

СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

**ШВЕЦЬ УЛЯНА СТАНІСЛАВІВНА**

УДК 538.971

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

01.04.07 – фізика твердого тіла

**АВТОРЕФЕРАТ**

дисертації на здобуття наукового ступеня  
кандидата фізико-математичних наук

Суми – 2014

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Сумському державному університеті  
Міністерства освіти і науки України.

Науковий керівник – кандидат фізико-математичних наук, доцент  
**Карпуша Василь Данилович**,  
Сумський державний університет,  
перший проректор.

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, професор  
**Шайкевич Ігор Андрійович**,  
Київський національний університет  
імені Тараса Шевченка,  
професор кафедри оптики;

доктор фізико-математичних наук, професор  
**Татаренко Валентин Андрійович**,  
Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова  
НАН України,  
заступник директора з наукової роботи.

Захист відбудеться “     ” травня 2014 р. о 13<sup>00</sup> годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 55.051.02 Сумського державного університету за адресою: 40007, м. Суми, вул. Римського-Корсакова, 2, корпус БЦ, ауд. 307.

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Сумського державного університету за адресою: 40007, м. Суми, вул. Римського-Корсакова, 2.

Автореферат розісланий “     ” квітня 2014 р.

Учений секретар  
спеціалізованої вченої ради

А. С. Опанасюк

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**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. 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.

У науковому і прикладному аспектах важливим є виготовлення поверхонь металів із заздалегідь заданими параметрами. 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. 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.

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.

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 невпорядкованих систем на їх оптичні властивості” (2004–2005 рр.), № 0107U001612 “Вплив зовнішніх факторів на оптичні параметри приповерхневих прошарків аморфних сплавів” (2007–2008 рр.), № 0109U004114 “Розв'язування оберненої задачі еліпсометрії в умовах похибки експерименту” (2009–2010 рр.), № 0111U007000 “Еліпсометричні дослідження низькорозмірних структур” (2011–2015 рр). 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  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$  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 досягну 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.

**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 [2, 5, 8], тези доповідей [11, 16, 18]; у статтях [1, 3, 4, 6, 7] і тезах доповідей [9, 10, 12–15, 17] 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 naukowo-praktycznej konferencji “Perspektywiczne opracowania są nauką i technikami-2011” (Przemysł, 2011); науково-технічних конференціях виклада-

чів, співробітників, аспірантів і студентів факультету ЕлІТ СумДУ (Суми, 2003–2008, 2010).

**Публікації.** Основні матеріали дисертації відображені у 18 [1–18] публікаціях, серед яких 6 статей [1–6] опубліковано у фахових наукових виданнях, а стаття [3] опублікована в іноземному виданні, що індексується наукометричною базою даних Scopus, 2 статті – у матеріалах конференцій [7, 8] та 10 – у тезах доповідей наукових конференцій [9–18].

**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.

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтована актуальність теми, сформульовані мета, основні задачі та зазначені методи дослідження, подаються наукова новизна та практичне значення отриманих результатів, відмічений зв'язок роботи з науковими темами, наведена інформація про апробацію отриманих результатів, особистий внесок здобувача, структуру роботи.

У **першому розділі** “Особливості будови непорядкованих матеріалів та вплив на їх структуру зовнішніх чинників (літературний огляд)” проведено огляд наукових джерел стосовно особливостей аморфного стану та існуючих моделей опису аморфного тіла, умов аморфізації. Аналізується зв'язок між методами отримання, атомно-електронною структурою та фізичними властивостями аморфних сплавів. Наведені методи дослідження атомно-електронної структури АМС, зокрема оптичний метод аналізу поверхневих властивостей сплавів. Розглядаються питання термічної стабільності та процесів структурної релаксації АМС. Узагальнено результати останніх досліджень впливу деформації та опромінення частинками різної природи на фазові перетворення в аморфних тілах та їх властивості.

У **другому розділі** “Методологія та методи дослідження” описані методи отримання, підготовки та дослідження зразків АМС. Визначена адекватна математична модель відбивального середовища, що якісно задовольняє умови дослідження.

У роботі були розглянуті 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  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$ ,  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{50}\text{B}_{10}$ ,  $\text{Fe}_{80}\text{DM}_5\text{B}_{15}$ ,  $\text{Fe}_{78-x}\text{Ni}_x\text{Si}_9\text{B}_{13}$  – методом спінінгування розплаву із швидкістю охолодження  $V = 10^6$  К/с. Останній метод отримання АМС характеризувався різним станом боків стрічки: контактної з диском (внутрішньої) та зовнішньої (що контактує з атмосферою).

Для отримання дзеркальної поверхні зразків аморфного сплаву застосовувалося механічне полірування з використанням пасти АСМ 1/0 НВМ, ГОСТ 25593-83. Структурна релаксація і кристалізація аморфних сплавів досягалися ізотермічним відпалюванням у вакуумі,  $p \approx 1,33 \cdot 10^{-4}$  Па. Температура кристалізації, що вимірювалася методом дилатометрії, для аморфних сплавів  $Fe_{78-x}Ni_xSi_9B_{13}$ ,  $Fe_{80}DM_5B_{15}$  була взята за паспортними даними зразків. Зразки  $Ni_{85}C_{15}$  пластично деформувалися шляхом холодного плющення їх між двома валами при відносному стисненні за товщиною на 20–30 %. Поверхні зразків  $Ni_{40}Fe_{40}B_{20}$ ,  $Ni_{40}Fe_{50}B_{10}$  бомбардувалися іонами спектрально чистого аргону з енергією 10–20 еВ.

Оптичні константи для вихідних сплавів були виміряні спектроеліпсометричним методом Бітті – Кона. У спектральному інтервалі 0,50–5,0 еВ використовувалось 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 призмами із скла Ф-І, LiF, NaCl.

