

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Сумський державний університет
Факультет електроніки та інформаційних технологій
Кафедра прикладної математики та моделювання складних систем

«До захисту допущено»

Завідувач кафедри

Ігор КОПЛИК

(підпис)

_____ 2024 р.

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА

на здобуття освітнього ступеня «бакалавр»

зі спеціальності 113 – Прикладна математика,

освітньо-професійної програми «Наука про дані та моделювання складних систем»

на тему: «Моделювання впливу легуючих елементів на оптичні характеристики приповерхневих шарів аморфних сплавів»

Здобувача групи ПМ-01 Горпинича Дениса Валерійовича

Кваліфікаційна робота містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело.

Денис ГОРПИНИЧ

(підпис)

Керівник,
ст. викладач,
канд. фіз.-мат. наук, доцент

Уляна ШВЕЦЬ

(підпис)

Суми – 2024

СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Факультет	електроніки та інформаційних технологій
Кафедра	прикладної математики та моделювання складних систем
Рівень вищої освіти	перший(бакалавр)
Галузь знань	11 «Математика та статистика»
Спеціальність	113 «Прикладна математика»
Освітня програма	освітньо-професійна «Наука про дані та моделювання складних систем»

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри ПМтаМСС

КОПЛИК Ігор _____

«___» _____ 2024 р.

ІНДИВІДУАЛЬНЕ ЗАВДАННЯ НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ ЗДОБУВАЧЕВІ ВИЩОЇ ОСВІТИ

Горпинич Денис Валерійович

1. Тема роботи: «Моделювання впливу легуючих елементів на оптичні характеристики приповерхневих шарів аморфних сплавів».

Керівник роботи: Швець Уляна Станіславівна, канд. фіз.-мат. наук, доцент, старший викладач

затверджено наказом по факультету ЕлІТ від «05» квітня 2024 р. № 0349-VI.

2. Термін подання роботи здобувачем «12» червня 2024 р.

3. Вихідні дані до роботи: результати еліпсометричних вимірювань аморфних сплавів $Fe_{78-x}Ni_xSi_9B_{13}$ ($x = 0, 1, 4, 8, 16, 21$ at. %).

4. Зміст розрахунково-пояснювальної записки (перелік питань, для розроблення): літературний огляд властивостей аморфних сплавів та визначення їх оптичних характеристик, створення математичної моделі та реалізація її в програмному середовищі Python.

5. Перелік графічного матеріалу:

- 1) Схематична модель ізотропна плівка – ізотропна підкладка;
- 2) Графік зміни оптичної товщини приповерхневого шару d залежно від вмісту Ni у аморфних сплавах $Fe_{78-x}Ni_xSi_9B_{13}$;
- 3) Графік зміни показника заломлення приповерхневого шару n_1 залежно від вмісту Ni у аморфних сплавах $Fe_{78-x}Ni_xSi_9B_{13}$;
- 4) Графік зміни показника заломлення підкладки n_2 залежно від вмісту Ni у аморфних сплавах $Fe_{78-x}Ni_xSi_9B_{13}$;
- 5) Графік зміни показника поглинання поверхневого шару k_1 залежно від вмісту Ni у аморфних сплавах $Fe_{78-x}Ni_xSi_9B_{13}$;
- 6) Графік зміни показника поглинання підкладки k_2 залежно від вмісту Ni у аморфних сплавах $Fe_{78-x}Ni_xSi_9B_{13}$;
- 7) Графік зміни об'ємної частки повітряної фази f залежно від вмісту Ni у аморфних сплавах $Fe_{78-x}Ni_xSi_9B_{13}$.

6. Консультанти проекту (роботи) із зазначенням розділів проекту, що їх стосується

Розділ	вище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		Завдання видав	Завдання прийняв

7. Дата видачі завдання «05» квітня 2024 р.

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№ п/п	Назва етапів кваліфікаційної роботи	Термін виконання роботи	Примітка
1	Літературний огляд властивостей аморфних сплавів та визначення їх оптичних характеристик.	06.05.2024 – 12.05.2024	
2	Розв'язання оберненої задачі еліпсометрії методом Нелдера–Міда.	13.05.2024 – 19.05.2024	
3	Моделювання гетерогенної структури АМС.	20.05.2024 – 26.05.2024	
4	Написання тексту кваліфікаційної роботи.	27.05.2024 – 01.06.2024	

Здобувач вищої освіти _____

Денис ГОРПИНИЧ

Керівник роботи _____

Уляна ШВЕЦЬ

АНОТАЦІЯ

Кваліфікаційна робота: 41 с., 7 рис., 5 табл., 11 джерел, 2 додатки.

Мета роботи: розробити комп'ютерну модель розв'язання оберненої задачі еліпсометрії, визначити оптичні характеристики аморфних сплавів $\text{Fe}_{78-x}\text{Ni}_x\text{Si}_9\text{B}_{13}$ ($x = 0, 1, 4, 8, 16, 21$ at. %), встановити розподіл повітряної фази у аморфній матриці поверхневого шару залежно від вмісту Ni у досліджуваних зразках.

Об'єкт дослідження: аморфні металеві сплави.

Предмет дослідження: моделювання оптичних властивостей аморфних сплавів.

Побудована еліпсометрична модель аморфного металевого сплаву та визначені характеристики оптичних систем через розв'язання оберненої задачі шляхом мінімізації цільової функції методом Нелдера-Міда. Знайдена фазова частка повітряної фази у аморфній матриці поверхневого шару сплавів $\text{Fe}_{78-x}\text{Ni}_x\text{Si}_9\text{B}_{13}$ ($x = 0, 1, 4, 8, 16, 21$ at. %). Написаний програмний код у програмному середовищі Python. Усі висновки та кінцеві розрахунки наведені на останніх сторінках.

Ключові слова: ДЕФЕКТИ СТРУКТУРИ АМС, ДІЕЛЕКТРИЧНА ФУНКЦІЯ, ЕЛІПСОМЕТРІЯ, ОБЕРНЕНА ЗАДАЧА, ОСНОВНЕ РІВНЯННЯ ЕЛІПСОМЕТРІЇ, МОДЕЛЬ «ІЗОТРОПНА ПЛІВКА – ІЗОТРОПНА ПІДКЛАДКА», МЕТОД НЕЛДЕРА – МІДА, ГЕТЕРОГЕННЕ СЕРЕДОВИЩЕ, ФАЗОВА ЧАСТКА.

ЗМІСТ

	С.
ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ	4
ВСТУП.....	5
РОЗДІЛ 1. АМОРФНІ МЕТАЛЕВІ СПЛАВИ.....	6
1.1 Дефекти структури АМС	6
1.2 Структурна релаксація	8
1.3 Надлишковий вільний об'єм	9
РОЗДІЛ 2. ВИЗНАЧЕННЯ ДІЕЛЕКТРИЧНОЇ ФУНКЦІЇ ГЕТЕРОГЕННИХ СИСТЕМ.....	11
РОЗДІЛ 3. ЕЛІПСОМЕТРИЧНА МОДЕЛЬ АМОРФНОГО МЕТАЛЕВОГО СПЛАВУ	13
3.1 Еліпсометричний метод дослідження поверхні.	13
3.2 Модель однорідна плівка – однорідна підкладка	16
3.3 Розв'язання оберненої задачі в еліпсометричних дослідженнях.....	18
РОЗДІЛ 4. РОЗРАХУНОК ОПТИЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК.....	23
4.1 Вихідні дані	23
4.2 Алгоритм та описання програми	23
4.3 Результати розрахунків	25
ВИСНОВКИ	32
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	33
ДОДАТОК А	34
ДОДАТОК Б.....	41

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

АМС – аморфні металеві сплави

НВО – надлишковий вільний об'єм

ГС – гетерогенні системи

I_0, I_{45}, I_{90} – інтенсивність світла після проходження системи поляризатор-зразок-аналізатор для трьох положень аналізатора ($\gamma_A=0^\circ, 45^\circ, 90^\circ$) та фіксованому положенні поляризатора ($\gamma_P = 45^\circ$)

d – оптична товщина поверхневого шару

n – показник заломлення

k – показник поглинання

ρ – відносний коефіцієнт відбиття поляризованого світла

θ_0 – кут падіння світла на поверхню зразка

N_0, N_1, N_2 – комплексні показники заломлення середовища, плівки, підкладки відповідно

ВСТУП

Аморфні металеві сплави (АМС) становлять один з найбільш захоплюючих класів матеріалів у сфері сучасного матеріалознавства. Вони відрізняються від кристалічних матеріалів тим, що атоми чи молекули в них розташовані неупорядковано, що надає їм унікальні механічні, термічні та електричні властивості. Ці особливості роблять аморфні металеві сплави привабливими для застосування у різноманітних промислових галузях.

Головною характеристикою АМС є аморфна структура, на відміну від упорядкованої кристалічної структури традиційних металів. Ця структура сприяє появі численних дефектів і деформацій, які впливають на фізичні та хімічні властивості сплавів.

Завдяки своїм унікальним властивостям, АМС використовуються у широкому спектрі застосувань, від електроніки до медичних технологій та побутових приладів. Вони ідеально підходять для виробництва мікроелектромеханічних систем, нанодатчиків та інших електронних компонентів через їх високу міцність, корозійну стійкість та хімічну стабільність.

