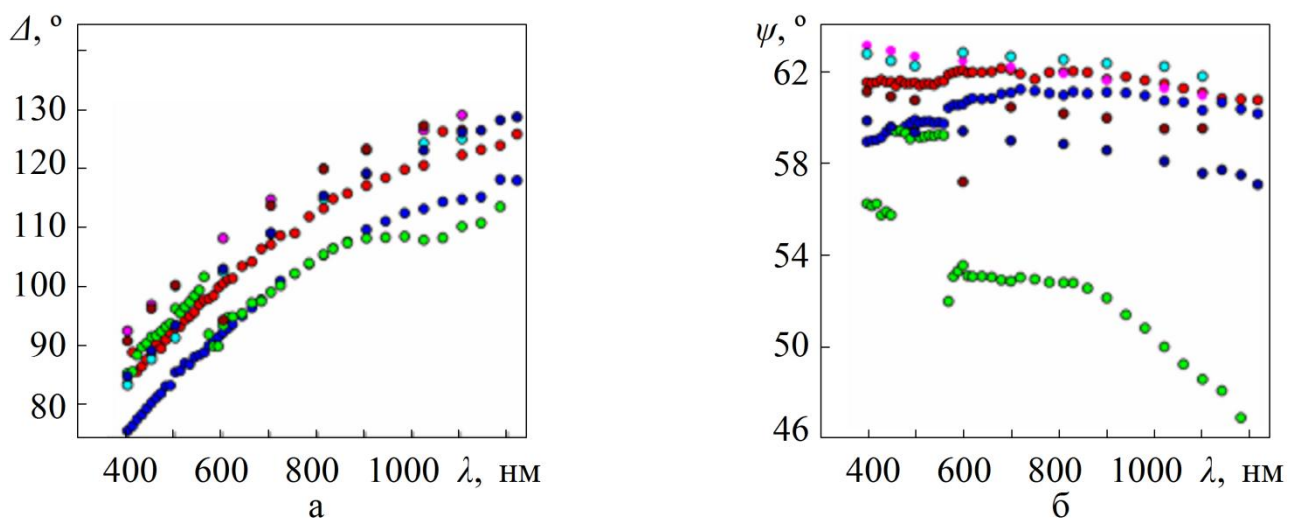


Рис. 5.12. Спектральні залежності еліпсометричних кутів аморфного металевого сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{V}_{20}$  до і після бомбардування (● – матова; ● – безконтактна; ● – після бомбардування; ● – полірована безконтактна в експерименті 1; ● – полірована безконтактна в експерименті 2; ● – полірована контактна в експерименті 1; ● – полірована контактна в експерименті 2 поверхні)

Аналіз спектральних залежностей азимута відновленої лінійної поляризації  $\psi$  показав (рис. 5.12), що полірування поверхні та її бомбардування приводить також і до зменшення значень  $\psi$ . Через те що саме цей еліпсометричний параметр у першу чергу реагує на зміну шорсткості [157], проведені дослідження дозволяють зробити висновок про зменшення шорсткості поверхні в результаті її бомбардування (причому режим  $C$  більше впливає на якість поверхні ніж  $B$  та  $A$ ).

Із еліпсометричних обчислень можна зробити висновок, що оптична товщина поверхневого шару  $d$  залежить від якості поверхні. Так, величини  $d$  контактної поверхні мають більші значення, ніж у безконтактної (рис. 5.10 б). Утворення поверхонь із меншою шорсткістю (у результаті полірування контактної і безконтактної поверхонь) приводить до того, що апроксимувальні лінії гармонік розташовані на графіках нижче. Бомбардування поверхні низькоенергетичними іонами аргону також спричиняє зменшення її шорсткості і змінює оптичні властивості поверхневого шару (рис. 5.10). Кут нахилу лінії апроксимації спектральної залежності у порівнянні з полірованими поверхнями зменшується.

Показники поглинання поверхневого шару  $k_1$  різних за фізичним станом поверхонь у досліджуваному діапазоні довжин хвиль майже не відрізняються (рис. 5.13). Проте значення  $k_1$  для контактної поверхні дещо менші, де очевидно знижується щільність оптичного шару за рахунок включення повітря при збільшенні шорсткості, а значення  $k_1$  для полірованої безконтактної поверхні – більші через підвищення щільності оптичного шару. Це повністю співпадає і з висновком про різну оптичну товщину поверхневого шару у контактної та безконтактної поверхонь (див. рис. 5.10).

Показник заломлення поверхневого шару  $n_1$  контактної і безконтактної поверхонь (рис. 5.14) змінюється з однаковою інтенсивністю із зростанням  $\lambda$ . Оскільки щільність поверхневого шару безконтактної поверхні вища, апроксимуюча лінія гармонік  $n_1 = f(\lambda)$  безконтактної поверхні проходить вище, ніж у контактної. Як і у випадку з  $k_1$ , показники  $n_1$  полірованих

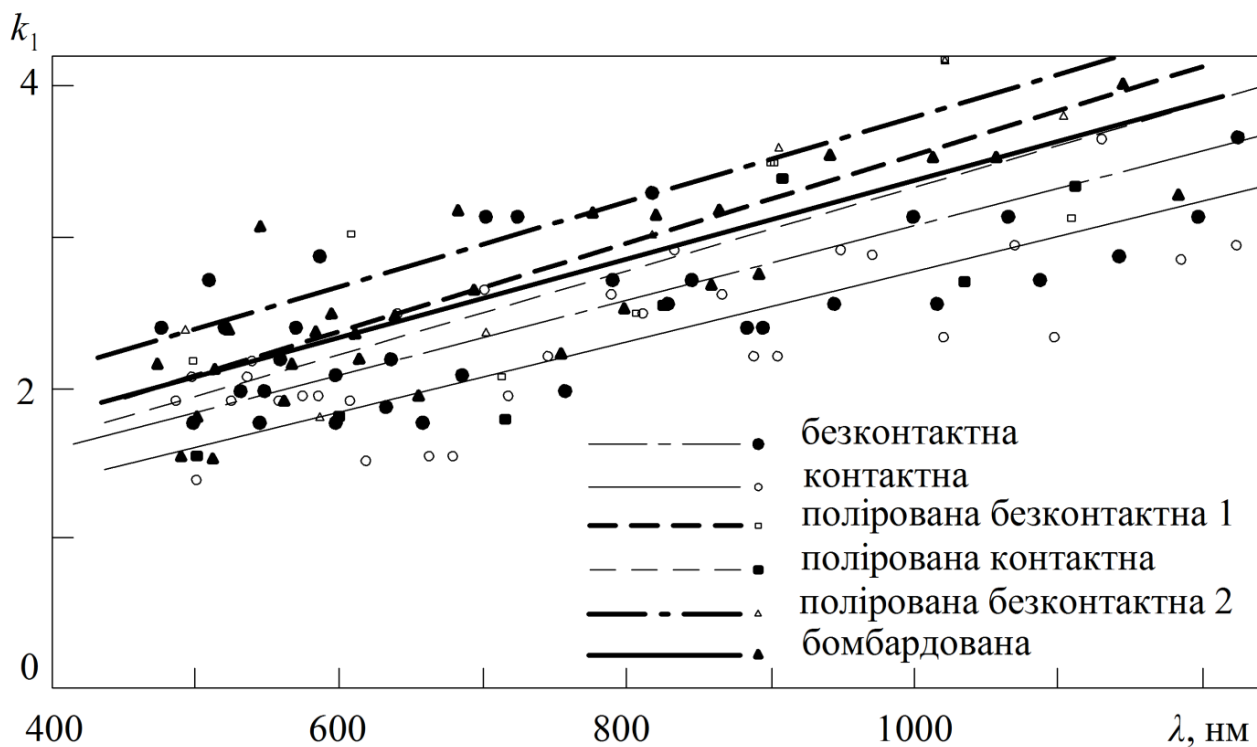


Рис. 5.13. Спектральні залежності показника поглинання поверхневого шару  $k_1$  аморфного сплаву  $Ni_{40}Fe_{40}B_{20}$

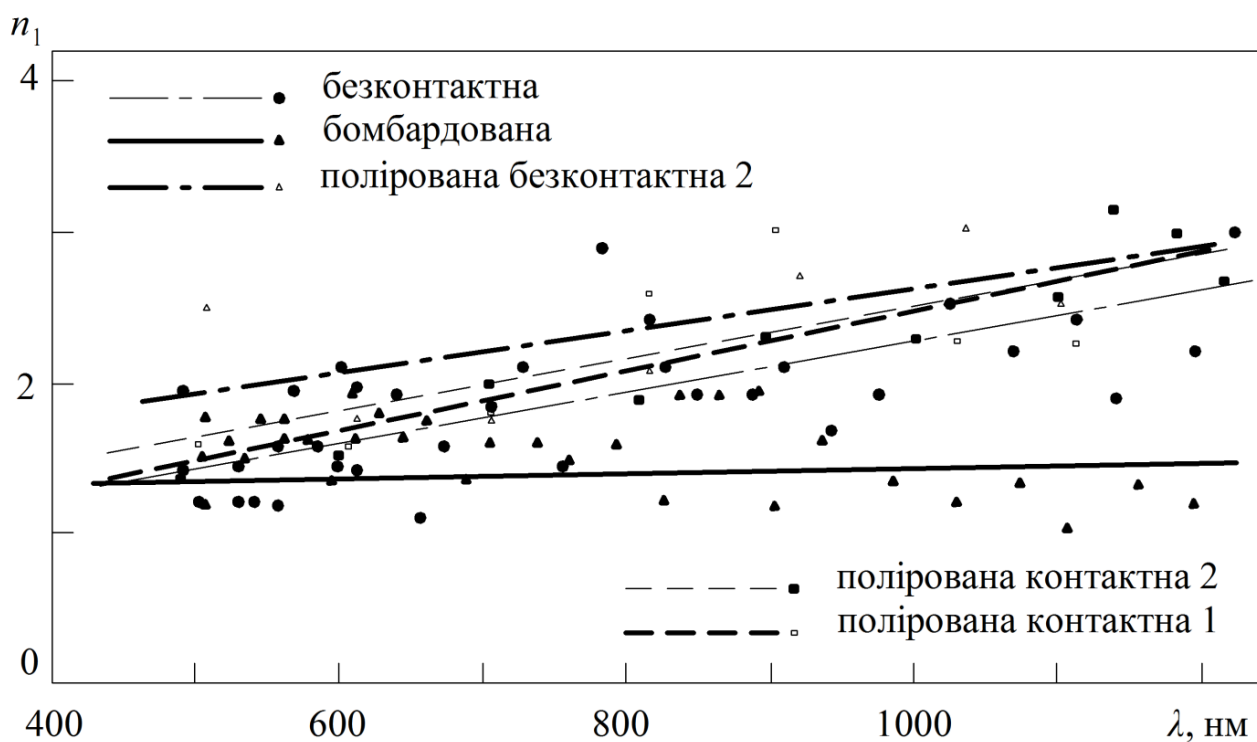


Рис. 5.14. Спектральні залежності показника заломлення поверхневого шару  $n_1$  аморфного сплаву  $Ni_{40}Fe_{40}B_{20}$

поверхонь (не залежно від їх стану до обробки) майже не відрізняються. У результаті бомбардування оптична товщина поверхневого шару майже не змінюється у досліджуваному діапазоні хвиль і це аналогічним чином відбивається на його показнику заломлення. Кут нахилу апроксимувальної лінії залежностей  $n_1 = f(\lambda)$  менший, ніж до бомбардування.

Аналіз спектральних залежностей показника поглинання “підкладки”  $k_2$  виявив, що сплави з різними за первинним станом поверхнями, після полірування мають подібні показники поглинання (рис. 5.15). Виходячи з того, що оптичні властивості матеріалу під поверхневим шаром залежать переважно від його атомно-електронної структури, показник поглинання “підкладки” повинен бути незмінним. Це і підтверджується результатами експерименту (рис. 5.15).

