

графіт правильної форми Гф12, розмір графітного сфероїда менший, ніж при модифікуванні чавуну магнієм, і відповідає Граз30.

Комплексне модифікування вже при вмісті в наплавленому металі 0,02-0,03% Mg і 0,05-0,06 Y призводить до утворення кулевидного графіту правильної чіткої форми Гф13. Причому розмір сфероїдів менший, ніж при роздільному модифікуванні, і відповідає Граз25. Необхідно відзначити, що практично весь вільний графіт є сфероїдами, рівномірно розподіленими в матриці основи, що характерний для рівноважних структур.

Висновки

1. Розроблений склад прутка для газового і електродугового зварювання високоміцного чавуну, що містить нову систему легування і розкислювання – РЗМ - бор.

2. Структура наплавленого металу перлітна з великими ділянками аустеніту дендритної орієнтації. Твердість в цій зоні складає 229НВ. Графіт кулевидний середньої величини, декілька дрібніше, ніж в основному металі.

Література

1. Асиновская Г.А., Журавецкий Ю.И. Газовая сварка чугуна. Машиностроение. М., 1974. 49 с.
2. Иванов Б.Г., Журавецкий Ю.И., Левченко В.И. Сварка и резка чугуна. М. Машиностроение, 1977. 208 с.
3. Левченко В.И. Состояние и перспективы развития сварки чугуна (обзор). «Сварочное производство», 1988. №2 с 2-4.

Експериментально досліджені спектри поглинання і розсіяння світла колоїдними частинками деяких металів в різних середовищах. Спостережувані спектри поглинання і розсіяння світла порівнюються з обчисленими по формулах Г.Ми оптики каламутних середовищ

Ключові слова: колоїдний розчин, наночастки, оптика каламутних середовищ

Експериментально исследованы спектры поглощения и рассеяния света коллоидными частицами некоторых металлов в разных средах. Наблюдаемые спектры поглощения и рассеяния света сравниваются с вычисленными по формулам Г.Ми оптики мутных сред

Ключевые слова: коллоидный раствор, наночастицы, оптика мутных сред

The spectrums of absorption and dispersion of light by the colloid particles of some metals in different environments are experimentally explored. The looked after spectrums of absorption and dispersion of light are compared to calculated on the formulas of the G.Mu optics of turbid environments

Keywords: colloid solution, nanochastytisy, optics of turbid environments

УДК 535.434

ПОГЛОЩЕНИЕ И РАССЕЯНИЕ СВЕТА МАЛЫМИ МЕТАЛЛИЧЕСКИМИ ЧАСТИЦАМИ

И.С. Радченко

Кандидат физико-математических наук, доцент
Кафедра теоретической и прикладной механики
Криворожский технический университет
ул. XXII Партсъезда, 11, г. Кривой Рог, Украина, 50027
Контактный тел.: (0564) 71-87-31

А.Ю. Малиновская

Старший преподаватель
Кафедра компьютерных систем автоматизированного
управления электроприводом
Криворожский металлургический факультет
Национальная металлургическая академия Украины
ул. Революционная, 5, г. Кривой Рог, Украина, 50006
Контактный тел.: 067-591-19-70
E-mail: mau2004@inbox.ru

1. Проблема и ее связь с научными и прикладными задачами

Малые металлические частицы и их системы, состоящие из достаточно большого числа малых частиц,

например, порошки, находят широкое применение в разных областях.

Порошки и агрегаты их, применяют, в частности, в качестве катализаторов химических реакций и электродов в электротехнических устройствах. Их

эффективность несравненно выше, чем у массивных образцов металлов. Введение малых частиц внутрь каких-то иных сред позволяет создать так называемые композиционные материалы. Металлические частицы, введенные в диэлектрик, резко изменяют его диэлектрические, оптические и механические свойства. Композитами являются ферромагнитные жидкости. Например, керосин с растворенными в нем частицами железа или никеля.

Свойства этих всех материалов зависят от величины металлических частиц и их концентрации. Величину частиц и их концентрацию можно определить по спектрам поглощения при сравнении наблюдаемых и вычисленных спектральных зависимостей коэффициентов поглощения и рассеяния света. При этом решается важный вопрос – с какого размера малые частицы обладают свойствами массивного материала.

Наиболее фундаментальные явления физики конденсированных сред (электропроводность, сверхпроводимость, ферромагнетизм, фазовые превращения и др.) представляют собой результат коллективных взаимодействий атомов, которые находятся в тесном контакте и взаимодействуют между собой. Каждое коллективное свойство атомов металла зарождается при объединении некоторого минимального количества атомов. В связи с этим возникают вопросы: с какого размера можно считать агрегированные атомы массивным металлом в отношении того или иного физического свойства и как влияет на эти свойства и как влияет на эти свойства размер полученного образования.

