

УДК 535.3
ББК 22.343
ГРНТИ 29.31.21
ВАК 01.04.05

Исследование оптических свойств графеновых наносистем с помощью численных вычислений на языке Python

К. К. Алтунин , Ю. А. Кучерова  ¹

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

Поступила в редакцию 8 апреля 2021 года
После переработки 12 апреля 2021 года
Опубликована 12 июня 2021 года

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

Ключевые слова: наноэлектроника, графен, графеновая наноэлектроника, нанокомпозит, графеновый нанокомпозит, графеновая наносистема, наночастица, монослой частиц, оптическое излучение, оптическое пропускание, оптическое отражение, оптическое покрытие, метод решётчных сумм

PACS: 42.25.Bs

Введение

В настоящее время интенсивно развиваются нанотехнологии, позволяющие создавать приборы и устройства на основе графеновых наноматериалов. В связи с этим становится актуальной задача вычисления оптических характеристик графеновых наноматериалов, находящихся в поле непрерывного или импульсного оптического излучения.

Объектом исследования является графеновый нанокомпозит.

Предметом исследования являются оптические процессы в графеновых нанокомпозитах с монослоями наночастиц.

¹E-mail: melneko@mail.ru

Целью работы является исследование оптических свойств графеновых наноматериалов и монослоёв наночастиц. В связи с интенсивным развитием графеновых материалов становится актуальной задача расчёта оптических характеристик и прогнозирования оптических свойств графеновых наноматериалов.

Задачи работы могут быть сформулированы следующим образом:

1. обзор и анализ научной литературы по графеновым наноматериалам,
2. создание теоретической модели графенового материала в поле оптического излучения,
3. проведение численных расчётов оптических характеристик графеновых нанокомпозитов и монослоёв наночастиц.

Гипотеза исследования состоит в том, что если выявить особенности оптических характеристик графеновых нанокомпозитов с монослоями наночастиц, то можно прогнозировать физические свойства приборов оптоэлектроники на основе графеновых нанокомпозитов с монослоями наночастиц.

В качестве методов исследования используются теоретические методы нанооптики, современные численные методы, методы программирования физических задач в оптике нанокомпозитов. В качестве материалов исследования выбраны различные конфигурации графеновых нанокомпозитов и монослоёв наночастиц.

Обзор научных работ по графеновым нанокомпозитам

Графен является двумерным слоем из атомов углерода, размещенных в решётке. Графен, новый класс двумерной углеродной наноструктуры, привлекает огромное внимание как экспериментальных, так и теоретических научных кругов в последние годы. Графен стал захватывающим новым наноматериалом углерода со многими новыми свойствами[1,2].

Благодаря привлекательным свойствам оптоэлектронных устройств на основе графена, таким как гибкость, ударопрочность и прозрачность, многочисленные исследования были посвящены материалам на основе графена с целью улучшения их оптоэлектронных свойств. Графен обладает замечательными электронными, термическими и механическими свойствами [3, 4]. Эта комбинация свойств делает графен потенциально идеальным кандидатом для образования полимер/графеновых нанокомпозитов с улучшенными механическими свойствами и электрической проводимостью. Графен является не только строительным блоком фуллеренов, углеродных нанотрубок и графита, он также обладает интересными свойствами, которые вызвали поток активности в последние несколько лет. Графен, двумерная углеродная структура, обладающая замечательными электронными и механическими свойствами, имеет большой потенциал в области материаловедения как для фундаментальных исследований, так и для технологических применений [5–8]. Эта уникальная наноструктура имеет большие перспективы для потенциальных применений во многих технологических областях, таких как наноэлектроника, датчики, нанокомпозиты, батареи, суперконденсаторы и накопители водорода. Однако отсутствие эффективного подхода к производству обрабатываемых графеновых листов в больших количествах было основным препятствием для использования большинства предлагаемых применений.

Слои графена характеризуются хорошей химической стабильностью, высокой проводимостью и большой удельной поверхностью, что делает их привлекательными системами для изучения электрокаталитического эффекта углеродных материалов [9, 10].

Был значительный интерес к использованию графена или его свернутого аналога, углеродной нанотрубки, в качестве усиления в композитах с металлической матрицей

[11–13] из-за присущей им стабильности при повышенных температурах, высокой жёсткости и прочности, а также превосходных электрических и теплопроводных свойств при помещении в металлические матрицы. Такое уникальное сочетание свойств основано на эффективном связывании вдоль границы раздела графен-металл [14, 15].

Наноккомпозиты состоят из нанонаполнителей и матриц, что позволяет создавать новые материалы с желаемыми свойствами как нанонаполнителей, так и матриц. Формирование перколяционной сети нанонаполнителей в матрицах имеет решающее значение для практической реализации уникальных свойств. Некоторые нанонаполнители, такие как углеродные нанотрубки и графеновые нанолитики, настолько гибки, что становятся волнистыми или смятыми [16].

Наноккомпозиты с наполнителями с высоким аспектным отношением привлекают огромное внимание благодаря превосходным физическим свойствам композита по сравнению с исходной матрицей. Наноккомпозиты с функционализированным графеном в качестве наполнителей не дали ожидаемой высокой теплопроводности из-за высокого межфазного термического сопротивления между функциональными группами и хлопьями графена. В работе [17] сообщается о надёжном и эффективном методе, который позволяет определить конфигурацию функциональных возможностей для улучшения теплопроводности. Метод сочетает в себе линеаризацию межатомных взаимодействий, расчёт и оптимизацию теплопроводности с использованием глобализованного и ограниченного алгоритма Нелдера-Мида.

Стремление к материалам с высокой теплопроводностью привело к созданию в матрице с более низкой теплопроводностью наноккомпозитов, включающих макромолекулярные материалы с превосходной теплопроводностью, такие как углеродные нанотрубки и графеновые наноленты. Чтобы минимизировать тепловое сопротивление поверхности раздела, жесткие, встроенные материалы могут быть химически функционализированы с различными боковыми цепями. В статье [18] сообщается об эффективном теоретическом методе, который использует нормальные моды для расчёта теплопроводности таких систем, и показывается, как коэффициент участия этих мод можно использовать для оценки различных вариантов функционализации. Этот метод использован для изучения того, насколько эффективно различные алкановые цепи улучшают тепловой поток через нанопласт графена.

В статье [5] обобщены результаты недавних фотоэмиссионных исследований, охватывающих различные аспекты, такие как рост эпитаксиального графена и многослойного графена, электронные и структурные свойства границы раздела с подложкой SiC и электронная структура эпитаксиальных слоёв графена.

За последние несколько десятилетий произошли драматические достижения в области электроники, которые нашли применение в вычислительной технике, связи, автоматике и других приложениях, которые затрагивают практически каждый аспект нашей жизни. В значительной степени эти достижения стали результатом непрерывной миниатюризации микроэлектронных устройств, в частности кремниевых транзисторов, что привело к созданию более плотных, быстрых и более энергоэффективных схем. Однако очевидно, что миниатюризация и повышение производительности этих устройств не могут продолжаться вечно; ряд ограничений в фундаментальном научном, а также технологическом характере накладывают ограничения на конечный размер и производительность кремниевых устройств. Полупроводниковая технология прошла долгий путь, создавая устройства всё меньшего размера. Но в конце концов, когда транзисторы приближаются к размеру молекул, квантовые эффекты становятся важными. Реализация приближающихся ограничений вдохновила всемирные усилия по разработке технологий альтернативных устройств. Некоторые подходы включают отход от традиционной электроники на основе транспорта электронов: например, разработка устройств

на основе спина. Другой подход, на котором сосредотачивается внимание, поддерживает принципы работы используемых в настоящее время устройств, в первую очередь полевого транзистора, но заменяет ключевой компонент устройства, проводящий канал, углеродными наноматериалами, такими как одномерные углеродные нанотрубки или двумерные графеновые слои, которые имеют превосходные электрические свойства. Кроме того, полупроводниковые углеродные нанотрубки представляют собой материалы с прямой запрещённой зоной, которые представляют собой идеальную систему для изучения оптики и оптоэлектроники в одном измерении и изучения возможности использования как электроники, так и оптоэлектронных технологий на одном материале [6]. Было разработано несколько методов синтеза графена, таких как метод скотча [1, 19], эпитаксиальный рост на пластине SiC [20], и химическое расслоение [21–23]. Первые два метода непригодны для получения графеновых слоёв с большой площадью поверхности в больших количествах при низких затратах.

Уникальное электронное свойство листов графена [1, 19, 24] обеспечивает потенциальное применение для синтеза нанокомпозитов [25] и изготовления различных микроэлектронных устройств, таких как полевые транзисторы [26], сверхчувствительные датчики [27], и электромеханические резонаторы [28].

Помимо захватывающих электронных свойств, таких как дробный квантовый эффект Холла при комнатной температуре, графен обладает рядом других особенностей, представляющих большой практический интерес. Многие физические измерения на графене были сделаны с образцами, приготовленными методом скотча, и недавно были предприняты некоторые попытки синтезировать образцы графена в более широком масштабе. Такой синтез обычно даёт образцы, которые не являются однослойными и содержат несколько графеновых слоёв [29–31].

В статье [32] сообщается о межфазной прочности на сдвиг графена на чистых и окисленных металлических и металлических поверхностях Ti и Al, используя расчёты теории функционала плотности. Результаты показывают значительные изменения в свойствах связи графен-металл в присутствии оксидной фазы. В частности, сильно хемосорбированная граница раздела между графеном и чистым Ti резко ослаблена образованием оксидно-металлической фазы, в то время как слабо поглощающая граница раздела между графеном и чистым Al значительно усиливается за счёт образования оксида металла. Эти эффекты окисления могут быть в некоторой степени модулированы наличием вакансий или дефектов Стоун-Уэlsa, которые увеличивают связывающие взаимодействия более слабых границ раздела графен-металл. Эти драматические изменения межфазных свойств при окислении поверхности объясняют результаты недавних экспериментов по извлечению углеродных нанотрубок из нанокомпозитов с металлической матрицей Al и Ti.

Используя молекулярно-динамическое моделирование и моделирование графеновых слоёв в органической матрице, можно продемонстрировать, что тепловое сопротивление поверхности, определенное методом тепловой релаксации, примерно на порядок больше, чем определенное из метода прямого моделирования теплообмена через границу раздела матрица-графен-матрица. В статье [33] даётся объяснение этой разницы на основе спектрального анализа частотно-зависимой колебательной температуры. Метод релаксации имитирует экспериментальные лазерные измерения межфазного теплового сопротивления на основе лазера, а метод прямого моделирования предоставляет информацию, необходимую для прогнозирования и понимания теплопроводности нанокомпозитов.

Гетерогенный фотокатализ с использованием полупроводников и возобновляемой солнечной энергии считается одним из наиболее перспективных процессов, позволяющих смягчить и даже разрешить как мировые кризисы энергоснабжения, так и загряз-

нения окружающей среды. За последние несколько лет было сделано много обнадеживающих достижений в области исследований полупроводниковых фотокатализаторов на основе графена. Среди них нанокompозиты CdS/графен привлекли большое внимание как важный вид фотокатализатора в химической и материаловедении благодаря своей превосходной фотокаталитической активности и фотостабильности при облучении в видимом свете. В работе [34] рассматривается механизм улучшения фотокаталитических характеристик композитных фотокатализаторов CdS/графен и систематическое обобщение последних достижений в области разработки и синтеза нанокompозитов CdS/графен. Эти нанокompозиты перспективны для большого разнообразия применений в фотокаталитических полях в видимом свете, включая искусственные фотосинтетические системы (фотокаталитическое производство водорода и снижение содержания CO₂), восстановление окружающей среды и органический фотосинтез. Специальное внимание уделяется фотокаталитическому образованию водорода и фотодеградации загрязняющих веществ на нанокompозитных фотокатализаторах CdS/графен. Кроме того, обсуждаются перспективы материалов на основе CdS/графена, включая различные остающиеся проблемы для крупномасштабных применений, определяя перспективные области для соответствующих исследований в этой области.

В работе [35] сообщается о том, что синтезированы прозрачные и химически модифицированные графеновые нанокompозитные плёнки.

Микроструктура, тепловые и электрические свойства графеновых нанокompозитных плёнок толщиной около 100 мкм с УФ-отверждением в зависимости от содержания графена исследованы в статье [36].

В статье [37] исследован нанокompозитный материал сера/графен, который получен путём включения серы в графеновые каркасы посредством процесса плавления.

В работе [38] пенополистирол (PS)/функционализированные графеновые нанокompозитные пены были приготовлены с использованием сверхкритического диоксида углерода.

В статье [39] исследовано влияние функционализации циклогексилдиамина на поверхность графена посредством реакции диазония на кинетику отверждения, а также морфологические, механические, термические и физические свойства пены нанокompозита натуральный каучук/графен.

Кроме того, полимерные нанокompозитные пены привлекают все большее внимание как научных, так и промышленных кругов [4]. Сочетание функциональных нанонаполнителей и технологии вспенивания сверхкритической жидкости имеет высокий потенциал для создания нового класса материалов, которые являются легкими, высокопрочными и многофункциональными.

В работе [40] описана изготовленная серия огнестойких нанокompозитных пенопластов мочевино-формальдегид/графен-силан на основе промышленного продукта графена с использованием полимеризации и вспенивания на водной основе.

Как графен, атомарно тонкий двумерный кристалл, исследует третье пространственное измерение, изгибаясь при сжатии, ещё не понятно. Знание прочности на изгиб графена, нагрузки, при которой он трансформируется из плоской в изогнутую форму, является ключом к обеспечению механической стабильности нанoeлектронных и нанокompозитных устройств на основе графена. В статье [41] устанавливается с помощью теоретического анализа из первых принципов, что графен обладает внутренней жёсткостью против выпучивания, и это проявляется в слабо линейном компоненте в дисперсии изгибного акустического режима графена, который считается квадратичным.

В работе [42] сообщается об аэрозольном синтезе и оптических характеристиках нанокompозитных плёнок ZnO / неокисленный графен с высокой оптической прозрачностью ($T > 85\%$ на видимых длинах волн).

В статье [43] было изучено релаксационное поведение полиимида и его нанокомпозита, содержащего 10 мас.% графена, с использованием динамического механического спектрометра.

В работе [44] описано использование специально изготовленной сборочной конструкции плёнки, которая состоит из микрофлюидной камеры, позволяющей самосборке на основе электростатического заряда противоположно заряженных растворов полимеров, образующих гидрогелевое волокно и, в конечном итоге, нанокомпозитную волокнистую гидрогелевую плёнку. Плёнка повторяет однонаправленную иерархическую волокнистую структуру наряду с проводящими свойствами. Исследуемые объекты обладают высокой проводимостью и подвижностью носителей заряда графена для создания наноструктурных плёнок графенового нанокомпозита из волокнистого гидрогеля.

Графен широко исследовался в качестве материалов электродов суперконденсаторов благодаря его уникальным характеристикам двумерной наноструктуры, включая высокую теоретическую удельную поверхность, высокую проводимость, хорошую стабильность, широкое потенциальное окно и превосходную механическую гибкость.

В работе [45] рассмотрены свойства графен-полипирролового нанокомпозита, выступающего в качестве идеального электроактивного материала для высокоэффективных суперконденсаторов. Высокая плотность энергии, долговечность и гибкость суперконденсаторов срочно необходимы для следующего поколения носимых и портативных электронных устройств [46]. В работе [47] продемонстрировано тестированием производительности функционального композиционного материала в суперконденсаторах, что присутствие наночастиц Fe_2O_3 оказывает положительное влияние на активную площадь поверхности углеродного аэрогеля и, следовательно, на ёмкость материала.

В статье [48] сообщается о простом методе синтеза нанокомпозита серебро – полипиррол/графен в качестве эффективных электродных материалов для применения суперконденсатора.

В работе [49] был синтезирован и охарактеризован магнитно-сульфоновый графеновый нанокомпозит ($\text{G-SO}_3\text{H/Fe}_3\text{O}_4$) с помощью методов сканирующей электронной микроскопии, инфракрасной спектроскопии с преобразованием Фурье и рентгеновской дифракции.

