

**Физика. Материаловедение**

УДК 538.958

**Морев Никита Геннадьевич**Амурский государственный университет  
г. Благовещенск, Россия*E-mail:* [nikita2002morev@mail.ru](mailto:nikita2002morev@mail.ru)**Дудин Андрей Николаевич**Амурский государственный университет  
г. Благовещенск, Россия*E-mail:* [andrew.n.dudin@gmail.com](mailto:andrew.n.dudin@gmail.com)**Нещименко Виталий Владимирович**Амурский государственный университет  
г. Благовещенск, Россия*E-mail:* [v1taly@mail.ru](mailto:v1taly@mail.ru)**Morev Nikita Gennadievich**Amur State University  
Blagoveshchensk, Russia*E-mail:* [nikita2002morev@mail.ru](mailto:nikita2002morev@mail.ru)**Dudin Andrey Nikolaevich**Amur State University  
Blagoveshchensk, Russia*E-mail:* [andrew.n.dudin@gmail.com](mailto:andrew.n.dudin@gmail.com)**Neshchimenko Vitaly Vladimirovich**Amur State University  
Blagoveshchensk, Russia*E-mail:* [v1taly@mail.ru](mailto:v1taly@mail.ru)**СРАВНЕНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЛЫХ И СПЛОШНЫХ СФЕР ОКСИДА ЦИНКА****COMPARISON OF OPTICAL PROPERTIES OF HOLLOW AND SOLID SPHERES OF ZINC OXIDE**

*Аннотация. Построена модель распределения поглощенного излучения в частицах оксида цинка в форме сплошного микрошара и полый микросферы. Установлено, что рассеяние света интенсивней происходит на полых микрочастицах.*

*Abstract. A model of the distribution of absorbed radiation in zinc oxide particles in the form of a solid microball and hollow microsphere is constructed. It is established that light scattering occurs more intensively on hollow microparticles.*

*Ключевые слова: оптические свойства, полые частицы, оксид цинка.*

*Key words: optical properties, hollow particles, zinc oxide.*

DOI: 10.22250/20730268\_2023\_103\_17

**Введение**

Изучение влияния формы частиц на оптические свойства помогает разрабатывать новые материалы с уникальными оптическими характеристиками. Это важно для создания более эффективных и функциональных материалов в таких областях как фотоника, лазерные технологии, оптическая связь и даже медицинская диагностика [1-3]. Форма частиц может влиять на спектры поглощения и рассеяния света, что позволяет создавать материалы с определенными оптическими характеристиками.

ми, широко применяемые в производстве оптических устройств, красителей и пигментов. Оксид цинка используется как белый пигмент в производстве красок, пластмасс, резиновых изделий, керамики и др. Высокая яркость и оптическая прозрачность делают его ценным компонентом для создания белых и цветных пигментов [4-6]. Он обладает хорошей способностью рассеивать свет, что позволяет создавать краски и покрытия с высокой степенью отражения света.

Цель настоящей работы – исследование влияния формы микрочастиц оксида цинка в форме шара и сферы на их отражательную способность.

### Эксперимент

Полые частицы получали гидротермальным методом: 2,5 ммоль  $Zn(CH_3COO)_2 \cdot 2H_2O$  растворяли в 1 моль деионизированной воды, после чего добавляли 7,5 ммоль  $NH_4HCO_3$ . Раствор заливали в автоклав с тефлоновым покрытием, который заполняли на 80%. Герметичный автоклав выдерживали при 180°C в течение 15 часов. После естественного охлаждения автоклав открывали, белый продукт собирали и несколько раз промывали деионизированной водой и этанолом. Центрифугирование не проводилось, порошок сам выпадал в осадок. После этого густой раствор сушили на воздухе при 60°C с последующей термообработкой при 650°C в течение 3 часов.

Шарообразные частицы получали смешиванием в трехгорлой колбе 10 ммоль  $Zn(CH_3COO)_2 \cdot 2H_2O$  со 100 мл  $C_4H_{10}O_3$  при механическом перемешивании со скоростью 600 об/мин, в течение 1 часа, с нагревом до 160°C. Для предотвращения испарения растворителя использовали дефлегмацию с водяным охлаждением. Полученную белую коллоидную суспензию центрифугировали при 5000 об/мин. Всплывший продукт сливали и несколько раз промывали этанолом. После этого раствор сушили на воздухе при 60°C с последующей термообработкой при 300°C в течение 3 часов.