Важное значение, в настоящее время, имеет решение задачи о фазовом состоянии системы, состоящей из смеси атомов разного сорта. В твердом состоянии возможны различные случаи фазового равновесия. Система может быть гомогенна (однофазна) и представлять собой твердый раствор (А, В) или химическое соединение A_nB_m . Система может быть гетерогенна и состоять из смеси различных фаз.

Здесь, на первый план выступают оптические методы изучения твердых тел, так как они позволяют получать информацию об их строении, не разрушая материала.

2. Постановка задачи

Целью настоящей работы является экспериментальное исследование поглощения и рассеяния света малыми частицами металлов в разных средах, преобразование формул теории Г.Ми к виду удобному для расчетов на ЭВМ; вычисление спектров ослабления и рассеяния света коллоидами металлов. Приведены результаты расчетов спектров для некоторых металлов. Проведено сравнение теории и эксперимента.

3. Изложение материала и результаты

Эта проблема – частный случай общей проблемы спектральных свойств сред с диспергированными в них сильно поглощающими частицами [1]. Если частицы очень мелкие (диаметр много меньше длины волны падающего излучения λ), то каждая из них при

взаимодействии с электромагнитным излучением становится источником ряда дифрагированных парциальных колебаний электромагнитного поля.

В общем виде математическое решение задачи нахождения коэффициентов рассеяния $k_{\text{рас}}$ и ослабления (чистое поглощение + рассеяние) $k_{\text{осл}}$, а также степени поляризации Р совокупности частиц разного размера в среде с показателем преломления n_0 дано Ми [2]. Предшественниками Ми в решении общей задачи дифракции электромагнитных волн на теле произвольной формы были крупные физики и математики XIX и XX столетий (см. [3] и табл. 1). Величины $k_{\text{осл}}$ и $k_{\text{рас}}$ выражаются через суммы амплитуд бесконечного ряда парциальных электрических и магнитных волн a_N и b_N . Амплитудные коэффициенты суть функции двух основных параметров: относительного диаметра $\alpha = 2\pi r m_0 / \lambda_0$ и диэлектрической проницаемости вещества частиц $\epsilon = \epsilon_1 - i\epsilon_2$, где $\epsilon_1 = n^2 - \chi^2$ и $\epsilon_2 = 2\pi\chi$ (n и χ – показатели преломления и поглощения соответственно), λ_0 – длина волны падающего на частицу излучения в вакууме.

Для одной первой парциальной волны (простейший случай, см. [1])

$$k_{\text{осл}} = C \frac{6\pi m_0}{\lambda_0} A(1 + P\alpha^2 + Q\alpha^3 + R\alpha^4 + \dots), \quad (1)$$

где коэффициенты А, Р, Q, R... суть функции только n и χ , С – объемная концентрация. Когда размеры частиц настолько малы по сравнению с λ_0 (условимся называть их мельчайшими), что $\alpha \rightarrow 0$, остается лишь первый член с коэффициентом

$$A = -\frac{3\epsilon_2 m_0^2}{(\epsilon_1 + 2m_0^2)^2 + \epsilon_2^2} \quad (2)$$

Формула (2) определяет основные черты спектральной зависимости $k_{\text{осл}}$; члены с λ в формуле (1) вызывают ее большее или меньшее искажение. Физический смысл выражений Ми выявляется при сопоставлении поглощения излучения изолированными частицами с явлениями физики плазмы твердого тела [4,5], в которых также определяющее значение имеет комплексная диэлектрическая проницаемость, в частности, с поверхностными плазменными колебаниями.

Современные теоретические представления в вопросе о спектральных зависимостях величин $k_{\text{осл}}$ и $k_{\text{рас}}$ привели к ряду уточнений и усложнений. Они касаются, с одной стороны, крупных частиц, а с другой – мельчайших. Применение для расчетов ЭВМ, позволившее проводить суммирование по полным формулам с учетом достаточно большого числа членов, показало, что в области крупных частиц на кривых $k_{\text{осл}}(\lambda)$ и $k_{\text{рас}}(\lambda)$ четко наблюдаются осцилляции, обусловленные интерференцией парциальных волн [6, 7].

Для мельчайших частиц металлов, оптические свойства которых в соответствующей спектральной области обусловлены свободными электронами, фактором, не учитывавшимся ранее, является изменение значений оптических постоянных ϵ_1 и ϵ_2 при уменьшении размеров частиц. Теория этого эффекта как с квантовомеханической [8], так и с классической [9] точек зрения позволяет произвести расчет значений ϵ_1 и ϵ_2 как функций r . В обоих случаях $\epsilon_2 = A + B/r$, но с разными коэффициентами А и В. Зависимость ϵ_1 от r выражена слабо.

