

# Секция 1

---

## Физические науки

---

### 1.1 Оптика

Научная статья

УДК 535.31

ББК 22.343

ГРНТИ 29.31.21

ВАК 1.3.6.

PACS 42.25.Bs

OCIS 310.6860

MSC 00A79

## Исследование оптического отражения и пропускания нанокомпозитной структуры с металлическими наночастицами

К. К. Алтунин , Е. С. Железникова , В. В. Соколова  <sup>1</sup>

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

Поступила в редакцию 5 октября 2023 года

После переработки 12 октября 2023 года

Опубликована 12 декабря 2023 года

---

**Аннотация.** Рассматривается оптическое отражение и пропускание нанокомпозитной структуры с металлическими наночастицами, находящейся в поле оптического излучения. Представлены результаты численных расчётов энергетических коэффициентов оптического отражения и пропускания от поверхности нанокомпозитной плёнки с наночастицами серебра при различных углах падения излучения на поверхность нанокомпозитной плёнки.

**Ключевые слова:** оптическое пропускание, оптическое отражение, оптическое излучение, нанокомпозит, наноструктура, наночастица, наночастицы серебра

---

<sup>1</sup>E-mail: sokolovavasilevna2002@inbox.ru

## Введение

Актуальность исследования обусловлена возрастающим интересом к наноматериалам с наночастицами. Наноматериалы находят всё более широкое применение в различных технологических процессах получения новых наноразмерных оптоэлектронных приборов. В настоящее время отмечается значительный подъём научного интереса к разработке и исследованию физических свойств нанокompозитных материалов, в которых в качестве включений применяются металлические наночастицы.

Интенсивное развитие технологии создания оптических покрытий приводит к необходимости разработки последовательной теории оптических процессов в различных нанокompозитных покрытиях. В настоящей работе будут рассматриваться нанокompозитные покрытия, содержащие металлические наночастицы. Включение металлических наночастиц в диэлектрическую матрицу приводит к необходимости последовательного учёта квантовомеханических и наноплазмонных процессов. Производство нанокompозитов представляет собой высокотехнологичную отрасль и требует проведения серьёзных научных исследований в области нанотехнологий.

Целью работы является исследование оптических свойств нанокompозитных структур с металлическими наночастицами, находящихся во внешнем поле оптического излучения. Задачи работы состоят из анализа научных работ по классификации наноструктур и описания физических свойств наноструктур с металлическими наночастицами, находящихся во внешнем поле оптического излучения.

Объектом исследования является нанокompозит с металлическими наночастицами. Предметом исследования является система физических характеристик оптических процессов в нанокompозитных структурах с металлическими наночастицами, находящихся во внешнем поле оптического излучения.

В качестве методов исследования используется анализ и моделирование физических характеристик нанокompозитных структур с металлическими наночастицами. Методы исследования включают в себя теоретические методы современной оптики для расчёта оптических характеристик нанокompозитных структур с наночастицами, численные методы расчёта оптических характеристик наноматериалов с наночастицами, методы программирования для реализации численных методов расчёта оптических характеристик нанокompозитных структур, численные методы оптимизации физических параметров оптических процессов в нанокompозитных структурах с наночастицами. В качестве материалов исследования используются нанокompозитные материалы, содержащие наночастицы, которые могут быть изменять распределение по объёму или по поверхности нанокompозитной среды. Материалом исследования является набор нанокompозитных структур с металлическими наночастицами, находящимися в поле оптического излучения.

Гипотеза исследования состоит в том, что если использовать современные методы анализа физических свойств наноструктур с металлическими наночастицами, то можно прогнозировать состояния нанокompозитных сред с металлическими наночастицами в составе более сложных наноструктур в наноразмерных оптоэлектронных приборах и устройствах нанoeлектроники на основе нанокompозитных сред с металлическими наночастицами.

Теоретическая значимость исследования заключается в том, что физические свойства наноматериалов могут быть использованы в создании новой методологии физико-технического образования на основе пополнения научной базы физических свойств наноматериалов. Практическая значимость исследования заключается в совершенствовании материалов темы по изучению физических свойств наноматериалов, которые могут быть использованы для развития методологии физико-технического образования.

## Обзор работ по физическим свойствам нанокompозитов

В поиске новых функциональных материалов одним из наиболее перспективным направлением является разработка композитов со структурами нанометрового размера или квантовыми точками, рассеянными в твёрдых матрицах. В частности, композиты, построенные из аморфных матриц и наноразмерных кластеров высокой плотности металлического, полупроводникового или диэлектрического типа привлекают внимание исследователей благодаря своим отличительным оптическим, электронным, тепловым, или механическим свойствам. Их многочисленные технологические приложения включают в себя элементы с нулевым тепловым расширением, очень твёрдые или архитектурные материалы, костные имплантаты, магнитные подложки дисков памяти, люминесцентные солнечные концентраторы или, в телекоммуникационной отрасли активные и пассивные оптические устройства. Будущие приложения этого типа нанокристаллических композитов, вероятно, будут использовать узкоспециализированные инженерные свойства по запросу. Помимо композиционных изменений и производственного процесса альтернативным способом добавления новых функциональных возможностей материалам в целом и нанокристаллическим композитам в частности является использование технологии высокого давления. Действительно, высокое давление дает возможность синтезировать твёрдые тела с уникальными оптическими, электронными, магнитными или термомеханическими свойствами, что в настоящее время является серьёзной проблемой в материаловедении. Структурные превращения под давлением в нанокристаллических композитах интересны с точки зрения фундаментальной науки, а также очень привлекательны с захватывающей перспективой создания новых материалов. Глубокие изменения фундаментальных свойств нанокристаллических композитов в ответ на повышенное давление могут показать иной путь к развитию технологически важных наноматериалов.

В статье [1] получен боковой фотогальванический эффект с максимальной чувствительностью 308.3 мВ/мм, что является очень большим значением чувствительности в области органических материалов, даже сравнимым с заявленной чувствительностью большинства неорганических материалов.

Переходные электронные устройства, составляющие основу инновационной эволюции современной электроники, относятся к устройствам, которые могут физически исчезнуть по требованию, широко исследовались в различных приложениях [2–4], особенно в новой области, связанной с органическими материалами [5, 6]. Природный биологический материал, белок шелка, обладает превосходными свойствами, такими как биосовместимость, биоразлагаемость и безвредность для окружающей среды [7, 8], что проложило путь ко многим приложениям, включая имплантируемую биоэлектронику, носимые технологии и экологичные переходные биоэлектронные и фотонные устройства [9–11].

В статье [12] исследована температурная зависимость поглощения микроволн магнитами со случайной анизотропией. Он определяется сильной метастабильностью из-за широкого распределения энергетических барьеров, разделяющих различные спиновые конфигурации. При малой мощности СВЧ, когда нагрев пренебрежимо мал, спиновая динамика близка к линейной. Это соответствует прецессии ферромагнитно упорядоченных областей, находящихся в резонансе с микроволновым полем.

В статье [13] исследованы методы синхротронной рентгеновской дифракции и ячейки с алмазными наковальнями использовались для характеристики фазовых превращений и оценки структурной стабильности разработанного нанокристаллического композита при повышенных давлениях.

Антиотражающие покрытия превратились в высокоэффективные компоненты, снижающие отражающую способность и блики, для различного оптического и оптоэлек-

трического оборудования. При прохождении сквозь линзу свет частично поглощается и отражается от её поверхностей из-за разных коэффициентов преломления материала линзы и окружающей воздушной среды. При этом отражённые лучи приводят к возникновению мешающих отражений и снижают четкость восприятия изображения. Если антибликовое покрытие состоит из одного слоя, уменьшение прохождения светового потока происходит только в одной определенной части спектра, поэтому для охвата всего спектра видимого света наносят несколько покрытий, соответствующих разным частям диапазона. Оптическое явление отражения, возникает из-за перехода в среде, в которой распространяется свет. Среда (стекло, вода, воздух) оптически характеризуется параметром, показателем преломления, который количественно определяет скорость света в текущей среде по отношению к скорости света в вакууме. Таким образом, по мере распространения света глаза могут обнаружить оптические нарушения, если есть изменение показателя преломления. Многие покрытия состоят из прозрачных тонкопленочных структур с чередующимися слоями с контрастным показателем преломления. Толщина слоя выбирается для создания деструктивной интерференции в лучах, отраженных от границ раздела, и конструктивной интерференции в соответствующих прошедших лучах. Это приводит к изменению характеристик конструкции в зависимости от длины волны и угла падения, поэтому цветовые эффекты часто проявляются под косыми углами.

Есть две отдельные причины оптических эффектов из-за покрытий, которые часто называют толстопленочными и тонкопленочными эффектами. Эффекты толстой пленки возникают из-за разницы в показателе преломления между слоями выше и ниже покрытия (или пленки); в простейшем случае эти три слоя — воздух, покрытие и стекло. Толстопленочные покрытия не зависят от толщины покрытия, если оно намного толще длины волны света. Эффект тонкой пленки возникает, когда толщина покрытия примерно равна четверти или половине длины волны света. В этом случае отражения постоянного источника света могут быть добавлены деструктивно, и, следовательно, уменьшить отражения с помощью отдельного механизма. Тонкопленочные покрытия зависят не только от толщины пленки и длины волны света, но и от угла, под которым свет падает на поверхность с покрытием. Всякий раз, когда луч света перемещается из одной среды в другую (например, когда свет попадает в лист стекла после прохождения через воздух), некоторая часть света отражается от поверхности (известной как граница раздела) между двумя средами. Это можно наблюдать, например, если смотреть через окно, где можно увидеть (слабое) отражение от передней и задней поверхностей оконного стекла. Сила отражения зависит от соотношения показателей преломления двух сред, а также от угла наклона поверхности к лучу света. Именно уравнение Френеля предлагает базовую предварительную математическую модель отражения и преломления. Уравнения Френеля (или коэффициенты Френеля) описывают отражение и передачу света (или электромагнитного излучения в целом) при падении на границу раздела между различными оптическими средами. Когда свет падает на границу раздела между средой с показателем преломления  $n_1$  и второй средой с показателем преломления  $n_2$ , могут происходить как отражение, так и преломление света. Уравнения Френеля описывают отношения электрических полей отраженных и прошедших волн к электрическому полю падающей волны (магнитные поля волн также можно связать с помощью аналогичных коэффициентов). Поскольку это комплексные отношения, они описывают не только относительную амплитуду, но и фазовые сдвиги между волнами. Уравнения предполагают, что граница раздела между средами плоская, а среда однородная и изотропная. Предполагается, что падающий свет представляет собой плоскую волну, что достаточно для решения любой проблемы, поскольку любое падающее световое поле может быть разложено на плоские волны и поляризации. Согласно Огюстену-Жану

Френелю, доля падающего света, отражённого на границе раздела, измеряется коэффициентом отражения, а остальная часть прошедшего (преломлённого) света измеряется коэффициентом пропускания.

В статье [14] оптимизированы многослойные просветляющие покрытия для фотоэлектрических устройств, используя современные эволюционные алгоритмы. Применяется строгая методология, чтобы показать, что данная структура, которая является особенно регулярной (то есть существенно периодической), возникает спонтанно и систематически в очень широком диапазоне условий. Сама регулярность структуры позволяет провести тщательный физический анализ того, как работает конструкция. Это позволяет понять, что центральная часть представляет собой фотонный кристалл, используемый в качестве буфера для света, и что внешние слои предназначены для уменьшения несоответствия импеданса между внешней средой и блоховской модой, поддерживаемой фотонным кристаллом. Показано, как оптимизация может предлагать новые правила проектирования и рассматриваться как источник вдохновения. Изготовлены конструкции с помощью легко развёртываемых технологий.

В статье [15] резонаторные оптомеханические системы предлагают мощный способ оптически манипулировать движением механических осцилляторов, начиная от наноразмерных объектов, таких как нанолучи и микротороидальные резонаторы, к макроскопическим объектам, таким как Интерферометры Фабри-Перо с подвесными зеркалами [16]. А ярким примером является лазерное охлаждение механических движение в основное квантовое состояние, достигаемое как в микроволновом и оптическом режимах [17, 18]. Зрелость этих методы и технологии могут сделать квантовый контроль над макроскопическими объектами реальностью. Это имеет основополагающее значение интерес к исследованию квантовых свойств макроскопических механические осцилляторы, такие как запутанность и декогеренция [19]. С другой стороны, существует широкий спектр оптико-механические системные приложения. Беспрецедентный точность в перемещении и измерении силы с использованием механические генераторы были приняты для сверхчувствительных измерения [20].