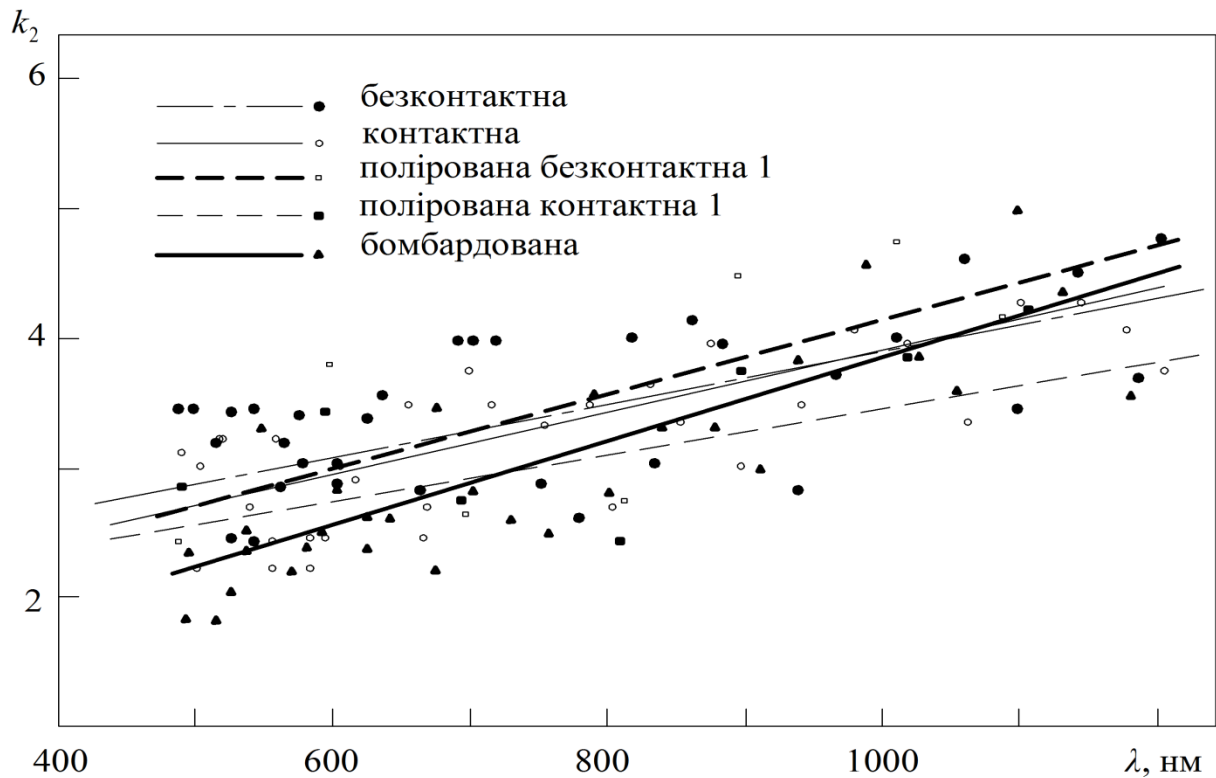


Рис. 5.15. Спектральні залежності показника поглинання “підкладки”  $k_2$  аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$

Показник заломлення “підкладки”  $n_2$  при дослідженні контактної і безконтактної поверхонь після їх полірування практично збігаються. При цьому

лінії апроксимації залежностей  $n_2 = f(\lambda)$  у координатах  $(n_2, \lambda)$  мають однакові положення (рис. 5.16). Процес бомбардування поверхні у досліджуваному діапазоні хвиль викликає не тільки зменшення оптичної товщини поверхневого шару  $d$  (див. рис. 5.10) та показник заломлення  $n_1$  (див. рис. 5.14), але й показника заломлення  $n_2$ . Так, кут нахилу лінії апроксимації залежностей  $n_2 = f(\lambda)$  незначний (рис. 5.16). Кут нахилу лінії апроксимації для безконтактної поверхні більший, ніж для контактної (рис. 5.16).

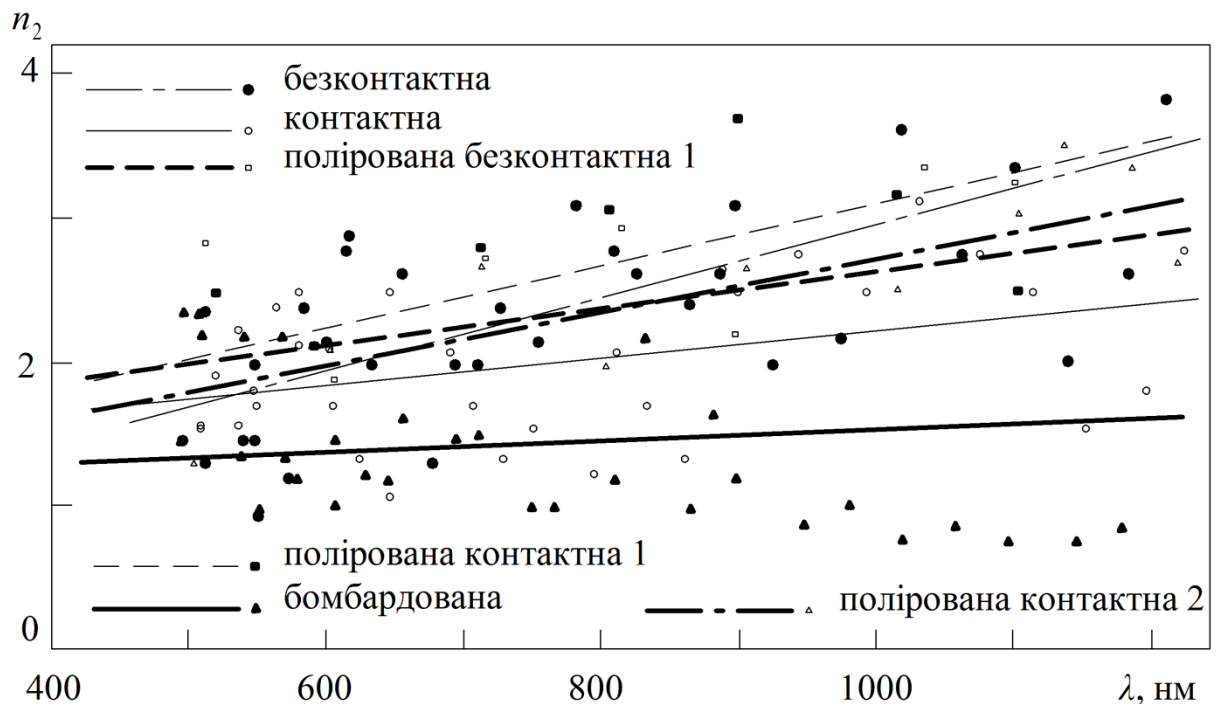


Рис. 5.16. Спектральні залежності показника заломлення “підкладки”  $n_2$  аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$

#### 5.4. Вплив введення легуючих елементів на оптичні характеристики

У роботі були досліджені групи АМС  $\text{Fe}_{80}\text{DM}_5\text{B}_{15}$  і  $\text{Fe}_{78-x}\text{Ni}_x\text{Si}_9\text{B}_{13}$ , отримані методом спінінгування розплаву. Для першої групи сплавів як домішки були використані такі матеріали: Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni; для другої – змінювався вміст нікелю у сплаві ( $x = 0, 1, 4, 8, 16, 21$  at. %). Оптичні характеристики систем для моделі “тонка однорідна плівка – однорідна підкладка” визначені за даними спектроеліпсометричних вимірювань

(табл. А.1, А.2) при куті падіння світла  $\varphi_0 = 74^\circ$  і довжині хвилі падаючого світла  $\lambda = 816$  нм, а також при куті падіння світла  $\varphi_0 = 72^\circ$  у діапазоні довжин хвиль падаючого світла  $\lambda = (248-1220)$  нм для сплавів  $\text{Fe}_{80}\text{DM}_5\text{B}_{15}$  і  $\text{Fe}_{78-x}\text{Ni}_x\text{Si}_9\text{B}_{13}$  відповідно.

Отримані залежності оптичної товщини  $d$  поверхневого шару і температури кристалізації  $T_{\text{кр}}$  від типу легуючого елемента для сплаву  $\text{Fe}_{80}\text{DM}_5\text{B}_{15}$  (рис. 5.17) мають подібний характер: сплав із максимальною або мінімальною оптичною товщиною  $d$  поверхневого шару характеризується відповідно максимальною або мінімальною температурою кристалізації  $T_{\text{кр}}$ . Також експериментально встановлений якісно подібний вплив зміни вмісту нікелю у сплаві  $\text{Fe}_{78-x}\text{Ni}_x\text{Si}_9\text{B}_{13}$  на оптичну товщину  $d$  поверхневого шару і температуру кристалізації  $T_{\text{кр}}$  (табл. 5.2).

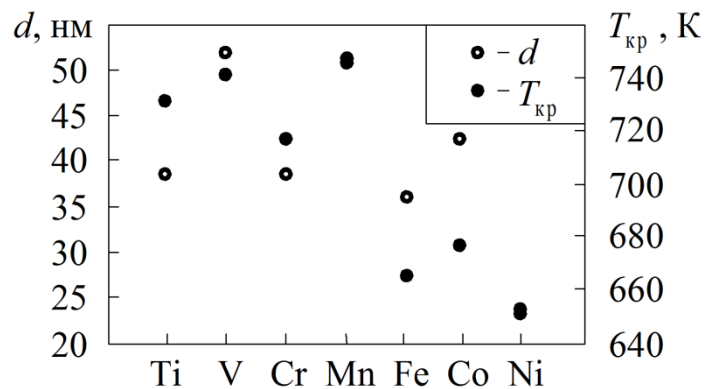


Рис. 5.17. Залежності оптичної товщини  $d$  і температури кристалізації  $T_{\text{кр}}$  від типу легуючого елемента для сплаву  $\text{Fe}_{80}\text{DM}_5\text{B}_{15}$

Виявлено, що така взаємозалежність оптичної товщини  $d$  поверхневого шару і температури кристалізації  $T_{\text{кр}}$  простежується при великих довжинах хвиль. Це пояснюється збільшенням товщини зондованого шару при збільшенні довжини хвилі падаючого світла: збільшується інформативність поверхневого шару, а отже, і результатів дослідження.

Отримані результати дозволяють зробити висновок, що складна атомно-електронна структура перехідного шару безпосередньо пов'язана з об'ємними властивостями аморфних сплавів у цілому, що зрештою є наслідком

наслідування АМС-структури рідини. Необхідно відзначити, що у даній моделі відбивальної поверхні не враховується топологічна структура поверхневого шару. Проте саме отримані ефективні модельні значення поверхневого шару АМС є параметрами, що зв'язують особливості структури поверхневого шару і термічну стабільність усього зразка.

Таблиця 5.2

**Залежності оптичної товщини  $d$  неоднорідного поверхневого шару і температури кристалізації  $T_{кр}$  від вмісту Ni у сплаві  $Fe_{78-x}Ni_xSi_9B_{13}$  для довжини хвилі  $\lambda = 820$  нм**

$x$ , at %	$d$ , нм	$T_{кр}$ , К
0	40	820
1	38	820
4	35	800
8	32	790
16	33	780
21	31	790

На рис. 5.18 наведені залежності температури кристалізації  $T_{кр}$  та оптичної провідності  $\sigma$  для довжини хвилі падаючого світла  $\lambda = 827,5$  нм від типу легуючого елемента для сплаву  $Fe_{80}DM_5B_{15}$ . Бачимо, що вони мають антибатний характер: із збільшенням порядкового номера атомів домішки температура кристалізації  $T_{кр}$  зменшується, а значення оптичної провідності  $\sigma(h\nu)$  збільшується. Оскільки абсолютні значення  $\sigma(h\nu)$  залежать від густини електронних станів на рівні Фермі, можна припустити, що виконується критерій Нагеля – Таука. Відповідно до нього для елемента, який має найменшу термічну стабільність, тобто найменшу температуру кристалізації  $T_{кр}$ , густина електронних станів буде найбільшою. Отримані результати є підтвердженням критерію Нагеля – Таука про стабільність аморфних сплавів, оскільки із збільшенням порядкового номера атомів домішкового матеріалу значення оптичної провідності  $\sigma(h\nu)$  і температури кристалізації  $T_{кр}$  змінюються антибатно відносно один до одного.

