УДК 535.3 ББК 22.343 ГРНТИ 29.31.21 ВАК 01.04.05

Исследование оптических характеристик ультратонких нанокомпозитных плёнок с помощью численных вычислений на языке Python

К.К. Алтунин 跑, Е.А. Купреянова 🛅 1

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Ульяновский государственный педагогический университет имени И. Н. Ульянова», 432071, Ульяновск, Россия

> Поступила в редакцию 5 апреля 2021 года После переработки 12 апреля 2021 года Опубликована 12 июня 2021 года

Аннотация. Рассматривается физические особенности оптических процессов в ультратонких нанокомпозитных плёнках и плёночных наносистемах. Проведены численные расчёты пропускательной и отражательной способностей ультратонких нанокомпозитных плёнок, находящихся во внешнем поле оптического излучения. Для вычисления оптических характеристик составлена компьютерная программа на языке программирования Python, которая позволяет строить графики зависимостей отражательной и пропускательной способностей от длины волны внешнего оптического излучения. Получены зависимости энергетических коэффициентов оптического пропускания и отражения ультратонких нанокомпозитных плёнок от длины волны излучения в оптическом диапазоне длин волн при различных значениях параметров ультратонких нанокомпозитных плёнок. Показано, что можно эффективно управлять величиной оптического пропускания оптического излучения путём изменения параметров ультратонких нанокомпозитных плёнок.

Ключевые слова: нанокомпозитная плёнка, ультратонкая нанокомпозитная плёнка, наноструктурное покрытие, металлические наночастицы, наночастицы серебра, оптическое излучение, коэффициент оптического пропускания, коэффициент оптического отражения, просветляющее оптическое покрытие, оптические приборы, наносистема

PACS: 42.25.Bs

Введение

В современной оптике проявляется повышенный научный интерес к ультратонким нанокомпозитным плёнкам в связи с возможностью высокоэффективного просветления поверхностей оптических приборов и устройств оптоэлектроники. Просветляющие оптические покрытия используют наносистемы со сложной структурой наноразмерных слоёв и плёнок. Внутри просветляющих нанокомпозитных покрытий металлические

¹E-mail: kupreyanova.zhenechka@mail.ru

наночастицы могут организовываться в такие наноструктурные элементы, как нанокластеры и наноагрегаты. Границы раздела поверхностей сред даже покрывают монослоями наночастиц для повышения просветляющей способности поверхности твёрдого тела. В связи с этим тема работы, посвящённая исследованию физических свойств ультратонких нанокомпозитных плёнок, является актуальной темой современной фундаментальной физики. Результаты проведения численных расчётов оптических характеристик ультратонких нанокомпозитных плёнок должны помочь выработке стратегии изготовления наноструктурных покрытий из ультратонких нанокомпозитных плёнок. Ультратонкие нанокомпозитные плёнки нашли широкое применение в устройствах и приборах оптики и оптоэлектроники.

Целью исследования является выяснение свойств ультратонких нанокомпозитных плёнок, находящихся в поле оптического излучения. В задачи работы входит исследование теоретической модели оптических процессов в ультратонких нанокомпозитных плёнках и плёночных наносистемах, проведение численных расчётов оптических характеристик ультратонких нанокомпозитных плёнок и плёночных наносистем на языке программирования Python.

Объектом исследования являются ультратонкие нанокомпозитные плёнки. Предметом исследования являются физические характеристики оптических процессов в ультратонких нанокомпозитных плёнках.

Для фундаментальных исследований наиболее важной является возможность изучения самых различных наносистем в условиях, когда и расстояние между наночастицами и их взаимная ориентация строго фиксированы. Именно эта ситуация и реализуется в ультратонких нанокомпозитных плёнках. Можно изучать спектральные проявления взаимодействий валентных электронов как внутри наночастицы, так и в соседних наночастицах. Более того, уже ведутся исследования направленных модификаций ультратонких нанокомпозитных плёнок с помощью мультислойных наносистем.

Гипотеза исследования заключается в том, что если использовать теоретические модели оптических процессов в ультратонких плёнках, плёночных наносистемах из нанокомпозитных материалов и результаты численных расчётов оптических характеристик ультратонких нанокомпозитных плёнок, то можно прогнозировать оптические свойства приборов и устройств на основе плёночных наносистем из нанокомпозитных материалов.

Методами исследования являются теоретические и численные методы нанооптики ультратонких плёнок из нанокомпозитных материалов, состоящих из диэлектрической матрицы и металлических наночастиц.

Обзор работ по свойствам и методам получения ультратонких нанокомпозитных плёнок

В последние время достигнут значительный прогресс в подходах и технологиях нанесения нанопокрытий, тонких и ультратонких плёнок. В настоящее время нанотехнология позволяет получать ультратонкие плёнки и нанопокрытия, состоящие всего из одного монослоя или нескольких атомных слоёв. Такие ультратонкие плёнки могут функционализировать поверхность, чтобы поддерживать желаемые химические взаимодействия, или, наоборот, пассивировать поверхность, чтобы сделать её химически инертной. Образование собственного оксида толщиной в несколько атомных слоёв на поверхности многих полупроводниковых материалов является примером поверхностной пассивации. Нанотехнологии революционизируют применение нанопокрытий во многих областях, особенно с учетом возможности изготовления нанопокрытий со специальным покрытием. спроектированная наноархитектура, например, покрытия на основе нанокомпозитных полимеров, состоящие из сетки металлических наноточек, ориентированных металлических наностержней, нанопроволок или нанотрубок. Возникновение явлений, связанных с возбуждением поверхностных плазмон-поляритонов и отрицательным преломлением, открывает новые возможности для развития новые фокусирующие оптические элементы со сверхвысоким разрешением.

Плёнки Ленгмюра–Блоджетт широко изучаются [1–4] как модельные системы для изучения различных физических, химических и биологических явлений в системах с уменьшенной размерностью. Для формирования плёнок Ленгмюра-Блоджетт используется простой процесс, который включает последовательную передачу органического монослоя, разбросанного по воде или другим жидкостям путём повторного погружения подложки. Несмотря на обширные исследования, легкость образования этих плёнок, имеющих исключительно хорошо упорядоченный стабильный молекулярный слой, остаётся загадкой даже через 80 лет после открытия этого метода. С первых лет разработки этого метода хорошо известно, что границы раздела, присутствующие в этих плёнках, довольно жёсткие и резкие, и можно наносить плёнку даже на проволочную сетку. Хотя недавние достижения в методах измерений, такие как метод скользящего падения рентгеновских лучей [5] и сканирующая зондовая микроскопия [1], а также прогресс в теоретических формализмах [6] для изучения структуры поверхностей и границ раздела улучшили наше понимание структуры плёнок Ленгмюра–Блоджетт [1, 7– 10. Мы до сих пор не располагаем исчерпывающими сведениями о точном механизме образования и устойчивости таких плёнок. Понимание образования полупроводниковых частиц нанометрового размера, которые обладают размерным эффектом в зонной структуре, имеет важное значение [11].

Различия во взаимодействии неполярных углеводородных цепей (короткодействующих) с полярными "головными группами" (дальние) могут приводить к разным двумерным позиционно упорядоченным фазам с корреляционной длиной, зависящей от плотности и температуры, а с другой "родственные" молекулы могут приводить к различным ориентационно упорядоченным фазам. Обширные исследования амилофильных монослоёв на поверхности воды рассмотрели оба эти аспекта и установили связь между упорядочением связей и ориентационным упорядочением цепей и позиционным упорядочением молекул [12–14].

В этих двумерных системах существует два способа выделения жидкости из твёрдого тела. Первое связано с ориентационным порядком связей в "решётке" составляющих, будь то атомы, молекулы, кластеры, дырки или вихри. Здесь ориентационный порядок длинной связи в гексагональной решетке обозначает гексатическую фазу, а этот порядок нарушается в жидкой фазе путём перехода к случайно распределенным многоугольным устройствам. Поскольку микроскопический порядок в твёрдых телах проявляется в возникновении плоскостей спайности и зёрен в их пробое, эта случайность в микроскопическом склеивании грубо зернируется в случайно соединенные отверстия или пузырьки в сложных жидкостях, таких как мыльные плёнки [15]. Второе отличие происходит от наличия однородного поверхностного натяжения на поверхности жидкости в равновесии, которое реагирует на деформацию в любом масштабе длины путём рассеивания этого напряжения через капиллярные волны. Следовательно, поверхность жидкости характеризуется капиллярными волнами, вызывающими колебания высоты любой длины волны в диапазоне, определяемом размером молекул и размером выборки, что приводит к логарифмической корреляции по высоте с разделением плоскости [16] без какого-либо обрезания. Это контрастирует с самоаффинной корреляцией высоты с явной "корреляционной длиной" или обрезанием и алгебраической зависимостью от разделения в плоскости [16], наблюдаемого на твёрдых поверхностях.

