

УДК 535.341.08

РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТОВ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПОГЛОЩЕНИЯ НАНОЧАСТИЦ АЛЮМИНИЯ
НА ДЛИНЕ ВОЛНЫ 690 НМ

А. В. Каленский, А. П. Никитин, М. В. Ананьева

CALCULATION OF ALUMINIUM NANOPARTICLES ABSORPTIVITY
AT THE WAVELENGTH OF 690 NM

A. V. Kalenskii, A. P. Nikitin, M. V. Ananyeva

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (госзадание № 2014/64) и Российского Фонда Фундаментальных Исследований (№ 14-03-00534 А).

В работе исследована зависимость коэффициентов эффективности поглощения наночастицами алюминия (в вакууме) от температуры в интервале 300 – 700 К. При увеличении температуры наночастицы алюминия коэффициент эффективности поглощения увеличивается во всем исследованном диапазоне. Рассчитаны зависимости максимальных коэффициентов эффективности поглощения и оптимальных размеров наночастицы от температуры. Для каждого радиуса наночастицы в диапазоне от 50 до 200 нм исследуемая зависимость интерполируется полиномом второго порядка, получены коэффициенты разложения. Результаты необходимы для оптимизации составов капсулей оптических детонаторов и устройств оптоакустики.

The paper investigates the dependence of aluminium nanoparticles absorptivity (in a vacuum) on the temperature in the range from 300 to 700 K. If the temperature increases, the absorptivity also increases all over the examined range. The dependences of absorptivity maximums and optimal nanoparticles sizes on the temperature were calculated. For each of the nanoparticles radii in the range from 50 to 200 nm the dependence might be described using polynomial of the second degree. The expansion coefficients were calculated. The results of the work are important to enhance the cup of the optical detonator and optoacoustic equipment.

Ключевые слова: оптические свойства, показатель поглощения, теория Ми, коэффициент эффективности поглощения, наночастицы алюминия.

Keywords: optical properties, linear absorption index, Mie theory, absorptivity, aluminum nanoparticles.

Экспериментальному и теоретическому исследованию оптических свойствам наночастиц металлов в посвящен ряд работ [7; 10; 18]. Прикладной аспект проблемы заключается в широком практическом использовании процессов поглощения света (в том числе на длине волны рубинового лазера – 690 нм) наночастицами в прозрачных матрицах. Взаимодействие излучения с наночастицей приводит к ее нагреванию [20; 22; 24]. В устройствах нелинейной оптики термоупругие напряжения могут вызвать деградацию потребительских свойств материала, заключающихся в уменьшении прозрачности матрицы в условиях образования локальных дефектных областей и образованию каверн на рабочей поверхности устройства. С другой стороны, оптимизация составов капсулей оптических детонаторов [4; 11] и устройств оптоакустики требует определения условий, при которых коэффициент эффективности поглощения будет максимальным [16; 12]. Возможность использования композитов на основе наночастиц алюминия и вторичных взрывчатых веществ в качестве капсулей оптических детонаторов отмечалась в работах [8; 14]. Показано, что эффективность поглощения [25] и рассеяния [2; 23] света в образце, длина волны инициирующего излучения [3; 13], учет фазовых переходов [1; 17] оказывают существенное влияние на эффективность нагревания наночастицы. Однако увеличение температуры приводит одновременно к изменению коэффициента эффективности поглощения.

Целью настоящей работы является исследование зависимости коэффициентов эффективности поглощения наночастиц алюминия от температуры на длине волны 690 нм.

Коэффициент эффективности поглощения света (Q_{abs}) сферической наночастицей (радиуса R) рассчитывался (как и в работах [6; 16]) в рамках теории Ми как разность коэффициентов эффективности экстинкции (Q) и рассеяния (Q_{sca}):

$$Q_{\text{sca}} = \frac{2}{\rho^2} \sum_{l=1}^{\infty} (2l+1) \cdot (|c_l|^2 + |b_l|^2),$$

$$Q = \frac{2}{\rho^2} \text{Im} \sum_{l=1}^{\infty} (2l+1) \cdot (c_l - b_l),$$

где $\rho = 2\pi R/\lambda$, а λ – длина волны. Коэффициенты c_l и b_l определяются из граничных условий на поверхности наночастицы [9]:

