



Секция 2

Физико-математические науки

УДК 535.3
ББК 22.343
ГРНТИ 29.31.21
ВАК 01.04.05

Исследование оптического пропускания и отражения нанокompозита с включениями из углеродных наноматериалов

К. К. Алтунин , Е. В. Торутанова  ¹

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

Поступила в редакцию 7 июня 2021 года
После переработки 17 июня 2021 года
Опубликована 9 сентября 2021 года

Аннотация. Рассматриваются результаты исследования оптического пропускания и отражения нанокompозита с наноразмерными включениями из углеродных наноматериалов. Построена теоретическая модель для описания оптических процессов в нанокompозитных структурах с наноразмерными включениями из углеродных нанотрубок. Модифицирован метод численного расчёта эффективных оптических параметров нанокompозитных структур с включениями из углеродных нанотрубок. Построена численная модель оптических процессов в нанокompозитных структурах с включениями из углеродных нанотрубок и разработана компьютерная программа на языке программирования Python для вычисления оптических характеристик нанокompозитной структуры с включениями в виде углеродных нанотрубок. Проведённые численные расчёты оптических параметров нанокompозитной структуры с углеродными нанотрубками показали, что можно существенно увеличить оптическое пропускание при определённых геометрических параметрах нанокompозитной структуры с углеродными нанотрубками.

Ключевые слова: нанокompозит, нанокompозитная плёнка, углеродный наноматериал, оптическое излучение, коэффициент оптического пропускания, коэффициент оптического отражения, просветляющее оптическое покрытие, оптические приборы, нанотрубка

PACS: 42.25.Bs

¹E-mail: ekaterina.torutanova@yandex.ru

Введение

В настоящее время интенсивно развиваются технологии получения наноструктурных материалов, в том числе наноструктурные материалы, содержащие включения в виде нанотрубок, комплексов и агрегатов на основе нанотрубок, что приведёт к созданию новых наноразмерных оптоэлектронных приборов.

Актуальность исследования обусловлена возрастающим интересом к наноструктурным материалам, а также оптическим свойствам наноструктурных материалов с включением нанотрубок.

Целью работы является исследование оптических свойств нанокompозитных структур с включениями их углеродных нанотрубок. Для достижения цели фундаментального исследования сформулированы следующие задачи:

1. написание обзора литературы по физическим свойствам нанокompозитов,
2. создание теоретической модели для описания оптических нанокompозитной среды с углеродными нанотрубками,
3. проведение расчётов оптических характеристик нанокompозитной среды с углеродными нанотрубками.

Объектом исследования является нанокompозитная среда с включениями в виде углеродных нанотрубок.

Предметом исследования является совокупность оптических свойств нанокompозитной среды с включениями в виде углеродных нанотрубок, находящимися во внешнем поле оптического излучения.

Гипотеза исследования состоит в том, что если обобщить результаты теоретических и численных расчётов оптических свойств нанокompозитных сред с включениями в виде углеродных нанотрубок, то можно предложить метод для адекватного оптического описания характеристик наноразмерного оптоэлектронного прибора на основе нанокompозитных структур с включениями в виде углеродных нанотрубок.

Методы исследования включают в себя набор теоретических и численных методов нанооптики, включая методы программирования физических задач на языках программирования высокого уровня.

Обзор научных работ по физическим свойствам нанокompозитов и наноструктур с углеродными наноматериалами и углеродными нанотрубками

Различные углеродные нанотрубки и нанокompозиты, созданные на основе нанотрубок, являются наиболее часто упоминаемыми строительными блоками нанотехнологий. С удвоенной прочностью на растяжение стали, теплопроводностью лучше, чем у всех, кроме самого чистого алмаза, и электрической проводимостью, подобной меди, но способной проводить гораздо более высокие электрические токи, углеродные нанотрубки кажутся удивительным материалом.

На самом деле нанотрубки бывают разных видов: длинные, короткие, одностенные, многостенные, открытые, закрытые, с различными типами спиральной структуры. Каждый тип имеет свои специфические производственные затраты и области применения. Некоторые были произведены в больших количествах в течение многих лет, в то время как другие только сейчас производятся в промышленных масштабах с достойной

чистотой и в количествах, превышающих несколько грамм. Одной из основных классификаций углеродных нанотрубок являются одностенные разновидности, которые имеют единственную цилиндрическую стенку, и многостенные разновидности, которые имеют цилиндры внутри цилиндров.

В конце 1991 года было предсказано, что углеродные нанотрубки в зависимости от их структуры и диаметра могут быть металлическими или полупроводниковыми. На основании теоретических исследований было указано, что нанотрубки могут демонстрировать экзотическое квантово-механическое поведение в присутствии магнитного поля. В отсутствие чистого материала было трудно интерпретировать теоретический расчет, сделанный для электронных свойств нанотрубок. Позже, модифицированные пути синтеза для получения чистого материала и эффективные методы очистки позволили электронное измерение нанотрубок на индивидуальном уровне. Научные публикации, появившиеся на нанотрубках, к настоящему времени показали, что электронные свойства нанотрубок могут довольно широко варьироваться в зависимости от степени их кристаллического порядка. Многие группы исследовали удельное сопротивление отдельных нанотрубок и их температурную зависимость.

Одностенные углеродные нанотрубки определяются как одномерные аллотропы углерода цилиндрической формы, которые имеют высокую площадь поверхности и большое отношение длины к диаметру. Из-за малого диаметра углеродных нанотрубок и большого соотношения сторон углеродные нанотрубки с одной стенкой считаются одномерным материалом. Одностенные углеродные нанотрубки названы так из-за полый структуры и количества стенок. Одностенные углеродные нанотрубки сделаны из нанотрубок толщиной в один атом, которые образуют трубку во время синтеза методом химического осаждения из газовой фазы и являются членами семейства фуллеренов.

Уникальные физические свойства однослойных углеродных нанотрубок обусловлены их одномерным размером, формой, высоким соотношением сторон и sp^2 -гибридизированными атомами углерода, расположенными в виде полый трубки. Они состоят из одной нанотрубки из атомов углерода, расположенных в виде шестиугольника, имеющего 5 и 6 членных колец. Существуют различные типы одностенных углеродных нанотрубок, потому что графитовые листы могут быть выращены с разными киральными углами во время синтеза. Истинные одностенные углеродные нанотрубки имеют внешний диаметр 0.7 – 1.2 нм и могут быть длиной от 0.5 до 30 мкм. Более длинные углеродные нанотрубки доступны в виде массива, обладающего характерным размером до 500 мкм.

Одностенные углеродные нанотрубки могут быть использованы для поглощения света, флуоресценции и прозрачных проводящих свойств. Известно, что они успешно делают суперчёрные (светопоглощающие) материалы при использовании массива углеродных нанотрубок (отдельные углеродные нанотрубки, стоящие как лес), потому что свет попадает между отдельными углеродными нанотрубками и не может отражаться обратно на протяжении всей длины нанотрубок, что приводит к поглощению света. Одностенные углеродные нанотрубки имеют настраиваемое ближнее инфракрасное излучение, которое реагирует на изменения локальной диэлектрической функции. Одностенные углеродные нанотрубки использовались при очень низких содержаниях 0.03 мас.% для изготовления прозрачных проводящих плёнок для дисплеев и солнечных элементов для замены оксида индия и олова, который имеет ограниченные глобальные ресурсы.

Одностенные углеродные нанотрубки можно рассматривать как свёрнутый графеновый лист с длинной оболочкой. Нанотрубки обычно имеют отношение длины к диаметру около 1000 и, следовательно, считаются почти одномерными структурами. Одно-

стенные углеродные нанотрубки обычно имеют диаметр, близкий к 1 нм, и в несколько тысяч раз длиннее. Одностенные углеродные нанотрубки обладают отличными электронными свойствами по сравнению с вариантами многостенных углеродных нанотрубок, которые делают их наиболее подходящим кандидатом для миниатюризации электроники для замены микроэлектромеханических систем, которые в настоящее время являются основой современной электроники. Самым основным строительным блоком этих систем является электрический провод, и одностенные углеродные нанотрубки могут быть отличными проводниками. Несмотря на их широкий потенциал в разнообразных нанотехнологических применениях, одностенные углеродные нанотрубки по-прежнему очень дороги в производстве, и разработка более доступных методов синтеза жизненно необходима для их применения в промышленных масштабах.

Углеродные нанотрубки с несколькими стенками состоят из нескольких слоёв графита, свернутых коаксиально для образования трубчатой формы. Они неизменно производятся с высокой частотой структурных дефектов. Многослойные углеродные нанотрубки являются структурно достаточно прочными; тем не менее, они часто содержат области структурного несовершенства. Например, структурный дефект, такой как микротрещина в стальной проволоке, приведет к катастрофическому разрушению при 1-2 % теоретической прочности на разрыв, которую можно было бы прогнозировать на основе фундаментальных химических принципов. Несмотря на недостатки, уникальные физические и химические свойства углеродных нанотрубок, такие как структурная жесткость и гибкость, продолжают вызывать значительный интерес. Кроме того, углеродные нанотрубки чрезвычайно прочны, примерно в 100 раз прочнее (устойчивее к нагрузкам), чем сталь, на одну шестую веса. Углеродные нанотрубки также могут действовать как проводники или полупроводники в зависимости от их хиральности и обладают собственной сверхпроводимостью. Это идеальные теплопроводники, которые также могут вести себя как полевые излучатели.

Электронные, оптические, термические и механические свойства одностенных углеродных нанотрубок, которые в последние годы вызывают большой интерес, обусловлены их уникальными физическими свойствами и структурой. Один слой атомов углерода удерживается вместе в структуре нанотрубки гибридами химических sp^2 -связями. В зависимости от того, как образуется нанотрубка, нанотрубки считаются полупроводниковыми или металлическими по своей природе. Одностенные углеродные нанотрубки инертны и могут использоваться для улучшения механических и проводящих свойств в других материалах.

Дисперсию одностенных углеродных нанотрубок обычно исследуют с помощью ультразвукового зонда с низкой амплитудой, и для стабилизации дисперсий может потребоваться использование поверхностно-активных веществ или высокофункционализированных одностенных углеродных нанотрубок. Также можно для исследования использовать ультразвуковой датчик мощностью 750 Вт, который необходимо включать и выключать каждые 30 секунд, чтобы предотвратить повреждение одностенных углеродных нанотрубок, и настраивать амплитуду звуковой волны примерно до 27%.

Одностенные углеродные нанотрубки представляют собой цилиндрические графитовые трубки диаметром около 1 нм. Они обладают металлическими или полупроводниковыми характеристиками в зависимости от того, как прокатаны графитовые листы. Ожидается, что из-за их замечательных электрических характеристик одностенные углеродные нанотрубки будут использоваться в широком диапазоне применений, таких как полевые транзисторы и проводящие пленки. В таких приложениях в устройствах изготавливаются сети из одностенных углеродных нанотрубок. Таким образом, фундаментальное понимание свойств электрического транспорта в таких сетях имеет большое значение для улучшения характеристик устройства. Сообщалось о ряде ис-

следований по этой проблеме; однако большинство исследований было выполнено на смеси металлических и полупроводниковых одностенных углеродных нанотрубок, поскольку одностенные углеродные нанотрубки образуются в таком смешанном состоянии [1–7]. Предполагается, что в одном пучке нанотрубок на проводимость влияют двумерные процессы слабой локализации из-за интерференции электронных волн, которые классифицируются как квантовые явления переноса [8].

В статье [4] сообщается о зависимости транспортных свойств однослойных плёнок углеродных нанотрубок, легированных органическими молекулами при низкой температуре. Температурная зависимость сопротивления и магнитосопротивления однослойных плёнок углеродных нанотрубок исследована систематически и хорошо объясняется двумерной схемой прыжковой проводимости с переменным диапазоном. Магнитосопротивление резко снижается при легировании, и анализ, основанный на двумерной теории скачкообразного изменения диапазона, показывает, что плотность состояний листа на уровне Ферми даёт монотонное увеличение с увеличением плотности носителей заряда. Прыжок носителей заряда в одностенной углеродной нанотрубке усиливается при легировании.

В статье [5] сообщается об измерениях электрического сопротивления отдельной углеродной нанотрубки при низкой температуре. Магнитное поле, приложенное перпендикулярно оси нанотрубки, увеличивает проводимость и вызывает апериодические колебания. Данные находят глобальную и последовательную интерпретацию в терминах двумерной слабой локализации и универсальных флуктуаций проводимости в мезоскопических проводниках. Размерность электронной системы обсуждается с точки зрения своеобразной структуры углеродных нанотрубок.

В статье [6] были найдены убедительные доказательства перехода металл – изолятор в макроскопические проводники одностенных углеродных нанотрубок.

В статье [8] сообщается об ориентационной зависимости поведения магнитосопротивления жгута с одностенными углеродными нанотрубками. Чёткое разграничение поведения наблюдается между приложением магнитного поля перпендикулярно или параллельно оси жгута. Для перпендикулярного поля наблюдается монотонное отрицательное магнитосопротивление из-за двумерной слабой локализации внутри жгута. Напротив, для параллельного поля наблюдается сложное колебательное поведение, обусловленное эффектом Альтшулера-Аронова-Спивака вокруг замкнутых электронных траекторий на дискретных цилиндрах внутри жгута из одностенных углеродных нанотрубок. Можно определить доминирующую колебательную моду, которая соответствует замкнутым траекториям вокруг внешней окружности жгута из одностенных углеродных нанотрубок. Однако из-за сложного волокнистого характера жгута общее колебательное поведение довольно сложно и может быть классифицировано как универсальные флуктуации проводимости. При приложении к образцу напряжения задней поверхности наблюдаются пики кулоновской блокады в транспортном токе с дополнительной структурой пиков, наложенной вследствие резонансного туннелирования. Найден интересный эффект, благодаря которому эти пики подавляются в присутствии магнитного поля.

В статье [9] разработана теоретическая модель для высокопроизводительной характеристики отдельных углеродных нанотрубок, учитывающая деполяризацию установки и оптический отклик подложки. Показано, что для правильного моделирования экспериментальных данных необходимо учитывать как некогерентную, так и когерентную деполяризацию света оптическими элементами. Показано, как сигнал нанотрубки можно отделить от комплексного коэффициента отражения антиотражающей подложки, который обычно используется для усиления оптического контраста. Описан экспери-

ментальный протокол для извлечения параметров деполяризации и восприимчивости комплексных нанотрубок, и как он может улучшить назначение хиральности отдельных углеродных нанотрубок в сложных случаях.

Благодаря уникальным физическим и химическим свойствам многостенных углеродных нанотрубок, двустенных углеродных нанотрубок и одностенных углеродных нанотрубок одностенные углеродные нанотрубки могут найти применение в различных областях, включая наноэлектронные устройства следующего поколения [10]. Электронные свойства одностенных углеродных нанотрубок зависят от их атомной структуры. Из-за отсутствия методологии и контроля нанотрубки, полученные с помощью методов промышленного синтеза, то есть дугового разряда, лазерной абляции и химического осаждения из газовой фазы, как правило, проявляют изменяющиеся и смешанные свойства, что ограничивает их применимость. Несмотря на успехи в области синтеза [11–15] и сортировки одностенных углеродных нанотрубок [16–20] с определёнными атомными структурами, требуются новые методы, позволяющие контролируемо модифицировать электронное свойство одностенных углеродных нанотрубок.