В то время как большая часть исследований корреляций высот в амфифильных монослоях на поверхности воды была проведена на нетронутых амфифилах, таких как длинноцепочечные жирные кислоты [17] с некоторыми исключениями [18, 19], как наличие противоионов и, в частности, конкретные ионы двухвалентного металла, в воде изменяет эти корреляции далеко не ясно. С другой стороны, поскольку только двухвалентные металлосодержащие амфифильные жирные кислоты образуют стабильные многослойные плёнки [20], на их основе были проведены корреляционные исследования по толщине. Чтобы быть более конкретным, многослойные только кадмиевые соли этих жирных кислот были тщательно изучены [10, 21, 22]. Оба этих многослойных Ленгмюра и многослойные исследования Ленгмюра–Блоджетта показывают, что они имеют корреляцию по высоте в жидкости, когда область наблюдения велика [10, 17, 19, 22], в то время как мультислои проявляют самоаффинную корреляцию по малым длинам сканирования [10, 22]. Однако мало информации о том, что происходит в многослойных материалах при изменении металла, а также о любой связи между жидкоподобным или твёрдоподобным поведением металлоносного амфифильного монослоя на воде и корреляциями высоты, полученными в многослойных пленках на твёрдых подложках того же амфифил.

В настоящее время органические мультислои играют важную роль в исследованиях тонкоплёночных технологий. Возможными применениями плёнок с органическими мультислоями являются покрытия из стекловолокна для передачи света, высокоскоростные оптические элементы управления в микроэлектронике, улучшение качества поверхности зеркал и детекторов для органических молекул в качестве биосенсорных устройств [23, 24].

Развивается новая область — молекулярная электроника [25], ставящая одной из своих задач создание элементов с размерами, характерными для молекул. На этом пути предполагается решить серьезные физические проблемы, ограничивающие применение полупроводниковых интегральных схем.

Уже сегодня полимеризующиеся тонкие плёнки Лэнгмюра-Блоджетт используются для электронно-лучевой литографии сверхвысокого разрешения, а также в качестве диэлектрических покрытий в структурах металл–диэлектрик–металл. В последнем случае лэнгмюровская плёнка может не только выполнять функцию высокопрочного (в механическом, химическом и электрическом смысле) диэлектрика, но и быть активным элементом, чувствительным к внешним воздействиям, например тепловому (пироэлектрик), механическому (пьезоэлектрик) или имеющему химическую природу (химический сенсор). Весьма перспективным применением представляется также использование ультратонких плёнок Лэнгмюра-Блоджетт в качестве оптических волноводов, особенно в том случае, когда соответствующий материал обладает ещё и нелинейнооптическими свойствами.

Плёнки Ленгмюра–Блоджетт используются как активные элементы в солнечных батареях. Также они могут играть роль диэлектрического покрытия, пироэлектрика или пьезоэлектрика. Плёнки Ленгмюра–Блоджетт применяются практически во всех типах сенсоров.

В статье [26] рассматриваются агрегаты, образованные из коллоидных частиц, будут различаться по форме в зависимости от преобладающего режима агрегации. Компактные структуры образуются при медленной агрегации, в то время как рыхлые тонкие структуры образуются, когда преобладает быстрое (или ограниченное диффузией) агрегация. Эти структуры могут быть фрактальными по своей природе, то есть существует взаимосвязь между пористостью и количеством первичных частиц, составляющих агрегат, и описывается фрактальной размерностью. Фрактальные размеры агрегатов гематита были измерены экспериментально методом статического светорассеяния [26]. Фрактальные размеры менялись в зависимости от режимов агрегации; для режима быстрой агрегации было обнаружено, что фрактальная размерность составляет 2.8, в то время как для условий, в которых агрегация была медленной (преобладают силы замедления), фрактальная размерность составляет 2.3. Для условий, которые приводят к агрегации, в которых участвуют как силы диффузии, так и силы замедления, были обнаружены структуры с такими фрактальными размерами, что фрактальная размерность находится в диапазоне от 2.3 до 2.8. Также было исследовано влияние адсорбированной фульвокислоты, встречающейся в природе органической кислоты, на кинетику агрегации гематита и получаемую структуру агрегатов гематита. Изучение структуры агрегатов показывает, что фрактальные размерности агрегатов гематита, частично покрытых молекулами фульвокислоты, выше, чем у агрегатов без адсорбированной фульвокислоты. Показатели рассеяния, полученные из экспериментов по статическому светорассеянию этих агрегатов, находятся в диапазоне от 2.83 ± 0.08 до 3.42 ± 0.1 . Показатели рассеяния больше 3 указывают на то, что рассеяние является результатом объектов, содержащих поры, ограниченные поверхностями с фрактальной структурой, и может быть связано только с фрактальной размерностью поверхности. Высокие фрактальные размерности обусловлены перестройкой агрегатов, которая происходила только при низком покрытии органической кислотой.

В статье [27] рассматривается динамическое рассеяние света в качестве метода, используемого для определения размера наноразмерных и субмикронных частиц путём измерения их теплового движения (диффузии) в жидкой среде. Измеренные коэффициенты диффузии связаны с гидродинамическим размером частиц через уравнение Стокса-Эйнштейна. Рассматривается применение динамического рассеяния света для характеристики разбавленных суспензий пирогенного кремнезема, которые состоят из полидисперсных фрактальных агрегатов, состоящих из спеченных сферических первичных частиц. Моделирование используется для установления взаимосвязи между структурными свойствами агрегатов и их диффузионным поведением. Поэтому разработан алгоритм, позволяющий генерировать агрегаты с настраиваемой фрактальной размерностью и произвольным числом первичных частиц. Результаты свидетельствуют о том, что гидродинамические радиусы показывают другое масштабирование по сравнению со структурным радиусом инерции, что имеет большое значение для интерпретации результатов динамического рассеяния света. Кроме того, при измерениях необходимо учитывать влияние вращательной диффузии.

В статье [28] рассматривается структурированный свет, происходящий от способности адаптировать свет, обычно имея в виду пространственный контроль его амплитуды, фазы и поляризации. Несмотря на то, что эта почтенная тема восходит к самым первым лазерным конструкциям, структурирование света у источника за последнее десятилетие вызвало бурный рост активности, подпитываемый современным инструментарием, который использует универсальность дифракционных структур, жидких кристаллов, метаповерхностей или метаматериалов, и экзотическими геометриями лазеров, а также множество приложений, которые варьируются от получения изображений, микроскопии и лазерной обработки материалов до оптической связи. Недавний прогресс в создании и управлении структурированным светом позволяет сделать особый акцент на структурирование света в лазерной источнике структурированного света. Различные подходы к проектированию, включая формирование накачки, геометрию резонатора и использование специальных внутрирезонаторных оптических элементов, реализованных в различных лазерах, от микрочиповых решений до высокомощных волокон, описаны в учебном стиле.

Дистанционное зондирование с использованием различных способов обнаружения света и дальности используется для приложений обнаружения целей, построения изображений и определения дальности. Для точного определения диапазона в качестве источников света использовались либо лазеры с высокой пиковой мощностью коротких импульсов, либо модулированные лазерные диоды непрерывного действия. В методе коротких импульсов разрешение по дальности, которое определяется шириной импульса, обычно находится в диапазоне метров. В методе модулированной непрерывной волны обнаружение и локализация цели осуществляются либо путём корреляции формы сигнала, отражённого или рассеянного от цели, с опорной формой волны с задержкой по времени, либо путём оптического воздействия на них с помощью интерферометра Майкельсона, где разрешение по дальности определяется ширина полосы модулированного сигнала. Ограниченное скоростью кода и скоростью модуляции, разрешающая способность детектирования и определения дальности света с кодовой модуляцией псевдослучайным числом находится в диапазоне нескольких десятков метров.

На инструментах, изготовленных из кварцита, было проведено несколько исследований с использованием микролинз [29]. Большинство из них полагаются на визуальное наблюдение характеристик микроволокон с помощью оптических световых микроскопов и сканирующих электронных микроскопов. Микрошероховатость кварцевого инструмента редко определяется количественно, хотя для математического документирования шероховатости поверхности с помощью других силикатных инструментов применялись многочисленные методы. В статье [29] с помощью лазерной сканирующей конфокальной микроскопии была задокументирована шероховатость поверхности четырёх экспериментальных скребков, сделанных из двух разных подтипов кварцита Мистассини, которые использовались либо для свежей, либо для сухой оленьей шкуры. Данные о шероховатости поверхности были проанализированы с использованием фрактальной сложности в масштабе площади. Результаты этого тестового примера показывают, что анализ с использованием фрактальной сложности в масштабе площади позволяет эффективно различать неиспользуемые и использованные области на инструментах из кварцита на основе шероховатости поверхности, а также что он может различать шероховатость сухой и свежей кожи. Различия в подтипах кварцита Мистассини действительно повлияли на шероховатость поверхности, но не настолько, чтобы предотвратить различие между инструментами из сухой и свежей кожи. Хотя использование параметра фрактальной сложности в масштабе площади для анализа каменных микролинейок требует дальнейшего тестирования, эти первые результаты предполагают, что это может быть надежным методом для математического документирования и различения структур износа на археологических инструментах из кварцита.

В статье [30] представлена печатная антенна Ван Коха на фрактальной подложке с фотонной запрещённой зоной. Подложка состоит из заземленных печатных элементов Ван Коха. Конструкция представляет собой многочастотный излучатель, похожий на обычную фрактальную антенну, но особый синтез подложки увеличивает полосу частот и коэффициент усиления и заставляет антенну излучать поле с круговой поляризацией.