У цьому контексті, дослідження оптичних властивостей АМС є важливим та актуальним, оскільки воно може поглибити розуміння фізичних характеристик сплавів і відкрити нові можливості для їх промислового застосування.

РОЗДІЛ 1. АМОРФНІ МЕТАЛЕВІ СПЛАВИ

1.1 Дефекти структури АМС

Більшість дефектів, які характерні для кристалічних сплавів, відсутні в аморфних металевих сплавах (АМС). Проте, дослідження властивостей аморфних сплавів показали, що структурні дефекти можуть існувати і в них [1].

Основними причинами виникнення дефектів у АМС є неоднорідності в їх складі. Навіть невеликі зміни у вмісті різних елементів або домішок можуть призвести до утворення неконтрольованих фаз, включень або порожнеч у матеріалі. Процес лиття, який використовується для створення аморфних металевих сплавів, часто викликає механічні напруги через швидке охолодження, що сприяє утворенню дефектів за рахунок великих термічних градієнтів. Чутливість АМС до корозії та окислення, особливо при взаємодії з агресивними середовищами, може призводити до тріщин та інших дефектів на поверхні та в глибині матеріалу. Також механічні впливи, як-от удари, стискання або розтягнення, можуть спричинити деформацію та утворення дефектів у АМС, а неправильне використання або обробка може призвести до руйнування матеріалу. Нерівномірні термічні обробки або температурний режим під час виробництва чи експлуатації також можуть викликати утворення тріщин, пузирів або фазових неоднорідностей.

Дослідники часто розрізняють внутрішні та зовнішні дефекти в аморфних металевих сплавах. Внутрішні дефекти притаманні матеріалу незалежно від його структурної релаксації, тоді як зовнішні дефекти можуть зникати під час релаксаційних змін структури. Типові дефекти аморфних сплавів поділяють на точкові, мікроскопічні протяжні та макроскопічні [1].

Основний точковий дефект у АМС – це вакансії, які представляють собою ділянки, де атоми відсутні. В аморфних структурах, де кристалічна решітка не присутня, вакансії можуть формуватися, коли атоми не займають потрібне місце

під час формування структури. В процесі швидкого охолодження металевго сплаву з рідкого стану атоми впорядковуються хаотично, і висока швидкість охолодження не дає атомам можливості упорядкуватися в кристалічну решітку, залишаючи порожні місця, які формують вакансії. Вакансії можуть значно впливати на різні властивості АМС, включно з механічною міцністю, електричною провідністю та теплопровідністю, відіграючи роль як у позитивних, так і у негативних змінах властивостей матеріалу.

До мікроскопічних протяжних дефектів належать дислокації, які виникають через порушення регулярного розміщення атомів у кристалічній ґратці. У АМС дислокації можуть проявлятися як регіони з відмінною від середньої густиною атомів, що відображає структурну нерегулярність матеріалу. Дислокації в аморфних металевих сплавах можуть виникати з різних причин, зокрема через термічні коливання, механічні напруги під час деформації, а також через нерівномірність складу матеріалу. Під час процесів, таких як швидке охолодження з рідкого стану, можуть утворюватися області, де структура матеріалу не встигає належним чином організуватися, що призводить до формування дислокацій. Ці дефекти можуть впливати на механічні, електричні та теплові властивості сплаву, оскільки вони стають осередками руху атомів і деформації матеріалу.

Основним типом макроскопічних дефектів в АМС є тріщини та розриви, які можуть виникати з багатьох причин, включаючи механічні напруги під час виробництва або обробки, а також внаслідок зовнішніх ударів чи руйнувань. Тріщини можуть початися з маленьких дефектів і поширюватися через матеріал, особливо під дією зовнішніх навантажень або термічних напруг. Такий процес може призводити до повного руйнування матеріалу, ставлячи під загрозу безпеку його застосування. Наявність тріщин серйозно погіршує механічні властивості АМС, зменшуючи їхню міцність, пластичність та стійкість до руйнувань, і навіть незначне механічне навантаження може спричинити подальше розширення тріщини та загрозу руйнування.

1.2 Структурна релаксація

Структурна релаксація в аморфних металевих сплавах (АМС) означає процес, у якому атоми або молекули матеріалу реорганізуються для зменшення внутрішніх напруг і досягнення більш стабільного енергетичного стану. Цей процес, відбуваючись під впливом температури, тиску або механічних напруг, має значний вплив на багато аспектів поведінки та властивостей АМС. Зокрема, структурна релаксація може покращити міцність, пластичність та в'язкість матеріалу шляхом зменшення внутрішніх деформацій. Також вона може змінювати температурну стійкість, збільшуючи термічну стабільність та зменшуючи чутливість до теплових змін. Релаксація впливає на електричну та магнітну провідність, регулюючи розташування носіїв заряду і їх міграцію, підвищує стійкість до корозії, усуваючи дефекти і знижуючи внутрішні напруги. В деяких випадках релаксація може навіть впливати на термоелектричні властивості АМС, змінюючи їхню здатність генерувати електричний струм при зміні температури.

Оглянемо ключові види структурної релаксації в аморфних металевих сплавах та їхній вплив на мікроструктуру та характеристики матеріалу:

1. Термічна релаксація: Цей тип релаксації виникає під дією температури, коли атоми чи молекули в матеріалі отримують достатньо енергії для зміщення і переорганізації. Процес може включати дифузію та перерозподіл атомів, що призводить до зниження внутрішніх напруг, збільшення відстаней між атомами і стабілізації структури.
2. Механічна релаксація: Це відбувається під впливом зовнішніх механічних навантажень, таких як деформація матеріалу. Цей процес може включати пластичну деформацію і відновлення, що може сприяти зменшенню внутрішніх напруг і перестановці дефектів структури.
3. Хімічна релаксація: Це процес, що виникає через хімічні реакції всередині матеріалу, які можуть включати реакції дифузії, окислення чи розчинення. Це може вплинути на зміни в хімічному складі, структурі та фазовому

складі, що, у свою чергу, впливає на механічні, термічні та корозійні властивості матеріалу.

4. Високотемпературна релаксація: Відбувається при високих температурах, коли енергія атомів чи молекул достатня для інтенсивного переміщення та переорганізації. Це може привести до значних змін у мікроструктурі та властивостях матеріалу, включно зі зменшенням напруг, зміною кристалічної орієнтації та розчиненням дефектів.

1.3 Надлишковий вільний об'єм

В аморфних матеріалах, таких як аморфні металеві сплави (АМС), атоми мають хаотичне розташування і не формують добре визначену кристалічну структуру, на відміну від кристалічних матеріалів, де атоми розміщені у строго організованих позиціях кристалічної решітки. Це хаотичне розташування атомів у аморфних матеріалах створює численні прогалини або вільний простір, який називається надлишковим вільним об'ємом. Цей надлишковий вільний об'єм може мати форму порожнеч, атомних вакансій чи інших дефектів у структурі матеріалу. Згідно з деякими авторами, такі пороподібні мікронесуцільності, які є найбільш рухомою складовою вільного об'єму, можуть відігравати ключову роль у структурних перетвореннях і змінах фізико-механічних властивостей АМС під час процесів низькотемпературної структурної релаксації та на початкових етапах кристалізації [2].

Завдяки своїм особливим характеристикам, надлишковий вільний об'єм (НВО) в аморфних металевих сплавах (АМС) відіграє ключову роль у різноманітних областях застосування. НВО забезпечує пластичність сплаву, тобто здатність деформуватися без розриву, роблячи АМС ідеальними для виробництва гнучких компонентів та деталей, які вимагають здатності до механічної деформації. Також НВО сприяє підвищенню термостійкості сплаву, дозволяючи йому зберігати механічні властивості при високих температурах, що робить АМС придатними для використання в умовах екстремальних температур,

високотемпературних застосуваннях та електроніці. НВО також здатний абсорбувати енергію вібрацій та ударів, що робить АМС корисними в галузях, де необхідне зменшення вібрації та поглинання ударів, наприклад, у авіаційній та автомобільній промисловості. Крім того, НВО застосовується у виробництві мікроелектронних пристроїв, таких як датчики, мікросхеми та інші електронні компоненти, які потребують високої міцності та стійкості до деформацій.

Хоча надлишковий вільний об'єм у аморфних металевих сплавах має деякі позитивні характеристики, він також привносить деякі недоліки. НВО може створювати додаткові активні центри на поверхні матеріалу, що підвищує його хімічну реактивність та сприяє корозії або іншим видам руйнування, особливо в агресивних середовищах. Властивості матеріалу можуть з часом змінюватися через процеси релаксації та рекристалізації, що може вести до їхньої деградації. Надлишковий вільний об'єм також може збільшувати крихкість матеріалу при низьких температурах, що становить проблему в застосуваннях, де важлива стійкість до ударних навантажень. Крім того, висока пластичність, спричинена НВО, може робити матеріал менш придатним для певних технологічних процесів, таких як гаряче кування або лиття.