В работе [50] получают полианилино-функционализированный восстановленный оксид графена путём межфазной полимеризации, а затем вертикально ориентированные полианилино-графеновые нанокомпозиты.

В статье [51] рассматривается недавний прогресс в области синтеза и изготовления графеновых нанокомпозитных материалов для применения в различных системах накопления энергии.

Теория оптических свойств графеновых наноматериалов

Рассмотрим теоретическую модель для оптического отражения и пропускания монослоя металлических наночастиц на поверхности полубесконечной среды. Приведём описание процесса оптического отражения и пропускания монослоя сферических наночастиц, расположенных на поверхности полубесконечной подстилающей среды. Основная система уравнений для нахождения амплитудных коэффициентов отражения и пропускания от монослоя металлических наночастиц, расположенных на поверхности подстилающей среды, имеет вид [52, 53]:

$$r_{01}^s = E_{01}^s N_1 \alpha_1 B_1^s - c_{01}^s t_{01}^s, \quad (1)$$

$$a_{01}^s t_{01}^s = E_0^s + E_{01}^s N_1 \alpha_1 C_1^s, \quad (2)$$

$$E_{01}^s = \frac{E_0^s - c_{01}^s t_{01}^s}{1 - (a_{T1} + A_1^s) N_1 \alpha_1}, \quad (3)$$

где введены френелевские коэффициенты

$$c_{01}^s = \frac{1}{2} \frac{\sin(\theta_0 - \theta_1)}{\cos \theta_0 \sin \theta_1}, \quad (4)$$

$$a_{01}^s = \frac{1}{2} \frac{\sin(\theta_0 + \theta_1)}{\cos \theta_0 \sin \theta_1}, \quad (5)$$

где θ_0 – угол падения внешней оптической волны, θ_1 – угол преломления внешней оптической волны, который может быть найден из обобщённого закона преломления

$$\frac{\sin \theta_0}{\sin \theta_1} = \frac{n_1}{n_0}. \quad (6)$$

Выражая из уравнения (6) угол преломления θ_1 , получим

$$\theta_1 = \arcsin \left(\frac{n_0 \sin \theta_0}{n_1} \right). \quad (7)$$

Решим систему уравнений (1)-(3).

$$r_{01}^s = \frac{(E_0^s - c_{01}^s t_{01}^s) N_1 \alpha_1 B_1^s}{1 - (a_{T1} + A_1^s) N_1 \alpha_1} - c_{01}^s t_{01}^s, \quad (8)$$

$$a_{01}^s t_{01}^s = E_0^s + \frac{N_1 \alpha_1 C_1^s (E_0^s - c_{01}^s t_{01}^s)}{1 - (a_{T1} + A_1^s) N_1 \alpha_1}, \quad (9)$$

$$a_{01}^s t_{01}^s = E_0^s + \frac{N_1 \alpha_1 C_1^s E_0^s}{1 - (a_{T1} + A_1^s) N_1 \alpha_1} - \frac{N_1 \alpha_1 C_1^s c_{01}^s t_{01}^s}{1 - (a_{T1} + A_1^s) N_1 \alpha_1}, \quad (10)$$

получим уравнение для нахождения амплитудного коэффициента пропускания t_{01}^s

$$t_{01}^s \left(a_{01}^s + \frac{N_1 \alpha_1 C_1^s c_{01}^s}{1 - (a_{T1} + A_1^s) N_1 \alpha_1} \right) = E_0^s \left(1 + \frac{N_1 \alpha_1 C_1^s}{1 - (a_{T1} + A_1^s) N_1 \alpha_1} \right), \quad (11)$$

из которого находим

$$t_{01}^s = E_0^s \frac{\left(1 + \frac{N_1 \alpha_1 C_1^s}{1 - (a_{T1} + A_1^s) N_1 \alpha_1} \right)}{\left(a_{01}^s + \frac{N_1 \alpha_1 C_1^s c_{01}^s}{1 - (a_{T1} + A_1^s) N_1 \alpha_1} \right)}. \quad (12)$$

Энергетический коэффициент отражения оптической волны от монослоя сферических наночастиц найдём по формуле

$$R_{01}^s = \left| \frac{r_{01}^s}{E_0^s} \right|^2. \quad (13)$$

Опишем процесс вычисления решёточных сумм для монослоя из металлических наночастиц сферической формы. Выражение решёточной суммы для точки наблюдения внутри монослоя наночастиц имеет вид [53]:

$$A_1^s = \frac{4\pi}{3} a^3 \sum_j \exp(ik_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j) \times \\ \times \left\{ \left(\frac{3}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|^5} - \frac{3ik_0}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|^4} - \frac{k_0^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|^3} \right) (y - y_j)^2 - \right. \\ \left. - \left(\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|^3} - \frac{ik_0}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|^2} - \frac{k_0^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|} \right) \right\}, \quad (14)$$

где $k_0 = \omega/c$ – волновое число оптической волны в вакууме.

Вектор поляризации подстилающей среды $\mathbf{P}(\mathbf{r}) = (\tilde{n}^2 - 1) k_0^2 \mathbf{Q}(\mathbf{r})$, где $\tilde{n}$ – показатель преломления среды, $\mathbf{Q}(\mathbf{r})$ – функция координат, удовлетворяющая уравнению Гельмгольца

$$\nabla^2 \mathbf{Q} + \tilde{n}^2 k_0^2 \mathbf{Q} = 0 \quad (15)$$

и условию поперечности $\nabla \cdot \mathbf{Q} = 0$. Применение теоремы Грина позволяет преобразовать объёмный интеграл по координатам в подстилающей среде к следующему поверхностному интегралу:

$$\mathbf{I}_\Sigma = -2\pi \frac{\sin(\theta_0 - \theta_1)}{\cos \theta_0 \sin \theta_1} \mathbf{Q}_0 \exp(ik_0 \mathbf{r} \cdot \mathbf{s}) . \quad (16)$$

Тогда амплитуда s -поляризованной отражённой волны может быть определена из следующего равенства

$$r_{01}^s = E_{01}^s N_1 \alpha_1 B_1^s - c_{01}^s t_{01}^s . \quad (17)$$

Выражение решёточной суммы для точки наблюдения вне монослоя наночастиц имеет вид:

$$B_1^s = \frac{4\pi}{3} a^3 \exp(-ik_0 z) \sum_j \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j) \times \\ \times \left\{ \left(\frac{3}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|^5} - \frac{3ik_0}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|^4} - \frac{k_0^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|^3} \right) (y - y_j)^2 - \right. \\ \left. - \left(\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|^3} - \frac{ik_0}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|^2} - \frac{k_0^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|} \right) \right\} \exp(ik_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|) . \quad (18)$$

Эффективная поляризуемость валентных электронов в сферических наночастицах определяется выражением

$$\alpha_{\text{leff}} = \frac{\alpha_1}{1 - (a_T + A_1^s) N_1 \alpha_1} . \quad (19)$$

Запишем уравнения для нахождения амплитудного коэффициента пропускания монослоя сферических наночастиц в виде

$$a_{01}^s t_{01}^s = E_0^s + E_{01}^s N_1 \alpha_1 C_1^s , \quad (20)$$

где коэффициент a_{01}^s находится по формуле

$$a_{01}^s = \frac{1}{2} \frac{\sin(\theta_0 + \theta_1)}{\cos \theta_0 \sin \theta_1} . \quad (21)$$

Выражая из уравнения (20) амплитудный коэффициент пропускания монослоя сферических наночастиц, получим

$$t_{01}^s = E_0^s \frac{1 + N_1 \alpha_{\text{leff}} C_1^s}{a_{01}^s + c_{01}^s N_1 \alpha_{\text{leff}} C_1^s} . \quad (22)$$

Энергетический коэффициент пропускания оптической волны через монослой сферических наночастиц найдём по формуле

$$T_{01}^s = \frac{q_1^s}{q_0^s} \left| \frac{t_{01}^s}{E_0^s} \right|^2 , \quad (23)$$

где $q_1^s = n_1 \cos \theta_1$, $q_0^s = n_0 \cos \theta_0$.

Опишем процесс вычисления решёточных сумм методом Лоренца для монослоя металлических наночастиц сферической формы на поверхности полубесконечной среды. Вычислим решёточные суммы для монослоя металлических наночастиц сферической формы на поверхности полубесконечной среды, используя метод Лоренца. Согласно методу Лоренца наночастицы, находящиеся вблизи точки наблюдения, считаются распределёнными дискретно, а более далёкие наночастицы считаются распределёнными непрерывно. Влияние далёких наночастиц может быть учтено путём перехода к интегрированию. Рассмотрим случай, когда точка наблюдения находится вне наночастицы. Учитывая, что функция, описывающее поле диполей, является периодической с периодом решётки, она может быть разложена в ряд Фурье по векторам обратной решётки. Запишем следующее равенство

$$\begin{aligned} \mathbf{B} &= \frac{4\pi}{3} a^3 \exp(-ik_0 z) \sum_j [\nabla [\nabla, \mathbf{n}_0]] \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) G(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|) = \\ &= \sum_{p,q=-\infty}^{\infty} \mathbf{A}_{pq}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}), \end{aligned} \quad (24)$$

где $\mathbf{n}_0 = \mathbf{E}_0 / |\mathbf{E}_0|$, функция Грина

$$G(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|) = \frac{\exp(ik_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|}, \quad (25)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{pq}(\mathbf{r}) &= -\frac{4\pi}{3} a^3 \exp(-ik_0 z) \frac{2\pi i}{|[\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2]|} \times \\ &\times [\mathbf{k}_{pq} [\mathbf{k}_{pq}, \mathbf{n}_0]] \frac{\exp[i(\mathbf{k}_{pq} - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}]}{\kappa_{pq}}. \end{aligned} \quad (26)$$

Здесь введены обозначения

$$\mathbf{k}_{pq} = \begin{cases} \left(\mathbf{q} + \mathbf{g}_{pq}^{\parallel}, \kappa_{pq} \right) & z > 2a, \\ \left(\mathbf{q} + \mathbf{g}_{pq}^{\parallel}, -\kappa_{pq} \right) & z < 0, \end{cases} \quad (27)$$

$$\kappa_{pq} = \sqrt{k_0^2 - \left(\mathbf{q} + \mathbf{g}_{pq}^{\parallel} \right)^2}, \quad (28)$$

$$\mathbf{g}_{pq}^{\parallel} = p\mathbf{g}_1 + q\mathbf{g}_2. \quad (29)$$

Векторы обратной решётки равны

$$\mathbf{g}_1 = 2\pi \frac{[\mathbf{a}_2, \mathbf{n}]}{|[\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2]|}, \quad (30)$$

$$\mathbf{g}_2 = 2\pi \frac{[\mathbf{n}, \mathbf{a}_1]}{|[\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2]|}, \quad (31)$$

где $\mathbf{a}_1 = (1, 0, 0)$, $\mathbf{a}_2 = (\alpha, \beta, 0)$ – векторы трансляции прямой решётки, выбранные из соображения минимальности их длины, а вектор $\mathbf{n} = (0, 0, 1)$ перпендикулярен поверхности монослоя. y -составляющая вектора $\mathbf{B}$, имеющего вид (24), совпадает с B_1^s .

Вычислим решёточную сумму (14) для точек наблюдения, расположенных внутри монослоя наночастиц. Следуя методу Эвальда [52], запишем следующее выражение при $z = 0$:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i) &= \frac{4\pi}{3} a^3 \sum_j [\nabla [\nabla, \mathbf{n}_0]] \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j) G(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|) = \\ &= \frac{4\pi}{3} a^3 \hat{f}(\mathbf{k}_0) \mathbf{n}_0 \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j), \end{aligned} \quad (32)$$

где $\mathbf{r}_j$ – радиус-вектор точки наблюдения, находящейся в центре i -ой наночастицы. Суммирование проводится по всем слагаемым, кроме i -го слагаемого. Вектор $\mathbf{A}$ имеет y -компоненту, совпадающую с A_1^s .

Тензор $\hat{f}$ является симметричным с компонентами f_{xz}, f_{zx}, f_{yz} , равными нулю. Он имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} f^{\mu\nu}(\mathbf{k}_0) &= c^{\mu\nu} - \frac{2}{3} i k_0^3 \left(\operatorname{erfc} \left(\frac{i k_0}{2F} \right) - 1 \right) \delta^{\mu\nu} + \\ &+ \frac{4F}{3\sqrt{\pi}} (k_0^2 - F^2) \exp \left(\frac{k_0^2}{4F^2} \right) \delta^{\mu\nu}. \end{aligned} \quad (33)$$

Здесь содержится дополнительный интеграл вероятностей (erfc), который быстро стремится к нулю при больших значениях аргумента,

$$\begin{aligned} c^{\mu\nu} &= \frac{i\pi}{|[\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2]|} \sum_{p,q} \left[\frac{k_0^2 \delta^{\mu\nu} - k_{pq\mu} k_{pq\nu}}{k_{pq}} \operatorname{erfc} \left(-\frac{i k_{pq}}{2F} \right) \left(1 + (-1)^{\delta^{\mu z}} (-1)^{\delta^{\nu z}} \right) + \right. \\ &+ \delta^{\mu z} \delta^{\nu z} \frac{i 4F}{\sqrt{\pi}} \exp \left(\frac{k_{pq}^2}{4F^2} \right) \left. \right] + \frac{1}{2} \sum_{n,m} \frac{\exp(i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{a}_{nm})}{a_{nm}^3} \times \\ &\times \left\{ \Gamma_{nm}^{(1)} [\delta^{\mu\nu} \Gamma_{nm}^{(2)} + \mathbf{a}_{nm}^\mu \cdot \mathbf{a}_{nm}^\nu \Gamma_{nm}^{(3)}] + \right. \\ &+ \Gamma_{nm}^{(4)} [-\delta^{\mu\nu} \mathbf{a}_{nm} + \mathbf{a}_{nm}^\mu \cdot \mathbf{a}_{nm}^\nu \Gamma_{nm}^{(5)}] + c.c. \left. \right\}, \end{aligned} \quad (34)$$

$\mu, \nu = x, y, z$; $\mathbf{a}_{nm} = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2$, $a_{nm} = |\mathbf{a}_{nm}|$; n, m – целые числа.

Коэффициенты находятся по формулам

$$\Gamma_{nm}^{(1)} = \exp(-i k_0 a_{nm}) \operatorname{erfc} \left(a_{nm} F - \frac{i k_0}{2F} \right), \quad (35)$$

$$\Gamma_{nm}^{(2)} = -1 - i k_0 a_{nm} + k_0^2 a_{nm}^2, \quad (36)$$

$$\Gamma_{nm}^{(3)} = -k_0^2 + \frac{3i k_0}{a_{nm}} + \frac{3}{a_{nm}^2}, \quad (37)$$

$$\Gamma_{nm}^{(4)} = \frac{2F}{\sqrt{\pi}} \exp \left(-F^2 a_{nm}^2 + \frac{k_0^2}{4F^2} \right), \quad (38)$$

$$\Gamma_{nm}^{(5)} = \frac{3}{a_{nm}} + 2F^2 a_{nm}, \quad (39)$$

$$F = \sqrt{\frac{\pi}{|[\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2]|}}. \quad (40)$$

Численное исследование оптических свойств графеновых нанокомпозитов с монослоями наночастиц строится на основе решения задачи об отражении и пропускании оптической волны монослоем наночастиц на подложке.

Результаты численных расчётов коэффициентов оптического отражения и пропускания

Приведём описание результатов разработки компьютерной программы для расчёта оптического отражения и пропускания монослоя. В работе разработана компьютерная программа для расчёта оптического отражения и пропускания монослоя наночастиц, находящихся в диэлектрической матрице. Компьютерная программа на языке программирования Python состоит из блока подключения необходимых библиотек расширений для численных расчётов и построения графиков, блока описания функций зависимости рассчитываемых величин от длины волны излучения и процедур построения графиков. Затем из интерактивной оболочки разработки компьютерной программы на языке программирования Python разработки можно записать графики функциональных зависимостей оптического отражения и пропускания монослоя наночастиц или графенового нанокompозита в файл.