Для многих приложений для самолётов, спутников, мобильной и беспроводной связи требуются низкопрофильные антенны. Микрополосковые антенны представляют собой, пожалуй, наиболее предпочтительный вид излучателей для этих современных приложений. К сожалению, все структурные характеристики печатных элементов (размер, вес, возможность компланарного изготовления), составляющий их низкий профиль, должен быть сопоставлен с недостатками их низкой эффективности и узкой полосы частот. Кроме того, для большинства современных приложений требуется многочастотный режим, поле с круговой поляризацией и возможно высокое усиление. С развитием систем беспроводной связи, которые работают в многочастотных диапазонах, растёт спрос на многополосные антенны и микроволновые устройства. Для мобильных телефонов очень привлекательны планарные антенны, поскольку эти антенны имеют низкий профиль, а также могут быть просто изготовлены на системной плате мобильного телефона для практического применения.

Теория эффективной среды для описания оптических свойств ультратонких нанокомпозитных плёнок и нанопокрытий

Ультратонкие плёнки и нанопокрытия играют важную роль во многих областях, таких как микроэлектроника и наноэлектроника, машиностроение, автомобилестроение и авиастроение, робототехника. Нанопокрытия, в частности, представляют собой интерфейс между продуктом и окружающей средой и поэтому определяют не только эстетические аспекты товаров, но и важные специфические свойства, такие как, например, антикоррозийная, самоочищающаяся, химическая стойкость и устойчивость к царапинам. Термин «нанопокрытия» обычно используется, когда покрытие наноструктурированное или его толщина находится в нанометровом масштабе. Наноструктурирование обычно применяется из-за его способности повышать гидрофобность, радиационную стойкость и коррозионную стойкость, а также потому, что оно делает материалы намного более гибкими. Ультратонкие плёнки и нанопокрытия представляют собой двумерные системы, то есть свободные электроны в проводящих системах может распространяться только в плоскости xOy. Ограничение в z-направлении может добавить много специфических характеристик, особенно в случае электронных материалов. Правильно разработанные ультратонкие плёнки и нанопокрытия иногда используются для уменьшения трения и отражения света, для модификации поверхности в экстремальных условиях и для улучшения свойств удаления грязи. В настоящее время возрастает интерес к нанофазным термобарьерным покрытиям, которые обладают чрезвычайно низкой теплопроводностью. Большое внимание также уделяется декоративным нанопокрытиям на основе специальных красок и чернил. Существуют различные методы производства ультратонких плёнок и нанопокрытий: вакуумное напыление, термическое напыление, электрохимическое напыление. основываться на испарении, распылении, термическом разложении. Среди методов термического напыления можно упомянуть плазменное напыление и дуговое напыление, а также высокоскоростной процесс термического напыления кислородного топлива, который обеспечивает получение покрытий высокой плотности с уникальными характеристиками в условиях агрессивного износа и коррозионных сред. Фактически, наиболее широко используемые промышленные процессы нанесения покрытий основаны на гальванике и химическом осаждении. Эти подходы относительно просты и экономичны и применимы для самых разных покрытий.

Рассмотрим модель, которая используется для определения диэлектрической функции нанокомпозитного слоя, содержащего включения одинаковых наночастиц, распределённых на подложке. Эффективная диэлектрическая функция $\varepsilon_{\rm eff}$ нанокомпозитного слоя связывает макроскопическую поляризацию **р** и макроскопическое электрическое поле **E**_{eff},

$$\mathbf{p} = \varepsilon_0 (\varepsilon_{\text{eff}} - \varepsilon_{\text{cap}}) \mathbf{E}_{\text{ext}} , \qquad (1)$$

где $\varepsilon_{\rm eff}$ – диэлектрическая проницаемость среды и $\varepsilon_{\rm cap}$ – диэлектрическая функция сетчатой плёнки, содержащей пустоты.

В других отношениях макроскопическая поляризация является суммой микроскопических поляризаций частиц: $\mathbf{P} = N\mathbf{p}$, где N – количество частиц на единицу объёма. \mathbf{P} можно выразить как

$$\mathbf{P} = N \varepsilon_{\text{eff}} \varepsilon_{\text{cap}} V \alpha \mathbf{E}_{\text{loc}} , \qquad (2)$$

где $V\alpha$ – поляризуемость частицы объёма V и $c \alpha = \frac{\varepsilon_{\rm m} - \varepsilon_{\rm cap}}{\varepsilon_{\rm cap} + \ell(\varepsilon_{\rm m} - \varepsilon_{\rm cap})}$ (где ℓ является геометрическим фактором деполяризации эллипсоидальной наночастицы и $\varepsilon_{\rm m}$ – это диэлектрическая функция металла) и $\mathbf{E}_{\rm loc}$ – это локальное поле в точке расположения одной центральной частицы. Это поле даёт три вклада: макроскопическое приложенное

электрическое поле \mathbf{E}_{ext} поле, созданное диполем изображения \mathbf{E}_{im} частицы, а поле, созданное соседними частицами и их изображениями \mathbf{E}_{int} .

Предположим, что поле \mathbf{E}_{dip} , созданное диполем \mathbf{p} , устанавливаем в 0 на расстоянии *r* от точки *M* в среде с диэлектрической функцией ε_{ext} , тогда оно даётся выражением

$$\mathbf{E}_{\rm dip} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_{\rm cap}}H^3 \frac{\varepsilon_{\rm sub} - \varepsilon_{\rm cap}}{\varepsilon_{\rm sub} + \varepsilon_{\rm cap}} \mathbf{p} \tag{3}$$

Это поле равно нулю, если подложка идентична материалу покрытия, то есть $\varepsilon_{sub} = \varepsilon_{cap}$. Вклад $\mathbf{E}_{int} = \mathbf{E}_{neighb} + \mathbf{E}_{im neighb}$ соседних частиц (\mathbf{E}_{neighb}) и их изображений ($\mathbf{E}_{im neighb}$) задаётся выражением

$$\mathbf{E}_{\text{neighb}} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_{\text{cap}}} \sum_j \frac{3(\mathbf{p}_j \cdot \mathbf{u}_{rj})\mathbf{u}_{rj} - \mathbf{p}_j}{\mathbf{r}_j^3}$$
(4)

И

$$\mathbf{E}_{im,neighb} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_{cap}} \sum_j \frac{3\left(\mathbf{p}_j \cdot \mathbf{u}_{rj}\right)\mathbf{u'}_{rj} - \mathbf{p'}_j}{\mathbf{r'}_j^3} , \qquad (5)$$

где \mathbf{p}_j' является дипольным моментом изображения диполей соседние частицы. Эти диполи расположены на расстоянии \mathbf{r}_j' от центральной частицы.

Предполагая, что все наночастицы имеют тот же дипольный момент $\mathbf{p} = \mathbf{p}_j$ (то есть, та же поляризуемость) локальное поле может быть записано как

$$\mathbf{E}_{\rm loc} = \frac{\mathbf{E}_{\rm ext}}{1 + \varepsilon_0 \varepsilon_{\rm cap} \alpha \beta} \,. \tag{6}$$

где

$$\beta = \frac{V}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_{\rm cap}} \left[\frac{1}{H^3} \frac{\varepsilon_{\rm sub} - \varepsilon_{\rm cap}}{\varepsilon_{\rm sub} + \varepsilon_{\rm cap}} - \sum_j \frac{3\cos^2\theta_j - 1}{\mathbf{r}_j^3} - \frac{\varepsilon_{\rm sub} - \varepsilon_{\rm cap}}{\varepsilon_{\rm sub} + \varepsilon_{\rm cap}} \sum_j \frac{3\cos^2\theta_j - 1}{\mathbf{r}_j^3} \right]$$
(7)

и θ_j – это угол между векторами \mathbf{u}_j и \mathbf{p}_j .

Условие

$$C = \sum_{j} \frac{3\cos^2\theta_j - 1}{\mathbf{r}'_j^3} \tag{8}$$

учитывает вклад в локальное поле соседних наночастиц и их изображений. Для наночастиц, регулярно расположенных на прямоугольной решетке, C зависит от частиц размером H и параметров решётки. Поэтому диэлектрическую функцию эффективной среды можно получить из уравнений и в виде

$$\varepsilon_0 \left(\varepsilon_{\rm eff} - \varepsilon_{\rm cap} \right) \mathbf{E}_{\rm ext} = N \varepsilon_0 \varepsilon_{\rm cap} V \alpha \mathbf{E}_{\rm loc} = N \varepsilon_0 \varepsilon_{\rm cap} V \frac{\varepsilon_{\rm m} - \varepsilon_{\rm cap}}{\varepsilon_{\rm cap} - l \left(\varepsilon_{\rm m} - \varepsilon_{\rm cap} \right)} \,. \tag{9}$$

Используя уравнение (6), получаем

$$\varepsilon_0 \left(\varepsilon_{\text{eff}} - \varepsilon_{\text{cap}} \right) = NV \frac{\varepsilon_{\text{cap}} \left(\varepsilon_{\text{eff}} - \varepsilon_{\text{cap}} \right)}{\varepsilon_{\text{cap}} + \ell \left(\varepsilon_{\text{m}} - \varepsilon_{\text{cap}} \right)} \frac{1}{1 + \varepsilon_0 \varepsilon_{\text{cap}} \alpha \beta} \,. \tag{10}$$

Эффективная диэлектрическая функция нанокомпозитного слоя задаётся

$$\varepsilon_{\text{eff}} = \varepsilon_{\text{cap}} \left[q \frac{\varepsilon_{\text{m}} - \varepsilon_{\text{cap}}}{\varepsilon_{\text{cap}} + F\left(\varepsilon_{\text{m}} - \varepsilon_{\text{cap}}\right)} + 1 \right] , \qquad (11)$$

где q = NV и $F = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_{cap}}{\varepsilon_m - \varepsilon_{cap}} \alpha \beta + \ell (1 + \varepsilon_0 \varepsilon_{cap} \alpha \beta)$ является эффективным коэффициентом деполяризации, учитывающим форму частиц, межчастичные дипольные взаимодействия и взаимодействия с подложкой.