РОЗДІЛ 2. ВИЗНАЧЕННЯ ДІЕЛЕКТРИЧНОЇ ФУНКЦІЇ ГЕТЕРОГЕННИХ СИСТЕМ

Гетерогенне середовище описується як склад, що містить різні компоненти або фази, які можуть мати різні кількості, бути розподілені нерівномірно чи володіти різними фізичними характеристиками. Для опису таких середовищ ефективно використовувати усереднені параметри, які відображають реальну структуру матеріалу та властивості його компонентів. Одним із таких методів є формула суміші, що встановлює залежність між середнім значенням комплексної діелектричної проникності гетерогенної суміші та діелектричною проникністю та об'ємною концентрацією її складових.[3] У гетерогенних системах розрізняють два основних типи мікроструктури: матричну та статистичну. В матричній топології частки дисперсної фази рівномірно розподілені всередині безперервної матриці. Формула Максвелла-Гарнетта виглядає наступним чином [6]:

$$\frac{\varepsilon_{eff} - \varepsilon_1}{\varepsilon_{eff} + (D-1)\varepsilon_1} = \sum_{i=2}^n f_i \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_1}{\varepsilon_i + (D-1)\varepsilon_1}, \quad (2.1)$$

де ε_{eff} – ефективна діелектрична функція гетерогенної системи;

f_i – об'ємна частка;

ε_1 – діелектрична функція матриці;

ε_i – діелектрична функція дисперсних фаз;

D – розмірність гетерогенної системи.

Для нашого випадку рівняння Максвелла-Гарнетта матиме такий вигляд

$$\frac{\varepsilon_{eff} - \varepsilon_1}{\varepsilon_{eff} + 2\varepsilon_1} = f \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_1}{\varepsilon_i + 2\varepsilon_1}. \quad (2.2)$$

Рівняння Максвелла-Гарнетта є ефективним методом для визначення діелектричних характеристик композитів, де одна фаза (інклюдія) вбудована в

іншу, що є неперервною матрицею. Ця модель працює найкраще, коли інклюзії малі порівняно з довжиною хвилі випромінювання і коли один з компонентів значно менший за об'єм, ніж інший. Однак, в умовах більш складних або рівномірно розподілених композитів, застосування рівняння Максвела-Гарнетта може бути обмеженим. У таких ситуаціях зазвичай використовується рівняння Бруггемана, яке дозволяє аналізувати випадки, коли інклюзії та матриця мають схожі об'ємні частки, або коли неможливо чітко визначити, яка з фаз є матрицею, а яка — інклюзією. Для нашого випадку рівняння Бруггемана матиме такий вигляд.

$$(1 - f) \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_{eff}}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon_{eff}} = f \frac{\varepsilon_{eff} - \varepsilon_i}{\varepsilon_{eff} + 2\varepsilon_i} \quad (2.3)$$

Рівняння Бруггемана забезпечує більш загальний підхід, вважаючи, що кожна інклюзія оточена ефективним середовищем, що враховує вплив всіх компонентів. Це самоузгоджувальне рівняння дозволяє адекватно описувати властивості матеріалів, де інтеракція між фазами має значний вплив на ефективні діелектричні властивості.

Ефективна діелектрична функція являє собою комплексну величину. Її можна знайти за наступною формулою:

$$\varepsilon_{eff} = \text{Re}(\varepsilon_{eff}) + i\text{Im}(\varepsilon_{eff}), \quad (2.4)$$

$$\text{Re}(\varepsilon) = n^2 - k^2, \quad (2.5)$$

$$\text{Im}(\varepsilon) = 2nk, \quad (2.6)$$

$$\varepsilon = n^2 - k^2 + i2nk = (n + ik)^2, \quad (2.7)$$

де n – показник заломлення, k – показник поглинання.

РОЗДІЛ 3. ЕЛІПСОМЕТРИЧНА МОДЕЛЬ АМОРФНОГО МЕТАЛЕВОГО СПЛАВУ

3.1 Еліпсометричний метод дослідження поверхні.

Еліпсометрія є набором технік для аналізу поверхонь рідин або твердих тіл шляхом вивчення змін поляризації світлових хвиль, які відбиваються або проходять через поверхню. Коли плоскополяризоване світло взаємодіє з поверхнею, воно зазнає змін, перетворюючись на еліптично поляризоване світло через наявність тонкого шару на межі між різними фазами. Такі зміни поляризації визначаються за допомогою оптичних констант шару, що засновано на принципах Френеля. Еліпсометрія використовується як контактний і високочутливий метод для аналізу процесів на поверхнях, таких як абсорбція чи корозія. У якості джерела світла у цьому методі часто використовують монохроматичне випромінювання, наприклад лазер [4].

Еліпсометрія є ефективним методом для аналізу оптичних властивостей тонких плівок і поверхневих шарів матеріалів, зокрема в мікроелектроніці та технологічних процесах. Цей метод дозволяє точно вимірювати товщину плівок без їх пошкодження, визначати показник заломлення та інші оптичні параметри, що важливо для розуміння взаємодії світла з матеріалом. Еліпсометрія також надає дані про структуру плівок, включаючи анізотропію та шарованість, що використовується в контролі якості тонких покриттів в промисловості. Крім того, цей метод застосовується для дослідження наноматеріалів, таких як квантові точки або нанотрубки, забезпечуючи цінну інформацію про їх оптичні та структурні властивості. Еліпсометрія включає застосування математичних моделей для аналізу та оптимізації властивостей тонких плівок. Еліпсометрія має значний потенціал для точних вимірювань і аналізу тонких плівок, застосовуючись у широкому спектрі наукових, технічних та промислових сфер для дослідження і контролю різних матеріалів.

Основне рівняння еліпсометрії встановлює зв'язок між комплексними коефіцієнтами відбиття R_p та R_s для світла, яке взаємодіє з тонким шаром матеріалу. Визначення еліпсометричних параметрів Ψ та Δ , які реєструються приладом, є ключовим у цьому процесі.

Основне рівняння еліпсометрії виглядає наступним чином

$$\rho = \frac{R_p}{R_s} = \operatorname{tg}(\Psi) \cdot e^{i\Delta}, \quad (3.1.1)$$

де R_p та R_s – комплексні коефіцієнти відбиття p та s компонента відповідно;

Ψ – азимут відновленої лінійної поляризації;

Δ - зсув фаз між ортогональними компонентами вектора поляризації.

Це рівняння відтворює процес взаємодії світла з тонким матеріальним шаром, що дозволяє оцінити такі оптичні властивості шару, як показник заломлення, товщину та інші характеристики. Еліпсометр реєструє параметри Ψ та Δ , а аналіз цих даних дозволяє визначити коефіцієнти відбиття та характеристики матеріалу, що досліджується [5].

Коефіцієнти відбиття можна знайти за допомогою формули Френеля [7]:

$$R_s = \left| \frac{n_1 \cos(\theta_i) - n_2 \cos(\theta_t)}{n_1 \cos(\theta_i) + n_2 \cos(\theta_t)} \right|^2, \quad (3.1.2)$$

$$R_p = \left| \frac{n_1 \cos(\theta_t) - n_2 \cos(\theta_i)}{n_1 \cos(\theta_t) + n_2 \cos(\theta_i)} \right|^2, \quad (3.1.3)$$

де n_1 та n_2 – показники заломлення 1-го та 2-го середовища відповідно;

θ_t – кут заломлення;

θ_i – кут падіння.

Коефіцієнти відбиття можна також знайти за допомогою коефіцієнтів відображення Френеля:

$$R_s = \frac{r_{01s} + r_{12s} e^{-i2\beta}}{1 + r_{01s} r_{12s} e^{-i2\beta}}, \quad (3.1.4)$$

$$R_p = \frac{r_{01p} + r_{12p} e^{-i2\beta}}{1 + r_{01p} r_{12p} e^{-i2\beta}}, \quad (3.1.5)$$

де r_{01p} , r_{12p} , r_{01s} , r_{12s} – коефіцієнти відображення Френеля;

β – фазова товщина плівки.

Фазова товщина плівки:

$$\beta = 2\pi \left(\frac{d_1}{\lambda} \right) \sqrt{N_1^2 - N_0^2 \sin^2 \theta_0}. \quad (3.1.6)$$

Коефіцієнти відображення Френеля знаходяться за наступними формулами:

$$r_{01p} = \frac{N_1 \cos(\theta_0) - N_0 \cos(\theta_1)}{N_1 \cos(\theta_0) + N_0 \cos(\theta_1)}, \quad (3.1.7)$$

$$r_{12p} = \frac{N_2 \cos(\theta_1) - N_1 \cos(\theta_2)}{N_2 \cos(\theta_1) + N_1 \cos(\theta_2)}, \quad (3.1.8)$$

$$r_{01s} = \frac{N_0 \cos(\theta_0) - N_1 \cos(\theta_1)}{N_0 \cos(\theta_0) + N_1 \cos(\theta_1)}, \quad (3.1.9)$$

$$r_{12s} = \frac{N_1 \cos(\theta_1) - N_2 \cos(\theta_2)}{N_1 \cos(\theta_1) + N_2 \cos(\theta_2)}, \quad (3.1.10)$$

У цих формулах θ_0 – кут падіння світла на межу між першим та другим середовищами;

θ_1 – кут заломлення світла у першому середовищі;

θ_2 – кут заломлення світла у другому середовищі;

N_0, N_1, N_2 – комплексні показники заломлення цих середовищ.