Используя чередующиеся слои материала с низким показателем преломления, такого как диоксид кремния, и материала с более высоким показателем преломления, можно получить коэффициент отражения всего 0.1% на одной длине волны. Также могут быть изготовлены покрытия, которые дают очень низкую отражательную способность в широком диапазоне частот, хотя они являются сложными и относительно дорогими. Оптические покрытия также могут быть изготовлены с особыми характеристиками, такими как почти нулевое отражение на нескольких длинах волн или оптимальные характеристики при углах падения, отличных от  $0^\circ$ . Дополнительной категорией просветляющих покрытий являются «поглощающие дуги». Эти покрытия полезны в ситуациях, когда высокое пропускание через поверхность неважно или нежелательно, но требуется низкая отражательная способность. Они могут обеспечивать очень низкий коэффициент отражения при небольшом количестве слоёв и часто могут производиться дешевле или в большем масштабе, чем стандартные непоглощающие просветляющие покрытия. Поглощающие антиотражающие покрытия часто используют необычные оптические свойства, проявляемые составными тонкими плёнками, полученными путём напыления. Так, например, нитрид титана и нитрид ниобия используются в поглощающих дугах.

## Модель

Амплитудные коэффициенты отражения оптической волны в нанокompозитной среде вычисляются по формулам:

$$r_{01}^s = \frac{\cos \theta_0 - \sqrt{n_{10}^2 - \sin^2 \theta_0}}{\cos \theta_0 + \sqrt{n_{10}^2 - \sin^2 \theta_0}}, \quad (1)$$

$$r_{01}^p = \frac{n_{10}^2 \cos \theta_0 - \sqrt{n_{10}^2 - \sin^2 \theta_0}}{n_{10}^2 \cos \theta_0 + \sqrt{n_{10}^2 - \sin^2 \theta_0}}, \quad (2)$$

где  $\theta_0$  - угол падения внешнего оптического излучения на границу раздела двух сред,  $n_{10}$  - относительный показатель преломления оптического излучения на границе раздела двух сред. Амплитудные коэффициенты пропускания оптической волны в нанокompозитной среде вычисляются по формулам:

$$t_{01}^s = \frac{2 \cos \theta_0}{\cos \theta_0 + \sqrt{n_{10}^2 - \sin^2 \theta_0}}, \quad (3)$$

$$t_{01}^p = \frac{2n_{10}^2 \cos \theta_0}{n_{10}^2 \cos \theta_0 + \sqrt{n_{10}^2 - \sin^2 \theta_0}}, \quad (4)$$

Коэффициенты Френеля по энергии для отражения оптической волны в нанокompозитной среде вычисляются по формулам:

$$R_{01}^s = |r_{01}^s|^2, \quad (5)$$

$$R_{01}^p = |r_{01}^p|^2, \quad (6)$$

$$R_{01} = \frac{1}{2} (R_{01}^s + R_{01}^p). \quad (7)$$

Коэффициенты Френеля по энергии для пропускания оптической волны в нанокompозитной среде вычисляются по формулам:

$$T_{01}^s = \frac{n_1 \cos \theta_1}{n_0 \cos \theta_0} |t_{01}^s|^2, \quad (8)$$

$$T_{01}^p = \frac{n_1 \cos \theta_1}{n_0 \cos \theta_0} |t_{01}^p|^2, \quad (9)$$

$$T_{01} = \frac{1}{2} (T_{01}^s + T_{01}^p). \quad (10)$$

Амплитудный коэффициент отражения оптической волны в нанокompозитной плёнке на полубесконечной подстилающей среде вычисляется по формуле [21]:

$$r_1 = \frac{r_{01} + r_{12} \exp(i2\varphi_1)}{1 + r_{01}r_{12} \exp(i2\varphi_1)}. \quad (11)$$

Здесь  $\varphi_1 = k_0 d_1 \sqrt{n_{10}^2 - \sin^2 \theta_0}$ ,  $d_1$  - толщина нанокompозитной плёнки,  $k_0 = 2\pi/\lambda$  - волновое число света в вакууме,  $\lambda$  - длина волны оптического излучения. Амплитудный коэффициент пропускания оптической волны в нанокompозитной плёнке на полубесконечной подстилающей среде вычисляется по формуле

$$t_1 = \frac{t_{01}t_{12} \exp(i\varphi_1)}{1 + r_{01}r_{12} \exp(i2\varphi_1)}. \quad (12)$$



Коэффициенты Френеля по энергии для отражения оптической волны в нанокomпозитной плёнке на полубесконечной подстилающей среде вычисляются по формулам:

$$R_1^s = |r_1^s|^2, \quad (13)$$

$$R_1^p = |r_1^p|^2, \quad (14)$$

$$R_1 = \frac{1}{2} (R_1^s + R_1^p). \quad (15)$$

Коэффициенты Френеля по энергии для пропускания оптической волны в нанокomпозитной плёнке на полубесконечной подстилающей среде вычисляются по формулам:

$$T_1^s = \frac{n_2 \cos \theta_2}{n_0 \cos \theta_0} |t_1^s|^2, \quad (16)$$

$$T_1^p = \frac{n_2 \cos \theta_0}{n_0 \cos \theta_2} |t_1^p|^2, \quad (17)$$

$$T_1 = \frac{1}{2} (T_1^s + T_1^p). \quad (18)$$

Комплексный показатель преломления нанокomпозитной плёнки в приближении эффективной среды вычислим по формуле [22]:

$$n_1 = f_1 n_1^p + (1 - f_1) n_1^m. \quad (19)$$

где  $f_1$  – фактор заполнения нанокomпозитной плёнки металлическими наночастицами,  $n_1^p$  – комплексный показатель преломления системы наноразмерных включений в виде металлических наночастиц,  $n_1^m$  – комплексный показатель преломления матрицы нанокomпозитной плёнки. В качестве матрицы нанокomпозитной плёнки выбрано стекло BK7.

Квадрат показателя преломления системы наноразмерных включений в виде металлических наночастиц находится по формуле Друде

$$(n_1(\omega))^2 = \varepsilon_1^p(\omega) = \varepsilon_1^\infty - \frac{\omega_{1p}^2}{\omega(\omega + i\gamma_1)}. \quad (20)$$

где коэффициент затухания находится по формуле

$$\gamma_1 = \gamma_{01} + A_{p1} \frac{v_{F1}}{a_1}, \quad (21)$$

где  $a_1$  – радиус металлических наночастиц,  $v_{F1}$  – скорость Ферми для носителей заряда в металлических наночастицах,  $A_{p1}$  – коэффициент Пирсона.

Произведём описание нанокomпозитной структуры для двух нанокomпозитных сред в приближении эффективной среды.

Эффективная диэлектрическая проницаемость первой нанокomпозитной среды находится по формуле Максвелл-Гарнетта:

$$\varepsilon_1(\omega) = \varepsilon_1^m(\omega) \left( 1 + \frac{f_1 (\varepsilon_1^p(\omega) - \varepsilon_1^m(\omega))}{\varepsilon_1^m + g_1 (1 - f_1) (\varepsilon_1^p(\omega) - \varepsilon_1^m(\omega))} \right), \quad (22)$$

где  $f_1$  – фактор заполнения первой нанокomпозитной среды металлическими наночастицами,  $g_1$  – деполяризующий фактор системы наноразмерных включений в первой нанокomпозитной среде,  $\varepsilon_1^p$  – диэлектрическая проницаемость наноразмерных включений в виде металлических наночастиц,  $\varepsilon_1^m$  – диэлектрическая проницаемость материала матрицы первой нанокomпозитной среды.

Эффективная диэлектрическая проницаемость второй нанокompозитной среды находится по формуле Максвелл-Гарнетта:

$$\varepsilon_2(\omega) = \varepsilon_2^m(\omega) \left( 1 + \frac{f_2(\varepsilon_2^p(\omega) - \varepsilon_2^m(\omega))}{\varepsilon_2^m + g_2(1 - f_2)(\varepsilon_2^p(\omega) - \varepsilon_2^m(\omega))} \right), \quad (23)$$

где  $f_2$  – фактор заполнения второй нанокompозитной среды металлическими наночастицами,  $g_2$  – деполаризующий фактор системы наноразмерных включений во второй нанокompозитной среде,  $\varepsilon_2^p$  – диэлектрическая проницаемость наноразмерных включений в виде металлических наночастиц,  $\varepsilon_2^m$  – диэлектрическая проницаемость материала матрицы второй нанокompозитной среды.

Диэлектрическая проницаемость материала матрицы в составе нанокompозитной среды находится по формуле:

$$\varepsilon_1^m(\lambda) = \varepsilon_1^{PMA}(\lambda) = 1 + \frac{1.1819\lambda^2}{\lambda^2 - 0.011313}, \quad (24)$$

где длина волны подставляется в микрометрах.

Диэлектрическая проницаемость материала наноразмерных включений в виде наночастиц серебра сферической формы находится по формуле:

$$\varepsilon_1^p(\omega) = \varepsilon_{\infty 1} - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma_{e1})}, \quad (25)$$

где циклическая частота излучения  $\omega = 2\pi c/\lambda$ .

Коэффициент затухания находится по формуле

$$\gamma_{e1} = \gamma_{01} + A_{p1} \frac{v_{F1}}{a_1}, \quad (26)$$

$A_{p1}$  – коэффициент Пирсона, для серебра скорость Ферми равна  $v_F = 1.39 \cdot 10^6$  м/с.

Для объёмного серебра известны следующие параметры:  $\varepsilon_{\infty 1} = 4.1$ ,  $\omega_p = 1.33 \cdot 10^{16}$  с<sup>-1</sup>,  $\gamma_{01} = 7.7 \cdot 10^{13}$  с<sup>-1</sup>.

## Результаты численных расчётов оптических характеристик нанокompозитов

В ходе исследования нанокompозитных плёнок составлена компьютерная программа, позволяющая вычислять зависимость коэффициента Френеля по энергии для отражения от поверхности нанокompозитной плёнки с наночастицами серебра от длины волны падающего оптического излучения.

В качестве основных начальных параметров для начала организации численных расчётов оптических характеристик нанокompозитной системы выбираются следующие параметры: угол падения внешнего излучения, диапазон длин волн излучения для построения спектров отражения и пропускания, характерные размеры включений, фактор заполнения наночастицами нанокompозитной плёнки.

Основной расчётный блок разработанной компьютерной программы на языке программирования Python начинается с описания функций, характеризующих дисперсионные зависимости диэлектрической проницаемости материала матрицы и материала включений, магнитной проницаемости материала матрицы и материала включений, комплексного показателя преломления материала матрицы и материала системы включений из металлических наночастиц. Ключевую часть компьютерной программы для расчёта оптических свойств нанокompозитных структур составляют различные формулы смешения, позволяющие рассчитывать эффективные параметры нанокompозитов



с наночастицами. В компьютерной программе реализованы функциональные зависимости эффективных параметров различных материалов в нанокompозитных структурах таких, как эффективная диэлектрическая проницаемость, эффективная магнитная проницаемость, эффективный показатель преломления и эффективный поверхностный импеданс нанокompозитной среды с металлическими наночастицами, находящейся во внешнем поле оптического излучения.

Рассмотрим результаты численных расчётов энергетических коэффициентов оптического пропускания однослойной нанокompозитной плёнки с наночастицами серебра, расположенной на подложке из стекла типа BK7.

Рассмотрим нанокompозитную плёнку, состоящую из полимерной матрицы и включений в виде сферических наночастиц серебра. Для того чтобы оценить соотношение оптических констант компонент нанокompозитной среды, воспользуемся теорией Максвелла–Гарнетта. Согласно этой теории может быть найдена эффективная диэлектрическая проницаемость двухкомпонентной гетерогенной среды.

Применим модель эффективной среды для описания двух нанокompозитных сред. Эффективная диэлектрическая проницаемость среды  $j$  вычисляется по формуле:

$$\varepsilon_j = \varepsilon_j^m \left( 1 + \frac{f_j (\varepsilon_j^p - \varepsilon_j^m)}{\varepsilon_j^m + g_j (1 - f_j) (\varepsilon_j^p - \varepsilon_j^m)} \right). \quad (27)$$

где  $\varepsilon_j^m$  — диэлектрическая проницаемость матрицы в среде  $j$ ,  $\varepsilon_j^p$  — диэлектрическая проницаемость наночастиц серебра в среде  $j$ ,  $f_j$  — объёмная доля включений в среде  $j$ ,  $g_j$  — деполяризующий фактор. В случае сферических наночастиц деполяризующий фактор  $g_j = 1/3$ . Эффективная диэлектрическая проницаемость наночастиц в среде  $j$  имеет вид:

$$\varepsilon_{1p}(\omega) = 1 - \frac{\omega_{1p}^2 - \omega_0^2}{\omega^2 - \omega_0^2 + i\omega\Gamma_1}. \quad (28)$$

где введено обозначение

$$\Gamma_j = \gamma_{Cj} + A_j \frac{v_{Fj}}{a_j}. \quad (29)$$

$v_{Fj}$  — скорость Ферми для металлических наночастиц,  $a_j$  — радиус металлических наночастиц в нанокompозитной среде  $j$ .