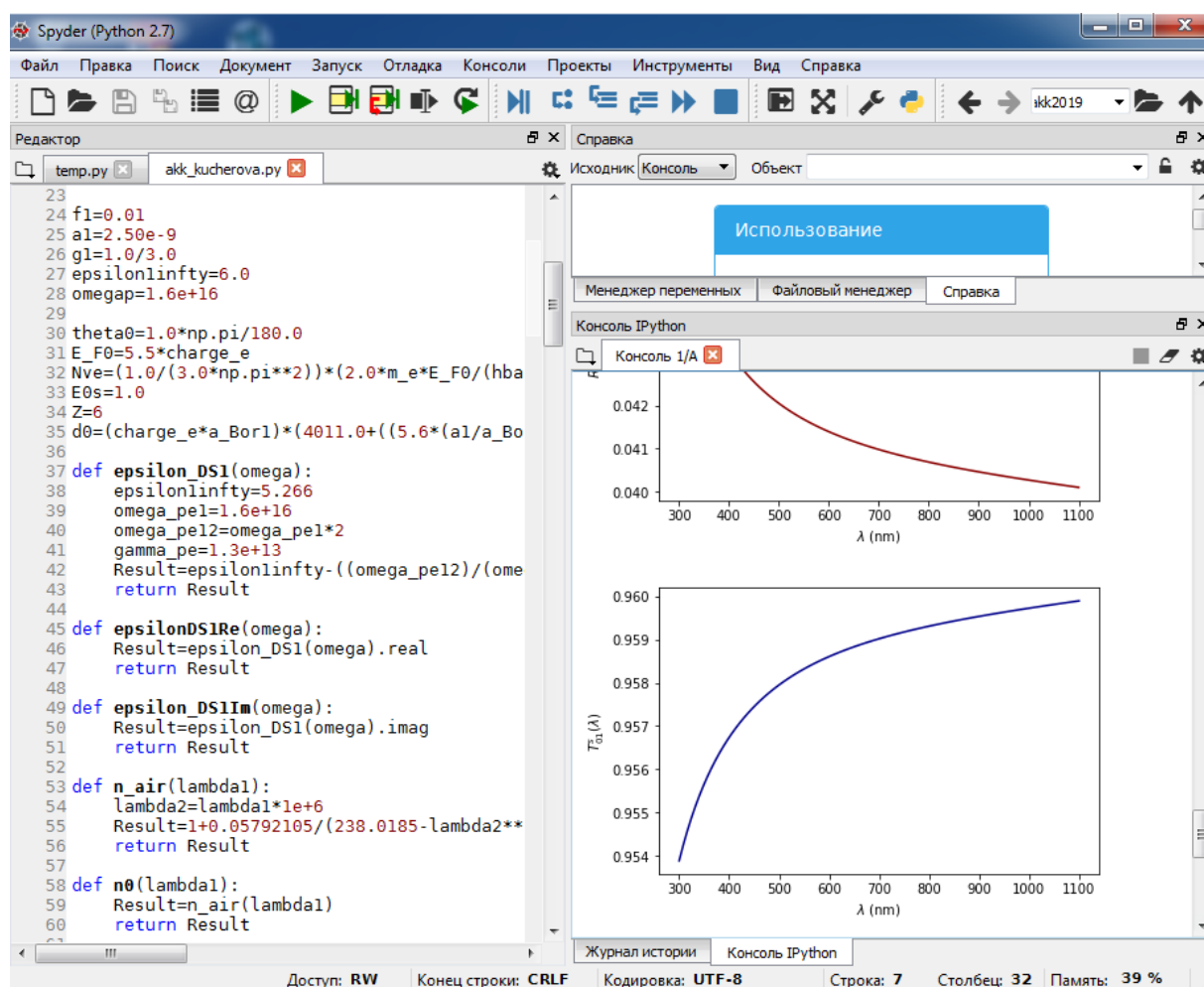


Рис. 1. Первая часть программы на языке программирования Python для расчёта оптического отражения и пропускания монослоя наночастиц.

На рис. 1 изображена первая часть программы на языке программирования Python для расчёта оптического отражения и пропускания монослоя наночастиц, расположенного на поверхности полубесконечной среды.

Численные расчёты оптических характеристик графеновых нанокompозитов и монослоёв наночастиц проводятся на основе решения задачи об отражении и пропускании оптической волны монослоя наночастиц, расположенных на поверхности полубесконечной подстилающей среды.

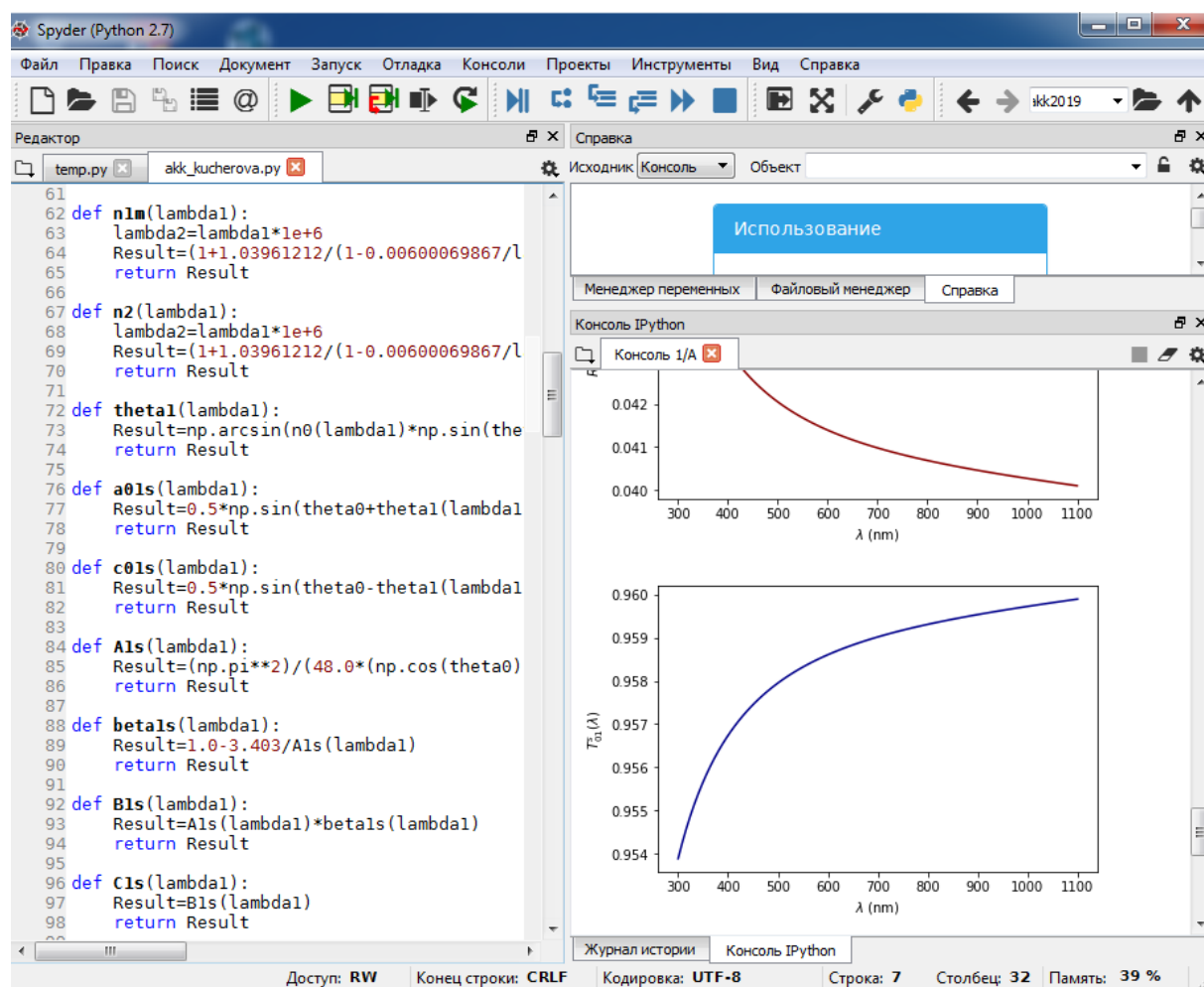


Рис. 2. Вторая часть компьютерной программы на языке программирования Python для расчёта оптического отражения и пропускания монослоя наночастиц.

На рис. 2 изображена вторая часть компьютерной программы на языке программирования Python для расчёта оптического отражения и пропускания монослоя наночастиц. На рис. 3 изображена третья часть компьютерной программы на языке программирования Python для расчёта оптического отражения и пропускания монослоя наночастиц, позволяющая строить графики зависимости оптического отражения и пропускания монослоя наночастиц в диэлектрической матрице из стекла в составе графенового нанокompозита. Затем можно либо записать графики в файл из программы, либо скопировать в графический файл из интерактивной оболочки языка Python.

Приведём результаты численных расчётов эффективного показателя преломления монослоя сферических наночастиц в случае малого заполнения. Компьютерная программа на языке программирования Python позволяет производить расчёты зависимости действительной и мнимой частей эффективного показателя преломления монослоя наночастиц от длины волны внешнего оптического излучения. Приведём результаты численных расчётов эффективного показателя преломления монослоя сферических наночастиц в случае малого заполнения наночастицами графенового нанокompозита.

На рис. 4 изображена зависимость действительной части эффективного показателя преломления монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 2\%$ в матрице из стекла от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

На рис. 5 изображена зависимость мнимой части эффективного показателя преломления монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 2\%$ в

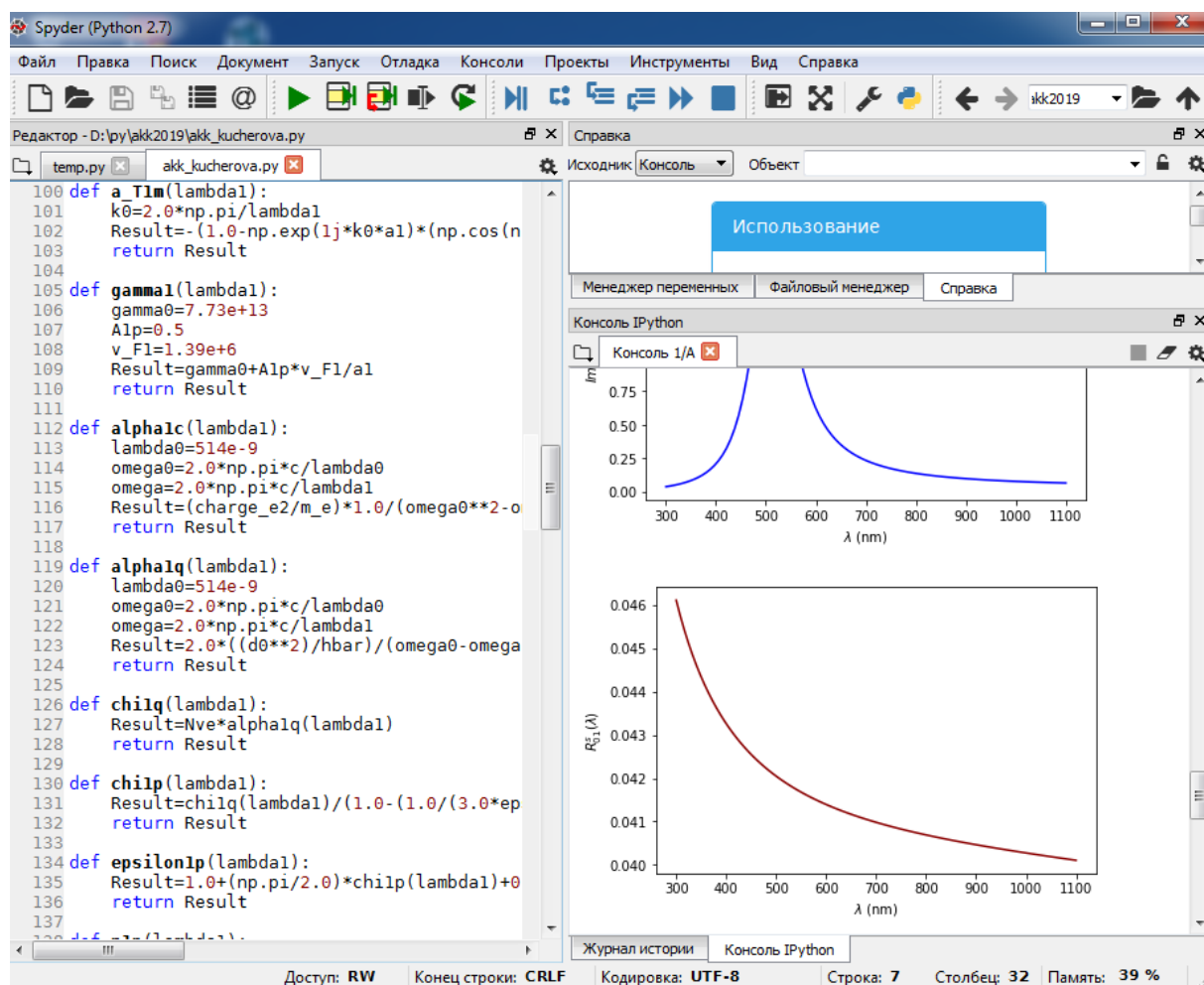


Рис. 3. Третья часть компьютерной программы на языке программирования Python для расчёта оптического отражения и пропускания монослоя наночастиц.

матрице из стекла от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

Предполагается применять разработанную компьютерную программу, написанную на языке программирования Python, для расчёта оптического отражения и пропускания графеновых наноконпозитов.

Приведём результаты численных расчётов оптического отражения и пропускания монослоя сферических наночастиц в случае малого заполнения. Компьютерная программа на языке программирования Python позволяет производить расчёты зависимости энергетических коэффициентов отражения и пропускания от монослоя наночастиц от длины волны внешнего излучения.