Таблица 1

К истории решения задачи о дифракции волн на сфере и эллипсоиде вращения

1. Общая задача дифракции		Пуассон (1819), Стокс (1849), Кирхгофф (1881)													
2. Решение уравнения $\nabla^2 \psi + k^2 \psi = 0$ при помощи рядов		Лаплас, Пуассон, Гельмгольц (1859), Стокс (1868), Рэлей (1871), Лэмб (1882), Стокс (1849), Кирхгофф (1887) $\nabla^2 \psi$													
3. Применение уравнения $\nabla^2 \psi + k^2 \psi = 0$ к случаю свободных и вынужденных колебаний	Теория упругих колебаний	$\epsilon' = n - i\text{nx}$ $\epsilon' = \epsilon - 2i\sigma T$ (диэлектрики и металлы)					$\sigma T = \infty$ (совершенные проводники)					Δ_ϵ бесконечно мало	$\epsilon' = n - i\text{nx}$ $\epsilon' = \epsilon - 2i\sigma T$		
		Свободные колебания			Вынужденные колебания			Свободные колебания			Вынужденные колебания				
															$\frac{2\rho}{\lambda} \rightarrow 0$
	Томсон (§300-307)	Томсон (1884) (§308-315)	Рэлей (§332)	Рэлей (1881)	Рэлей (§343)	Рэлей (1872) (§335), Л.Лоренц (1890)	Томсон (§361)	Рэлей (1872) (§330, 331)	Томсон (§361)	Томсон (§369), Шварцшильд (1901)	Рэлей (1872) (§334)	Рэлей (1871)	Рэлей (1899) Рэлей (1914)	Рэлей (1881), Рэлей (1897)	Ганс (1912)
4. Разложение на два поля и применение	Абрагам (1898), Бромвич (1919), Никольсон (1910)														
	Дебай (1909)	Абрагам (1898), Эренхафт (1903)	Заммерфельд (1899), Игнатовский (1906), Зейтц (1906), Литем (1906), Дебай (1908), Слон (1920), Пфеннигер (1927)	Ми (1908), Дебай (1909), Бромвич (1920)	Иобст (1925), Меллих (1933), Тринк (1935)	Меллих (1927)	Абрагам (1898) Эренхафт (1903)	Игнатовский (1907) Алки (1908), Зиглер (1908)	Герц Фельд (1911)	Рэлей (1918)	Шустер Стюарт (1925)	Ганс и Гашпель (1909) Кунц (1920) Кабан (1921)			
5. Оптические свойства мутных сред	Игнатовский (1906)	Лоренц (1890)	Газенерль (1902), Ми (1908), Дебай (1909), Лампа (1909)								Максвелл Гарнетт (1905)	Ганс и Гашпель (1909)			
Примечание. Указанные в скобках параграфы соответствуют работам: Рэлей Д.В. Теория звука. – М., Гостехиздат, 1955; Thomson J.J. Electricity and Magnetism															

Полное представление о спектральных свойствах металлов в коллоидном раздроблении можно получить лишь при применении машинных способов расчета, которые позволяют проводить вычисления для любого числа членов рядов, определяющих коэффициенты $k_{осл}$ и $k_{рас}$, а также при достаточно малом интервале $\Delta\lambda$ между расчетными точками спектра.

Нами было предпринято исследование по возможности всех систем «металл: среда» для сферических изолированных частиц по формулам Ми с учетом размерных эффектов. Выбор ограничен тем, что числовые значения оптических постоянных металлов недостаточно надежны (в ряде статей по исследованию диэлектрической проницаемости ϵ приведены лишь кривые $\epsilon_1(\lambda)$ и $\epsilon_2(\lambda)$ в мелком масштабе, что значитель-

но затрудняет использование этих данных для расчетов). Результаты исследований некоторых систем были опубликованы ранее, например, Au:H₂O, Ag:H₂O [10], Li:LiF [11], Mg:LiF [12]; K:KCl [13]. В настоящей статье приводим преобразованные к виду, удобному для расчетов на ЭВМ, формулы Ми, схему расчетов амплитудных коэффициентов с учетом размерных эффектов, результаты расчетов для некоторых систем и их обсуждение.

4. Расчет амплитудных коэффициентов и их сумм

По Ми, коэффициенты ослабления $k_{осл}$ и рассеяния $k_{рас}$ выражаются через суммы амплитуд парциальных электрических a_N и магнитных b_N колебаний

$$k_{осл} = C \frac{6\pi}{\lambda_0} m_0 \operatorname{Re} \sum_{N=1} (2N+1) \left(\frac{a_N}{2\alpha^3} + \frac{b_N}{2\alpha^3} \right),$$

$$k_{рас} = C \frac{6\pi}{\lambda_0} m_0 2\alpha^3 \sum_{N=1} (2N+1) \left(\left| \frac{a_N}{2\alpha^3} \right|^2 + \left| \frac{b_N}{2\alpha^3} \right|^2 \right),$$

$$a_N = \frac{S'_N(m'a)S_N(\alpha) - m'S_N(m'\alpha)S'_N(\alpha)}{S'_N(m'a)[S_N(\alpha) + iC_N(\alpha)] - m'S_N(m'\alpha)[S'_N(\alpha) + iC'_N(\alpha)]}, \quad (3)$$