Оптичні параметри зразків визначали шляхом розв'язання оберненої задачі еліпсометрії (ОЗЕ), яка зводилася до відновлення вхідних параметрів ( $n$  – показника заломлення;  $k$  – показника поглинання;  $d$  – оптичної товщини півки), що описують оптичну систему, за відомими вихідними даними (виміряними значеннями еліпсометричних кутів  $\psi$  і  $\Delta$ ).

ОЗЕ базувалася на основному рівнянні еліпсометрії:

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

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.

Алгоритм розв'язання ОЗЕ полягав у пошуку такого елемента із множини заздалегідь обмеженого підкласу можливих розв'язків, на якому відхил функції помилки  $F$  досягав свого мінімального значення:

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

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

У роботі ОЗЕ була розв'язана методом покрокової мінімізації функції помилки, алгоритм якої наведений на рис. 1.

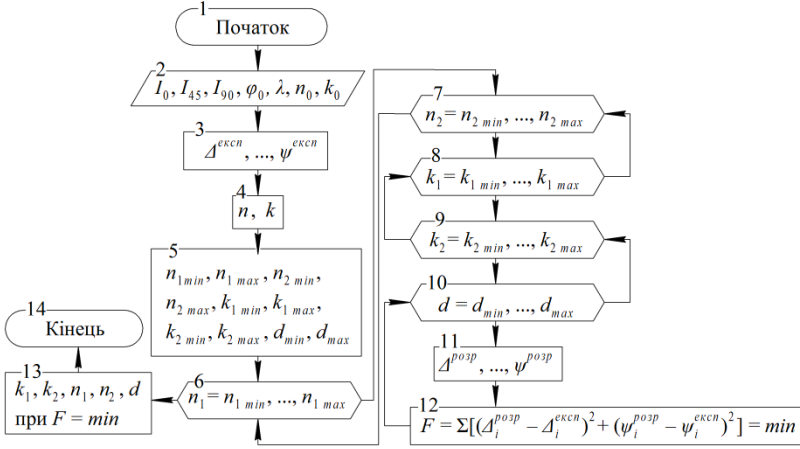


Рис. 1. Алгоритм розрахунку оптичних характеристик відбивальної системи

У другому розділі дисертації також розглянуто принцип побудови та використання нейронних мереж як оптимізаційного методу, що може бути використаний при розв'язанні ОЗЕ для значного прискорення процесу отримання результату за наявності відомих навчальних пар.

### Третій розділ “Математичне моделювання взаємодії світла з поверхнями

досліджуваних зразків”. Основною моделлю проведених досліджень аморфних сплавів була двошарова модель відбивальної системи “ізотропна плівка – ізотропна підкладка” (рис. 2). Поверхня АМС характеризувалася оптичною товщиною поверхневого шару  $d$ . Фізичний зміст останньої величини полягав у тому, що її значення визначало такий шар, для якого оптичні властивості істотно відрізнялися від властивостей усього матеріалу в цілому.

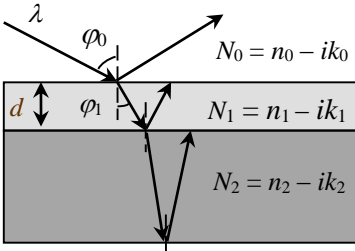


Рис. 2. Модель відбивальної системи

Для вибору початкового наближення використовувалася модель “напівнескінченного середовища”:

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



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

де  $n$  – ефективне значення показника заломлення всієї системи;  $k$  – ефективне значення коефіцієнта поглинання системи;  $\varphi_0$  – кут падіння світла на поверхню досліджуваного зразка.

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

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

Оптична товщина поверхневого шару обмежена  $d \leq 100$  нм.

При взаємодії світлової хвилі з поверхнею аморфного сплаву її енергія зменшується, тому фазова товщина плівки визначалася як  $\beta = \operatorname{Re}\beta + \operatorname{Im}\beta$ .

На рис. 3 наведена залежність функції помилки  $F$  від оптичних параметрів. Із цих даних випливає, що поверхня не є гладкою, має безліч екстремальних значень. Проте у межах множини розрахованих оптичних показників її значення розміщуються на поверхні, близькій до площини. Це, з одного боку, може вносити помилку до результату обчислення значень оптичних показників, оскільки незначні зміни значення функції помилки можуть привести до істотних відмінностей результату. З іншого боку, у функції помилки в межах розрахованих значень оптичних показників при достатньому збільшенні все-таки вирізняється чіткий мінімум, що дозволило припустити принципову можливість “точного” розв’язання ОЗЕ при зменшенні значення кроку у циклах програмної реалізації.

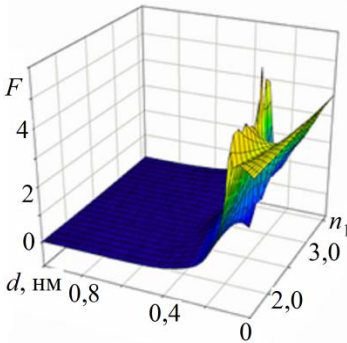


Рис. 3. Залежність функції помилки  $F$  від оптичної товщини  $d$  та показника заломлення поверхневого шару  $n_1$  сплаву  $Ni_{40}Fe_{40}B_{20}$

Отримані перетини функції помилки площинами, паралельними площині  $Fn_2$  на рівнях розрахованого значення  $k_2^{розр}$ , ефективного значення показника поглинання всієї системи  $k$  і граничного значення  $k_{2\max}$ . Також було виконано моделювання у 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  $n_2^{розр}$ , ефективного значення показника заломлення всієї системи  $n$  і граничного його значення  $n_{2\max}$ . Аналіз графіків (рис. 4) засвідчив, що поверхня “долини” навколо вста-