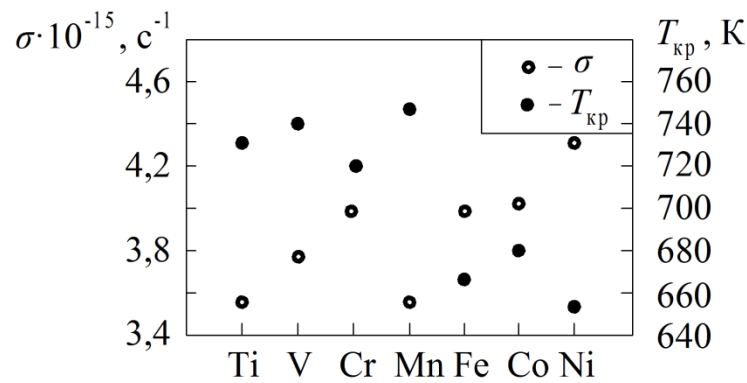


Рис. 5.18. Залежності оптичної провідності  $\sigma(h\nu)$  і температури кристалізації  $T_{\text{кр}}$  від типу легуючого елемента для сплаву  $\text{Fe}_{80}\text{ДМ}_5\text{В}_{15}$

Подібний характер залежностей оптичної товщини  $d$  поверхневого шару і температури кристалізації  $T_{\text{кр}}$  від типу легуючого елемента АМС вказує на прямий взаємозв'язок між об'ємними і поверхневими властивостями аморфних сплавів [32]. Експериментальні залежності значень оптичної провідності  $\sigma(h\nu)$  для довжини хвилі падаючого світла  $\lambda = 827,5$  нм і температури кристалізації  $T_{\text{кр}}$  від типу легуючого елемента мають антибатну залежність, що підтверджує критерій Нагеля – Таука про стабільність аморфних сплавів.

### Висновки до розділу 5

1. Виявлено зближення спектральних залежностей оптичних параметрів аморфного деформованого сплаву  $\text{Ni}_{85}\text{C}_{15}$  і кристалічного сплаву аналогічного хімічного складу, що є результатом збільшення кристалічних структур в аморфній матриці після її деформування.
2. Отримано, що об'ємна доля кристалічної фази в аморфному сплаві  $\text{Ni}_{85}\text{C}_{15}$  у результаті пластичної деформації збільшується.
3. Установлено, що процентний вміст кристалічної фази біля поверхні вищий, ніж у глибині сплаву, що відповідає прагненню системи до термодинамічної рівноваги і перетворенню її структури у структуру з більшим порядком. Цей факт свідчить про початок структурної релаксації у поверхневому шарі раніше, ніж у решті об'єму.



4. Показано, що підвищений процентний вміст повітряної фази біля поверхні зразка  $\text{Ni}_{85}\text{C}_{15}$  є наслідком шорсткості реальної поверхні.
5. Установлено, що бомбардування поверхні аморфних сплавів низькоенергетичними іонами приводить до зменшення оптичної товщини поверхневого шару. У діапазоні довжин хвиль  $\lambda = (400-1200)$  нм оптична товщина  $d$  зменшується від 0 до 41% для сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{50}\text{B}_{10}$  та від 59 до 74% для сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$ .
6. Установлено, що оптичні характеристики поверхневого шару визначаються фізичним станом поверхні: чим вища шорсткість, тим більша оптична товщина поверхневого шару  $d$  і менші значення показників заломлення  $n_1$  і поглинання  $k_1$ .
7. Показано, що оптичні характеристики “підкладки” менш чутливі до змін, які відбуваються у поверхневому шарі, і збільшуються із збільшенням довжини хвилі падаючого світла.
8. Виявлено подібний характер залежностей оптичної товщини  $d$  поверхневого шару і температури кристалізації  $T_{\text{кр}}$  від типу легуючого елементу, що доводить зв'язок між об'ємними і поверхневими властивостями аморфних сплавів  $\text{Fe}_{80}\text{DM}_5\text{B}_{15}$  і  $\text{Fe}_{78-x}\text{Ni}_x\text{Si}_9\text{B}_{13}$ .
9. Доведено, що експериментальні залежності значень оптичної провідності  $\sigma(h\nu)$  для довжини хвилі світла, що падає  $\lambda = 827,5$  нм і температури кристалізації  $T_{\text{кр}}$  від типу легуючого елементу мають антибатну залежність, що підтверджує критерій Нагеля – Таука про стабільність аморфних сплавів.

## ВИСНОВКИ

У результаті дослідження впливу вмісту легуючих елементів, пластичної деформації, низькоенергетичного іонного бомбардування на аморфні металеві сплави  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$ ,  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{50}\text{B}_{10}$ ,  $\text{Ni}_{85}\text{C}_{15}$ ,  $\text{Fe}_{80}\text{DM}_{5}\text{B}_{15}$  і  $\text{Fe}_{78-x}\text{Ni}_x\text{Si}_9\text{B}_{13}$  було розвинуто уявлення про зв'язок оптичних характеристик поверхні з властивостями твердого тіла в цілому та процесами аморфізації, що дало можливість зробити такі висновки:

1. Уперше проведена оцінка досяжної точності еліпсометричних вимірювань шляхом апроксимації гармоніками результатів експериментальних досліджень та прийняттям нормального закону їх розподілу:  $s_{k1} = 0,233$ ;  $s_{n1} = 0,199$ ;  $s_{k2} = 0,260$ ;  $s_{n2} = 0,268$ ;  $s_d = 4,285 \cdot 10^{-9}$  м.
2. Виявлено, що положення на спектральних залежностях оптичних параметрів аморфних сплавів  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$ ,  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{50}\text{B}_{10}$  переважної більшості розрахункових точок апроксимується гармоніками з незмінним кроком і величиною відносного зсуву, які визначаються електронною структурою зразка. Отримані значення довжин хвиль:  $\lambda = 216$  нм (3d-електрони),  $\lambda = 240$  нм (4s-електрони),  $\lambda = 396$  нм (3p-електрони).
3. Виявлено збільшення об'ємної частки кристалічної фази в аморфному деформованому сплаві  $\text{Ni}_{85}\text{C}_{15}$  ( $f = 0,67-0,18$ ) щодо вихідного аморфного сплаву; наближення його спектральних залежностей оптичних параметрів і оптичної провідності у результаті пластичної деформації до значень параметрів кристалічного сплаву аналогічного хімічного складу, що є результатом утворення кристалічних структур.
4. Установлено, що процентний вміст кристалічної фази біля поверхні аморфного сплаву  $\text{Ni}_{85}\text{C}_{15}$  вищий порівняно з іншими областями цього сплаву. У діапазоні довжин хвиль від  $\lambda = (500-1000)$  нм зменшується від 67 до 0 %. Цей факт свідчить про настання структурної релаксації у поверхневому шарі раніше, ніж у решті об'єму.

5. Установлено, що бомбардування поверхні аморфних сплавів низькоенергетичними іонами приводить до зменшення оптичної товщини поверхневого шару. У діапазоні довжин хвиль  $\lambda = (400-1200)$  нм оптична товщина  $d$  зменшується від 0 до 41 % для сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{50}\text{B}_{10}$  та від 59 до 74 % – для сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$ .
6. Показано, що стабілізація еліпсометричних параметрів поверхні у процесі її бомбардування відбувається упродовж перших 3 хвилин, збільшення часу взаємодії низькоенергетичних іонів із поверхнею подальших змін не викликає.
7. Оптичні характеристики поверхневого шару визначаються фізичним станом поверхні. Чим вища шорсткість, тим більша оптична товщина поверхневого шару  $d$  і менше значення показників заломлення  $n_1$  та поглинання  $k_1$ . Оптичні характеристики підкладки менш чутливі до змін, що відбуваються у поверхневому шарі.
8. Виявлено подібний характер залежностей оптичної товщини  $d$  поверхневого шару і температури кристалізації  $T_{\text{кр}}$  від типу легуючого елемента, що доводить зв'язок між об'ємними і поверхневими властивостями аморфних сплавів  $\text{Fe}_{80}\text{DM}_5\text{B}_{15}$  і  $\text{Fe}_{78-x}\text{Ni}_x\text{Si}_9\text{B}_{13}$ .

**ДОДАТОК А**  
(обов'язковий)

Таблиця А.1

**Результати еліпсометричних вимірювань аморфного сплаву Fe<sub>80</sub>DM<sub>5</sub>B<sub>15</sub>**

ДМ	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni
$I_0$	99	173	135	164	110	136	192
$I_{45}$	141	265	175	213	119	178	216
$I_{90}$	330	559	429	511	352	467	502

Таблиця А.2

**Результати еліпсометричних вимірювань аморфного сплаву Fe<sub>78-x</sub>Ni<sub>x</sub>Si<sub>9</sub>B<sub>13</sub>**

Сплав	$I_{90}$	$I_{45}$	$I_0$
Fe <sub>78</sub> Si <sub>9</sub> B <sub>13</sub>	494	149	134
Fe <sub>77</sub> Ni <sub>1</sub> Si <sub>9</sub> B <sub>13</sub>	644	205	181
Fe <sub>74</sub> Ni <sub>4</sub> Si <sub>9</sub> B <sub>13</sub>	686	239	187
Fe <sub>70</sub> Ni <sub>8</sub> Si <sub>9</sub> B <sub>13</sub>	624	207	189
Fe <sub>62</sub> Ni <sub>16</sub> Si <sub>9</sub> B <sub>13</sub>	734	218	226
Fe <sub>57</sub> Ni <sub>21</sub> Si <sub>9</sub> B <sub>13</sub>	949	309	301

Таблиця А.3

Результати еліпсометричних вимірювань безконтактної поверхні аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$ 

$\lambda, \text{нм}$	500	510	520	530	540	550	560	570	580	590	600	610	620	640	660	680	700
$I_0$	154	188	230	261	290	806	181	88	109	128	154	183	219	142	193	246	111
$I_{45}$	323	390	471	530	580	605	354	175	216	249	297	346	414	259	348	431	191
$I_{90}$	523	632	778	883	977	1043	618	308	384	453	547	644	773	501	682	880	395
$\lambda, \text{нм}$	720	750	780	810	830	860	880	900	940	980	1020	1060	1100	1140	1180	1215	
$I_0$	144	185	223	254	280	323	249	264	266	200	118	49	160	58	40	21	
$I_{45}$	238	298	348	386	413	466	350	362	358	258	148	53	187	65	44	22	
$I_{90}$	505	636	786	896	991	1138	865	907	923	685	399	163	524	186	128	67	

Таблиця А.4

Результати еліпсометричних вимірювань контактної поверхні аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$ 

$\lambda, \text{нм}$	500	510	520	530	540	550	560	570	580	590	600	610	620	640	660	680	700
$I_0$	118	146	184	213	246	267	278	254	45	53	63	74	86	119	159	190	233
$I_{45}$	250	306	380	441	498	539	556	520	92	107	126	148	171	231	302	358	431
$I_{90}$	351	430	544	630	723	787	816	788	141	166	198	236	276	381	510	620	763
$\lambda, \text{нм}$	720	750	780	810	830	860	880	900	940	980	1020	1060	1100	1140	1180	1215	
$I_0$	277	159	183	196	203	221	230	238	223	158	88	296	93	31	80	25	
$I_{45}$	501	280	311	322	330	350	359	364	331	226	122	399	121	41	97	30	
$I_{90}$	918	524	598	636	667	722	756	781	730	512	280	938	286	98	247	76	

Таблиця А.5

**Результати еліпсометричних вимірювань полірованої контактної поверхні аморфного сплаву Ni<sub>40</sub>Fe<sub>40</sub>B<sub>20</sub>**

<b>1-й експеримент</b>										
$\lambda, \text{нм}$	500	600	700	810	900	1020	1100	1140	1180	1215
$I_0$	319	73	92	164	209	261	42	206	54	156
$I_{45}$	720	144	160	252	291	321	49	167	41	113
$I_{90}$	1151	277	344	606	762	941	146	516	133	372
<b>2-й експеримент</b>										
$\lambda, \text{нм}$	500	600	700	810	900	1020	1100	1140	1180	1215
$I_0$	150	128	116	242	315	223	42	206	54	156
$I_{45}$	273	198	155	280	327	203	34	167	41	113
$I_{90}$	427	366	324	662	843	575	104	516	133	372

Таблиця А.6

**Результати еліпсометричних вимірювань бомбардованої поверхні аморфного сплаву Ni<sub>40</sub>Fe<sub>40</sub>B<sub>20</sub>**

$\lambda, \text{нм}$	500	510	520	530	540	550	560	720
$I_0$	69	79	92	100	108	110	111	89
$I_{45}$	120	137	157	169	179	180	174	102
$I_{90}$	197	221	258	282	304	311	313	157
$\lambda, \text{нм}$	750	780	810	830	860	880	900	
$I_0$	106	122	132	139	149	155	156	
$I_{45}$	116	128	134	138	143	145	144	
$I_{90}$	186	212	229	241	254	258	258	

Таблиця А.7

**Результати еліпсометричних вимірювань полірованої безконтакної поверхні аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$**

