

Анализ оптических свойств однородных металлических, окисных наночастиц и двухслойных наночастиц с металлическим ядром и окисной оболочкой с целью эффективного поглощения солнечной радиации

© Л.Г. Астафьева¹, В.К. Пустовалов², В. Фритче³

¹ Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, 220072 Минск, Беларусь

² Белорусский национальный технический университет, 220013 Минск, Беларусь

³ Институт фотонных технологий (IPHT), 07745 Иена, Германия

e-mail: astafev@dragon.bas-net.by

Поступила в редакцию 26.03.2018 г.

В окончательной редакции 26.10.2018 г.

Принята к публикации 06.11.2018 г.

В последнее время активно изучаются вопросы использования наночастиц для поглощения солнечной радиации и фототермических нанотехнологий. Эффективность применения наночастиц в качестве фототермических агентов для солнечной энергии определяется спектральными оптическими свойствами наночастиц. Выполнено компьютерное моделирование оптических свойств однородных металлических (никелевых, титановых, молибденовых) наночастиц, их окислов и наночастиц, состоящих из металлического ядра и окисной оболочки, с радиусами в диапазоне 50–100 nm в спектральном интервале 200–2500 nm. Исследовано влияние радиусов наночастиц, типов металлов и их окислов на спектральные коэффициенты эффективности поглощения K_{abs} и рассеяния K_{sca} излучения наночастицами. Выбор подходящего типа наночастиц для поглощения солнечного излучения был проведен на основе сравнительного анализа зависимостей коэффициентов эффективности поглощения K_{abs} , интенсивности солнечного излучения I_S и параметра $P_1 = K_{\text{abs}}/K_{\text{sca}}$ от длины волны. Сферические двухслойные наночастицы, состоящие из никеля, титана в ядре и окисных оболочек, с радиусами около 75, 100 nm могут быть применены в спектральном интервале 200–2500 nm для эффективного поглощения солнечной радиации. Эти результаты вносят существенный вклад в изучение оптических свойств наночастиц, которые могут быть использованы в системах тепловой энергии.

DOI: 10.21883/OS.2019.03.47381.88-18

Введение

В последние годы были исследованы вопросы применения наночастиц для поглощения солнечной радиации, для фототермической нанотехнологии и солнечной тепловой энергетики. Для повышения поглощения при использовании солнечного света [1–5], для фотокатализа [6–8], для энергетических применений [9–18] используются различные наночастицы в наножидкостях. Поверхностный плазмонный резонанс определяет эффективность поглощения и рассеяния излучения наночастицами [19–22]. Максимальное улавливание солнечной энергии и последующее преобразование в тепловую энергию будут реализованы в случае высокого поглощения излучения наночастицами. Радиационное рассеяние приводит к уменьшению эффективности процессов поглощения и преобразования света в теплоту.

Металлические наночастицы представляют особый интерес для применения солнечной энергии и нанотехнологий. Оптические свойства металлических наночастиц Cu, Au, Al, Ag и т. д. были исследованы с целью при-

менения в нанотехнологиях в спектральном интервале 300–1000 nm [20,22–24]. К сожалению, металлические наночастицы Ti, Ni, Mo не исследовались в широких интервалах радиусов наночастиц и длин волн излучения 200–2500 nm.

Исследование двухслойных наночастиц, состоящих из металлического ядра и окисной оболочки, также очень интересно для улучшения и манипуляции резонансами плазменного спектра наночастиц в дополнение к чистым металлическим наночастицам. Образование окисной оболочки на металлической наночастице может быть достигнуто различными химическими [25] и физическими [26,27] методами и в результате естественного окисления металлических наночастиц в реактивной среде. Естественное окисление чистых металлических наночастиц в газообразных или жидких средах, содержащих компоненты кислорода (воздух, вода, пар), приводит к образованию тонкой окисной оболочки толщиной около 5–10 nm на металлических наночастицах. Действие интенсивного оптического (солнечного) излучения и нагревания наночастиц может способствовать окисле-

нию поверхностного слоя металлической наночастицы и образованию двухслойных металлических/окисных наночастиц с ядром-оболочкой.

Оптические свойства наночастиц с металлическим ядром и его окисной оболочкой ($\text{Ag-Ag}_2\text{O}$, $\text{Al-Al}_2\text{O}_3$, $\text{Cu-Cu}_2\text{O}$) [28,29] не использовались для целей поглощения солнечного излучения. В экспериментальных и теоретических исследованиях поглощения солнечной радиации использовались гомогенные окисные наночастицы (Al_2O_3 , SiO_2 , CuO , ZnO и др.) [12–14,16]. К сожалению, нет достаточных оснований для использования перечисленных окисных наночастиц для поглощения солнечной энергии.

Существующий разрыв в знаниях между опубликованными результатами и потребностями в наночастицах с соответствующими оптическими свойствами явно требует исследований и выбора оптических свойств потенциально подходящих наночастиц, которые могут быть применены для эффективного поглощения и преобразования солнечной энергии в прикладных системах тепловой энергетики.

Сравнительный анализ оптимальных параметров различных металлических наночастиц, двухслойных металлических/окисных наночастиц и чистых окисных наночастиц для их использования в качестве агентов для поглощения солнечной энергии и в прикладных нанотехнологиях все еще отсутствует. Наши исследования направлены на изучение оптических свойств наночастиц для применения в прикладных энергетических системах для эффективного поглощения энергии солнечного излучения. Здесь мы представляем результаты комплексного исследования оптических свойств сферических металлических, окисных и металлическое ядро-окисная оболочка наночастиц, размещенных в воде, на основе компьютерного моделирования для их применения в поглощении солнечного излучения.

Оптические свойства наночастиц в спектральном интервале 200–2500 nm

Достижение максимального поглощения и минимального рассеяния излучения наночастицами очень важно для эффективного захвата солнечной энергии. Факторы эффективности поглощения K_{abs} , рассеяния K_{sca} и экстинкции $K_{\text{ext}} = K_{\text{abs}} + K_{\text{sca}}$ излучения с длиной волны λ описывают оптические свойства сферической наночастицы с радиусом r_0 [19]. Параметр $P_1 = K_{\text{abs}}/K_{\text{sca}}$ должен быть больше 1 ($P_1 > 1$ или $P_1 \gg 1$), а фактор поглощения K_{abs} — больше (или намного больше в благоприятных случаях), чем фактор рассеяния K_{sca} . Такая ситуация позволяет достичь максимальной эффективности взаимодействия солнечной радиации с наночастицей для ее нагрева [30,31]. Рассеяние солнечной радиации наночастицами будет преобладать над поглощением для $P_1 < 1$, и после многократного рассеяния излучения на

наночастицах приведет к значительному уменьшению сбора солнечной энергии.