Недавние исследования углеродных нанотрубок были направлены на изменение электронных свойств одностенных углеродных нанотрубок путём ковалентной и нековалентной модификации их внешней поверхности, замены атомов углерода чужеродными атомами, интеркалирования пучков и заполнения каналов нанотрубок [21, 22]. Последний способ особенно перспективен, поскольку различные вещества с различными свойствами могут быть заключены в оболочку из одностенных углеродных нанотрубок. Заполнение одностенных углеродных нанотрубок фуллереном C_{60} [23] и $RuCl_3$ [24] впервые было выполнено в 1998 году, и с тех пор эта тема привлекает все большее внимание. Одностенные углеродные нанотрубки были заполнены различными простыми элементами веществами, металлами [25–31] и неметаллами [26, 32], химическими соединениями, галогенидами металлов [33–38], халькогенидами металлов [39–43] и оксиды металлов [44, 45], а также молекулы, фуллерены и их производные [46–50] и металлоценов [51, 52].

Газофазный метод позволил заполнить одностенные углеродные нанотрубки ферроценом [53–64], кобальтоценом [65, 66], никелоценом [67–70] и цероценом [71, 72].

Хотя углеродные нанотрубки без какой-либо модификации всё ещё обладают большим потенциалом для многих других применений, было обнаружено, что функционализированные углеродные нанотрубки имеют отличные биомедицинские применения.

Проведённый анализ научной литературы по физическим свойствам углеродных нанотрубок и нанокompозитов с углеродными нанотрубками, который показал необходимость теоретического и численного исследования физических свойств нанокompозитов с включениями из углеродных нанотрубок.

Теоретическая модель

Теоретические исследования показали, что оптическая активность углеродных нанотрубок исчезает, если нанотрубки становятся больше. Следовательно, ожидается, что другие физические свойства также зависят от этих параметров. Использование оптической активности может привести к созданию оптических устройств, в которых углеродные нанотрубки играют важную роль.

В последние годы полимерные нанокompозиты вызывают промышленный интерес. Углеродные нанотрубки являются идеальным выбором в качестве наполнителя как для структурных, так и для функциональных применений, поскольку углеродные нанотрубки могут привести к значительному улучшению свойств полимеров при очень низкой загрузке наполнителя. Существуют различные методы изготовления полимерных нанокompозитов, армированных углеродными нанотрубками, такие как смешивание растворов, смешивание в расплаве и полимеризация. Развиваются также некоторые новые

методы, такие как послойные и листовые маршруты, чтобы дать новое представление о производстве полимерных нанокомпозитов. Электрические, механические и термические свойства углеродных нанотрубок, армированных полимерными нанокомпозитами, представляют значительный технологический интерес. Потенциальные применения высокоэффективных углеродных нанотрубок на полимерных нанокомпозитах обеспечат прогресс в этой новой области.

Полимер является универсальным материалом, обладающим уникальными физическими свойствами, такими как низкая плотность, разумная прочность, гибкость, лёгкость в обработке. Однако механические свойства этих материалов не подходят для многих инженерных применений. Следовательно, существует постоянный поиск новых полимерных материалов с улучшенными свойствами. Первоначально смешивание различных классов полимеров было использовано для изготовления новых материалов с уникальными свойствами. Однако смешивание приводит лишь к незначительному улучшению физических свойств, которые всё ещё недостаточны для инженерных приложений. Поэтому для повышения прочности и жёсткости полимерных материалов использовались различные виды органических и неорганических наполнителей. Было отмечено, что прочность и жёсткость длинных волокон, армированных термореактивным полимером, сравнима с металлами по доле их массы. В результате чего эти материалы были использованы в авиационной и спортивной технике. Однако обработка этих материалов очень сложна; поэтому были разработаны небольшие композиты, армированные волокнами или частицами. В качестве наполнителей для обычных частиц использовались кремнезем, сажа, металлические частицы. Но для достижения желаемых механических свойств требовалась значительно большая загрузка наполнителя, что, таким образом, увеличивало стоимость и затрудняло технологичность. Поэтому для достижения высоких механических свойств при более низкой загрузке наполнителя использовались нанонаполнители. Укреплённая нанонаполнителем полимерная матрица известна как полимерный нанокомпозит.

Поляризационная оптическая микроскопия и спектроскопия постепенно становятся ключевыми методами высокопроизводительной характеристики отдельных углеродных нанотрубок и других одномерных наноструктур на подложке и в устройствах. Оптический отклик углеродных нанотрубок на подложке в экспериментах с кросс-поляризацией обычно ограничивается сохранением поляризации оптических элементов в экспериментальной установке.

Одним из наиболее интересных аспектов одностенных углеродных нанотрубок является крайняя зависимость их свойств от их кристаллической структуры и окружающей среды. Тем не менее, эта замечательная особенность является двусторонней монетой: она открывает множество новых явлений и приложений [73, 74], но проблематична, когда требуются специфические и хорошо контролируемые свойства, как для электронных приложений [75]. Эта проблема становится ещё более острой, когда речь идёт об отдельных одностенных углеродных нанотрубках, поскольку измерение их структуры или сигнатуры, зависящие от окружающей среды, обычно является длительным и сложным, особенно при изучении в устройствах [76–79]. Как прямой метод структурной характеристики, электронная дифракция должна быть методом выбора для определения структуры отдельных нанотрубок [80], но строго ограничена требованием использования взвешенных одностенных углеродных нанотрубок, а также стоимостью и сложностью передачи. электронные микроскопы. На практике рамановская спектроскопия является наиболее популярным методом [81], потому что он прост в исполнении, подходит как для металлических, так и для полупроводниковых одностенных углеродных нанотрубок, обеспечивает богатые информацией спектры и широко доступен. Однако основным недостатком является метод проб и ошибок, необходимый для опре-

деления энергии лазера в резонансе с оптическим переходом исследуемой нанотрубки. Измеряя энергии оптических переходов отдельных одностенных углеродных нанотрубок, резонансное рэлеевское рассеяние представляет собой высокопроизводительный метод структурной идентификации [82], но обычно ограничивается подвесными нанотрубками из-за интенсивного отражения или рассеяния от подложки. Недавно были разработаны новые оптические методы для непосредственного измерения оптических характеристик отдельных нанотрубок непосредственно на подложках [83–85]. Среди них поляризованная оптическая спектроскопия [86–88] представляет особый интерес, поскольку она не накладывает дополнительных ограничений (например, осаждённый слой, жидкая среда) на образец.

Сначала рассмотрим идеальный случай, когда оптические элементы не деполаризуют свет. Внешнее поле \mathbf{E}_i можно записать в виде

$$\mathbf{E}_i = |E_0| \exp(ikz - i\phi) \mathbf{e}_x, \quad (1)$$

где $|E_0|$ – амплитуда падающего поля, z – координата вдоль оси распространения \mathbf{e}_x , k – волновое число, а ϕ – фаза Гуи [89], дополнительная фаза, возникающая при распространении сфокусированного гауссова пучка.

Поэтому в следующем выражении рассмотрим только фазу Гуи для простоты. Отражённый луч сохраняет поляризацию падающего луча и следует за этим выражением:

$$\mathbf{E}_R = r\mathbf{E}_i \exp(i\phi) = r |E_0| \exp(i\pi) \mathbf{e}_x, \quad (2)$$

где r – амплитудный коэффициент отражения (r^2 – коэффициент отражения). Здесь фаза Гуи для отраженного пучка принимается равной π , поскольку обнаружение выполняется в дальней зоне. Поле, рассеянное углеродной нанотрубкой, считается полностью переполаризованным вдоль оси углеродной нанотрубки и записывается в виде

$$\mathbf{E}_{NT} = \frac{1}{2} A (1 + r)^2 \mathbf{E}_0 \exp(i\phi) (\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y), \quad (3)$$

где A – комплексная постоянная, которая пропорциональна восприимчивости нанотрубок χ и зависит от геометрических параметров (например, положения углеродных нанотрубок в освещённой области или эффективности сбора). Коэффициент $(1 + r)$ обозначает тот факт, что нанотрубка видит как падающий, так и отражённый свет. Этот коэффициент возводится в квадрат, потому что этот эффект действует как на поглощение, так и на рассеяние. Рассеянный свет от углеродных нанотрубок не приобретает дополнительную фазу при движении в дальнем поле. Оба поля собираются объективом микроскопа и анализируются через второй поляризатор. Интенсивность I , которую измеряют на камере или спектрометре, определяется выражением

$$I = |E_{tot}| = |(\mathbf{E}_R + \mathbf{E}_{NT}) (\sin(\delta) \mathbf{e}_x + \cos(\delta) \mathbf{e}_y)|^2, \quad (4)$$

где оба поля суммируются и проецируются на основную ось второго поляризатора, которая составляет небольшой угол δ с её направлением.

Эта интенсивность сравнивается с эталонной интенсивностью I_0 , отражённой подложкой от углеродных нанотрубок:

$$I_0 = |\mathbf{E}_R (\sin(\delta) \mathbf{e}_x + \cos(\delta) \mathbf{e}_y)|^2. \quad (5)$$

Контраст между двумя сигналами определяется выражением:

$$C = \frac{I - I_0}{I_0} \approx \frac{(1 + r)^4 |A|^2}{4r^2 \delta^2} + \frac{(1 + r)^2 \operatorname{Re}(\exp(i(\pi - \phi)) A^*)}{r \delta}. \quad (6)$$

Первый член этого уравнения связан с рассеянием и показывает, что будет измерено в эксперименте по рассеянию Рэлея. Второе слагаемое описывает интерференцию между отражённым полем и рассеянным полем углеродных нанотрубок.

Часть входного света, которая деполяризована вдоль оси \mathbf{e}_x (соответственно, оси \mathbf{e}_y), называется f_x (соответственно, f_y) и считается намного меньшей, чем 1. Для описания некогерентной деполяризации можно написать

$$\mathbf{E}_i = |E_i| (a\mathbf{e}_x + f_x \exp(i\psi_x(t))\mathbf{e}_x + f_y \exp(i\psi_y(t))\mathbf{e}_y) \quad (7)$$

с $\psi_x(t)$ и $\psi_y(t)$ случайные фазы деполяризованного света. Коэффициенты a , f_x и f_y следуют нормировочному уравнению

$$|a + f_x \exp(i\psi_x(t))|^2 + |f_y \exp(i\psi_y(t))|^2 = 1.$$

Выражение контраста теперь даётся выражением

$$C \approx \frac{(1+r)^4 |A|^2}{4r^2 (\delta^2 + f_y^2)} + \frac{\delta (1+r)^2 \operatorname{Re}(\exp(i(\pi - \phi)) A^*)}{r (\delta^2 + f_y^2)}. \quad (8)$$

Можно отметить, что при добавлении деполяризации выражение (8) больше не расходится при $\delta \rightarrow 0$. В частном случае, когда $\phi = \pi/2$, это выражение можно упростить до записи

$$C \approx \frac{(1+r)^4 |A|^2}{4r^2 (\delta^2 + f_y^2)} + \frac{\delta (1+r)^2 \operatorname{Im}(A)}{r (\delta^2 + f_y^2)}. \quad (9)$$

Это выражение показывает, что некогерентная деполяризация не меняет характер контраста. Другими словами, форма спектров не изменится. Поэтому необходимо учитывать другой тип деполяризации для учёта периодических колебаний, наблюдаемых при малых значениях δ .

Здесь считаем, что оптические элементы действуют как волновая пластина, которая меняет линейную поляризацию на эллиптическую с фиксированной фазой между двумя ортогональными компонентами. Часть поля ввода, которая деполяризована, называется f_{co} , и предполагается, что она намного меньше 1. Внешнее поле теперь записывается как

$$\mathbf{E}_i = |E_i| \exp(i\phi) (\mathbf{e}_x + f_{co} \exp(i\psi) \mathbf{e}_y), \quad (10)$$

где ψ – фаза деполяризованного света. Здесь, в отличие от предыдущего случая, когерентно деполяризованный свет может мешать входной поляризации при взаимодействии с углеродными нанотрубками, ориентированными под углом 45° . Затем контраст определяется как

$$C = \frac{(1+r)^4 |A|^2}{4r^2 |\delta + f_{co} \exp(i\psi)|} + \frac{(1+r)^2 \operatorname{Re}(\exp(i(\pi - \phi)) A^* (\delta + f_{co} \exp(i\psi)))}{r |\delta + f_{co} \exp(i\psi)|^2}. \quad (11)$$

Рассматривая конкретный случай, когда $\phi = \pi/2$, можно заметить, что теперь A связан с комплексным членом деполяризации, как можно видеть в числителе интерференционного члена. Полное выражение может быть явно записано как

$$C = \frac{(1+r)^4 |A|^2}{4r^2 |\delta + f_{co} \exp(i\psi)|^2} + (1+r)^2 \frac{(\delta + f_{co} \exp(i\psi)) \operatorname{Im}(A) - f_{co} \sin \psi \operatorname{Re}(A)}{r |\delta + f_{co} \exp(i\psi)|^2}. \quad (12)$$

Числитель интерференционного члена теперь состоит из двух вкладов. Первый вклад включает поглощение нанотрубок и больше не уничтожается при $\delta = 0$, но при $\delta =$

$-f_{co} \cos \psi$, который в дальнейшем будет называться δ_0 . Второй вклад связан с $\text{Re}(A)$, который сам связан с $\text{Im}(A)$ через отношения Крамерса-Кронига:

$$\text{Re}(\chi(\omega)) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\omega' \text{Im}(\chi\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega', \quad (13)$$

где ω – энергия. Второе слагаемое в выражении C может кардинально изменить форму спектра контраста, при условии, что $\sin \psi$ сравним с $\cos \psi$. Давайте определим $f = -f_{co} \sin \psi$ и выражение можно записать в виде

$$C = \frac{(1+r)^4 |A|^2}{4r^2 |\delta - \delta_0 + if|^2} + (1+r)^2 \frac{(\delta - \delta_0) \text{Im}(A) - f \text{Re}(A)}{r |\delta - \delta_0 + if|^2}. \quad (14)$$

Это выражение показывает, что в конкретном случае, когда $f = 0$, то есть $\psi = 0$ (или π), контраст расходится при $\delta = \delta_0$: две компоненты поляризации находятся в фазе (или в противофазе), и в результате поляризация линейная. Другими словами, чтобы полностью смоделировать физику, лежащую в основе спектра контраста, необходимо принять во внимание оба типа деполяризации, когерентную и некогерентную, и тогда наиболее общее выражение контраста даётся выражением

$$C = \frac{(1+r)^4 |A|^2}{4r^2 |\delta - \delta_0 + if|^2 + f_y^2} + (1+r)^2 \frac{(\delta - \delta_0) \text{Im}(A) - f \text{Re}(A)}{r |\delta - \delta_0 + if|^2 + f_y^2}. \quad (15)$$

Это выражение показывает важность знания типа деполяризации, участвующей в эксперименте, поскольку числитель и знаменатель не имеют общих факторов. Это также показывает, что как некогерентная, так и когерентная деполяризация будут иметь связанный эффект (в знаменателе) и не могут быть легко разделены, если оба произойдут в эксперименте.