1-й експеримент							
$\lambda, \text{нм}$	500	600	700	810	900	1020	1100
$I_0$	182	232	149	285	223	104	66
$I_{45}$	369	403	224	375	267	112	65
$I_{90}$	681	853	536	1000	763	346	214
2-й експеримент							
$\lambda, \text{нм}$	500	600	700	810	900	1020	1100
$I_0$	159	113	73	149	201	103	115
$I_{45}$	282	179	98	171	210	94	107
$I_{90}$	507	272	227	453	602	297	332

Таблиця А.8

**Результати еліпсометричних вимірювань бомбардованої поверхні аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{50}\text{B}_{10}$  ( $t = 1$  хв)**

$\lambda, \text{нм}$	500	510	520	530	540	550	560	570	580	590	600	610	620	640	660	680	700
$I_{90}$	416	509	633	755	809	884	919	69	83	100	119	140	164	227	302	378	471
$I_{45}$	272	328	403	475	506	546	562	41	47	57	66	77	89	121	156	190	231
$I_0$	136	167	209	251	270	296	306	23	28	33	39	46	54	73	99	123	154
$\lambda, \text{нм}$	720	750	780	810	830	860	880	900	940	980	1020	1060	1100	1140	1180	1220	
$I_{90}$	562	680	763	814	422	459	491	506	480	339	177	408	126	435	108	34	
$I_{45}$	267	314	339	352	180	191	200	203	186	128	65	145	43	150	37	11	
$I_0$	182	223	252	270	143	156	167	173	165	119	63	147	46	163	40	13	

Таблиця А.9

Результати еліпсометричних вимірювань бомбардованої поверхні аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{50}\text{B}_{10}$  ( $t = 3$  хв)

$\lambda, \text{нм}$	500	510	520	530	540	550	560	570	580	590	600	610	620	640	660	680
$I_{90}$	936	693	857	809	866	946	813	147	175	213	255	301	356	463	274	355
$I_{45}$	617	446	546	511	541	585	498	84	99	119	140	163	190	243	140	177
$I_0$	335	244	303	288	309	340	293	51	60	74	88	105	123	160	96	125
$\lambda, \text{нм}$	700	720	750	780	810	830	860	880	900	940	980	1020	1060	1100	1140	1180
$I_{90}$	450	560	690	818	900	976	1076	461	483	474	350	423	155	95	309	73
$I_{45}$	218	264	318	361	384	409	431	187	192	183	132	156	58	33	107	24
$I_0$	158	198	247	292	322	353	386	170	178	177	133	164	63	38	134	37

Таблиця А.10

Результати еліпсометричних вимірювань бомбардованої поверхні аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{50}\text{B}_{10}$  ( $t = 5$  хв)

$\lambda, \text{нм}$	500	510	520	530	540	550	560	570	580	590	600	610	620	640	660	680	700
$I_{90}$	412	500	613	726	780	255	277	74	91	109	133	154	183	252	330	416	524
$I_{45}$	282	359	412	480	510	153	75	45	55	66	79	90	105	142	181	223	272
$I_0$	148	181	223	263	285	85	100	27	33	40	48	56	66	92	119	152	190
$\lambda, \text{нм}$	720	750	780	810	830	860	880	900	940	980	1020	1060	1100	1140	1180	1220	
$I_{90}$	622	750	395	429	454	490	518	526	490	344	187	276	89	37	94	29	
$I_{45}$	319	369	190	200	207	218	225	226	204	139	73	106	33	14	33	10	
$I_0$	229	275	147	160	170	185	196	200	189	134	74	110	36	19	38	13	



Таблиця А.11

Результати еліпсометричних вимірювань аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{50}\text{B}_{10}$ 

$\lambda, \text{нм}$	500	540	600	660	720	830	900	1020	1060	1100
$I_{90}$	141	248	47	120	238	42	52	187	65	58
$I_{45}$	281	476	83	197	363	57	65	209	70	62
$I_0$	487	885	161	412	802	140	172	606	208	185

Таблиця А.12

Результати еліпсометричних вимірювань вихідного зразка аморфного сплаву  $\text{Ni}_{85}\text{C}_{15}$ 

$E, \text{eV}$	2,5	2,4	2,3	2,2	2,1	2,0	1,9	1,8	1,7	1,6	1,5	1,4	1,3	1,2
$I_{90}$	346	220	302	363	163	265	438	453	276	370	470	487	479	464
$I_{45}$	228	144	194	225	98	155	249	248	145	187	229	226	212	196
$I_0$	105	66	91	112	52	85	143	147	90	121	154	161	159	156
$E, \text{eV}$	1,12	1,1	1,05	0,98	0,95	0,86	0,81	0,76	0,71	0,67	0,64	0,60	0,58	0,54
$I_{90}$	200	109	249	287	305	313	316	303	269	216	197	171	125	84
$I_{45}$	39	44	95	100	105	101	97	88	75	57	51	41	29	19
$I_0$	66	38	86	100	110	116	121	119	108	88	83	73	54	37

Результати еліпсометричних вимірювань аморфного сплаву Ni<sub>85</sub>C<sub>15</sub> після деформації

1-й експеримент														
<i>E</i> , eВ	2,5	2,4	2,3	2,2	2,1	2,0	1,9	1,8	1,7	1,6	1,5	1,4	1,3	1,2
<i>I</i> <sub>90</sub>	364	556	463	519	178	284	455	460	651	268	334	409	410	318
<i>I</i> <sub>45</sub>	245	367	302	330	110	174	271	265	372	145	174	207	199	148
<i>I</i> <sub>0</sub>	76	117	97	110	38	63	101	103	148	60	74	92	94	73
<i>E</i> , eВ	1,12	1,1	1,05	0,98	0,95	0,86	0,81	0,76	0,71	0,67	0,64	0,60	0,58	0,54
<i>I</i> <sub>90</sub>	103	64	129	149	156	161	168	159	139	143	105	90	65	44
<i>I</i> <sub>45</sub>	45	29	55	60	61	61	60	55	46	36	32	26,5	19	12
<i>I</i> <sub>0</sub>	23	16	30	36	39	44	44	43	38	32	30	26	20	14
2-й експеримент														
<i>E</i> , eВ	2,5	2,4	2,3	2,2	2,1	2,0	1,9	1,8	1,7	1,6	1,5	1,4	1,3	1,2
<i>I</i> <sub>90</sub>	531	280	333	349	225	76	585	429	642	357	427	361	368	510
<i>I</i> <sub>45</sub>	328	173	200	208	132	208	328	231	339	180	208	170	166	223
<i>I</i> <sub>0</sub>	101	55	66	71	46	363	125	92	140	77	98	79	82	117
<i>E</i> , eВ	1,12	1,1	1,05	0,98	0,95	0,86	0,81	0,76	0,71	0,67	0,64	0,60	0,58	0,54
<i>I</i> <sub>90</sub>	135	101	169	192	197	211	225	216	196	259	144	109	80	56
<i>I</i> <sub>45</sub>	55	42	65	71	69	72	73	67	58	45	39	28	20	13
<i>I</i> <sub>0</sub>	31	24	41	48	50	56	63	61	57	47	43	33	25	17

Результати еліпсометричних вимірювань кристалічного сплаву  $Ni_{85}C_{15}$ 

1-й експеримент														
$E$ , eВ	2,5	2,4	2,3	2,2	2,1	2,0	1,9	1,8	1,7	1,6	1,5	1,4	1,3	1,2
$I_{90}$	388	576	275	295	255	426	278	427	391	485	585	507	514	201
$I_{45}$	256	370	174	187	155	252	159	238	209	252	295	245	238	89
$I_0$	82	122	58	65	56	94	62	96	87	107	130	112	114	45
$E$ , eВ	1,12	1,1	1,05	0,98	0,95	0,86	0,81	0,76	0,71	0,67	0,64	0,60	0,58	0,54
$I_{90}$	182	66	229	264	295	301	316	300	267	207	197	170	125	85
$I_{45}$	74	28	89	98	106	103	105	93	80	60	55	44	33	21
$I_0$	39	15	51	60	69	73	79	76	69	55	53	47	35	24
2-й експеримент														
$E$ , eВ	2,5	2,4	2,3	2,2	2,1	2,0	1,9	1,8	1,7	1,6	1,5	1,4	1,3	1,2
$I_{90}$	292	463	408	475	206	333	543	409	318	412	370	460	464	184
$I_{45}$	179	279	241	273	117	185	293	211	158	197	171	204	200	76
$I_0$	60	97	87	103	46	76	126	94	73	96	85	107	109	43
$E$ , eВ	1,12	1,1	1,05	0,98	0,95	0,86	0,81	0,76	0,71	0,67	0,64	0,60	0,58	0,54
$I_{90}$	173	134	219	253	265	272	282	264	236	188	172	148	117	79
$I_{45}$	66	53	81	89	90	88	87	78	67	52	46	38	29	19
$I_0$	38	33	52	60	66	69	74	70	65	53	50	44	35	24

## ПРИМІТКИ

Основні результати дисертаційної роботи опубліковані у співавторстві з науковим керівником канд. фіз.-мат. наук Карпушою Василем Даниловичем.

Вважаю своїм приємним обов'язком висловити щире подяку науковому керівнику канд. фіз.-мат. наук, доценту Карпуші В. Д. за вибір тематики, керівництво, зацікавленість до роботи і постійну допомогу та підтримку. Карпуша В. Д. запропонував пов'язати тематику дисертаційної роботи з комплексними дослідженнями аморфних металевих сплавів на основі Ni, Fe, сформулював задачі досліджень, приймав участь у обговоренні результатів та підготовці статей.

Особлива подяка за неоціненну допомогу, наукові ідеї, консультації, обговорення результатів, кваліфіковані поради заслуженому діячу науки і техніки України, д-р. фіз.-мат. наук, професору Проценку Івану Юхимовичу, д-р. фіз.-мат. наук, професору Черноусу Анатолію Миколайовичу, д-р. фіз.-мат. наук, професору Погребняку Олександрю Дмитровичу, д-р. фіз.-мат. наук, професору Проценку Сергію Івановичу.

Висловлює подяку завідувачу кафедри оптики Київського національного університету імені Тараса Шевченка, д-р. фіз.-мат. наук, професору Поперенко Леоніду Володимировичу за надання можливості отримання та обговорення результатів.

Виражаю щире подяку всьому колективу кафедри моделювання складних систем за підтримку, допомогу та активне обговорення результатів дисертаційної роботи на наукових семінарах.

**СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ**

1. Глезер А. М. Принципы создания многофункциональных конструкционных материалов нового поколения / А. М. Глезер // УФН. – 2012. – Т. 182, № 5. – С. 559–566.
2. Bokoch S. A Semi-Empirical Parameterization of Interatomic Interactions Based on the Statistical-Thermodynamic Analysis of the Data on Radiation Diffraction and Phase Equilibria in F.C.C.-Ni–Fe Alloys / S. Bokoch, V. Tatarenko // Sol. St. Phen. – 2008. – V. 138. – P. 303–318.
3. Schuh Chr. A. Mechanical behavior of amorphous alloys / Chr. A. Schuh, T. C. Hufnagel, U. Ramamurty // Acta Mater. – 2007. – V. 55, № 12. – P. 4067–4109.
4. Стародубцев Ю. Аморфные металлические материалы / Ю. Стародубцев, В. Белозеров // Силовая электроника. – 2009. – № 2. – С. 86–89.
5. Діагностика поверхні поляризованим світлом / [Л. В. Поперенко, В. С. Стащук, І. А. Шайкевич, В. А. Одарич]. – К. : ВПЦ «Київський університет», 2007. – 336 с.
6. Gao Y. F. Thermomechanical instability analysis of inhomogeneous deformation in amorphous alloys / Y. F. Gao, B. Yang, T. G. Nieh // Acta Mater. – 2007. – V. 55, № 7. – P. 2319–2327.
7. Wahid M. F. M. Effect of transition metals in the development of Al–Cu–Mg based metallic glass / M. F. M. Wahid, K. J. Laws, M. Ferr // Mat. Res. Innov. – 2013. – V. 17, № 2. – P. 67–72.
8. Structural and thermal sensitivity of Cu-Zr-Ti amorphous alloys to tension / A. H. Cai, X. Xiong, Y. Liu [et al] // Sci. China Phys. Mech. Astron. – 2013. – V. 56, № 8. – P. 1606–1610.
9. Melnichenko L. Yu. Influence of surface dimensional effects and interband transitions on absorption of light in aluminium / L. Yu. Melnichenko, B. B. Tytarchuk, I. A. Shaykevich // Semic. Phys., Quant. Electr. Optoelectr. – 2002. – V. 5, № 3. – P. 300–302.