$$b_N = \frac{m'S'_N(m'a)S_N(\alpha) - S_N(m'\alpha)S'_N(\alpha)}{m'S'_N(m'a)[S_N(\alpha) + iC_N(\alpha)] - S_N(m'\alpha)[S'_N(\alpha) + iC'_N(\alpha)]}, \quad (4)$$

$$m' = \frac{n - i\chi}{m_0}.$$

Функции Риккати-Бесселя $S_N(z)$ и $C_N(z)$ выражаются через функции Бесселя 1-го рода порядка $N+1/2$ следующим образом:

$$S_N(z) = \sqrt{\frac{\pi z}{2}} J_{N+1/2}(z),$$

$$C_N(z) = \sqrt{\frac{\pi z}{2}} H_{N+1/2}(z).$$

Штрихом обозначено дифференцирование функции по аргументу. Функции Бесселя, входящие в формулы (3) и (4), выражаются через круговые функции. Три первые функции $S_N(z)$ и $C_N(z)$ следующие:

$$\left. \begin{aligned} S_0(z) &= \sin z, & S_1(z) &= \frac{\sin z}{z} - \cos z, \\ S_2(z) &= \left(\frac{3}{z^2} - 1 \right) \sin z - \frac{3}{z^2} \cos z; \\ C_0(z) &= \cos z, & C_1(z) &= \sin z + \frac{\cos z}{z}, \\ C_2(z) &= \left(\frac{3}{z^2} - 1 \right) \cos z + \frac{3}{z^2} \sin z. \end{aligned} \right\}$$

Все функции удовлетворяют рекуррентным соотношениям вида

$$S_{N+1}(z) = \frac{2N+1}{z} S_N(z) - S_{N-1}(z).$$

Производные функции выражаются через сами функции. Для них имеет место формула

$$S'_N(z) = S_{N-1}(z) - \frac{N}{z} S_N(z).$$

Функции $S_N(z)$ и $S'_N(z)$ разлагаются в степенные ряды по z [14].

Для удобства составления программы расчетов, на ЭВМ амплитудных коэффициентов a_N и b_N преобразуем выражения (3) и (4). Разделим числитель и знаменатель в (3) и (4) на $S_N(z)$ и перейдем от производных к самим функциям. В результате после группировки членов и несложных преобразований получим следующие формулы:

$$a_N = [1 + iG_N(\alpha, m'\alpha)]^{-1},$$

$$b_N = [1 + iH_N(\alpha, m'\alpha)]^{-1},$$

где

$$G_N(\alpha, m'\alpha) = \frac{W_N(\alpha, m'\alpha)C_N(\alpha) - C_{N-1}(\alpha)}{W_N(\alpha, m'\alpha)S_N(\alpha) - S_{N-1}(\alpha)},$$

$$W_N(\alpha, m'\alpha) = \frac{A_N(m'\alpha)C_N(\alpha) + \frac{N}{\alpha}}{m'},$$

$$A_N(m'\alpha) = R_N(m'\alpha) + \frac{N}{m'\alpha},$$

$$R_N(m'\alpha) = m'\alpha[(2N-1) - m'\alpha R_{N-1}(m'\alpha)]^{-1},$$

$$R_0(m'\alpha) = \frac{\cos \alpha n' \operatorname{ch} \alpha \chi' + i \sin \alpha n' \operatorname{sh} \alpha \chi'}{\sin \alpha n' \operatorname{ch} \alpha \chi' - i \cos \alpha n' \operatorname{sh} \alpha \chi'},$$

$$H_N(\alpha, m'\alpha) = \frac{\left[m'A_N(m'\alpha) + \frac{N}{\alpha} \right] C_N(\alpha) - C_{N-1}(\alpha)}{\left[m'A_N(m'\alpha) + \frac{N}{\alpha} \right] S_N(\alpha) - S_{N-1}(\alpha)}.$$

Так как показатель преломления вещества коллоидной частицы – величина комплексная, то функции $R_N(\alpha, m'\alpha)$ и $H_N(\alpha, m'\alpha)$ также являются комплексными. Перед составлением программы расчетов на ЭВМ мы во всех приведенных выше выражениях выделили действительную и мнимую части. На ЭВМ по заданным значениям $n(\lambda)$, $\chi(\lambda)$, $m_0(\lambda)$, λ_0 вычисляли:

- 1) значения α для заданного радиуса частиц r ;
- 2) по α – значения R_0 , R_N , A_N и $m'A_N$;
- 3) амплитудные коэффициенты a_N и b_N ;
- 4) коэффициенты ослабления и рассеяния $k_{осл}$ и $k_{рас}$.