Интерференция в оксидном слое является хорошо известным явлением, которое приводит к тому, что два коэффициента отражения становятся сложными функциями длины волны:

$$r_E(\lambda) = -\frac{r_{01} + r_{12} \exp(i2k_0 n_1 d_1)}{1 + r_{01} r_{12} \exp(i2k_0 n_1 d_1)} \quad (16)$$

$$r_A(\lambda) = 1 - \frac{(1 - r_{01}^2) r_{12} \exp(i2k_0 n_1 d_1)}{1 + r_{01} r_{12} \exp(i2k_0 n_1 d_1)}, \quad (17)$$

где r_{01} (соответственно, r_{12}) – коэффициент отражения на границе раздела воздуха с оксидом кремния толщиной d с показателем преломления n_1 (соответственно на границе оксида кремния и кремния), а $k_0 = 2\pi/\lambda$.

Расчёт контраста в идеальном случае без деполяризации даёт новое выражение:

$$C = \frac{|A|^2 |r_A|^4}{4r_E^2 \delta^2} + \frac{\text{Re}(\exp(i(\pi - \phi)) A^* (r_A^*)^2 r_E)}{|r_E|^2 \delta}, \quad (18)$$

где видно, что коэффициент усиления появляется только в числителе. В целях иллюстрации добавим четыре экситонных перехода углеродных нанотрубок одинаковой силы при разных энергиях вместе с нерезонансным членом восприимчивости (то есть комплексной постоянной A_0):

$$A(\lambda) = \frac{C_0}{(\omega_0 - \omega) - i\frac{\Gamma}{2}} + A_0. \quad (19)$$

Принимая во внимание влияние подложки и обоих типов деполяризации, контраст записывается как

$$C = \frac{|A|^2 |r_A|^4}{4r_E^2 (|\delta - \delta_0 + if|^2 + f_y^2)} + \frac{\text{Re} (\exp (i (\pi - \phi)) A^* (r_A^*)^2 r_E) (\delta - \delta_0 + if)}{r_E^2 (|\delta - \delta_0 + if|^2 + f_y^2)}, \quad (20)$$

Из этого выражения можно выбрать использование различных моделей, представленных ранее. Например, установка $f = 0$ эквивалентна полностью некогерентной деполяризации. Хотя в этом выражении представлено много параметров, в следующей части можно увидеть, что некоторые из них можно исправить или получить с помощью независимых измерений. Уравнение (20) также подчеркивает важность фазы Гуи, которая действует как дополнительная дефазировка в члене помехи. Фаза Гуи обычно считается равной $\pi/2$, но следует отметить, что отклонения могут наблюдаться, если нанотрубка не находится в центре перетяжки пучка или если пучок не является полностью гауссовским.

Показатель преломления для многослойных углеродных нанотрубок может быть рассчитан по формуле $n_{MWCNTs} = 2.47 + i0.99$. Формула показателя для преломления многослойных углеродных нанотрубок с учётом дисперсии не известна в настоящее время.

Рассмотрим коэффициенты Френеля для границы раздела сред с нанокompозитной средой с наноразмерными включениями из углеродных наноматериалов. Теория оптических свойств границы раздела сред с нанокompозитной средой с наноразмерными включениями из углеродных наноматериалов будет строиться на основе приближения эффективной среды. На первом этапе теории будут вычисляться амплитудные и энергетические коэффициенты Френеля для границы раздела сред с нанокompозитной средой с включениями из углеродных наноматериалов. На втором этапе теории будут вычисляться амплитудные и энергетические коэффициенты Френеля для нанокompозитной плёнки с наноразмерными включениями из углеродных наноматериалов. На втором этапе теории будут вычисляться амплитудные и энергетические коэффициенты Френеля для нанокompозитной плёнки с наноразмерными включениями из углеродных наноматериалов в определённом интервале оптических длин волн. Пусть на границу раздела сред 0 и 1 падает внешняя оптическая волна. Угол падения оптической волны обозначим θ_0 , а угол преломления обозначим θ_1 .

Напряжённость электрического поля внешней электромагнитной волны имеет вид представим в виде плоской волны. Будем использовать комплексное представление для записи векторов напряжённостей внешней, отражённой и прошедшей через границу раздела сред волн:

$$\mathbf{E}_{in}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_{in}(0) \exp\{i(\omega t - \mathbf{k}_{in}\mathbf{r})\}, \quad (21)$$

$$\mathbf{E}_r(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_r(0) \exp\{i(\omega t - \mathbf{k}_r\mathbf{r})\}, \quad (22)$$

$$\mathbf{E}_t(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_t(0) \exp\{i(\omega t - \mathbf{k}_t\mathbf{r})\}, \quad (23)$$

где амплитуды напряжённостей для случая s -поляризации и p -поляризации излучения определяются выражениями:

$$\mathbf{E}_r^s(0) = r^s \mathbf{E}_{in}(0), \quad (24)$$

$$\mathbf{E}_t^s(0) = t^s \mathbf{E}_{in}(0), \quad (25)$$

$$\mathbf{E}_r^p(0) = r^p \mathbf{E}_{in}(0), \quad (26)$$

$$\mathbf{E}_t^p(0) = t^p \mathbf{E}_{in}(0), \quad (27)$$

где r^s , t^s , r^p и t^p являются амплитудными коэффициентами Френеля для s -компонент и p -компонент отражённой и прошедшей волн.

В случае прозрачных сред амплитудные коэффициенты Френеля принимают вид:

$$r_{01}^s = \frac{\operatorname{tg}(\theta_0 - \theta_1)}{\operatorname{tg}(\theta_0 + \theta_1)}, \quad (28)$$

$$t_{01}^s = \frac{2 \sin \theta_1 \cos \theta_0}{\sin(\theta_0 + \theta_1)}, \quad (29)$$

$$r_{01}^p = \frac{\operatorname{tg}(\theta_0 - \theta_1)}{\operatorname{tg}(\theta_0 + \theta_1)}, \quad (30)$$

$$t_{01}^p = \frac{2n_0 / \cos \theta_1}{n_1 / \cos \theta_1 + n_0 / \cos \theta_0}. \quad (31)$$

Мы получим энергетические коэффициенты

$$R_{0,1}^{s,p} = |r_{0,1}^{s,p}|^2, \quad (32)$$

$$T_{0,1}^{s,p} = \frac{n_1 \cos \theta_1}{n_0 \cos \theta_0} |t_{0,1}^{s,p}|^2. \quad (33)$$

Для энергетических коэффициентов выполняется закон сохранения

$$R_{0,1}^{s,p} + T_{0,1}^{s,p} = 1. \quad (34)$$

Амплитудные коэффициенты Френеля для нанокompозитной плёнки могут быть записаны в точной форме, как

$$r_1^s = \frac{E_r^s(0)}{E_{in}^s(0)} = \frac{r_{01}^s + r_{12}^s \exp(i2\phi_1)}{1 + r_{01}^s r_{12}^s \exp(i2\phi_1)}, \quad (35)$$

$$r_1^p = \frac{E_r^p(0)}{E_{in}^p(0)} = \frac{r_{01}^p + r_{12}^p \exp(i2\phi_1)}{1 + r_{01}^p r_{12}^p \exp(i2\phi_1)}, \quad (36)$$

где введена фазовая толщина слоя

$$\phi_1 = k_0 d_1 \sqrt{\varepsilon_1 - \varepsilon_0 \sin^2 \theta_0}, \quad (37)$$

где волновое число $k_0 = 2\pi/\lambda$.

Коэффициенты Френеля для прошедшей оптической волны определяются выражениями:

$$t_1^s = \frac{E_t^s(0)}{E_{in}^s(0)} = \frac{t_{01}^s t_{12}^s \exp(i\phi_1)}{1 + r_{01}^s r_{12}^s \exp(i2\phi_1)}, \quad (38)$$

$$t_1^p = \frac{E_t^p(0)}{E_{in}^p(0)} = \frac{t_{01}^p t_{12}^p \exp(i\phi_1)}{1 + r_{01}^p r_{12}^p \exp(i2\phi_1)}. \quad (39)$$

Разработка компьютерной программы и результаты численных расчётов оптических характеристик нанокompозитной среды с углеродными нанотрубками

В теоретической части работы в качестве основных начальных параметров выбираются следующие параметры: угол падения внешнего излучения, диапазон длин волн излучения для построения спектров отражения и пропускания, характерные размеры включений, набор собственных частот системы.

```

> with(Statistics):
X := Vector([0.25, 0.26, 0.27, 0.28, 0.29, 0.3, 0.31, 0.32, 0.33, 0.34, 0.35, 0.36, 0.37, 0.38, 0.39, 0.4, 0.41, 0.42, 0.43, 0.44, 0.45, 0.46,
0.47, 0.48, 0.49, 0.5, 0.51, 0.52, 0.53, 0.54, 0.55, 0.56, 0.57, 0.58, 0.59, 0.6, 0.61, 0.62, 0.63, 0.64, 0.65, 0.66, 0.67, 0.68, 0.69, 0.7,
0.71, 0.72, 0.73, 0.74, 0.75, 0.76, 0.77, 0.78, 0.79, 0.8, 0.81, 0.82, 0.83, 0.84, 0.85, 0.86, 0.87, 0.88, 0.89, 0.9, 0.91, 0.92, 0.93, 0.94,
0.95, 0.96, 0.97, 0.98, 0.99, 1.0, 1.01, 1.02, 1.03, 1.04, 1.05, 1.06, 1.07, 1.08, 1.09, 1.1, 1.11, 1.12, 1.13, 1.14, 1.15, 1.16, 1.17, 1.18,
1.19, 1.2, 1.21, 1.22, 1.23, 1.24, 1.25, 1.26, 1.27, 1.28, 1.29, 1.3], datatype = float):
Y := Vector([1.108673, 1.118799, 1.29341, 1.38805, 1.46198, 1.51288, 1.54401, 1.56074, 1.56807, 1.56978, 1.56846, 1.56575, 1.56265,
1.55973, 1.55729, 1.55546, 1.55429, 1.55373, 1.55373, 1.55419, 1.55504, 1.55618, 1.55753, 1.55901, 1.56056, 1.56211, 1.56362,
1.56505, 1.56637, 1.56756, 1.56862, 1.56953, 1.5703, 1.57095, 1.57149, 1.57196, 1.57239, 1.57281, 1.57327, 1.57382, 1.57451,
1.57539, 1.57651, 1.57792, 1.57966, 1.58174, 1.58418, 1.58695, 1.59005, 1.59341, 1.59697, 1.60066, 1.60439, 1.60806, 1.6116,
1.61495, 1.61803, 1.62081, 1.62328, 1.62542, 1.62725, 1.62878, 1.63005, 1.6311, 1.63198, 1.63272, 1.63337, 1.63398, 1.63459,
1.63523, 1.63596, 1.63678, 1.63775, 1.63887, 1.64017, 1.64166, 1.64336, 1.64528, 1.6474, 1.64975, 1.65232, 1.65508, 1.65803,
1.66117, 1.66451, 1.66797, 1.67157, 1.67532, 1.67912, 1.683, 1.68697, 1.69094, 1.69491, 1.69891, 1.70283, 1.70674, 1.71054,
1.71425, 1.7179, 1.72139, 1.72477, 1.728, 1.73107, 1.73399, 1.73674, 1.73931], datatype = float):
Y2 := Vector([1.108673^2, 1.118799^2, 1.29341^2, 1.38805^2, 1.46198^2, 1.51288^2, 1.54401^2, 1.56074^2, 1.56807^2, 1.56978^2, 1.56846^2,
1.56575^2, 1.56265^2, 1.55973^2, 1.55729^2, 1.55546^2, 1.55429^2, 1.55373^2, 1.55373^2, 1.55419^2, 1.55504^2, 1.55618^2, 1.55753^2,
1.55901^2, 1.56056^2, 1.56211^2, 1.56362^2, 1.56505^2, 1.56637^2, 1.56756^2, 1.56862^2, 1.56953^2, 1.5703^2, 1.57095^2, 1.57149^2,
1.57196^2, 1.57239^2, 1.57281^2, 1.57327^2, 1.57382^2, 1.57451^2, 1.57539^2, 1.57651^2, 1.57792^2, 1.57966^2, 1.58174^2, 1.58418^2,
1.58695^2, 1.59005^2, 1.59341^2, 1.59697^2, 1.60066^2, 1.60439^2, 1.60806^2, 1.6116^2, 1.61495^2, 1.61803^2, 1.62081^2, 1.62328^2,
1.62542^2, 1.62725^2, 1.62878^2, 1.63005^2, 1.6311^2, 1.63198^2, 1.63272^2, 1.63337^2, 1.63398^2, 1.63459^2, 1.63523^2, 1.63596^2,
1.63678^2, 1.63775^2, 1.63887^2, 1.64017^2, 1.64166^2, 1.64336^2, 1.64528^2, 1.6474^2, 1.64975^2, 1.65232^2, 1.65508^2, 1.65803^2,
1.66117^2, 1.66451^2, 1.66797^2, 1.67157^2, 1.67532^2, 1.67912^2, 1.683, 1.68697^2, 1.69094^2, 1.69491^2, 1.69891^2, 1.70283^2,
1.70674^2, 1.71054^2, 1.71425^2, 1.7179^2, 1.72139^2, 1.72477^2, 1.728, 1.73107^2, 1.73399^2, 1.73674^2, 1.73931^2], datatype = float):
> Fit(1 +  $\frac{b1 \cdot r^2}{r^2 + c1} + \frac{b2 \cdot r^2}{r^2 + c2} + \frac{b3 \cdot r^2}{r^2 + c3}$ , X, Y2, r):
1 -  $\frac{1.30830483584205 \cdot r^2}{r^2 + 0.831199220442872} + \frac{1.88137754511185 \cdot r^2}{r^2 + 0.0566855364863389} + \frac{4.99366213843503 \cdot r^2}{r^2 + 6.50101189917973}$  (1)

```

Рис. 1. Часть компьютерной программы для аппроксимации действительной части показателя преломления углеродных нанотрубок как функции длины волны оптического излучения.

Нанокompозиты на основе полимерных матриц и нанотрубок способны изменять свою электрическую проводимость за счёт смещения нанотрубок относительно друг друга под влиянием внешних факторов. Это свойство можно применить для создания микроскопических сенсоров, определяющих интенсивность механического воздействия за сверхкороткие промежутки времени.

Опишем основные элементы компьютерной программы для расчёта физических характеристик нанокompозитных систем с углеродными нанотрубками.

На рис. 1 изображена часть компьютерной программы для аппроксимации действительной части показателя преломления углеродных нанотрубок как функции длины волны оптического излучения.

На рис. 2 изображена часть компьютерной программы для аппроксимации мнимой части показателя преломления углеродных нанотрубок как функции длины волны оптического излучения.

Основной расчетный блок разрабатываемой программы начинается с описания функций, характеризующих дисперсионных зависимостей диэлектрической проницаемости, магнитной проницаемости и комплексного показателя преломления для различных материалов. Ключевую часть программы составляют различные формулы смешения, позволяющие рассчитывать эффективные параметры нанокompозитов с нанотрубками. В ходе работы будут подвергнуты анализу и запрограммированы функциональные зависимости эффективных параметров таких, как эффективная диэлектрическая проницаемость, эффективная магнитная проницаемость, эффективный показатель преломления и эффективный поверхностный импеданс нанокompозитной среды с нанотрубками, находящейся во внешнем поле оптического излучения.