10. Формирование различных рельефов поверхности металлических стекол под воздействием механической нагрузки / В. Е. Корсуков, В. И. Бетехтин, М. С. Варкентин [и др.] // ФТТ. – 2013. – Т. 55, № 4. – С. 729–735.
11. Crystallization behavior of Al-Ni-Y amorphous alloys / M. Y. Na, K. Ch. Kim, W. T. Kim [et al.] // Applied Microscopy. – 2013. – V. 43, № 3. – P. 127–131.
12. Образование наноструктуры в аморфных сплавах системы Al-Ni-Y / Г. Е. Абросимова, А. С. Аронин, О. И. Баркалов [и др.] // ФТТ. – 2013. – Т. 55, № 9. – С. 1665–1670.
13. Природа деформационной кристаллизации аморфных сплавов на основе железа при мегапластической деформации / Р. В. Сундеев, А. М. Глезер, А. В. Шалимова [и др.] // Деформация и разрушение материалов. – 2013. – № 5. – С. 2–9.
14. Hydrogen permeability and crystallization kinetics in amorphous Ni-Nb-Zr alloys / S.-M. Kim, Dh. Chandra, N. K Narendra [et al.] // Int. J. Hydrogen Energy. – 2012. – V. 37, № 4. – P. 3904–3914.
15. Crystallization behavior of  $\text{Ce}_{70-x}\text{Al}_x\text{Cu}_{20}\text{Co}_x$  ( $x = 0, 1, 3, 5$  at.%) amorphous alloys / Y. Wang, Y. Wang, J. Wang [et al.] // J. Non-Crystal. Solids. – 2012. – V. 358, № 15. – P. 1735–1739.
16. Влияние содержания иттрия на термическую устойчивость и процессы нанокристаллизации аморфных сплавов  $\text{Al}_{86}\text{Ni}_6\text{Co}_2\text{Gd}_{6-x}\text{Y}_x$  и  $\text{Al}_{86}\text{Ni}_2\text{Co}_6\text{Gd}_{6-x}\text{Y}_x$  / В. К. Носенко, Е. А. Сегидя, А. А. Назаренко [и др.] // Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии. – 2013. – Т. 11, № 1. – С. 57–71.
17. Влияние структурирования аморфных металлических сплавов  $\text{Al}_{87}\text{Y}_{5-x}\text{Gd}_x\text{Ni}_{8-y}$  ( $x = 0, 1, 5; y = 0, 4$ ) на их механические свойства / Л. Бойгишин, М. Ковбуз, О. Герцик [и др.] // ФТТ. – 2013. – Т. 55, № 2. – С. 209–212.
18. Швец У. С. Решение обратной задачи эллипсометрии оптимизационными методами / У. С. Швец // Вісник СумДУ. Серія Фізика, математика, механіка. – 2005. – № 8 (80). – С. 160–170.

19. Швець У. Взаємозв'язок оптичних параметрів і електронної структури аморфних сплавів / У. Швець // Вісник Львівського університету. Серія фізична. – 2011. – № 46. – С. 130–137.
20. Швець У. С. Закономерность рассеивания значений спектральных зависимостей оптических параметров аморфных сплавов / У. С. Швець // Materiały VII Międzynarodowej naukowo-praktycznej konferencji [“Perspektywiczne opracowania są nauką i technikami-2011”], (Przemyśl, 07–15 listopada 2011). – 2011. – С. 34–39.
21. Shvets U. S. Analysis of amorphous alloys near-surface layer structure by ellipsometric method / U. S. Shvets, V. D. Karpusha // Materials of VI Int. young scientists conf. [“Optics and High Technology Material Science” (SPO 2005)], (Kyiv, October 27–30, 2005). – 2005. – P. AO.7/22.
22. Shvets U. S. Ellipsometric investigations of plastic deformation influence on the structure of the amorphous alloy  $\text{Ni}_{85}\text{C}_{15}$  / U. S. Shvets, V. D. Karpusha, L. V. Poperenko // Materials of VII Int. young scientists conf. [“Optics and High Technology Material Science” (SPO 2006)], (Kyiv, October 26–29, 2006). – 2006. – P. AP.27/56.
23. Shvets U. S. Magnification of precision of model of the deformed near-surface layer due to an air phase / U. S. Shvets, V. D. Karpusha // Materials of VIII Int. young scientists conf. [“Optics and High Technology Material Science” (SPO 2007)], (Kyiv, October 25–28, 2007). – 2007. – P. AP.5/36.
24. Shvets U. S. Correlation between the optical properties of amorphous alloys and their electronic structure / U. S. Shvets, V. D. Karpusha // Materials of XI Int. young scientists conf. [“Optics and High Technology Material Science” (SPO 2010)], (Kyiv, October 21–24, 2010). – 2010. – P. AP.21/85.
25. Швець У. С. Эллипсометрические исследования степени упорядочения аморфных сплавов в результате пластической деформации / [У. С. Швець, В. Д. Карпуша] // Матеріали конф. молодих учених та аспірантів [“ІЕФ–2007”], (Ужгород, 14–19 травня 2007 р.). – 2007. – С. 208.

26. Швець У. С. Еліпсометричне моделювання оптичних властивостей аморфних металевих сплавів / У. С. Швець, В. Д. Карпуша // Матеріали ІV Міжнар. наук. конф. [“Фізика неупорядкованих систем”], (Львів, 14–16 жовтня 2008 р.). – 2008. – С. 70–71.
27. Швець У. С. Еліпсометричне дослідження структурних змін аморфних сплавів внаслідок пластичної деформації / У. С. Швець, В. Д. Карпуша // Матеріали Міжнар. конф. студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики [“ЕВРИКА–2007”], (Львів, 22–24 травня 2007 р.). – 2007. – С. С8.
28. Швець У. Вплив фізико-механічних факторів на оптичні параметри при поверхневих прошарках аморфних сплавів / У. Швець, В. Карпуша // Матеріали Міжнар. конф. студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики [“ЕВРИКА–2008”], (Львів, 19–21 травня 2008 р.). – 2008. – С. D19.
29. Швець У. Еліпсометричне визначення довжин хвиль 3d-, 3p-, 4s- електронів аморфних сплавів / У. Швець, В. Карпуша // Матеріали Міжнар. конф. студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики [“ЕВРИКА–2009”], (Львів, 20–22 травня 2009 р.). – 2009. – С. D15.
30. Швець У. Особливості розв’язування оберненої задачі еліпсометрії в умовах похибки експерименту / У. Швець // Матеріали Міжнар. конф. студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики [“ЕВРИКА–2010”], (Львів, 19–21 травня 2010 р.). – 2010. – С. 27.
31. Карпуша В. Д. Влияние пластической деформации на структурные изменения приповерхностного слоя аморфных сплавов / В. Д. Карпуша, У. С. Швец // Сборник докладов Харьковской нанотехнологической ассамблеи-2008 [“Наноматериалы”], (Харьков, 2008 г.). – 2008. – Т. 2. – С. 153–158.
32. Карпуша В. Д. Взаимосвязь оптических свойств приповерхностных слоев и объемных характеристик аморфных сплавов / В. Д. Карпуша, У. С. Швец // ФТТ. – 2007. – Т. 49, № 3. – С. 465–467.



33. Карпуша В. Д. Особенности решения обратной задачи в спектроскопических исследованиях / В. Д. Карпуша, У. С. Швець // Вісник СумДУ. Серія Фізика, математика, механіка. – 2004. – № 10 (69). – С. 28–34.
34. Швець У. Еліпсометричні дослідження структурних змін аморфних сплавів унаслідок пластичної деформації / У. Швець, В. Карпуша // Вісник Львівського університету. Серія фізична. – 2008. – № 41. – С. 275–282.
35. Карпуша В. Д. Вплив іонного бомбардування і шорсткості вихідної поверхні на оптичні параметри аморфних металевих сплавів / В. Д. Карпуша, У. С. Швець // ФІП. – 2013. – Т. 11, № 1. – С. 103–111.
36. Немошкаленко В. В. Аморфные металлические сплавы / В. В. Немошкаленко, А. В. Романова, А. Г. Ильинский. – К. : Наукова думка, 1987. – 248 с.
37. Судзуки К. Аморфные металлы / К. Судзуки, К. Фудзимори, К. Хасимото; под. ред. проф. Ц. Масумото. – М. : Металлургия, 1987. – 328 с.
38. Аморфные металлические сплавы / Под ред. Ф. Е. Люборского. – М. : Металлургия, 1987. – 584 с.
39. Iron-based amorphous metals: high-performance corrosion-resistant material development / J. Farmer, J.-Sh. Choi, Ch. Saw [et al.] // Metallurgical and materials transactions A. – 2009. – V. 40, № 6. – P. 1289–1305.
40. Ductility improvement of amorphous steels: Roles of shear modulus and electronic structure / X. J. Gu, S. J. Poon, G. J. Shiflet [et al.] // Acta materialia. – 2008. – V. 56. – P. 99–94.
41. Metallic glasses: viable tool materials for the production of surface microstructures in amorphous polymers by micro-hot-embossing / D. L. Henann, V. Srivastaya, H. K. Taylor [et al.] // J. Micromech. Microeng. – 2009. – V. 19, № 11, 115030. – P. 1–10.
42. Korshunov L. G. Structural transformations and tribological properties of amorphous alloys upon wear at room and cryogenic temperatures / L. G. Korshunov,

- N. L. Chernenko, Yu. N. Goikhenberg // *Phys. Met. Metallogr.* – 2009. – V. 108, № 3. – P. 310–320.
43. Nicholson D. M. C. Calculated effect of alloy additions on the saturation magnetization of  $\text{Fe}_{0.80}\text{B}_{0.20}$  / D. M. C. Nicholson, Y. Wang, M. Widom // *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* – 2003. – V. 754. – P. CC6.12.1 – CC6.12.6.
44. The Mn effect on magnetic structure of FeMn-B amorphous metals / Y. Wang, D. M. C. Nicholson, M. Widom [et al.] // *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* – 2004. – V. 806. – P. 263–268.
45. Наноматериалы, нанопокрyтия, нанотехнологии / Н. А. Азаренков, В. М. Береснев, А. Д. Погребняк [и др.]. – Х.: ХНУ имени В.Н. Каразина, 2009. – 209 с.
46. Новые материалы / В. Н. Анциферов, Ф. Ф. Бездудный, Л. Н. Белянчиков [и др.]; под н. ред. проф. Карабасова Ю.С. – М.: Миссис, 2002. – 736 с.
47. Lin C.K. Preparation and thermal stability of Zr-Ti-Al-Ni-Cu amorphous powders by mechanical alloying technique / C. K. Lin, S. W. Liu, P. Y. Lee // *Metallurg. Mat. Transact. A.* – 2001. – V. 32 A. – P. 1777–1786.
48. Lovas A. New effects and interpretation of amorphous Curie point relaxation in FeNi-based metallic glasses / A. Lovas, K. Ban // *Czech. J. Phys.* – 2004. – V. 54. – P. 89–92.
49. Кинетика структурной релаксации стекла  $\text{Pd}_{40}\text{Cu}_{30}\text{Ni}_{10}\text{P}_{20}$  в объемном и ленточном состояниях по данным измерений электрического сопротивления / С. В. Хоник, В. В. Свиридов, Н. П. Кобелев [и др.] // *ФТТ.* – 2007. – Т. 49, № 8. – С. 1345–1351.
50. Thermal behavior of several Fe-Ni alloys prepared by mechanical alloying and rapid solidification / A. Gonzalez, J. J. Sunol, J. Bonastre [et al.] // *J. Therm. Anal. Cal.* – 2005. – V. 80. – P. 253–256.
51. Праттон М. Введение в физику поверхности / М. Праттон. – Ижевск: НИЦ “Регулярная и хаотическая динамика”, 2000. – 256 с.