Компьютерное моделирование факторов эффективности поглощения K_{abs} , рассеяния K_{sca} и экстинкции K_{ext} солнечной радиации в зависимости от длины волны λ в спектральном интервале 200–2500 nm однородными металлическими (Ti, Ni, Mo), окисными (TiO_2 , NiO, MoO_3) наночастицами и наночастицами с металлическим ядром и окисной оболочкой (Ti-TiO_2 , Ni-NiO, Mo-MoO₃) было проведено на основе обобщенной теории Ми [19]. Использовались однородные наночастицы с радиусами в диапазоне $r_0 = 50–100$ nm и двухслойные наночастицы с ядрами с радиусами в диапазоне $r_0 = 40–90$ nm и толщиной окисной оболочки $\Delta r_1 = 10$ nm. Значения оптических показателей преломления металлов, окислов и окружающей воды были взяты из [32–35].

Положения $\lambda_{\text{abs}}^{\text{max}}$, $\lambda_{\text{sca}}^{\text{max}}$, и $\lambda_{\text{ext}}^{\text{max}}$ и максимальные значения факторов эффективности $K_{\text{abs}}^{\text{max}}$, $K_{\text{sca}}^{\text{max}}$, $K_{\text{ext}}^{\text{max}}$ на оси λ обозначены на рис. 1–3 разными вертикальными линиями — величины $\lambda_{\text{abs}}^{\text{max}}$ максимального значения фактора поглощения $K_{\text{abs}}^{\text{max}}$ обозначаются сплошными линиями, $\lambda_{\text{sca}}^{\text{max}}$ — штриховыми линиями и $\lambda_{\text{ext}}^{\text{max}}$ — штрихпунктирными линиями в случае разных значений $\lambda_{\text{abs}}^{\text{max}}$, $\lambda_{\text{sca}}^{\text{max}}$, и $\lambda_{\text{ext}}^{\text{max}}$. В некоторых случаях сплошные линии обозначают одновременное расположение всех максимумов факторов эффективности. Горизонтальные штриховые линии обозначают значение $P_1 = 1$ на рис. 1–3 (d, h, l).

На рис. 1 представлены зависимости факторов эффективности K_{abs} , K_{sca} и K_{ext} и параметра P_1 от длины волны λ для сферических однородных наночастиц Ti и TiO_2 с радиусами $r_0 = 50, 75, 100$ nm и для двухслойных наночастиц Ti-TiO₂ с толщиной оболочки $\Delta r_1 = 10$ nm, радиусами ядра $r_0 = 40, 65, 90$ nm. Радиусы однородных наночастиц r_0 равны соответственно внешним радиусам $r_1 = r_0 + \Delta r_1$ двухслойных наночастиц с ядром и оболочкой для сравнения результатов в случае эквивалентных наночастиц.

Плазмонный резонанс электромагнитного (солнечного) излучения на наночастицах Ti определяет его поглощение. Величины $K_{\text{abs}}^{\text{max}}$ расположены при $\lambda_{\text{abs}}^{\text{max}} \sim 500–1000$ nm для наночастиц Ti с $r_0 = 50, 75, 100$ nm. При увеличении r_0 области размещения максимальных значений факторов $K_{\text{abs}}^{\text{max}}$, $K_{\text{sca}}^{\text{max}}$, $K_{\text{ext}}^{\text{max}}$ на оси λ для наночастиц Ti сдвинуты в сторону больших значений длин волн. Увеличение r_0 приводит к уменьшению $K_{\text{abs}}^{\text{max}}$ и образованию двух максимальных значений $K_{\text{abs}}^{\text{max}}$ при $r_0 = 100$ nm. Значения $K_{\text{abs}}^{\text{max}}$ для наночастиц Ti с $r_0 = 50, 75$ nm приблизительно больше или равны значениям $K_{\text{sca}}^{\text{max}}$ в спектральном интервале 200–750 nm, а значения $K_{\text{abs}}^{\text{max}}$ больше или намного больше значений $K_{\text{sca}}^{\text{max}}$ для спектрального интервала 750–2500 nm. Значения $K_{\text{abs}}^{\text{max}}$ меньше, чем значения $K_{\text{sca}}^{\text{max}}$ для наночастиц Ti с $r_0 = 100$ nm в спектральном интервале $\sim 200–1000$ nm.

Для наночастиц Ti параметр $P_1 > 1$ для $r_0 = 50, 75$ nm и для всего спектрального интервала 200–2500 nm и достигает значений $P_1 \sim 10–50$ в