5) факторы эффективности ослабления $Q_{осл}$ и рассеяния $Q_{рас}$. Для $Q_{осл}$ и $Q_{рас}$ и коэффициентов ослабления $k_{осл}$ и рассеяния $k_{рас}$ справедливы следующие соотношения:

$$k_{осл} = C \frac{3\pi}{\lambda_0} m_0 \frac{Q_{осл}}{2\alpha};$$

$$k_{рас} = C \frac{3\pi}{\lambda_0} m_0 \frac{Q_{рас}}{2\alpha};$$

6) коэффициент чистого поглощения, определяющий долю поглощенной частицами энергии:

$$k_n = k_{осл} - k_{рас};$$

7) интенсивность света, рассеянного частицей в направлении θ :

$$I(\theta) = I_0 \frac{i_1 + i_2}{2k^2 R^2},$$

где θ – угол между направлением распространения падающего и рассеянного излучения в плоскости рассеяния; $k = 2\pi m_0 / \lambda_0$; R – расстояние от центра сферической частицы до точки наблюдения; величины i_1 и i_2 характеризуют угловую зависимость компонент рассеянного излучения, поляризованных перпендикулярно и параллельно плоскости рассеяния:

$$i_1 = \left| \sum_{N=1} \frac{2N+1}{N(N+1)} [a_N \pi_N(\cos\theta) + b_N \tau_N(\cos\theta)] \right|^2,$$

$$i_2 = \left| \sum_{N=1} \frac{2N+1}{N(N+1)} [a_N \tau_N(\cos\theta) + b_N \pi_N(\cos\theta)] \right|^2.$$

Угловые функции $\pi_N(\cos\theta)$ и $\tau_N(\cos\theta)$ вычислялись по рекуррентным соотношениям [14]. В частности, для $\pi_N(\cos\theta)$ справедливо соотношение

$$\pi_N(\cos\theta) = \frac{2N-1}{N-1} \cos\theta \cdot \pi_{N-1}(\cos\theta) - \frac{N}{N-1} \pi_{N-2}(\cos\theta).$$

Функцию $\tau_N(\cos\theta)$ можно выразить через $\pi_N(\cos\theta)$:

$$\tau_N(\cos\theta) = \frac{N^2}{2N+1} \pi_{N+1}(\cos\theta) - \frac{(N+1)^2}{2N+1} \pi_{N+1}(\cos\theta)$$

Первые несколько функций $\pi_N(\cos\theta)$ будут следующими:

$$\pi_1(\cos\theta) = 1, \quad \pi_2(\cos\theta) = 3\cos\theta,$$

$$\pi_3(\cos\theta) = \frac{3}{2}(5\cos^2\theta - 1);$$

8) степень поляризации

$$P = \frac{i_1 - i_2}{i_1 + i_2}.$$

При вычислениях всех рядов по нашей программе суммирование прекращалось при выполнении неравенства

$$\frac{a_N(8; 8 b_N)}{\sum_{N=1} a_N(8; 8 b_N)} \leq 10^{-8}. \quad (5)$$

Условие (5) позволяет сохранить одинаковую точность при вычислении спектральных характеристик коллоидных систем как с очень малыми, так и с крупными частицами.

5. Расчет спектральных зависимостей оптических постоянных коллоидных частиц с учетом размерных эффектов

Действительная и мнимая части диэлектрической проницаемости вещества коллоидных частиц с учетом аддитивности определяются выражениями

$$\epsilon_1 = \epsilon_1^b + \epsilon_1^f, \quad \epsilon_2 = \epsilon_2^b + \epsilon_2^f,$$

где ϵ_1^b и ϵ_2^b относятся к междузонным переходам (связанные электроны, поляризация атомного остова), а ϵ_1^f и ϵ_2^f – к свободным электронам (внутризонные эффекты). Принимаем, что для частиц с $r \geq 1,1$ нм величины ϵ_1^b и ϵ_2^b такие же, как и у «массивного» вещества (расстояние между энергетическими уровнями не изменяется с уменьшением размера), но эффективная частота релаксации электронов проводимости увеличена за счет их столкновений с поверхностью частиц [11].

Классическая частота соударений электронов проводимости, согласно [9], находится из соотношения

$$\frac{1}{\tau} = \sum_{i=1} \frac{1}{\tau_i} + \frac{U}{\Gamma},$$

где $\sum_{i=1} \frac{1}{\tau_i}$ – частота соударений электронов с дефектами, электронами, фононами и т. д.; U – скорость электронов, обладающих энергией Ферми. Для большинства металлов второе слагаемое в (6) перестает играть заметную роль уже при $r \geq 15 \div 20$ нм (для таких частиц оно составляет 1/20 первого). Следовательно, размерные эффекты выражены наиболее сильно для частиц с $r \leq 15 \div 20$ нм.