$$c_l = i \frac{\psi_l(\rho)\psi_l'(n\rho) - n\psi_l'(\rho)\psi_l(n\rho)}{\zeta_l(\rho)\psi_l(n\rho) - n\zeta_l'(\rho)\psi_l(n\rho)},$$

$$b_l = -i \frac{\psi_l'(\rho)\psi_l(n\rho) - n\psi_l(\rho)\psi_l'(n\rho)}{\zeta_l'(\rho)\psi_l(n\rho) - n\zeta_l(\rho)\psi_l'(n\rho)},$$

где $n = m/m_0$ – комплексный показатель преломления наночастицы относительно среды. Для вычисления функций (ψ_l и ζ_l) и их производных (ψ_l' и ζ_l') использовались рекуррентные соотношения, приведенные в работах [6; 9].

Основным параметром, определяющим зависимость $Q_{\text{abs}}(R)$ при различных температурах (T) является комплексный показатель преломления металла (m). В таблице 1 приведены комплексные показатели преломления алюминия для длины волны $\lambda = 690$ нм (рубино-

вый лазер) при температурах 300 – 700 К. Значения m_i при температурах 300 К, 500 К и 700 К (1.8-6.25i, 2.5-4.9i и 2.6-3.9i, соответственно) взяты из работы [19].

Остальные значения m_i получены интерполяцией полиномом второго порядка.

Таблица 1

Рассчитанные при температурах T комплексные показатели преломления (m_i), максимальные коэффициенты эффективности поглощения наночастиц алюминия в вакууме ($Q_{abs\ max}$), соответствующие им радиусы ($R_{abs\ max}$) и коэффициенты эффективности поглощения для $R = 50, 125$ и 200 нм

T, K	m_i	$Q_{abs\ max}$	$R_{abs\ max\ нм}$	$Q_{abs} (50\ нм)$	$Q_{abs} (125\ нм)$	$Q_{abs} (200\ нм)$
300	1.8-6.25i	0.4706	102.3	0.1980	0.4231	0.3711
325	1.9203-6.0621i	0.5216	102.0	0.2198	0.4678	0.4107
350	2.0313-5.8797i	0.5722	101.7	0.2416	0.5121	0.4499
375	2.1328-5.7027i	0.6222	101.4	0.2633	0.5557	0.4886
400	2.225-5.5313i	0.6712	101.1	0.2846	0.5985	0.5265
425	2.3078-5.3652i	0.7192	100.9	0.3055	0.6402	0.5636
450	2.3812-5.2047i	0.7659	100.6	0.3259	0.6807	0.5996
475	2.4453-5.0496i	0.8111	100.4	0.3457	0.7200	0.6346
500	2.5-4.9i	0.8549	100.2	0.3648	0.7580	0.6683
525	2.5453-4.7559i	0.8971	100.0	0.3832	0.7945	0.7008
550	2.5812-4.6172i	0.9376	99.8	0.4008	0.8296	0.7321
575	2.6078-4.484i	0.9767	99.6	0.4176	0.8633	0.7622
600	2.625-4.3563i	1.0141	99.4	0.4337	0.8955	0.7910
625	2.6328-4.234i	1.0501	99.3	0.4491	0.9264	0.8186
650	2.6312-4.1172i	1.0847	99.1	0.4639	0.9558	0.8451
675	2.6203-4.0059i	1.1179	98.9	0.4782	0.9839	0.8705
700	2.6-3.9i	1.1499	98.7	0.4921	1.0106	0.8947

Используя полученные комплексные показатели преломления, для каждой температуры рассчитаны зависимости коэффициента эффективности поглощения света (Q_{abs}) от радиуса сферической наночастицы. Зависимости имеют максимумы ($Q_{abs\ max}$), положение которых ($R_{abs\ max}$) зависят от температуры. Для уточнения максимума зависимости $Q_{abs}(R)$ рассчитаны с шагом 0.1 нм. При $T = 300$ К $Q_{abs\ max} = 0.4706$ при $R_{abs\ max} = 102.3$ нм. При увеличении температуры $Q_{abs\ max}$ увеличивается, а $R_{abs\ max}$ – уменьшается. При $T = 700$ К $Q_{abs\ max}$ возрастает в 2.44 раза, при этом $R_{abs\ max}$ уменьшается всего на 4 %. Увеличение температуры приводит к росту коэффициента эффективности поглощения света и уменьшению оптимального размера наночастиц. Такие закономерности для ряда металлов наблюдаются при уменьшении длины волны лазерного импульса [3; 13], или увеличении оптической плотности матрицы [15], в которую помещены наночастицы.