На рис. 6 изображена зависимость энергетического коэффициента отражения от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 2\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 1^\circ$ от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

На рис. 7 изображена зависимость энергетического коэффициента пропускания от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 2\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 1^\circ$ от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

На рис. 8 изображена зависимость энергетического коэффициента отражения от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 2\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 10^\circ$ от длины волны внешнего излучения в диапазоне

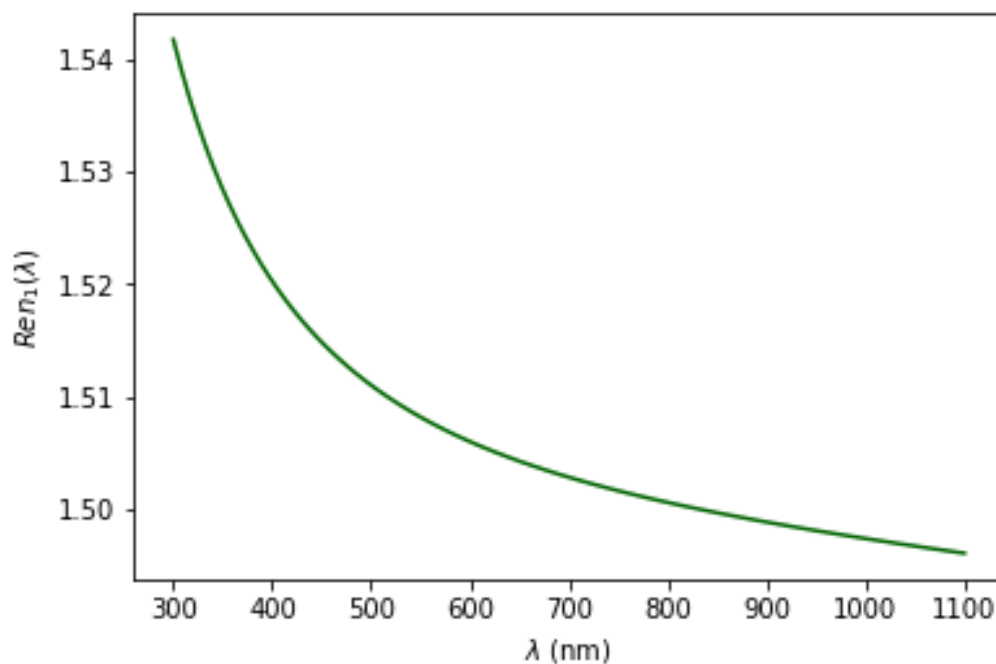


Рис. 4. Действительная часть эффективного показателя преломления монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 2\%$ в матрице из стекла от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

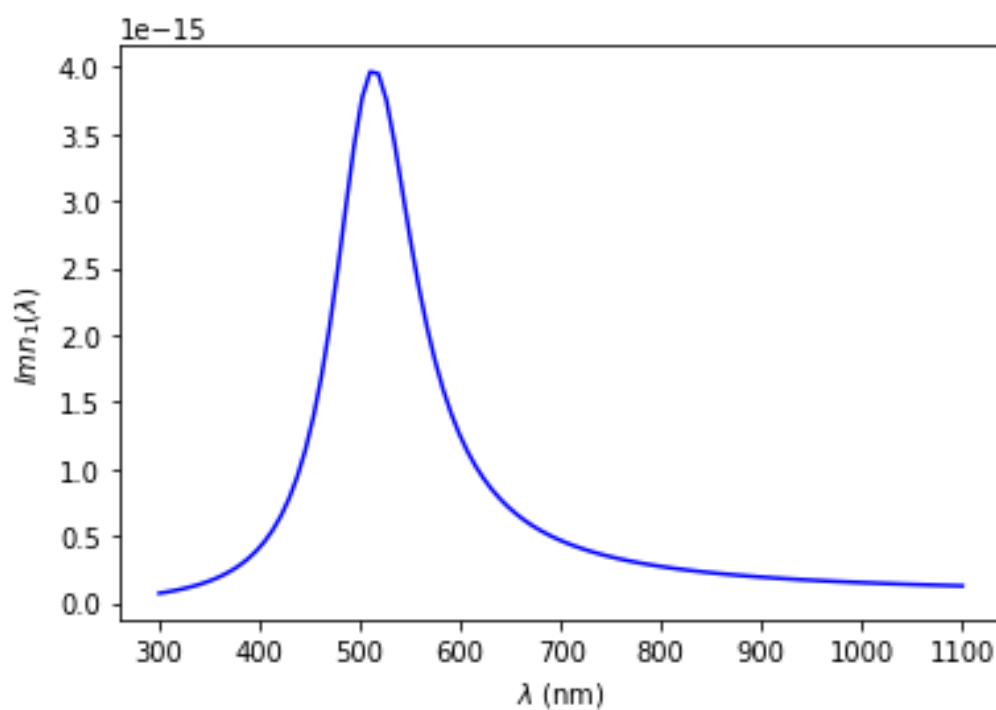


Рис. 5. Мнимая часть эффективного показателя преломления монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 2\%$ в матрице из стекла от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

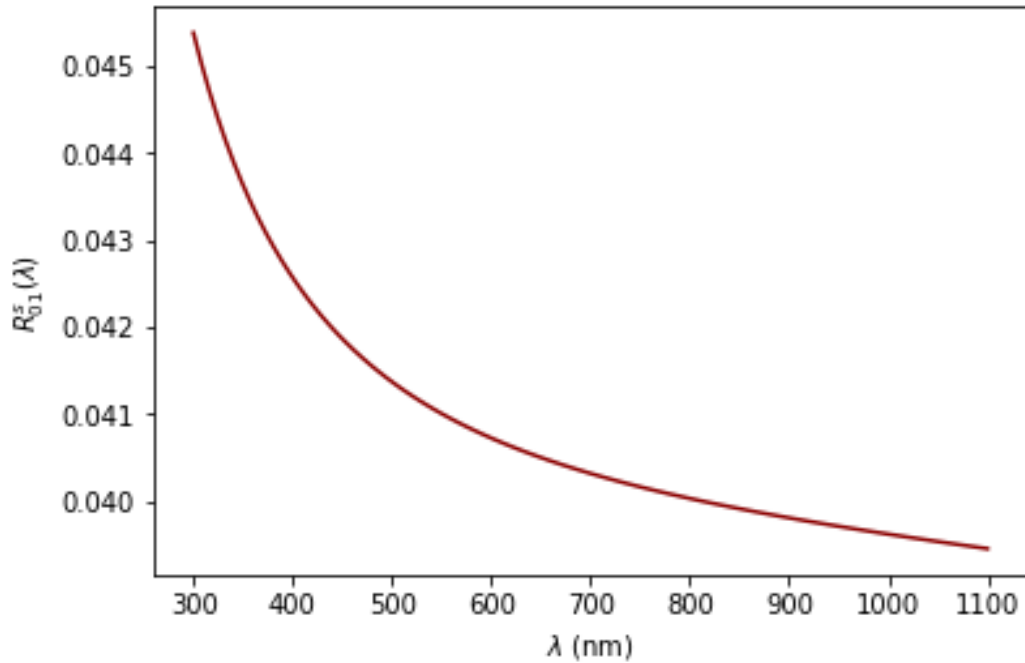


Рис. 6. Энергетический коэффициент отражения от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 2\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 1^\circ$ от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

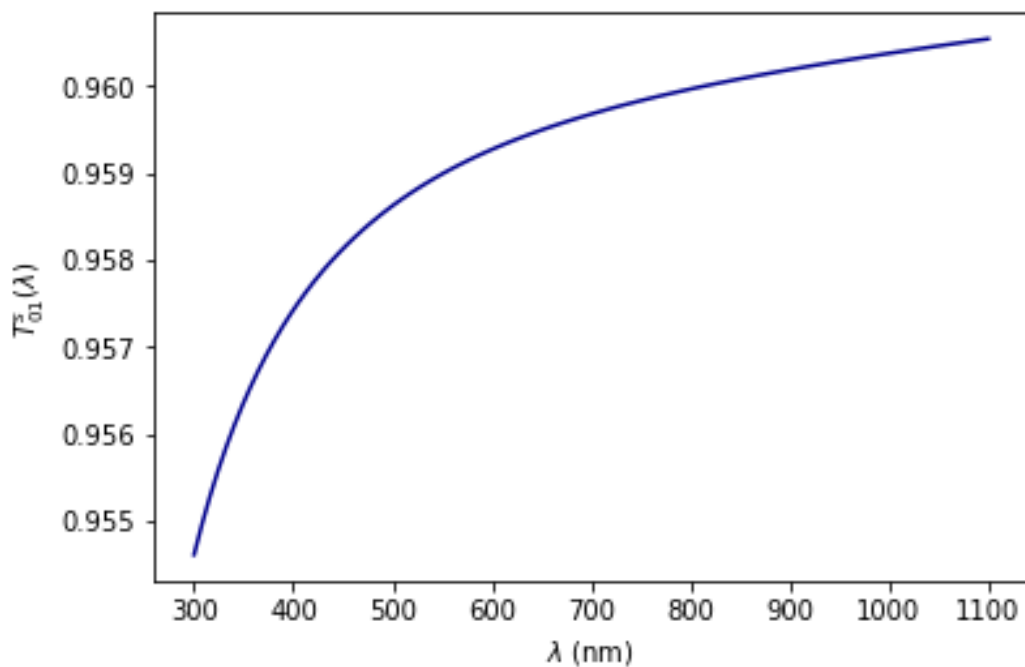


Рис. 7. Энергетический коэффициент пропускания от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 2\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 1^\circ$ от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

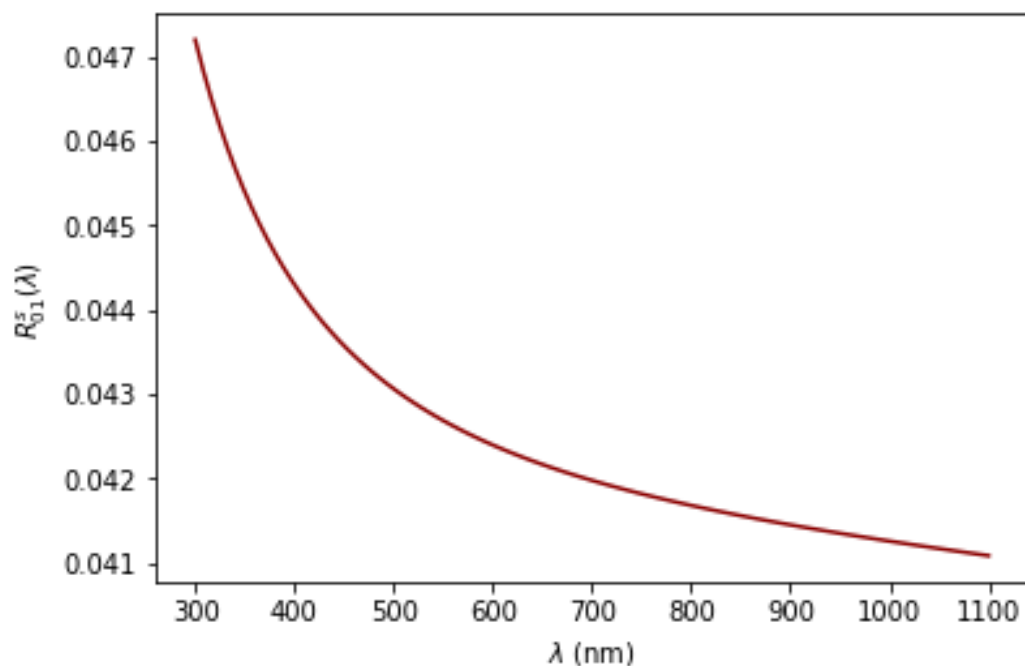


Рис. 8. Энергетический коэффициент отражения от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 2\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 10^\circ$ от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

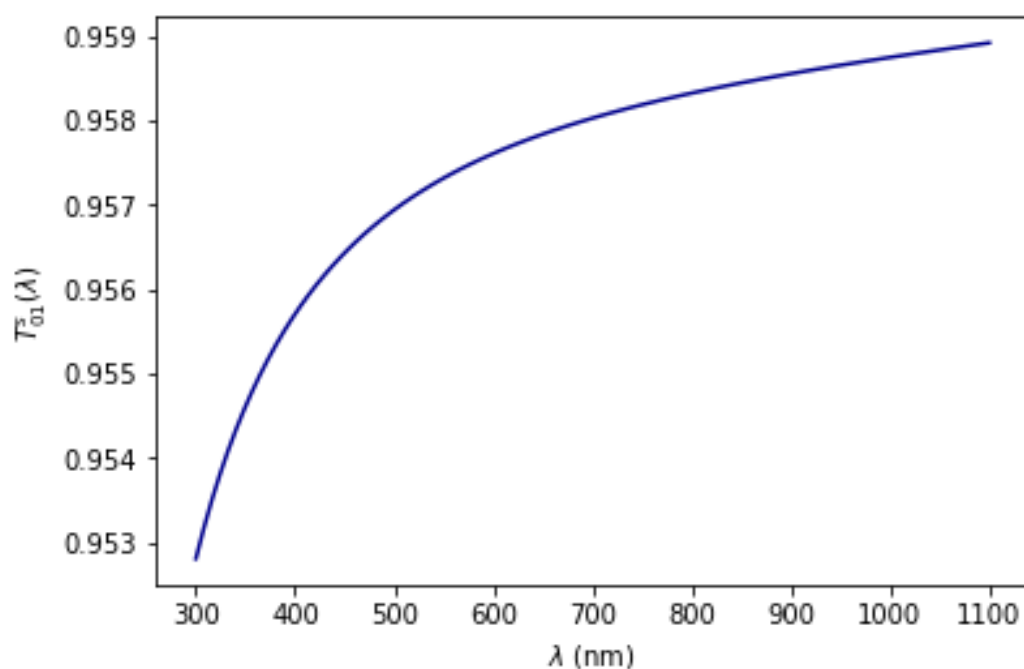


Рис. 9. Энергетический коэффициент пропускания от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 2\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 10^\circ$ от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

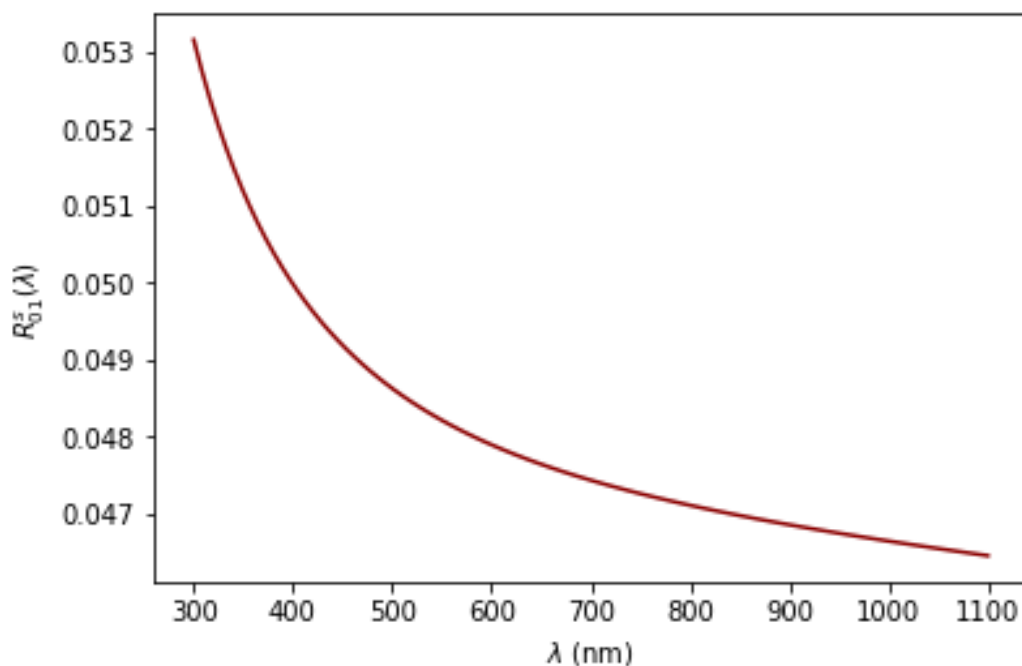


Рис. 10. Энергетический коэффициент отражения от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 2\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 20^\circ$ от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

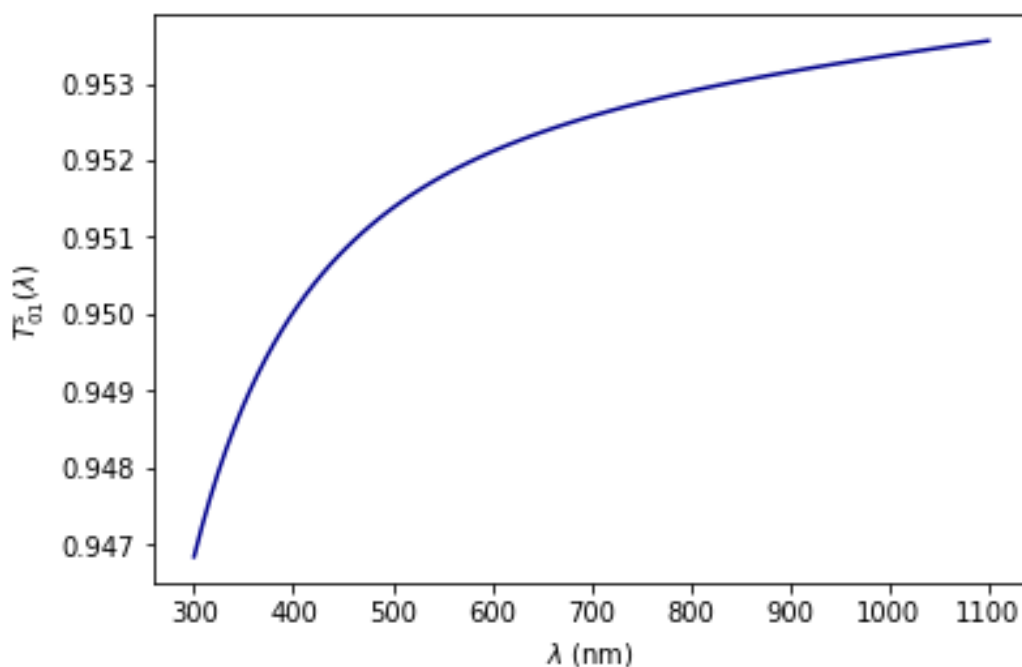


Рис. 11. Энергетический коэффициент пропускания от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 2\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 20^\circ$ от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