Також знаючи закон Снеліуса:

$$\frac{\sin(\theta_0)}{\sin(\theta_1)} = \frac{N_1}{N_0}, \quad (3.1.11)$$

$$\frac{\sin(\theta_1)}{\sin(\theta_2)} = \frac{N_2}{N_1}. \quad (3.1.12)$$

Комплексні показники заломлення:

$$N_0 = n_0 - ik_0,$$

$$N_1 = n_1 - ik_1, \quad (3.1.13)$$

$$N_2 = n_2 - ik_2.$$

3.2 Модель однорідна плівка – однорідна підкладка

Модель ізотропної плівки на однорідній основі є стандартною установкою для еліпсометричних досліджень тонких шарів. В цій моделі обидва компоненти, плівка та підкладка, припускаються ізотропними, що означає, що їх оптичні властивості є однаковими у всіх напрямках. Це дозволяє аналізувати та визначати товщину та інші оптичні параметри плівки.

Різні теоретичні підходи, зокрема модель розповсюдження хвиль, використовуються для моделювання оптичних характеристик цих систем, враховуючи взаємодію світла з плівкою та її підкладкою. Ключовим аспектом визначення оптичних характеристик є апроксимація експериментальних результатів еліпсометра шляхом порівняння з теоретичними розрахунками еліпсометричних параметрів. Моделі з ізотропною плівкою на ізотропній підкладці є надзвичайно корисними для визначення властивостей тонких шарів, таких як напилені плівки чи покриття, створені з різних матеріалів.

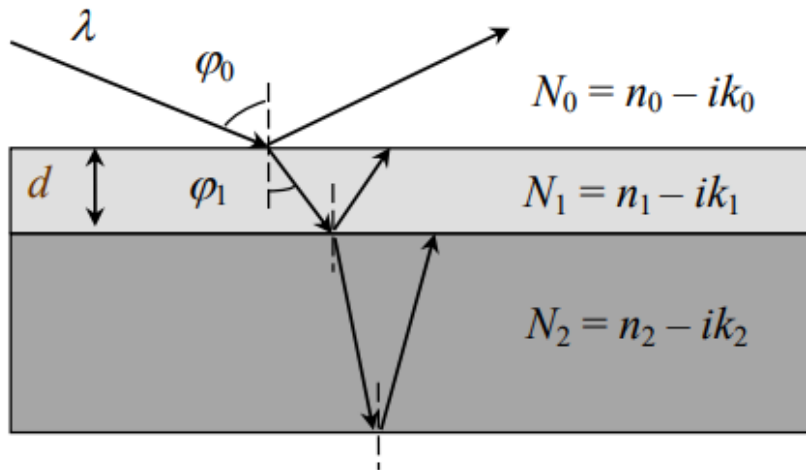


Рисунок – Схематична модель ізотропна плівка – ізотропна підкладка

де n – показник заломлення;

k – коефіцієнт поглинання;

θ – кут падіння світла;

d – товщина плівки.

У моделі, що розглядає взаємодію світла з ізотропними матеріалами, повітря, плівка та підкладка позначаються індексами 0, 1 та 2 відповідно. Ця модель надає можливість вивчати оптичні властивості як плівки, так і підкладки, дозволяючи досліджувати, як матеріали взаємодіють зі світлом. Вона також забезпечує точне вимірювання товщини тонких плівок, що є критично важливим для контролю виробничих процесів та для наукових досліджень.

Модель дозволяє адаптувати додаткові ступені свободи, такі як орієнтація молекул або анізотропія оптичних властивостей, що розширює її застосування в технологічних галузях. Це включає виробництво наплення, створення тонких плівок для сонячних батарей, дисплеїв та інших оптичних пристроїв. Крім того, точне визначення оптичних та структурних властивостей є фундаментальним для контролю якості у промислових процесах.

Важливість цієї моделі також полягає у її ролі у наукових дослідженнях, де вона допомагає вивчати взаємодію світла з тонкими плівками та сприяє розвитку нових технологій. Таким чином, модель ізотропної плівки на ізотропній

підкладці стала ключовим інструментом для розвитку та впровадження тонких плівок у різноманітні технологічні процеси, а також для дослідження їхніх оптичних та фізичних властивостей.

3.3 Розв'язання оберненої задачі в еліпсометричних дослідженнях

Виділяють пряму та обернену задачі еліпсометрії. Перший тип задачі дозволяє розрахувати еліпсометричні кути за відомими оптичними характеристиками досліджуваних оптичних систем. З іншого боку, обернена задача зосереджена на визначенні оптичних характеристик на основі вимірних еліпсометричних кутах.

Оскільки основне рівняння еліпсометрії (3.1.1) має складний та трансцендентний характер, не існує прямого способу для однозначного визначення параметрів. Тому для вирішення таких завдань використовуються ітераційні чисельні методи, які спрямовані на мінімізацію помилкової функції, визначеної певним чином [9].

$$F = \left[\frac{(\Delta_i^{\text{розр}} - \Delta_i^{\text{екс}})^2}{\delta\Delta} + \frac{(\psi_i^{\text{розр}} - \psi_i^{\text{екс}})^2}{\delta\psi} \right] \rightarrow \min, \quad (3.3.1)$$

де $\Delta_i^{\text{екс}}$, $\psi_i^{\text{екс}}$ – вимірні експериментальні еліпсометричні кути;

$\Delta_i^{\text{розр}}$, $\psi_i^{\text{розр}}$ – вираховані розрахункові еліпсометричні кути;

$\delta\Delta$, $\delta\psi$ – експериментальні похибки еліпсометричних кутів.

Рівняння (3.1.1) створює зв'язок між коефіцієнтом ρ та еліпсометричними параметрами Ψ і Δ , які обчислюються під час експериментів. Це дозволяє визначати два параметри системи, за умови, що інші параметри та умови експерименту відомі. Формули для обчислення експериментальних значень $\psi^{\text{експ}}$ і $\Delta^{\text{експ}}$ встановлюються наступним чином:

$$\psi^{\text{експ}} = \text{arctg}\left(\sqrt{\frac{I_{90}}{I_0}}\right), \quad (3.3.2)$$

$$\Delta^{\text{експ}} = \arccos\left(\frac{2I_{45} - I_{90} - I_0}{2\sqrt{I_0 I_{90}}}\right), \quad (3.3.3)$$

де I_0 , I_{45} , I_{90} – інтенсивність світла після проходження системи поляризатор-зразок - аналізатор для трьох положень аналізатора ($\gamma_A = 0^\circ, 45^\circ, 90^\circ$) та фіксованому положенні поляризатора ($\gamma_P = 45^\circ$);

Розраховані значення кутів поляризації $\Delta^{\text{розр}}$, $\psi^{\text{розр}}$ розраховують із співвідношення

$$\psi^{\text{розр}} = \text{arctg}\left(\frac{\text{Re}(\rho)}{\cos\Delta}\right), \quad (3.3.4)$$

$$\Delta^{\text{розр}} = \text{arctg}\left(\frac{\text{Im}(\rho)}{\text{Re}(\rho)}\right). \quad (3.3.5)$$

Обернена задача чутлива до вибору початкового наближення. В якості останнього виберемо значення оптичних параметрів, визначені для моделі напівнескінченного середовища [11].

$$n^2 - k^2 = \sin^2\theta_0 \left(1 + \text{tg}\theta_0 \frac{\cos^2 2\psi - \sin^2 2\psi \sin^2 \Delta}{(1 + \sin 2\psi \cos \Delta)^2}\right), \quad (3.3.6)$$

$$2nk = \sin^2\theta_0 \text{tg}^2\theta_0 \frac{\sin 4\psi \sin \Delta}{(1 + \sin 2\psi \cos \Delta)^2}, \quad (3.3.7)$$

де n , k - ефективні значення показника заломлення і показника поглинання всієї оптичної системи відповідно;

θ_0 – кут падіння світла на поверхню досліджуваного зразка.

Отже, в процесі аналізу після розробки моделі покриття, ключовим етапом є мінімізація неув'язки (3.3.1). Для оптимізації функціоналу F використовуються

методи, що вимагають значних обчислень для надійного знаходження глобального мінімуму. Оптимізаційні методи можна поділити на дві основні групи: методи, що базуються на обчисленні похідних (методи високого порядку) та методи прямого пошуку, які не вимагають використання похідних. Зазвичай, методи, які використовують похідні, досягають збіжності швидше за методи прямого пошуку. Проте, використання методів високого порядку у вирішенні обернених задач оптики шаруватих середовищ має певні труднощі. Перша проблема полягає у тому, що отримання аналітичних похідних часто є складним чи неможливим, а використання чисельних методів може призводити до значних помилок, особливо біля екстремумів. Друга проблема – час, витрачений на підготовку до оптимізації (отримання похідних), може переважати час, необхідний для самої оптимізації за методами прямого пошуку [8]. У цьому контексті для розв'язання оберненої задачі було застосовано метод Нелдера-Міда.

Метод Нелдера-Міда, інакше відомий як симплекс-метод Нелдера-Міда, широко застосовується для знаходження мінімумів функцій з багатьма змінними без необхідності обчислення похідних. Цей метод є важливим інструментом у різноманітних наукових та інженерних дисциплінах, зокрема в оптимізаційних задачах у сфері оберненої еліпсометрії. Він особливо корисний у ситуаціях, де функція витрат має складну структуру або коли обчислення похідних є складним або неможливим. Метод опирається на використання симплекса, який у N -вимірному просторі є геометричною фігурою з $N + 1$ вершинами. У процесі алгоритму симплекс зазнає модифікації через ряд дій, таких як відбиття, стиснення, розтягнення та зсув, дозволяючи ефективно «переміщуватися» по поверхні функції витрат і ефективно «обтікати» локальні мінімуми [10].