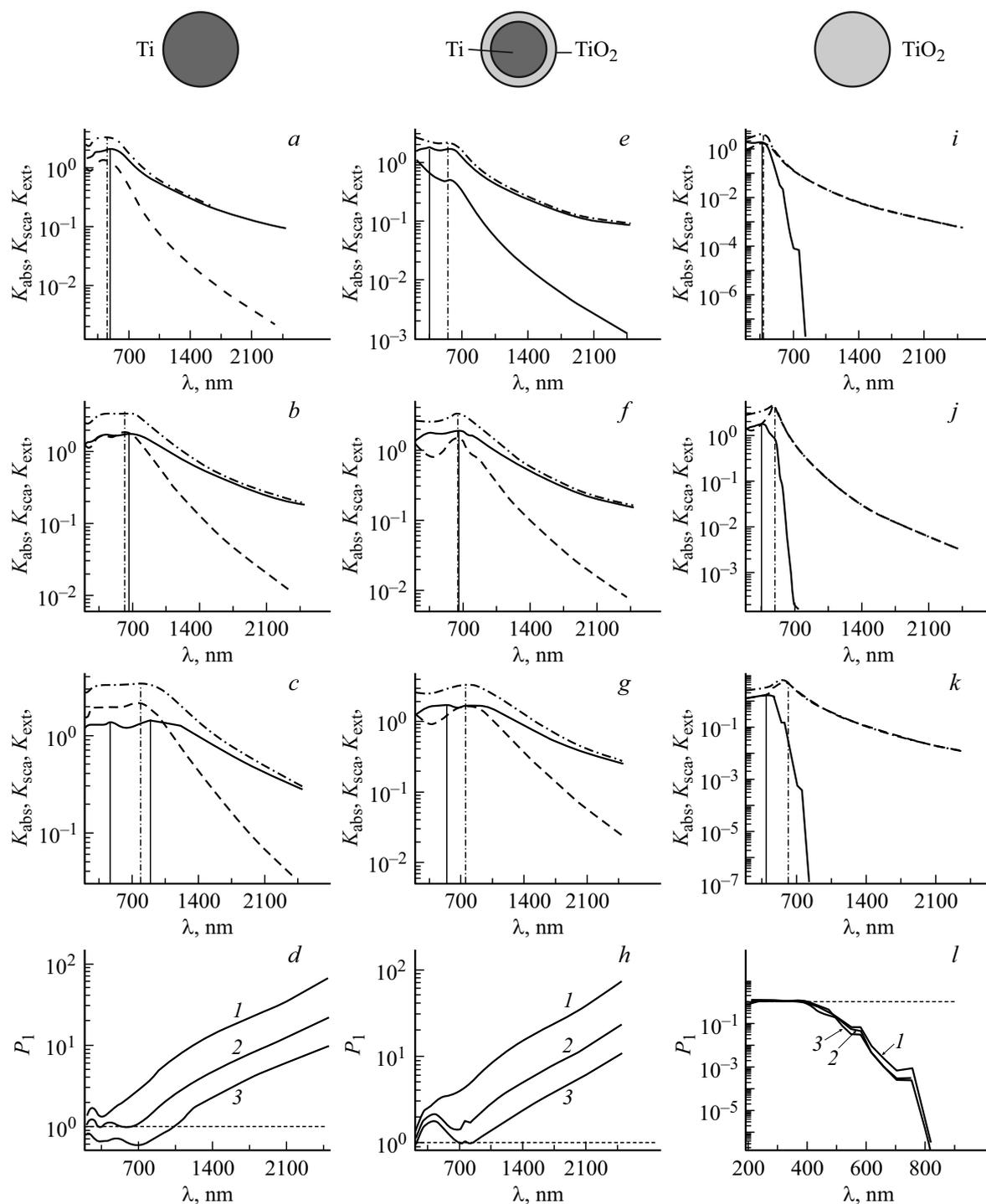


Рис. 1. Зависимости факторов эффективности K_{abs} (сплошные кривые, *a-c, e-g, i-k*), K_{sca} (штриховые, *a-c, e-g, i-k*) и K_{ext} (штрихпунктирные, *a-c, e-g, i-k*) и зависимости параметра P_1 (*d, h, l*) от λ для однородных наночастиц Ti (*a-d*) и TiO_2 (*i-l*) с $r_0 = 50$ (*a, i, d1, l1*), 75 (*b, j, d2, l2*), 100 nm (*c, k, d3, l3*) и для наночастиц Ti-TiO₂ с $r_0 = 40$ (*e, h1*), 65 (*f, h2*), 90 nm (*g, h3*) и с $\Delta r_1 = 10$ nm.

спектральном интервале 1500–2500 nm из-за резкого уменьшения K_{sca} при увеличении λ . Это означает возможность эффективного применения наночастиц Ti с $r_0 = 50, 75$ nm для поглощения солнечного излучения в качестве идеальных поглотителей. Параметр P_1

меньше 1 при $r_0 = 100$ nm в важном спектральном интервале 200–1000 nm.

Образование окисной оболочки на наночастицах Ti (Ti + TiO₂) сдвинуло размещение $\lambda_{\text{abs}}^{\text{max}}$ от 350 nm при $r_0 = 50$ nm до 670 nm при $r_0 = 75$ nm. Интересно,