52. Kinetics of crystallization of a Fe-based multicomponent amorphous alloy / A. Pratap, T. L. S. Rao, K. Patel [et al.] // *Bull. Mater. Sci.* – 2009. – V. 32, № 5, October. P. 527–529.
53. Барабаш М. Ю. Фізична модель напружень в аморфних сплавах / М. Ю. Барабаш, Л. Ю. Куницька, Ю. А. Куницький // *ФХТТ.* – 2009. – Т 10, № 3. – С. 660–664.
54. Блейкмор Дж. Физика твердого тела / Дж. Блейкмор. – М. : Мир, 1988. – 608 с.
55. Глезер А. М. Аморфные и нанокристаллические структуры: сходства, различия, взаимные переходы / А. М. Глезер // *Рос. хим. журн.* – 2002. – Т. XLVI, № 5. – С. 57–63.
56. Хоник В. А. Стекла: структура и структурные превращения / В. А. Хоник. // *Соросовский образовательный журнал.* – 2001. – Т 7, № 3. – С. 95–102.
57. Effect of the atomic packing density on the structural change rate of amorphous alloys under elastostatic stress / K.-W. Park, M. Wakeda, Y. Shibutani [et al.] // *Met. Mat. Intern.* – 2008. –V. 14, № 2. – P. 159–163.
58. Особенности структуры и магнитные свойства аморфных сплавов на основе железа и кобальта в зависимости от условий нанокристаллизации / Н. И. Носкова, В. В. Шулика, А. Г. Лаврентьев [и др.] // *ЖТФ.* – 2005. – Т. 75, № 10. – С. 61–65.
59. Савін В. В. Формування аморфного стану впорядкуванням конгруентно сполучених кластерів системи Ni-Nb-(Ta, V) / В. В. Савін, Е. Ю. Костенко, О. Б. Коновалов // *ФХТТ.* – 2006. – Т 7, № 4. – С. 670–672.
60. Васильев М. О. Дослідження поверхні аморфного сплаву  $Fe_{75}Ni_4Si_2Mo_3B_{16}$  методами ЕОС та РФЕС / М. О. Васильев, Г. Г. Галстян // *Наук. вісник Ужгородського універ. Серія Фізика.* – 2005. – Т. 17. – С. 60–64.
61. Akashev L. A. The optical properties of Al–8 at.% Ce alloy in the liquid, amorphous, and crystalline states / L. A. Akashev, V. E. Sidorov // *High Temperature.* – 2009. –V. 47, № 3. – P. 331–335.

62. Методы анализа поверхностей / Под ред. А. Зандеры. – М. : Мир, 1979. – 582 с.
63. Influence of Y(Gd) and Ni(Fe) on the principal structural characteristics of  $\text{Al}_{87}\text{Y}_{5-x}\text{Gd}_x\text{Ni}_{8-y}\text{Fe}$  ( $x = 0-5$ ;  $y = 0-4$ ) amorphous metallic alloys / T. Mika, S. Mudryi, B. Kotur [et al.] // *Mat. Sci.* – 2008. – V. 44, № 4. – P. 550–555.
64. Katsndson A. A. Computation method in condensed matter: electronic structure / A. A. Katsndson, V. S. Stepanyuk, A. Szasz. – Springer, 1992. – 320 p.
65. Мотт Н. Электронные процессы в некристаллических веществах / Н. Мотт, Э. Дэвис. – М. : Мир, 1982. – Т.1, 2. – 658 с.
66. Нелинейные явления в нано- и микрогетерогенных системах. / С. А. Гриднев, Ю. Е. Калинин, А. В. Ситников, О. В. Стогней; под ред. С.А. Гриднева. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2012. – 352 с.
67. Поперенко Л. В. Оптичні властивості опромінених металевих дзеркал / Л. В. Поперенко. – К. : ВПЦ «Київський університет», 2005. – 174 с.
68. Петров А. Л. Структура и свойства неупорядоченных твердых тел / А. Л. Петров, А. А. Гаврилюк, С. М. Зубрицкий. – Иркутск, 2004. – 70 с.
69. Кондрат О. Б. Електронні стани на межі поділу аморфного-кристалічного гетеропереходу  $\text{Ge}_{33}\text{As}_{12}\text{Se}_{55-p}\text{-Si}$  / О. Б. Кондрат // *ФХТТ.* – 2006. – Т. 7, № 3. – С. 474–477.
70. Попель О. М. Коливні спектри структурних елементів аморфного  $\text{SiO}_2$  / О. М. Попель, О. В. Книгініцький // *ЖФД.* 1997. – Т. 1, № 2. – С. 151–155.
71. Шабанова И. Н. Рентгеноэлектронное исследование электронной структуры системы Fe–Si / И. Н. Шабанова, Н. С. Теребова, В. И. Кормилец // *ФТТ.* – 2000. – Т 42, № 7. – С. 1161–1163.
72. Turkerman M. E. Understanding modern molecular dynamics: Techniques and applications / M. E. Turkerman, G. J. Martyna // *J. Phys. Chem. B.* – 2000. – V. 104, № 2. – P. 159–178.
73. Белашенко Д. К. Структура жидких и аморфных металлов / Д. К. Белашенко. – М. : Metallurgiya, 1985. – 192 с.

74. Белашенко Д. Б. Компьютерное моделирование некристаллических оксидов / Д. Б. Белашенко // Успехи химии. – 1997. – Т. 66, № 9. – С. 811–844.
75. Simulation study for atomic size and alloying effects during forming process of amorphous alloys / C.-X. Zheng, R.-S. Liu, P. Peng [et al.] // Sci. China ser. G Phys. Mech. Astron. – 2004. – V. 47, № 4. – P. 393–402.
76. Использование модифицированного уравнения Орнштейна–Цернике физики классических жидкостей для описания неравновесных состояний простых молекулярных систем со сферически-симметричным потенциалом взаимодействия / Ю. В. Аграфонов, А. С. Нестеров, Ш. Б. Цыдыпов [и др.] // Труды VII Сессии молодых ученых. – 2004. – С. 243–245.
77. Alvarez F. The atomic and electronic structure of amorphous silicon nitride / F. Alvarez, A. A. Valladares // Rev. Mex. Fis. – 2002. – V. 48, № 6. – P. 528 – 533.
78. First-principles study of crystalline and amorphous  $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$  and the effects of stoichiometric defects / S. Caravati, M. Bernasconi, T. D. Kühne, [et. al] // J. Phys. Cond. Matt. – 2009. – V. 21, № 25, 255501. – P 1–4.
79. First-principles simulation of supercooled liquid alloys / M. Widom, P. Ganesh, S. Kazimirov [et al.] // J. Phys.: Cond. Matt. – 2008. – V. 20, № 11, 114114. – P. 1–4.
80. Лагунов В. А. Компьютерное моделирование формирования кристаллической структуры при переходе из аморфного состояния / В. А. Лагунов, А. Б. Синани // ФТТ. – 2000. – Т 42, № 6. – С. 1087–1091.
81. Лагунов В. А. Образование биструктуры твердого тела в компьютерном эксперименте / В. А. Лагунов, А. Б. Синани // ФТТ. – 1998. – Т. 40, № 10. – С. 1919–1924.
82. Нургаянов Р. Р. Ближний порядок, атомная структура и динамика аморфного сплава  $\text{Ni}_{80}\text{Zr}_{20}$  / Р. Р. Нургаянов, В. Г. Чуудинов, В. И. Ладьянов // ФТТ. – 1997.– Т 39, № 6. – С. 961–963.
83. The Peculiarities of the electronic structure of NiPdP based amorphous alloys / O. Nakonechnaya, I. Plyushchay, O. Yeremenko O [et al.] // ФХТТ. – 2005. – Т. 6, № 1. – С. 78–81.

84. Казіміров В. П. Аналіз структури розплавів системи Fe-Sn з використанням методу RMCA / В. П. Казіміров, С. Ю. Смик // ЖФД. – 2000. – Т. 4, № 1. – С. 68–72.
85. Харьков Е. И. Физика жидких металлов / Е. И. Харьков, В. И. Лысов, В. Е. Федоров. – К. : Вища школа, 1987. – 247 с.
86. Саркисов Г. Н. Молекулярные функции распределения стабильных, метастабильных и аморфных классических моделей / Г. Н. Саркисов // УФН. – 2007. – Т. 172, № 6. – С. 647–669.
87. Optical properties of the  $\text{HfO}_{2-x}\text{N}_x$  and  $\text{TiO}_{2-x}\text{N}_x$  films prepared by ion beam sputtering / V. V. Atuchin, V. N. Kruchinin, A. V. Kalinkin [et al.] // Optics and Spectroscopy. – 2009. – V. 106, № 1. – P. 72–77.
88. Сухорукова М. В. Исследование ультратонких слоев  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  методом эллипсометрии / М. В. Сухорукова, И. А. Скороходова, В.П. Хвостиков // ФТП. – 2000. – Т. 34, № 1. – С. 57–61.
89. Azarova V.V. Ellipsometry of precision optical surfaces and mirror coatings / V.V Azarova, N.M. Solov'eva, V.V. Fokin // Optics and Spectroscopy. – 2009. – V. 107, № 2. – P. 184–188.
90. Громов В. К. Введение в эллипсометрию / В. К. Громов. – Л. : Изд-во Ленингр. ун-та, 1986. – 192 с.
91. Ключев В. В. Неразрушающий контроль и диагностика нанотехнологий и наноматериалов / В. В. Ключев, В. И. Матвеев // Контроль. Диагностика. – 2007.– № 10. – С. 3–13.
92. Романенко А. А. О повышении чувствительности эллипсометрического метода исследования нанослоев / А. А. Романенко // Письма в ЖТФ. – 2000. – Т. 26, № 14. – С. 18–23.
93. Spectroscopic ellipsometry methods for thin absorbing coatings / J. Hilfiker, R. Synowicki, H. G. Tompkins // SVC 51st Annual Technical Conference Proceedings, (Philadelphia, 2008). – 2008. – P. 511–516.
94. Spectroscopic ellipsometry and polarimetry for materials and systems analysis at the nanometer scale: state-of-the-art, potential, and perspectives / M. Losurdo,

M. Bergmair, G. Bruno [et al.] // *J. Nanopart. Res.* – 2009. – V. 11, № 7. – P. 1521–1554.

95. Изменение параметров и состава тонких пленок пористого кремния в результате окисления. Эллипсометрические исследования / Е. В. Астрова, В. Б. Воронков, А. Д. Ременюк [и др.] // *ФТП.* – 1999. – Т. 33, № 10. – С. 1264–1270.

96. Спектральная эллипсометрия гидрогенизированного углерода, выращенного при магнетронном распылении графита / С. Г. Ястребов, М. Гаррига, М. И. Алонсо [и др.] // *ФТП.* – 2003. – Т. 37, № 10. – С. 1241–1243.

97. Карпуша В. Д. Оптические свойства и электронная структура некоторых аморфных сплавов на основе *3d*-металлов: диссертация на соискание ученой степени канд. физ.-мат. наук: 01.04.05 / Василий Данилович Карпуша. – К. : КГУ им.Т.Г. Шевченка, 1989. – 184 с.

98. Tompkins H. G. Handbook of ellipsometry / H. G. Tompkins, E. A. Irene. – New York : Springer, 2005. – 870 p.

99. Азам Р. Эллипсометрия и поляризованный свет / Р. Азам, Н. Башара. – М. : Мир, 1981. – 548 с.

100. Schubert M. Generalized ellipsometry and complex optical systems / M. Schubert // *Thin Sol. Films.* – 1998. – V. 313–314. – P. 323–332.

101. Infrared optical properties of mixed-phase thin films studied by spectroscopic ellipsometry using boron nitride as an example / M. Schubert, B. Rheinländer, E. Franke [et al.] // *Phys. Rev. B.* – 1997. – V. 56, № 20. – P. 13306–13313.

102. Беляева А. И. Границы раздела слоев и шероховатость в многослойной кремниевой структуре / А. И. Беляева, А. А. Галуза, С. Н. Коломиец // *ФТП.* – 2004. – Т. 38, № 9. – С. 1050–1055.

103. Состав и пористость многокомпонентных структур: пористый кремний как трехкомпонентная система / Л. В. Беляков, Т. Л. Макарова, В. И. Сахаров [и др.] // *ФТП.* – 1998. – Т. 32, № 9. – С. 1122–1124.