Типичной рассматриваемой системой является структура, составленная из металлических частиц, внедрённых в диэлектрическую матрицу. Для анализа подобных структур часто применяют численные методы, в частности метод конечных элементов или метод моментов. Однако с помощью этих методов нельзя достичь физического понимания свойств подобных структур. Альтернативным методом описания композитных структур является использование эффективных диэлектрической и магнитной проницаемостей. Обычно в этом случае применяют теорию Максвелл–Гарнетта. Однако эта теория непригодна, когда частицы занимают более 30% объёма композитной среды. Кроме того, теория Максвелл–Гарнетта неприменима, когда расстояние между частицами, составляющими композитную среду, оказывается сравнимым с длиной волны внешнего излучения оптического излучения. Во всех этих случаях приходится использовать специальные методы расчёта оптических свойств композитных материалов.

В зависимости от типа основной матрицы, занимающей большую часть объёма нанокompозитного материала, нанокompозиты принято подразделять на три категории. Нанокompозиты на основе керамической матрицы улучшают оптические и электрические свойства первоначального материала (керамического соединения, состоящего из смеси оксидов, нитридов, силицидов и т.д.). В нанокompозитах на основе металлической матрицы так называемым усиливающим материалом (нанокомпонентом) часто служат

углеродные нанотрубки, повышающие прочность и электрическую проводимость. Полимерные нанокомпозиты содержат полимерную матрицу с распределёнными по ней наночастицами или нанонаполнителями, которые могут иметь сферическую, плоскую или волокнистую структуру.

Рассмотрим возможность использования серебра в качестве материала для наночастиц нанокомпозита. Это обусловлено тем, что серебро, в отличие от других металлов, в оптическом диапазоне имеет сравнительно небольшую мнимую часть диэлектрической проницаемости. Для того чтобы рассеяние на частицах композита было рэлеевским и композит для внешнего излучения можно было считать однородной средой, размеры частиц должны быть намного меньше длины волны оптического излучения.

В качестве основных начальных параметров для начала организации численных расчётов оптических характеристик нанокомпозитной системы выбираются следующие параметры: угол падения внешнего излучения, диапазон длин волн излучения для построения спектров отражения и пропускания, характерные размеры включений, фактор заполнения наночастицами нанокомпозитной плёнки.

Основной расчётный блок разработанной компьютерной программы, написанный на языке Python, начинается с описания функций, характеризующих дисперсионные зависимости диэлектрической проницаемости материала матрицы и материала включений, магнитной проницаемости материала матрицы и материала включений, комплексного показателя преломления материала матрицы и материала системы включений из металлических наночастиц. Ключевую часть компьютерной программы для расчёта оптических свойств нанокомпозитных структур составляют различные формулы смешения, позволяющие рассчитывать эффективные параметры нанокомпозитов с наночастицами. В компьютерной программе реализованы функциональные зависимости эффективных параметров различных материалов в нанокомпозитных структурах таких, как эффективная диэлектрическая проницаемость, эффективная магнитная проницаемость, эффективный показатель преломления и эффективный поверхностный импеданс нанокомпозитной среды с металлическими наночастицами, находящейся во внешнем поле оптического излучения.

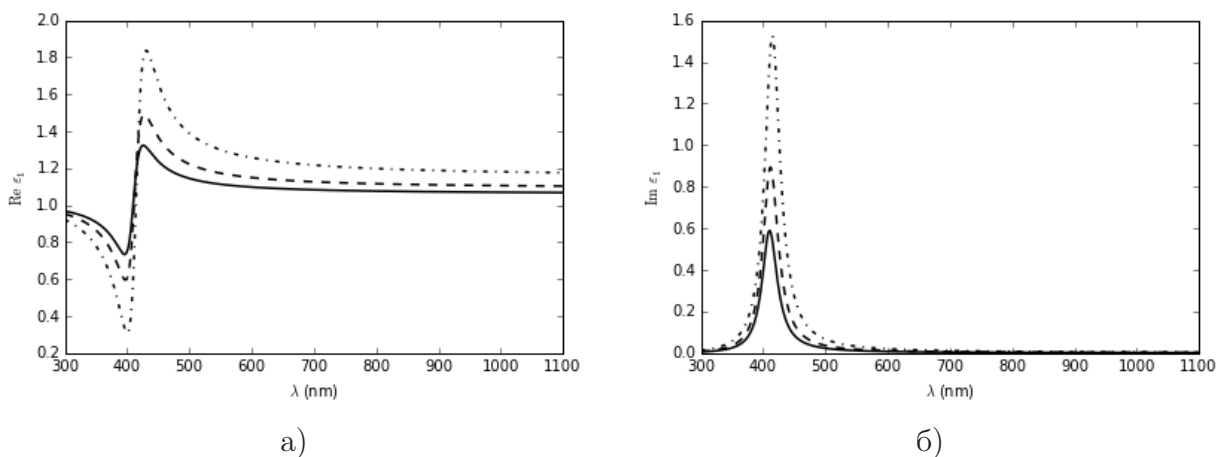


Рис. 1. Графики зависимостей действительной и мнимой частей эффективной диэлектрической проницаемости нанокомпозита из полиметилметакрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения.

На рис. 1 изображены зависимости графики зависимостей действительной и мнимой частей эффективной диэлектрической проницаемости нанокомпозита из полиметилме-

такрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения.

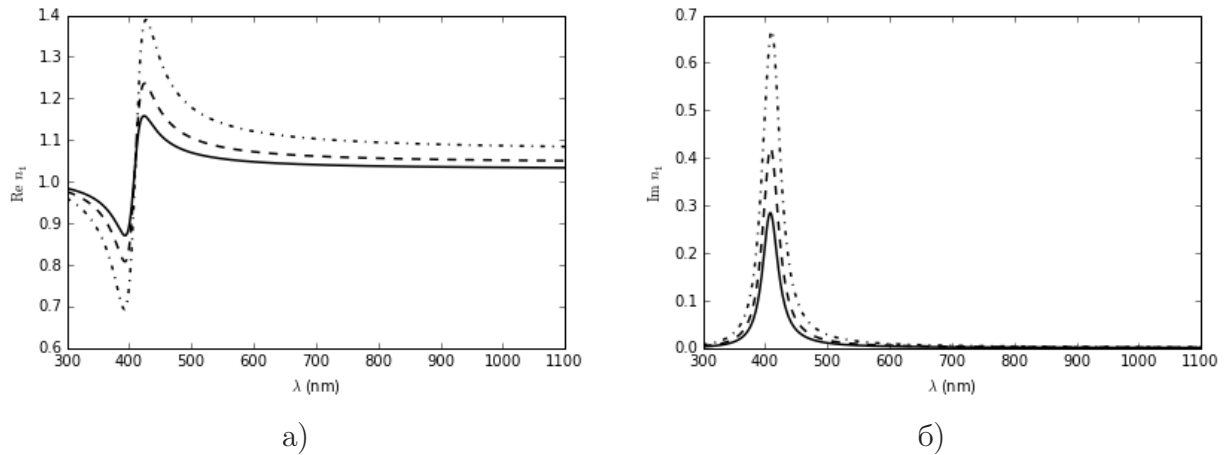


Рис. 2. Графики зависимостей модуля эффективной диэлектрической проницаемости и модуля эффективного показателя преломления нанокompозита из полиметилметакрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения.

На рис. 2 изображены зависимости графики зависимостей модуля эффективной диэлектрической проницаемости и модуля эффективного показателя преломления нанокompозита из полиметилметакрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения.

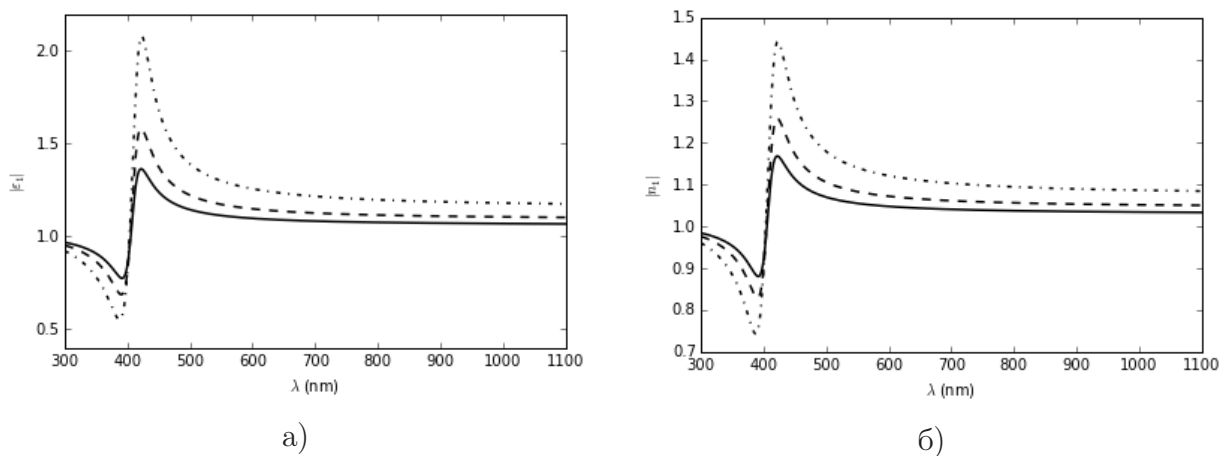


Рис. 3. Графики зависимостей действительной и мнимой частей эффективного показателя преломления нанокompозита из полиметилметакрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения.

На рис. 3 изображены зависимости графики зависимостей действительной и мнимой частей эффективного показателя преломления нанокompозита из полиметилметакрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),

$f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения.

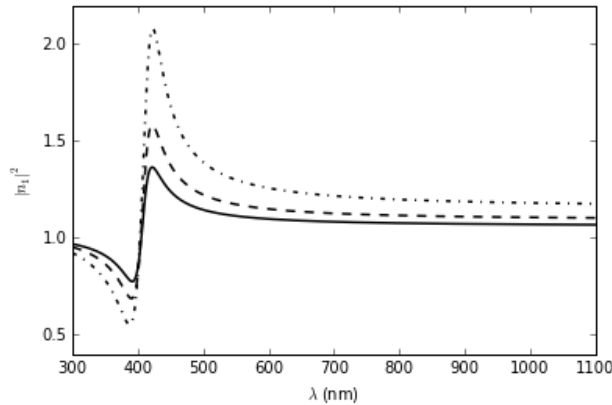


Рис. 4. Графики зависимости квадрата модуля эффективного показателя преломления нанокompозита из полиметилметакрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения.

На рис. 4 приведено изображение графиков зависимости квадрата модуля эффективного показателя преломления нанокompозита из полиметилметакрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения.

На рис. 5 изображены зависимости энергетических коэффициентов оптического отражения от длины волны оптического излучения для случая падения  $s$ -поляризованной оптической волны из воздуха на границу раздела с полубесконечной нанокompозитной средой из полиметилметакрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения, расположенную на подложке из стекла ВК7 при угле падения излучения а)  $\theta_0 = 0^\circ$ , б)  $\theta_0 = 10^\circ$ , в)  $\theta_0 = 20^\circ$ , г)  $\theta_0 = 30^\circ$ .

На рис. 6 изображены зависимости энергетических коэффициентов оптического пропускания от длины волны оптического излучения для случая падения  $s$ -поляризованной оптической волны из воздуха на границу раздела с полубесконечной нанокompозитной средой из полиметилметакрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения, расположенную на подложке из стекла ВК7 при угле падения излучения а)  $\theta_0 = 0^\circ$ , б)  $\theta_0 = 10^\circ$ , в)  $\theta_0 = 20^\circ$ , г)  $\theta_0 = 30^\circ$ .

На рис. 7 изображены зависимости энергетических коэффициентов оптического отражения от длины волны оптического излучения для случая падения  $s$ -поляризованной оптической волны из воздуха на границу раздела с полубесконечной нанокompозитной средой из полиметилметакрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения, расположенную на подложке из стекла ВК7 при угле падения излучения а)  $\theta_0 = 35^\circ$ , б)  $\theta_0 = 40^\circ$ , в)  $\theta_0 = 45^\circ$ , г)  $\theta_0 = 50^\circ$ .