Есть две общие теории эффективной среды. Первая теория — это диэлектрическая функция Максвелла-Гарнетта, которая рассматривает разбавленную систему включений. Сложность этого подхода состоит в том, что он асимметричен относительно включений и матрицы. Вторая теория — это приближение эффективной среды Бруггемана, которое является симметричным относительно включений и матрицы и не ограничивается каким-либо конкретным диапазоном концентраций. Ещё одно преимущество диэлектрической функции приближения эффективной среды состоит в том, что она правильно предсказывает порог перколяции для сферических зёрен.

Поскольку металлические включения могут составлять большой объём образца, выбрали диэлектрическую функцию приближения эффективной среды Бруггемана. Для включений со сложной диэлектрической проницаемостью $\tilde{\varepsilon}_a$ с объёмной долей f в матрице $\tilde{\varepsilon}_b$ аппроксимирующая диэлектрическая проницаемость эффективной среды $\tilde{\varepsilon}$ является корнем квадратичного выражения:

$$f\frac{\tilde{\varepsilon}_a - \tilde{\varepsilon}}{\tilde{\varepsilon}_a + \phi_c \tilde{\varepsilon}} + (1 - f) f\frac{\tilde{\varepsilon}_b - \tilde{\varepsilon}}{\tilde{\varepsilon}_b + \phi_c \tilde{\varepsilon}} , \qquad (12)$$

где физическое решение — это то решение, которое имеет $\text{Im}\{\tilde{\varepsilon}\} > 0$. Здесь $\phi_c (1 - g_c) / g_c$, где g_c – коэффициент деполяризации сфероида,

$$g_c = \frac{1 - e_c^2}{e_c^2} \left(\frac{1}{e_c} \arctan(e_c) - 1 \right) .$$
 (13)

Для сфероида с длиной оси фигуры c и длиной поперечной оси a эксцентриситет сфероида равен $e_c = \sqrt{1 - a^2/c^2}$. Диэлектрическая функция приближения эффективной среды аппроксимируется коэффициентом отражения с использованием нелинейного метода наименьших квадратов; коэффициент отражения выбран потому, что он представляет собой комбинацию действительной и мнимой частей диэлектрической функции, в отличие от действительной части проводимости, которая зависит только от мнимой части $\tilde{\varepsilon}$. Несмотря на то, что измерение является усреднённым по объёму, при низких температурах реальная часть диэлектрической функции падает ниже нуля на низких частотах, что указывает на слабое металлическое состояние. Предполагается, что включения являются металлическими в нормальном состоянии (сверхпроводящие ниже T_c) со сложной диэлектрической функцией, которая может быть описана простой моделью Друде [31]:

$$\tilde{\varepsilon}_{a}\left(\omega\right) = \varepsilon_{\infty} - \frac{\omega_{p,D}^{2}}{\omega^{2} + i\omega/\tau_{D}}, \qquad (14)$$

где ε_{∞} – действительная часть диэлектрической проницаемости на высоких частотах, $\omega_{p,D}^2 = 4\pi n e^2/m^*$ и $1/\tau_D$ – квадрат плазменной частоты и скорости рассеяния для делокализованных носителей соответственно, а m^* – эффективная масса. Предполагается, что матрица изолирующая со сложной диэлектрической функцией, состоящей только из осцилляторов Лоренца,

$$\tilde{\varepsilon}_b(\omega) = \varepsilon_\infty + \sum_j \frac{\Omega_j^2}{\omega_j^2 - \omega_j^2 - i\omega\gamma_j} , \qquad (15)$$

где ω_i , γ_i и ω_i – положение, ширина и сила осциллятора *j*-го колебания.

Модель Максвелла-Гарнетта была одним из первых подходов к описанию диэлектрической проницаемости случайных нанокомпозитов. В этой модели среднего поля для каждого включения учитывается только средний индуцированный диполь. Высшие мультипольные моменты не учитываются. Итак, каждая частица поляризована, как если бы она находилась в однородном эффективном поле:

$$\varepsilon_{\text{eff}} = \varepsilon_m \left(1 + \frac{1}{A} \frac{fx}{1 - fx} \right) , \qquad (16)$$

где

$$x = \frac{A\left(\varepsilon_p - \varepsilon_m\right)}{\varepsilon_m + A\left(\varepsilon_p - \varepsilon_m\right)} \,. \tag{17}$$

 ε_p , ε_m – диэлектрические проницаемости включений и матрицы соответственно, f – объёмная доля наночастиц. Коэффициент деполяризации A равен 1/3 в случае сфер. Для проводящих включений на достаточно низких частотах выполняется $|\varepsilon_p| \gg |\varepsilon_m|$ и, следовательно, x = 1, так что

$$\varepsilon_{\text{eff}} = \varepsilon_m \frac{1+2f}{1-f} \,. \tag{18}$$

Модель Максвелла–Гарнетта считалась удовлетворительной, когда точные межчастичные взаимодействия не важны, например, в случае разбавленных дисперсий или компонентов с низкой поляризуемостью.

Модель, которая чаще всего хорошо согласуется с экспериментальными результатами для нанокомпозитов, получена Бруггеманом

$$\left(\frac{\varepsilon_{\text{eff}} - \varepsilon_p}{\varepsilon_m - \varepsilon_p}\right) \left(\frac{\varepsilon_m}{\varepsilon_{\text{eff}}}\right)^{1/3} = 1 - f , \qquad (19)$$

или для проводящих частиц на низких частотах

$$\varepsilon_{\text{eff}} = \frac{\varepsilon_m}{\left(1 - f\right)^3} \,. \tag{20}$$

Эта формула, известная как асимметричная формула Бруггемана или формула Ханаи–Бруггемана, получается в предположении, что для нанокомпозитной среды теоретическая модель смешения Максвелла–Гарнетта является точной при низких факторах заполнения, а затем после итерационной процедуры, добавляющей небольшую долю частиц на каждом этапе. Здесь предел перколяции f = 1. Эта модель признана действительной, по крайней мере, для не слишком высоких коэффициентов заполнения и часто используется для сравнения с экспериментальными данными или результатами моделирования.

Результаты численных расчётов оптических характеристик для ультратонких нанокомпозитных плёнок и покрытий

Для вычисления эффективной диэлектрической проницаемости слоистой структуры, содержащего *n* слоёв, при условии последовательного соединения слоёв будем пользоваться следующей формулой смешения

$$\varepsilon_{\text{eff}} = \frac{\sum_{i=1}^{n} d_i}{\sum_{i=1}^{n} \frac{d_i}{\varepsilon_i}},$$
(21)

где d_i – толщина *i*-го слоя. Энергетические коэффициенты отражения и пропускания для слоя вычисляются по обычным формулам классической оптики. Эти формулы пригодны для толстых, тонких и ультратонких плёнок.

Амплитудные коэффициенты Френеля вычисляются по формулам:

1

$$r_{2} = \frac{r_{01} + r_{01}r_{12}r_{23}\exp\left(i2\phi_{2}\right) + (r_{12} + r_{23}\exp\left(i2\phi_{2}\right))\exp\left(i2\phi_{2}\right)}{1 + r_{12}r_{23}\exp\left(i2\phi_{2}\right) + r_{01}(r_{12} + r_{23}\exp\left(i2\phi_{2}\right))\exp\left(i2\phi_{2}\right)}$$
(22)

$$r_{01}^s = \frac{n_0 \cos \theta_0 - \tilde{n}_1 \cos \theta_1}{n_0 \cos \theta_0 + \tilde{n}_1 \cos \theta_1} , \qquad (23)$$

$$\dot{s}_{12}^s = \frac{\tilde{n}_1 \cos\theta_1 - \tilde{n}_2 \cos\theta_2}{\tilde{n}_1 \cos\theta_1 + \tilde{n}_2 \cos\theta_2} , \qquad (24)$$

$$r_{23}^s = \frac{\tilde{n}_2 \cos\theta_2 - \tilde{n}_3 \cos\theta_3}{\tilde{n}_2 \cos\theta_2 + \tilde{n}_3 \cos\theta_3} \,. \tag{25}$$

В работе разработана компьютерная программа для расчёта оптического отражения и пропускания ультратонких нанокомпозитных плёнок.