Морфологию частиц исследовали методом растровой электронной микроскопии (РЭМ), при этом использовался сканирующий электронный микроскоп высокого разрешения Helios NanoLab 600i. Для регистрации спектров диффузного отражения ( $\rho_\lambda$ ) образцы получали прессованием порошков под давлением 1 МПа в подложки диаметром 17 мм и высотой 4 мм с выдержкой 2 мин. Спектры  $\rho_\lambda$  регистрировали в области 200-2500 нм с помощью спектрофотометра Perkin Elmer Lambda 950, диаметр интегрирующей сферы составлял 150 мм, с шагом 5 нм/с.

Для моделирования использовалась среда COMSOL Multiphysics, зачастую применяемая при моделировании сложных процессов, где требуется переход от одного физического раздела к другому. Данная программа использует метод конечных элементов в процессе моделирования, к которому широко прибегают для решения дифференциальных и интегральных уравнений в частных производных, встречающихся при решении прикладных задач физики. Этот метод заключается в разбиении области решения на конечное число элементов или построении сетки. В каждом элементе выбирается аппроксимирующая функция, равная нулю за его пределами.

### Результаты и обсуждение

Снимки на РЭМ показывают (рис. 1), что частицы сферической формы имеют размер 5 мкм, а шаровидные частицы – меньший, равный 1 мкм. Выход полых частиц и шаровидных частиц составляет около 90%, остальные частицы являются их осколками.

Коэффициент отражения микрошара выше, чем у полых частицы в диапазоне длин волн от края основного поглощения до ближней инфракрасной области (рис. 2). Более низкий коэффициент отражения наноструктурированных частиц можно объяснить более высокой концентрацией собственных дефектов в оксиде цинка из-за большой площади поверхности. В результате увеличивается интенсивность полос поглощения центров окраски, обусловленных собственными точечными дефектами. Эффективность рассеяния также сильно зависит от распределения частиц пигмента по размерам, но механизм увеличения коэффициента отражения по мере увеличения числа отражений от первой поверхности и количества многократного рассеяния не имеет полного согласия из-за сложности объекта, представляющего собой микрочастицу, состоящую из наночастиц.

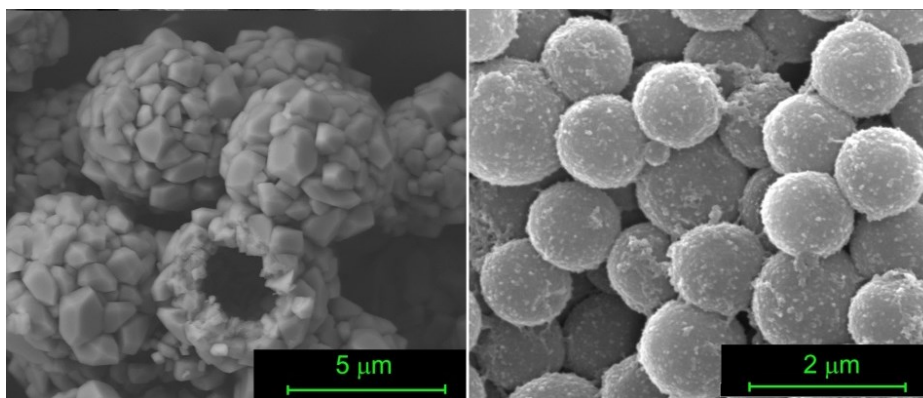


Рис. 1. РЭМ-изображение микросферы (а) и микрошара (б).