На рис. 8 изображены зависимости энергетических коэффициентов оптического пропускания от длины волны оптического излучения для случая падения  $s$ -поляризованной

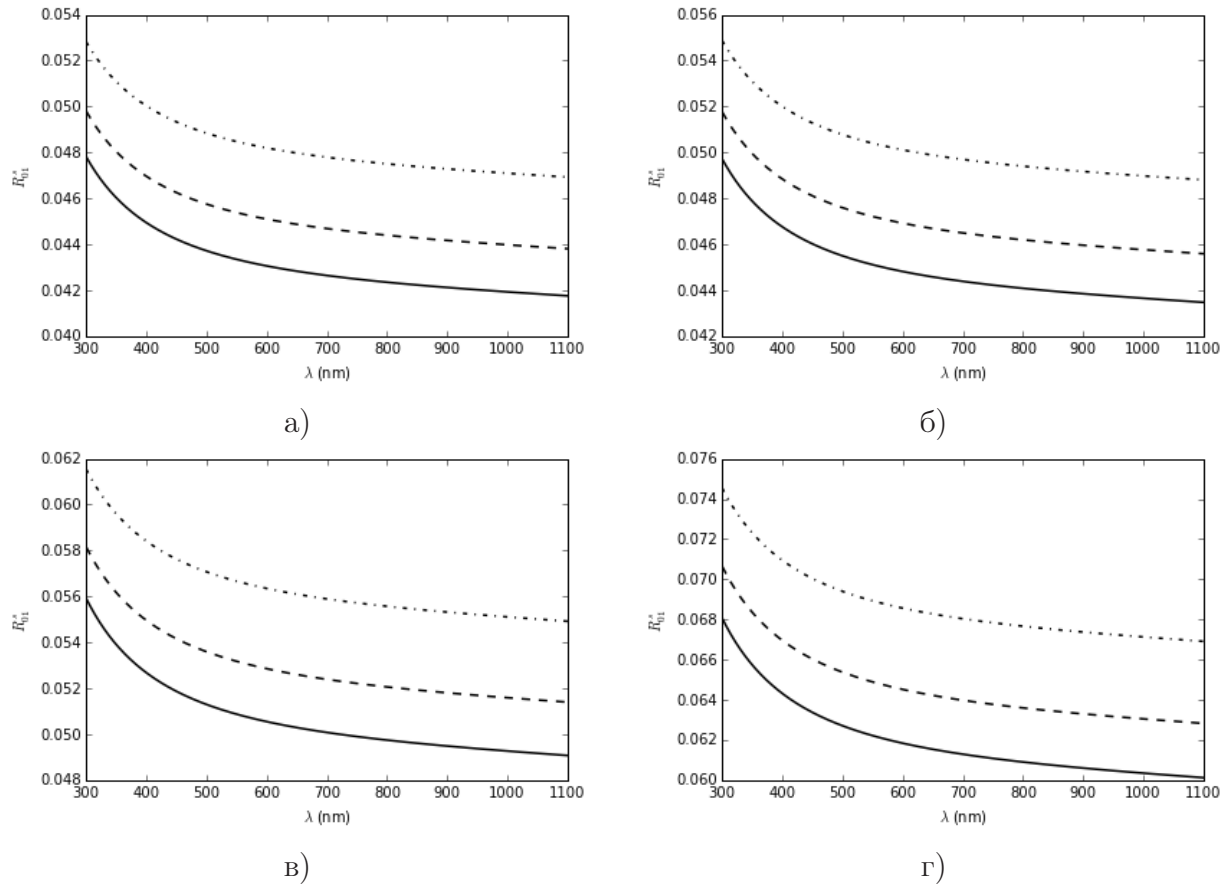


Рис. 5. Зависимости энергетических коэффициентов оптического отражения от длины волны оптического излучения для случая падения  $s$ -поляризованной оптической волны из воздуха на границу раздела с полубесконечной нанокомпозитной средой из полиметилметакрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения, расположенную на подложке из стекла ВК7 при угле падения излучения а)  $\theta_0 = 0^\circ$ , б)  $\theta_0 = 10^\circ$ , в)  $\theta_0 = 20^\circ$ , г)  $\theta_0 = 30^\circ$ .

оптической волны из воздуха на границу раздела с полубесконечной нанокомпозитной средой из полиметилметакрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения, расположенную на подложке из стекла ВК7 при угле падения излучения а)  $\theta_0 = 35^\circ$ , б)  $\theta_0 = 40^\circ$ , в)  $\theta_0 = 45^\circ$ , г)  $\theta_0 = 50^\circ$ . Из анализа полученных зависимостей, что рассматриваемые нанокомпозитные плёнки обладают слабой угловой зависимостью энергетического коэффициента отражения в широком диапазоне оптических длин волн.

В следующей части расчётов диэлектрическая проницаемость материала наноразмерных включений в виде наночастиц серебра сферической формы находится по формуле:

$$\varepsilon_1^p(\omega) = \varepsilon_{\infty 1} - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma_{e1})}, \quad (30)$$

где циклическая частота излучения  $\omega = 2\pi c/\lambda$ .

В следующей части расчётов коэффициент затухания находится по формуле

$$\gamma_{e1} = \gamma_{01} + (0.71 + (1 - f_1) 0.31) \frac{v_{F1}}{a_1}, \quad (31)$$

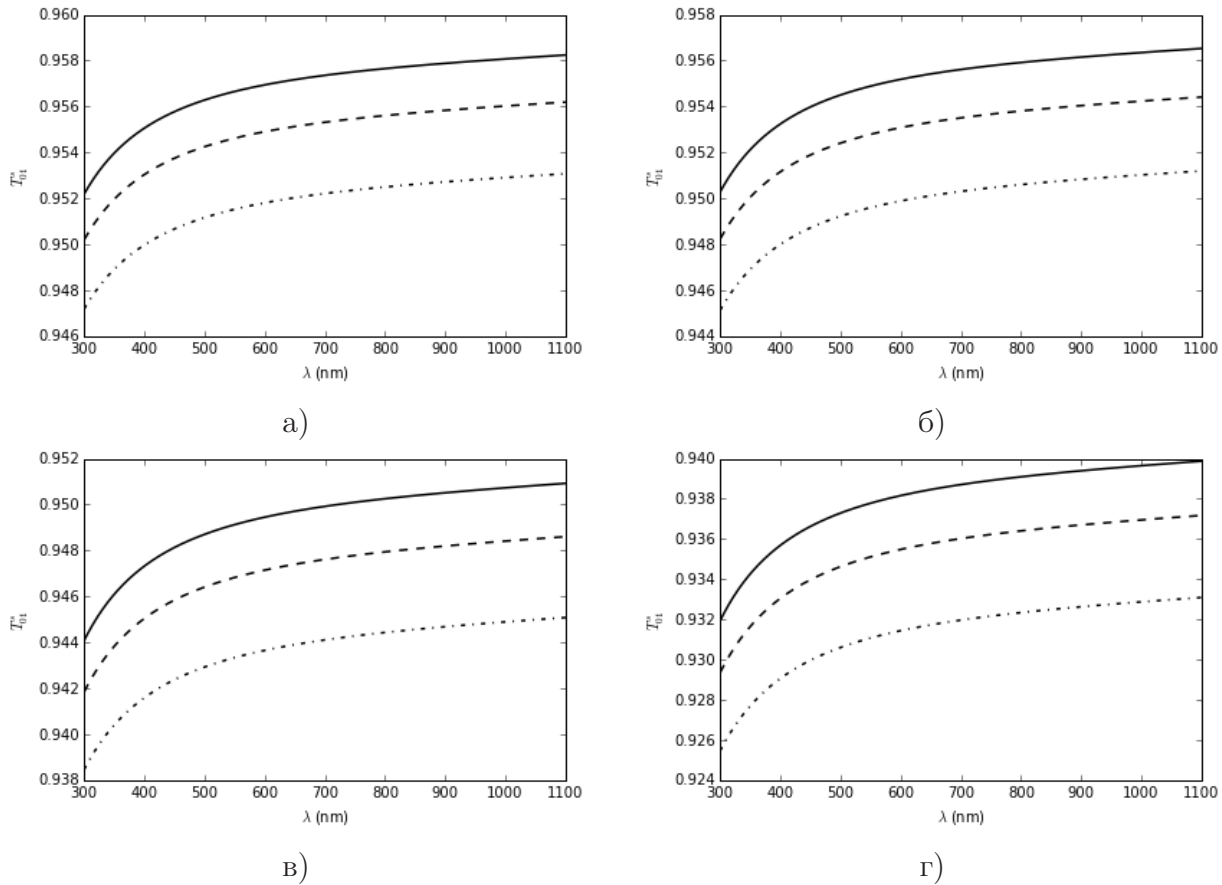


Рис. 6. Зависимости энергетических коэффициентов оптического пропускания от длины волны излучения для случая падения  $s$ -поляризованной оптической волны из воздуха на границу раздела с полубесконечной нанокомпозитной средой из полиметилметакрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения, расположенную на подложке из стекла ВК7 при угле падения излучения а)  $\theta_0 = 0^\circ$ , б)  $\theta_0 = 10^\circ$ , в)  $\theta_0 = 20^\circ$ , г)  $\theta_0 = 30^\circ$ .

для серебра скорость Ферми равна  $v_F = 1.39 \cdot 10^6$  м/с.

Для объёмного серебра известны следующие параметры:  $\varepsilon_{\infty 1} = 4.1$ ,  $\omega_p = 1.33 \cdot 10^{16}$  с<sup>-1</sup>,  $\gamma_{01} = 7.7 \cdot 10^{13}$  с<sup>-1</sup>.

Рассмотрим нанокомпозитную плёнку, состоящую из полимерной матрицы и включений в виде сферических наночастиц серебра. Для того чтобы оценить соотношение оптических констант компонент нанокомпозитной среды, воспользуемся теорией Максвелл–Гарнетта. Согласно этой теории может быть найдена эффективная диэлектрическая проницаемость двухкомпонентной гетерогенной среды.

Применим модель эффективной среды для описания двух нанокомпозитных сред. Эффективная диэлектрическая проницаемость среды  $j$  вычисляется по формуле:

$$\varepsilon_j = \varepsilon_j^m \left( 1 + \frac{f_j (\varepsilon_j^p - \varepsilon_j^m)}{\varepsilon_j^m + g_j (1 - f_j) (\varepsilon_j^p - \varepsilon_j^m)} \right). \quad (32)$$

где  $\varepsilon_j^m$  — диэлектрическая проницаемость матрицы в среде  $j$ ,  $\varepsilon_j^p$  — диэлектрическая проницаемость наночастиц серебра в среде  $j$ ,  $f_j$  — объёмная доля включений в среде  $j$ ,  $g_j$  — деполаризующий фактор. В случае сферических наночастиц деполаризующий фактор  $g_j = 1/3$ . Эффективная диэлектрическая проницаемость наночастиц в среде  $j$



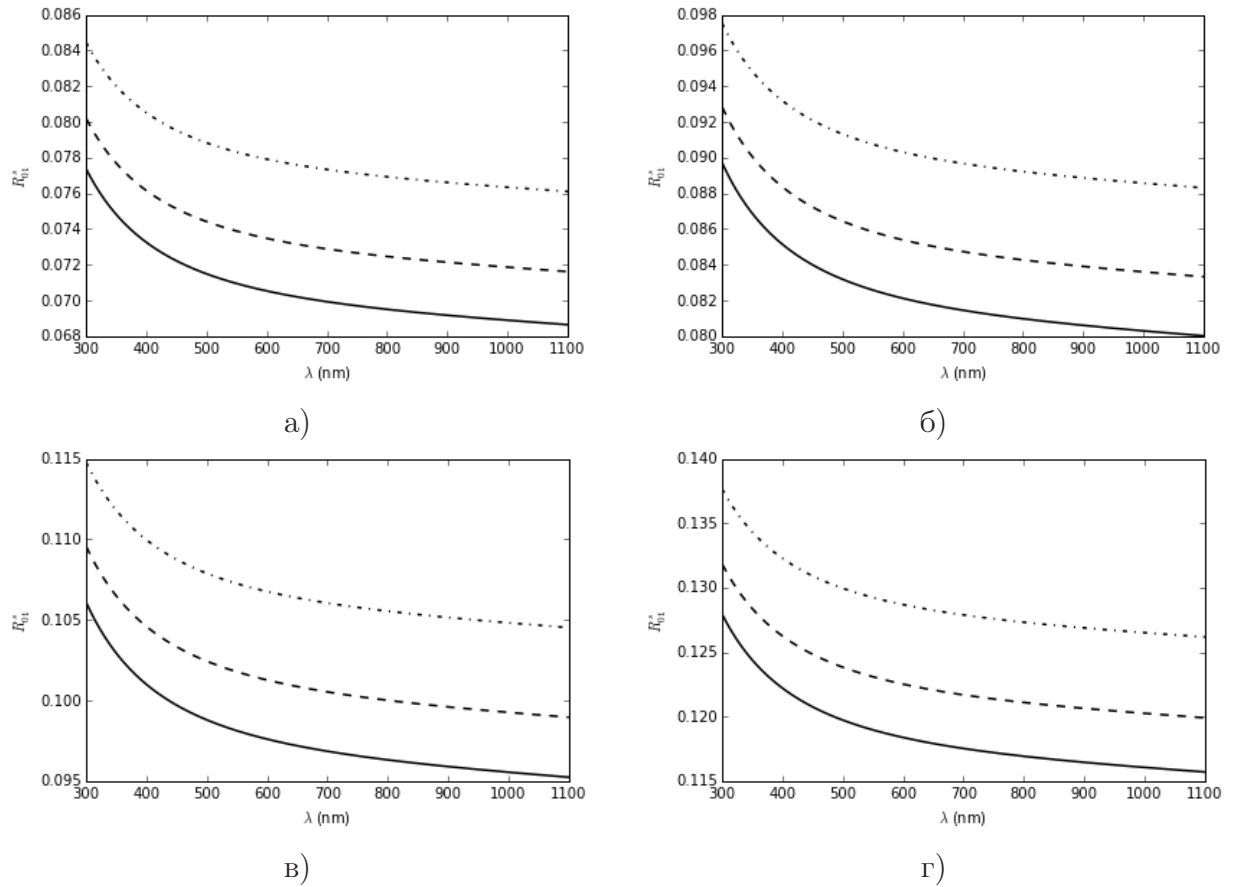


Рис. 7. Зависимости энергетических коэффициентов оптического отражения от длины волны оптического излучения для случая падения  $s$ -поляризованной оптической волны из воздуха на границу раздела с полубесконечной нанокомпозитной средой из полиметилметакрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения, расположенную на подложке из стекла ВК7 при угле падения излучения а)  $\theta_0 = 35^\circ$ , б)  $\theta_0 = 40^\circ$ , в)  $\theta_0 = 45^\circ$ , г)  $\theta_0 = 50^\circ$ .