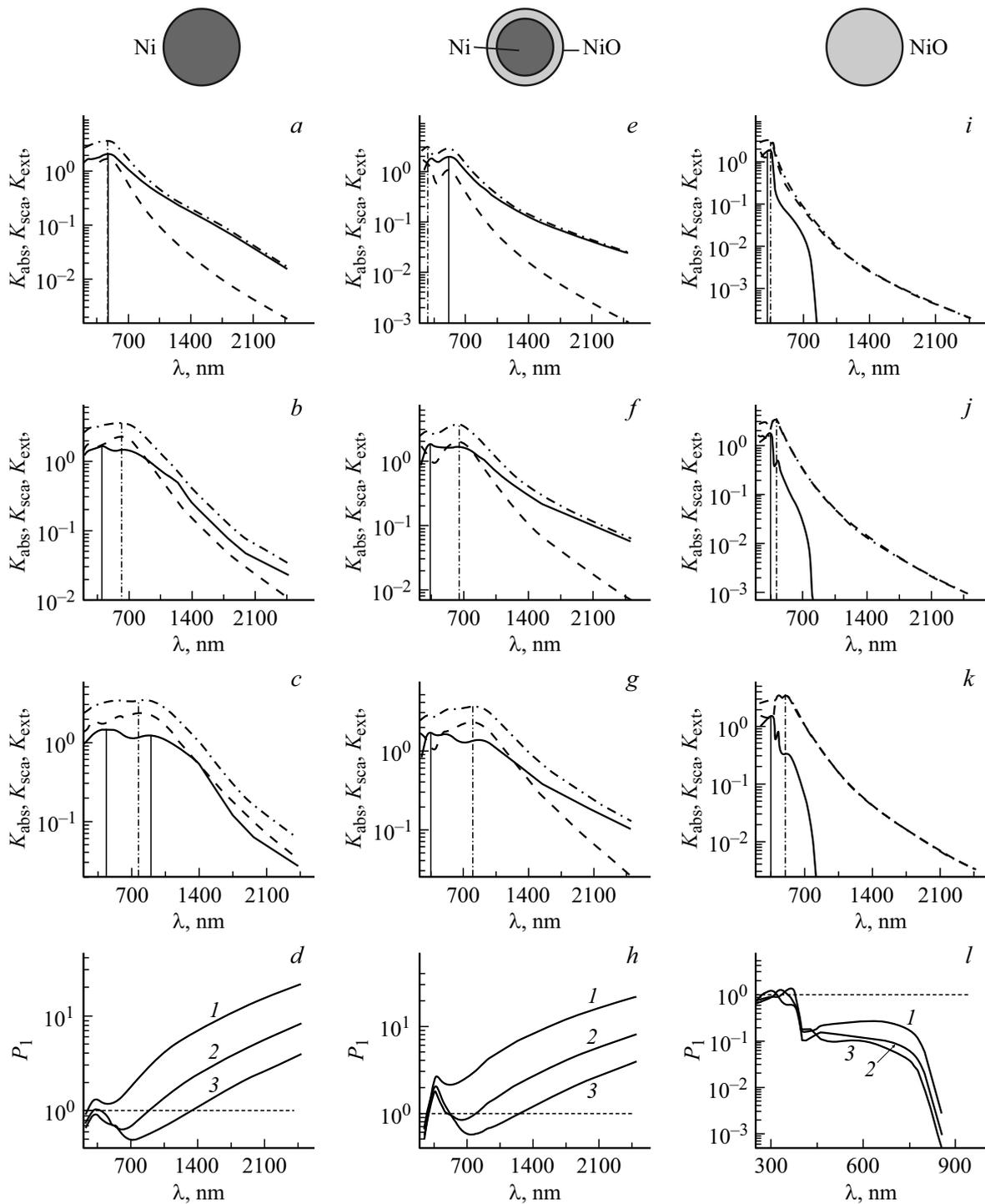


Рис. 2. Зависимости факторов эффективности K_{abs} (сплошные кривые, *a-c, e-g, i-k*), K_{sca} (штриховые, *a-c, e-g, i-k*) и K_{ext} (штрихпунктирные, *a-c, e-g, i-k*) и зависимости параметра P_1 (*d, h, l*) от λ для однородных наночастиц Ni (*a-d*) и NiO (*i-l*) с $r_0 = 50$ (*a, i, d1, l1*), 75 (*b, j, d2, l2*), 100 nm (*c, k, d3, l3*) и наночастиц Ni-NiO с $r_0 = 40$ (*e, h1*), 65 (*f, h2*), $r_0 = 90$ nm (*c, h3*) и с $\Delta r_1 = 10$ nm.

что образуются довольно резкий минимум K_{sca}^{min} при $\lambda \sim 400$ nm и максимумы K_{sca}^{max} при $\lambda \sim 700-800$ nm для $r_0 = 65, 90$ nm. Значения K_{abs} больше, чем значения K_{sca} , для спектрального интервала 250–2500 nm для всех представленных значений r_0 и Δr_1 . Следует также

отметить резкое уменьшение K_{sca} с увеличением λ в интервале 700–2500 nm.

Мы видим появление максимумов P_1 для $\lambda \sim 350$ nm для наночастиц Ti-TiO₂ с $r_0 = 40, 65, 90$ nm. Величина P_1 равна $\sim 1-2$ в спектральном интервале 250–700 nm

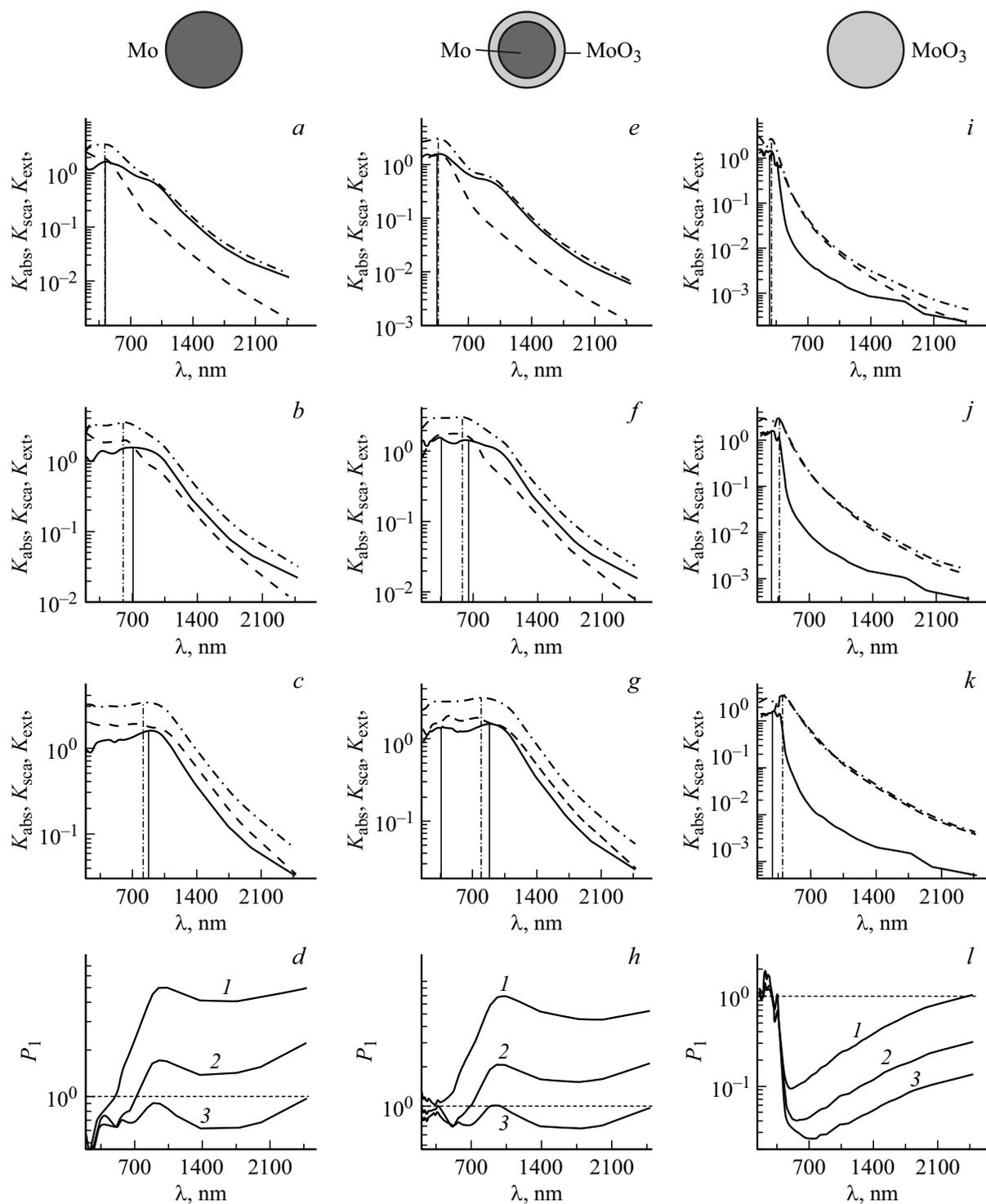


Рис. 3. Зависимости факторов эффективности K_{abs} (сплошные кривые, *a-c, e-g, i-k*), K_{sca} (штриховые, *a-c, e-g, i-k*) и K_{ext} (штрихпунктирные, *a-c, e-g, i-k*) и зависимости параметра P_1 (*d, h, l*) от λ для однородных наночастиц Mo (*a-d*) и MoO₃ (*i-l*) с $r_0 = 50$ (*a, i, d1, l1*), 75 (*b, j, d2, l2*), 100 nm (*c, k, d3, l3*) и для наночастиц Mo-MoO₃ с $r_0 = 40$ (*e, h1*), 65 (*f, h2*), 90 nm (*g, h3*) и с $\Delta r_1 = 10$ nm.