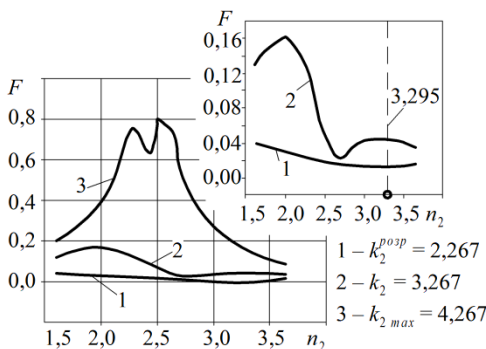


Рис. 4. Перетини поверхні функції помилки  $F$  площиною, паралельною площині  $Fn_2$  в діапазоні  $k_2 = 2,267\text{--}4,267$

таких міркувань: вона повинна бути такою, щоб вірогідність відхилення вибіркового середнього (середнього арифметичного) від генерального середнього (математичного сподівання) на величину, більшу від  $\Delta F$ , була меншою від заданого числа  $p$ . Отримано вираз для оцінки необхідного числа випадкових величин при заданій вірогідності відхилення їх середнього значення від математичного сподівання:

$$u = t_{кр}^2 r^2 / \gamma^2,$$

де  $t$  – критерій Стюдента;  $r$  – коефіцієнт варіації;  $\gamma$  – коефіцієнт, що дорівнює відношенню граничної помилки до середнього арифметичного величини.

При значенні ймовірності  $p = 95\%$  для ступеня вільності від 7 до 30 критерій Стюдента дорівнює  $t_{кр} \approx 2$ .

Беручи  $r = 0,2$ , за необхідності досягнення точності результатів, при якій вони відхиляються від деякого середнього арифметичного на 10%, достатньо використати  $u \approx 10$  значень функції  $F$ .

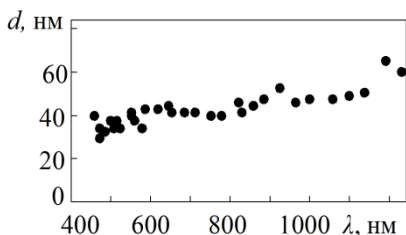


Рис. 5. Спектральна залежність оптичної товщини  $d$  поверхневого шару аморфного зразка  $Ni_{40}Fe_{40}B_{20}$ , визначеної за середньостатистичним значенням функції помилки

новленого мінімуму функції  $F$  не є гладкою. Не виключалася можливість появи додаткових локальних мінімумів або глибшого глобального мінімуму. Для підвищення стійкості результатів необхідно було шукати розв'язок, який відповідав би середньостатистичному значенню декількох значень функції помилки, що прямують до нуля, однакового порядку.

Кількість використовуваних мінімальних значень функції  $F$ , що дозволили знайти розв'язок оберненої задачі, визначалася з

Результати еліпсометричних вимірювань відображають взаємодії фотонів з електронами, виявлення яких має ймовірнісний характер. Цим пояснюється підвищення інформативності графіків, отриманих при використанні методів математичної статистики (рис. 5).

Область визначення функції помилки залежить від значень оптичних показників. Найменші їх значення, які допускаються фізичним сенсом завдання, що вирішується,  $k_{1\min}, k_{2\min} = 0$ , а  $n_{1\min}, n_{2\min} = 1$ ; верхні межі можна визначити за результатами розрахункового експерименту.

У середовищі математичної програми *Matlab* із використанням додатка *Neural Networks Toolbox* створена нейронна мережа (НМ). Була вибрана двошарова НМ зворотного розповсюдження помилки з двадцятьма нейронами у прихованому шарі. Мережа мала 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 ( $n_1, k_1, n_2, k_2, d$ ). Застосовувалося “навчання з учителем” за наявності  $m = 14$  навчальних пар за методом Левенберга – Марквардта, який на відміну від інших методів високих порядків визначення напрямів мінімізації використовував замість градієнта якобіан, що дозволяє отримати більше інформації про рельєф функції помилки, ніж градієнт. Створена таким чином НМ була застосована для визначення оптичних показників сплаву  $Ni_{40}Fe_{40}B_{20}$ . Спостерігався збіг із результатами, визначеними під час оптимізаційного розв'язування ОЗЕ. Метод НМ, який дозволив збільшити обсяг інформації, отриманої при “точному” розв'язуванні оберненої задачі, є ефективним у комбінації з іншим методом, що формує навчальні пари, наприклад, оптимізаційним.

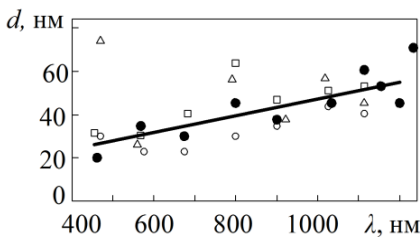


Рис. 6. Лінійна апроксимація спектральних залежностей оптичної товщини  $d$  поверхневого шару полірованих поверхонь аморфного сплаву  $Ni_{40}Fe_{40}B_{20}$

Аналіз отриманих залежностей  $d = f(\lambda)$  (рис. 6) показав, що в інтервалі довжин хвиль від 500 до 1200 нм апроксимувальною лінією може бути лінійна залежність  $d = D + \eta\lambda$ . Цей взаємозв'язок може набути практичного застосування для полірованої поверхні аморфного сплаву  $Ni_{40}Fe_{40}B_{20}$   $D_{пол} = d_{пол} - \eta_{сер}\lambda$ . Визначивши  $D$  для поверхні досліджуваного зразка, отримуємо приріст параметра шорсткості  $\Delta D$ :  $\Delta D = D - D_{пол}$ . За таруванням визначаємо функціональну залежність між  $\Delta D$  і відмінністю параметра шорсткості даної поверхні від полірованої  $\Delta R_a = f(\Delta D)$ . Відомо, що полірована поверхня має  $R_{a\text{пол}} = (0,05, \dots, 0,1)$  мкм. Тоді параметр шорсткості поверхні, дослідженої еліпсометричним методом, дорівнює  $R_a = R_{a\text{пол}} + f(\Delta D)$ .