имеет вид:

$$\varepsilon_{jp}(\omega) = 1 - \frac{\omega_{jp}^2 - \omega_0^2}{\omega^2 - \omega_0^2 + i\omega\gamma_{ej}}. \quad (33)$$

где введено обозначение

$$\gamma_{ej} = \gamma_{0j} + (0.71 + (1 - f_j) 0.31) \frac{v_{Fj}}{a_j}, \quad (34)$$

где  $v_{Fj}$  – скорость Ферми для металлических наночастиц,  $a_j$  – радиус металлических наночастиц в нанокомпозитной среде  $j$ .

Рассмотрим результаты численных расчётов энергетических коэффициентов оптического пропускания однослойной нанокомпозитной плёнки с наночастицами серебра, расположенной на подложке из стекла типа ВК7.

На рис. 9 изображены зависимости графики зависимостей действительной и мнимой частей эффективной диэлектрической проницаемости нанокомпозита из полиметилметакрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения.

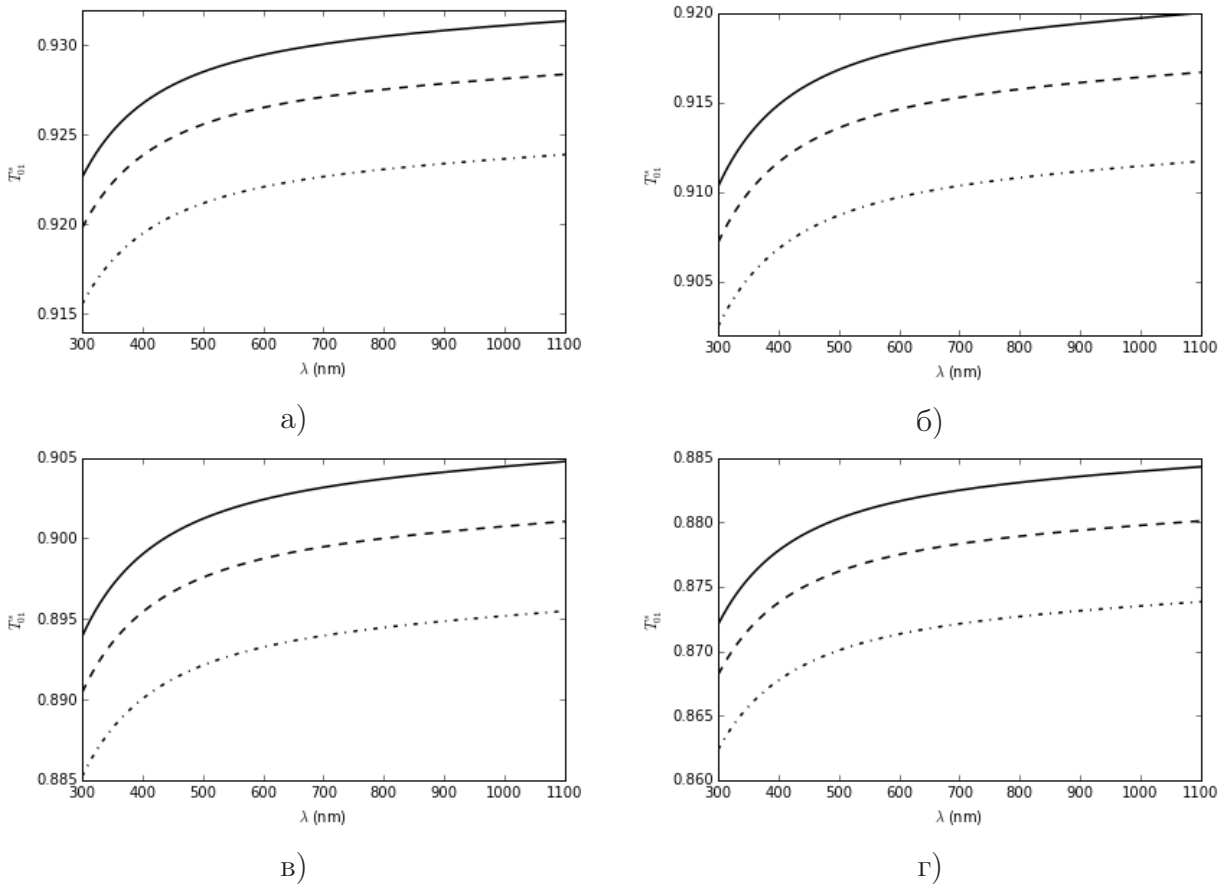


Рис. 8. Зависимости энергетических коэффициентов оптического пропускания от длины волны излучения для случая падения  $s$ -поляризованной оптической волны из воздуха на границу раздела с полубесконечной нанокомпозитной средой из полиметилметакрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения, расположенную на подложке из стекла ВК7 при угле падения излучения а)  $\theta_0 = 35^\circ$ , б)  $\theta_0 = 40^\circ$ , в)  $\theta_0 = 45^\circ$ , г)  $\theta_0 = 50^\circ$ .

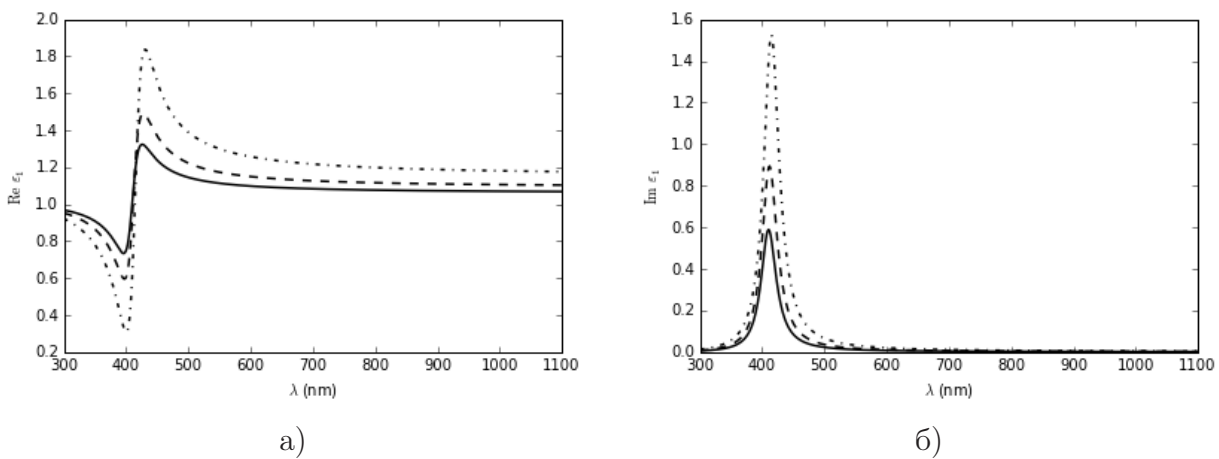


Рис. 9. Графики зависимостей действительной и мнимой частей эффективной диэлектрической проницаемости нанокомпозита из полиметилметакрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения.

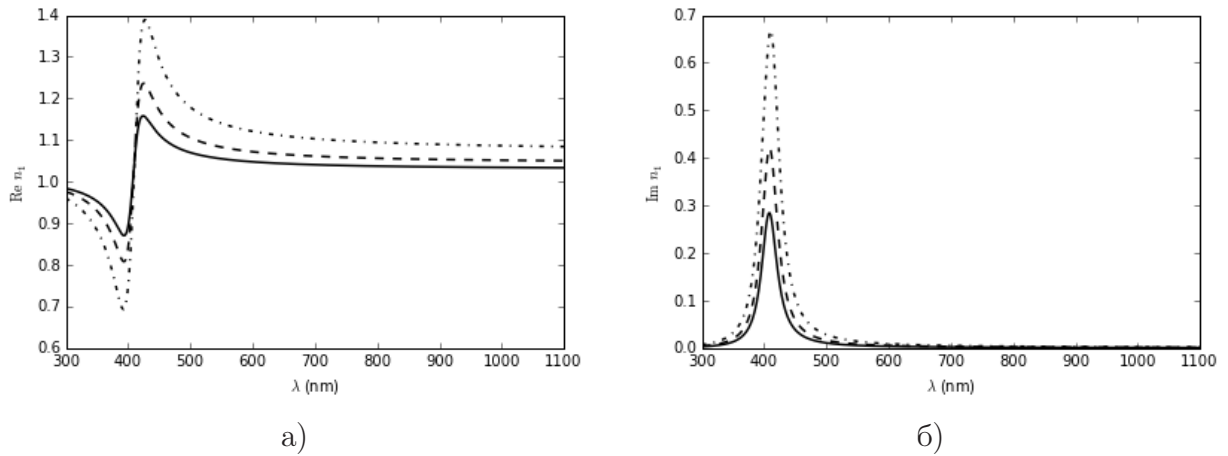


Рис. 10. Графики зависимостей модуля эффективной диэлектрической проницаемости и модуля эффективного показателя преломления нанокompозита из полиметилметакрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения.

На рис. 10 изображены зависимости графики зависимостей модуля эффективной диэлектрической проницаемости и модуля эффективного показателя преломления нанокompозита из полиметилметакрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения.

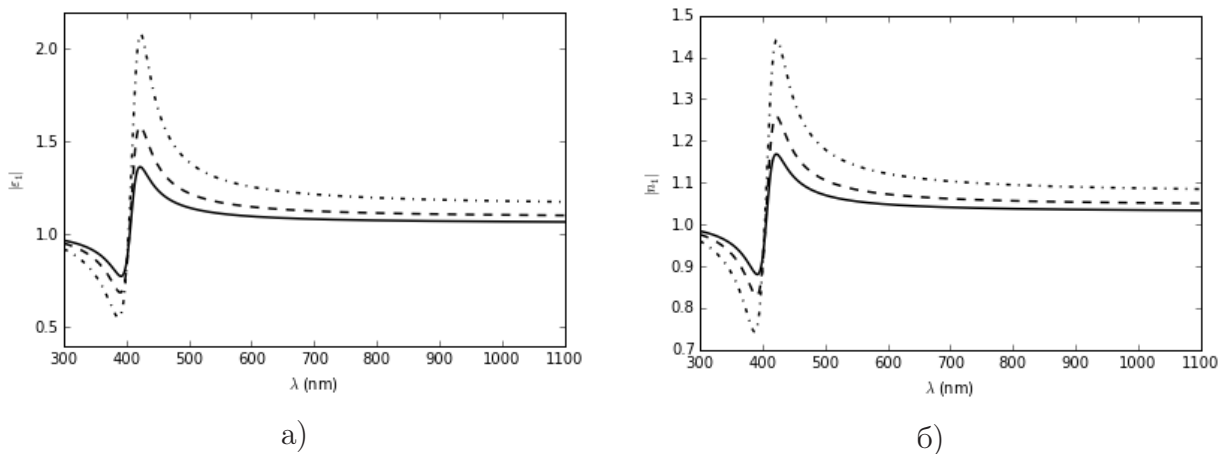


Рис. 11. Графики зависимостей действительной и мнимой частей эффективного показателя преломления нанокompозита из полиметилметакрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения.

На рис. 11 изображены зависимости графики зависимостей действительной и мнимой частей эффективного показателя преломления нанокompозита из полиметилметакрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения.