Рис. 1. Первая часть компьютерной программы на языке программирования Python для расчёта оптического отражения и пропускания ультратонких нанокомпозитных плёнок.

НАУКА ONLINE. № 2 (15). 2021

На рис. 1 изображена первая часть компьютерной программы на языке программирования Python для расчёта оптического отражения и пропускания ультратонких нанокомпозитных плёнок.



Рис. 2. Другая часть компьютерной программы на языке программирования Python для расчёта оптического отражения и пропускания ультратонких нанокомпозитных плёнок.

На рис. 2 изображена часть компьютерной программы на языке программирования Python для расчёта оптического отражения и пропускания ультратонких нанокомпозитных плёнок. Приведём результаты численных расчётов энергетических коэффициентов оптического отражения и пропускания ультратонких нанокомпозитных плёнок, активированных наночастицами серебра. Нанокомпозитные плёнки могут рассматриваться в приближении эффективной среды. Расчёт комплексной диэлектрической проницаемости неупорядоченных сред может быть сделан в рамках классических подходов, основанных на теориях гомогенизации Друде, Лорентц–Лоренца, Максвелл–Гарнетта, Оделевского, Бёттчере, Бергмана и др. Ясно, что универсальную форму для диэлектрическая проницаемости $\varepsilon_{\rm eff}$ среды получить затруднительно, так как диэлектрическая проницаемость зависит не только от состава неупорядоченной среды, но и от особенностей её структуры.



Рис. 3. Зависимость энергетического коэффициента отражения и коэффициента пропускания от длины волны оптического излучения для случая падения оптической волны из воздуха на ультратонкую нанокомпозитную плёнку толщиной $d_1 = 112$ нм из полиметилметакритала с наночастицами серебра с радиусом $a_1 = 4.0$ нм, фактором заполнения $f_1 = 3\%$, расположенную на подложке из нанокомпозитной среды из SiO₂ с наночастицами серебра с радиусом $a_2 = 7.0$ нм, фактором заполнения $f_2 = 5\%$ при угле падения излучения а) $\theta_0 = 0^\circ$, b) $\theta_0 = 15^\circ$, c) $\theta_0 = 30^\circ$, d) $\theta_0 = 50^\circ$.

На рис. З приведены результаты численных расчётов зависимости энергетического коэффициента отражения и коэффициента пропускания от длины волны оптического излучения для случая падения оптической волны из воздуха на ультратонкую нанокомпозитную плёнку толщиной $d_1 = 112$ нм из полиметилметакритала с наночастицами серебра с радиусом $a_1 = 4.0$ нм, фактором заполнения $f_1 = 3$ %, расположенную на подложке из нанокомпозитной среды из SiO₂ с наночастицами серебра с радиусом $a_2 = 7.0$ нм, фактором заполнения $f_2 = 5$ %. Угол падения внешнего оптического излучения: a) $\theta_0 = 0$ °, b) $\theta_0 = 15$ °, c) $\theta_0 = 30$ °, d) $\theta_0 = 50$ °.

На рис. 4 приведены результаты численных расчётов зависимости энергетического коэффициента отражения и коэффициента пропускания от длины волны оптического излучения для случая падения оптической волны из воздуха на ультратонкую нанокомпозитную плёнку толщиной $d_1 = 112$ нм из полиметилметакритала с наночастицами серебра с радиусом $a_1 = 2.5$ нм, фактором заполнения $f_1 = 2\%$, расположенную на подложке из нанокомпозитной среды из SiO₂ с наночастицами серебра с радиусом $a_2 = 5.5$ нм, фактором заполнения $f_2 = 3\%$. Угол падения внешнего оптического излучения: a) $\theta_0 = 0^\circ$, b) $\theta_0 = 15^\circ$, c) $\theta_0 = 30^\circ$, d) $\theta_0 = 50^\circ$.

На рис. 5 приведены результаты численных расчётов зависимости энергетического коэффициента отражения и коэффициента пропускания от длины волны оптического



Рис. 4. Зависимость энергетического коэффициента отражения и коэффициента пропускания от длины волны оптического излучения для случая падения оптической волны из воздуха на ультратонкую нанокомпозитную плёнку толщиной $d_1 = 112$ нм из полиметилметакритала с наночастицами серебра с радиусом $a_1 = 2.5$ нм, фактором заполнения $f_1 = 2\%$, расположенную на подложке из нанокомпозитной среды из SiO₂ с наночастицами серебра с радиусом $a_2 = 5.5$ нм, фактором заполнения $f_2 = 3\%$ при угле падения излучения а) $\theta_0 = 0^\circ$, b) $\theta_0 = 15^\circ$, c) $\theta_0 = 30^\circ$, d) $\theta_0 = 50^\circ$.

излучения для случая падения оптической волны из воздуха на ультратонкую нанокомпозитную плёнку толщиной $d_1 = 370$ нм из полиметилметакритала с наночастицами серебра с радиусом $a_1 = 4.0$ нм, фактором заполнения $f_1 = 3\%$, расположенную на подложке из нанокомпозитной среды из SiO₂ с наночастицами серебра с радиусом $a_2 = 7.0$ нм, фактором заполнения $f_2 = 5\%$. Угол падения внешнего оптического излучения: a) $\theta_0 = 0^\circ$, b) $\theta_0 = 15^\circ$, c) $\theta_0 = 30^\circ$, d) $\theta_0 = 50^\circ$.

На рис. 6 приведены результаты численных расчётов зависимости энергетического коэффициента отражения и коэффициента пропускания от длины волны оптического излучения для случая падения оптической волны из воздуха на ультратонкую двухслойную нанокомпозитную плёночную структуру. Толщина первой нанокомпозитной плёнки $d_1 = 112$ нм из полиметилметакритала с наночастицами серебра с радиусом $a_1 = 4.0$ нм, фактором заполнения $f_1 = 3$ %. Толщина второй нанокомпозитной плёнки $d_2 = 59$ нм из полиметилметакритала с наночастицами серебра с радиусом $a_2 = 7.0$ нм, фактором заполнения $f_2 = 5$ %. Подложка состоит из кристаллического кремния. Угол падения внешнего оптического излучения: а) $\theta_0 = 0^\circ$, b) $\theta_0 = 15^\circ$, c) $\theta_0 = 30^\circ$, d) $\theta_0 = 50^\circ$.

На рис. 7 приведены результаты численных расчётов зависимости энергетического коэффициента отражения и коэффициента пропускания от длины волны оптического



Рис. 5. Зависимость энергетического коэффициента отражения и коэффициента пропускания от длины волны оптического излучения для случая падения оптической волны из воздуха на ультратонкую нанокомпозитную плёнку толщиной $d_1 = 370$ нм из полиметилметакритала с наночастицами серебра с радиусом $a_1 = 4.0$ нм, фактором заполнения $f_1 = 3\%$, расположенную на подложке из нанокомпозитной среды из SiO₂ с наночастицами серебра с радиусом $a_2 = 7.0$ нм, фактором заполнения $f_2 = 5\%$ при угле падения излучения а) $\theta_0 = 0^\circ$, b) $\theta_0 = 15^\circ$, c) $\theta_0 = 30^\circ$, d) $\theta_0 = 50^\circ$.

излучения для случая падения оптической волны из воздуха на ультратонкую двухслойную нанокомпозитную плёночную структуру. Толщина первой нанокомпозитной плёнки $d_1 = 112$ нм из полиметилметакритала с наночастицами серебра с радиусом $a_1 = 2.5$ нм, фактором заполнения $f_1 = 2$ %. Толщина второй нанокомпозитной плёнки $d_2 = 59$ нм из полиметилметакритала с наночастицами серебра с радиусом $a_2 = 5.5$ нм, фактором заполнения $f_2 = 3$ %. Подложка состоит из кристаллического кремния. Угол падения внешнего оптического излучения: a) $\theta_0 = 0^\circ$, b) $\theta_0 = 15^\circ$, c) $\theta_0 = 30^\circ$, d) $\theta_0 = 50^\circ$.

На рис. 8 приведены результаты численных расчётов зависимости энергетического коэффициента отражения и коэффициента пропускания от длины волны оптического излучения для случая падения оптической волны из воздуха на ультратонкую двухслойную нанокомпозитную плёночную структуру. Толщина первой нанокомпозитной плёнки $d_1 = 370$ нм из полиметилметакритала с наночастицами серебра с радиусом $a_1 = 4.0$ нм, фактором заполнения $f_1 = 3$ %. Толщина второй нанокомпозитной плёнки $d_2 = 114$ нм из полиметилметакритала с наночастицами серебра с радиусом $a_2 = 7.0$ нм, фактором заполнения $f_2 = 5$ %. Подложка состоит из кристаллического кремния. Угол падения внешнего оптического излучения: а) $\theta_0 = 0^\circ$, b) $\theta_0 = 15^\circ$, c) $\theta_0 = 30^\circ$, d) $\theta_0 = 50^\circ$.