#### Четвертий розділ “Досяжна точність визначення оптичних параметрів”.

Аналіз спектральних залежностей оптичних параметрів аморфного сплаву показав, що положення переважної більшості точок спектральних залежностей апроксимувалося трьома гармоніками. Частини гармонік були проведені через найочевидніше розміщені точки. Окреслені таким чином ділянки кри-

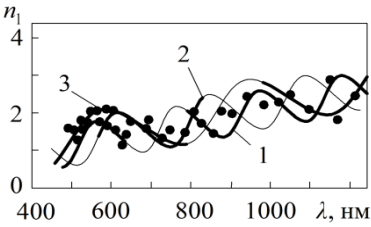


Рис. 7. Розміщення гармонік на розрахункових точках спектральної залежності показника заломлення  $n_1$  поверхневого шару аморфного сплаву  $Ni_{40}Fe_{40}B_{20}$

лової й електронної хвиль, відбувалося зменшення значення досліджуваного оптичного параметра. Відповідно до правила В. М. Клечковського заповнення орбіталей, збільшення енергії на енергетичних підрівнях матеріалу відбуваються у такому порядку:  $3s < 3p < 4s < 3d$ . Тому довжина хвилі  $3d$ -електронів для атомів Ni, Fe, B найменша. Отже, перша гармоніка була результатом взаємодії світлової хвилі з  $3d$ -елекtrонами, друга гармоніка – з  $4s$ -елекtrонами і третя гармоніка – з  $3p$ -елекtrонами. Можливість виділення гармонік на спектральних залежностях досліджуваних сплавів пояснювалася не процентним вмістом нікелю і заліза в сплавах, а саме їх електронною структурою, що підтверджено спектроеліпсометричним дослідженням зразка нікелю – кроки гармонік збігалися з кроками раніше встановлених гармонік.

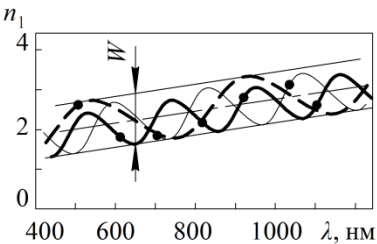


Рис. 8. Спектральна залежність розсіювання показника заломлення  $n_1$  поверхневого шару аморфного сплаву  $Ni_{40}Fe_{40}B_{20}$

середній лінії і проведеними через максимум і мінімум гармонік). Аналіз результатів досліджень засвідчив, що середні значення величин полів розсіювання показників заломлення та поглинання дорівнювали:  $W_{k1} = 1,399$ ;  $W_{n1} = 1,194$ ;  $W_{k2} = 1,559$ ;  $W_{n2} = 1,611$ ;  $W_d = 25,711 \cdot 10^{-9}$  м. Тоді середні квадратичні відхилення досліджуваних оптичних показників становили:  $s_{k1} = 0,233$ ;  $s_{n1} = 0,199$ ;  $s_{k2} = 0,260$ ;  $s_{n2} = 0,268$ ;  $s_d = 4,285 \cdot 10^{-9}$  м.

вих 1, 2, 3 (рис. 7) інтерпольовані на решту точок. Виявилось, що всі розраховані точки задовільно наближені до утворених кривих. Ці самі криві гармонік перенесені на графіки інших експериментів і скрізь спостерігалось переважне потрапляння розрахункових точок спектральних залежностей на лінії гармонік.

Можливість виділення гармонічних складових спектральних залежностей оптичних показників аморфного сплаву пояснювалася проявом хвильових властивостей електрона і світла, що падає. Коли збігалися максимуми енергій світлової й електронної хвиль, відбувалося зменшення значення досліджуваного оптичного параметра. Відповідно до правила В. М. Клечковського заповнення орбіталей, збільшення енергії на енергетичних підрівнях матеріалу відбуваються у такому порядку:  $3s < 3p < 4s < 3d$ . Тому довжина хвилі  $3d$ -електронів для атомів Ni, Fe, B найменша. Отже, перша гармоніка була результатом взаємодії світлової хвилі з  $3d$ -елекtrонами, друга гармоніка – з  $4s$ -елекtrонами і третя гармоніка – з  $3p$ -елекtrонами. Можливість виділення гармонік на спектральних залежностях досліджуваних сплавів пояснювалася не процентним вмістом нікелю і заліза в сплавах, а саме їх електронною структурою, що підтверджено спектроеліпсометричним дослідженням зразка нікелю – кроки гармонік збігалися з кроками раніше встановлених гармонік.

Апроксимація гармоніками результатів розрахунку оптичних параметрів дозволила оцінити точність еліпсометричних розрахунків (рис. 8). Розсіювання цих значень характеризує середнє квадратичне відхилення  $s$ . 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 відбувався за нормальним законом, то  $s = W/6$  ( $W$  – відстань між лініями, паралельними

**П'ятий розділ** “Вплив зовнішніх чинників на оптичні властивості та об'ємні характеристики аморфних металевих сплавів”. У результаті проведених експериментів у діапазоні довжин хвиль падаючого світла  $\lambda = (500\text{--}2500)$  нм і виконаних розрахунків отримано спектральні залежності оптичних показників аморфного сплаву  $\text{Ni}_{85}\text{C}_{15}$  до і після деформації, а також матеріалу аналогічного хімічного складу з кристалічною структурою. Установлено, що спектральні залежності оптичної товщини  $d$  поверхневого шару для зразків після

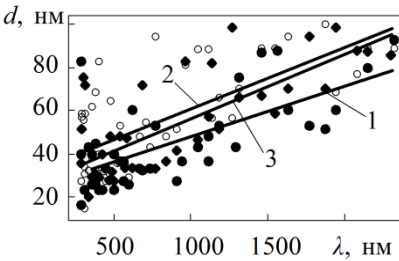


Рис. 9. Спектральні залежності оптичної товщини  $d$  поверхневого шару сплаву  $\text{Ni}_{85}\text{C}_{15}$  (●—1—аморфний; ○—2—деформований аморфний; ◆—3—кристалічний)

пластичної деформації і з кристалічною структурою змінювалися однаково щодо вихідного зразка (рис. 9). Таким чином, властивості зразків аморфного сплаву  $\text{Ni}_{85}\text{C}_{15}$  після пластичної деформації наближалися до властивостей матеріалу такого самого хімічного складу з кристалічною структурою, що, на нашу думку, було результатом перетворення структури аморфного сплаву під впливом пластичної деформації на кристалічну.