Эффективный показатель преломления и эффективная диэлектрическая проницаемость нанокompозитной среды с нанотрубками могут быть рассчитаны в приближении эффективной среды либо по формуле Максвелл-Гарнетта, либо по формуле Бруггемана, либо по формуле Лорентц-Лоренца.

Следующая часть программы позволяет рассчитывать амплитудные энергетические

```
> with(Statistics) :
X := Vector([0.25, 0.26, 0.27, 0.28, 0.29, 0.3, 0.31, 0.32, 0.33, 0.34, 0.35, 0.36, 0.37, 0.38, 0.39, 0.4, 0.41, 0.42, 0.43, 0.44, 0.45, 0.46,
0.47, 0.48, 0.49, 0.5, 0.51, 0.52, 0.53, 0.54, 0.55, 0.56, 0.57, 0.58, 0.59, 0.6, 0.61, 0.62, 0.63, 0.64, 0.65, 0.66, 0.67, 0.68, 0.69, 0.7,
0.71, 0.72, 0.73, 0.74, 0.75, 0.76, 0.77, 0.78, 0.79, 0.8, 0.81, 0.82, 0.83, 0.84, 0.85, 0.86, 0.87, 0.88, 0.89, 0.9, 0.91, 0.92, 0.93, 0.94,
0.95, 0.96, 0.97, 0.98, 0.99, 1.0, 1.01, 1.02, 1.03, 1.04, 1.05, 1.06, 1.07, 1.08, 1.09, 1.1, 1.11, 1.12, 1.13, 1.14, 1.15, 1.16, 1.17, 1.18,
1.19, 1.2, 1.21, 1.22, 1.23, 1.24, 1.25, 1.26, 1.27, 1.28, 1.29, 1.3], datatype = float) :
Y := Vector([0.69065, 0.73726, 0.74974, 0.73135, 0.69234, 0.64472, 0.59765, 0.55602, 0.52161, 0.49429, 0.47323, 0.45731, 0.44553,
0.43697, 0.43088, 0.42665, 0.42383, 0.42203, 0.42098, 0.42045, 0.4203, 0.42039, 0.42066, 0.42105, 0.42153, 0.42208, 0.42271,
0.42341, 0.42421, 0.42513, 0.4262, 0.42743, 0.42886, 0.43051, 0.43241, 0.43458, 0.43704, 0.4398, 0.44286, 0.44623, 0.44989,
0.45382, 0.45798, 0.46232, 0.46679, 0.47131, 0.47582, 0.48023, 0.48445, 0.48843, 0.49209, 0.49542, 0.49838, 0.50097, 0.50323,
0.5052, 0.50694, 0.50849, 0.50996, 0.51139, 0.51285, 0.51442, 0.51612, 0.51801, 0.52012, 0.52246, 0.52505, 0.52789, 0.53099,
0.53431, 0.53788, 0.54164, 0.54559, 0.54972, 0.55394, 0.55831, 0.56272, 0.56722, 0.5717, 0.57621, 0.58067, 0.58505, 0.58934,
0.59353, 0.59761, 0.6015, 0.60524, 0.60882, 0.61217, 0.61532, 0.61829, 0.62103, 0.62355, 0.62588, 0.62798, 0.6299, 0.6316,
0.63311, 0.63446, 0.63563, 0.63666, 0.63755, 0.63831, 0.63896, 0.63952, 0.64], datatype = float) :
Y2 := Vector([0.69065^2, 0.73726^2, 0.74974^2, 0.73135^2, 0.69234^2, 0.64472^2, 0.59765^2, 0.55602^2, 0.52161^2, 0.49429^2, 0.47323^2,
0.45731^2, 0.44553^2, 0.43697^2, 0.43088^2, 0.42665^2, 0.42383^2, 0.42203^2, 0.42098^2, 0.42045^2, 0.4203^2, 0.42039^2, 0.42066^2, 0.42105^2, 0.42153^2, 0.42208^2, 0.42271^2,
0.42341^2, 0.42421^2, 0.42513^2, 0.4262^2, 0.42743^2, 0.42886^2, 0.43051^2, 0.43241^2, 0.43458^2, 0.43704^2, 0.4398^2, 0.44286^2, 0.44623^2, 0.44989^2,
0.45382^2, 0.45798^2, 0.46232^2, 0.46679^2, 0.47131^2, 0.47582^2, 0.48023^2, 0.48445^2, 0.48843^2, 0.49209^2, 0.49542^2, 0.49838^2, 0.50097^2, 0.50323^2, 0.5052^2, 0.50694^2, 0.50849^2, 0.50996^2,
0.51139^2, 0.51285^2, 0.51442^2, 0.51612^2, 0.51801^2, 0.52012^2, 0.52246^2, 0.52505^2, 0.52789^2, 0.53099^2, 0.53431^2, 0.53788^2,
0.54164^2, 0.54559^2, 0.54972^2, 0.55394^2, 0.55831^2, 0.56272^2, 0.56722^2, 0.5717^2, 0.57621^2, 0.58067^2, 0.58505^2, 0.58934^2,
0.59353^2, 0.59761^2, 0.6015^2, 0.60524^2, 0.60882^2, 0.61217^2, 0.61532^2, 0.61829^2, 0.62103^2, 0.62355^2, 0.62588^2, 0.62798^2,
0.6299^2, 0.6316^2, 0.63311^2, 0.63446^2, 0.63563^2, 0.63666^2, 0.63755^2, 0.63831^2, 0.63896^2, 0.63952^2, 0.64^2], datatype = float) :
> Fit(1 +  $\frac{b1 \cdot r^2}{r^2 + c1} + \frac{b2 \cdot r^2}{r^2 + c2} + \frac{b3 \cdot r^2}{r^2 + c3}, X, Y2, t$ ):
1 +  $\frac{6.59946602975250 \cdot r^2}{r^2 - 12.6239956593298} - \frac{157.780595848503 \cdot r^2}{r^2 + 211.462452763240} - \frac{1.05375488292589 \cdot r^2}{r^2 - 2.86030708261783}$  (1)
> |
```

Рис. 2. Часть компьютерной программы для аппроксимации мнимой части показателя преломления углеродных нанотрубок как функции длины волны оптического излучения.

коэффициенты оптического отражения, пропускания, поглощения для различных конфигураций наноструктур с нанотрубками как функции длины волны излучения. На основании проведённых расчётов набора эффективных параметров можно получить зависимости энергетических коэффициентов оптического отражения, пропускания, поглощения как функции длины волны излучения.

Заключительная же часть программы формирует графики энергетических коэффициентов оптического отражения, пропускания, поглощения как функции длины волны излучения.

Построенные графические зависимости будут способствовать наглядному представлению оптических характеристик наноструктурных материалов с нанотрубками.

Приведём краткое описание созданного программного продукта, предназначенного для расчёта физических свойств нанокompозитных систем с нанотрубками.

Применим модель эффективной среды для описания нанокompозитных сред с включениями в виде углеродных нанотрубок. Эффективная диэлектрическая проницаемость нанокompозитной среды j с включениями в виде углеродных нанотрубок вычисляется по формуле:

$$\epsilon_j = \epsilon_j^m \left(1 + \frac{f_j (\epsilon_j^p - \epsilon_j^m)}{\epsilon_j^m + g_j (1 - f_j) (\epsilon_j^p - \epsilon_j^m)} \right). \quad (40)$$

где ϵ_j^m — диэлектрическая проницаемость матрицы в нанокompозитной среде j , ϵ_j^p — диэлектрическая проницаемость системы наноразмерных включений в виде углеродных нанотрубок в нанокompозитной среде j , f_j — объёмная доля наноразмерных включений в нанокompозитной среде j , g_j — деполаризующий фактор.

На рис. 3 изображена часть компьютерной программы на языке программирования Python для расчёта физических свойств нанокompозитных систем с углеродными нанотрубками.

Опишем результаты численных расчётов оптического пропускания однослойной нанокompозитной плёнки с углеродными нанотрубками, полученные в результате вычислений при помощи компьютерной программы на языке программирования Python.

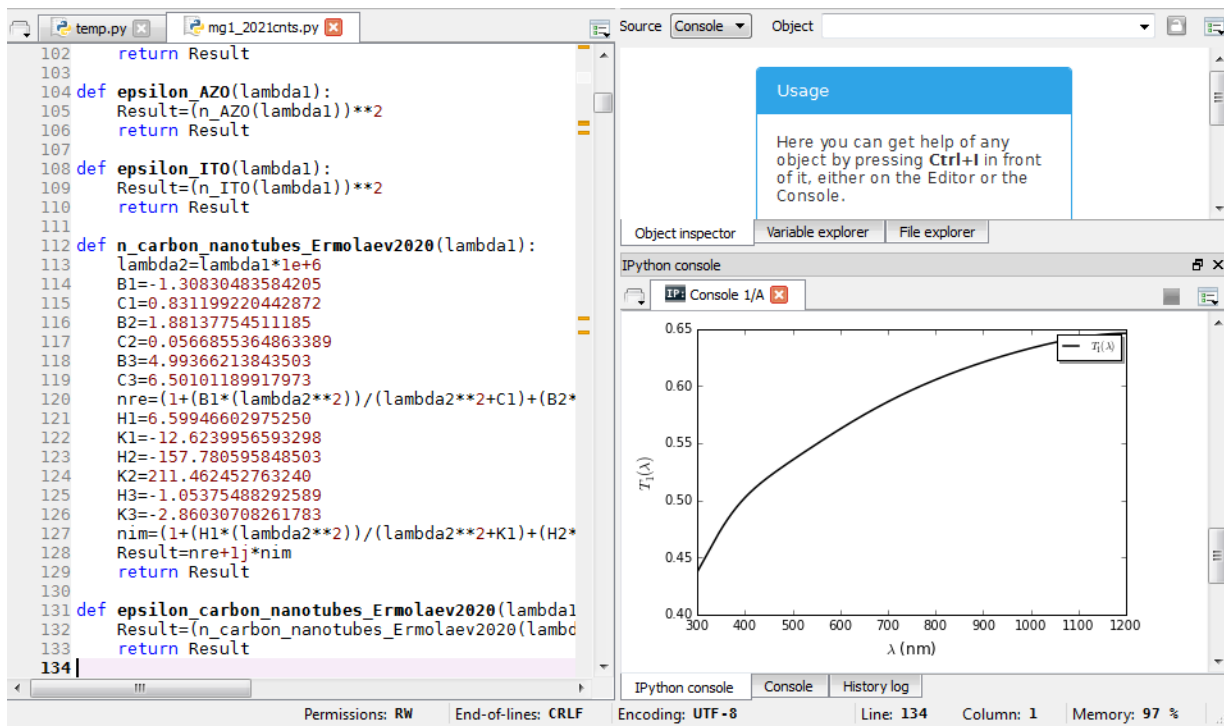


Рис. 3. Часть компьютерной программы на языке программирования Python для расчёта физических свойств нанокompозитных систем с углеродными нанотрубками.

Рассмотрим результаты численных расчётов оптического пропускания однослойной нанокompозитной плёнки с углеродными нанотрубками, расположенной на подложке из стекла BK7.

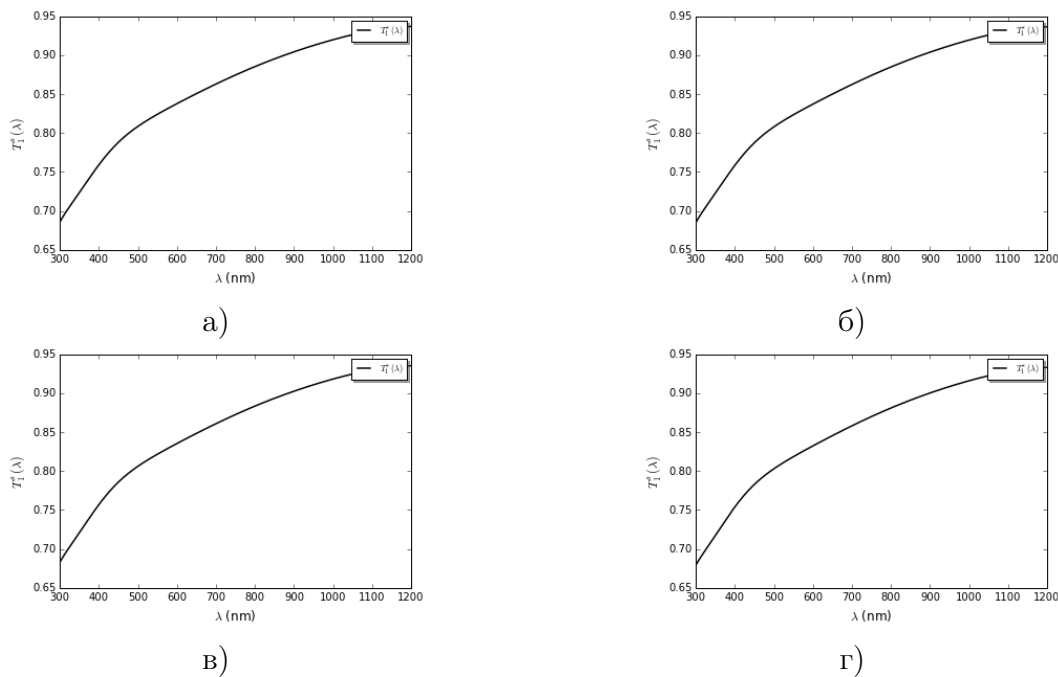


Рис. 4. Зависимость энергетического коэффициента пропускания от длины волны оптического излучения для случая падения *s*-поляризованной оптической волны из воздуха на нанокompозитную плёнку толщиной $d_1 = 250$ нм из полиметилметакрилата с углеродными нанотрубками, фактором заполнения $f_1 = 3\%$, расположенную на подложке из стекла BK7 при угле падения а) $\theta_0 = 0^\circ$, б) $\theta_0 = 5^\circ$, в) $\theta_0 = 10^\circ$, г) $\theta_0 = 15^\circ$.

На рис. 4 изображена зависимость энергетического коэффициента пропускания от длины волны оптического излучения для случая падения s -поляризованной оптической волны из воздуха на нанокompозитную плёнку толщиной $d_1 = 250$ нм из полиметилметакрилата с углеродными нанотрубками, фактором заполнения $f_1 = 3\%$, расположенную на подложке из стекла BK7 при угле падения излучения а) $\theta_0 = 0^\circ$, б) $\theta_0 = 5^\circ$, в) $\theta_0 = 10^\circ$, г) $\theta_0 = 15^\circ$. Из графиков видно, что нанокompозитная плёнка обладает высоким пропусканием в широком диапазоне оптических длин волн.