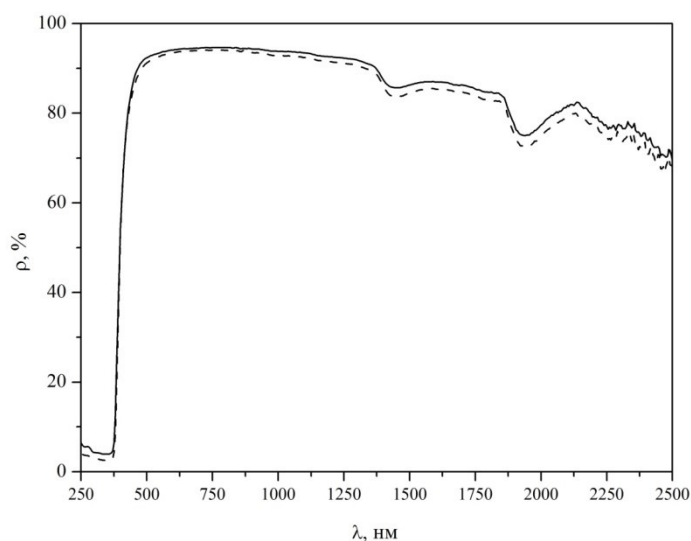


Рис. 2. Спектры диффузного отражения микрошара (—) и микросферы (- - -) оксид цинка.

Для оценки оптических свойств было осуществлено моделирование. Размер частиц составлял 5000 нм, длины волн падающего света выбиралась в диапазоне от 500 до 800 нм. Толщина слоя в сфере была взята 300 нм, в объеме которых располагали воздух.

На рис. 3 приведено сравнительное изображение объемного распределения поглощенного излучения сплошным микрокубом и полым микрогексаэдром, а на рис. 2 – сплошным микрошаром и полый микросферой. Максимальная поглощенная мощность не превышает  $100 \text{ пВт/м}^3$ . У микрокуба по сравнению с другими частицами максимальная поглощенная мощность, т.е. имеющая наибольшую способность поглощать излучение в видимом диапазоне. Таким образом, для полых частиц с наименьшей способностью поглощать излучение большая часть света будет рассеиваться и отражаться от поверхности материала, а не поглощаться им. Это может привести к увеличению интенсивности рассеянного света и уменьшению его поглощения.

На рис. 4 приведено сравнительное изображение распределения направленности векторов  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{H}$  после отражения излучения шаром и сферой соответственно. Из рисунков следует, что характер индикатрис рассеяния для сплошных микрочастиц соответствует рассеянию Ми. На полярной диаграмме рассеяния света полых частиц видно, что значение интенсивности нерассеянного излучения в несколько раз больше, чем значение интенсивности на полярной диаграмме рассеяния света сплошной частицы.

Таким образом, моделирование распределения поглощенного излучения и распределение направленности векторов  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{H}$  сплошным шаром и сферой свидетельствует, что наиболее интенсивно свет рассеивается на полых частицах, тогда как сплошными микрочастицами свет видимого диапазона поглощается.

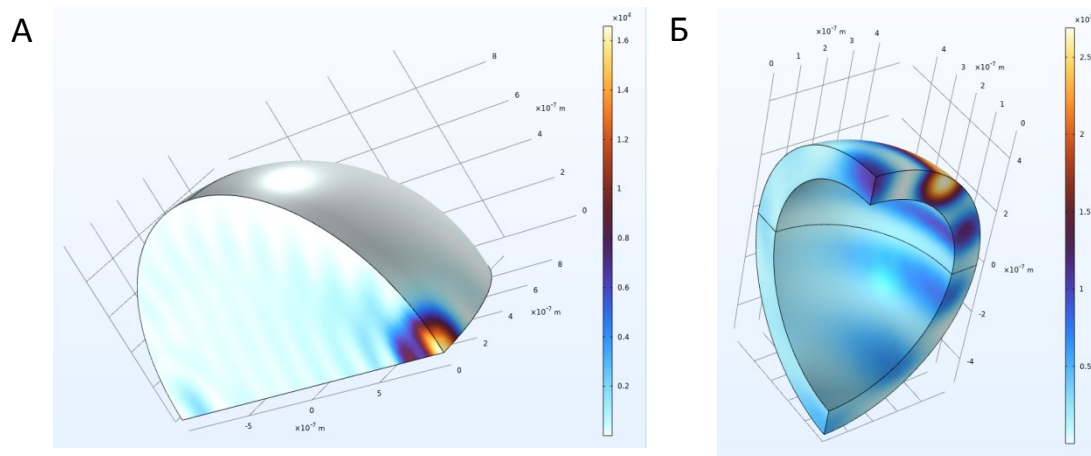


Рис. 3. Объемное распределение поглощенного излучения микрочаром ZnO (А) и микросферой ZnO (Б).