Вплив пластичної деформації на оптичну провідність  $\sigma$  аморфного сплаву  $\text{Ni}_{85}\text{C}_{15}$  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). У вихідному сплаві для спектра дисперсійної залежності оптичної провідності  $\sigma$  були характерні широкі мінімуми при довжині хвилі  $\lambda_1 = (200\text{--}3270)$  нм і  $\lambda_2 = (776\text{--}1034)$  нм. Після пластичної деформації зразків сплаву мінімум у спектрі  $\sigma$  змістився у бік зменшення довжини хвилі. При цьому оптична провідність  $\sigma$  в ультрафіолетовій області спектра зросла, а в інфрачервоній області майже не змінилася. Подібна залежність виявилась 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 приводила до однакових перетворень у структурі сплаву. Останній результат дозволив зробити висновок, що і пластична деформація аморфних сплавів спричинила утворення кристалічних структур.

Гетерогенна система поверхневого шару аморфного сплаву була описана як аморфна матриця з включеннями кристалічної і повітряної фаз. При низькому процентному вмісті включень у безперервній матриці це відповідало співвідношенню Максвелла – Гарнетта; при збільшенні об'ємної частки включень доцільним можна було вважати використання співвідношення Бругемана – Ландауера.

Для знаходження об'ємної частки окремих фаз  $f_i$  в області їх визначення  $f_i \in [0;1]$  необхідно було розв'язати обернені задачі, для яких відхили цільових функцій досягали своїх мінімальних значень  $F_{M\_Г} \rightarrow \min$ ,  $F_{Б\_Л} \rightarrow \min$ , при цьому повинна була виконуватися обов'язкова умова  $f_1 + f_2 + f_3 = 1$  ( $f_1, f_2, f_3$  – об'ємні частки аморфної, кристалічної, повітряної фаз відповідно).

За наближенням Максвелла – Гарнетта функціонал

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

$$\text{де } A_{M\_Г} = \frac{\tilde{\epsilon}_{ам, деф}^{ам} - \epsilon_1^{ам}}{\tilde{\epsilon}_{ам, деф}^{ам} + 2\epsilon_1^{ам}}; B_{M\_Г} = \frac{\epsilon_2^{кр} - \epsilon_1^{ам}}{\epsilon_2^{кр} + 2\epsilon_1^{ам}}; C_{M\_Г} = \frac{\epsilon_3^{пов} - \epsilon_1^{ам}}{\epsilon_3^{пов} + 2\epsilon_1^{ам}}.$$

За наближенням Бруггемана – Ландауера функціонал

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

$$\text{де } A_{Б\_Л} = \frac{\epsilon_1^{ам} - \tilde{\epsilon}_{ам, деф}^{ам}}{\epsilon_1^{ам} + 2\tilde{\epsilon}_{ам, деф}^{ам}}; B_{Б\_Л} = \frac{\epsilon_2^{кр} - \tilde{\epsilon}_{ам, деф}^{ам}}{\epsilon_2^{кр} + 2\tilde{\epsilon}_{ам, деф}^{ам}}; C_{Б\_Л} = \frac{\epsilon_3^{пов} - \tilde{\epsilon}_{ам, деф}^{ам}}{\epsilon_3^{пов} + 2\tilde{\epsilon}_{ам, деф}^{ам}},$$

де *ам*, *деф*, *кр*, *пов* – індекси, що відповідають аморфному, деформованому аморфному, кристалічному сплавам і повітряним включенням.

Моделльне подання ефективного середовища АМС до впливу деформації за наближенням Максвелла – Гарнетта показало (рис. 10), що зі збільшенням довжини хвилі  $\lambda$  падаючого світла зменшувалася об'ємна частка кристалічної фази і збільшувалася аморфна складова. Після деформації аморфного сплаву спостерігалася різке збільшення кількості об'ємної частки кристалічної фази біля поверхні. Залежності, отримані за моделлю Бруггемана – Ландауера з урахуванням повітряної фази, наведені на рис. 11. Бачимо, що деформаційна дія сприяла впорядкуванню структури аморфного сплаву.

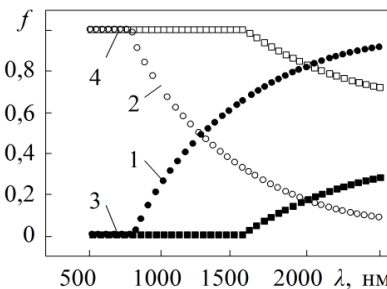


Рис. 10. Розподіл об'ємної частки кристалічної (2, 4) і аморфної фаз (1, 3) у поверхневому шарі аморфного сплаву  $Ni_{85}C_{15}$  до (1, 2) і після (3, 4) деформації згідно з наближенням Максвелла – Гарнетта

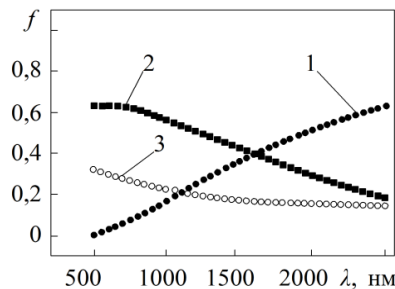


Рис. 11. Розподіл окремих фаз деформованого аморфного сплаву  $Ni_{85}C_{15}$  згідно з наближенням Бруггемана – Ландауера (1 – аморфна фаза; 2 – кристалічна фаза; 3 – повітряна фаза)

Для перевірки впливу низькоенергетичного бомбардування на оптичні властивості поверхні використані режими: *A* – час бомбардування 1 хв; *B* – 3 хв; *C* – 5 хв. Бомбардування поверхні іонами (рис. 12) привело до зменшення значень оптичної товщини *d* поверхневого шару, яке пов'язане зі зниженням його шорсткості поверхні. Зміна цієї характеристики у процесі бомбардування відбулася упродовж перших 3 хвилин, подальше збільшення часу впливу змін не викликало. Подібні результати отримані і під час дослідження аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$ .