и резко возрастает до $P_1 \sim 10-50$ с увеличением λ в спектральном интервале 700–2500 nm. Наличие окисной оболочки приводит к увеличению поглощения при воздействии излучения на двухслойные наночастицы

и улучшению возможности применения двухслойных наночастиц Ti-TiO₂.

Значение K_{abs} для наночастиц TiO₂ резко падает до 5–6 порядков величины при увеличении длины волны

до ~ 700 nm, ее значение практически равно нулю при $\lambda > 700$ nm. Это означает, что наночастицы TiO_2 обладают значительной поглощательной способностью только в спектральном интервале 200–450 nm. Окисные наночастицы TiO_2 практически не поглощают излучение в спектральном интервале 500–2500 nm, содержащем около 85% всей солнечной энергии. В этом спектральном интервале 500–2500 nm рассеяние наночастицами преобладает над поглощением излучения, а зависимости $K_{\text{sca}}(\lambda)$ и $K_{\text{ext}}(\lambda)$ практически совпадают друг с другом, $K_{\text{sca}}(\lambda) \approx K_{\text{ext}}(\lambda)$ (рис. 1). Параметр P_1 резко уменьшается с увеличением λ при $\lambda > 500$ nm. Эти результаты показывают практическую невозможность использования окисных наночастиц TiO_2 для эффективного поглощения солнечной радиации в спектральном интервале 500–2500 nm.

На рис. 2, 3 представлены зависимости факторов эффективности K_{abs} , K_{sca} и K_{ext} излучения и параметра P_1 от длины волны λ для сферических однородных наночастиц Ni, NiO и Mo, MoO_3 соответственно с радиусами $r_0 = 50, 75, 100$ nm и двухслойных наночастиц Ni-NiO и Mo-MoO₃ с ядром и оболочкой с радиусами ядра $r_0 = 40, 65, 90$ nm и толщиной оболочки $\Delta r_1 = 10$ nm.

Фактор эффективности поглощения K_{abs} для наночастиц Ni (рис. 2) имеет два слабо выделенных максимума при $r_0 = 100$ nm. Параметр P_1 больше 1 при $r_0 = 50$ nm для спектрального интервала излучения $\lambda = 200$ –2500 nm, он достигает значений $P_1 \sim 10$ с увеличением λ в инфракрасной (ИК) области. Параметр P_1 меньше 1 в интервале $200 \text{ nm} < \lambda < 850 \text{ nm}$ для наночастиц Ni с $r_0 = 75$ nm и в интервале $300 \text{ nm} < \lambda < 1400 \text{ nm}$ при $r_0 = 100$ nm. Наночастицы Ni являются хорошими поглотителями излучения во всем оптическом спектре при $r_0 = 50$ nm и в ИК оптическом интервале при $r_0 = 75$ nm.

Значения K_{abs} больше, чем K_{sca} , для наночастиц Ni-NiO с $r_0 = 40$ nm в полном спектральном интервале 250–2500 nm. С другой стороны, для наночастиц Ni-NiO с $r_0 = 65$ nm $K_{\text{abs}} < K_{\text{sca}}$ в спектральном интервале 550–750 nm и для $r_0 = 90$ nm $K_{\text{abs}} < K_{\text{sca}}$ для спектрального интервала 550–1400 nm. Зависимость параметра P_1 от λ имеет сложный характер для всех представленных значений r_0 со сформированными максимумами $P_1 \sim 2$ –3 при $\lambda \sim 400$ nm.

Зависимость K_{abs} от λ для однородных окисных наночастиц NiO примерно одинакова в ультрафиолетовом интервале 200–400 nm, и она резко уменьшается на ~ 3 –4 порядка величины при увеличении λ , и при $\lambda > 700$ nm значение K_{abs} практически равно 0. Это поведение определяется зависимостью показателя поглощения NiO от λ [34]. Значения $K_{\text{sca}} \gg K_{\text{abs}}$ и $P_1 \ll 1$ для спектрального интервала 400–2500 nm, и наночастицы NiO не подходят для применения в поглощении солнечной энергии.

Спектральная зависимость K_{abs} для наночастиц Mo (рис. 3) имеет один максимум $K_{\text{abs}}^{\text{max}}$, который смещается от $\lambda_{\text{abs}}^{\text{max}} = 380$ nm для $r_0 = 50$ nm до $r_0 = 860$ nm

при $r_0 = 100$ nm. Фактор поглощения K_{abs} больше, чем фактор рассеяния K_{sca} , в спектральном интервале 400–2500 nm при $r_0 = 50$ nm и в интервале 700–2500 nm для наночастиц Mo с $r_0 = 75$ nm. Параметр P_1 возрастает до значений $P_1 \sim 5$ при $r_0 = 50$ nm и $P_1 \sim 2$ при $r_0 = 75$ nm с увеличением λ . Параметр P_1 меньше 1 для $r_0 = 50, 75$ nm в спектральном интервале $\lambda \sim 200$ –500 nm и $\lambda \sim 200$ –700 nm соответственно. Это означает, что возможность применения наночастиц Mo для поглощения солнечного излучения мала в упомянутых спектральных интервалах. Для наночастиц Mo K_{abs} с $r_0 = 100$ nm меньше фактора рассеяния K_{sca} , и $P_1 < 1$ для всего интервала 200–2500 nm.