Члены ϵ_1^f и ϵ_2^f вычисляются по формулам

$$\epsilon_1^f = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \frac{1}{\tau^2}}, \quad (7)$$

$$\epsilon_2^f = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \frac{1}{\tau^2}} \frac{1}{\omega}, \quad (8)$$

где ω_p – плазменная частота. Из (7) и (8) видно, что особенно сильно влияние размерных эффектов сказывается на ϵ_2^f . Это приводит к увеличению полуширины коллоидной полосы ослабления при неизменном спектральном положении ее максимума (зависимость ϵ_1^f от $\frac{1}{\tau}$ выражена слабо) для частиц с $r \leq 15 \div 20$ нм. Этот радиус можно назвать критическим ($r_{кр}$). Дальнейшее увеличение размеров приводит в соответствии с общими выражениями Ми к смещению максимума в длинноволновую область спектра, $k_{осл \max}$ уменьшается, а полуширина увеличивается.

Программа расчетов спектральных зависимостей оптических постоянных частиц с учетом размерных эффектов на ЭВМ была следующей:

- 1) вводили значения ω_p^2 , U , $\sum_{i=1} \frac{1}{\tau_i}$;
- 2) по (7) и (8) вычисляли $(\epsilon_1^f)_M$ и $(\epsilon_2^f)_M$ при $r \rightarrow \infty$ (массивный металл);
- 3) определяли ϵ_1^b и ϵ_2^b ;

$$\epsilon_1^b = \epsilon_1 - (\epsilon_1^f)_M, \quad \epsilon_2^b = \epsilon_2 - (\epsilon_2^f)_M,$$

(они должны храниться в запоминающем устройстве машины до конца расчетов);

- 4) вычисляли значения $\frac{1}{\tau}$ для каждого g ;

5) по значениям— рассчитывали $\epsilon_1^f(r,\lambda)$, $\epsilon_2^f(r,\lambda)$. В результате получили $\epsilon_1(r,\lambda)$ и $\epsilon_2(r,\lambda)$. По ним вычисляют $n(r,\lambda)$ и $\chi(r,\lambda)$. Дальнейший расчет ведут по программе, схема которой приведена в п. 4.1.

6. Результаты расчетов

С целью детального выяснения границ применимости формулы (2) (для мельчайших частиц) проведено сравнение получаемых по ней коэффициентов ослабления $k_{осл}^{(2)}$ с коэффициентами, рассчитанными по полным формулам Ми $k_{осл}^{(Мм)}$ (см. табл. 2). Из данных таблицы и других расчетных данных видим, что относительная погрешность в общем случае зависит от отношения χ'/n' .

Факторы эффективности ослабления $Q_{осл}$ для различных значений комплексного показателя преломления $m' = 2 - i\chi'$

α	χ'						
	0,002	0,02	0,2	1,0	2,0	3,0	4,0
0,05	1,378-4	1,341-3	1,331-2	5,873-2	7,096-2	4,745-2	2,735-2
0,10	3,375-4	2,762-3	2,691-2	1,187-2	1,434-1	9,742-2	5,720-2
0,20	1,640-3	6,650-3	5,653-2	2,482-1	3,092-1	2,173-1	1,357-2
*	1,334-4	1,334-3	1,328-2	5,861-2	7,063-2	4,712-2	2,703-2

Примечания. Запись 1,378-4 означает 1,378·10⁻⁴ и т. д.; строка* - результаты расчетов по формуле (2)

При $\alpha = 0,05$ для большинства реальных систем ($\chi'/n' \leq 20$) она составляет ~ 1 %, при $\alpha=0,10$ – около 50%. В общем случае зависимость между r и α дается соотношением

$$r = 0,1591\alpha \frac{\lambda}{m_0}$$

Вычисления показывают, что формула (2) может быть применена для частиц с $r \leq 10$ нм. В качестве примеров приведем некоторые результаты расчетов на ЭВМ для коллоидных систем, дающих максимум на кривой $k_{осл}$ в инфракрасной (Rb:RbCl), видимой (Cu: NaCl) и ультрафиолетовой (Hg:H₂O) областях спектра.

На рис. 1 и 2 показано влияние изменений значений n' (рис. 2, $m' = n' - i \cdot 1,50$) и χ' (рис.1 $m' = n' - i,50 - i\chi'$) на фактор эффективности $Q_{осл}$.

Из этих рисунков и анализа полученных расчетных данных следует, что:

1) численные значения функции $Q_{осл}$ испытывают большие колебания в районе малых значений параметра λ ;

2) при данном значении λ на характер зависимости функции $Q_{осл}$ оказывает влияние величина комплексного показателя преломления вещества частицы;

3) количество экстремумов кривой $Q_{осл}$ зависит от соотношения между относительным показателем преломления n' и показателем поглощения вещества частицы χ' . При данном значении χ' экстремумов на кривой $Q_{осл}$ тем больше, чем меньше величина n' . При уменьшении показателя n' также растет и величина дополнительных максимумов. С увеличением n' ко-

личество экстремумов уменьшается, кривая остается при относительно малых отношениях параметра α ;

4) при данном значении относительного показателя преломления n' вещества частицы увеличение показателя поглощения χ' сказывается на уменьшении $Q_{осл}$, тогда максимум на кривой $Q_{осл}$ наблюдается при меньших значениях параметра α . У частиц, сильно поглощающих и с относительно большим значением коэффициента n' , кривая $Q_{осл}$ имеет один максимум, асимптотическое значение $Q_{осл} = 2$ достигается при относительно малых значениях параметра α .