длин волн излучения от 300 до 1100 нм. На рис. 9 изображена зависимость энергетического коэффициента пропускания от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 2\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 10^\circ$ от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм. На рис. 10 изображена зависимость энергетического коэффициента отражения от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 2\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 20^\circ$ от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм. На рис. 11 изображена зависимость энергетического коэффициента пропускания от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 2\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 20^\circ$ от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

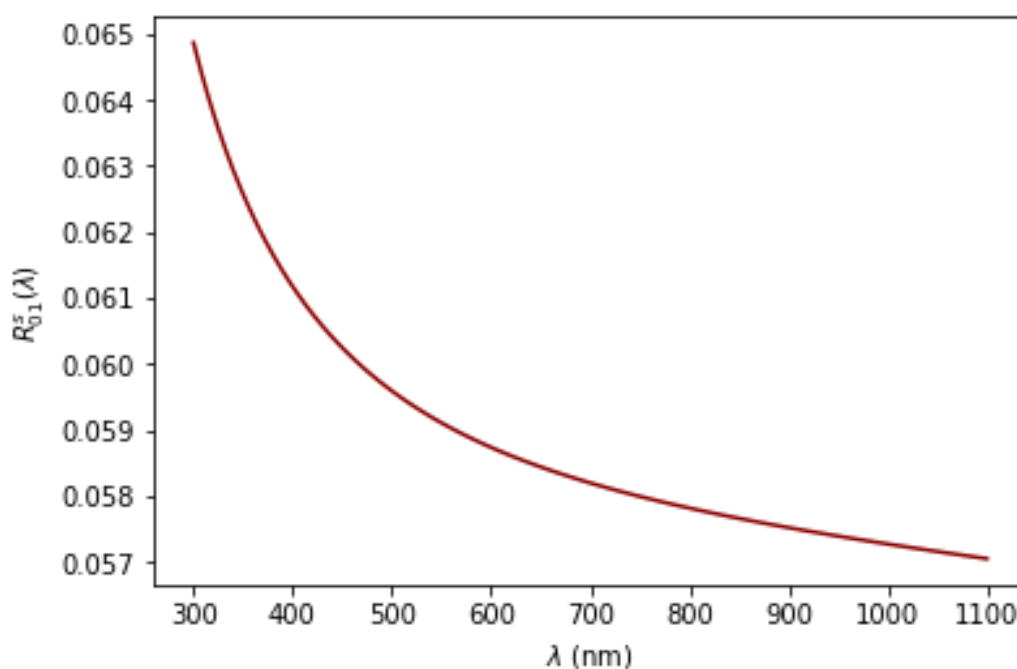


Рис. 12. Энергетический коэффициент отражения от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 2\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 30^\circ$ в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

На рис. 12 изображена зависимость энергетического коэффициента отражения от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 2\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 30^\circ$ в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

На рис. 13 изображена зависимость энергетического коэффициента пропускания от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 2\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 30^\circ$ от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

Опишем результаты численных расчётов эффективного показателя преломления монослоя сферических наночастиц в случае значительного заполнения. Приведём результаты численных расчётов эффективного показателя преломления монослоя сферических наночастиц в случае значительного заполнения наночастицами графенового нанокompозита.

На рис. 14 изображена зависимость действительной части эффективного показателя преломления монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 12\%$ в матрице из стекла от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

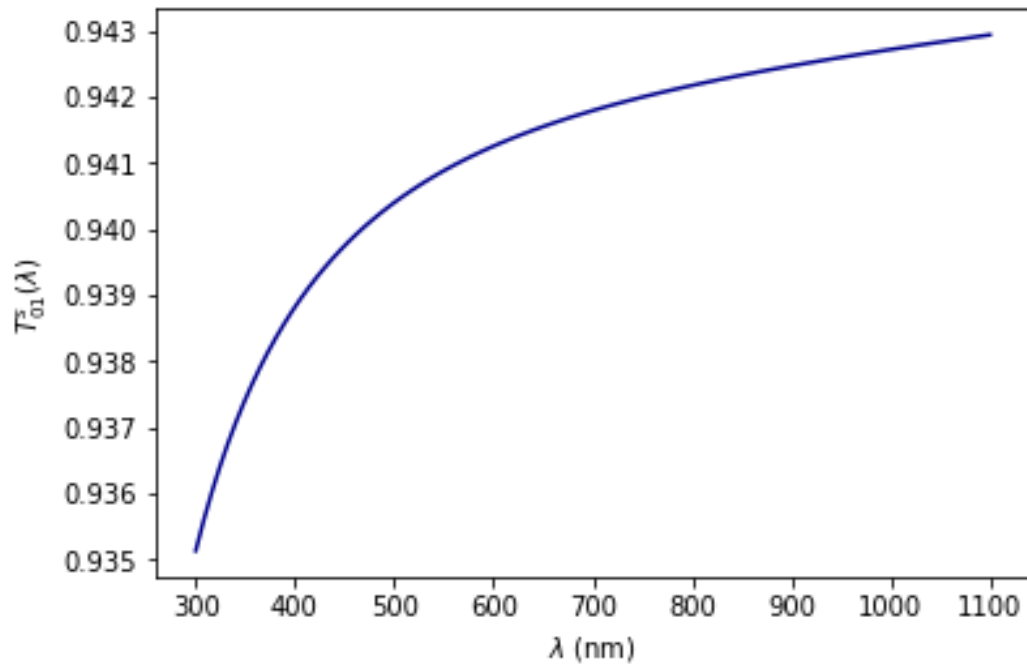


Рис. 13. Энергетический коэффициент пропускания от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 2\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 30^\circ$ от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

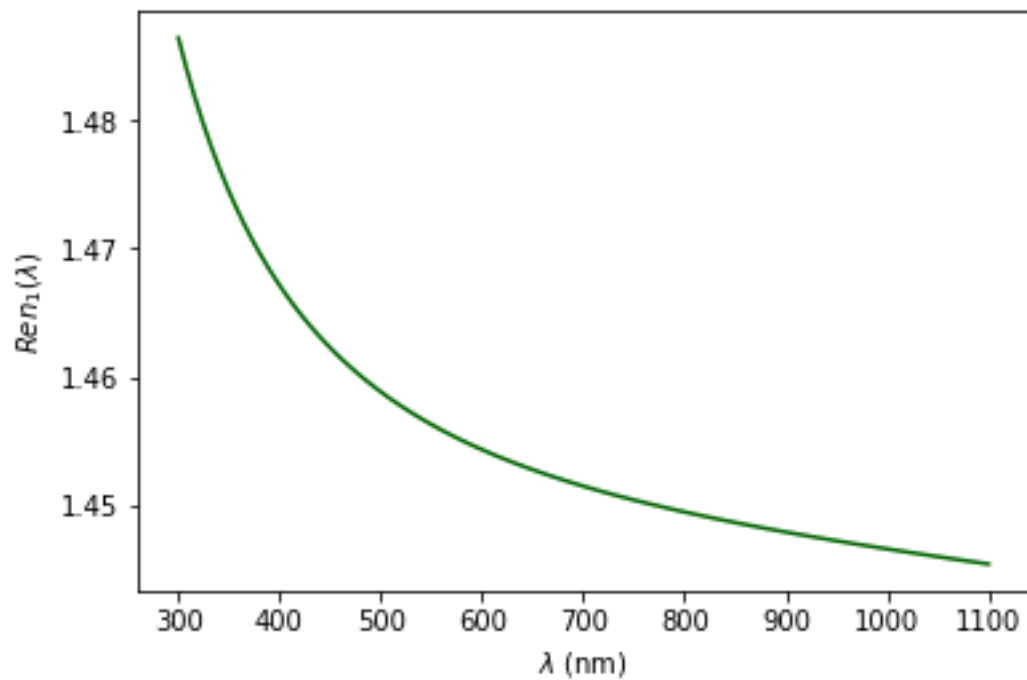


Рис. 14. Действительная часть эффективного показателя преломления монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 12\%$ в матрице из стекла от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

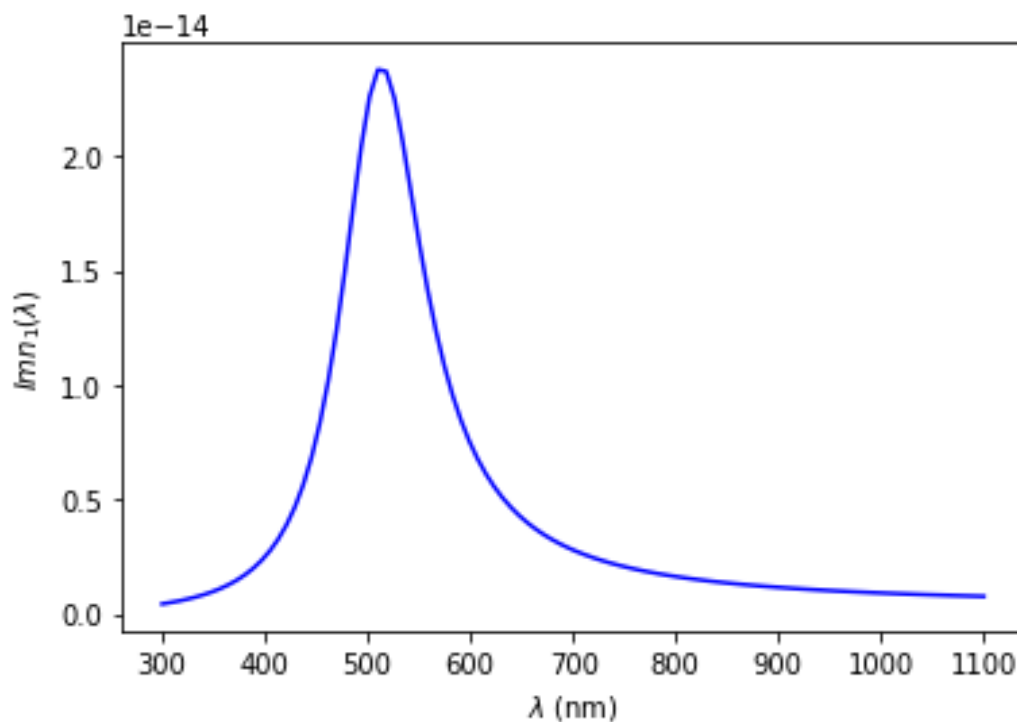


Рис. 15. Мнимая часть эффективного показателя преломления монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 12\%$ в матрице из стекла от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

На рис. 15 изображена зависимость мнимой части эффективного показателя преломления монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 12\%$ в матрице из стекла от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

Приведём результаты численных расчётов оптического отражения и пропускания монослоя сферических наночастиц в случае значительного заполнения. Рассмотрим результаты численных расчётов энергетических коэффициентов оптического пропускания и отражения монослоя сферических наночастиц в случае значительного заполнения металлическими наночастицами графенового нанокompозита. На рис. 16 изображена зависимость энергетического коэффициента отражения от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 12\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 1^\circ$ от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм. Из графика видно, что нанокompозит с монослоем наночастиц обладает очень низким отражением оптического излучения в широком диапазоне оптических длин волн.

На рис. 17 изображена зависимость энергетического коэффициента пропускания от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 12\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 1^\circ$ от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

На рис. 18 изображена зависимость энергетического коэффициента отражения от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 12\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 10^\circ$ от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

На рис. 19 изображена зависимость энергетического коэффициента пропускания от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 12\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 10^\circ$ от длины волны внешнего излучения в диапазоне

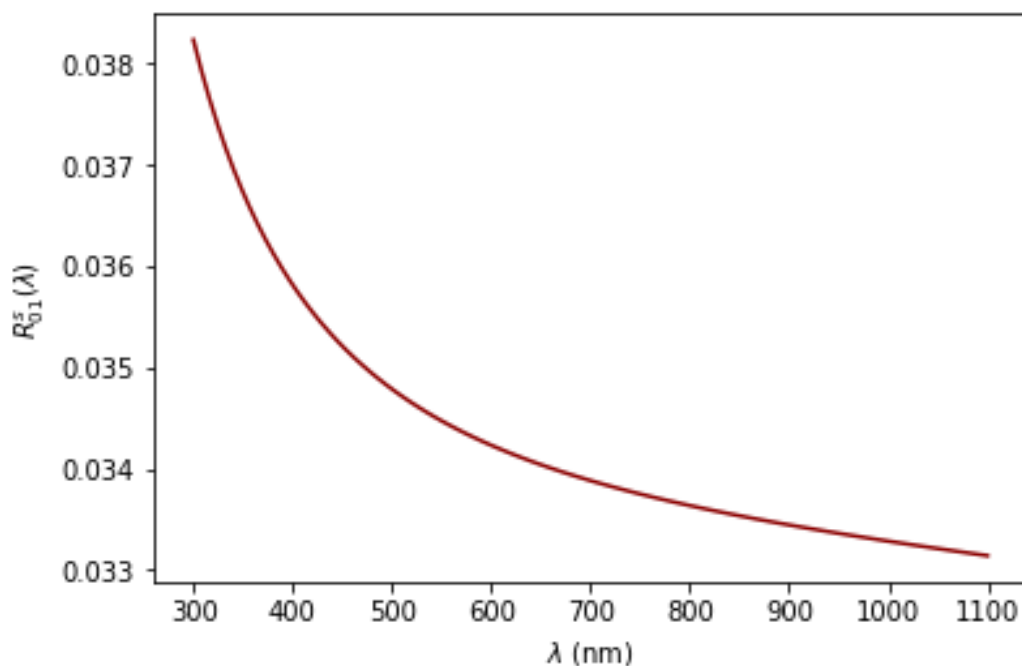


Рис. 16. Энергетический коэффициент отражения от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 12\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 1^\circ$ от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

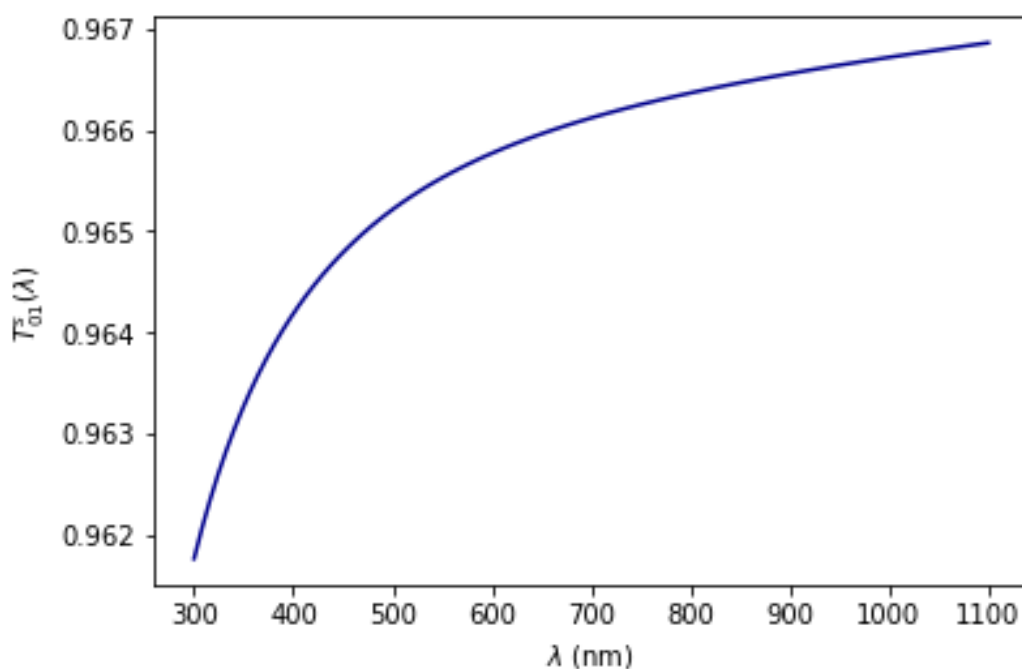


Рис. 17. Энергетический коэффициент пропускания от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 12\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 1^\circ$ от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