104. Плівки германію на арсеніді галію: структурні, електронні та оптичні властивості / Є. Ф. Венгер, Р. В. Конакова, Л. О. Матвеєва [та ін.] // ФХТТ. – 2009. – Т 10, № 2. – С. 315–324.
105. Application of spectroscopic ellipsometry to characterization of optical thin films / J. A. Woollam, C. Bungay, L. Yan [et al.] // SPIE. – 2003. – V. 4932. – P. 393–404.
106. Johs B. Quantifying the accuracy of ellipsometer systems / B. Johs, C. M. Herzinger // Phys. Stat. Sol. – 2008. – V. 5. – P. 1301–1035.
107. Nolot E. Ellipsometry characterization of bulk acoustic wave filters / E. Nolot, A. Lefevre, J. Hilfiker // Phys. Stat. Sol. – 2008. – V. 17, № 5. – P. 1168–1171.
108. Эллипсометрия как экспресс-метод установления корреляции между пористостью и газочувствительностью слоев диоксида олова / Д. Ц. Димитров, В. В. Лучинин, В. А. Мошникова [и др.] // ЖТФ. – 1999. – Т 69, № 4. – С. 129–130.
109. Дмитрук М. Л. Морфологія та оптичні властивості острівцевих металевих плівок на поверхні напівпровідників / М. Л. Дмитрук, Т. А. Михайлик, В. Р. Романюк // ФХТТ. – 2001. – Т. 2, № 2. – С. 179–187.
110. Контроль состава гетероэпитаксиальных слоев  $Cd_{1-z}Zn_zTe$  методом спектральной эллипсометрии / М. В. Якушев, В. А. Швец, И. А. Азаров [и др.] // ФТП. – 2010. – Т. 44, № 1. – С. 62–68.
111. Основы эллипсометрии / А. В. Ржанов, К. К. Свиташев, А. И. Семенов [и др.]; под ред. А. В. Ржанова. – Новосибирск : Наука, 1978. – 424 с.
112. Нанокристаллизация аморфного сплава  $Fe_{80}B_{20}$  под действием интенсивной пластической деформации / Г. Е. Абросимова, А. С. Аронин, С. В. Добаткин [и др.] // ФТТ. – 2007. – Т. 49, № 6. – С. 983–988.
113. Sunol J. J. Comparison of Fe-Ni based alloys prepared by ball milling and rapid solidification / J. J. Sunol, A. Gonzalez, L. Escoda // J. Mat. Sci. – 2004. – V. 39. – P. 5147–5150.



114. Аморфные полосы сдвига в деформированном TiNi-сплаве / Е. В. Татьянанин, Н. Ф. Боровиков, В. Г. Курдюмов [и др.] // ФТТ. – 1997. – Т 39, № 7. – С. 1237–1239.
115. Оптическая спектроскопия кристаллического и аморфного состояний молибдата европия / С. З. Шмурак, А. П. Киселева, В. В. Сеницын [и др.] // ФТТ. – 2006. – Т. 48, № 1. – С. 48–54.
116. Бетехтин В. И. Пористость и механические свойства аморфных сплавов / В. И. Бетехтин, А. Г. Кадомцев, О. В. Амосова // Изв. ак. н. Серия физ. – 2003. – Т. 67, № 6. – С. 818–822.
117. Семин А. П. Влияние технологических параметров, химического состава и режимов термической обработки на механические свойства аморфных сплавов Fe-Ni-P / А. П. Семин, А. М. Глезер, В. Е. Громов // Известия ВУЗов. Черная металлургия. – 2003. – № 12. – С. 58–61.
118. Семин А. П. Влияние микролегирования на механические свойства аморфных сплавов / А. П. Семин, А. М. Глезер, В. Е. Громов [и др.] // Вестник СамГТУ. Серия “Физико-математические науки”. – 2004. – № 27. – С. 172–175.
119. Абросимова Г. Е. Влияние концентрации редкоземельного компонента на параметры наноструктуры в сплавах на основе алюминия / Г. Е. Абросимова, А. С. Аронин // ФТТ. – 2009. – Т. 51, № 9. – С. 1665–1671.
120. Яцишин Б. П. Оптичні та електричні властивості тонкоплівкових структур на основі германію та РЗМ / Б. П. Яцишин // ФХТТ. – 2005. – Т. 6, № 3. – С. 418–422.
121. Влияние отжига на избыточный свободный объем и прочность аморфных сплавов / В. И. Бетехтин, Е. Л. Гюлиханданов, А. Г. Кадомцев [и др.] // ФТТ. – 2000. – Т. 42, № 8. – С. 1420–1424.
122. Влияние химического состава и избыточного свободного объема на поверхностную кристаллизацию аморфных сплавов / В. И. Бетехтин, А. Г. Кадомцев, В. Е. Корсуков [и др.] // Письма в ЖТФ. – 1998. – Т. 24, № 23. – С. 58–64.

123. Нанопористость и магнитные характеристики аморфного металлического сплава  $\text{Fe}_{58}\text{Ni}_{20}\text{Si}_9\text{B}_{13}$  / А. И. Слущер, В. И. Бетехтин, А. Г. Кадомцев [и др.] // ЖТФ. – 2006. – Т. 76, № 12. – С. 57–60.
124. Correlation between the electronic structure and thermostability of the Fe-based soft magnetic glasses / M. Babich, O. Nakonechna, I. Plyushchay [et al.] // Phys. Chem. Sol. St. – 2002. – V. 3, № 2. – P. 272–275.
125. Correlation between resistivity characteristics and electronic structure parameters of the TNi-Pd-P amorphous alloys / M. Babich, O. Nakonechna, M. Semen'ko [et. al.] // Mat. Res. Soc. Symp. Proc. – 2001. – V. 644. – P. L12.1.1–L12.1.6.
126. Fractalization of the surface relief of an amorphous alloy as an indication of rupture / V. I. Betekhtin, V. L. Gilyarov, A. G. Kadomtsev [et. al.] // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. – 2009. – V. 73, № 10. – P. 1419–1422.
127. Влияние одноосного растяжения и гидростатического сжатия на геометрию и морфологию поверхности лент аморфного сплава  $\text{Fe}_{77}\text{Ni}_1\text{Si}_9\text{B}_{13}$  / В. И. Бетехтин, П. Н. Бутенко, В. Л. Гиляров [и др.] // ФТТ. – 2008. – Т. 50, № 10. – С. 1800–1806.
128. Влияние интенсивной пластической деформации на электронные свойства сплава  $\text{Cu}_{72}\text{Au}_{24}\text{Ag}_4$  / Н. И. Коуров, В. Г. Пушин, А. В. Королев [и др.] // ФТТ. – 2010. – Т. 52, № 1. – С. 14–19.
129. Влияние деформации на нанокристаллизацию аморфных сплавов / А. С. Аронин, Г. Е. Абросимова, С. В. Добаткин, Д. В. Матвеев, О. Г. Рыбченко // Тезисы докладов Второй Всероссийской конференции по наноматериалам [“НАНО 2007”], (Новосибирск, 2007 г.). – 2007. – С. 44.
130. Гундеров Д. В. Некоторые закономерности аморфизации и нанокристаллизации при интенсивной пластической деформации кристаллических и аморфных сплавов [Электронный ресурс] / Д. В. Гундеров // Электронный научный журнал «Исследовано в России». – 2006. – С. 1404–1412. – Режим доступа до журн.: <http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2006/151.pdf>.

131. Nanocrystallization induced by severe plastic deformation of amorphous alloys / R. Z. Valiev, D. V. Gunderov, A. P. Zhilyaev [et al.] // *J. Met. Nanocr. Mat.* – 2004. – V. 22. – P. 21–26.
132. Severe plastic deformation of amorphous alloys. II. Magnetic Properties / A. M. Glezer, M. P. Plotnikova, A. V. Shalimova [et al.] // *Bull. Russ. Acad. Sci. Phys.* – 2009. – V. 73, № 9. – P. 1310–1314.
133. Влияние деформации на изменение структуры аморфной фазы  $\text{Pd}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_2$  / Г. Е. Абросимова, А. С. Аронин, Н. С. Афоникова [и др.] // *ФТТ.* – 2010. – Т. 52, № 9. – С. 1763–1768.
134. Скачкообразная деформация объемного аморфного сплава  $\text{Pd}_{40}\text{Cu}_{30}\text{Ni}_{10}\text{P}_{20}$  в процессе наноиндентирования / Ю. И. Головин, В. И. Иволгин, А. И. Тюрин [и др.] // *ФТТ.* – 2003. – Т. 45, № 7. – С. 1209–1212.
135. Лякишев Н. П. Наноматериалы конструкционного назначения / Н. П. Лякишев, М. И. Алымов // *Российские нанотехнологии.* – 2006. – Т. 1, № 1–2. – С. 71–81.
136. Верещагин М. Н. Неоднородность пластической деформации аморфных сплавов на основе железа / М. Н. Верещагин, О. М. Остриков, Д. Б. Зюков // *Письма в ЖТФ.* – 2004. – Т. 30, № 5. – С. 82–87.
137. Dependence of the amount of a nanocrystalline phase in the amorphous  $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$  alloy on the degree of severe plastic deformation / G. E. Abrosimova, A. S. Aronin, S. V. Dobatkin, I. I. Zver'kova [et al.] // *Phys. Met. Metallog.* – 2008. – V. 106, № 6. – P. 597–603.
138. Correlated transformation of the microrelief of the stressed surface of an amorphous alloy / V. E. Korsukov, P. N. Butenko, A. S. Luk'yanenko [et al.] // *Glass Phys. Chem.* – 2009. – V. 35, № 5. – P. 484–490.
139. Irreversible structural change induced by elastostatic stress imposed on an amorphous alloy and its influence on the mechanical properties / S.-J. Lee, B.-G. Yoo, J.-I. Jang [et al.] // *Met. Mat. Intern.* – 2008. – V. 14, № 1. – P. 9–13.

140. Мегапластическая деформация аморфных сплавов. I. Структура и механические свойства / А. М. Глезер, М. Р. Плотникова, А. В. Шалимова [и др.] // Известия РАН. – 2009. – Т. 73, № 9. – С. 1302–1309.
141. Золотухин И. В. Аморфные металлические сплавы / И. В. Золотухин, Ю. Е. Калинин // УФН. – 1990. – Т. 160, № 9. – С. 75–110.
142. Золотухин И. В. Физические свойства аморфных металлических материалов / И. В. Золотухин. – М. : Metallurgia, 1986. – 176 с.
143. Кекало И. Б. Влияние упругой и пластической деформации на магнитные свойства аморфных сплавов / И. Б. Кекало, А. Н. Жданов, В. Ю. Цветков // Сб. Структура, структурные превращения и магнитные свойства аморфных металлических сплавов. – М. : Metallurgia, 1986. – С. 118–130.
144. Федоров В. А. Влияние отжига на изменение характера деформирования и разрушения металлического стекла при локальном нагружении / В. А. Федоров, И. В. Ушаков // ЖТФ. – 2001. – Т. 71, № 6. – С. 28–31.
145. Пивоваров А. Л. Новая метастабильная структура в аморфном сплаве  $Fe_{85}B_{15}$  после ионной бомбардировки / А. Л. Пивоваров, С. П. Ченакин, В. Т. Черепин // Письма в ЖТФ. – 1989. – Т. 50, № 10. – С. 420–421.
146. Поздєєв С. В. Дослідження впливу фізико-механічних факторів при інтерпретації еліпсометричних вимірювань для скла К-8 після електронно-променевої обробки / С. В. Поздєєв, Г. М. Дубровська, О. В. Поздєєва // ФХТТ. – 2001. – Т. 2, № 2. – С. 305–310.
147. Structural relaxation of amorphous metallic alloys / M. E. Dokukin, N. S. Perov, A. I. Beskrovnyi [et al.] // J. Magn. Magn. Mat. – 2004. – V. 272-276S. – P. E1151–E1152.
148. Influence of boundary conditions on the parameters of the low-temperature  $\Delta T$  effect / S. Zaichenko, A. Radkovskaya, A. Sivov [et al.] // J. Magn. Magn. Mat. – 2003. – V. 258–259. – P. 567–570.
149. Влияние низкотемпературного отжига на морфологию приповерхностных слоев аморфного сплава на основе железа / В. И. Бетехтин, П. Н. Бутенко, А. Г. Кадомцев [и др.] // ФТТ. – 2007. – Т. 49, № 12. – С. 2118–2124.