При моделировании быстропротекающих процессов в энергетических материалах [5; 21] постоянной величиной остается радиус наночастицы, а температура изменяется в результате поглощения света. В таблице 1 приведены рассчитанные значения коэффициентов эффективности поглощения света наночастицами алюминия радиусами 50 нм ($Q_{abs} (50\ нм)$), 125 нм ($Q_{abs} (125\ нм)$) и 200 нм ($Q_{abs} (200\ нм)$). На рисунке 1 приведена рассчитанная зависимость коэффициента эффективности поглощения наночастиц алюминия радиусом 100 нм от температуры (точки) для длины волны 690 нм. На этом же рисунке представлена аппроксимация рассчитанной зависимости полиномом второго порядка (линия). Выбор радиуса определяется тем, что в интервале температур от комнатной до 700 К $R_{abs\ max} =$

(100 ± 2) нм. В этом температурном диапазоне коэффициент эффективности поглощения увеличивается с 0.4698 до 1.1493 (почти в 2.5 раза).

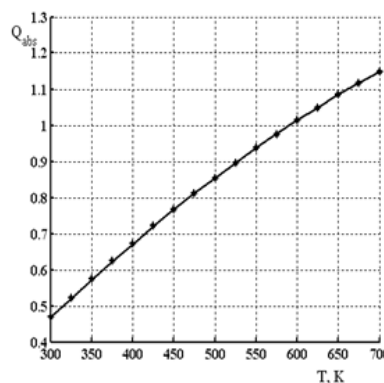


Рис. 1. Зависимость коэффициента эффективности поглощения наночастиц алюминия радиусом 100 нм от температуры при длине волны 690 нм

В таблице 2 представлены рассчитанные значения Q_{abs} для температур 300, 500 и 700 К. Зависимости коэффициента эффективности поглощения от температуры в актуальном диапазоне температур для радиусов наночастиц алюминия от 50 до 200 нм хорошо интерполируется полиномом второго порядка $Q_{abs} = a \cdot T^2 + b \cdot T + c$, коэффициенты разложения для различных радиусов представлены в столбцах 5 – 7 таблицы 2.

Рассчитанные при радиусах R коэффициенты эффективности поглощения наночастиц алюминия при температурах 300, 500 и 700 К и коэффициенты разложения $Q_{abs} = f(T)$ в полином второй степени

$R, \text{ нм}$	$Q_{abs} (300 \text{ К})$	$Q_{abs} (500 \text{ К})$	$Q_{abs} (700 \text{ К})$	$a \cdot 10^7$	$b \cdot 10^3$	$c \cdot 10^1$
50	0.1980	0.3648	0.4921	-4.9391	1.2291	-1.2627
60	0.2606	0.4884	0.6678	-6.0342	1.6214	-1.7149
70	0.3282	0.6181	0.8503	-7.2001	2.0252	-2.1454
80	0.3949	0.7392	1.0135	-8.7436	2.4208	-2.5262
90	0.4467	0.8251	1.1206	-10.3438	2.7191	-2.7589
100	0.4698	0.8549	1.1493	-11.3231	2.8311	-2.7758
110	0.4630	0.8334	1.1128	-11.3629	2.7607	-2.6290
120	0.4380	0.7847	1.0456	-10.7166	2.5907	-2.4275
130	0.4086	0.7327	0.9782	-9.8178	2.4057	-2.2478
140	0.3838	0.6913	0.9270	-8.9808	2.2560	-2.1215
150	0.3676	0.6660	0.8974	-8.3722	2.1617	-2.0550
160	0.3606	0.6564	0.8877	-8.0671	2.1245	-2.0415
170	0.3610	0.6585	0.8914	-8.0732	2.1332	-2.0630
180	0.3655	0.6656	0.8991	-8.3148	2.1653	-2.0921
190	0.3701	0.6705	0.9019	-8.6316	2.1926	-2.1004
200	0.3711	0.6683	0.8947	-8.8453	2.1936	-2.0735

Значение коэффициента b для радиусов в интервале от 50 до 200 нм положительно, следовательно, с увеличением температуры Q_{abs} увеличивается, но скорость роста значения коэффициента эффективности поглощения – уменьшается (коэффициент a – отрицательный).