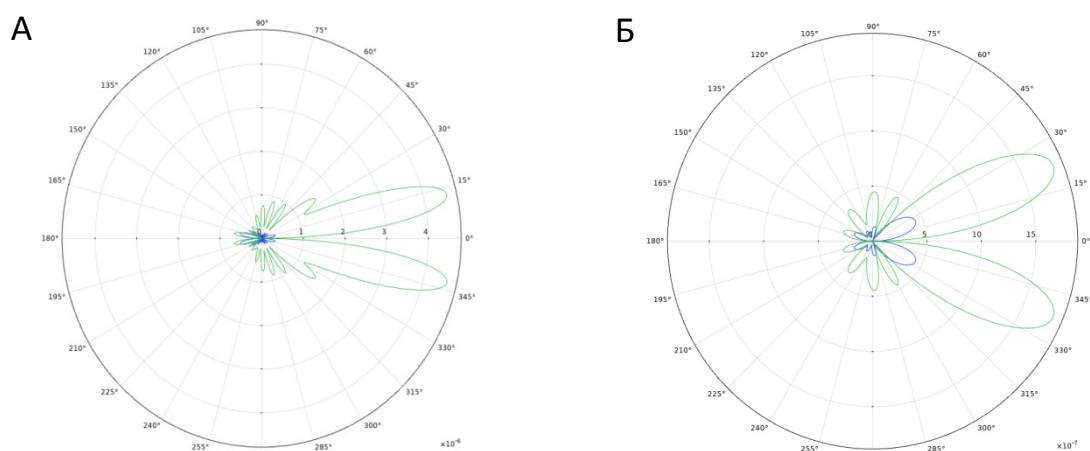


Рис. 4. Распределение направленности векторов  $E$  и  $H$  после отражения излучения сплошным микрочаром ZnO (А) и полым микросферой ZnO (Б).

### Заключение

Выполненные исследования показали, что значения отражательной способности, установленные экспериментально, отличаются от данных, полученных при моделировании. Показано, что отражательная способность микрочаров оксида цинка больше, чем микросфер, на 1-5% в диапазоне от 300 до 2500 нм.

*Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, госзадание № 122082600014-6 (FZMU-2022-0007).*

1. Singh, S.C. Zinc oxide nanostructures: synthesis, characterizations and device applications // J. Nanoengineering and Nanomanufacturing. – 2013. – Vol. 3. – P. 1-28.
2. Kumar, S.G. Zinc oxide based photocatalysis: tailoring surface-bulk structure and related interfacial charge carrier dynamics for better environmental applications / S.G. Kumar, K.S.R. Koteswara // RSC Adv. – 2015. – Vol. 5. – P. 3306-3351.
3. Kahouli, M. Structural and optical properties of ZnO nanoparticles prepared by direct precipitation method / M. Kahouli, A. Barhoumi, A. Bouzid, A. Al-Hajry, S. Guermazi // Superlattices Microstruct. – 2015. – Vol. 85. – P. 7-23.
4. Kiomarsipour, N. Evaluation of shape and size effects on optical properties of ZnO pigment / N. Kiomarsipour, R.S. Razavi, K. Ghani, M. Kioumarsipour // Applied Surface Science. – 2013. – Vol. 270. – P. 33-38.
5. Schoenhalz, A.L. Surface and quantum confinement effects in ZnO nanocrystals / A.L. Schoenhalz, J.T. Arantes, A. Fazio, G.M. Dalpian // J. Phys. Chem. C. – 2010. – Vol. 114, No. 43. – P. 18293-18297.
6. Kumar, S.S. Synthesis, characterization and optical properties of zinc oxide nanoparticles / S.S. Kumar, P. Venkateswarlu, V.R. Rao, G.N. Rao // International Nano Letters – 2013. – Vol. 3. – P. 1-6.