Розглянемо детальніше алгоритм мінімізації Нелдера-Міда. Початковим кроком є формування симплексу з початкової точки та n інших точок, які зазвичай обираються шляхом додавання невеликого значення до кожної координати початкової точки. Далі розраховуються значення функції в кожній вершині симплексу ($f_1 = f(x_1)$, $f_2 = f(x_2)$, ..., $f_{n+1} = f(x_{n+1})$), і сортується за значеннями функції від найменшого до найбільшого, де найменше – $f(x_l)$, а

найбільше – $f(x_h)$. Симплекс пересувається за допомогою трьох основних операцій: відображення, розтягування та стиснення, кожна з яких спрямована на поліпшення позиції симплексу відносно цільової функції.

Перша стратегія, яка застосовується, коли потрібно покращити найгіршу вершину симплексу. Найгірша вершина (вершина з найвищим значенням функції, x_h) відображається через центр мас інших вершин симплексу для формування нової точки

$$x_r = x_0 + \alpha(x_0 - x_h), \quad (3.3.8)$$

де α – коефіцієнт відображення, стандартним значенням є $\alpha = 1$;

x_0 – центр мас усіх вершин симплексу, крім найгіршої:

$$x_0 = \frac{1}{n} \sum_{i \neq h} x_i, \quad (3.3.9)$$

де x_i – всі вершини, окрім найкращої.

Нова точка x_r оцінюється за допомогою цільової функції. Якщо $f(x_r) < f(x_h)$, тоді найгірша точка замінюється новою точкою ($x_h = x_r$)

Якщо відображена точка x_r демонструє значне поліпшення, тобто $f(x_r) < f(x_l)$, то алгоритм спробує «розтягнути» симплекс у цьому напрямку, знову використовуючи центр мас як опорну точку, для створення ще кращої точки. Цей крок сприяє подальшому пошуку оптимуму в області, де функція показує кращі результати.

$$x_e = x_0 + \gamma(x_r - x_0), \quad (3.3.10)$$

де γ – коефіцієнт розтягування, стандартним значенням є $\gamma = 2$.

Нова точка x_e оцінюється за допомогою цільової функції. Якщо $f(x_e) < f(x_r)$, тоді найгірша точка x_h замінюється новою точкою x_e ($x_h = x_e$). Якщо $f(x_e) \geq f(x_r)$, тоді найгірша точка x_h залишається рівною x_r ($x_h = x_r$).

Якщо відображення не приводить до поліпшень і нова точка все ще гірша за найкращу, алгоритм застосовує стиснення. Стиснення виконується шляхом зменшення відстані від найгіршої точки до центру мас, спроба знайти краще розташування в близькій області.

$$x_c = x_0 + \rho(x_h - x_0), \quad (3.3.11)$$

де ρ – коефіцієнт стиснення, стандартним значенням є $\rho = 0,5$.

Нова точка x_c оцінюється за допомогою цільової функції. Якщо $f(x_c) < f(x_h)$, тоді найгірша точка x_h замінюється новою точкою x_c ($x_h = x_c$).

Якщо навіть стиснення не призводить до покращення, застосовується останній захід – зменшення симплексу. При цьому всі точки крім найкращої притягуються до найкращої точки, що ефективно зменшує розмір симплексу і дозволяє уникнути потенційних локальних мінімумів.

$$x_i = x_l + \sigma(x_i - x_l), \quad (3.3.12)$$

де σ – коефіцієнт зменшення, стандартним значенням є $\sigma = 0,5$;

x_i – всі вершини, окрім найкращої.

Алгоритм буде діяти поки не будуть досягнуті критерії зупинки. Зазвичай ними є досягнута задана точність або обмежена кількість ітерацій.

РОЗДІЛ 4. РОЗРАХУНОК ОПТИЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК

4.1 Вихідні дані

У цій роботі було досліджено зразки аморфних сплавів: $\text{Fe}_{78}\text{Si}_9\text{B}_{13}$, $\text{Fe}_{77}\text{Ni}_1\text{Si}_9\text{B}_{13}$, $\text{Fe}_{74}\text{Ni}_4\text{Si}_9\text{B}_{13}$, $\text{Fe}_{70}\text{Ni}_8\text{Si}_9\text{B}_{13}$, $\text{Fe}_{62}\text{Ni}_{16}\text{Si}_9\text{B}_{13}$, $\text{Fe}_{57}\text{Ni}_{21}\text{Si}_9\text{B}_{13}$. Еліпсометричні вимірювання були проведені в повітрі.

Таблиця 4.1

Результати еліпсометричних вимірювань аморфного сплаву $\text{Fe}_{78-x}\text{Ni}_x\text{Si}_9\text{B}_{13}$

x , at. %	I_{90}	I_{45}	I_0
0	494	149	134
1	644	205	181
4	686	239	187
8	624	207	189
16	734	218	226
21	949	309	301

Де: Кут падіння світла на поверхню досліджуваного зразка $\theta_0 = 72^\circ$.

Показник заломлення $n_0 = 1$.

Показник поглинання оточуючого середовища $k_0 = 0$.

Довжина хвилі $\lambda = 820$ нм.

4.2 Алгоритм та описання програми

Обернена задача еліпсометрії зосереджена на встановленні оптичних характеристик матеріалу, таких як показники заломлення (n) та коефіцієнти поглинання (k), виходячи з результатів еліпсометричних вимірювань. Особливо корисним в цьому контексті є метод Нелдера-Міда, що не вимагає визначення

градієнтів функції, особливо коли аналітичні похідні важко обчислити або коли функція витрат містить численні локальні мінімуми. Саме тому цей метод було вибрано для розв'язання згаданої задачі.

Алгоритм розв'язання:

- 1) Перш за все, необхідно розрахувати експериментальні дані. Це включає вимірювання еліпсометричних кутів ψ (Псі) та Δ (Дельта), які описують стан поляризації світла після його відбиття від поверхні досліджуваного матеріалу. Їх розрахунок проводимо за формулами (3.3.2) та (3.3.3);
- 2) На основі вихідних характеристик матеріалу та попередніх досліджень необхідно сформулювати початкові припущення щодо показників заломлення n і коефіцієнтів поглинання k для кожного шару матеріалу. За формулами (3.3.8) та (3.3.9);
- 3) Розраховуються розрахункові значення ψ і Δ . Ці розрахунки виконуються за формулами (3.3.4) та (3.3.5) на основі початкових припущень і залежать від товщини шарів, характеристик матеріалу та кута падіння світла;
- 4) Формуємо симплекс, який для n вимірів має $n + 1$ вершину. Кожна вершина ініціалізується з деяким набором параметрів (n, k, d) , що представляють оптичні характеристики матеріалу та товщину шару;
- 5) У кожній вершині симплексу обчислюється функція витрат, яка вимірює відхилення теоретично розрахованих еліпсометричних параметрів від експериментальних даних. Функція витрат може бути визначена як (3.3.1);
- 6) Операції трансформації:
 - ✓ Відображення: Вираховується відбиття гіршої вершини симплексу відносно центроїду решти вершин. Якщо відбита точка має кращу оцінку, вона замінює гіршу вершину.
 - ✓ Експансія: Якщо відбита точка дає значне покращення, виконується спроба «розтягнути» симплекс у цьому напрямку для додаткового покращення.
 - ✓ Контракція: Якщо відбита точка не покращує ситуацію, симплекс «стискається» навколо кращої точки.

- ✓ Зменшення: Якщо жодна з попередніх операцій не приводить до покращення, розмір симплексу зменшується з метою деталізації пошуку в обмеженому регіоні.

7) Алгоритм продовжується до тих пір, поки не будуть досягнуті критерії зупинки, такі як максимальна кількість ітерацій, мінімальне поліпшення функції витрат між ітераціями або мінімальний розмір симплексу.

Код до алгоритму додано у додатку А.

Для врахування надлишкового вільного об'єму, використано рівняння Бруггемана (2.1) та рівняння Максвела-Гарнетта (2.2). Ці рівняння дозволяють адекватно описати поведінку матеріалів на макроскопічному рівні, передбачаючи як електричні, так і оптичні властивості ефективного середовища. У контексті даного дослідження, параметри поверхневого шару, які були отримані в результаті розв'язання оберненої задачі еліпсометрії, прийняті за основу для моделювання ефективного середовища.

Код до алгоритму додано у додатку Б.

4.3 Результати розрахунків

За результатами еліпсометричних вимірювань (табл. 4.1) розраховані експериментальні значення еліпсометричних кутів (табл. 4.2). Для моделі «напівнескінченного середовища» були одержані ефективні значення показника заломлення n та показника поглинання k (табл. 4.3).

Таблиця 4.2

Експериментальні значення еліпсометричних кутів

для аморфних сплавів $Fe_{78-x}Ni_xSi_9B_{13}$

x , at. %	$\psi^{\text{експ}}$, °	$\Delta^{\text{експ}}$, °
0	62,49	129,89
1	62,07	127,43
4	62,43	123,46

8	61,17	125,52
16	60,97	130,04
21	60,61	126,25

Таблиця 4.3

Ефективні значення показника заломлення n та показника поглинання k для аморфних сплавів $\text{Fe}_{78-x}\text{Ni}_x\text{Si}_9\text{B}_{13}$

x , at. %	n	k
0	3,59	3,81
1	3,36	3,81
4	3,12	3,59
8	3,13	3,88
16	3,46	4,12
21	3,12	4,01

Для моделі «ізотропна плівка-ізотропна підкладка» було розв'язано обернену задачу еліпсометрії шляхом мінімізації цільової функції метод Нелдера-Міда (табл 4.4), де в якості початкового наближення шуканих оптичних параметрів були вибрані ефективні значення (n, k) досліджуваних систем.