Вывод: при моделировании процессов кондуктивного теплопереноса в наночастице при нагревании светом необходимо учитывать зависимость коэффициента эффективности поглощения от температуры.

Литература

1. Адуев Б. П., Ананьева М. В., Звекон А. А., Каленский А. В., Кригер В. Г., Никитин А. П. Микроочаговая модель лазерного инициирования взрывного разложения энергетических материалов с учетом плавления // Физика горения и взрыва. 2014. Т. 50. № 6. С. 92 – 99.
2. Адуев Б. П., Нурмухаметов Д. Р., Белокуров Г. М., Звекон А. А., Каленский А. В., Никитин А. П., Лисков И. Ю. Исследование оптических свойств наночастиц алюминия в тетранитропентаэритрите с использованием фотометрического шара // Журнал технической физики. 2014. Т. 84. № 9. С. 126 – 131.
3. Адуев Б. П., Нурмухаметов Д. Р., Фурега Р. И., Звекон А. А., Каленский А. В. Взрывчатое разложение ТЭНа с нанодобавками алюминия при воздействии импульсного лазерного излучения различной длины волны // Химическая физика. 2013. Т. 32. № 8. С. 39 – 42.
4. Ананьева М. В., Звекон А. А., Зыков И. Ю., Каленский А. В., Никитин А. П. Перспективные составы для капсуля оптического детонатора // Перспективные материалы. 2014. № 7. С. 5 – 12.
5. Ананьева М. В., Каленский А. В. Иницирование взрывного разложения микрокристаллов азида серебра // Молодой ученый. 2014. № 19. С. 52 – 55.
6. Газенаур Н. В., Зыков И. Ю., Каленский А. В. Зависимость показателя поглощения меди от длины волны // Аспирант. 2014. № 5. С. 94 – 98.
7. Звекон А. А., Каленский А. В., Никитин А. П., Адуев Б. П. Моделирование распределения интенсивности в прозрачной среде с Френелевскими границами, содержащей наночастицы алюминия // Компьютерная оптика. 2014. Т. 38. № 4. С. 749 – 756.
8. Зыков И. Ю. Критическая плотность энергии инициирования тэна с добавками наночастиц алюминия // Международное научное издание Современные фундаментальные и прикладные исследования. 2013. № 1(8). С. 79 – 84.
9. Зыков И. Ю. Учет эффективности поглощения при разогреве нановключений лазерным излучением // Международное научное издание Современные фундаментальные и прикладные исследования. 2012. № 3(6). С. 43 – 50.
10. Зыков И. Ю., Одинцова О. В. Спектральная зависимость коэффициентов эффективности поглощения наночастиц серебра в прозрачной матрице // Аспирант. 2014. № 5. С. 99 – 102.
11. Каленский А. В., Ананьева М. В., Звекон А. А., Зыков И. Ю. Спектральная зависимость критической плотности энергии инициирования композитов на основе пентаэритриттетранитрата с наночастицами никеля // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. Т. 11. № 3. С. 340 – 345.
12. Каленский А. В., Ананьева М. В., Никитин А. П. Оптические характеристики наночастиц никеля в прозрачных матрицах // Современные научные исследования и инновации. 2014. № 11-1 (43). С. 5 – 13.
13. Каленский А. В., Звекон А. А., Ананьева М. В., Зыков И. Ю., Кригер В. Г., Адуев Б. П. Влияние длины волны лазерного излучения на критическую плотность энергии инициирования энергетических материалов // Физика горения и взрыва. 2014. Т. 50. № 3. С. 98 – 104.