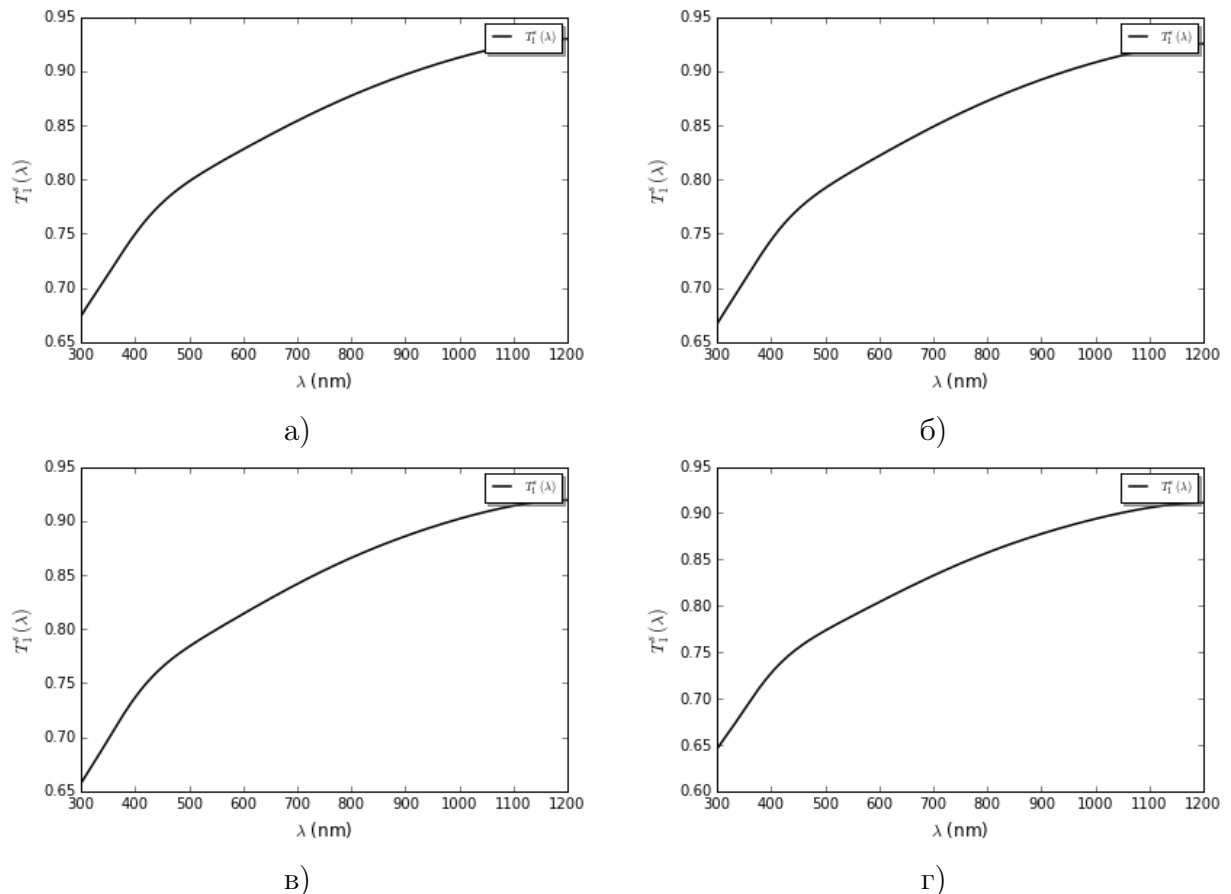


Рис. 5. Зависимость энергетического коэффициента пропускания от длины волны оптического излучения для случая падения s -поляризованной оптической волны из воздуха на нанокompозитную плёнку толщиной $d_1 = 250$ нм из полиметилметакрилата с углеродными нанотрубками, фактором заполнения $f_1 = 3\%$, расположенную на подложке из стекла BK7 при угле падения а) $\theta_0 = 20^\circ$, б) $\theta_0 = 25^\circ$, в) $\theta_0 = 30^\circ$, г) $\theta_0 = 35^\circ$.

На рис. 5 изображена зависимость энергетического коэффициента пропускания от длины волны оптического излучения для случая падения s -поляризованной оптической волны из воздуха на нанокompозитную плёнку толщиной $d_1 = 250$ нм из полиметилметакрилата с углеродными нанотрубками, фактором заполнения $f_1 = 3\%$, расположенную на подложке из стекла BK7 при угле падения излучения а) $\theta_0 = 20^\circ$, б) $\theta_0 = 25^\circ$, в) $\theta_0 = 30^\circ$, г) $\theta_0 = 35^\circ$.

Заключение

Даже после более чем двух десятилетий всесторонних фундаментальных исследований с момента их открытия углеродные нанотрубки продолжают удивлять исследователей потенциальными новыми приложениями и интересными открытиями новых физических явлений и свойств. Из-за огромного стремления найти практическое при-

менение, исследования углеродных нанотрубок активно проводятся в различных областях, включая накопление энергии, молекулярную электронику, наномеханические устройства, композиты, а также химическое сенсирование и биосенсирование.

В современной технологии материалов углеродные нанотрубки стали кандидатами для изготовления новых устройств и систем доставки лекарств. Они были успешно реализованы для разработки новых систем доставки лекарств. Углеродные нанотрубки демонстрируют многочисленные возможности в областях применения, таких как терапия, биомедицинские применения, инженерия костной ткани. Кроме того, некоторые стратегии химической модификации углеродных нанотрубок также обсуждались с точки зрения ковалентных и нековалентных связей. Углеродные нанотрубки всё ещё обладают большим потенциалом для применения в биомедицинских приложениях благодаря гибкости их модификации, проводимости и эластичности. Из-за таких уникальных свойств углеродные нанотрубки стали интересной областью исследований для разработки новых систем доставки лекарств для лучшего высвобождения терапевтических агентов.

Уникальные свойства углеродных нанотрубок открыли новую эпоху создания современных многофункциональных нанокompозитов. Включение углеродных нанотрубок в полимерные матрицы дает материалы, которые можно использовать для многих высокопроизводительных инженерных задач. Исследования на основе полимерных нанокompозитов на основе углеродных нанотрубок показывают, что углеродные нанотрубки имеют большой потенциал для изменения свойств полимерных нанокompозитов. Качество углеродных нанотрубок, армированных полимерными нанокompозитами, зависит от нескольких факторов, таких как тип углеродных нанотрубок, хиральность, дисперсия, выравнивание, чистота, соотношение сторон, функционализация и межфазное взаимодействие между углеродными нанотрубками и полимерной матрицей.

Выводы по работе можно сформулировать следующим образом:

1. проведённый анализ научной литературы по физическим свойствам нанокompозитных сред с включениями из углеродных нанотрубок показал необходимость теоретического и численного исследования физических свойств нанокompозитных сред с включениями из углеродных нанотрубок,
2. построена теоретическая модель оптических процессов в нанокompозитных структурах с включениями из углеродных нанотрубок,
3. построена численная модель оптических процессов в нанокompозитных структурах с включениями из углеродных нанотрубок и разработана компьютерная программа на языке программирования Python для вычисления оптических характеристик нанокompозитной структуры с включениями в виде углеродных нанотрубок,
4. проведённые численные расчёты оптических параметров нанокompозитной структуры с углеродными нанотрубками показали, что можно существенно увеличить оптическое пропускание при определённых геометрических параметрах нанокompозитной структуры с углеродными нанотрубками.

В работе модифицирован метод численного расчёта эффективных оптических параметров нанокompозитных структур с включениями из углеродных нанотрубок.

Список использованных источников

1. Ion irradiation effects on conduction in single-wall carbon nanotube networks / V. Skákalová [et al.] // Applied Physics A. — 2008. — jan. — Vol. 90, no. 4. — P. 597–602. — URL: <https://doi.org/10.1007/s00339-007-4383-0>.

2. Yosida Y., Oguro I. Variable range hopping conduction in bulk samples composed of single-walled carbon nanotubes // *Journal of Applied Physics*. — 1999. — jul. — Vol. 86, no. 2. — P. 999–1003. — URL: <https://doi.org/10.1063/1.370838>.
3. Magnetoresistance of an entangled single-wall carbon-nanotube network / G. T. Kim [et al.] // *Physical Review B*. — 1998. — dec. — Vol. 58, no. 24. — P. 16064–16069. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.58.16064>.
4. Takano Takumi, Takenobu Taishi, Iwasa Yoshihiro. Enhancement of Carrier Hopping by Doping in Single Walled Carbon Nanotube Films // *Journal of the Physical Society of Japan*. — 2008. — dec. — Vol. 77, no. 12. — P. 124709. — URL: <https://doi.org/10.1143/jpsj.77.124709>.
5. Quantum Transport in a Multiwalled Carbon Nanotube / L. Langer [et al.] // *Physical Review Letters*. — 1996. — jan. — Vol. 76, no. 3. — P. 479–482. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevlett.76.479>.
6. Vavro J., Kikkawa J. M., Fischer J. E. Metal-insulator transition in doped single-wall carbon nanotubes // *Physical Review B*. — 2005. — apr. — Vol. 71, no. 15. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.71.155410>.
7. Variable Range Hopping in Single-Wall Carbon Nanotube Thin Films: A Processing–Structure–Property Relationship Study / Sida Luo [et al.] // *Langmuir*. — 2013. — jun. — Vol. 29, no. 27. — P. 8694–8702. — URL: <https://doi.org/10.1021/la401264r>.
8. Orientation dependence of magneto-resistance behaviour in a carbon nanotube rope / G.C. McIntosh [et al.] // *Thin Solid Films*. — 2002. — sep. — Vol. 417, no. 1-2. — P. 67–71. — URL: [https://doi.org/10.1016/s0040-6090\(02\)00592-8](https://doi.org/10.1016/s0040-6090(02)00592-8).
9. Comprehensive model of the optical spectra of carbon nanotubes on a substrate by polarized microscopy / Léonard Monniello [et al.] // *Physical Review B*. — 2019. — mar. — Vol. 99, no. 11. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.99.115431>.
10. Endo Morinobu, Strano Michael S., Ajayan Pulickel M. Potential Applications of Carbon Nanotubes // *Topics in Applied Physics*. — Springer Berlin Heidelberg, 2007. — P. 13–62. — URL: https://doi.org/10.1007/978-3-540-72865-8_2.
11. Chiang Wei-Hung, Sankaran R. Mohan. Linking catalyst composition to chirality distributions of as-grown single-walled carbon nanotubes by tuning NixFe1-x nanoparticles // *Nature Materials*. — 2009. — sep. — Vol. 8, no. 11. — P. 882–886. — URL: <https://doi.org/10.1038/nmat2531>.
12. Narrow-Chirality Distributed Single-Walled Carbon Nanotube Growth from Nonmagnetic Catalyst / Zohreh Ghorannevis [et al.] // *Journal of the American Chemical Society*. — 2010. — jul. — Vol. 132, no. 28. — P. 9570–9572. — URL: <https://doi.org/10.1021/ja103362j>.
13. Chiral-Selective Growth of Single-Walled Carbon Nanotubes on Lattice-Mismatched Epitaxial Cobalt Nanoparticles / Maoshuai He [et al.] // *Scientific Reports*. — 2013. — mar. — Vol. 3, no. 1. — URL: <https://doi.org/10.1038/srep01460>.
14. Chirality-specific growth of single-walled carbon nanotubes on solid alloy catalysts / Feng Yang [et al.] // *Nature*. — 2014. — jun. — Vol. 510, no. 7506. — P. 522–524. — URL: <https://doi.org/10.1038/nature13434>.

15. Chemical vapor deposition synthesis of near-zigzag single-walled carbon nanotubes with stable tube-catalyst interface / Qiuchen Zhao [et al.] // *Science Advances*. — 2016. — may. — Vol. 2, no. 5. — P. e1501729. — URL: <https://doi.org/10.1126/sciadv.1501729>.
16. Isolation of 1 nm Diameter Single-Wall Carbon Nanotube Species Using Aqueous Two-Phase Extraction / Jeffrey A. Fagan [et al.] // *ACS Nano*. — 2015. — apr. — Vol. 9, no. 5. — P. 5377–5390. — URL: <https://doi.org/10.1021/acsnano.5b01123>.
17. Green Alexander A., Hersam Mark C. Nearly Single-Chirality Single-Walled Carbon Nanotubes Produced via Orthogonal Iterative Density Gradient Ultracentrifugation // *Advanced Materials*. — 2011. — apr. — Vol. 23, no. 19. — P. 2185–2190. — URL: <https://doi.org/10.1002/adma.201100034>.
18. Large-scale single-chirality separation of single-wall carbon nanotubes by simple gel chromatography / Huaping Liu [et al.] // *Nature Communications*. — 2011. — may. — Vol. 2, no. 1. — URL: <https://doi.org/10.1038/ncomms1313>.
19. DNA sequence motifs for structure-specific recognition and separation of carbon nanotubes / Xiaomin Tu [et al.] // *Nature*. — 2009. — jul. — Vol. 460, no. 7252. — P. 250–253. — URL: <https://doi.org/10.1038/nature08116>.
20. Industrial-scale separation of high-purity single-chirality single-wall carbon nanotubes for biological imaging / Yohei Yomogida [et al.] // *Nature Communications*. — 2016. — jun. — Vol. 7, no. 1. — URL: <https://doi.org/10.1038/ncomms12056>.
21. Kharlamova M. V. Electronic properties of pristine and modified single-walled carbon nanotubes // *Physics-Uspekhi*. — 2013. — nov. — Vol. 56, no. 11. — P. 1047–1073. — URL: <https://doi.org/10.3367/ufne.0183.201311a.1145>.
22. Kharlamova Marianna V. Advances in tailoring the electronic properties of single-walled carbon nanotubes // *Progress in Materials Science*. — 2016. — apr. — Vol. 77. — P. 125–211. — URL: <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2015.09.001>.
23. Smith Brian W., Monthieux Marc, Luzzi David E. Encapsulated C60 in carbon nanotubes // *Nature*. — 1998. — nov. — Vol. 396, no. 6709. — P. 323–324. — URL: <https://doi.org/10.1038/24521>.
24. The opening and filling of single walled carbon nanotubes (SWTs) / Jeremy Sloan [et al.] // *Chemical Communications*. — 1998. — no. 3. — P. 347–348. — URL: <https://doi.org/10.1039/a707632k>.
25. Metal Nanowires and Intercalated Metal Layers in Single-Walled Carbon Nanotube Bundles / A. Govindaraj [et al.] // *Chemistry of Materials*. — 2000. — jan. — Vol. 12, no. 1. — P. 202–205. — URL: <https://doi.org/10.1021/cm990546o>.
26. Metallization of single-wall carbon nanotube thin films induced by gas phase iodination / A. A. Tonkikh [et al.] // *Carbon*. — 2015. — nov. — Vol. 94. — P. 768–774. — URL: <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2015.07.062>.
27. Silver filled single-wall carbon nanotubes—synthesis, structural and electronic properties / E. Borowiak-Palen [et al.] // *Nanotechnology*. — 2006. — apr. — Vol. 17, no. 9. — P. 2415–2419. — URL: <https://doi.org/10.1088/0957-4484/17/9/058>.