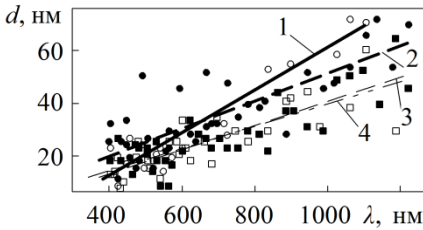


Рис. 12. Спектральні залежності оптичної товщини *d* поверхневого шару до і після бомбардування аморфного сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{50}\text{B}_{10}$ : ○–1 – вихідний зразок; ●–2 – режим *A*; □–3 – режим *B*; ■–4 – режим *C*

практично збігалися; дещо більший розкид вони мали для сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$ . Проте для обох випадків залишалось характерним розміщення залежності, отриманої для бомбардованого зразка, нижче щодо вихідного. Тобто бомбардування поверхні зразків в аномально жевріючому розряді приводило до зменшення значень  $\Delta$ .

Аналіз спектральних залежностей азимута відновленої лінійної поляризації  $\psi$  показав (рис. 13), що полірування поверхні та її бомбардування привели також і до зменшення значень  $\psi$ . Через те що саме цей еліпсометричний параметр у першу чергу реагує на зміну шорсткості, проведені дослідження дозволили зробити висновок про зменшення шорсткості поверхні в результаті її бомбардування.

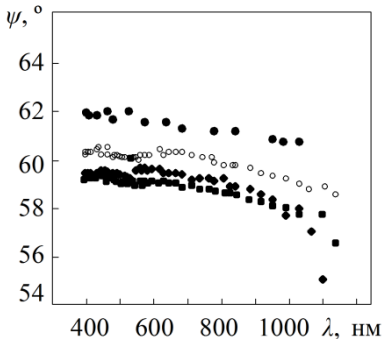


Рис. 13. Спектральні залежності еліпсометричного кута  $\psi$  аморфного металевго сплаву  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{50}\text{B}_{10}$  до і після бомбардування (● – вихідний зразок; ○ – режим *A*; ◆ – режим *B*; ■ – режим *C*)

Дослідження спектральних залежностей виявило, що значення оптичних параметрів АМС визначалося фізичним станом поверхні у результаті її полірування та низькоенергетичного бомбардування. Так, чим більшою була шорсткість, тим більшою виявилася оптична товщина *d* і меншими значення показників заломлення  $n_1$  і поглинання  $k_1$ . Оптичні харак-

теристики підкладки менш чутливі до змін, які відбувалися в поверхневому шарі.

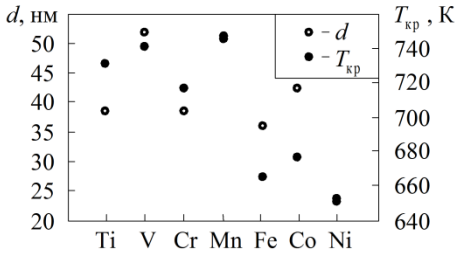


Рис. 14. Залежності оптичної товщини  $d$  і температури кристалізації  $T_{кр}$  від типу легуючого елемента для сплаву  $Fe_{80}DM_5B_{15}$

Аналіз залежності оптичної товщини  $d$  поверхневого шару і температури кристалізації  $T_{кр}$  від типу легуючого елемента для сплаву  $Fe_{80}DM_5B_{15}$  (рис. 14) показав, що сплав із максимальною або мінімальною оптичною товщиною  $d$  поверхневого шару характеризувався відповідно максимальною або мінімальною температурою кристалізації  $T_{кр}$ . Якісно подібний вплив зміни вмісту нікелю на оптичну товщину  $d$  поверхневого шару і температуру кристалізації  $T_{кр}$  спостерігався у сплаві  $Fe_{78-x}Ni_xSi_9B_{13}$ . Подібний ха-

рактир залежностей оптичної товщини поверхневого шару  $d$  і температури кристалізації  $T_{кр}$  від типу легуючого елемента АМС свідчив про те, що складна атомно-електронна структура перехідного шару безпосередньо пов'язана з об'ємними властивостями аморфних сплавів у цілому, що є наслідком наслідування АМС-структури рідини.

Залежності температури кристалізації  $T_{кр}$  та оптичної провідності  $\sigma$  для довжини хвилі падаючого світла  $\lambda = 827,5$  нм від типу легуючого елемента для сплаву  $Fe_{80}DM_5B_{15}$  мали антибатний характер: із збільшенням порядкового номера атомів домішки температура кристалізації  $T_{кр}$  зменшувалась, а значення оптичної провідності  $\sigma(h\nu)$  збільшувалось. Оскільки абсолютні значення  $\sigma(h\nu)$  залежать від густини електронних станів на рівні Фермі, можна припустити, що виконувався критерій Нагеля – Таука. Відповідно до нього для елемента, який має найменшу термічну стабільність, тобто найменшу температуру кристалізації  $T_{кр}$ , густина електронних станів буде найбільшою.