Знайдені показники заломлення поверхневого шару та підкладки (n_1, n_2) , коефіцієнти поглинання поверхневого шару та підкладки (k_1, k_2) та оптична товщина поверхневого шару (d) були використані для моделювання гетерогенного середовища поверхневого шару з урахуванням повітряної фази в аморфній матриці для наближень Максвела-Гарнета та Бругеммана. Одержані результати наведені на рис. 4.6 та у табл. 4.5.

Таблиця 4.4

Результати розв'язання оберненої задачі еліпсометрії
для аморфних сплавів $\text{Fe}_{78-x}\text{Ni}_x\text{Si}_9\text{B}_{13}$

x , at. %	n_1	n_2	k_1	k_2	d , нм	$F \times 10^{-8}$
0	3,37	4,34	3,23	3,89	11,16	8,13
1	2,99	4,15	3,32	3,68	12,24	8,34
4	2,99	3,92	3,36	3,32	23,54	6,48
8	2,84	3,87	3,66	3,47	17,89	12,24
16	3,21	4,15	3,76	4,03	12,91	7,12
21	2,75	3,95	3,67	3,76	14,44	16,59

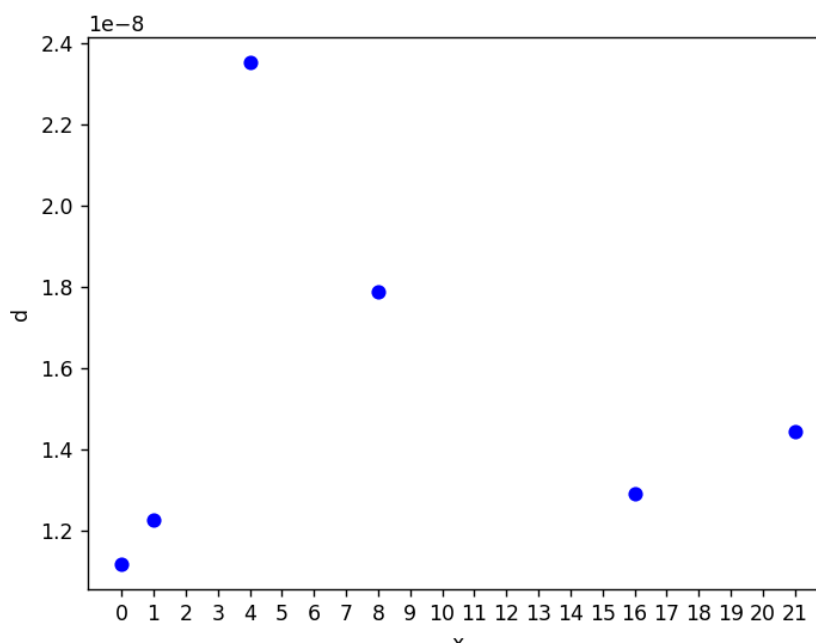


Рисунок 4.1 – Зміна оптичної товщини приповерхневого шару d залежно від вмісту Ni у аморфних сплавах $\text{Fe}_{78-x}\text{Ni}_x\text{Si}_9\text{B}_{13}$

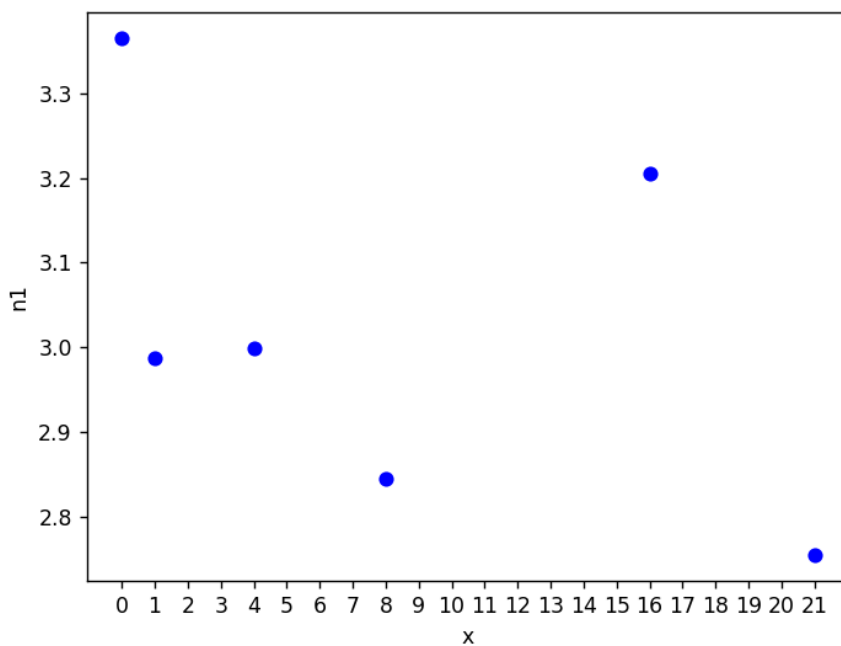


Рисунок 4.2 – Зміна показника заломлення приповерхневого шару n_1 залежно від вмісту Ni у аморфних сплавах $\text{Fe}_{78-x}\text{Ni}_x\text{Si}_9\text{B}_{13}$

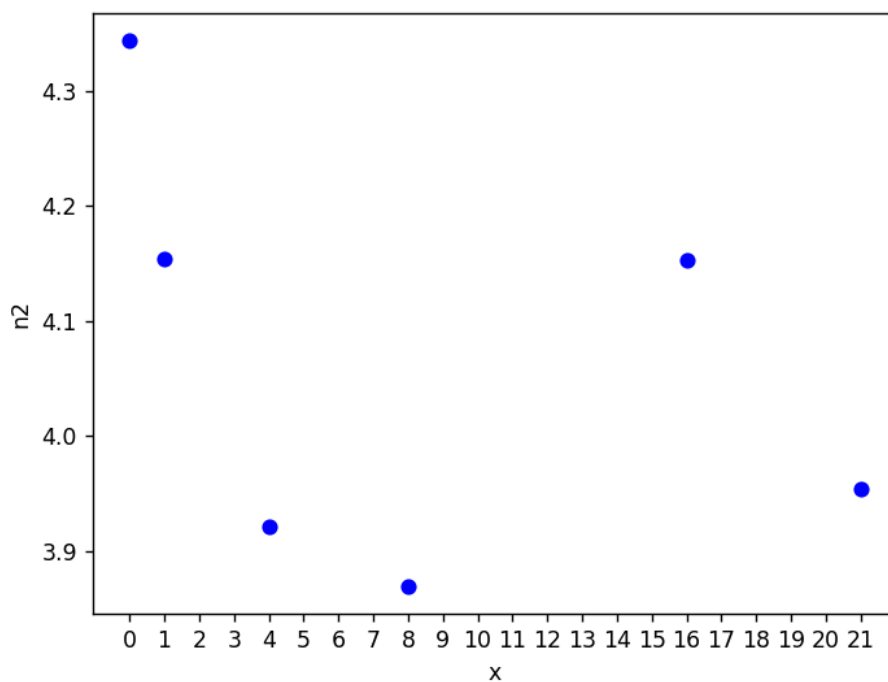


Рисунок 4.3 – Зміна показника заломлення підкладки n_2 залежно від вмісту Ni у аморфних сплавах $\text{Fe}_{78-x}\text{Ni}_x\text{Si}_9\text{B}_{13}$

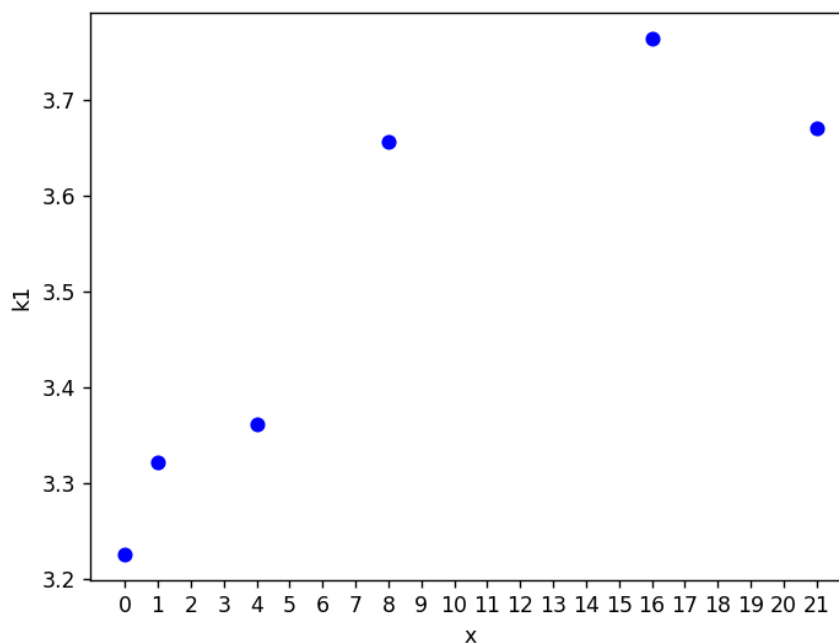


Рисунок 4.4 – Зміна показника поглинання поверхневого шару k_1 залежно від вмісту Ni у аморфних сплавах $\text{Fe}_{78-x}\text{Ni}_x\text{Si}_9\text{B}_{13}$