Рис. 6. Зависимость энергетического коэффициента отражения и коэффициента пропускания от длины волны оптического излучения для случая падения оптической волны из воздуха на ультратонкую двухслойную нанокомпозитную плёночную структуру. Толщина первой нанокомпозитной плёнки $d_1 = 112$ нм из полиметилметакритала с наночастицами серебра с радиусом $a_1 = 4.0$ нм, фактором заполнения $f_1 = 3$ %. Толщина второй нанокомпозитной плёнки $d_2 = 59$ нм из полиметилметакритала с наночастицами серебра с радиусом $a_2 = 7.0$ нм, фактором заполнения $f_2 = 5$ %. Подложка состоит из кристаллического кремния. Рассматриваются углы падения излучения а) $\theta_0 = 0^\circ$, b) $\theta_0 = 15^\circ$, c) $\theta_0 = 30^\circ$, d) $\theta_0 = 50^\circ$.

На рис. 9 приведены результаты численных расчётов зависимости энергетического коэффициента отражения и коэффициента пропускания от длины волны оптического излучения для случая падения оптической волны из воздуха на двухслойную нанокомпозитную плёночную структуру. Толщина первой нанокомпозитной плёнки $d_1 = 12$ мкм из полиметилметакритала с наночастицами серебра с радиусом $a_1 = 4.0$ нм, фактором заполнения $f_1 = 3$ %. Толщина второй нанокомпозитной плёнки $d_2 = 59$ мкм из полиметилметакритала с наночастицами серебра с радиусом $a_2 = 7.0$ нм, фактором заполнения $f_2 = 5$ %. Подложка состоит из кристаллического кремния. Угол падения внешнего оптического излучения: а) $\theta_0 = 0^\circ$, b) $\theta_0 = 15^\circ$, c) $\theta_0 = 30^\circ$, d) $\theta_0 = 50^\circ$. Из полученных графиков видно, что ультратонкие нанокомпозитные плёнки обладают высоким пропусканием оптического излучения. Экстраординарно высокое оптическое пропускание и слабая угловая зависимость от угла падения оптического излучения делает возможным использование нанокомпозитных плёнок в качестве просветляющих покрытий.



Рис. 7. Зависимость энергетического коэффициента отражения и коэффициента пропускания от длины волны оптического излучения для случая падения оптической волны из воздуха на ультратонкую двухслойную нанокомпозитную плёночную структуру. Толщина первой нанокомпозитной плёнки $d_1 = 112$ нм из полиметилметакритала с наночастицами серебра с радиусом $a_1 = 2.5$ нм, фактором заполнения $f_1 = 2$ %. Толщина второй нанокомпозитной плёнки $d_2 = 59$ нм из полиметилметакритала с наночастицами серебра с радиусом $a_2 = 5.5$ нм, фактором заполнения $f_2 = 3$ %. Подложка состоит из кристаллического кремния. Рассматриваются углы падения излучения а) $\theta_0 = 0^\circ$, b) $\theta_0 = 15^\circ$, c) $\theta_0 = 30^\circ$, d) $\theta_0 = 50^\circ$.

Заключение

В работе исследованы оптические характеристики ультратонких нанокомпозитных плёнок. в приближении эффективной среды разработана модифицированная теоретическая модель для описания оптических процессов в ультратонких нанокомпозитных плёнках, находящихся во внешнем поле оптического излучения. Разработанная модель позволяет адекватно описывать различные оптические процессы в ультратонких нанокомпозитных плёнках и плёночных покрытиях, расположенных на различных подложках. Изменяя весовое содержание и размер металлических наночастиц, находящихся внутри ультратонких нанокомпозитных плёнок, можно эффективно управлять значениями энергетических коэффициентов оптического отражения и пропускания ультратонких нанокомпозитных плёнок, что может быть использовано для создания новых высокоэффективных наноструктурых покрытий для приборов и устройств оптоэлектроники. В работе проводились численные расчёты пропускательной и отражательной способностей ультратонких нанокомпозитных плёнок, находящихся во внешнем поле оптического излучения.



Рис. 8. Зависимость энергетического коэффициента отражения и коэффициента пропускания от длины волны оптического излучения для случая падения оптической волны из воздуха на ультратонкую двухслойную нанокомпозитную плёночную структуру. Толщина первой нанокомпозитной плёнки $d_1 = 370$ нм из полиметилметакритала с наночастицами серебра с радиусом $a_1 = 4.0$ нм, фактором заполнения $f_1 = 3$ %. Толщина второй нанокомпозитной плёнки $d_2 = 114$ нм из полиметилметакритала с наночастицами серебра с радиусом $a_2 = 7.0$ нм, фактором заполнения $f_2 = 5$ %. Подложка состоит из кристаллического кремния. Рассматриваются углы падения излучения а) $\theta_0 = 0^\circ$, b) $\theta_0 = 15^\circ$, c) $\theta_0 = 30^\circ$, d) $\theta_0 = 50^\circ$.

Для вычисления оптических характеристик составлена компьютерная программа на языке программирования Python. Компьютерная программа позволяет строить графики зависимостей отражательной и пропускательной способностей от длины волны внешнего оптического излучения. При помощи компьютерной программы вычислены оптические характеристики оптического отражения и пропускания ультратонких нанокомпозитных плёнок и плёночных покрытий, содержащих наночастицы серебра, при различных значениях параметрах системы включений из металлических наночастиц.

Показано, что можно управлять величиной пропускания оптического излучения путём изменения параметров ультратонких нанокомпозитных плёнок. Оптическое пропускание ультратонких нанокомпозитных плёнок обладает слабой угловой зависимостью.

Гипотеза исследования, заключающаяся в том, что если использовать теоретические модели оптических процессов в ультратонких плёнках, плёночных наносистемах из нанокомпозитных материалов и результаты численных расчётов оптических характеристик ультратонких нанокомпозитных плёнок, то можно прогнозировать оптические свойства приборов и устройств на основе плёночных наносистем из нанокомпозитных материалов, подтверждена полностью.



Рис. 9. Зависимость энергетического коэффициента отражения и коэффициента пропускания от длины волны оптического излучения для случая падения оптической волны из воздуха на ультратонкую двухслойную нанокомпозитную плёночную структуру. Толщина первой нанокомпозитной плёнки $d_1 = 12$ мкм из полиметилметакритала с наночастицами серебра с радиусом $a_1 = 4.0$ нм, фактором заполнения $f_1 = 3$ %. Толщина второй нанокомпозитной плёнки $d_2 = 59$ мкмм из полиметилметакритала с наночастицами серебра с радиусом $a_2 = 7.0$ нм, фактором заполнения $f_2 = 5$ %. Подложка состоит из кристаллического кремния. Рассматриваются углы падения излучения а) $\theta_0 = 0^\circ$, b) $\theta_0 = 15^\circ$, c) $\theta_0 = 30^\circ$, d) $\theta_0 = 50^\circ$.

Выводы по работе можно сформулировать следующим образом:

- 1. проведённый анализ работ по оптике ультратонких нанокомпозитных покрытий показал актуальность исследования ультратонких нанокомпозитных плёнок,
- построена теоретическая модель оптических процессов в ультратонких нанокомпозитных плёнках и плёночных наносистемах, позволяющая адекватно описывать различные оптические процессы в ультратонких нанокомпозитных плёнках и плёночных наносистемах, расположенных на различных подложках,
- компьютерная программа, которая была написана на языке программирования Python, позволяет вычислять оптические характеристики ультратонких нанокомпозитных плёнок, строить графики зависимостей отражательной и пропускательной способностей от длины волны внешнего оптического излучения,
- в результате численных расчётов оптических характеристик ультратонких нанокомпозитных плёнок показано, что возможно управлять значением оптического пропускания ультратонкой нанокомпозитной плёнки, изменяя состав ультратонкой нанокомпозитной плёнки.