## ВИСНОВКИ

У результаті дослідження впливу вмісту легуючих елементів, пластичної деформації, низькоенергетичного іонного бомбардування на аморфні металеві сплави  $Ni_{40}Fe_{40}B_{20}$ ,  $Ni_{40}Fe_{50}B_{10}$ ,  $Ni_{85}C_{15}$ ,  $Fe_{80}DM_5B_{15}$  і  $Fe_{78-x}Ni_xSi_9B_{13}$  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  $\text{Fe}_{78-x}\text{Ni}_x\text{Si}_9\text{B}_{13}$ .

## СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

### 1. Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати

1. Карпуша В. Д. Особенности решения обратной задачи в спектроэллипсометрических исследованиях / В. Д. Карпуша, У. С. Швец // Вісник СумДУ. Серія Фізика, математика, механіка. – 2004. – № 10 (69). – С. 28–34.

2. Швец У. С. Решение обратной задачи эллипсометрии оптимизационными методами / **У. С. Швец** // Вісник СумДУ. Серія Фізика, математика, механіка. – 2005. – № 8 (80). – С. 160–170.
3. 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.
4. 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.
5. Швець У. Взаємозв'язок оптичних параметрів і електронної структури аморфних сплавів / **У. Швець** // Вісник Львівського університету. Серія фізична. – 2011. – № 46. – С. 130–137.
6. 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.

## 2. Наукові праці апробаційного характеру

7. 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.
8. Швец У. С. Закономерность рассеивания значений спектральных зависимостей оптических параметров аморфных сплавов / **У. С. Швец** // Materiały VII Międzynarodowej naukowo-praktycznej konferencji [“Perspektywiczne opracowania są nauką i technikami-2011”], (Przemyśl, 07–15 listopada 2011 r.). – 2011. – С. 34–39.
9. 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.
10. Shvets U. S. Ellipsometric investigations of plastic deformation influence on the structure of the amorphous alloy Ni<sub>85</sub>C<sub>15</sub> / **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.
11. 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.
12. 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.

13. 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.
14. 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.
15. Швець У. С. Еліпсометричне моделювання оптичних властивостей аморфних металевих сплавів / У. С. Швець, В. Д. Карпуша // Матеріали IV Міжнар. наук. конф. [“Фізика неупорядкованих систем”], (Львів, 14–16 жовтня 2008 р.). – 2008. – С. 70–71.
16. Швець У. Вплив фізико-механічних факторів на оптичні параметри приповерхневих прошарків 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.
17. 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.
18. 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.

## АНОТАЦІЯ

**Швець У. С. Вплив пластичної деформації та іонного опромінення на аморфізацію і оптичні властивості сплавів на основі Fe і Ni. – Рукопис.**

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла. – Сумський державний університет, Суми, 2014.

Дисертацію присвячено вивченню впливу пластичної деформації та іонного опромінення на аморфізацію та оптичні властивості аморфних сплавів. Для дослідження використаний спектроеліпсометричний метод Бітті – Кона, чисельний розрахунок оптичних параметрів виконувався шляхом розв’язання оберненої задачі еліпсометрії; моделювання топології гетерогенних систем відбувалося в рамках наближень Максвелла – Гарнетта та Бруггемана – Ландауера.

Апроксимація гармоніками результатів моделювання дозволила оцінити точність еліпсометричних розрахунків.

Установлено, що пластична деформація сплавів  $Ni_{85}C_{15}$  викликає процеси кристалізації та збільшення кількості повітряної фази в поверхневому шарі.

Бомбардування поверхонь сплавів  $Ni_{40}Fe_{50}B_{10}$  і  $Ni_{40}Fe_{40}B_{20}$  низькоенергетичними іонами приводить до зменшення оптичної товщини поверхнього шару. Стабілізація еліпсометричних параметрів поверхні у процесі її бомбардування відбувається упродовж перших 3 хвилин. Оптичні характеристики поверхнього шару визначаються фізичним станом поверхні: чим вища шорсткість, тим більша оптична товщина поверхнього шару  $d$  і менше значення показників заломлення  $n_1$  і поглинання  $k_1$ . Оптичні характеристики підкладки менш чутливі до змін, що відбуваються у поверхневому шарі.

Доведено, що залежності оптичної товщини поверхнього шару і температури кристалізації  $T_{кр}$  від типу легуючого елемента мають подібний характер, що свідчить про прямий взаємозв'язок між об'ємними і поверхневими властивостями аморфних сплавів  $Fe_{80}DM_5B_{15}$  і  $Fe_{78-x}Ni_xSi_9B_{13}$ . Експериментальні залежності значень оптичної провідності  $\sigma(h\nu)$  для довжини хвилі падаючого світла  $\lambda = 827,5$  нм і температури кристалізації  $T_{кр}$  від типу легуючого елемента мають антибатну залежність, що підтверджує критерій Нагеля – Таука про стабільність аморфних сплавів.

**Ключові слова:** аморфні металеві сплави, еліпсометрія, обернена задача еліпсометрії, пластична деформація, низькоенергетичне іонне бомбардування.

## АННОТАЦІЯ

**Швец У. С. Влияние пластической деформации и ионного облучения на аморфизацию и оптические свойства аморфных сплавов на основе Fe и Ni. – Рукопись.**

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика твердого тела. – Сумский государственный университет, Сумы, 2014.

Диссертация посвящена изучению влияния пластической деформации и ионного облучения на аморфизацию и оптические свойства аморфных сплавов. Для исследования использовался спектроэллипсометрический метод Битти – Кона, числовой расчет оптических параметров выполнялся путем решения обратной задачи эллипсометрии; моделирование топологии гетерогенных систем происходило с учетом приближений Максвелла – Гарнетта и Бруггемана – Ландауэра.

Анализ спектральных зависимостей оптических параметров исследованных образцов показал, что положение подавляющего большинства точек аппроксимируется тремя гармониками. Возможность выделения гармонических составляющих объясняется проявлением волновых свойств электронов и падающего света. Аппроксимация гармониками результатов моделирования позволила оценить точность эллипсометрических расчетов.