На рис. 12 приведено изображение графиков зависимости квадрата модуля эффективного показателя преломления нанокompозита из полиметилметакрилата с наноча-

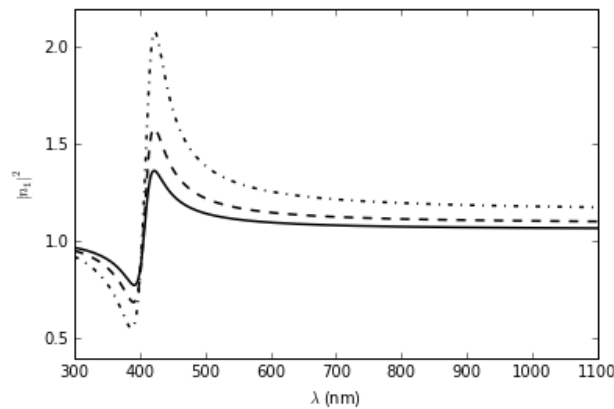


Рис. 12. Графики зависимости квадрата модуля эффективного показателя преломления нанокompозита из полиметилметакрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения.

стицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения.

На рис. 13 изображены зависимости энергетических коэффициентов оптического отражения от длины волны оптического излучения для случая падения  $s$ -поляризованной оптической волны из воздуха на границу раздела с полубесконечной нанокompозитной средой из полиметилметакрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения, расположенную на подложке из стекла ВК7 при угле падения излучения а)  $\theta_0 = 0^\circ$ , б)  $\theta_0 = 10^\circ$ , в)  $\theta_0 = 20^\circ$ , г)  $\theta_0 = 30^\circ$ .

На рис. 14 изображены зависимости энергетических коэффициентов оптического пропускания от длины волны внешнего оптического излучения для случая падения  $s$ -поляризованной оптической волны из воздуха на границу раздела с полубесконечной нанокompозитной средой из полиметилметакрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения, расположенную на подложке из стекла ВК7 при угле падения излучения а)  $\theta_0 = 0^\circ$ , б)  $\theta_0 = 10^\circ$ , в)  $\theta_0 = 20^\circ$ , г)  $\theta_0 = 30^\circ$ .

На рис. 15 изображены зависимости энергетических коэффициентов оптического отражения от длины волны внешнего оптического излучения для случая падения  $s$ -поляризованной оптической волны из воздуха на границу раздела с полубесконечной нанокompозитной средой из полиметилметакрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения, расположенную на подложке из стекла ВК7 при угле падения излучения а)  $\theta_0 = 35^\circ$ , б)  $\theta_0 = 40^\circ$ , в)  $\theta_0 = 45^\circ$ , г)  $\theta_0 = 50^\circ$ .

На рис. 16 изображены зависимости энергетических коэффициентов оптического пропускания от длины волны внешнего оптического излучения для случая падения  $s$ -поляризованной оптической волны из воздуха на границу раздела с полубесконечной нанокompозитной средой из полиметилметакрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического из-

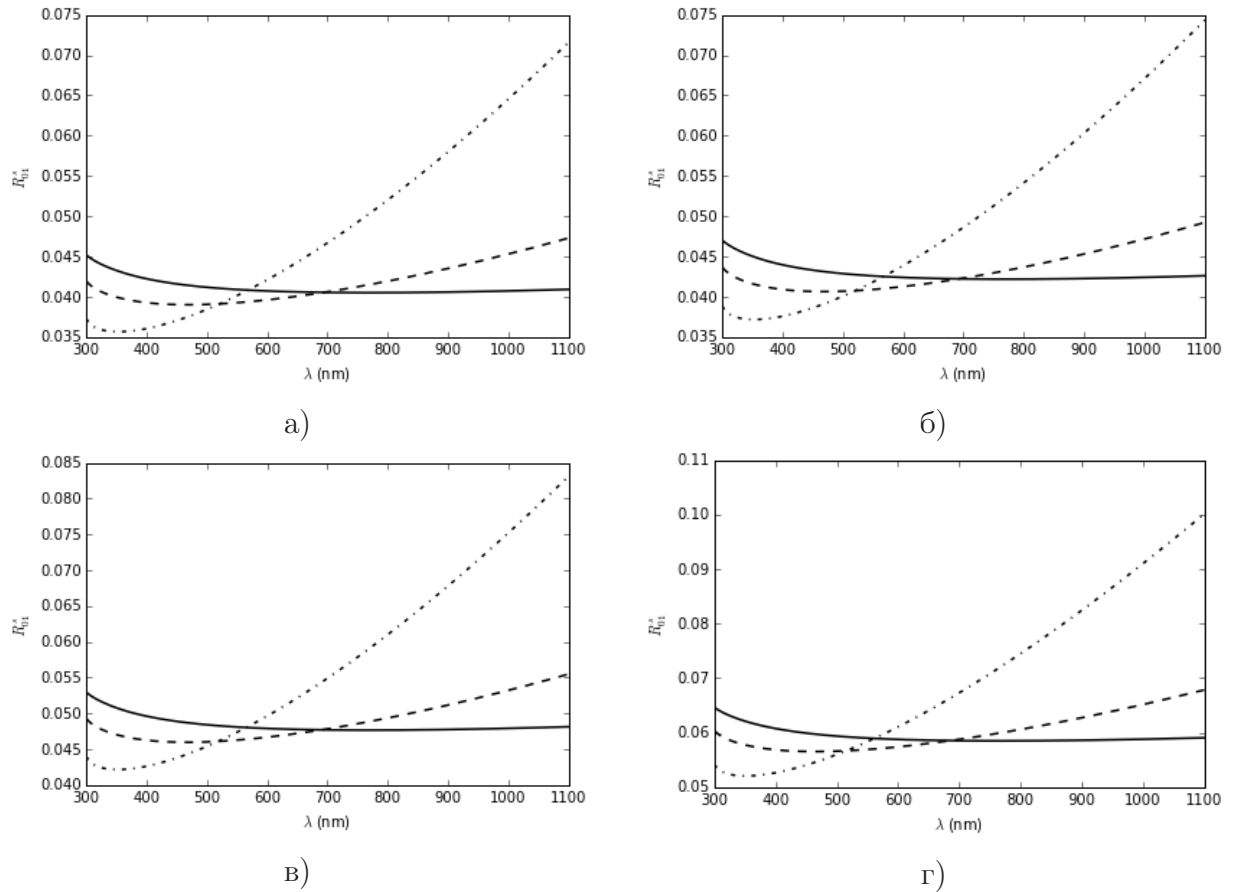


Рис. 13. Зависимости энергетических коэффициентов оптического отражения от длины волны оптического излучения для случая падения  $s$ -поляризованной оптической волны из воздуха на границу раздела с полубесконечной нанокомпозитной средой из полиметилметакрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения, расположенную на подложке из стекла ВК7 при угле падения излучения а)  $\theta_0 = 0^\circ$ , б)  $\theta_0 = 10^\circ$ , в)  $\theta_0 = 20^\circ$ , г)  $\theta_0 = 30^\circ$ .

лучения, расположенную на подложке из стекла ВК7 при угле падения излучения а)  $\theta_0 = 35^\circ$ , б)  $\theta_0 = 40^\circ$ , в)  $\theta_0 = 45^\circ$ , г)  $\theta_0 = 50^\circ$ .

Компьютерная программа для вычисления коэффициентов оптического отражения и пропускания состоит из блока подключения всех необходимых модулей для численных вычислений и построения графиков, блока описания констант, блока описания или ввода параметров, блока описания функций и процедур для вычисления оптических параметров, амплитудных и энергетических коэффициентов, блока построения графиков, блока записи графиков в файл.

В зависимости от типа основной матрицы, занимающей большую часть объёма нанокомпозитного материала, нанокомпозиты принято подразделять на три категории. Нанокомпозиты на основе керамической матрицы улучшают оптические и электрические свойства первоначального материала (керамического соединения, состоящего из смеси оксидов, нитридов, силицидов и т.д.). В нанокомпозитах на основе металлической матрицы так называемым усиливающим материалом (нанокомпонентом) часто служат углеродные нанотрубки, повышающие прочность и электрическую проводимость. Полимерные нанокомпозиты содержат полимерную матрицу с распределёнными по ней наночастицами или нанонаполнителями различной структуры.

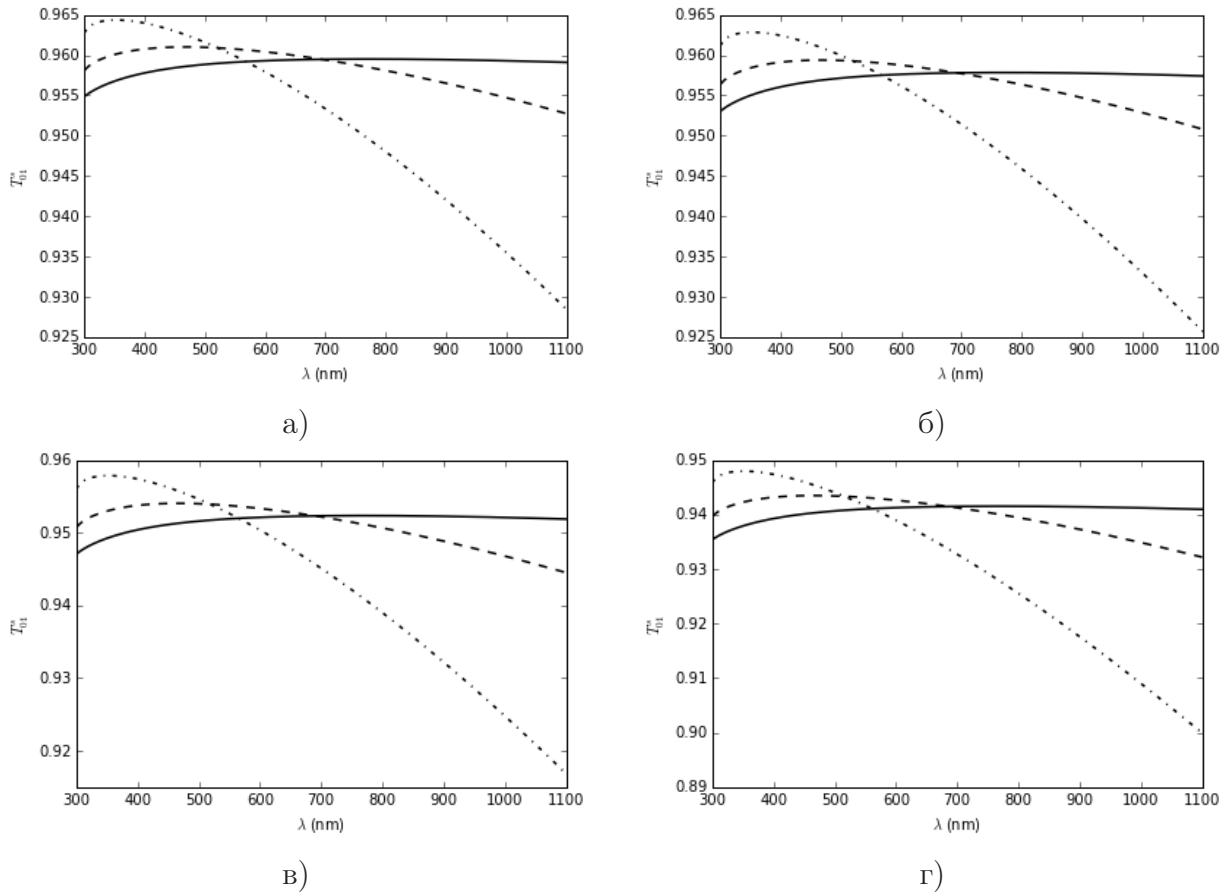


Рис. 14. Зависимости энергетических коэффициентов оптического пропускания от длины волны излучения для случая падения  $s$ -поляризованной оптической волны из воздуха на границу раздела с полубесконечной нанокомпозитной средой из полиметилметакрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения, расположенную на подложке из стекла ВК7 при угле падения излучения а)  $\theta_0 = 0^\circ$ , б)  $\theta_0 = 10^\circ$ , в)  $\theta_0 = 20^\circ$ , г)  $\theta_0 = 30^\circ$ .

## Заключение

В работе исследованы оптические характеристики нанокомпозитов. В работе проводились численные расчёты пропускательной и отражательной способностей нанокомпозитных плёнок, находящихся во внешнем поле оптического излучения.

Выводы по работе можно сформулировать следующим образом:

1. проведённый анализ литературы по физике нанокомпозитов показал актуальность исследования физических свойств нанокомпозитов,
2. построена теоретическая модель, пригодная для адекватного описания оптических процессов в нанокомпозитных плёнках с металлическими наночастицами, находящихся в поле оптического излучения,
3. компьютерная программа, которая была написана на языке программирования Python, позволяет вычислять оптические характеристики нанокомпозитных сред, строить графики зависимостей отражательной и пропускательной способностей от длины волны оптического излучения,
4. в результате численных расчётов оптических характеристик нанокомпозитных сред показано, что возможно управлять значением оптического пропускания нанокомпозитной среды, изменяя состав нанокомпозита.