Влияние образования окисной оболочки на металлические наночастицы с равными радиусами $r_1 = r_0 + \Delta r_1$ приводит к следующим последствиям. Максимумы плазмонного резонанса создаются и сдвигаются в сторону больших значений длины волны с увеличением r_0 . Это приводит к уменьшению факторов $K_{\text{abs}}^{\text{max}}$ и небольшому влиянию на все оптические факторы при $r_0 = 40$ –90 nm. Значения параметра P_1 уменьшаются с ростом $r_0(r_1)$. Образование окисной оболочки на металле наночастицы приводит к небольшому увеличению P_1 в выбранном спектральном интервале для всех значений r_0 . Увеличение r_0 для однородных наночастиц и r_1 для наночастиц ядро/оболочка приводит к увеличению K_{sca} , K_{ext} по сравнению с K_{abs} .

K_{abs} для однородных окисных наночастиц MoO_3 резко уменьшается на ~ 3 –4 порядка величины при увеличении λ . Значения $K_{\text{sca}} \gg K_{\text{abs}}$ и $P_1 \ll 1$ для спектрального интервала 400–2500 nm и наночастицы MoO_3 не подходят для применения в поглощении солнечной энергии.

На рис. 4 представлены зависимости интенсивности солнечного облучения I_S [36] и фактора эффективности поглощения K_{abs} для наночастиц Ti, Ti-TiO₂, TiO₂, Ni, Ni-NiO, NiO, Mo, Mo-MoO₃, MoO₃ от длины волны для $r_0, r_1 = 50, 75, 100$ nm.

Нагрев наночастиц (повышение температуры ΔT_0 наночастиц при сравнении с его исходным значением) [30,31] оптическим (солнечным) излучением в спектральном интервале $\lambda_1 - \lambda_2 = 200$ –2500 nm пропорционален (для двухслойных наночастиц r_0 заменяется на r_1 в приведенных ниже формулах)

$$\Delta T_0 \sim r_0 \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} I_S(\lambda) K_{\text{abs}}(r_0, \lambda) d\lambda. \quad (1)$$

Максимальная эффективность нагревания наночастиц достигается, когда правая часть уравнения (1) имеет максимальное значение. Следует отметить, что зависимость $I_S(\lambda)$ (рис. 1–3) имеет некоторую фиксированную форму и может быть смоделирована зависимостью излучения черного тела от λ [36]. Очевидно, что для достижения максимального значения интеграла в (1) зависимость $K_{\text{abs}}(\lambda)$ должна иметь приблизительно вид,

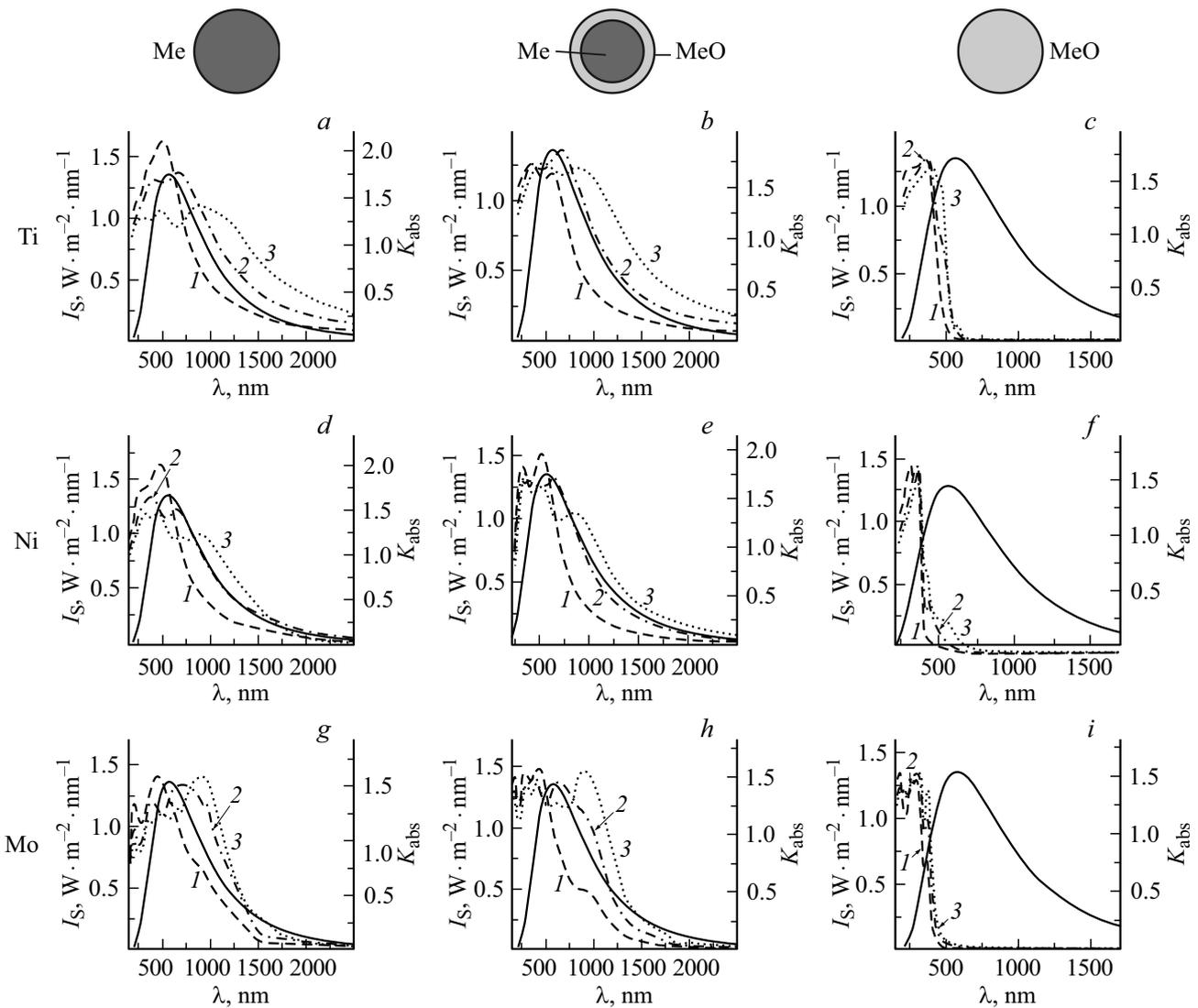


Рис. 4. Зависимости солнечного излучения I_S (a–i, сплошные линии, левая ось) и фактора эффективности поглощения K_{abs} (a–i, правая ось) от λ для наночастиц с радиусами $r_0, r_1 = 50$ (пунктирные линии), 75 (штриховые), 100 nm (штрихпунктирные) и наночастиц Ti (a), Ti-TiO₂ (b), TiO₂ (c), Ni (d), Ni-NiO (e), NiO (f), Mo (g), Mo-MoO₃ (h), MoO₃ (i). Введены обозначения: Me — металл, O — окисл.