Установлено, что физические свойства образцов аморфного сплава  $\text{Ni}_{85}\text{C}_{15}$  после пластической деформации приближаются к свойствам материала такого же химического состава с кристаллической структурой. Спектральные зависимости оптической толщины поверхностного слоя и оптической проводимости после пластической деформации и с кристаллической структурой изменяются одинаково по отношению к исходному аморфному образцу. Деформационное воздействие на АМС вызвало резкое увеличение кристаллической и воздушной фаз в аморфной матрице поверхностного слоя. Небольшие различия результатов при использовании приближений Максвелла – Гарнетта и Бругемана – Ландауэра обусловлены особенностями выбранных моделей: приближение Максвелла – Гарнетта соответствует аморфному состоянию, приближение Бругемана – Ландауэра – деформированному аморфному.

Бомбардировка поверхности сплавов  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{50}\text{B}_{10}$  и  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$  низкоэнергетическими ионами аргона привели к уменьшению оптической толщины поверхностного слоя. Стабилизация эллипсометрических параметров поверхности происходила в течение первых 3 минут, дальнейшее увеличение времени воздействия значительных изменений не вызывало. Установлено, что бомбардировка в аномально тлеющем разряде и полировка поверхности привела к уменьшению значений эллипсометрических углов ( $\Delta$ ,  $\psi$ ). Учитывая, что эллипсометрический параметр  $\psi$  в первую очередь реагирует на изменение шероховатости, проведенные исследования позволили сделать вывод об уменьшении шероховатости поверхности. Анализ спектральных зависимостей показал, что значения оптических характеристик определяются физическим состоянием поверхности: чем больше шероховатость, тем больше оптическая толщина  $d$  и меньше значения показателей преломления  $n_1$  и поглощения  $k_1$ . Оптические характеристики подложки менее чувствительны к изменениям, которые происходили в поверхностном слое.

Зависимости оптической толщины  $d$  поверхностного слоя и температуры кристаллизации  $T_{\text{кр}}$  от типа легирующего элемента для сплавов  $\text{Fe}_{80}\text{PM}_5\text{B}_{15}$ ,  $\text{Fe}_{78-x}\text{Ni}_x\text{Si}_9\text{B}_{13}$  показали, что сплав с максимальной или минимальной оптической толщиной  $d$  поверхностного слоя характеризовался соответственно максимальной или минимальной температурой кристаллизации  $T_{\text{кр}}$ . Зависимости температуры кристаллизации  $T_{\text{кр}}$  и оптической проводимости (для длины волны падающего света  $\lambda = 827,5$  нм) от типа легирующего элемента для сплава  $\text{Fe}_{80}\text{PM}_5\text{B}_{15}$  имели антибатный характер. Поскольку абсолютные значения  $\sigma(h\nu)$  зависят от плотности электронных состояний на уровне Ферми, можно допустить, что выполняется критерий Нагеля – Таука. В соответствии с ним для элемента, который имеет наименьшую термическую стабильность, плотность электронных состояний будет наибольшей.

**Ключевые слова:** аморфные металлические сплавы, эллипсометрия, обратная задача эллипсометрии, пластическая деформация, низкоэнергетическая ионная бомбардировка.

## ABSTRACT

**Shvets U. S. The influence of plastic deformation and ion irradiation on amorphization and optical properties of Fe and Ni based amorphous alloys. – Manuscript.**

The thesis for candidate of science degree in physics and mathematics, speciality 01.04.07 – solid state physics. – Sumy State University, Sumy, 2014.

The work is devoted to investigation of the plastic deformation and ion irradiation influence on amorphization and optical properties of amorphous alloys. The Beatty – Kona spectroscopy ellipsometric method has been used in the present paper, the numerical values of optical parameters have been determined by solving inverse problem of ellipsometry. Simulation of the heterogeneous systems topology has been performed using Maxwell – Garnett and Bruhhemana – Landae approximations.

Harmonics approximation of modeling results allowed to estimate the accuracy of the ellipsometric calculations.

It was found that plastic deformation of  $\text{Ni}_{85}\text{C}_{15}$  alloys causes crystallization processes and increases air phase in the surface layer.

It was shown that bombardment of the  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{50}\text{B}_{10}$  and  $\text{Ni}_{40}\text{Fe}_{40}\text{B}_{20}$  amorphous alloys by low energy ions leads to decrease in optical thickness of the surface layer. Stabilization of the ellipsometric surface parameters during the bombardment occurs during the first 3 minutes. The optical characteristics of the surface layer are determined by physical state of the surface itself. With increase in the surface roughness the surface layer optical thickness also increases. At the same time refraction index  $n_1$  and absorption index  $k_1$  decrease. The substrate optical characteristics are less sensitive to the changes that take place in the surface layer.

It was established in the work that the dependences of the optical thickness  $d$  and the crystallization temperature  $T_{\text{cr}}$  on the doping material type have a similar character for amorphous  $\text{Fe}_{80}\text{AM}_5\text{B}_{15}$  and  $\text{Fe}_{78-x}\text{Ni}_x\text{Si}_9\text{B}_{13}$  alloys. This fact evidences direct relationship between the bulk and surface properties of the allows. The experimental optical conductivity dependences on the doping element type  $\sigma(h\nu)$  for the incident light wavelength  $\lambda = 827,5$  nm and crystallization temperature  $T_{\text{cr}}$  have antibate character, that confirms Nagel – Tauke criterion about stability of amorphous alloys.

**Key words:** amorphous metal alloys, ellipsometry, the inverse problem of ellipsometry, plastic deformation, low-energy ion bombardment.

Підписано до друку 18.04.2014.  
Формат 60×90/16. Ум. друк. арк. 1,1. Обл.-вид. арк. 0,9. Тираж 100 пр. Зам. №

Видавець і виготовлювач  
Сумський державний університет,  
вул. Римського-Корсакова, 2, м. Суми, 40007  
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 3062 від 17.12.2007.