На рис. 3 представлены кривые факторов эффективности ослабления для ряда металлов (Na, Ag, Mg, Au, Fe, Ni) в кристалле NaCl. В табл. 3 приведены значения показателей преломления n и поглощения χ для указанных металлов, В этой же таблице приводится отношение χ/n для этих же металлов. Показатель преломления кристалла NaCl в вычислениях принимался равным 1,55. В табл. 3 приведены значения показателей преломления n и поглощения χ для указанных металлов. В этой же таблице приводится отношение χ/n для этих же металлов.

Таблица 2

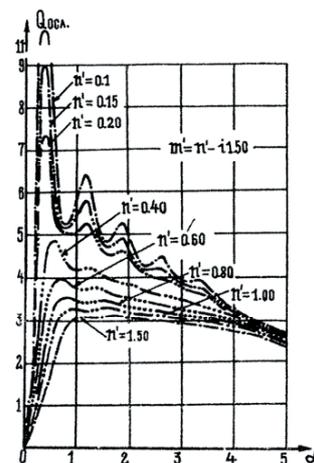


Рис. 1. Влияние изменения относительного показателя преломления вещества частицы на величину $Q_{осл}$

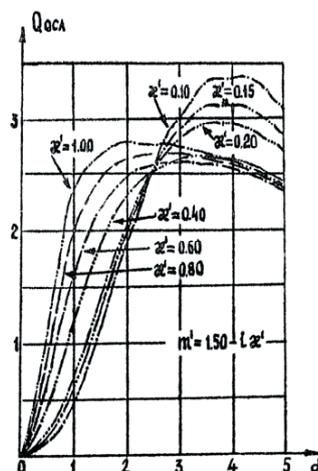


Рис. 2. Влияние изменения относительного показателя поглощения на фактор эффективности $Q_{осл}$

Из рис. 1 и табл. 3 видно, что с уменьшением отношения $\frac{\chi}{n} \approx 1$ "рябь" на кривой $Q_{осл}$ железа, для которого χ/n , этой «ряби» почти нет. Кроме того, первый максимум на кривой фактора эффективности и ослабления с уменьшением χ/n уменьшается и перемещается к большим значениям α .

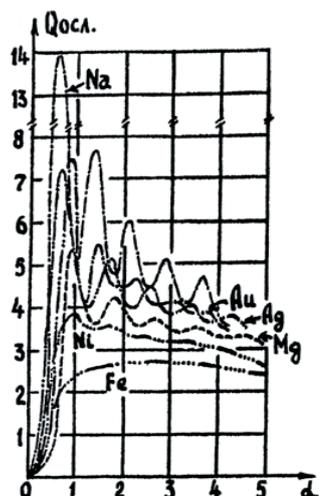


Рис. 3. Зависимость фактора эффективности $Q_{осл}$ изменения от параметра дифракции α для некоторых металлов

Таблица 3

Оптические постоянные некоторых (для $\lambda = 588,3$ нм)

Металл	χ	n	$\frac{\chi}{n}$	R^x
Na	2,61	0,05	52,20	99,8
Ag	3,64	0,18	20,22	95,0
Mg	4,42	0,37	11,94	92,7
Au	2,82	0,37	7,62	85,1
Hg	4,41	1,62	2,72	73,3
Cu	2,62	0,64	4,09	70,1
Ni ^{xx}	3,32	1,79	1,85	62,0
Fe ^{xx}	1,63	1,51	1,08	32,6

R^x - коэффициент отражения;
^{xx} - образцы приготовления испарением

Далее приведены результаты численного расчета для конкретных систем.

Система Rb:RbCl. В основу расчетов положены значения оптических постоянных Rb, полученных авторами работы [15] на толстых пленках. При вычислениях было принято $\omega_p^2 = 22,0458 \cdot 10^{30} \text{ c}^{-2}$ (один электрон проводимости на атом), $\sum \frac{1}{\tau} = 3,57 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$, $U = 0,8 \cdot 10^{15} \text{ нм/с}$.

Среднее значение показателя преломления кристалла RbCl равно 1,492 [15].

Спектральная зависимость коэффициента ослабления излучением системой Rb:RbCl показана на рис. 4. Из рисунка видно, что для мельчайших частиц $\lambda_{max} = 942 \text{ нм}$, $\Gamma_{@} \approx 15 \text{ нм}$, $k_{ослmax} \approx 6 \text{ см}^{-1}$.