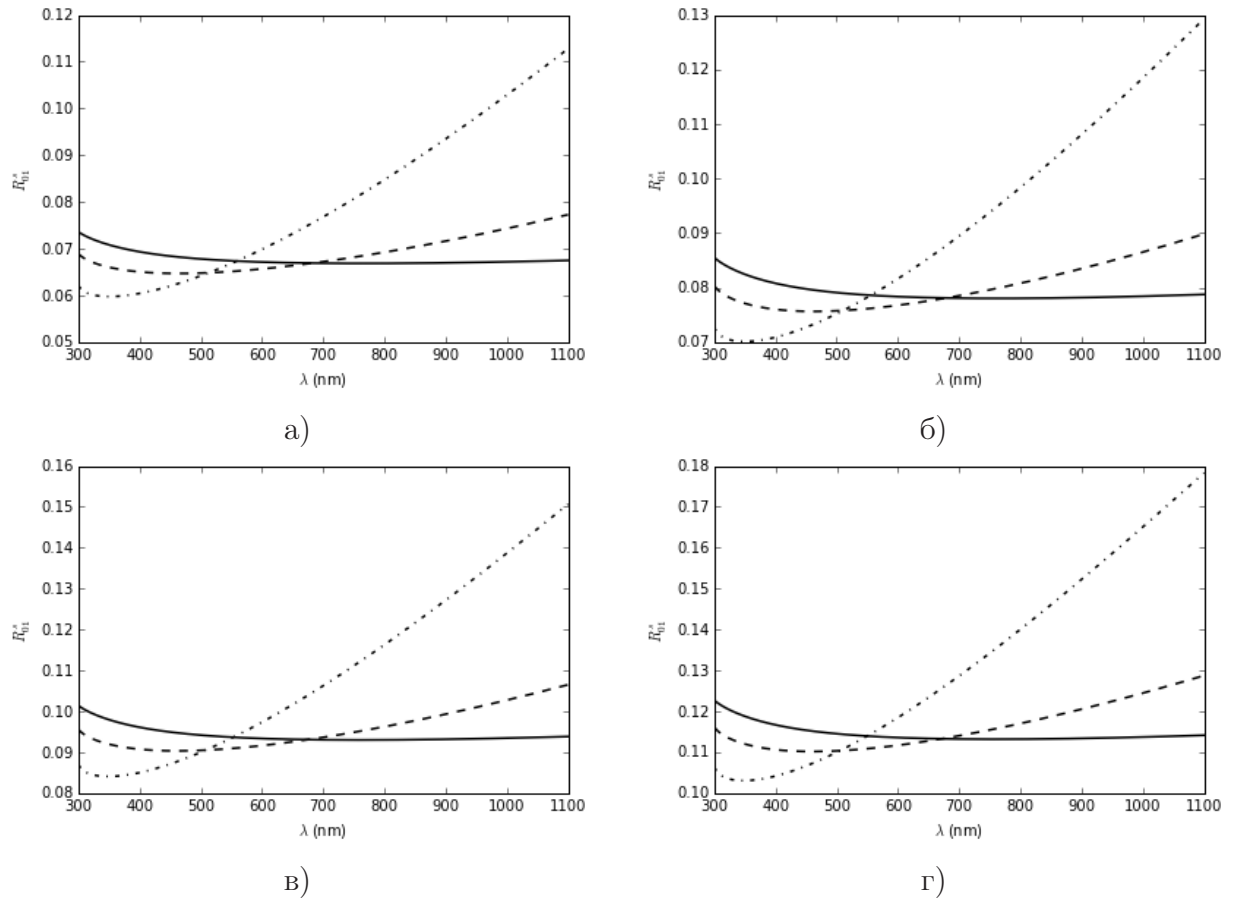


Рис. 15. Зависимости энергетических коэффициентов оптического отражения от длины волны оптического излучения для случая падения  $s$ -поляризованной оптической волны из воздуха на границу раздела с полубесконечной нанокompозитной средой из полиметилметакрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения, расположенную на подложке из стекла ВК7 при угле падения излучения а)  $\theta_0 = 35^\circ$ , б)  $\theta_0 = 40^\circ$ , в)  $\theta_0 = 45^\circ$ , г)  $\theta_0 = 50^\circ$ .

Для вычисления оптических характеристик нанокompозитных сред с металлическими наночастицами составлена компьютерная программа на языке программирования Python. Компьютерная программа позволяет строить графики зависимостей отражательной и пропускательной способностей нанокompозитных плёнок от длины волны внешнего оптического излучения. Компьютерная программа для вычисления энергетических коэффициентов оптического отражения и пропускания прозрачных нанокompозитных сред состоит из блока подключения всех необходимых модулей для численных вычислений и построения графиков, блока описания констант, блока описания или ввода параметров, блока описания функций и процедур для вычисления оптических параметров, амплитудных и энергетических коэффициентов, блока построения графиков, блока записи графиков в файл, блока отображения графиков в окне программы.

Гипотеза исследования, состоящая в том, что если использовать современные методы анализа физических свойств наноструктур с металлическими наночастицами, то можно прогнозировать состояния нанокompозитных сред с металлическими наночастицами в составе более сложных наноструктур в наноразмерных оптоэлектронных приборах и устройствах нанoeлектроники на основе нанокompозитных сред с металлическими наночастицами, подтверждена полностью.

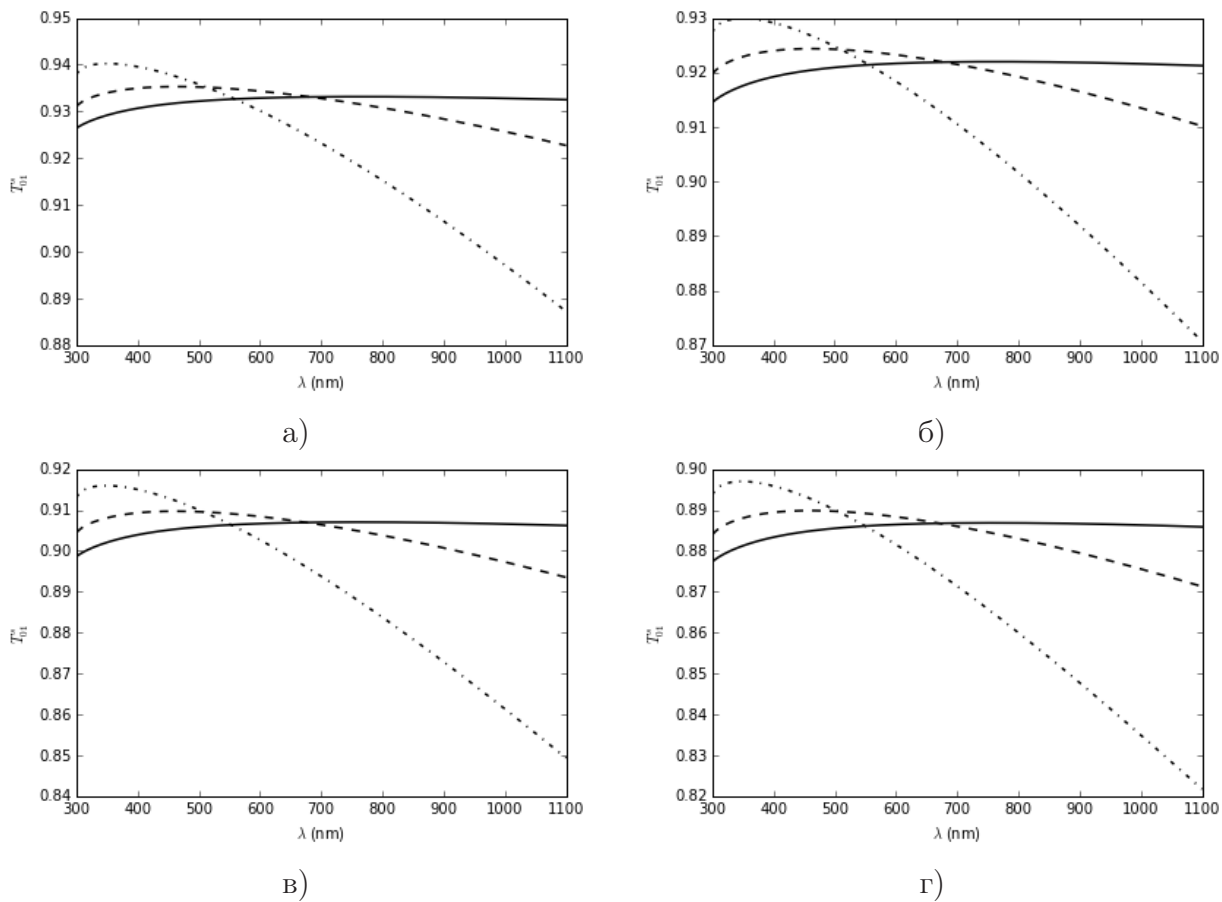


Рис. 16. Зависимости энергетических коэффициентов оптического пропускания от длины волны излучения для случая падения  $s$ -поляризованной оптической волны из воздуха на границу раздела с полубесконечной нанокompозитной средой из полиметилметакрилата с наночастицами серебра с фактором заполнения  $f_1 = 2\%$  (для сплошной линии),  $f_1 = 3\%$  (для пунктирной линии),  $f_1 = 5\%$  (для штрих-пунктирной линии) от длины волны внешнего оптического излучения, расположенную на подложке из стекла BK7 при угле падения излучения а)  $\theta_0 = 35^\circ$ , б)  $\theta_0 = 40^\circ$ , в)  $\theta_0 = 45^\circ$ , г)  $\theta_0 = 50^\circ$ .

Именно металл-полимерные нанокompозиты особенно востребованы в последнее время, потому было предложено много различных вариантов наноструктурных наполнителей, усиливающих и изменяющих свойства полимеров. В качестве матрицы в этом виде нанокompозитов применяют полипропилен, полистирол, полиамид или нейлон, а нанокompонентами выступают частицы оксидов алюминия или титана, либо углеродные, а также кремниевые нанотрубки и волокна. Нанокompозиты на основе полимеров отличаются от обычных полимерных композитных материалов меньшим весом и при этом большей ударопрочностью и износостойкостью, а также хорошим сопротивлением химическим воздействиям, что позволяет использовать их в военных и аэрокосмических разработках. Главное условие для создания полимерного нанокompозита с необходимыми свойствами заключается в полной совместимости основного материала и добавляемых к нему наночастиц, однако не менее важно для конечного результата правильно распределить наночастицы в полимерной матрице нанокompозитной плёнки.

Нанокompозитные плёнки с наночастицами серебра могут быть использованы для создания высокоэффективных просветляющих покрытий для солнечных панелей.

**Список использованных источников**

1. Lateral photovoltaic effect in silk-protein-based nanocomposite structure for physically transient position-sensitive detectors / Yuhong Cao [et al.] // *Physical Review Applied*. — 2021. — may. — Vol. 15, no. 5. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevapplied.15.054011>.
2. A physically transient form of silicon electronics / Suk-Won Hwang [et al.] // *Science*. — 2012. — sep. — Vol. 337, no. 6102. — P. 1640–1644. — URL: <https://doi.org/10.1126/science.1226325>.
3. Dissolvable metals for transient electronics / Lan Yin [et al.] // *Advanced Functional Materials*. — 2013. — sep. — Vol. 24, no. 5. — P. 645–658. — URL: <https://doi.org/10.1002/adfm.201301847>.
4. Biodegradable thin metal foils and spin-on glass materials for transient electronics / Seung-Kyun Kang [et al.] // *Advanced Functional Materials*. — 2015. — jan. — Vol. 25, no. 12. — P. 1789–1797. — URL: <https://doi.org/10.1002/adfm.201403469>.
5. Novel eco-friendly starch paper for use in flexible, transparent, and disposable organic electronics / Heejeong Jeong [et al.] // *Advanced Functional Materials*. — 2017. — nov. — Vol. 28, no. 3. — P. 1704433. — URL: <https://doi.org/10.1002/adfm.201704433>.
6. Ultrahigh tough, super clear, and highly anisotropic nanofiber-structured regenerated cellulose films / Dongdong Ye [et al.] // *ACS Nano*. — 2019. — apr. — Vol. 13, no. 4. — P. 4843–4853. — URL: <https://doi.org/10.1021/acsnano.9b02081>.
7. Dissolvable films of silk fibroin for ultrathin conformal bio-integrated electronics / Dae-Hyeong Kim [et al.] // *Nature Materials*. — 2010. — apr. — Vol. 9, no. 6. — P. 511–517. — URL: <https://doi.org/10.1038/nmat2745>.
8. Precisely printable and biocompatible silk fibroin bioink for digital light processing 3D printing / Soon Hee Kim [et al.] // *Nature Communications*. — 2018. — apr. — Vol. 9, no. 1. — URL: <https://doi.org/10.1038/s41467-018-03759-y>.
9. Materials and fabrication processes for transient and bioresorbable high-performance electronics / Suk-Won Hwang [et al.] // *Advanced Functional Materials*. — 2013. — apr. — Vol. 23, no. 33. — P. 4087–4093. — URL: <https://doi.org/10.1002/adfm.201300127>.
10. Physically transient resistive switching memory based on silk protein / Hong Wang [et al.] // *Small*. — 2016. — mar. — Vol. 12, no. 20. — P. 2715–2719. — URL: <https://doi.org/10.1002/smll.201502906>.
11. Silk inverse opals / Sunghwan Kim [et al.] // *Nature Photonics*. — 2012. — nov. — Vol. 6, no. 12. — P. 818–823. — URL: <https://doi.org/10.1038/nphoton.2012.264>.
12. Garanin Dmitry A., Chudnovsky Eugene M. Nonlinear and thermal effects in the absorption of microwaves by random magnets // *Physical Review B*. — 2022. — feb. — Vol. 105, no. 6. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.105.064402>.
13. Stability and equation of state of a nanocrystalline Ga-Ge mullite in a vitroc ceramic composite: A synchrotron X-ray diffraction study / Kristina E. Lipinska-Kalita [et al.] // *Physical Review B*. — 2008. — apr. — Vol. 77, no. 13. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.77.134107>.