28. Characterization of single wall carbon nanotubes filled with silver and with chromium compounds / P. Corio [et al.] // *Chemical Physics Letters*. — 2004. — jan. — Vol. 383, no. 5-6. — P. 475–480. — URL: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2003.11.061>.
29. Kharlamova M. V., Niu J. J. Comparison of metallic silver and copper doping effects on single-walled carbon nanotubes // *Applied Physics A*. — 2012. — aug. — Vol. 109, no. 1. — P. 25–29. — URL: <https://doi.org/10.1007/s00339-012-7091-3>.
30. Kharlamova M. V., Niu J. J. Donor doping of single-walled carbon nanotubes by filling of channels with silver // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. — 2012. — sep. — Vol. 115, no. 3. — P. 485–491. — URL: <https://doi.org/10.1134/s1063776112080092>.
31. Kharlamova M. V., Niu J. J. New method of the directional modification of the electronic structure of single-walled carbon nanotubes by filling channels with metallic copper from a liquid phase // *JETP Letters*. — 2012. — may. — Vol. 95, no. 6. — P. 314–319. — URL: <https://doi.org/10.1134/s0021364012060057>.
32. Conducting linear chains of sulphur inside carbon nanotubes / Toshihiko Fujimori [et al.] // *Nature Communications*. — 2013. — jul. — Vol. 4, no. 1. — URL: <https://doi.org/10.1038/ncomms3162>.
33. An encapsulated helical one-dimensional cobalt iodide nanostructure / Eilidh Philp [et al.] // *Nature Materials*. — 2003. — nov. — Vol. 2, no. 12. — P. 788–791. — URL: <https://doi.org/10.1038/nmat1020>.
34. Two layer 4:4 co-ordinated KI crystals grown within single walled carbon nanotubes / J. Sloan [et al.] // *Chemical Physics Letters*. — 2000. — oct. — Vol. 329, no. 1-2. — P. 61–65. — URL: [https://doi.org/10.1016/s0009-2614\(00\)00998-2](https://doi.org/10.1016/s0009-2614(00)00998-2).
35. Integral atomic layer architectures of 1D crystals inserted into single walled carbon nanotubes / Jeremy Sloan [et al.] // *Chemical Communications*. — 2002. — apr. — no. 13. — P. 1319–1332. — URL: <https://doi.org/10.1039/b200537a>.
36. Structural changes induced in nanocrystals of binary compounds confined within single walled carbon nanotubes: a brief review / Jeremy Sloan [et al.] // *Inorganica Chimica Acta*. — 2002. — mar. — Vol. 330, no. 1. — P. 1–12. — URL: [https://doi.org/10.1016/s0020-1693\(01\)00774-5](https://doi.org/10.1016/s0020-1693(01)00774-5).
37. One-Dimensional Crystals inside Single-Walled Carbon Nanotubes: Growth, Structure and Electronic Properties / Andrei Eliseev [et al.] // *Electronic Properties of Carbon Nanotubes*. — InTech, 2011. — jul. — URL: <https://doi.org/10.5772/19060>.
38. Aspects of crystal growth within carbon nanotubes / Jeremy Sloan [et al.] // *Comptes Rendus Physique*. — 2003. — nov. — Vol. 4, no. 9. — P. 1063–1074. — URL: [https://doi.org/10.1016/s1631-0705\(03\)00102-6](https://doi.org/10.1016/s1631-0705(03)00102-6).
39. Correlation of Structural and Electronic Properties in a New Low-Dimensional Form of Mercury Telluride / Robin Carter [et al.] // *Physical Review Letters*. — 2006. — may. — Vol. 96, no. 21. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevlett.96.215501>.
40. Band gap expansion, shear inversion phase change behaviour and low-voltage induced crystal oscillation in low-dimensional tin selenide crystals / Robin Carter [et al.] // *Dalton Trans*. — 2014. — Vol. 43, no. 20. — P. 7391–7399. — URL: <https://doi.org/10.1039/c4dt00185k>.

41. Kharlamova M. V. Novel approach to tailoring the electronic properties of single-walled carbon nanotubes by the encapsulation of high-melting gallium selenide using a single-step process // *JETP Letters*. — 2013. — nov. — Vol. 98, no. 5. — P. 272–277. — URL: <https://doi.org/10.1134/s0021364013180069>.
42. Kharlamova M. V. Comparative analysis of electronic properties of tin, gallium, and bismuth chalcogenide-filled single-walled carbon nanotubes // *Journal of Materials Science*. — 2014. — aug. — Vol. 49, no. 24. — P. 8402–8411. — URL: <https://doi.org/10.1007/s10853-014-8550-3>.
43. Growth and Characterization of One-Dimensional SnTe Crystals within the Single-Walled Carbon Nanotube Channels / L. V. Yashina [et al.] // *The Journal of Physical Chemistry C*. — 2011. — feb. — Vol. 115, no. 9. — P. 3578–3586. — URL: <https://doi.org/10.1021/jp1107087>.
44. Encapsulation of RexOyClusters within Single-Walled Carbon Nanotubes and Theirin tubuloReduction and Sintering to Re Metal / Pedro M. F. J. Costa [et al.] // *Chemistry of Materials*. — 2005. — dec. — Vol. 17, no. 26. — P. 6579–6582. — URL: <https://doi.org/10.1021/cm0510209>.
45. Light-induced instability of PbO-filled single-wall carbon nanotubes / Martin Hulman [et al.] // *Applied Physics Letters*. — 2004. — sep. — Vol. 85, no. 11. — P. 2068–2070. — URL: <https://doi.org/10.1063/1.1790603>.
46. Abundance of encapsulated C60 in single-wall carbon nanotubes / Beatrice Burteaux [et al.] // *Chemical Physics Letters*. — 1999. — aug. — Vol. 310, no. 1-2. — P. 21–24. — URL: [https://doi.org/10.1016/s0009-2614\(99\)00720-4](https://doi.org/10.1016/s0009-2614(99)00720-4).
47. Toward Controlled Spacing in One-Dimensional Molecular Chains: Alkyl-Chain-Functionalized Fullerenes in Carbon Nanotubes / Thomas W. Chamberlain [et al.] // *Journal of the American Chemical Society*. — 2007. — jul. — Vol. 129, no. 27. — P. 8609–8614. — URL: <https://doi.org/10.1021/ja071803q>.
48. Functionalised endohedral fullerenes in single-walled carbon nanotubes / Maria del Carmen Gimenez-Lopez [et al.] // *Chem. Commun.* — 2011. — Vol. 47, no. 7. — P. 2116–2118. — URL: <https://doi.org/10.1039/c0cc02929g>.
49. High-yield fullerene encapsulation in single-wall carbon nanotubes / H. Kataura [et al.] // *Synthetic Metals*. — 2001. — mar. — Vol. 121, no. 1-3. — P. 1195–1196. — URL: [https://doi.org/10.1016/s0379-6779\(00\)00707-4](https://doi.org/10.1016/s0379-6779(00)00707-4).
50. Direct Imaging of Sc2@C84Molecules Encapsulated Inside Single-Wall Carbon Nanotubes by High Resolution Electron Microscopy with Atomic Sensitivity / K. Suenaga [et al.] // *Physical Review Letters*. — 2003. — feb. — Vol. 90, no. 5. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevlett.90.055506>.
51. Ferrocene-filled single-walled carbon nanotubes / Lunhui Guan [et al.] // *Carbon*. — 2005. — nov. — Vol. 43, no. 13. — P. 2780–2785. — URL: <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2005.05.025>.
52. Diameter-selective encapsulation of metallocenes in single-walled carbon nanotubes / Lain-Jong Li [et al.] // *Nature Materials*. — 2005. — may. — Vol. 4, no. 6. — P. 481–485. — URL: <https://doi.org/10.1038/nmat1396>.

53. A Catalytic Reaction Inside a Single-Walled Carbon Nanotube / Hidetsugu Shiozawa [et al.] // *Advanced Materials*. — 2008. — apr. — Vol. 20, no. 8. — P. 1443–1449. — URL: <https://doi.org/10.1002/adma.200701466>.
54. Nanochemical reactions by laser annealing of ferrocene filled single-walled carbon nanotubes / Antonio Briones [et al.] // *physica status solidi (b)*. — 2011. — sep. — Vol. 248, no. 11. — P. 2488–2491. — URL: <https://doi.org/10.1002/pssb.201100114>.
55. Inner tube growth properties and electronic structure of ferrocene-filled large diameter single-walled carbon nanotubes / Marianna V. Kharlamova [et al.] // *Physica status solidi (b)*. — 2013. — nov. — Vol. 250, no. 12. — P. 2575–2580. — URL: <https://doi.org/10.1002/pssb.201300089>.
56. In situ Raman spectroscopy studies on time-dependent inner tube growth in ferrocene-filled large diameter single-walled carbon nanotubes / Marianna V. Kharlamova [et al.] // *Physica status solidi (b)*. — 2014. — sep. — Vol. 251, no. 12. — P. 2394–2400. — URL: <https://doi.org/10.1002/pssb.201451166>.
57. Temperature dependence of inner tube growth from ferrocene-filled single-walled carbon nanotubes / Xianjie Liu [et al.] // *Physica status solidi (b)*. — 2011. — sep. — Vol. 248, no. 11. — P. 2492–2495. — URL: <https://doi.org/10.1002/pssb.201100116>.
58. In situ filling of metallic single-walled carbon nanotubes with ferrocene molecules / Markus Sauer [et al.] // *Physica status solidi (b)*. — 2012. — oct. — Vol. 249, no. 12. — P. 2408–2411. — URL: <https://doi.org/10.1002/pssb.201200127>.
59. Ferrocene encapsulated in single-wall carbon nanotubes: a precursor to secondary tubes / Hidetsugu Shiozawa [et al.] // *Physica status solidi (b)*. — 2007. — nov. — Vol. 244, no. 11. — P. 4102–4105. — URL: <https://doi.org/10.1002/pssb.200776137>.
60. Fine tuning the charge transfer in carbon nanotubes via the interconversion of encapsulated molecules / H. Shiozawa [et al.] // *Physical Review B*. — 2008. — apr. — Vol. 77, no. 15. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.77.153402>.
61. Ferrocene encapsulation in carbon nanotubes: Various methods of filling and investigation / Dorina Kocsis [et al.] // *Physica status solidi (b)*. — 2011. — sep. — Vol. 248, no. 11. — P. 2512–2515. — URL: <https://doi.org/10.1002/pssb.201100160>.
62. Selective Enhancement of Photoluminescence in Filled Single-Walled Carbon Nanotubes / Xianjie Liu [et al.] // *Advanced Functional Materials*. — 2012. — apr. — Vol. 22, no. 15. — P. 3202–3208. — URL: <https://doi.org/10.1002/adfm.201200224>.
63. Electronic Structure of Carbon Nanotubes with Ultrahigh Curvature / Wolfgang Plank [et al.] // *ACS Nano*. — 2010. — jul. — Vol. 4, no. 8. — P. 4515–4522. — URL: <https://doi.org/10.1021/nn100615d>.
64. Internal charge transfer in metallicity sorted ferrocene filled carbon nanotube hybrids / Markus Sauer [et al.] // *Carbon*. — 2013. — aug. — Vol. 59. — P. 237–245. — URL: <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2013.03.014>.
65. Growth dynamics of inner tubes inside cobaltocene-filled single-walled carbon nanotubes / M. V. Kharlamova [et al.] // *Applied Physics A*. — 2016. — jul. — Vol. 122, no. 8. — URL: <https://doi.org/10.1007/s00339-016-0282-6>.

66. Chiral vector and metal catalyst-dependent growth kinetics of single-wall carbon nanotubes / Marianna V. Kharlamova [et al.] // *Carbon*. — 2018. — jul. — Vol. 133. — P. 283–292. — URL: <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2018.03.046>.
67. Doping of single-walled carbon nanotubes controlled via chemical transformation of encapsulated nickelocene / Marianna V. Kharlamova [et al.] // *Nanoscale*. — 2015. — Vol. 7, no. 4. — P. 1383–1391. — URL: <https://doi.org/10.1039/c4nr05586a>.
68. Temperature-dependent inner tube growth and electronic structure of nickelocene-filled single-walled carbon nanotubes / Marianna V. Kharlamova [et al.] // *Physica status solidi (b)*. — 2015. — aug. — Vol. 252, no. 11. — P. 2485–2490. — URL: <https://doi.org/10.1002/pssb.201552206>.
69. Chirality-dependent growth of single-wall carbon nanotubes as revealed inside nano-test tubes / Marianna V. Kharlamova [et al.] // *Nanoscale*. — 2017. — Vol. 9, no. 23. — P. 7998–8006. — URL: <https://doi.org/10.1039/c7nr01846k>.
70. Inner tube growth and electronic properties of metallicity-sorted nickelocene-filled semi-conducting single-walled carbon nanotubes / M. V. Kharlamova [et al.] // *Applied Physics A*. — 2018. — feb. — Vol. 124, no. 3. — URL: <https://doi.org/10.1007/s00339-018-1679-1>.
71. Screening the Missing Electron: Nanochemistry in Action / H. Shiozawa [et al.] // *Physical Review Letters*. — 2009. — jan. — Vol. 102, no. 4. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevlett.102.046804>.
72. Electronic properties of single-walled carbon nanotubes encapsulating a cerium organometallic compound / Hidetsugu Shiozawa [et al.] // *Physica status solidi (b)*. — 2009. — nov. — Vol. 246, no. 11-12. — P. 2626–2630. — URL: <https://doi.org/10.1002/pssb.200982344>.
73. Zhang Rufan, Zhang Yingying, Wei Fei. Horizontally aligned carbon nanotube arrays: growth mechanism, controlled synthesis, characterization, properties and applications // *Chemical Society Reviews*. — 2017. — Vol. 46, no. 12. — P. 3661–3715. — URL: <https://doi.org/10.1039/c7cs00104e>.
74. Carbon Nanotubes: Present and Future Commercial Applications / Michael F. L. De Volder [et al.] // *Science*. — 2013. — jan. — Vol. 339, no. 6119. — P. 535–539. — URL: <https://doi.org/10.1126/science.1222453>.
75. Carbon nanomaterials for electronics, optoelectronics, photovoltaics, and sensing / Deep Jariwala [et al.] // *Chem. Soc. Rev.* — 2013. — Vol. 42, no. 7. — P. 2824–2860. — URL: <https://doi.org/10.1039/c2cs35335k>.
76. In situ evidence for chirality-dependent growth rates of individual carbon nanotubes / Rahul Rao [et al.] // *Nature Materials*. — 2012. — jan. — Vol. 11, no. 3. — P. 213–216. — URL: <https://doi.org/10.1038/nmat3231>.
77. Self-Deactivation of Single-Walled Carbon Nanotube Growth Studied by inSitu Raman Measurements / Matthieu Picher [et al.] // *Nano Letters*. — 2009. — feb. — Vol. 9, no. 2. — P. 542–547. — URL: <https://doi.org/10.1021/nl802661z>.
78. In situ study of single-walled carbon nanotube growth in an environmental scanning electron microscope / H-A Mehedi [et al.] // *Nanotechnology*. — 2016. — nov. — Vol. 27, no. 50. — P. 505701. — URL: <https://doi.org/10.1088/0957-4484/27/50/505701>.