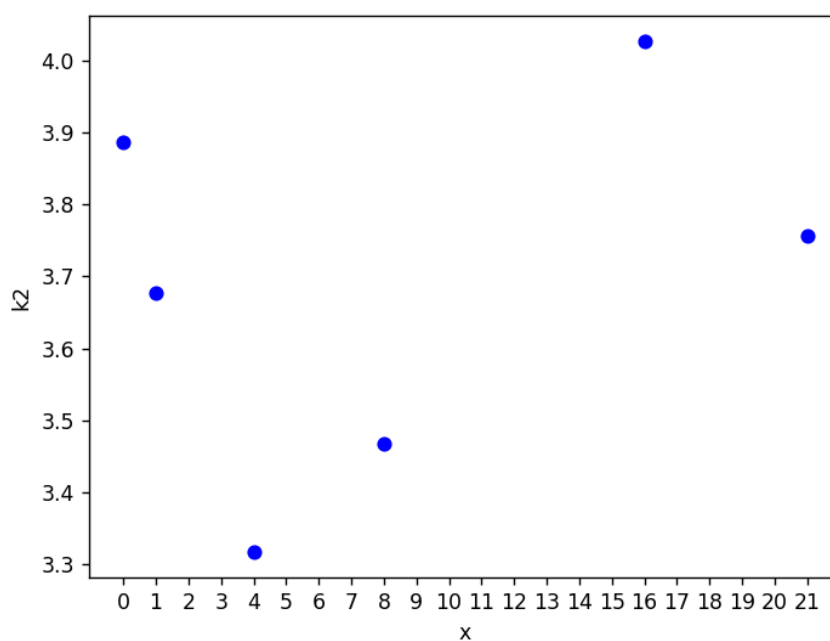


Рисунок 4.5 – Зміна показника поглинання підкладки k_2 залежно від вмісту Ni у аморфних сплавах $\text{Fe}_{78-x}\text{Ni}_x\text{Si}_9\text{B}_{13}$

Відомо, що для аморфних металевих сплавів характерна наявність надлишкового вільного об'єму, водночас досліджувані зразки, а саме приповерхневий шар, має певну шорсткість поверхні, обумовлену процесами

отримання зразків, тому введена повітряна фаза є результатом об'єднання НВО та шорсткості поверхні під час моделювання гетерогенного середовища.

Таблиця 4.5

Об'ємна частка повітряної фази у аморфній матриці поверхневого шару аморфних сплавів $Fe_{78-x}Ni_xSi_9B_{13}$

x , at. %	Наближення Максвела-Гарнета	Наближення Бруггемана
0	27,32 %	24,05 %
1	26,78 %	23,97 %
4	16,89 %	16,51 %
8	15,22 %	15,85 %
16	19,74 %	18,32 %
21	22,17 %	21,06 %

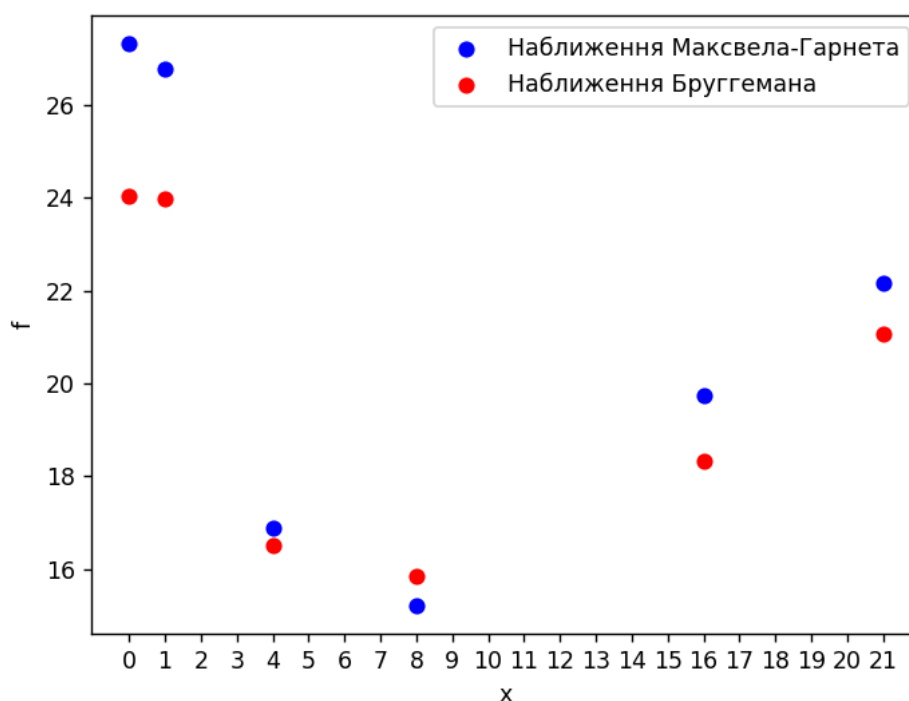


Рисунок 4.6 – Зміна об'ємної частки повітряної фази f , % залежно від вмісту Ni у аморфних сплавах $Fe_{78-x}Ni_xSi_9B_{13}$

Незначні відмінності у значеннях об'ємної частки повітряної фази у аморфній матриці обумовлені теоретичними передумовами топології гетерогенної системи. Так, матрична топологія (наближення Максвелла-Гарнета) припускає, що частинки дисперсної фази розподілені у безперервній матриці, водночас статистична топологія (наближення Бруггемана) описує рівноцінний розподіл окремих фаз. Отже, в умовах нашого моделювання гетерогенна система поверхневого шару аморфних сплавів більш інформативно може бути описана через наближення Максвелла-Гарнета.

З одержаних результатів видно, що найбільша об'ємна частка повітряної фази спостерігається для сплаву $\text{Fe}_{78}\text{Si}_9\text{B}_{13}$ (27,32 %), найменша для сплаву $\text{Fe}_{70}\text{Ni}_8\text{Si}_9\text{B}_{13}$ (15,22 %),

ВИСНОВКИ

1. Для моделі «ізотропна плівка – ізотропна підкладка» розв’язана обернена задача еліпсометрії шляхом мінімізації функціонала методом Нелдера-Міда, що дозволило одержати залежності оптичних параметрів від вмісту Ni для сплавів $\text{Fe}_{78-x}\text{Ni}_x\text{Si}_9\text{B}_{13}$ ($x = 0, 1, 4, 8, 16, 21$ at. %).

2. Моделювання гетерогенного середовища приповерхневого шару аморфного сплаву виконано з урахуванням повітряної фази, що є результатом об’єднання надлишкового вільного об’єму та шорсткості поверхні.

3. Незначні відмінності у значеннях об’ємної частки повітряної фази для наближень Максвела-Гарнета та Бруггемана обумовлені теоретичними передумовами цих наближень. Знайдені фазові частки повітряної фази у приповерхневому шарі більш інформативно описуються за допомогою наближення Максвела-Гарнета.

4. Для сплаву $\text{Fe}_{78-x}\text{Ni}_x\text{Si}_9\text{B}_{13}$ найбільша об’ємна частка повітряної фази $f = 27,32$ % спостерігається за $x = 0$ at. % і найменша $f = 15,22$ % за $x = 8$ at. %.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. ГАВРИЛЮК, Інесса Костянтинівна. Вплив лазерних нагрівів на структурний стан аморфного сплаву системи Co-B. 2023.
2. ВАСИЛЬЄВ, М. О., et al. Магнетомеханічні ефекти в аморфних стрічках. *Metallofizika i Novejsie Tehnologii*, 2020, 42.7.
3. КРИВОРУЧКО, Ya S. Визначення ефективної діелектричної проникності гетеро-генних середовищ та оцінка вмісту вологи в ґрунтах. *Поверхня*, 2011, 3 (18): 22-28.
4. Еліпсометрія [Електронний ресурс]. URL: <https://uk.wikipedia.org/wiki/%D0%95%D0%BB%D1%96%D0%BF%D1%81%D0%BE%D0%BC%D0%B5%D1%82%D1%80%D1%96%D1%8F>
5. Jung, J., Bork, J., Holmgaard, T., Kortbek, N. A., & Pedersen, K. (2004). Ellipsometry. *Scientific Project*, 1-132.
6. КАРПУША, Василь Данилович; ШВЕЦЬ, Уляна Станіславівна. *Еліпсометричні дослідження низькорозмірних структур*. Сумський державний університет, 2015.
7. Fresnel equations [Електронний ресурс]. URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Fresnel_equations
8. СТАРИК, С. П.; ГОНТАР, О. Г.; КУЦАЙ, О. М. Методика розв'язку обернених задач синтезу і аналізу оптичних шаруватих покриттів із захисною плівкою. 2009.
9. KOSTRUBA, A. M., et al. Investigation of the adsorption behavior of polymethacrylic acid on silicon substrates. *Ukrainian Journal of Physical Optics*, 2001.
10. BUNDAY, Brian D. Basic optimisation methods. 1984.
11. Прокопенко, М. Е. «Розв'язання оберненої задачі в еліпсометричних дослідженнях.» (2022).