150. Буковский Ю. Ф. Ионная и лазерная имплантация металлических материалов / Ю. Ф. Буковский, В. Н. Неволин, В. Ю. Фоминский. – М. : Энергоатомиздат. – 1991. – 253 с.
151. Черезова Л. А. Ионно-лучевые методы в оптической технологии / Л. А. Черезова. – СПб : СПбГУ ИТМО, 2007. – 151 с.
152. Влияние облучения кремния низкоэнергетическими ионами аргона на образование в нем электрически активных дефектов / В. М. Попов, Ю. М. Шустов, А. С. Клименко [и др.] // Материалы электроники. – 2009. – № 4. – С. 48–51.
153. Формирование приповерхностных слоев при низкоэнергетическом высокодозном ионно-плазменном облучении поверхности меди / В. И. Сафонов, И. Г. Марченко, Г. Н. Картмазов [и др.] / ВАНТ. – 2000. – № 4. – С. 182–184.
154. Радиационные технологии модификации поверхности. I. Ионная очистка и высокодозовая имплантация / В. А. Белоус, В. И. Лапшин, И. Г. Марченко [и др.] // ФИП. – 2003. – Т. 1, № 1. – С. 40–48.
155. Погребняк А. Д. Структурно-фазовые превращения в поверхностных слоях и свойства металлических материалов после импульсного воздействия пучков частиц / А. Д. Погребняк, О. П. Кульментьева // ФИП. – 2003. – Т. 1, № 2. – С. 108–136.
156. Поперенко Л. В. Вплив тривалого нейтронного опромінення на оптичні властивості аморфного сплаву в інфрачервоній області / Л. В. Поперенко, Д. В. Носач, І. В. Юргелевич // Sensor. Electr. Micros. Techn. – 2011. – Т. 2 (8), № 2. – С. 27–31.
157. Влияние бомбардировки ионами дейтерия на морфологию и оптические свойства поверхности рекристаллизованного вольфрама / А. И. Беляева, А. А. Галуза, А. А. Савченко [и др.] // Уч. зап. Тавр. нац. ун. Сер. ф.-м. н. – 2010. – Т. 23 (62), № 3. – С. 136–1487.
158. Допуски и посадки. Справочник. Часть 1. / Под. ред. В. Д. Мягкова. – Л. : Машиностроение, 1979. – 543 с.

159. Staryk S. P. A procedure for solving inverse problems of synthesis and characterization of multilayer optical coatings with a protective film / S. P. Staryk, O. G. Gontar, O. M. Kutsai // *J. Superhard Mat.* – 2009. – V. 31, № 5, – P. 323–332.
160. Воеводина С. Н. К вопросу об определении параметров тонких слоев / С. Н. Воеводина, А. В. Тихонравов // *Оптика и спектроскопия.* – 1990. – Т. 68, № 4. – С. 927–931.
161. Тихонов А. Н. Методы решения некорректных задач / А. Н. Тихонов, В. Я. Арсенин. – М. : Наука, 1975. – 224 с.
162. Назаренко И. Н. Решение обратной задачи эллипсометрии для слоя с изменяющимся по толщине комплексным показателем преломления / И. Н. Назаренко, Д. Л. Дорофеев // *Вестник Воронежского гос. унив. Серия химия, биология.* – 2001. – № 1. – С. 164–169.
163. Половинкин В. Г. Определение числа решений обратной задачи эллипсометрии в заданной области параметров / В. Г. Половинкин, С. Н. Свиташева // *Автометрия.* – 1999. – № 4. – С. 94–104.
164. Тихонов А. Н. Математическое моделирование технологических процессов и метод обратных задач в машиностроении / А. Н. Тихонов, В. Д. Кальнер, В. Б. Гласко. – М. : Машиностроение, 1990. – 264 с.
165. Эллипсометрическое исследование релаксационных изменений оптических констант и степени неоднородности тонких пленок стеклообразного  $As_2S_3$  / М. И. Козак, В. Н. Жихарев, В. Ю. Лоя [и др.] // *Письма в ЖТФ.* – 2006. – Т. 32, № 10. – С. 82–87.
166. Коструба А.М. Комплексный метод определения трех параметров поглощающих тонких пленок / А. М. Коструба, О. Г. Влох // *Спектроскопия твердого тела.* – 1996. – Т. 80, №6. – С. 920–924.
167. Шептунов О. А. Решение обратной задачи эллипсометрии для неоднородного диэлектрического слоя на известной подложке с использованием второго приближения теории возмущения / О. А. Шептунов, М. И. Абаев, Н. С. Плисс // *Оптика и спектроскопия.* – 1996. – Т. 80, № 6. – С. 979–983.

168. Kostruba A. M. Optimization of experimental conditions for ellipsometric studies of ultra-thin absorptive films / A. M. Kostruba // *Ukr. J. Phys. Opt.* – 2003. – V. 4, № 4. – P. 177–186.
169. Investigation of adsorption behavior of polymethacrylic acid on silicon substrates / A.M. Kostruba, V.F. Fedorko, Ya.P. Skorobogaty [et al.] // *Ukr. J. Phys. Opt.* – 2001. – V. 2, № 1. – P. 21–25.
170. Optical constants of surface layer on gadolinium gallium garnet: ellipsometric study / A. I. Belyaeva, A. A. Galuza, T. G. Grebennik [et al.] // *Semic. Phys., Quant. Electr. Optoelectr.* – 1999. – V. 2, № 4. – P. 61–65.
171. Влияние переходного слоя на результаты эллипсометрических исследований наноразмерных слоев / Д. И. Биленко, В. П. Полянская, М. А. Гецьман [и др.] // *ЖТФ.* – 2005. – Т. 75, № 6. – С. 69–73.
172. Абаев М. И. Аналитическое решение обратной задачи эллисометрии для всех параметров однослойной изотропной системы / М. И. Абаев // *Эллипсометрия: теория, методы, приложения*, (Новосибирск: Наука, 1987 г.). – 1987. – С. 41–44.
173. Дагман Э. Е. Полное решение обратной задачи эллипсометрии для однослойной системы при вариации толщины и угла падения света / Э. Е. Дагман // *Оптика и спектроскопия.* – 1988. – Т. 65, № 5. – С. 1150–1155.
174. Kushnir O. P. Application of spectral envelope functions of multilayer structures for analytical determination of antireflection conditions / O. P. Kushnir // *Ukr. J. Phys. Opt.* – 2009. – V. 10, № 2. – P. 82–88.
175. Абаев М. И. Метод эллипсометрического анализа пленки, нанесенной на неизвестную многослойную подложку / М. И. Абаев // *Оптика и спектроскопия.* – 1985. – Т. 58, № 5. – С. 1164–1166.
176. Дагман Э. Е. Полное решение обратной задачи эллипсометрии для однослойной системы при вариации толщины пленки / Э. Е. Дагман // *Оптика и спектроскопия.* – 1989. – Т. 66, № 1. – С. 174–179.

177. Мешков Б. Б. Определение параметров поглощающих пленок / Б. Б. Мешков, П. П. Яковлев // Оптический журнал. – 2003. – Т. 70, № 10. – С. 88–90.
178. Крылов П. Н. Регуляризационные методы исследования решения обратной задачи эллипсометрии для системы пленка-подложка / П. Н. Крылов, М. В. Шипкевич // Вестник удмуртского университета. – 2006. – № 4. – С. 65–76.
179. Pribil G. K. Dielectric function of thin metals films by combined in situ transmission ellipsometry and intensity measurements / G. K. Pribil, B. Johs, N. J. Ianno // Thin Sol. Films. – 2004. – V. 455–456. – P. 443–449.
180. Эллипсометрия в науке и технике. Выпуск 2 : сборник трудов. – Новосибирск : АН СССР, 1990. – 189 с.
181. Використання генетичного алгоритму для роз'язання оберненої задачі еліпсометрії / М. Г. Демиденко, С. І. Проценко, О. Б. Проценко [та ін.] // Вісник СумДУ. Серія Фізика, математика, механіка. – 2008. – №1. – С. 33–42.
182. Jain A. K. Artificial neural networks: a tutorial / A. K. Jain, J. Mao, K. M. Mohiuddin // Computer. – 1996. – V. 29, № 3, March. – P. 31–44.
183. Аналитические технологии для прогнозирования и анализа данных. Нейро Проект [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.neuroproject.ru/tutorial.php>.
184. Каширина И. Л. Искусственные нейронные сети / И. Л. Каширина. – Воронеж: ВГУ, 2005. – 51 с.
185. Турчин В. Ф. Использование методов математической статистики для решения некорректных задач / В. Ф. Турчин, В. П. Козлов, М. С. Малкевич // УФН. – 1970. – Т. 102, № 3. – С. 345–386.
186. Ландау Л. Д. Теоретическая физика. Т.8. Электродинамика сплошных сред / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М. : Наука, 1982. – 620 с.
187. Корн Г. Справочник по математике / Г. Корн, Т. Корн. – М. : Наука, 1973. – 831 с.



188. Вакарчук І. О. Квантова механіка / І. О. Вакарчук. – Львів: ЛНУ, 2007. – 848 с.
189. Ландау Л. Д. Теоретическая физика. Т.3. Квантовая механика (нерелятивистская теория) / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М. : Наука, 1989. – 768 с.
190. Горностырев Ю. Н. От фундаментальных характеристик электронной структуры к свойствам дефектов и механическому поведению металлов / Ю. Н. Горностырев // Сборник научных трудов. [“Фазовые и структурные превращения в сталях”], (Магнитогорск, 2001 г.). – 2001. – Вып. 2. – С. 7–26.
191. Китель Ч. Введение в физику твердого тела / Ч. Китель. – М. : Наука, 1978. – 792 с.
192. Absorption of the electromagnetic radiation by the surface modes in heterogeneous media / L. G. Grechko, V. G. Levandovskij, V. V. Motrich [et al.] // *Func. Mat.* – 1995. – V. 2, № 2. – P. 194–200.
193. Венгер Є. Ф. Оптика малих частинок і дисперсних середовищ / Є. Ф. Венгер, А. В. Гончаренко, М. Л. Дмитрук. – К. : Наукова думка, 1999. – 348 с.
194. Емец Ю. П. Дисперсия диэлектрической проницаемости трех- и четырехкомпонентных матричных сред / Ю. П. Емец // *ЖТФ*. – 2003. – Т. 73, № 3. – С. 42–53.
195. Levy O. Maxwell Garnett theory for mixture of anisotropic inclusions: applications to conducting polymers / O. Levy, D. Stroud // *Phys. Rev. B*. – 1997. – V. 56, № 13. – P. 8035–8046.
196. Эволюция оптических и магнитооптических свойств в нанокompозитах аморфных металл-диэлектрик / Е. А. Ганьшина, М. В. Ващук, А. Н. Виноградов [и др.] // *ЖЭТФ*. – 2004. – Т. 125, № 5. – С. 1172–1183.
197. Кобелев Н. П. Влияние деформационной и термической обработок на затухание и модуль сдвига в объемном металлическом стекле Zr-Cu-Ni-Al-Ti / Н. П. Кобелев, Е. Л. Колыванов, В. А. Хоник // *ФТТ*. – 2005. – Т. 47, № 4. – С. 646–649.

198. Кобелев Н. П. Исследование необратимой структурной релаксации в объемном металлическом стекле Pd-Cu-Ni-P / Н. П. Кобелев, Е. Л. Колыванов, В. А. Хоник // ФТТ. – 2006. – Т. 48, № 3. – С. 389–395.
199. Избыточный свободный объем и механические свойства аморфных сплавов / В. И. Бетехтин, А. М. Глезер, А. Г. Кадомцев [и др.] // ФТТ. – 1998. – Т. 40, № 1. – С. 85–89.
200. Бетехтин В. И. Врожденная субмикропористость и кристаллизация аморфных сплавов / В. И. Бетехтин, А. Г. Кадомцев, О. В. Толочко // ФТТ. – 2001. – Т. 43, № 10. – С. 1815–1820.
201. Антонов В. А. Эллипсометрия шероховатой поверхности / В. А. Антонов, В. И. Пшеницын, С. В. Яговкин // Эллипсометрия: теория, методы, приложения, (Новосибирск : Наука, 1987 г.). – 1987. – С. 3–8.
202. Свиташева С. Н. Эффективная среда как модель шероховатой поверхности / С. Н. Свиташева, Р. И. Любинская // Сб. Эллипсометрия: теория, методы, приложения. – Новосибирск : Наука, 1987. – С. 18–24.
203. Мельниченко Л. Ю. Влияние шероховатости и толщины оксидного слоя на спектральную зависимость оптических параметров медного зеркала / Л. Ю. Мельниченко, Л. В. Поперенко, И. А. Шайкевич // Автометрия. – 2012. – Т. 48, № 1. – С. 120–123.
204. Germer T. A. Measurement of roughness of two interfaces of a dielectric film by scattering ellipsometry / T. A. Germer // Phys. Rev. Let. – 2000. – V. 85, № 2. – P. 349–352.
205. Жасминов М. М. Управление качеством деталей при поверхностном пластическом деформировании / М. М. Жасминов. – Алма-Ата : Наука, 1986. – 208 с.
206. Куницкий Ю. А. Некристаллические металлические материалы и покрытия в технике / Ю. А. Куницкий, В. Н. Коржик, Ю. С. Борисов. – Киев : Техника, 1988. – 198 с.