79. Increased chemical reactivity of single-walled carbon nanotubes on oxide substrates: In situ imaging and effect of electron and laser irradiations / Hasan al Mehedi [et al.] // Nano Research. — 2015. — dec. — Vol. 9, no. 2. — P. 517–529. — URL: <https://doi.org/10.1007/s12274-015-0933-5>.
80. Structural Properties of Double-Walled Carbon Nanotubes Driven by Mechanical Inter-layer Coupling / Ahmed Ghedjatti [et al.] // ACS Nano. — 2017. — may. — Vol. 11, no. 5. — P. 4840–4847. — URL: <https://doi.org/10.1021/acsnano.7b01328>.
81. Raman spectroscopy of graphene and carbon nanotubes / R. Saito [et al.] // Advances in Physics. — 2011. — jun. — Vol. 60, no. 3. — P. 413–550. — URL: <https://doi.org/10.1080/00018732.2011.582251>.
82. Sfeir M. Y. Probing Electronic Transitions in Individual Carbon Nanotubes by Rayleigh Scattering // Science. — 2004. — nov. — Vol. 306, no. 5701. — P. 1540–1543. — URL: <https://doi.org/10.1126/science.1103294>.
83. On-Chip Rayleigh Imaging and Spectroscopy of Carbon Nanotubes / Daniel Y. Joh [et al.] // Nano Letters. — 2011. — jan. — Vol. 11, no. 1. — P. 1–7. — URL: <https://doi.org/10.1021/nl1012568>.
84. True-color real-time imaging and spectroscopy of carbon nanotubes on substrates using enhanced Rayleigh scattering / Wenyun Wu [et al.] // Nano Research. — 2015. — aug. — Vol. 8, no. 8. — P. 2721–2732. — URL: <https://doi.org/10.1007/s12274-015-0779-x>.
85. Laser-based imaging of individual carbon nanostructures / Robin W. Havener [et al.] // NPG Asia Materials. — 2011. — oct. — Vol. 3, no. 10. — P. 91–99. — URL: <https://doi.org/10.1038/asiamat.2011.145>.
86. Lefebvre Jacques, Finnie Paul. Polarized light microscopy and spectroscopy of individual single-walled carbon nanotubes // Nano Research. — 2011. — may. — Vol. 4, no. 8. — P. 788–794. — URL: <https://doi.org/10.1007/s12274-011-0135-8>.
87. High-throughput optical imaging and spectroscopy of individual carbon nanotubes in devices / Kaihui Liu [et al.] // Nature Nanotechnology. — 2013. — nov. — Vol. 8, no. 12. — P. 917–922. — URL: <https://doi.org/10.1038/nnano.2013.227>.
88. High-Throughput Determination of Statistical Structure Information for Horizontal Carbon Nanotube Arrays by Optical Imaging / Shibin Deng [et al.] // Advanced Materials. — 2016. — jan. — Vol. 28, no. 10. — P. 2018–2023. — URL: <https://doi.org/10.1002/adma.201505253>.
89. Hwang Jaesuk, Moerner W.E. Interferometry of a single nanoparticle using the Gouy phase of a focused laser beam // Optics Communications. — 2007. — dec. — Vol. 280, no. 2. — P. 487–491. — URL: <https://doi.org/10.1016/j.optcom.2007.08.032>.

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  0000-0002-0725-9416

Web of Science ResearcherID  I-5739-2014

SCOPUS ID  57201126207

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



E-mail: ekaterina.torutanova@yandex.ru

ORCID iD  0000-0002-1443-7946

Web of Science ResearcherID  AAX-8439-2021

@auxrussian@auxenglish@auxrussian@auxenglish

Investigation of optical transmission and reflection of a nanocomposite with inclusions from carbon nanomaterials

K. K. Altunin , E. V. Torutanova 

Ulyanovsk State Pedagogical University, 432071, Ulyanovsk, Russia

Submitted June 7, 2021

Resubmitted June 17, 2021

Published September 9, 2021

Abstract. The results of studying the optical transmission and reflection of a nanocomposite with nanosized inclusions of carbon nanomaterials are considered. A theoretical model has been constructed to describe optical processes in nanocomposite structures with nanosized carbon nanotube inclusions. The method of numerical calculation of the effective optical parameters of nanocomposite structures with inclusions from carbon nanotubes has been modified. A numerical model of optical processes in nanocomposite structures with inclusions of carbon nanotubes has been constructed and a computer program in the Python programming language has been developed to calculate the optical characteristics of a nanocomposite structure with inclusions in the form of carbon nanotubes. The numerical calculations of the optical parameters of the nanocomposite structure with carbon nanotubes have shown that it is possible to significantly increase the optical transmission at certain geometric parameters of the nanocomposite structure with carbon nanotubes.

Keywords: nanocomposite, nanocomposite film, carbon nanomaterial, optical radiation, optical transmittance, optical reflection coefficient, antireflection optical coating, optical devices, nanotube

PACS: 42.25.Bs

@auxrussian@auxenglish@auxrussian@auxenglish@auxrussian@auxenglish@auxrussian@auxenglish

References

1. Ion irradiation effects on conduction in single-wall carbon nanotube networks / V. Skákalová [et al.] // Applied Physics A. — 2008. — jan. — Vol. 90, no. 4. — P. 597–602. — URL: <https://doi.org/10.1007/s00339-007-4383-0>.
2. Yosida Y., Oguro I. Variable range hopping conduction in bulk samples composed of single-walled carbon nanotubes // Journal of Applied Physics. — 1999. — jul. — Vol. 86, no. 2. — P. 999–1003. — URL: <https://doi.org/10.1063/1.370838>.
3. Magnetoresistance of an entangled single-wall carbon-nanotube network / G. T. Kim [et al.] // Physical Review B. — 1998. — dec. — Vol. 58, no. 24. — P. 16064–16069. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.58.16064>.
4. Takano Takumi, Takenobu Taishi, Iwasa Yoshihiro. Enhancement of Carrier Hopping by Doping in Single Walled Carbon Nanotube Films // Journal of the Physical Society of Japan. — 2008. — dec. — Vol. 77, no. 12. — P. 124709. — URL: <https://doi.org/10.1143/jpsj.77.124709>.

5. Quantum Transport in a Multiwalled Carbon Nanotube / L. Langer [et al.] // *Physical Review Letters*. — 1996. — jan. — Vol. 76, no. 3. — P. 479–482. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevlett.76.479>.
6. Vavro J., Kikkawa J. M., Fischer J. E. Metal-insulator transition in doped single-wall carbon nanotubes // *Physical Review B*. — 2005. — apr. — Vol. 71, no. 15. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.71.155410>.
7. Variable Range Hopping in Single-Wall Carbon Nanotube Thin Films: A Processing–Structure–Property Relationship Study / Sida Luo [et al.] // *Langmuir*. — 2013. — jun. — Vol. 29, no. 27. — P. 8694–8702. — URL: <https://doi.org/10.1021/la401264r>.
8. Orientation dependence of magneto-resistance behaviour in a carbon nanotube rope / G.C. McIntosh [et al.] // *Thin Solid Films*. — 2002. — sep. — Vol. 417, no. 1-2. — P. 67–71. — URL: [https://doi.org/10.1016/s0040-6090\(02\)00592-8](https://doi.org/10.1016/s0040-6090(02)00592-8).
9. Comprehensive model of the optical spectra of carbon nanotubes on a substrate by polarized microscopy / Léonard Monniello [et al.] // *Physical Review B*. — 2019. — mar. — Vol. 99, no. 11. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.99.115431>.
10. Endo Morinobu, Strano Michael S., Ajayan Pulickel M. Potential Applications of Carbon Nanotubes // *Topics in Applied Physics*. — Springer Berlin Heidelberg, 2007. — P. 13–62. — URL: https://doi.org/10.1007/978-3-540-72865-8_2.
11. Chiang Wei-Hung, Sankaran R. Mohan. Linking catalyst composition to chirality distributions of as-grown single-walled carbon nanotubes by tuning NixFe1-x nanoparticles // *Nature Materials*. — 2009. — sep. — Vol. 8, no. 11. — P. 882–886. — URL: <https://doi.org/10.1038/nmat2531>.
12. Narrow-Chirality Distributed Single-Walled Carbon Nanotube Growth from Nonmagnetic Catalyst / Zohreh Ghorannevis [et al.] // *Journal of the American Chemical Society*. — 2010. — jul. — Vol. 132, no. 28. — P. 9570–9572. — URL: <https://doi.org/10.1021/ja103362j>.
13. Chiral-Selective Growth of Single-Walled Carbon Nanotubes on Lattice-Mismatched Epitaxial Cobalt Nanoparticles / Maoshuai He [et al.] // *Scientific Reports*. — 2013. — mar. — Vol. 3, no. 1. — URL: <https://doi.org/10.1038/srep01460>.
14. Chirality-specific growth of single-walled carbon nanotubes on solid alloy catalysts / Feng Yang [et al.] // *Nature*. — 2014. — jun. — Vol. 510, no. 7506. — P. 522–524. — URL: <https://doi.org/10.1038/nature13434>.
15. Chemical vapor deposition synthesis of near-zigzag single-walled carbon nanotubes with stable tube-catalyst interface / Qiuchen Zhao [et al.] // *Science Advances*. — 2016. — may. — Vol. 2, no. 5. — P. e1501729. — URL: <https://doi.org/10.1126/sciadv.1501729>.
16. Isolation of 1 nm Diameter Single-Wall Carbon Nanotube Species Using Aqueous Two-Phase Extraction / Jeffrey A. Fagan [et al.] // *ACS Nano*. — 2015. — apr. — Vol. 9, no. 5. — P. 5377–5390. — URL: <https://doi.org/10.1021/acsnano.5b01123>.

17. Green Alexander A., Hersam Mark C. Nearly Single-Chirality Single-Walled Carbon Nanotubes Produced via Orthogonal Iterative Density Gradient Ultracentrifugation // *Advanced Materials*. — 2011. — apr. — Vol. 23, no. 19. — P. 2185–2190. — URL: <https://doi.org/10.1002/adma.201100034>.
18. Large-scale single-chirality separation of single-wall carbon nanotubes by simple gel chromatography / Huaping Liu [et al.] // *Nature Communications*. — 2011. — may. — Vol. 2, no. 1. — URL: <https://doi.org/10.1038/ncomms1313>.
19. DNA sequence motifs for structure-specific recognition and separation of carbon nanotubes / Xiaomin Tu [et al.] // *Nature*. — 2009. — jul. — Vol. 460, no. 7252. — P. 250–253. — URL: <https://doi.org/10.1038/nature08116>.
20. Industrial-scale separation of high-purity single-chirality single-wall carbon nanotubes for biological imaging / Yohei Yomogida [et al.] // *Nature Communications*. — 2016. — jun. — Vol. 7, no. 1. — URL: <https://doi.org/10.1038/ncomms12056>.
21. Kharlamova M. V. Electronic properties of pristine and modified single-walled carbon nanotubes // *Physics-Uspekhi*. — 2013. — nov. — Vol. 56, no. 11. — P. 1047–1073. — URL: <https://doi.org/10.3367/ufne.0183.201311a.1145>.
22. Kharlamova Marianna V. Advances in tailoring the electronic properties of single-walled carbon nanotubes // *Progress in Materials Science*. — 2016. — apr. — Vol. 77. — P. 125–211. — URL: <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2015.09.001>.
23. Smith Brian W., Monthieux Marc, Luzzi David E. Encapsulated C60 in carbon nanotubes // *Nature*. — 1998. — nov. — Vol. 396, no. 6709. — P. 323–324. — URL: <https://doi.org/10.1038/24521>.
24. The opening and filling of single walled carbon nanotubes (SWTs) / Jeremy Sloan [et al.] // *Chemical Communications*. — 1998. — no. 3. — P. 347–348. — URL: <https://doi.org/10.1039/a707632k>.
25. Metal Nanowires and Intercalated Metal Layers in Single-Walled Carbon Nanotube Bundles / A. Govindaraj [et al.] // *Chemistry of Materials*. — 2000. — jan. — Vol. 12, no. 1. — P. 202–205. — URL: <https://doi.org/10.1021/cm990546o>.
26. Metallization of single-wall carbon nanotube thin films induced by gas phase iodination / A. A. Tonkikh [et al.] // *Carbon*. — 2015. — nov. — Vol. 94. — P. 768–774. — URL: <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2015.07.062>.
27. Silver filled single-wall carbon nanotubes—synthesis, structural and electronic properties / E. Borowiak-Palen [et al.] // *Nanotechnology*. — 2006. — apr. — Vol. 17, no. 9. — P. 2415–2419. — URL: <https://doi.org/10.1088/0957-4484/17/9/058>.
28. Characterization of single wall carbon nanotubes filled with silver and with chromium compounds / P. Corio [et al.] // *Chemical Physics Letters*. — 2004. — jan. — Vol. 383, no. 5-6. — P. 475–480. — URL: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2003.11.061>.
29. Kharlamova M. V., Niu J. J. Comparison of metallic silver and copper doping effects on single-walled carbon nanotubes // *Applied Physics A*. — 2012. — aug. — Vol. 109, no. 1. — P. 25–29. — URL: <https://doi.org/10.1007/s00339-012-7091-3>.

30. Kharlamova M. V., Niu J. J. Donor doping of single-walled carbon nanotubes by filling of channels with silver // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. — 2012. — sep. — Vol. 115, no. 3. — P. 485–491. — URL: <https://doi.org/10.1134/s1063776112080092>.
31. Kharlamova M. V., Niu J. J. New method of the directional modification of the electronic structure of single-walled carbon nanotubes by filling channels with metallic copper from a liquid phase // *JETP Letters*. — 2012. — may. — Vol. 95, no. 6. — P. 314–319. — URL: <https://doi.org/10.1134/s0021364012060057>.
32. Conducting linear chains of sulphur inside carbon nanotubes / Toshihiko Fujimori [et al.] // *Nature Communications*. — 2013. — jul. — Vol. 4, no. 1. — URL: <https://doi.org/10.1038/ncomms3162>.
33. An encapsulated helical one-dimensional cobalt iodide nanostructure / Eilidh Philp [et al.] // *Nature Materials*. — 2003. — nov. — Vol. 2, no. 12. — P. 788–791. — URL: <https://doi.org/10.1038/nmat1020>.
34. Two layer 4:4 co-ordinated KI crystals grown within single walled carbon nanotubes / J. Sloan [et al.] // *Chemical Physics Letters*. — 2000. — oct. — Vol. 329, no. 1-2. — P. 61–65. — URL: [https://doi.org/10.1016/s0009-2614\(00\)00998-2](https://doi.org/10.1016/s0009-2614(00)00998-2).
35. Integral atomic layer architectures of 1D crystals inserted into single walled carbon nanotubes / Jeremy Sloan [et al.] // *Chemical Communications*. — 2002. — apr. — no. 13. — P. 1319–1332. — URL: <https://doi.org/10.1039/b200537a>.
36. Structural changes induced in nanocrystals of binary compounds confined within single walled carbon nanotubes: a brief review / Jeremy Sloan [et al.] // *Inorganica Chimica Acta*. — 2002. — mar. — Vol. 330, no. 1. — P. 1–12. — URL: [https://doi.org/10.1016/s0020-1693\(01\)00774-5](https://doi.org/10.1016/s0020-1693(01)00774-5).
37. One-Dimensional Crystals inside Single-Walled Carbon Nanotubes: Growth, Structure and Electronic Properties / Andrei Eliseev [et al.] // *Electronic Properties of Carbon Nanotubes*. — InTech, 2011. — jul. — URL: <https://doi.org/10.5772/19060>.
38. Aspects of crystal growth within carbon nanotubes / Jeremy Sloan [et al.] // *Comptes Rendus Physique*. — 2003. — nov. — Vol. 4, no. 9. — P. 1063–1074. — URL: [https://doi.org/10.1016/s1631-0705\(03\)00102-6](https://doi.org/10.1016/s1631-0705(03)00102-6).
39. Correlation of Structural and Electronic Properties in a New Low-Dimensional Form of Mercury Telluride / Robin Carter [et al.] // *Physical Review Letters*. — 2006. — may. — Vol. 96, no. 21. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevlett.96.215501>.
40. Band gap expansion, shear inversion phase change behaviour and low-voltage induced crystal oscillation in low-dimensional tin selenide crystals / Robin Carter [et al.] // *Dalton Trans*. — 2014. — Vol. 43, no. 20. — P. 7391–7399. — URL: <https://doi.org/10.1039/c4dt00185k>.
41. Kharlamova M. V. Novel approach to tailoring the electronic properties of single-walled carbon nanotubes by the encapsulation of high-melting gallium selenide using a single-step process // *JETP Letters*. — 2013. — nov. — Vol. 98, no. 5. — P. 272–277. — URL: <https://doi.org/10.1134/s0021364013180069>.