аналогичный зависимости $I_S(\lambda)$, с возможным небольшим сдвигом от положения максимальной интенсивности солнечного излучения. Максимальное значение ΔT_0^{\max} может быть реализовано с использованием максимального соответствующего значения r_0^{\max} и максимальных значений $K_{abs}^{\max}(r_0^{\max}, \lambda)$ для всех λ во всем спектральном интервале $\lambda_2 - \lambda_1$, если это возможно:

$$\Delta T_0^{\max} \sim r_0^{\max} \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} I_S(\lambda) K_{abs}^{\max}(r_0^{\max}, \lambda) d\lambda. \quad (2)$$

Цель реализации ΔT_0^{\max} может быть достигнута путем выбора типа наночастиц и их размера, материалов ядра и оболочки и т.д.

Для наночастиц Ti зависимости K_{abs} от λ при $r_0 = 75, 100$ nm близки к зависимости $I_S(\lambda)$, а значения K_{abs}

больше, чем при $r_0 = 50$ nm, в спектральном интервале $\lambda \sim 600-2500$ nm с $K_{abs}^{\max} \approx 1.75$ и в спектральном интервале $\lambda \sim 750-2500$ nm с $K_{abs}^{\max} \approx 1.5$. Для наночастиц Ti-TiO₂ зависимость K_{abs} от λ при $r_0 = 65$ nm близка к зависимости $I_S(\lambda)$ в спектральном интервале $\lambda \sim 500-2500$ nm с $K_{abs}^{\max} \approx 1.85$. Значения K_{abs} для $r_0 = 90$ nm больше, чем K_{abs} для $r_0 = 40, 65$ nm, в спектральном интервале $\lambda \sim 750-2500$ nm и меньше в спектральном интервале $\lambda \sim 400-750$ nm.

Такая же ситуация существует для наночастиц Ni и Ni-NiO. Зависимости K_{abs} от λ при $r_0, r_1 = 75$ nm близки к зависимости $I_S(\lambda)$ в спектральном интервале $\lambda \sim 400-2500$ nm с $K_{abs}^{\max} \approx 1.6$ и $K_{abs}^{\max} \approx 1.65$ соответственно. Следует отметить, что зависимости $K_{abs}(\lambda)$ для $r_0, r_1 = 100$ nm также довольно близки к зависимости $I_S(\lambda)$, и они имеют более высокие значения K_{abs} ,

чем для $r_0, r_1 = 75$ nm, в спектральном интервале от $\lambda \sim 800$ –2500 nm.

Для наночастиц Mo и Mo-MoO₃ с $r_0, r_1 = 75, 100$ nm значение $\lambda_{\text{abs}}^{\text{max}} \sim 700, 950$ nm было смещено в сторону больших длин волн по сравнению с положением $\lambda_{\text{abs}}^{\text{max}} \approx 530$ nm. Но эти наночастицы имеют более высокие значения K_{abs} , чем для $r_0, r_1 = 50$ nm, в спектральном интервале $\lambda \sim 500$ –2500 nm. Факторы поглощения K_{abs} для наночастиц TiO₂, NiO, MoO₃ резко снижаются при увеличении λ , и они практически равны нулю при $\lambda > 500$ nm. Эти наночастицы не могут использоваться для эффективного поглощения солнечной радиации.

Исследованные зависимости оптических факторов K_{abs} , K_{sca} и K_{ext} и параметра P_1 в диапазонах радиусов наночастиц 50–100 nm и в спектральном интервале 200–2500 nm являются новыми и содержат новые данные в области оптических свойств наночастиц. Анализ оптических свойств представленных наночастиц Ti, Ti-TiO₂, Ni, Ni-NiO и, возможно, в меньшей степени Mo, Mo-MoO₃ позволяет сделать вывод о том, что эти наночастицы являются подходящими кандидатами для применений в солнечной тепловой энергетике.

Заключение

Выбор новых оптических свойств и оптимальных параметров гомогенных металлических, окисных и ядро-металл и оболочка-окисел наночастиц для эффективного поглощения солнечной радиации и для термических применений основан на исследованиях материалов и структуры наночастиц, их размеров (радиусов) и т. д. и сравнительном анализе их оптических свойств. Изучение указанных параметров было проведено в настоящей работе в качестве предпосылки для успешного использования наночастиц для применения в солнечной тепловой энергетике.

Исследованы новые зависимости факторов поглощения K_{abs} , рассеяния K_{sca} и экстинкции K_{ext} и параметра P_1 однородных наночастиц Ti, Ni, Mo и TiO₂, NiO, MoO₃ и двухслойных наночастиц ядро-оболочка Ti-TiO₂, Ni-NiO, Mo-MoO₃ для длин волн в спектральном интервале 200–2500 nm и в диапазоне радиусов наночастиц $r_0, r_1 = 50$ –100 nm на основе компьютерного моделирования. Параметр P_1 описывает доминирование поглощения наночастиц над рассеянием, если $P_1 > 1$.

Анализ результатов показывает, что окисные наночастицы TiO₂, NiO, MoO₃ не могут использоваться для эффективного поглощения солнечной радиации из-за чрезвычайно низкого поглощения в видимой и ИК областях солнечного оптического спектра, их параметры $P_1 \ll 1$.

Металлические и ядро-оболочка наночастицы имеют несколько общих особенностей. Увеличение r_0, r_1 сдвигает положение $\lambda_{\text{abs}}^{\text{max}}$, $\lambda_{\text{sca}}^{\text{max}}$, $\lambda_{\text{ext}}^{\text{max}}$ и значений $K_{\text{abs}}^{\text{max}}$, $K_{\text{sca}}^{\text{max}}$, $K_{\text{ext}}^{\text{max}}$ в сторону больших значений λ в видимой и ИК областях с уменьшением значения $K_{\text{abs}}^{\text{max}}$ и формированием

второго максимума. Металлические наночастицы из Ti, Ni и наночастицы металлическое ядро-окисная оболочка из Ti-TiO₂ с $r_0, r_1 \sim 75, 100$ nm имеют максимальные значения фактора поглощения $K_{\text{abs}}(\lambda)$, и их зависимости $K_{\text{abs}}(\lambda)$ близки к спектральной зависимости солнечной радиации $I_S(\lambda)$.