14. Analysis and fabrication of antireflective coating for photovoltaics based on a photonic-crystal concept and generated by evolutionary optimization / Pauline Bennet [et al.] // *Physical Review B*. — 2021. — mar. — Vol. 103, no. 12. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.103.125135>.
15. Cavity Enhancement of Anti-Stokes Scattering via Optomechanical Coupling with Surface Acoustic Waves / Ayato Okada [et al.] // *Physical Review Applied*. — 2018. — aug. — Vol. 10, no. 2. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevapplied.10.024002>.
16. Aspelmeyer Markus, Kippenberg Tobias J., Marquardt Florian. Cavity optomechanics // *Reviews of Modern Physics*. — 2014. — dec. — Vol. 86, no. 4. — P. 1391–1452. — URL: <https://doi.org/10.1103/revmodphys.86.1391>.
17. Sideband cooling of micromechanical motion to the quantum ground state / J. D. Teufel [et al.] // *Nature*. — 2011. — jul. — Vol. 475, no. 7356. — P. 359–363. — URL: <https://doi.org/10.1038/nature10261>.
18. Laser cooling of a nanomechanical oscillator into its quantum ground state / Jasper Chan [et al.] // *Nature*. — 2011. — oct. — Vol. 478, no. 7367. — P. 89–92. — URL: <https://doi.org/10.1038/nature10461>.
19. Bose S., Jacobs K., Knight P. L. Preparation of nonclassical states in cavities with a moving mirror // *Physical Review A*. — 1997. — nov. — Vol. 56, no. 5. — P. 4175–4186. — URL: <https://doi.org/10.1103/physreva.56.4175>.
20. Nanomechanical coupling between microwave and optical photons / Joerg Bochmann [et al.] // *Nature Physics*. — 2013. — sep. — Vol. 9, no. 11. — P. 712–716. — URL: <https://doi.org/10.1038/nphys2748>.
21. Near-field effect in composite nanomaterials with a quasi-zero refractive index / O. N. Gadomsky [et al.] // *Optics Communications*. — 2014. — mar. — Vol. 315. — P. 286–294. — URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.optcom.2013.11.035>.
22. Altunin K. K., Gadomsky O. N. High-negative effective refractive index of silver nanoparticles system in nanocomposite films // *Optics Communications*. — 2012. — mar. — Vol. 285, no. 5. — P. 816–820. — URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.optcom.2011.11.033>.

### 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](mailto:kostya_altunin@mail.ru)

ORCID iD  0000-0002-0725-9416

Web of Science ResearcherID  I-5739-2014

SCOPUS ID  57201126207

IstinaResearcherID  66185348

**Елизавета Сергеевна Железникова** — студент факультета физико-математического и технологического образования ФГБОУ ВО «Ульяновский государственный педагогический университет имени И. Н. Ульянова», Ульяновск, Россия.


E-mail: zheleznikovaliza200@gmail.com

ORCID iD  0000-0002-5854-1366

Web of Science ResearcherID  AGV-8100-2022

**Вероника Васильевна Соколова** — студент факультета физико-математического и технологического образования ФГБОУ ВО «Ульяновский государственный педагогический университет имени И. Н. Ульянова», Ульяновск, Россия.

E-mail: sokolovavasilevna2002@inbox.ru

ORCID iD  0000-0003-3479-119X

Web of Science ResearcherID  AGV-8078-2022

Original article  
PACS 42.25.Bs  
OCIS 310.6860  
MSC 00A79

## Investigation of optical reflection and transmission of a nanocomposite structure with metal nanoparticles

K. K. Altunin , E. S. Zheleznikova , V. V. Sokolova 

*Ulyanovsk State Pedagogical University, 432071, Ulyanovsk, Russia*

Submitted October 5, 2023  
Resubmitted October 12, 2023  
Published December 12, 2023

---

**Abstract.** The optical reflection and transmission of a nanocomposite structure with metal nanoparticles located in an optical radiation field is considered. The results of numerical calculations of the energy coefficients of optical reflection and transmission from the surface of a nanocomposite film with silver nanoparticles at different angles of incidence of radiation on the surface of the nanocomposite film are presented.

**Keywords:** optical transmission, optical reflection, optical radiation, nanocomposite, nanostructure, nanoparticle, silver nanoparticles

---

### References

1. Lateral photovoltaic effect in silk-protein-based nanocomposite structure for physically transient position-sensitive detectors / Yuhong Cao [et al.] // *Physical Review Applied*. — 2021. — may. — Vol. 15, no. 5. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevapplied.15.054011>.
2. A physically transient form of silicon electronics / Suk-Won Hwang [et al.] // *Science*. — 2012. — sep. — Vol. 337, no. 6102. — P. 1640–1644. — URL: <https://doi.org/10.1126/science.1226325>.
3. Dissolvable metals for transient electronics / Lan Yin [et al.] // *Advanced Functional Materials*. — 2013. — sep. — Vol. 24, no. 5. — P. 645–658. — URL: <https://doi.org/10.1002/adfm.201301847>.
4. Biodegradable thin metal foils and spin-on glass materials for transient electronics / Seung-Kyun Kang [et al.] // *Advanced Functional Materials*. — 2015. — jan. — Vol. 25, no. 12. — P. 1789–1797. — URL: <https://doi.org/10.1002/adfm.201403469>.
5. Novel eco-friendly starch paper for use in flexible, transparent, and disposable organic electronics / Heejeong Jeong [et al.] // *Advanced Functional Materials*. — 2017. — nov. — Vol. 28, no. 3. — P. 1704433. — URL: <https://doi.org/10.1002/adfm.201704433>.
6. Ultrahigh tough, super clear, and highly anisotropic nanofiber-structured regenerated cellulose Films / Dongdong Ye [et al.] // *ACS Nano*. — 2019. — apr. — Vol. 13, no. 4. — P. 4843–4853. — URL: <https://doi.org/10.1021/acsnano.9b02081>.



7. Dissolvable films of silk fibroin for ultrathin conformal bio-integrated electronics / Dae-Hyeong Kim [et al.] // *Nature Materials*. — 2010. — apr. — Vol. 9, no. 6. — P. 511–517. — URL: <https://doi.org/10.1038/nmat2745>.
8. Precisely printable and biocompatible silk fibroin bioink for digital light processing 3D printing / Soon Hee Kim [et al.] // *Nature Communications*. — 2018. — apr. — Vol. 9, no. 1. — URL: <https://doi.org/10.1038/s41467-018-03759-y>.
9. Materials and fabrication processes for transient and bioresorbable high-performance electronics / Suk-Won Hwang [et al.] // *Advanced Functional Materials*. — 2013. — apr. — Vol. 23, no. 33. — P. 4087–4093. — URL: <https://doi.org/10.1002/adfm.201300127>.
10. Physically transient resistive switching memory based on silk protein / Hong Wang [et al.] // *Small*. — 2016. — mar. — Vol. 12, no. 20. — P. 2715–2719. — URL: <https://doi.org/10.1002/smll.201502906>.
11. Silk inverse opals / Sunghwan Kim [et al.] // *Nature Photonics*. — 2012. — nov. — Vol. 6, no. 12. — P. 818–823. — URL: <https://doi.org/10.1038/nphoton.2012.264>.
12. Garanin Dmitry A., Chudnovsky Eugene M. Nonlinear and thermal effects in the absorption of microwaves by random magnets // *Physical Review B*. — 2022. — feb. — Vol. 105, no. 6. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.105.064402>.
13. Stability and equation of state of a nanocrystalline Ga-Ge mullite in a vitroc ceramic composite: A synchrotron x-ray diffraction study / Kristina E. Lipinska-Kalita [et al.] // *Physical Review B*. — 2008. — apr. — Vol. 77, no. 13. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.77.134107>.
14. Analysis and fabrication of antireflective coating for photovoltaics based on a photonic-crystal concept and generated by evolutionary optimization / Pauline Bennet [et al.] // *Physical Review B*. — 2021. — mar. — Vol. 103, no. 12. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.103.125135>.
15. Cavity Enhancement of Anti-Stokes Scattering via Optomechanical Coupling with Surface Acoustic Waves / Ayato Okada [et al.] // *Physical Review Applied*. — 2018. — aug. — Vol. 10, no. 2. — URL: <https://doi.org/10.1103/physrevapplied.10.024002>.
16. Aspelmeyer Markus, Kippenberg Tobias J., Marquardt Florian. Cavity optomechanics // *Reviews of Modern Physics*. — 2014. — dec. — Vol. 86, no. 4. — P. 1391–1452. — URL: <https://doi.org/10.1103/revmodphys.86.1391>.
17. Sideband cooling of micromechanical motion to the quantum ground state / J. D. Teufel [et al.] // *Nature*. — 2011. — jul. — Vol. 475, no. 7356. — P. 359–363. — URL: <https://doi.org/10.1038/nature10261>.
18. Laser cooling of a nanomechanical oscillator into its quantum ground state / Jasper Chan [et al.] // *Nature*. — 2011. — oct. — Vol. 478, no. 7367. — P. 89–92. — URL: <https://doi.org/10.1038/nature10461>.
19. Bose S., Jacobs K., Knight P. L. Preparation of nonclassical states in cavities with a moving mirror // *Physical Review A*. — 1997. — nov. — Vol. 56, no. 5. — P. 4175–4186. — URL: <https://doi.org/10.1103/physreva.56.4175>.

20. Nanomechanical coupling between microwave and optical photons / Joerg Bochmann [et al.] // Nature Physics. — 2013. — sep. — Vol. 9, no. 11. — P. 712–716. — URL: <https://doi.org/10.1038/nphys2748>.
21. Near-field effect in composite nanomaterials with a quasi-zero refractive index / O. N. Gadomsky [et al.] // Optics Communications. — 2014. — mar. — Vol. 315. — P. 286–294. — URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.optcom.2013.11.035>.
22. Altunin K. K., Gadomsky O. N. High-negative effective refractive index of silver nanoparticles system in nanocomposite films // Optics Communications. — 2012. — mar. — Vol. 285, no. 5. — P. 816–820. — URL: <http://dx.doi.org/10.1016/j.optcom.2011.11.033>.

**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 Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education “Ulyanovsk State Pedagogical University”, Ulyanovsk, Russia.

E-mail: [kostya.altunin@mail.ru](mailto:kostya.altunin@mail.ru)

ORCID iD  0000-0002-0725-9416

Web of Science ResearcherID  I-5739-2014

SCOPUS ID  57201126207

IstinaResearcherID  66185348

**Elizaveta Sergeevna Zheleznikova** — student of the Faculty of Physics, Mathematics and Technological Education of the Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education “Ulyanovsk State Pedagogical University”, Ulyanovsk, Russia.

E-mail: [zheleznikovaliza200@gmail.com](mailto:zheleznikovaliza200@gmail.com)

ORCID iD  0000-0002-5854-1366

Web of Science ResearcherID  AGV-8100-2022

**Veronika Vasilievna Sokolova** — student of the Faculty of Physics, Mathematics and Technological Education of the Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education “Ulyanovsk State Pedagogical University”, Ulyanovsk, Russia.

E-mail: [sokolovavasilevna2002@inbox.ru](mailto:sokolovavasilevna2002@inbox.ru)

ORCID iD  0000-0003-3479-119X

Web of Science ResearcherID  AGV-8078-2022