42. Kharlamova M. V. Comparative analysis of electronic properties of tin, gallium, and bismuth chalcogenide-filled single-walled carbon nanotubes // *Journal of Materials Science*. — 2014. — aug. — Vol. 49, no. 24. — P. 8402–8411. — URL: <https://doi.org/10.1007/s10853-014-8550-3>.
43. Growth and Characterization of One-Dimensional SnTe Crystals within the Single-Walled Carbon Nanotube Channels / L. V. Yashina [et al.] // *The Journal of Physical Chemistry C*. — 2011. — feb. — Vol. 115, no. 9. — P. 3578–3586. — URL: <https://doi.org/10.1021/jp1107087>.
44. Encapsulation of RexOyClusters within Single-Walled Carbon Nanotubes and Theirin tubuloReduction and Sintering to Re Metal / Pedro M. F. J. Costa [et al.] // *Chemistry of Materials*. — 2005. — dec. — Vol. 17, no. 26. — P. 6579–6582. — URL: <https://doi.org/10.1021/cm0510209>.
45. Light-induced instability of PbO-filled single-wall carbon nanotubes / Martin Hulman [et al.] // *Applied Physics Letters*. — 2004. — sep. — Vol. 85, no. 11. — P. 2068–2070. — URL: <https://doi.org/10.1063/1.1790603>.
46. Abundance of encapsulated C60 in single-wall carbon nanotubes / Beatrice Burtiaux [et al.] // *Chemical Physics Letters*. — 1999. — aug. — Vol. 310, no. 1-2. — P. 21–24. — URL: [https://doi.org/10.1016/s0009-2614\(99\)00720-4](https://doi.org/10.1016/s0009-2614(99)00720-4).
47. Toward Controlled Spacing in One-Dimensional Molecular Chains: Alkyl-Chain-Functionalized Fullerenes in Carbon Nanotubes / Thomas W. Chamberlain [et al.] // *Journal of the American Chemical Society*. — 2007. — jul. — Vol. 129, no. 27. — P. 8609–8614. — URL: <https://doi.org/10.1021/ja071803q>.
48. Functionalised endohedral fullerenes in single-walled carbon nanotubes / Maria del Carmen Gimenez-Lopez [et al.] // *Chem. Commun.* — 2011. — Vol. 47, no. 7. — P. 2116–2118. — URL: <https://doi.org/10.1039/c0cc02929g>.
49. High-yield fullerene encapsulation in single-wall carbon nanotubes / H. Kataura [et al.] // *Synthetic Metals*. — 2001. — mar. — Vol. 121, no. 1-3. — P. 1195–1196. — URL: [https://doi.org/10.1016/s0379-6779\(00\)00707-4](https://doi.org/10.1016/s0379-6779(00)00707-4).
50. Direct Imaging of Sc₂@C₈₄ Molecules Encapsulated Inside Single-Wall Carbon Nanotubes by High Resolution Electron Microscopy with Atomic Sensitivity / K. Suenaga [et al.] // *Physical Review Letters*. — 2003. — feb. — Vol. 90, no. 5. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevlett.90.055506>.
51. Ferrocene-filled single-walled carbon nanotubes / Lunhui Guan [et al.] // *Carbon*. — 2005. — nov. — Vol. 43, no. 13. — P. 2780–2785. — URL: <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2005.05.025>.
52. Diameter-selective encapsulation of metallocenes in single-walled carbon nanotubes / Lain-Jong Li [et al.] // *Nature Materials*. — 2005. — may. — Vol. 4, no. 6. — P. 481–485. — URL: <https://doi.org/10.1038/nmat1396>.
53. A Catalytic Reaction Inside a Single-Walled Carbon Nanotube / Hidetsugu Shiozawa [et al.] // *Advanced Materials*. — 2008. — apr. — Vol. 20, no. 8. — P. 1443–1449. — URL: <https://doi.org/10.1002/adma.200701466>.

54. Nanochemical reactions by laser annealing of ferrocene filled single-walled carbon nanotubes / Antonio Briones [et al.] // *physica status solidi (b)*. — 2011. — sep. — Vol. 248, no. 11. — P. 2488–2491. — URL: <https://doi.org/10.1002/pssb.201100114>.
55. Inner tube growth properties and electronic structure of ferrocene-filled large diameter single-walled carbon nanotubes / Marianna V. Kharlamova [et al.] // *Physica status solidi (b)*. — 2013. — nov. — Vol. 250, no. 12. — P. 2575–2580. — URL: <https://doi.org/10.1002/pssb.201300089>.
56. In situ Raman spectroscopy studies on time-dependent inner tube growth in ferrocene-filled large diameter single-walled carbon nanotubes / Marianna V. Kharlamova [et al.] // *Physica status solidi (b)*. — 2014. — sep. — Vol. 251, no. 12. — P. 2394–2400. — URL: <https://doi.org/10.1002/pssb.201451166>.
57. Temperature dependence of inner tube growth from ferrocene-filled single-walled carbon nanotubes / Xianjie Liu [et al.] // *Physica status solidi (b)*. — 2011. — sep. — Vol. 248, no. 11. — P. 2492–2495. — URL: <https://doi.org/10.1002/pssb.201100116>.
58. In situ filling of metallic single-walled carbon nanotubes with ferrocene molecules / Markus Sauer [et al.] // *Physica status solidi (b)*. — 2012. — oct. — Vol. 249, no. 12. — P. 2408–2411. — URL: <https://doi.org/10.1002/pssb.201200127>.
59. Ferrocene encapsulated in single-wall carbon nanotubes: a precursor to secondary tubes / Hidetsugu Shiozawa [et al.] // *Physica status solidi (b)*. — 2007. — nov. — Vol. 244, no. 11. — P. 4102–4105. — URL: <https://doi.org/10.1002/pssb.200776137>.
60. Fine tuning the charge transfer in carbon nanotubes via the interconversion of encapsulated molecules / H. Shiozawa [et al.] // *Physical Review B*. — 2008. — apr. — Vol. 77, no. 15. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.77.153402>.
61. Ferrocene encapsulation in carbon nanotubes: Various methods of filling and investigation / Dorina Kocsis [et al.] // *Physica status solidi (b)*. — 2011. — sep. — Vol. 248, no. 11. — P. 2512–2515. — URL: <https://doi.org/10.1002/pssb.201100160>.
62. Selective Enhancement of Photoluminescence in Filled Single-Walled Carbon Nanotubes / Xianjie Liu [et al.] // *Advanced Functional Materials*. — 2012. — apr. — Vol. 22, no. 15. — P. 3202–3208. — URL: <https://doi.org/10.1002/adfm.201200224>.
63. Electronic Structure of Carbon Nanotubes with Ultrahigh Curvature / Wolfgang Plank [et al.] // *ACS Nano*. — 2010. — jul. — Vol. 4, no. 8. — P. 4515–4522. — URL: <https://doi.org/10.1021/nn100615d>.
64. Internal charge transfer in metallicity sorted ferrocene filled carbon nanotube hybrids / Markus Sauer [et al.] // *Carbon*. — 2013. — aug. — Vol. 59. — P. 237–245. — URL: <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2013.03.014>.
65. Growth dynamics of inner tubes inside cobaltocene-filled single-walled carbon nanotubes / M. V. Kharlamova [et al.] // *Applied Physics A*. — 2016. — jul. — Vol. 122, no. 8. — URL: <https://doi.org/10.1007/s00339-016-0282-6>.
66. Chiral vector and metal catalyst-dependent growth kinetics of single-wall carbon nanotubes / Marianna V. Kharlamova [et al.] // *Carbon*. — 2018. — jul. — Vol. 133. — P. 283–292. — URL: <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2018.03.046>.


67. Doping of single-walled carbon nanotubes controlled via chemical transformation of encapsulated nickelocene / Marianna V. Kharlamova [et al.] // *Nanoscale*. — 2015. — Vol. 7, no. 4. — P. 1383–1391. — URL: <https://doi.org/10.1039/c4nr05586a>.
68. Temperature-dependent inner tube growth and electronic structure of nickelocene-filled single-walled carbon nanotubes / Marianna V. Kharlamova [et al.] // *Physica status solidi (b)*. — 2015. — aug. — Vol. 252, no. 11. — P. 2485–2490. — URL: <https://doi.org/10.1002/pssb.201552206>.
69. Chirality-dependent growth of single-wall carbon nanotubes as revealed inside nano-test tubes / Marianna V. Kharlamova [et al.] // *Nanoscale*. — 2017. — Vol. 9, no. 23. — P. 7998–8006. — URL: <https://doi.org/10.1039/c7nr01846k>.
70. Inner tube growth and electronic properties of metallicity-sorted nickelocene-filled semi-conducting single-walled carbon nanotubes / M. V. Kharlamova [et al.] // *Applied Physics A*. — 2018. — feb. — Vol. 124, no. 3. — URL: <https://doi.org/10.1007/s00339-018-1679-1>.
71. Screening the Missing Electron: Nanochemistry in Action / H. Shiozawa [et al.] // *Physical Review Letters*. — 2009. — jan. — Vol. 102, no. 4. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevlett.102.046804>.
72. Electronic properties of single-walled carbon nanotubes encapsulating a cerium organometallic compound / Hidetsugu Shiozawa [et al.] // *Physica status solidi (b)*. — 2009. — nov. — Vol. 246, no. 11-12. — P. 2626–2630. — URL: <https://doi.org/10.1002/pssb.200982344>.
73. Zhang Rufan, Zhang Yingying, Wei Fei. Horizontally aligned carbon nanotube arrays: growth mechanism, controlled synthesis, characterization, properties and applications // *Chemical Society Reviews*. — 2017. — Vol. 46, no. 12. — P. 3661–3715. — URL: <https://doi.org/10.1039/c7cs00104e>.
74. Carbon Nanotubes: Present and Future Commercial Applications / Michael F. L. De Volder [et al.] // *Science*. — 2013. — jan. — Vol. 339, no. 6119. — P. 535–539. — URL: <https://doi.org/10.1126/science.1222453>.
75. Carbon nanomaterials for electronics, optoelectronics, photovoltaics, and sensing / Deep Jariwala [et al.] // *Chem. Soc. Rev.* — 2013. — Vol. 42, no. 7. — P. 2824–2860. — URL: <https://doi.org/10.1039/c2cs35335k>.
76. In situ evidence for chirality-dependent growth rates of individual carbon nanotubes / Rahul Rao [et al.] // *Nature Materials*. — 2012. — jan. — Vol. 11, no. 3. — P. 213–216. — URL: <https://doi.org/10.1038/nmat3231>.
77. Self-Deactivation of Single-Walled Carbon Nanotube Growth Studied by inSitu Raman Measurements / Matthieu Picher [et al.] // *Nano Letters*. — 2009. — feb. — Vol. 9, no. 2. — P. 542–547. — URL: <https://doi.org/10.1021/nl802661z>.
78. In situ study of single-walled carbon nanotube growth in an environmental scanning electron microscope / H-A Mehedi [et al.] // *Nanotechnology*. — 2016. — nov. — Vol. 27, no. 50. — P. 505701. — URL: <https://doi.org/10.1088/0957-4484/27/50/505701>.

79. Increased chemical reactivity of single-walled carbon nanotubes on oxide substrates: In situ imaging and effect of electron and laser irradiations / Hasan al Mehedi [et al.] // *Nano Research*. — 2015. — dec. — Vol. 9, no. 2. — P. 517–529. — URL: <https://doi.org/10.1007/s12274-015-0933-5>.
80. Structural Properties of Double-Walled Carbon Nanotubes Driven by Mechanical Inter-layer Coupling / Ahmed Ghedjatti [et al.] // *ACS Nano*. — 2017. — may. — Vol. 11, no. 5. — P. 4840–4847. — URL: <https://doi.org/10.1021/acsnano.7b01328>.
81. Raman spectroscopy of graphene and carbon nanotubes / R. Saito [et al.] // *Advances in Physics*. — 2011. — jun. — Vol. 60, no. 3. — P. 413–550. — URL: <https://doi.org/10.1080/00018732.2011.582251>.
82. Sfeir M. Y. Probing Electronic Transitions in Individual Carbon Nanotubes by Rayleigh Scattering // *Science*. — 2004. — nov. — Vol. 306, no. 5701. — P. 1540–1543. — URL: <https://doi.org/10.1126/science.1103294>.
83. On-Chip Rayleigh Imaging and Spectroscopy of Carbon Nanotubes / Daniel Y. Joh [et al.] // *Nano Letters*. — 2011. — jan. — Vol. 11, no. 1. — P. 1–7. — URL: <https://doi.org/10.1021/nl1012568>.
84. True-color real-time imaging and spectroscopy of carbon nanotubes on substrates using enhanced Rayleigh scattering / Wenyun Wu [et al.] // *Nano Research*. — 2015. — aug. — Vol. 8, no. 8. — P. 2721–2732. — URL: <https://doi.org/10.1007/s12274-015-0779-x>.
85. Laser-based imaging of individual carbon nanostructures / Robin W. Havener [et al.] // *NPG Asia Materials*. — 2011. — oct. — Vol. 3, no. 10. — P. 91–99. — URL: <https://doi.org/10.1038/asiamat.2011.145>.
86. Lefebvre Jacques, Finnie Paul. Polarized light microscopy and spectroscopy of individual single-walled carbon nanotubes // *Nano Research*. — 2011. — may. — Vol. 4, no. 8. — P. 788–794. — URL: <https://doi.org/10.1007/s12274-011-0135-8>.
87. High-throughput optical imaging and spectroscopy of individual carbon nanotubes in devices / Kaihui Liu [et al.] // *Nature Nanotechnology*. — 2013. — nov. — Vol. 8, no. 12. — P. 917–922. — URL: <https://doi.org/10.1038/nnano.2013.227>.
88. High-Throughput Determination of Statistical Structure Information for Horizontal Carbon Nanotube Arrays by Optical Imaging / Shibin Deng [et al.] // *Advanced Materials*. — 2016. — jan. — Vol. 28, no. 10. — P. 2018–2023. — URL: <https://doi.org/10.1002/adma.201505253>.
89. Hwang Jaesuk, Moerner W.E. Interferometry of a single nanoparticle using the Gouy phase of a focused laser beam // *Optics Communications*. — 2007. — dec. — Vol. 280, no. 2. — P. 487–491. — URL: <https://doi.org/10.1016/j.optcom.2007.08.032>.

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

Ekaterina Vyacheslavovna Torutanova — student of the Faculty of Physics, Mathematics and Technological Education of the Ulyanovsk State Pedagogical University, Ulyanovsk, Russia.

E-mail: ekaterina.torutanova@yandex.ru

ORCID iD  0000-0002-1443-7946

Web of Science ResearcherID  AAX-8439-2021

@auxrussian@auxenglish@auxrussian@auxenglish@auxrussian@auxenglish@auxrussian@auxenglish