14. Каленский А. В., Зыков И. Ю., Ананьева М. В., Звекон А. А., Адуев Б. П. Взрывная чувствительность компози- тов тэн-алюминий к действию импульсного лазерного излучения // Вестник КемГУ. 2014. № 3(59) Т. 3. С. 211 – 217.
15. Каленский А. В., Зыков И. Ю., Никитин А. П. Расчет коэффициентов эффективности поглощения наноча- стиц алюминия в прозрачных средах // Все материалы. Энциклопедический справочник. 2015. № 1. С. 15 – 19.
16. Кригер В. Г., Каленский А. В., Звекон А. А., Зыков И. Ю., Адуев Б. П. Влияние эффективности поглощения лазерного излучения на температуру разогрева включения в прозрачных средах // Физика горения и взрыва. 2012. Т. 48. № 6. С. 54 – 58.
17. Кригер В. Г., Каленский А. В., Звекон А. А., Зыков И. Ю., Никитин А. П. Процессы теплопереноса при ла- зерном разогреве включений в инертной матрице // Теплофизика и аэромеханика. 2013. Т. 20. № 3. С. 375 – 382.
18. Лукатова С. Г. Спектральные закономерности коэффициентов эффективности поглощения композитов зо- лото-тэн // Международное научное издание Современные фундаментальные и прикладные исследования. 2014. № 2(13). С. 54 – 58.
19. Магунов А. Н. Лазерная термометрия твердых тел. М.: Физматлит, 2001. 224 с.
20. Чумаков Ю. А., Князева А. Г. Инициирование реакции в окрестности одиночной частицы, нагреваемой СВЧ излучением // Физика горения и взрыва. 2012. Т. 28. № 2. С. 24 – 30.
21. Ananyeva M. V., Kalenskii A. V. The size effects and before-threshold mode of solid-state chain reaction // Журнал Сибирского федерального университета. (Серия: Химия). 2014. Т. 7. № 4. С. 470 – 479.
22. Ananyeva M. V., Kriger V. G., Kalenskii A. V., Zvekov A. A., Borovicova A. P., Grishaeva E. A., Zycov I. Yu. Comparative Analysis of Energetic Materials Explosion Chain and Thermal Mechanisms // Известия вузов. Физика. 2012. Т. 55. № 11/3. С. 13 – 17.
23. Zvekov A. A., Ananyeva M. V., Kalenskii A. V., Nikitin A. P. Regularities of light diffusion in the compo site ma- terial pentaery thriol tetranitrate – nickel // Наносистемы: физика, химия, математика. 2014. Т. 5. № 5. С. 685 – 691.
24. Kalenskii A. V., Ananyeva M. V. Spectral regularities of the critical energy density of the pentaerythriol tetranitrate - aluminium nanosystems initiated by the laser pulse // Наносистемы: физика, химия, математика. 2014. Т. 5. № 6. С. 803 – 810.
25. Kalenskii A. V., Kriger V. G., Zvekov A. A., Grishaeva E. A., Zycov I. Yu., Nikitin A. P. The Microcenter Heat Explosion Model Modernization // Известия вузов. Физика. 2012. Т. 55. № 11/3. С. 62 – 66.

Информация об авторах:

Каленский Александр Васильевич – профессор кафедры химии твердого тела КемГУ, kriger@kemsu.ru.
Alexander V. Kalenskii – Professor at the Department of Solid State Chemistry, Kemerovo State University.

Никитин Андрей Павлович – аспирант Института углехимии и химического материаловедения СО РАН, Кеме- рово.

Andrey P. Nikitin – post-graduate student at the Institute of Coal Chemistry and Material Science of the Siberian Branch of the RAS.

(Научный руководитель: **Адуев Борис Петрович** – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лаборатории энергетических соединений и нанокompозитов института углехимии и химического материалове- дения СО РАН, lesinko-iuxm@yandex.ru).

Boris P. Aduev – doctor of physico-mathematical Sciences, Professor, head of laboratory of energetic compounds and nanocomposites Institute of Coal Chemistry and Material Science SB RAS).

Ананьева Марина Владимировна – научный сотрудник кафедры химии твердого тела КемГУ.

Marina V. Ananyeva – Research Associate at the Department of Solid State Chemistry, Kemerovo State University.

Статья поступила в редколлегию 22.01.2015 г.