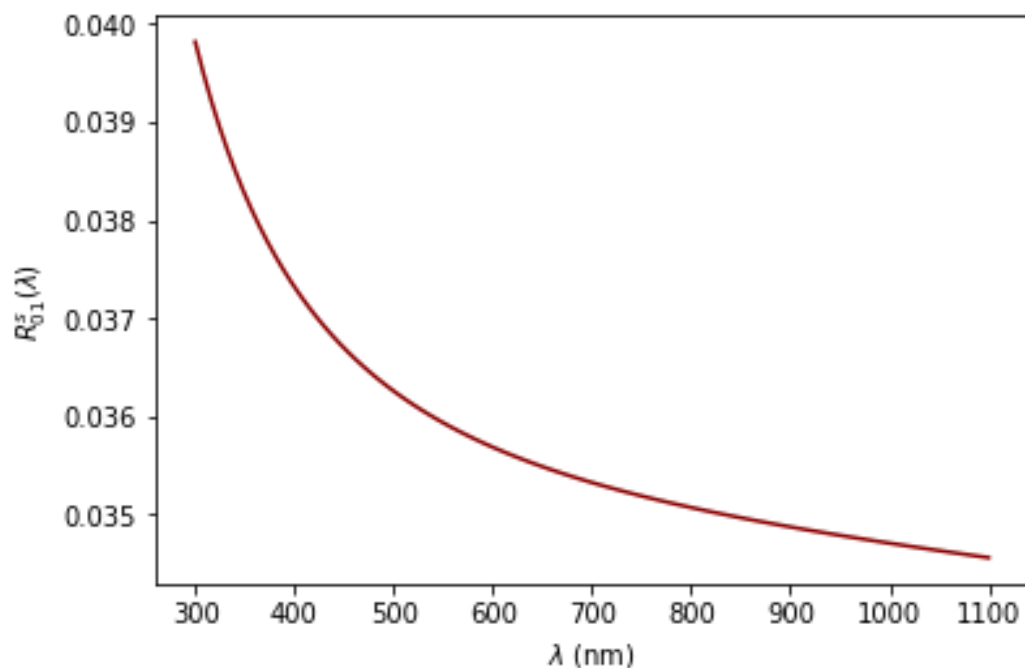


Рис. 18. Энергетический коэффициент отражения от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 12\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 10^\circ$ от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

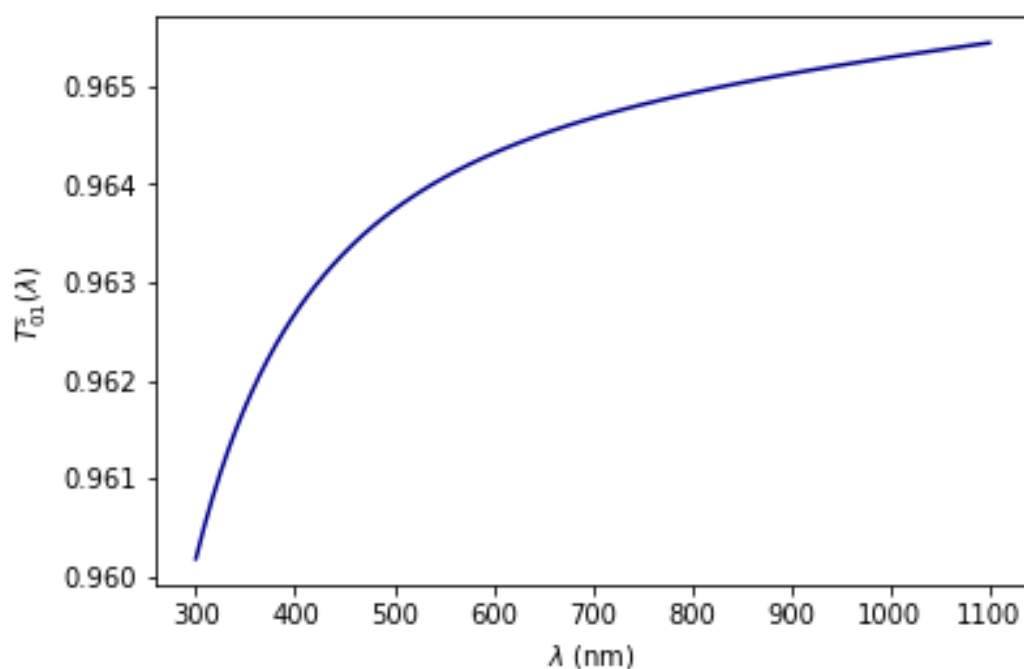


Рис. 19. Энергетический коэффициент пропускания от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 12\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 10^\circ$ от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

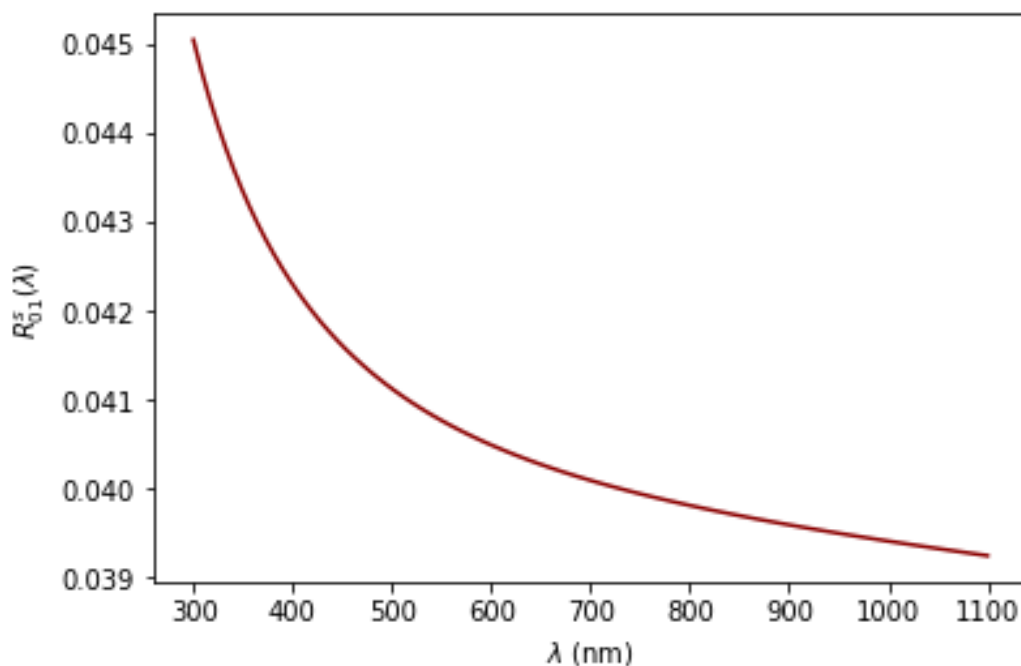


Рис. 20. Энергетический коэффициент отражения от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 12\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 20^\circ$ от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

длин волн излучения от 300 до 1100 нм. На рис. 20 изображена зависимость энергетического коэффициента отражения от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 12\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 20^\circ$ от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

На рис. 21 изображена зависимость энергетического коэффициента пропускания от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 12\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 20^\circ$ от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

На рис. 22 изображена зависимость энергетического коэффициента отражения от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 12\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 30^\circ$ от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм. На рис. 23 изображена зависимость энергетического коэффициента пропускания от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 12\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 30^\circ$ от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

Компьютерная программа, которая написана на языке программирования Python, позволяет вычислять энергетические коэффициенты отражения и пропускания оптического излучения монослоем наночастиц в диэлектрической матрице, а также графеновым нанокомпозитом. В результате проведенных численных расчетов с помощью компьютерной программы на языке программирования Python показано, что монослой в диэлектрической матрице обладает высоким пропусканием и малым отражением оптического излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм. По результатам проведенных численных расчетов показано, что разработанное покрытие из графенового нанокомпозита на основе монослоя наночастиц в матрице из стекла в составе графенового нанокомпозита отличается от штатных интерференционных покрытий. В результате численных расчетов выявлены основные особенности оптических характе-

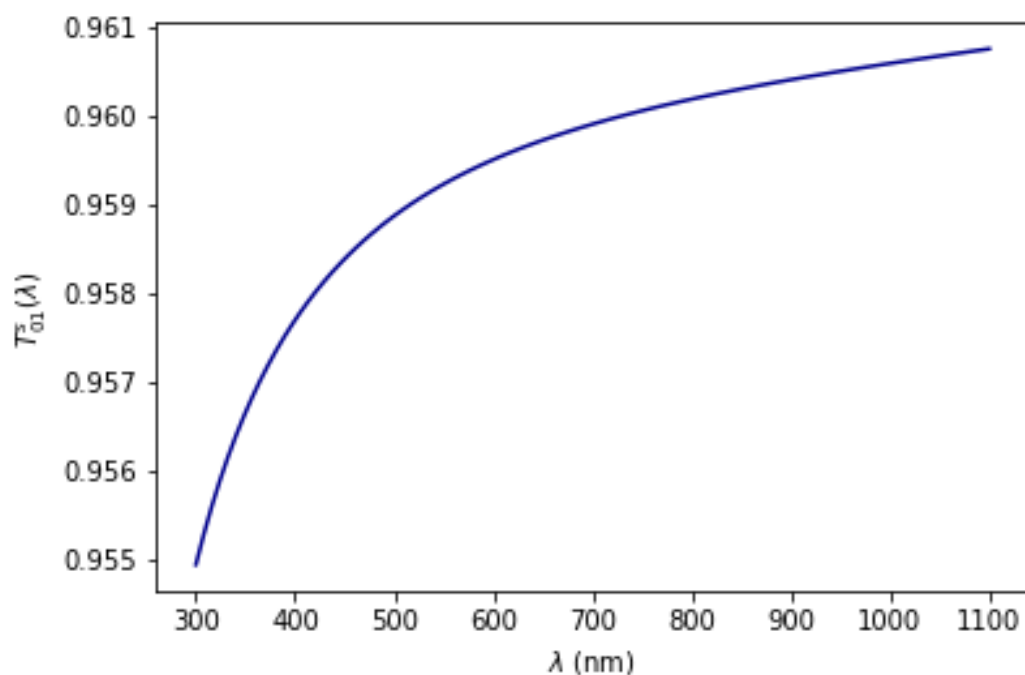


Рис. 21. Энергетический коэффициент пропускания от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 12\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 20^\circ$ от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

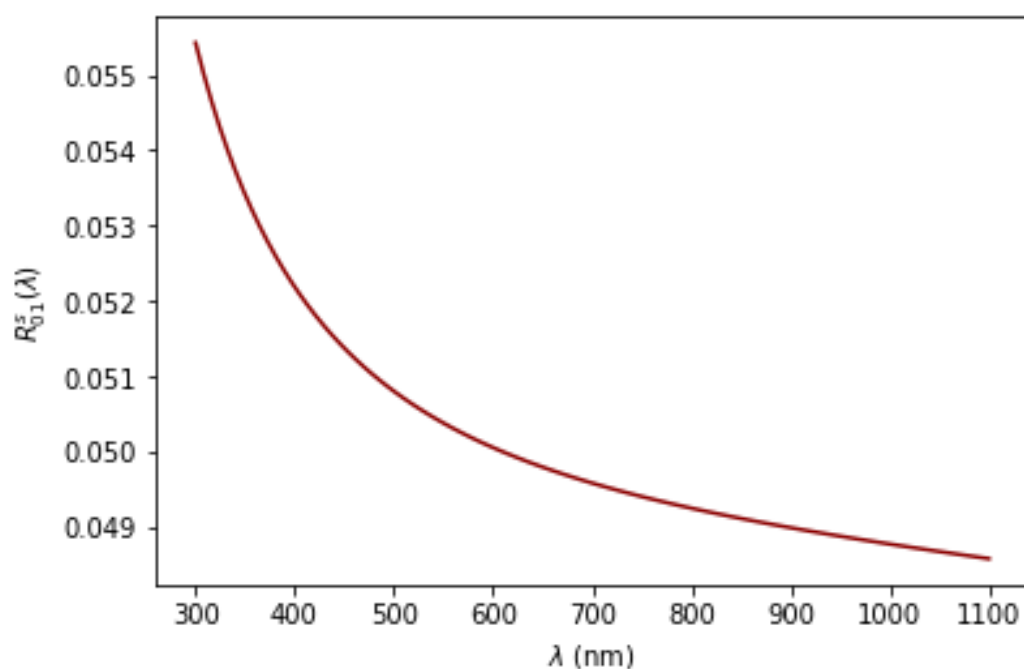


Рис. 22. Энергетический коэффициент отражения от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 12\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 30^\circ$ от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

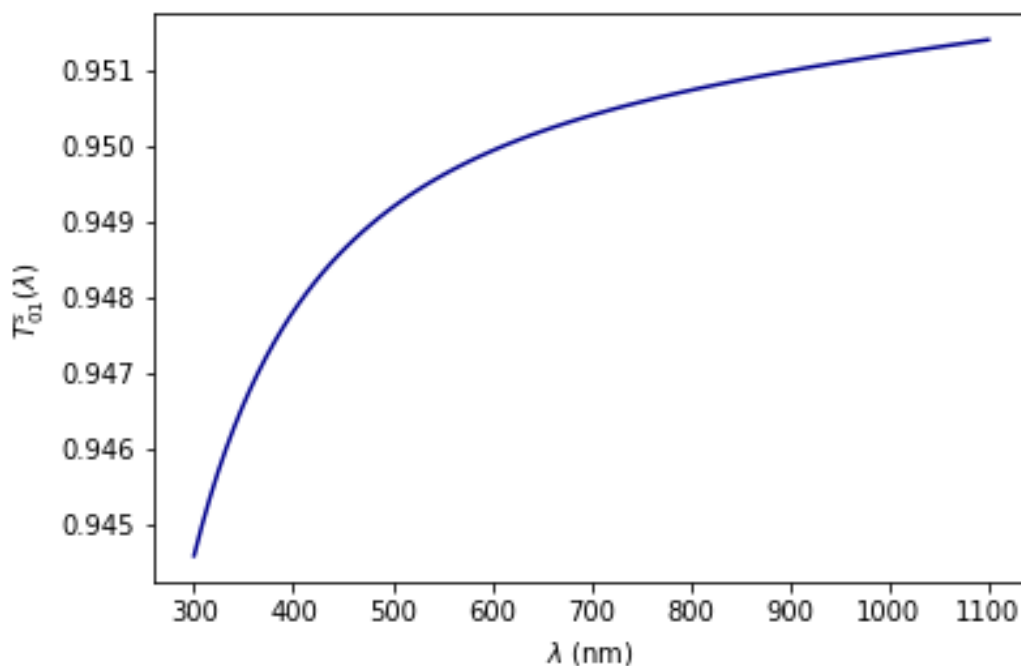


Рис. 23. Энергетический коэффициент пропускания от монослоя наночастиц с радиусом $a_1 = 2.5$ нм и фактором заполнения $f_1 = 12\%$ в матрице из стекла при угле падения $\theta_0 = 30^\circ$ от длины волны внешнего излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

ристик покрытий из графеновых нанокомпозитов, состоящие в значительном отличии по спектрам оптического отражения и пропускания от штатных интерференционных покрытий для солнечных элементов и солнечных панелей.

Заключение

В работе решена задача об отражении и пропускании оптического излучения монослоем сферических наночастиц в диэлектрической матрице. Результаты работы могут быть использованы при проектировании новых оптоэлектронных приборов на основе графеновых нанокомпозитов.

Выводы по работе можно сформулировать следующим образом:

1. проведённый анализ научной литературы доказывает актуальность расчёта оптических свойств графеновых нанокомпозитов,
2. построена теоретическая модель отражения и пропускания оптического излучения монослоем наночастиц в диэлектрической матрице,
3. разработанная компьютерная программа, написанная на языке программирования Python, позволяет вычислять энергетические коэффициенты отражения и пропускания оптического излучения монослоем наночастиц в диэлектрической матрице,
4. в результате численных расчётов показано, что монослой в диэлектрической матрице обладает высоким пропусканием и малым отражением оптического излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм.