Параметр P_1 больше 1 для наночастиц Ti и Ti-TiO₂ и наночастиц Ni и Ni-NiO с $r_0 = 50, 75$ nm для всего спектрального интервала 200–2500 nm. Но параметр P_1 уменьшается с увеличением r_0, r_1 и при $r_0 = 100$ nm, а в некоторых случаях и при $r_0 = 75$ nm, P_1 меньше 1 в узких или широких спектральных интервалах и, по крайнем случае, в полном спектральном интервале 200–2500 nm. Параметр P_1 увеличивается с увеличением λ в ИК области спектра до значений $P_1 \sim 10$ –50 для $r_0, r_1 = 50, 75$ nm. Тонкая окисная оболочка толщиной 10 nm влияет на оптические свойства двухслойных наночастиц в ультрафиолетовом и вблизи видимого спектрального интервала из-за оптического поглощения в этих спектральных областях окисным слоем.

Окончательный выбор лучших наночастиц может быть достигнут путем комплексного анализа свойств наночастиц, который позволяет реализовать максимальное нагревание наночастиц. Исследованные наночастицы могут применяться в качестве хороших поглотителей для эффективного поглощения солнечной радиации в применяемых энергетических тепловых системах (прямые солнечные поглощающие коллекторы).

Список литературы

- [1] Tang Y., Vlahovic B. // *Nanoscale Res Lett.* 2013. V. 8. P. 65.
- [2] Zhang H., Chen H.-J., Du X., Wen D. // *Solar Energy.* 2014. V. 100. P. 141.
- [3] Mlinar V. // *Nanotechnology.* 2013. V. 24. P. 042001.
- [4] Crisostomo F., Jerrild N., Mesgari S., Li Q., Taylor R. // *Appl. Energy.* 2017. V. 193. P. 1.
- [5] Du M., Tang G. // *Solar Energy.* 2016. V. 137. P. 393.
- [6] Hashemi S., Choi J.-W., Psaltis D. // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2014. V. 16. P. 5137.
- [7] Borgesa M., Sierra M., Cuevas E., García R., Esparzad P. // *Solar Energy.* 2016. V. 135. P. 527.
- [8] Duan H., Xuan Y. // *Appl. Energy.* 2014. V. 114. P. 22.
- [9] Kameya Y., Hanamura K. // *Solar Energy.* 2011. V. 85. P. 299.
- [10] He Q., Wang S., Zeng S., Zheng Z. // *Energy Conversion Management.* 2013. V. 73. P. 150.
- [11] Hossain M., Saidur R., Sabri M., Said Z., Hassani S. // *Renew. Sustain. Energy Reviews.* 2015. V. 43. P. 750.
- [12] Hussein A.K. // *Renew. Sustain. Energy Reviews.* 2016. V. 2. P. 767.
- [13] Kasaeian A., Eshghi A., Sameti M. // *Renew. Sustain. Energy Reviews.* 2015. V. 43. P. 584.
- [14] Leong K., Ong H., Amer N., Norazrina M., Risby M. // *Renew. Sustain. Energy Reviews.* 2016. V. 53. P. 1092.
- [15] Jin H., Lin G., Bai L., Amjad M., Filho E., Wen D. // *Solar Energy.* 2016. V. 139. P. 278.
- [16] Yiamsawas T., Mahian O., Dalkilic A., Kaewnai S., Wongwiset S. // *Appl. Energy.* 2013. V. 111. P. 40.

- [17] *Amjad M., Raza G., Xin Y., Pervaiz S., Wen D.* // Appl. Energy. 2017. V. 206. P. 393.
- [18] *Chen M., He Y., Zhu J., Wen D.I.* // Appl. Energy. 2016. V. 181. P. 65.
- [19] *Bohren C., Huffman D.* Absorption and Scattering of Light by Small Particles. Wiley Interscience, 1983. 545 p.; *Борен К., Хафмен Д.* Поглощение и рассеяние света малыми частицами. М.: Мир, 1986. 664 с.
- [20] *Kreibig U., Vollmer M.* Optical Properties of Metal Clusters. Heidelberg: Springer, 1995. 532 p.
- [21] *Maier S.* Plasmonics: Fundamentals and Applications. Heidelberg: Springer, 2007. 201 p.
- [22] *Pelton M., Aizpurua J., Bryant G.* // Laser Photonics. 2008. V. 2. P. 136.
- [23] *Amendola V., Bakr O., Stellacci F.* // Plasmonics. 2010. V. 5. P. 85.
- [24] *Astafyeva L.G., Pustovalov V.K., Fritzsche W.* // Nano-Structures & Nano-Objects. 2017. V. 12. P. 57.
- [25] *Jones M., Osberg K., MacFarlane L., Langille R., Mirkin C.* // Chem. Rev. 2011. V. 111. P. 3736.
- [26] *Pustovalov V., Bobuchenko D.* // Int. J. Heat Mass Transfer. 1989. V. 32. P. 3.
- [27] *Das S., Datta S., Mukhopadhyay A., Pal K., Basu D.* // Materials Chem. Phys. 2010. V. 122. P. 574.
- [28] *Laaksonen K., Suomela S., Puisto S., Rostedt N., Alani-Nissila T., Nieminen R.* // J. Opt. Soc. Am. B: Opt. Phys. 2013. V. 30. P. 338.
- [29] *Pustovalov V., Astafyeva L.* // J. Nanomaterials. 2015. P. ID 812617. doi 10.1155/2015/812617
- [30] *Pustovalov V.* // Laser Phys. 2011. V. 21. P. 906.
- [31] *Pustovalov V.* // RSC Advances. 2016. V. 6. P. 81266.
- [32] Refractive index database. 2015. [Электронный ресурс] Режим доступа: <http://refractiveindex.info/>
- [33] *Devore J.* // J. Opt. Soc. Am. 1951. V. 41. P. 416.
- [34] *Mahmoud S., Alshomer S., Tarawneh M.* // J. Mod. Phys. 2011. V. 2. P. 1178.
- [35] *Lajaunie L., Bousher F., Dessapt R., Moreau P.* // Phys. Rev. B. 2013. V. 88. P. 115141.
- [36] ASTM G-173-03-International standard ISO 9845-1, 1992.
- [37] *Pustovalov V., Astafyeva L., Fritzsche W.* // Solar Energy. 2015. V. 122. P. 1334.