ДОДАТОК А

```
from math import *

import numpy as np

import cmath

def nelder_mead(f, x_start, bounds, tol=1e-7, max_iter=500):

    alpha = 1.0

    gamma = 2.0

    rho = 0.5

    sigma = 0.5

    n = len(x_start)

    simplex = [x_start]

    for i in range(n):

        x = np.copy(x_start)

        x[i] = x[i] + 0.05 if x[i] != 0 else 0.00025

        simplex.append(x)

    simplex = np.array(simplex)

    def apply_bounds(x):

        for i in range(len(x)):

            x[i] = max(bounds[i][0], min(x[i], bounds[i][1]))

        if x[0] == x[1]:

            x[1] += 0.01 if x[1] + 0.01 <= bounds[1][1] else -0.01

        if x[2] == x[3]:
```

```

x[3] += 0.01 if x[3] + 0.01 <= bounds[3][1] else -0.01

return x

for iteration in range(max_iter):
    simplex = sorted(simplex, key=lambda x: f(x)[0])
    f_values = [f(x)[0] for x in simplex]
    if np.std(f_values) < tol:
        break
    x0 = np.mean(simplex[:-1], axis=0)

    xr = x0 + alpha * (x0 - simplex[-1])
    xr = apply_bounds(xr)
    fr, psi_calculated, delt_calculated, *_ = f(xr)
    if f_values[0] <= fr < f_values[-2]:
        simplex[-1] = xr
        continue

    if fr < f_values[0]:
        xe = x0 + gamma * (xr - x0)
        xe = apply_bounds(xe)
        fe, psi_calculated, delt_calculated, *_ = f(xe)
        if fe < fr:
            simplex[-1] = xe
        else:
            simplex[-1] = xr
    continue

```

```

xc = x0 + rho * (simplex[-1] - x0)

xc = apply_bounds(xc)

fc, psi_calculated, delt_calculated, *_ = f(xc)

if fc < f_values[-1]:
    simplex[-1] = xc
    continue

for i in range(1, len(simplex)):
    simplex[i] = simplex[0] + sigma * (simplex[i] - simplex[0])
    simplex[i] = apply_bounds(simplex[i])

simplex = sorted(simplex, key=lambda x: f(x)[0])
x_min = simplex[0]
f_min, psi_calculated, delt_calculated, *_ = f(x_min)

return x_min, f_min, iteration, psi_calculated, delt_calculated

def exp_angles(data):
    data_array = np.array(data)
    I_90 = data_array[:, 0]
    I_45 = data_array[:, 1]
    I_0 = data_array[:, 2]

    exp_psi = np.arctan(np.sqrt(I_90 / I_0))
    exp_delta = np.arccos((2 * I_45 - I_0 - I_90) / (2 * np.sqrt(I_90 * I_0)))
    exp_psi_delta = np.column_stack((exp_psi, exp_delta))

```

```

exp_psi_degrees = np.degrees(exp_psi)

exp_delta_degrees = np.degrees(exp_delta)

exp_psi_delta_degrees = np.column_stack((exp_psi_degrees, exp_delta_degrees))

return exp_psi_delta, exp_psi_delta_degrees

def find_n_and_k(data_psi_delta_exp, f_0):
    data_array = np.array(data_psi_delta_exp)
    psi = data_array[:, 0]
    delta = data_array[:, 1]

    u = np.tan(psi)
    v = np.cos(delta)

    a = np.sin(f_0) * np.tan(f_0) * (1 - u ** 2) / (1 + u ** 2 + 2 * u * v)
    b = np.sin(f_0) * np.tan(f_0) * (2 * u * np.sqrt(1 - v ** 2)) / ((1 + u ** 2 + 2 * u * v))
    A = 1 / 2 * (a ** 2 - b ** 2 + np.sin(f_0) ** 2)
    B = a * b

    n = np.sqrt(A + np.sqrt(A ** 2 + B ** 2))
    k = np.sqrt(-A + np.sqrt(A ** 2 + B ** 2))

    result = np.column_stack((n, k))

    return result

def objective_function(params, exp_ang, f_0):

```

```

n1, n2, k1, k2, d = params
N0 = complex(1, 0)
N1 = complex(n1, -k1)
N2 = complex(n2, -k2)

f_1 = cmath.asin((cmath.sin(f_0) * N0) / N1)
f_2 = cmath.asin((cmath.sin(f_1) * N1) / N2)

lamb = 820e-9

beta = 2 * pi * (d / lamb) * (N1 ** 2 - N0 ** 2 * cmath.sin(f_0) ** 2) ** (1 / 2)

r_01p = (N1 * cmath.cos(f_0) - N0 * cmath.cos(f_1)) / (N1 * cmath.cos(f_0) + N0 *
cmath.cos(f_1))

r_12p = (N2 * cmath.cos(f_1) - N1 * cmath.cos(f_2)) / (N2 * cmath.cos(f_1) + N1 *
cmath.cos(f_2))

r_01s = (N0 * cmath.cos(f_0) - N1 * cmath.cos(f_1)) / (N0 * cmath.cos(f_0) + N1 *
cmath.cos(f_1))

r_12s = (N1 * cmath.cos(f_1) - N2 * cmath.cos(f_2)) / (N1 * cmath.cos(f_1) + N2 *
cmath.cos(f_2))

e_beta=cmath.exp(-1j * 2 * beta)

ro_p = (r_01p + r_12p * e_beta) / (1 + r_01p * r_12p * e_beta)

ro_s = (1 + r_01s * r_12s * e_beta) / (r_01s + r_12s * e_beta)

ro = ro_p * ro_s

delt_calculated = np.arctan(ro.imag / ro.real)

psi_calculated = atan(ro.real / cos(delt_calculated))

```



```

if delt_calculated < 0:
    delt_calculated = pi + delt_calculated
if psi_calculated < 0:
    psi_calculated = pi/2 + psi_calculated

psi_exp = degrees(exp_ang[0])
delt_exp = degrees(exp_ang[1])

error = ((degrees(psi_calculated) - psi_exp) ** 2)/0.03 + ((degrees(delt_calculated) - delt_exp) **
2)/0.03

return error, psi_calculated, delt_calculated, psi_exp, delt_exp

def optimize_parameters(data, f_0):
    results = []

    exp_psi_delta, exp_psi_delta_degrees = exp_angles(data)

    n_k = find_n_and_k(exp_psi_delta, f_0)

    for i, exp_ang in enumerate(exp_psi_delta):
        initial_guess = [
            n_k[i][0]-0.65,
            n_k[i][0]+0.65,
            n_k[i][1]-0.65,
            n_k[i][1]+0.65,
            30e-9
        ]

        bounds = [
            (max(1, n_k[i][0] - 1), n_k[i][0] + 1),
            (max(1, n_k[i][0] - 1), n_k[i][0] + 1),
            (max(0, n_k[i][1] - 1), n_k[i][1] + 1),

```

```

(max(0, n_k[i][1] - 1), n_k[i][1] + 1),
(1e-9, 100e-9)
]
result, f_min, iterations, psi_calculated, delt_calculated = nelder_mead(
    lambda x: objective_function(x, exp_ang, f_0), initial_guess, bounds)
results.append(result)

print(f'Результати для ітерації {i}: {result}, кількість ітерацій: {iterations}, \nмінімальне
значення цільової функції: {f_min}')

print(
    f'\nпсі розрахункове: {degrees(psi_calculated)},\nпсі експериментальне:
{degrees(exp_ang[0])} \ndельта розрахункове: {degrees(delt_calculated)}\n'
    f'\ndельта експериментальне {degrees(exp_ang[1])}\n')

return results

data_amorphous = [
    [494, 149, 134],
    [644, 205, 181],
    [686, 239, 187],
    [624, 207, 189],
    [734, 218, 226],
    [949, 309, 301] ]

exp_psi_delta, exp_psi_delta_degrees = exp_angles(data_amorphous)

f_0 = radians(72)

optimized_parameters = optimize_parameters(data_amorphous, f_0)

```

ДОДАТОК Б

```
F_M=[]
```

```
F_B=[]
```

```
for i in range(len(optimized_parameters)):
```

```
    n0 = 1
```

```
    k0 = 0
```

```
    n1 = optimized_parameters[i][0]
```

```
    n2 = optimized_parameters[i][1]
```

```
    k1 = optimized_parameters[i][2]
```

```
    k2 = optimized_parameters[i][3]
```

```
    eps_effect = complex((n1 ** 2 - k1 ** 2), 2 * n1 * k1)
```

```
    eps_0 = complex((n0 ** 2 - k0 ** 2), 2 * n0 * k0)
```

```
    eps_2 = complex((n2 ** 2 - k2 ** 2), 2 * n2 * k2)
```

```
    f_m = ((eps_effect - eps_2) / (eps_effect + 2 * eps_2)) * ((eps_0 + 2 * eps_2) / (eps_0 - eps_2))
```

```
    F_M.append(f_m.real*100)
```

```
    b = (eps_effect - eps_0) / (2 * eps_effect + eps_0)
```

```
    a1 = (eps_2 + 2 * eps_effect) / (eps_2 - eps_effect)
```

```
    f_b = 1 / (b * a1 + 1)
```

```
    F_B.append(f_b.real*100)
```

```
print("\nРезультат Максвелла-Гарнетта ")
```

```
print(F_M)
```

```
print('Результат Бруггемана')
```

```
print(F_B)
```