Компьютерная программа, которая написана на языке программирования Python, позволяет вычислять энергетические коэффициенты отражения и пропускания оптического излучения монослоем наночастиц в диэлектрической матрице, а также графеновым нанокомпозитом.

В результате проведённых численных расчётов с помощью компьютерной программы на языке программирования Python показано, что монослой в диэлектрической матрице обладает высоким пропусканием и малым отражением оптического излучения в диапазоне длин волн излучения от 300 до 1100 нм. По результатам проведённых численных расчётов показано, что разработанное покрытие на основе графенового нанокompозита отличается от штатных интерференционных покрытий. В результате численных расчётов выявлены основные особенности оптических характеристик покрытий из графеновых нанокompозитов, состоящие в значительном отличии по спектрам оптического отражения и пропускания от штатных интерференционных покрытий.

Гипотеза исследования, состоящая в том, что если выявить особенности оптических характеристик графеновых нанокompозитов с монослоями наночастиц, то можно прогнозировать физические свойства приборов оптоэлектроники на основе графеновых нанокompозитов с монослоями наночастиц, подтверждена полностью.

Численное прогнозирование оптических свойств графеновых нанокompозитов с монослоями наночастиц строилось на основе теоретического и численного решения задачи об отражении и пропускании оптической волны от монослоя металлических наночастиц, расположенных на поверхности полубесконечной среды.

Список использованных источников

1. Geim A. K., Novoselov K. S. The rise of graphene // *Nature Materials*. — 2007. — mar. — Vol. 6, no. 3. — P. 183–191. — URL: <https://doi.org/10.1038/nmat1849>.
2. Katsnelson Mikhail I. Graphene: carbon in two dimensions // *Materials Today*. — 2007. — jan. — Vol. 10, no. 1-2. — P. 20–27. — URL: [https://doi.org/10.1016/s1369-7021\(06\)71788-6](https://doi.org/10.1016/s1369-7021(06)71788-6).
3. Westervelt R. M. Applied physics: Graphene Nanoelectronics // *Science*. — 2008. — apr. — Vol. 320, no. 5874. — P. 324–325. — URL: <https://doi.org/10.1126/science.1156936>.
4. Fabrication of microcellular polymer/graphene nanocomposite foams / Bin Shen [et al.] // *Polymer International*. — 2012. — sep. — Vol. 61, no. 12. — P. 1693–1702. — URL: <https://doi.org/10.1002/pi.4355>.
5. Epitaxial graphene: a new material / Th. Seyller [et al.] // *Physica status solidi (b)*. — 2008. — jul. — Vol. 245, no. 7. — P. 1436–1446. — URL: <https://doi.org/10.1002/pssb.200844143>.
6. Avouris Phaedon, Chen Zhihong, Perebeinos Vasili. Carbon-based electronics // *Nature Nanotechnology*. — 2007. — sep. — Vol. 2, no. 10. — P. 605–615. — URL: <https://doi.org/10.1038/nnano.2007.300>.
7. Uptake of H₂ and CO₂ by Graphene / Anupama Ghosh [et al.] // *The Journal of Physical Chemistry C*. — 2008. — sep. — Vol. 112, no. 40. — P. 15704–15707. — URL: <https://doi.org/10.1021/jp805802w>.
8. ABS nanocomposite films based on functionalized-graphene sheets / Cheol Heo [et al.] // *Journal of Applied Polymer Science*. — 2011. — Vol. 124. — P. 4663–4670. — URL: <https://doi.org/10.1002/app.35404>.
9. Graphene Based Electrochemical Sensors and Biosensors: A Review / Yuyan Shao [et al.] // *Electroanalysis*. — 2010. — mar. — Vol. 22, no. 10. — P. 1027–1036. — URL: <https://doi.org/10.1002/elan.200900571>.

10. Polyoxometalate-Graphene Nanocomposite Modified Electrode for Electrocatalytic Detection of Ascorbic Acid / Weiyang Zhang [et al.] // *Electroanalysis*. — 2013. — nov. — Vol. 26, no. 1. — P. 178–183. — URL: <https://doi.org/10.1002/elan.201300343>.
11. Jin-Phillipp N. Y., Rühle M. Carbon nanotube/metal interface studied by cross-sectional transmission electron microscopy // *Physical Review B*. — 2004. — dec. — Vol. 70, no. 24. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.70.245421>.
12. Length effect of carbon nanotubes on the strengthening mechanisms in metal matrix composites / B. Chen [et al.] // *Acta Materialia*. — 2017. — nov. — Vol. 140. — P. 317–325. — URL: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.08.048>.
13. Strengthening and toughening mechanisms in graphene-Al nanolaminated composite micro-pillars / Siwen Feng [et al.] // *Acta Materialia*. — 2017. — feb. — Vol. 125. — P. 98–108. — URL: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.11.043>.
14. Atomic and electronic structure of simple metal/graphene and complex metal/graphene/metal interfaces / Lyudmyla Adamska [et al.] // *Physical Review B*. — 2012. — may. — Vol. 85, no. 19. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.85.195443>.
15. Olsen Thomas, Thygesen Kristian S. Random phase approximation applied to solids, molecules, and graphene-metal interfaces: From van der Waals to covalent bonding // *Physical Review B*. — 2013. — feb. — Vol. 87, no. 7. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.87.075111>.
16. Effects of shape and flexibility of conductive fillers in nanocomposites on percolating network formation and electrical conductivity / Seulki Kwon [et al.] // *Physical Review E*. — 2016. — mar. — Vol. 93, no. 3. — URL: <https://doi.org/10.1103/physreve.93.032501>.
17. moussa Abdellah Ait, Jassemnejad Bahaeddin. Optimizing thermal conductivity in functionalized macromolecules using Langevin dynamics and the globalized and bounded Nelder-Mead algorithm // *Physical Review E*. — 2014. — may. — Vol. 89, no. 5. — URL: <https://doi.org/10.1103/physreve.89.053313>.
18. Moussa Abdellah Ait, Mullen Kieran. Using normal modes to calculate and optimize thermal conductivity in functionalized macromolecules // *Physical Review E*. — 2011. — may. — Vol. 83, no. 5. — URL: <https://doi.org/10.1103/physreve.83.056708>.
19. Novoselov K. S. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films // *Science*. — 2004. — oct. — Vol. 306, no. 5696. — P. 666–669. — URL: <https://doi.org/10.1126/science.1102896>.
20. Mattausch Alexander, Pankratov Oleg. Density functional study of graphene overlayers on SiC // *physica status solidi (b)*. — 2008. — jul. — Vol. 245, no. 7. — P. 1425–1435. — URL: <https://doi.org/10.1002/pssb.200844031>.
21. Flexible Graphene Films via the Filtration of Water-Soluble Noncovalent Functionalized Graphene Sheets / Yuxi Xu [et al.] // *Journal of the American Chemical Society*. — 2008. — may. — Vol. 130, no. 18. — P. 5856–5857. — URL: <https://doi.org/10.1021/ja800745y>.
22. Processable aqueous dispersions of graphene nanosheets / Dan Li [et al.] // *Nature Nanotechnology*. — 2008. — jan. — Vol. 3, no. 2. — P. 101–105. — URL: <https://doi.org/10.1038/nnano.2007.451>.

23. Eda Goki, Fanchini Giovanni, Chhowalla Manish. Large-area ultrathin films of reduced graphene oxide as a transparent and flexible electronic material // *Nature Nanotechnology*. — 2008. — apr. — Vol. 3, no. 5. — P. 270–274. — URL: <https://doi.org/10.1038/nnano.2008.83>.
24. Berger C. Electronic Confinement and Coherence in Patterned Epitaxial Graphene // *Science*. — 2006. — may. — Vol. 312, no. 5777. — P. 1191–1196. — URL: <https://doi.org/10.1126/science.1125925>.
25. Graphene-based composite materials / Sasha Stankovich [et al.] // *Nature*. — 2006. — jul. — Vol. 442, no. 7100. — P. 282–286. — URL: <https://doi.org/10.1038/nature04969>.
26. A Chemical Route to Graphene for Device Applications / Scott Gilje [et al.] // *Nano Letters*. — 2007. — nov. — Vol. 7, no. 11. — P. 3394–3398. — URL: <https://doi.org/10.1021/nl0717715>.
27. Detection of individual gas molecules adsorbed on graphene / F. Schedin [et al.] // *Nature Materials*. — 2007. — jul. — Vol. 6, no. 9. — P. 652–655. — URL: <https://doi.org/10.1038/nmat1967>.
28. Electromechanical Resonators from Graphene Sheets / J. S. Bunch [et al.] // *Science*. — 2007. — jan. — Vol. 315, no. 5811. — P. 490–493. — URL: <https://doi.org/10.1126/science.1136836>.
29. Functionalized Single Graphene Sheets Derived from Splitting Graphite Oxide / Hannes C. Schniepp [et al.] // *The Journal of Physical Chemistry B*. — 2006. — may. — Vol. 110, no. 17. — P. 8535–8539. — URL: <https://doi.org/10.1021/jp060936f>.
30. Structure and electronic properties of graphite nanoparticles / Odd E. Andersson [et al.] // *Physical Review B*. — 1998. — dec. — Vol. 58, no. 24. — P. 16387–16395. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.58.16387>.
31. Montoya Alejandro, Mondragón Fanor, Truong Thanh N. CO₂ adsorption on carbonaceous surfaces: a combined experimental and theoretical study // *Carbon*. — 2003. — jan. — Vol. 41, no. 1. — P. 29–39. — URL: [https://doi.org/10.1016/s0008-6223\(02\)00249-x](https://doi.org/10.1016/s0008-6223(02)00249-x).
32. Bagchi Soumendu, Ke Changhong, Chew Huck Beng. Oxidation effect on the shear strength of graphene on aluminum and titanium surfaces // *Physical Review B*. — 2018. — nov. — Vol. 98, no. 17. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.98.174106>.
33. Hu Lin, Desai Tapan, Koblinski Pawel. Determination of interfacial thermal resistance at the nanoscale // *Physical Review B*. — 2011. — may. — Vol. 83, no. 19. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.83.195423>.
34. CdS/Graphene Nanocomposite Photocatalysts / Qin Li [et al.] // *Advanced Energy Materials*. — 2015. — apr. — Vol. 5, no. 14. — P. 1500010. — URL: <https://doi.org/10.1002/aenm.201500010>.
35. 2D-Aligned Graphene Sheets in Transparent Polyimide/Graphene Nanocomposite Films Based on Noncovalent Interactions Between Poly(amic acid) and Graphene Carboxylic Acid / Gwang Yeon Kim [et al.] // *Macromolecular Materials and Engineering*. —

2011. — nov. — Vol. 297, no. 4. — P. 303–311. — URL: <https://doi.org/10.1002/mame.201100211>.
36. Jeong Young Gyu, An Ji-Eun. UV-cured epoxy/graphene nanocomposite films: preparation, structure and electric heating performance // *Polymer International*. — 2014. — feb. — Vol. 63, no. 11. — P. 1895–1901. — URL: <https://doi.org/10.1002/pi.4713>.
37. Superior Electrochemical Performance of Sulfur/Graphene Nanocomposite Material for High-Capacity Lithium-Sulfur Batteries / Bei Wang [et al.] // *Chemistry - An Asian Journal*. — 2012. — mar. — Vol. 7, no. 7. — P. 1637–1643. — URL: <https://doi.org/10.1002/asia.201200004>.
38. The preparation and properties of polystyrene/functionalized graphene nanocomposite foams using supercritical carbon dioxide / Chaoqun Li [et al.] // *Polymer International*. — 2012. — nov. — Vol. 62. — P. 1077–1084. — URL: <https://doi.org/10.1002/pi.4394>.
39. Charoeythornkhajhornchai Pollawat, Samthong Chavakorn, Somwangthanaroj Anongnat. Effect of graphene treated with cyclohexyl diamine by diazonium reaction on cure kinetics, mechanical, thermal, and physical properties of natural rubber/graphene nanocomposite foam // *Polymer Composites*. — 2018. — dec. — Vol. 40, no. S2. — P. E1766–E1776. — URL: <https://doi.org/10.1002/pc.25160>.
40. Intrinsic flame-retardant urea formaldehyde/graphene nanocomposite foam: Structure and reinforcing mechanism / Buyong Wu [et al.] // *Polymer Composites*. — 2018. — sep. — Vol. 40, no. S1. — P. E811–E820. — URL: <https://doi.org/10.1002/pc.25028>.
41. Kumar Sandeep, Hembram K. P. S. S., Waghmare Umesh V. Intrinsic buckling strength of graphene: First-principles density functional theory calculations // *Physical Review B*. — 2010. — sep. — Vol. 82, no. 11. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.82.115411>.
42. Vacancy filling effect of graphene on photoluminescence behavior of ZnO/graphene nanocomposite / Eunsil Lee [et al.] // *Physica status solidi (RRL) - Rapid Research Letters*. — 2014. — aug. — Vol. 8, no. 10. — P. 836–840. — URL: <https://doi.org/10.1002/pssr.201409225>.
43. Marashdeh Wajeeh F., Longun Jimmy, Iroh Jude O. Relaxation behavior and activation energy of relaxation for polyimide and polyimide-graphene nanocomposite // *Journal of Applied Polymer Science*. — 2016. — apr. — Vol. 133, no. 28. — URL: <https://doi.org/10.1002/app.43684>.
44. Hierarchically aligned fibrous hydrogel films through microfluidic self-assembly of graphene and polysaccharides / Akhil Patel [et al.] // *Biotechnology and Bioengineering*. — 2018. — aug. — Vol. 115, no. 10. — P. 2654–2667. — URL: <https://doi.org/10.1002/bit.26801>.
45. Graphene-Polypyrrole Nanocomposite: An Ideal Electroactive Material for High Performance Supercapacitors / Alagiri Mani [et al.] // *Graphene Materials*. — John Wiley & Sons, Inc., 2015. — apr. — P. 225–244. — URL: <https://doi.org/10.1002/9781119131816.ch7>.

46. Flexible Solid-State Supercapacitors with Enhanced Performance from Hierarchically Graphene Nanocomposite Electrodes and Ionic Liquid Incorporated Gel Polymer Electrolyte / Lanxiang Feng [et al.] // *Advanced Functional Materials*. — 2017. — nov. — Vol. 28, no. 4. — P. 1704463. — URL: <https://doi.org/10.1002/adfm.201704463>.
47. Carbon Nanodots as Feedstock for a Uniform Hematite-Graphene Nanocomposite / Volker Strauss [et al.] // *Small*. — 2018. — nov. — Vol. 14, no. 51. — P. 1803656. — URL: <https://doi.org/10.1002/smll.201803656>.
48. Dhibar Saptarshi, Das Chapal Kumar. Silver nanoparticles decorated polypyrrole/graphene nanocomposite: A potential candidate for next-generation supercapacitor electrode material // *Journal of Applied Polymer Science*. — 2017. — jan. — Vol. 134, no. 16. — URL: <https://doi.org/10.1002/app.44724>.
49. Removal of Organic Dyes in Environmental Water onto Magnetic-Sulfonic Graphene Nanocomposite / Sui Wang [et al.] // *CLEAN - Soil, Air, Water*. — 2013. — Vol. 41, no. 10. — P. 992–1001. — URL: <https://doi.org/10.1002/clen.201200460>.
50. Vertically oriented polyaniline-graphene nanocomposite based on functionalized graphene for supercapacitor electrode / Qiang Zhao [et al.] // *Journal of Applied Polymer Science*. — 2017. — jan. — Vol. 134, no. 19. — URL: <https://doi.org/10.1002/app.44808>.
51. Graphene-Based Nanocomposites for Energy Storage / Liwen Ji [et al.] // *Advanced Energy Materials*. — 2016. — jun. — Vol. 6, no. 16. — P. 1502159. — URL: <https://doi.org/10.1002/aenm.201502159>.
52. Born Max, Wolf Emil. *Principles of Optics*. — Oxford : Pergamon Press, 1969. — 720 p.
53. Gadomskii O. N., Shalin A. S. Effect of optical blooming of a nanocrystal monolayer and the interface between two media // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. — 2007. — oct. — Vol. 105, no. 4. — P. 761–773. — URL: <http://dx.doi.org/10.1134/S106377610710010X>.