Список использованных источников

- Langmuir-Blodgett films / J. Zasadzinski [et al.] // Science. 1994. mar. Vol. 263, no. 5154. - P. 1726-1733. - URL: https://doi.org/10.1126/science.8134836.
- 2. Solidlike and liquidlike behavior in monolayers and multilayers of metal-bearing amphiphiles / S. Mukherjee [et al.] // Physical Review E. 2011. aug. Vol. 84, no. 2. URL: https://doi.org/10.1103/physreve.84.021606.
- 3. Alivisatos A. P. Perspectives on the Physical Chemistry of Semiconductor Nanocrystals // The Journal of Physical Chemistry. - 1996. - jan. - Vol. 100, no. 31. - P. 13226-13239. - URL: https://doi.org/10.1021/jp9535506.
- Li H., Zhang J., Bubeck Ch. Surfactant induced orientation of non-centrosymmetric polyoxometalate clusters in Langmuir-Blodgett films // Thin Solid Films. 2010. oct. Vol. 519, no. 1. P. 417–422. URL: https://doi.org/10.1016/j.tsf.2010. 07.103.
- 5. Principles and applications of grazing incidence X-ray and neutron scattering from ordered molecular monolayers at the air-water interface / J. Als-Nielsen [et al.] // Physics Reports. 1994. oct. Vol. 246, no. 5. P. 251–313. URL: https://doi.org/10.1016/0370-1573(94)90046-9.
- 6. X-ray and neutron scattering from rough surfaces / S. K. Sinha [et al.] // Physical Review B. - 1988. - aug. - Vol. 38, no. 4. - P. 2297-2311. - URL: https://doi.org/ 10.1103/physrevb.38.2297.
- X-ray diffuse scattering study of static undulations in multilayer films of a liquidcrystalline polymer / R. E. Geer [et al.] // Physical Review Letters. — 1993. — aug. — Vol. 71, no. 9. — P. 1391–1394. — URL: https://doi.org/10.1103/physrevlett.71. 1391.
- Geer R. E., Shashidhar R. Crossover from static to thermal layer undulations in finitesize liquid-crystalline films // Physical Review E. - 1995. - jan. - Vol. 51, no. 1. -P. R8-R11. - URL: https://doi.org/10.1103/physreve.51.r8.
- 9. Correlations in the interface structure of Langmuir-Blodgett films observed by x-ray scattering / V. Nitz [et al.] // Physical Review B. 1996. aug. Vol. 54, no. 7. P. 5038-5050. URL: https://doi.org/10.1103/physrevb.54.5038.
- Evidence of Self-Affine Rough Interfaces in a Langmuir-Blodgett Film from X-Ray Reflectometry / A. Gibaud [et al.] // Physical Review Letters. 1995. apr. Vol. 74, no. 16. P. 3205–3208. URL: https://doi.org/10.1103/physrevlett.74.3205.
- 11. Brus L. Electronic wave functions in semiconductor clusters: experiment and theory // The Journal of Physical Chemistry. 1986. jun. Vol. 90, no. 12. P. 2555–2560. URL: https://doi.org/10.1021/j100403a003.
- Kaganer V. M., Loginov E. B. Crystallization phase transitions and phase diagram of Langmuir monolayers // Physical Review Letters. — 1993. — oct. — Vol. 71, no. 16. — P. 2599-2602. — URL: https://doi.org/10.1103/physrevlett.71.2599.
- Kaganer V. M., Loginov E. B. Symmetry and phase transitions in Langmuir monolayers: The Landau theory // Physical Review E. — 1995. — mar. — Vol. 51, no. 3. — P. 2237– 2249. — URL: https://doi.org/10.1103/physreve.51.2237.

- 14. Kaganer V. M., Möhwald H., Dutta P. Structure and phase transitions in Langmuir monolayers // Reviews of Modern Physics. 1999. apr. Vol. 71, no. 3. P. 779-819. URL: https://doi.org/10.1103/revmodphys.71.779.
- Aste T., Szeto K. Y., Tam W. Y. Statistical properties and shell analysis in random cellular structures // Physical Review E. — 1996. — nov. — Vol. 54, no. 5. — P. 5482– 5492. — URL: https://doi.org/10.1103/physreve.54.5482.
- 16. X-ray-scattering study of capillary-wave fluctuations at a liquid surface / M. K. Sanyal [et al.] // Physical Review Letters. — 1991. — feb. — Vol. 66, no. 5. — P. 628–631. — URL: https://doi.org/10.1103/physrevlett.66.628.
- 17. Daillant J, Alba M. High-resolution x-ray scattering measurements: I. Surfaces // Reports on Progress in Physics. 2000. sep. Vol. 63, no. 10. P. 1725-1777. URL: https://doi.org/10.1088/0034-4885/63/10/203.
- 18. Dramatic enhancement of capillary wave fluctuations of a decorated water surface / A. Datta [et al.] // Physical Review E. 2005. apr. Vol. 71, no. 4. URL: https://doi.org/10.1103/physreve.71.041604.
- 19. Elasticity of two-dimensional crystalline monolayers of fatty acid salts at an air-water surface / J. Daillant [et al.] // Soft Matter. 2009. Vol. 5, no. 1. P. 203–207. URL: https://doi.org/10.1039/b810134e.
- 20. Schwartz D. K. Langmuir-Blodgett film structure // Surface Science Reports. 1997.—jan. Vol. 27, no. 7-8. P. 245-334. URL: https://doi.org/10.1016/s0167-5729(97)00003-4.
- Basu J. K., Sanyal M. K. Capillary Waves in Langmuir-Blodgett Interfaces and Formation of Confined CdS Layers // Physical Review Letters. 1997. dec. Vol. 79, no. 23. P. 4617–4620. URL: https://doi.org/10.1103/physrevlett.79.4617.
- 22. Basu J. K., Hazra S., Sanyal M. K. Growth Mechanism of Langmuir-Blodgett Films // Physical Review Letters. 1999. jun. Vol. 82, no. 23. P. 4675–4678. URL: https://doi.org/10.1103/physrevlett.82.4675.
- 23. Agarwal Vijendra K. Langmuir-Blodgett Films // Physics Today. 1988. jun. Vol. 41, no. 6. P. 40–46. URL: https://doi.org/10.1063/1.881121.
- 24. Bubeck Christoph, Holtkamp Dieter. Optical and surface-analytical methods for the characterization of ultrathin organic films // Advanced Materials. 1991. jan. Vol. 3, no. 1. P. 32–38. URL: https://doi.org/10.1002/adma.19910030107.
- 25. Blinov L. M. Langmuir films // Uspekhi Fizicheskih Nauk. 1988. Vol. 155, no. 7. P. 443-480. URL: https://doi.org/10.3367/ufnr.0155.198807c.0443.
- 26. Raper Judy A., Amal Rose. Measurement of Aggregate Fractal Dimensions Using Static Light Scattering // Particle & Particle Systems Characterization. — 1993. — nov. — Vol. 10, no. 5. — P. 239–245. — URL: https://doi.org/10.1002/ppsc.19930100505.
- 27. Dynamic Light Scattering for the Characterization of Polydisperse Fractal Systems: I. Simulation of the Diffusional Behavior / Uwe Kätzel [et al.] // Particle & Particle Systems Characterization. — 2008. — feb. — Vol. 25, no. 1. — P. 9–18. — URL: https://doi.org/10.1002/ppsc.200700004.

- 28. Forbes Andrew. Structured Light from Lasers // Laser & Photonics Reviews. 2019. oct. Vol. 13, no. 11. P. 1900140. URL: https://doi.org/10.1002/lpor. 201900140.
- 29. Stemp W. J., Lerner H. J., Kristant E. H. Testing Area-Scale Fractal Complexity (Asfc) and Laser Scanning Confocal Microscopy (LSCM) to Document and Discriminate Microwear on Experimental Quartzite Scrapers // Archaeometry. 2017. oct. Vol. 60, no. 4. P. 660-677. URL: https://doi.org/10.1111/arcm.12335.
- 30. Siakavara K. Enhanced fractal microstrip-antenna performance by using photonicbandgap fractal ground plane // Microwave and Optical Technology Letters. — 2004. — Vol. 42, no. 5. — P. 397–402. — URL: https://doi.org/10.1002/mop.20316.
- 31. Born M., Wolf E. Principles of Optics. Oxford : Pergamon Press, 1969. 720 p.

Сведения об авторах:

Константин Константинович Алтунин — кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры физики и технических дисциплин ФГБОУ ВО «Ульяновский государственный педагогический университет имени И. Н. Ульянова», Ульяновск, Россия.

E-mail: kostya_altunin@mail.ru ORCID iD 100000-0002-0725-9416 Web of Science ResearcherID P I-5739-2014 SCOPUS ID \Huge{so} 57201126207

Евгения Александровна Купреянова — студент факультета физико-математического и технологического образования ФГБОУ ВО «Ульяновский государственный педагогический университет имени И. Н. Ульянова», Ульяновск, Россия.

E-mail: kupreyanova.zhenechka@mail.ru

ORCID iD (D) 0000-0002-9848-1273

Web of Science ResearcherID P AAZ-8152-2020

Investigation of optical characteristics of ultrathin nanocomposite films using Python numerical computations

K.K. Altunin ២, E.A. Kupreyanova ២

Ulyanovsk State Pedagogical University, 432071, Ulyanovsk, Russia

Submitted April 5, 2021 Resubmitted April 12, 2021 Published June 12, 2021

Abstract. The physical features of optical processes in ultrathin nanocomposite films and film nanosystems are considered. Numerical calculations of the transmittance and reflectivity of ultrathin nanocomposite films in an external field of optical radiation have been carried out. To calculate the optical characteristics, a computer program was compiled in the Python programming language, which allows plotting the dependences of the reflectance and transmittance on the wavelength of external optical radiation. The dependences of the energy coefficients of optical transmission and reflection of ultrathin nanocomposite films on the radiation wavelength in the optical wavelength range are obtained for various values of the parameters of ultrathin nanocomposite films. It is shown that it is possible to effectively control the optical transmission of optical radiation by changing the parameters of ultrathin nanocomposite films.