Сведения об авторах:

Константин Константинович Алтуни — 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  0000-0002-0725-9416

Web of Science ResearcherID  I-5739-2014

SCOPUS ID  57201126207

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

E-mail: melneko@mail.ru

ORCID iD  0000-0002-9759-839X

Web of Science ResearcherID  ABD-4970-2020

Investigation of the optical properties of graphene nanosystems using the Python numerical computations

K. K. Altunin , Yu. A. Kucherova 

Ulyanovsk State Pedagogical University, 432071, Ulyanovsk, Russia

Submitted April 8, 2021

Resubmitted April 12, 2021

Published June 12, 2021

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

Keywords: nanoelectronics, graphene, graphene nanoelectronics, nanocomposite, graphene nanocomposite, graphene nanoitem, nanoparticle, monolayer of particles, optical radiation, optical transmission, optical reflection, optical coating, lattice sum method

PACS: 42.25.Bs

References

1. ABS nanocomposite films based on functionalized-graphene sheets / Cheol Heo [et al.] // Journal of Applied Polymer Science. — 2011. — Vol. 124. — P. 4663–4670. — URL: <https://doi.org/10.1002/app.35404>.
2. Epitaxial graphene: a new material / Th. Seyller [et al.] // Physica status solidi (b). — 2008. — jul. — Vol. 245, no. 7. — P. 1436–1446. — URL: <https://doi.org/10.1002/pssb.200844143>.
3. Avouris Phaedon, Chen Zhihong, Perebeinos Vasili. Carbon-based electronics // Nature Nanotechnology. — 2007. — sep. — Vol. 2, no. 10. — P. 605–615. — URL: <https://doi.org/10.1038/nnano.2007.300>.
4. Uptake of H₂ and CO₂ by Graphene / Anupama Ghosh [et al.] // The Journal of Physical Chemistry C. — 2008. — sep. — Vol. 112, no. 40. — P. 15704–15707. — URL: <https://doi.org/10.1021/jp805802w>.
5. Geim A. K., Novoselov K. S. The rise of graphene // Nature Materials. — 2007. — mar. — Vol. 6, no. 3. — P. 183–191. — URL: <https://doi.org/10.1038/nmat1849>.

6. Novoselov K. S. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films // *Science*. — 2004. — oct. — Vol. 306, no. 5696. — P. 666–669. — URL: <https://doi.org/10.1126/science.1102896>.
7. Mattausch Alexander, Pankratov Oleg. Density functional study of graphene overlayers on SiC // *physica status solidi (b)*. — 2008. — jul. — Vol. 245, no. 7. — P. 1425–1435. — URL: <https://doi.org/10.1002/pssb.200844031>.
8. Flexible Graphene Films via the Filtration of Water-Soluble Noncovalent Functionalized Graphene Sheets / Yuxi Xu [et al.] // *Journal of the American Chemical Society*. — 2008. — may. — Vol. 130, no. 18. — P. 5856–5857. — URL: <https://doi.org/10.1021/ja800745y>.
9. Processable aqueous dispersions of graphene nanosheets / Dan Li [et al.] // *Nature Nanotechnology*. — 2008. — jan. — Vol. 3, no. 2. — P. 101–105. — URL: <https://doi.org/10.1038/nnano.2007.451>.
10. Eda Goki, Fanchini Giovanni, Chhowalla Manish. Large-area ultrathin films of reduced graphene oxide as a transparent and flexible electronic material // *Nature Nanotechnology*. — 2008. — apr. — Vol. 3, no. 5. — P. 270–274. — URL: <https://doi.org/10.1038/nnano.2008.83>.
11. Katsnelson Mikhail I. Graphene: carbon in two dimensions // *Materials Today*. — 2007. — jan. — Vol. 10, no. 1-2. — P. 20–27. — URL: [https://doi.org/10.1016/s1369-7021\(06\)71788-6](https://doi.org/10.1016/s1369-7021(06)71788-6).
12. Functionalized Single Graphene Sheets Derived from Splitting Graphite Oxide / Hannes C. Schniepp [et al.] // *The Journal of Physical Chemistry B*. — 2006. — may. — Vol. 110, no. 17. — P. 8535–8539. — URL: <https://doi.org/10.1021/jp060936f>.
13. Structure and electronic properties of graphite nanoparticles / Odd E. Andersson [et al.] // *Physical Review B*. — 1998. — dec. — Vol. 58, no. 24. — P. 16387–16395. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.58.16387>.
14. Montoya Alejandro, Mondragón Fanor, Truong Thanh N. CO₂ adsorption on carbonaceous surfaces: a combined experimental and theoretical study // *Carbon*. — 2003. — jan. — Vol. 41, no. 1. — P. 29–39. — URL: [https://doi.org/10.1016/s0008-6223\(02\)00249-x](https://doi.org/10.1016/s0008-6223(02)00249-x).
15. Berger C. Electronic Confinement and Coherence in Patterned Epitaxial Graphene // *Science*. — 2006. — may. — Vol. 312, no. 5777. — P. 1191–1196. — URL: <https://doi.org/10.1126/science.1125925>.
16. Graphene-based composite materials / Sasha Stankovich [et al.] // *Nature*. — 2006. — jul. — Vol. 442, no. 7100. — P. 282–286. — URL: <https://doi.org/10.1038/nature04969>.
17. A Chemical Route to Graphene for Device Applications / Scott Gilje [et al.] // *Nano Letters*. — 2007. — nov. — Vol. 7, no. 11. — P. 3394–3398. — URL: <https://doi.org/10.1021/nl0717715>.
18. Detection of individual gas molecules adsorbed on graphene / F. Schedin [et al.] // *Nature Materials*. — 2007. — jul. — Vol. 6, no. 9. — P. 652–655. — URL: <https://doi.org/10.1038/nmat1967>.

19. Electromechanical Resonators from Graphene Sheets / J. S. Bunch [et al.] // *Science*. — 2007. — jan. — Vol. 315, no. 5811. — P. 490–493. — URL: <https://doi.org/10.1126/science.1136836>.
20. Graphene-Polypyrrole Nanocomposite: An Ideal Electroactive Material for High Performance Supercapacitors / Alagiri Mani [et al.] // *Graphene Materials*. — John Wiley & Sons, Inc., 2015. — apr. — P. 225–244. — URL: <https://doi.org/10.1002/9781119131816.ch7>.
21. Hierarchically aligned fibrous hydrogel films through microfluidic self-assembly of graphene and polysaccharides / Akhil Patel [et al.] // *Biotechnology and Bioengineering*. — 2018. — aug. — Vol. 115, no. 10. — P. 2654–2667. — URL: <https://doi.org/10.1002/bit.26801>.
22. CdS/Graphene Nanocomposite Photocatalysts / Qin Li [et al.] // *Advanced Energy Materials*. — 2015. — apr. — Vol. 5, no. 14. — P. 1500010. — URL: <https://doi.org/10.1002/aenm.201500010>.
23. Fabrication of microcellular polymer/graphene nanocomposite foams / Bin Shen [et al.] // *Polymer International*. — 2012. — sep. — Vol. 61, no. 12. — P. 1693–1702. — URL: <https://doi.org/10.1002/pi.4355>.
24. Jeong Young Gyu, An Ji-Eun. UV-cured epoxy/graphene nanocomposite films: preparation, structure and electric heating performance // *Polymer International*. — 2014. — feb. — Vol. 63, no. 11. — P. 1895–1901. — URL: <https://doi.org/10.1002/pi.4713>.
25. Superior Electrochemical Performance of Sulfur/Graphene Nanocomposite Material for High-Capacity Lithium-Sulfur Batteries / Bei Wang [et al.] // *Chemistry - An Asian Journal*. — 2012. — mar. — Vol. 7, no. 7. — P. 1637–1643. — URL: <https://doi.org/10.1002/asia.201200004>.
26. Polyoxometalate-Graphene Nanocomposite Modified Electrode for Electrocatalytic Detection of Ascorbic Acid / Weiying Zhang [et al.] // *Electroanalysis*. — 2013. — nov. — Vol. 26, no. 1. — P. 178–183. — URL: <https://doi.org/10.1002/elan.201300343>.
27. Graphene Based Electrochemical Sensors and Biosensors: A Review / Yuyan Shao [et al.] // *Electroanalysis*. — 2010. — mar. — Vol. 22, no. 10. — P. 1027–1036. — URL: <https://doi.org/10.1002/elan.200900571>.
28. Removal of Organic Dyes in Environmental Water onto Magnetic-Sulfonic Graphene Nanocomposite / Sui Wang [et al.] // *CLEAN - Soil, Air, Water*. — 2013. — Vol. 41, no. 10. — P. 992–1001. — URL: <https://doi.org/10.1002/clen.201200460>.
29. The preparation and properties of polystyrene/functionalized graphene nanocomposite foams using supercritical carbon dioxide / Chaoqun Li [et al.] // *Polymer International*. — 2012. — nov. — Vol. 62. — P. 1077–1084. — URL: <https://doi.org/10.1002/pi.4394>.
30. Flexible Solid-State Supercapacitors with Enhanced Performance from Hierarchically Graphene Nanocomposite Electrodes and Ionic Liquid Incorporated Gel Polymer Electrolyte / Lanxiang Feng [et al.] // *Advanced Functional Materials*. — 2017. — nov. — Vol. 28, no. 4. — P. 1704463. — URL: <https://doi.org/10.1002/adfm.201704463>.

31. 2D-Aligned Graphene Sheets in Transparent Polyimide/Graphene Nanocomposite Films Based on Noncovalent Interactions Between Poly(amic acid) and Graphene Carboxylic Acid / Gwang Yeon Kim [et al.] // *Macromolecular Materials and Engineering*. — 2011. — nov. — Vol. 297, no. 4. — P. 303–311. — URL: <https://doi.org/10.1002/mame.201100211>.
32. Carbon Nanodots as Feedstock for a Uniform Hematite-Graphene Nanocomposite / Volker Strauss [et al.] // *Small*. — 2018. — nov. — Vol. 14, no. 51. — P. 1803656. — URL: <https://doi.org/10.1002/smll.201803656>.
33. Vertically oriented polyaniline-graphene nanocomposite based on functionalized graphene for supercapacitor electrode / Qiang Zhao [et al.] // *Journal of Applied Polymer Science*. — 2017. — jan. — Vol. 134, no. 19. — URL: <https://doi.org/10.1002/app.44808>.
34. Intrinsic flame-retardant urea formaldehyde/graphene nanocomposite foam: Structure and reinforcing mechanism / Buyong Wu [et al.] // *Polymer Composites*. — 2018. — sep. — Vol. 40, no. S1. — P. E811–E820. — URL: <https://doi.org/10.1002/pc.25028>.
35. Vacancy filling effect of graphene on photoluminescence behavior of ZnO/graphene nanocomposite / Eunsil Lee [et al.] // *Physica status solidi (RRL) - Rapid Research Letters*. — 2014. — aug. — Vol. 8, no. 10. — P. 836–840. — URL: <https://doi.org/10.1002/pssr.201409225>.
36. Charoeythornkhajhornchai Pollawat, Samthong Chavakorn, Somwangthanaroj Anongnat. Effect of graphene treated with cyclohexyl diamine by diazonium reaction on cure kinetics, mechanical, thermal, and physical properties of natural rubber/graphene nanocomposite foam // *Polymer Composites*. — 2018. — dec. — Vol. 40, no. S2. — P. E1766–E1776. — URL: <https://doi.org/10.1002/pc.25160>.
37. Marashdeh Wajeeh F., Longun Jimmy, Iroh Jude O. Relaxation behavior and activation energy of relaxation for polyimide and polyimide-graphene nanocomposite // *Journal of Applied Polymer Science*. — 2016. — apr. — Vol. 133, no. 28. — URL: <https://doi.org/10.1002/app.43684>.
38. Dhibar Saptarshi, Das Chapal Kumar. Silver nanoparticles decorated polypyrrole/graphene nanocomposite: A potential candidate for next-generation supercapacitor electrode material // *Journal of Applied Polymer Science*. — 2017. — jan. — Vol. 134, no. 16. — URL: <https://doi.org/10.1002/app.44724>.
39. Graphene-Based Nanocomposites for Energy Storage / Liwen Ji [et al.] // *Advanced Energy Materials*. — 2016. — jun. — Vol. 6, no. 16. — P. 1502159. — URL: <https://doi.org/10.1002/aenm.201502159>.
40. Bagchi Soumendu, Ke Changhong, Chew Huck Beng. Oxidation effect on the shear strength of graphene on aluminum and titanium surfaces // *Physical Review B*. — 2018. — nov. — Vol. 98, no. 17. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.98.174106>.
41. Westervelt R. M. Applied physics: Graphene Nanoelectronics // *Science*. — 2008. — apr. — Vol. 320, no. 5874. — P. 324–325. — URL: <https://doi.org/10.1126/science.1156936>.

42. Jin-Phillipp N. Y., Rühle M. Carbon nanotube/metal interface studied by cross-sectional transmission electron microscopy // *Physical Review B*. — 2004. — dec. — Vol. 70, no. 24. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.70.245421>.
43. Length effect of carbon nanotubes on the strengthening mechanisms in metal matrix composites / B. Chen [et al.] // *Acta Materialia*. — 2017. — nov. — Vol. 140. — P. 317–325. — URL: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.08.048>.
44. Strengthening and toughening mechanisms in graphene-Al nanolaminated composite micro-pillars / Siwen Feng [et al.] // *Acta Materialia*. — 2017. — feb. — Vol. 125. — P. 98–108. — URL: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.11.043>.
45. Atomic and electronic structure of simple metal/graphene and complex metal/-graphene/metal interfaces / Lyudmyla Adamska [et al.] // *Physical Review B*. — 2012. — may. — Vol. 85, no. 19. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.85.195443>.
46. Olsen Thomas, Thygesen Kristian S. Random phase approximation applied to solids, molecules, and graphene-metal interfaces: From van der Waals to covalent bonding // *Physical Review B*. — 2013. — feb. — Vol. 87, no. 7. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.87.075111>.
47. Effects of shape and flexibility of conductive fillers in nanocomposites on percolating network formation and electrical conductivity / Seulki Kwon [et al.] // *Physical Review E*. — 2016. — mar. — Vol. 93, no. 3. — URL: <https://doi.org/10.1103/physreve.93.032501>.
48. moussa Abdellah Ait, Jassemnejad Bahaeddin. Optimizing thermal conductivity in functionalized macromolecules using Langevin dynamics and the globalized and bounded Nelder-Mead algorithm // *Physical Review E*. — 2014. — may. — Vol. 89, no. 5. — URL: <https://doi.org/10.1103/physreve.89.053313>.
49. Moussa Abdellah Ait, Mullen Kieran. Using normal modes to calculate and optimize thermal conductivity in functionalized macromolecules // *Physical Review E*. — 2011. — may. — Vol. 83, no. 5. — URL: <https://doi.org/10.1103/physreve.83.056708>.
50. Hu Lin, Desai Tapan, Keblinski Pawel. Determination of interfacial thermal resistance at the nanoscale // *Physical Review B*. — 2011. — may. — Vol. 83, no. 19. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.83.195423>.
51. Kumar Sandeep, Hembram K. P. S. S., Waghmare Umesh V. Intrinsic buckling strength of graphene: First-principles density functional theory calculations // *Physical Review B*. — 2010. — sep. — Vol. 82, no. 11. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.82.115411>.
52. Born Max, Wolf Emil. *Principles of Optics*. — Oxford : Pergamon Press, 1969. — 720 p.
53. Gadomskii O. N., Shalin A. S. Effect of optical blooming of a nanocrystal monolayer and the interface between two media // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. — 2007. — oct. — Vol. 105, no. 4. — P. 761–773. — URL: <http://dx.doi.org/10.1134/S106377610710010X>.

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.

E-mail: kostya.altunin@mail.ru

ORCID iD  0000-0002-0725-9416

Web of Science ResearcherID  I-5739-2014

SCOPUS ID  57201126207

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

E-mail: melneko@mail.ru

ORCID iD  0000-0002-9759-839X

Web of Science ResearcherID  ABD-4970-2020