Keywords: nanocomposite film, ultrathin nanocomposite film, nanostructured coating, metal nanoparticles, silver nanoparticles, optical radiation, optical transmittance, optical reflection coefficient, antireflection optical coating, optical devices, nanosystem

PACS: 42.25.Bs

References

- Blinov L. M. Langmuir films // Uspekhi Fizicheskih Nauk. 1988. Vol. 155, no. 7. P. 443–480. — URL: https://doi.org/10.3367/ufnr.0155.198807c.0443.
- 2. Solidlike and liquidlike behavior in monolayers and multilayers of metal-bearing amphiphiles / S. Mukherjee [et al.] // Physical Review E. 2011. aug. Vol. 84, no. 2. URL: https://doi.org/10.1103/physreve.84.021606.
- Kaganer V. M., Loginov E. B. Crystallization phase transitions and phase diagram of Langmuir monolayers // Physical Review Letters. - 1993. - oct. - Vol. 71, no. 16. -P. 2599-2602. - URL: https://doi.org/10.1103/physrevlett.71.2599.
- Kaganer V. M., Loginov E. B. Symmetry and phase transitions in Langmuir monolayers: The Landau theory // Physical Review E. – 1995. – mar. – Vol. 51, no. 3. – P. 2237– 2249. – URL: https://doi.org/10.1103/physreve.51.2237.
- Kaganer V. M., Möhwald H., Dutta P. Structure and phase transitions in Langmuir monolayers // Reviews of Modern Physics. — 1999. — apr. — Vol. 71, no. 3. — P. 779– 819. — URL: https://doi.org/10.1103/revmodphys.71.779.

- Aste T., Szeto K. Y., Tam W. Y. Statistical properties and shell analysis in random cellular structures // Physical Review E. - 1996. - nov. - Vol. 54, no. 5. - P. 5482-5492. - URL: https://doi.org/10.1103/physreve.54.5482.
- 7. X-ray-scattering study of capillary-wave fluctuations at a liquid surface / M. K. Sanyal [et al.] // Physical Review Letters. 1991. feb. Vol. 66, no. 5. P. 628–631. URL: https://doi.org/10.1103/physrevlett.66.628.
- 8. Daillant J, Alba M. High-resolution x-ray scattering measurements: I. Surfaces // Reports on Progress in Physics. 2000. sep. Vol. 63, no. 10. P. 1725–1777. URL: https://doi.org/10.1088/0034-4885/63/10/203.
- 9. Dramatic enhancement of capillary wave fluctuations of a decorated water surface / A. Datta [et al.] // Physical Review E. 2005. apr. Vol. 71, no. 4. URL: https://doi.org/10.1103/physreve.71.041604.
- 10. Elasticity of two-dimensional crystalline monolayers of fatty acid salts at an air-water surface / J. Daillant [et al.] // Soft Matter. 2009. Vol. 5, no. 1. P. 203–207. URL: https://doi.org/10.1039/b810134e.
- 11. Schwartz D. K. Langmuir-Blodgett film structure // Surface Science Reports. 1997. jan. Vol. 27, no. 7-8. P. 245–334. URL: https://doi.org/10.1016/s0167-5729(97)00003-4.
- Basu J. K., Sanyal M. K. Capillary Waves in Langmuir-Blodgett Interfaces and Formation of Confined CdS Layers // Physical Review Letters. 1997. dec. Vol. 79, no. 23. P. 4617–4620. URL: https://doi.org/10.1103/physrevlett.79.4617.
- Basu J. K., Hazra S., Sanyal M. K. Growth Mechanism of Langmuir-Blodgett Films // Physical Review Letters. — 1999. — jun. — Vol. 82, no. 23. — P. 4675–4678. — URL: https://doi.org/10.1103/physrevlett.82.4675.
- Langmuir-Blodgett films / J. Zasadzinski [et al.] // Science. 1994. mar. Vol. 263, no. 5154. - P. 1726-1733. - URL: https://doi.org/10.1126/science.8134836.
- 15. Alivisatos A. P. Perspectives on the Physical Chemistry of Semiconductor Nanocrystals // The Journal of Physical Chemistry. — 1996. — jan. — Vol. 100, no. 31. — P. 13226-13239. — URL: https://doi.org/10.1021/jp9535506.
- 16. Principles and applications of grazing incidence X-ray and neutron scattering from ordered molecular monolayers at the air-water interface / J. Als-Nielsen [et al.] // Physics Reports. 1994. oct. Vol. 246, no. 5. P. 251–313. URL: https://doi.org/10.1016/0370-1573(94)90046-9.
- 17. X-ray and neutron scattering from rough surfaces / S. K. Sinha [et al.] // Physical Review B. - 1988. - aug. - Vol. 38, no. 4. - P. 2297-2311. - URL: https://doi.org/ 10.1103/physrevb.38.2297.
- X-ray diffuse scattering study of static undulations in multilayer films of a liquidcrystalline polymer / R. E. Geer [et al.] // Physical Review Letters. — 1993. — aug. — Vol. 71, no. 9. — P. 1391–1394. — URL: https://doi.org/10.1103/physrevlett.71. 1391.

- 19. Geer R. E., Shashidhar R. Crossover from static to thermal layer undulations in finitesize liquid-crystalline films // Physical Review E. - 1995. - jan. - Vol. 51, no. 1. -P. R8-R11. - URL: https://doi.org/10.1103/physreve.51.r8.
- 20. Correlations in the interface structure of Langmuir-Blodgett films observed by x-ray scattering / V. Nitz [et al.] // Physical Review B. 1996. aug. Vol. 54, no. 7. P. 5038-5050. URL: https://doi.org/10.1103/physrevb.54.5038.
- 21. Agarwal Vijendra K. Langmuir-Blodgett Films // Physics Today. 1988. jun. Vol. 41, no. 6. P. 40–46. URL: https://doi.org/10.1063/1.881121.
- 22. Bubeck Christoph, Holtkamp Dieter. Optical and surface-analytical methods for the characterization of ultrathin organic films // Advanced Materials. 1991. jan. Vol. 3, no. 1. P. 32–38. URL: https://doi.org/10.1002/adma.19910030107.
- Li H., Zhang J., Bubeck Ch. Surfactant induced orientation of non-centrosymmetric polyoxometalate clusters in Langmuir-Blodgett films // Thin Solid Films. 2010. oct. Vol. 519, no. 1. P. 417–422. URL: https://doi.org/10.1016/j.tsf.2010. 07.103.
- 24. Evidence of Self-Affine Rough Interfaces in a Langmuir-Blodgett Film from X-Ray Reflectometry / A. Gibaud [et al.] // Physical Review Letters. 1995. apr. Vol. 74, no. 16. P. 3205–3208. URL: https://doi.org/10.1103/physrevlett.74.3205.
- 25. Brus L. Electronic wave functions in semiconductor clusters: experiment and theory // The Journal of Physical Chemistry. 1986. jun. Vol. 90, no. 12. P. 2555–2560. URL: https://doi.org/10.1021/j100403a003.
- 26. Born M., Wolf E. Principles of Optics. Oxford : Pergamon Press, 1969. 720 p.
- 27. Shalaev V. M. Nonlinear optics of random media. Springer Berlin Heidelberg, 2000. URL: http://dx.doi.org/10.1007/BFb0109599.
- Forbes Andrew. Structured Light from Lasers // Laser & Photonics Reviews. 2019. oct. Vol. 13, no. 11. P. 1900140. URL: https://doi.org/10.1002/lpor. 201900140.
- 29. Dynamic Light Scattering for the Characterization of Polydisperse Fractal Systems: I. Simulation of the Diffusional Behavior / Uwe Kätzel [et al.] // Particle & Particle Systems Characterization. — 2008. — feb. — Vol. 25, no. 1. — P. 9–18. — URL: https://doi.org/10.1002/ppsc.200700004.
- Raper Judy A., Amal Rose. Measurement of Aggregate Fractal Dimensions Using Static Light Scattering // Particle & Particle Systems Characterization. — 1993. — nov. — Vol. 10, no. 5. — P. 239–245. — URL: https://doi.org/10.1002/ppsc.19930100505.
- 31. Stemp W. J., Lerner H. J., Kristant E. H. Testing Area-Scale Fractal Complexity (Asfc) and Laser Scanning Confocal Microscopy (LSCM) to Document and Discriminate Microwear on Experimental Quartzite Scrapers // Archaeometry. 2017. oct. Vol. 60, no. 4. P. 660-677. URL: https://doi.org/10.1111/arcm.12335.

Information about authors:

Konstantin Konstantinovich Altunin – PhD in Physics and Mathematics, Associate Professor, Associate Professor of the Department of Physics and Technical Disciplines of the Ulyanovsk State Pedagogical University, Ulyanovsk, Russia.

НАУКА ONLINE. № 2 (15). 2021 •

E-mail: kostya_altunin@mail.ru ORCID iD $\stackrel{\textcircled{}}{10}$ 0000-0002-0725-9416 Web of Science ResearcherID $\stackrel{\textcircled{}}{10}$ I-5739-2014 SCOPUS ID $\stackrel{\textcircled{}{50}}{57201126207}$

Evgeniya Aleksandrovna Kupreyanova — student of the Faculty of Physics, Mathematics and Technological Education of the Ulyanovsk State Pedagogical University, Ulyanovsk, Russia.

E-mail: kupreyanova.zhenechka@mail.ru ORCID iD (D) 0000-0002-9848-1273 Web of Science ResearcherID (P) AAZ-8152-2020