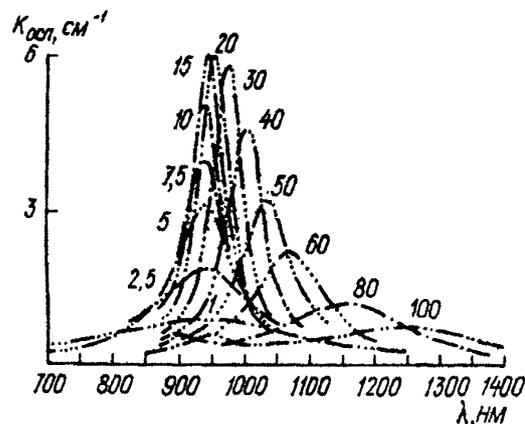


Рис. 4. Спектральная зависимость коэффициента ослабления излучения системой Ru:RuCl

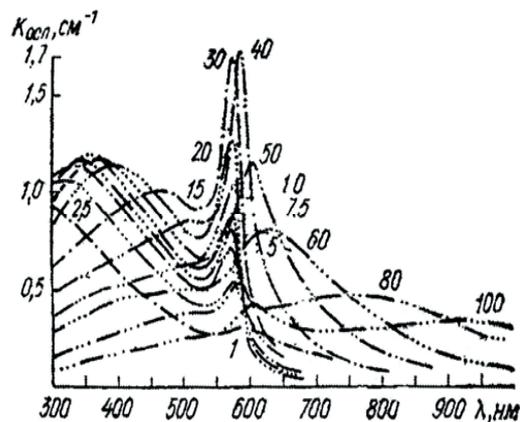


Рис. 5. Спектральная зависимость коэффициента ослабления излучения системой Cu:NaCl

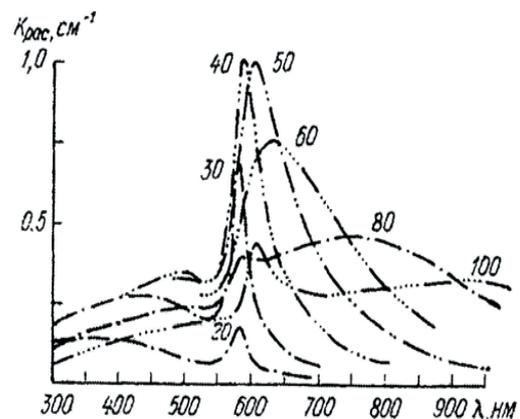


Рис. 6. Спектральная зависимость коэффициента рассеяния излучения системой Cu:NaCl

Система Cu:NaCl. В основу расчетов положены значения оптических постоянных меди, полученные Оттером [15]. При вычислениях было принято $\omega_p^2 = 281,6389 \cdot 10^{30} \text{ c}^{-2}$, $\sum_{i=1} \frac{1}{\tau_i} = 3,891 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$, $U = 1,58 \cdot 10^{15} \text{ нм/с}$.

Спектральные зависимости коэффициентов ослабления и рассеяния излучения системой Cu:NaCl показаны на рис. 5 и 6 соответственно.

Из них видим, что кривая $k_{\text{осл}}(\lambda)$ для частиц меди с $r \approx 1 \text{ нм}$ имеет практически один максимум ($\lambda \approx 350 \text{ нм}$). При $2,5 \leq r \leq 40 \text{ нм}$ на кривых отчетливо наблюдаются два максимума при $r > 40 \text{ нм}$, сохраняется только один максимум в области $\lambda > 550 \text{ нм}$. Побочные максимумы (вклады коэффициентов a_2, a_3, \dots) в этой области появляются на кривых $k_{\text{осл}}$ для $r > 70 \text{ нм}$.

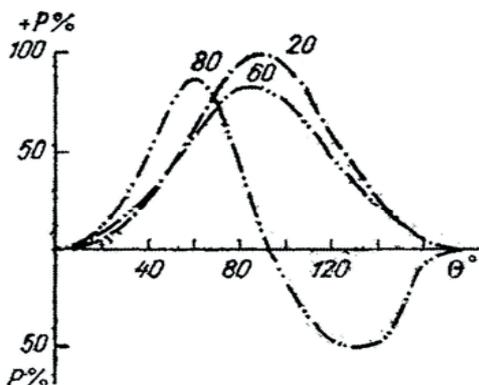


Рис. 7. Степень поляризации рассеянного света частицами меди в кристалле NaCl

Таблица 4

Оптические постоянные золота

λ	n	χ	ϵ_1	ϵ_2
250	1,22	1,50	-0,762	3,66
275	1,35	1,75	-1,24	4,725
300	1,58	1,83	-0,853	5,783
325	1,62	1,78	-0,544	5,767
350	1,60	1,72	-0,398	5,504
375	1,58	1,78	-0,672	5,625
400	1,58	1,80	-0,744	5,688
425	1,50	1,78	-0,918	5,34
450	1,43	1,72	-1,195	5,148
475	1,24	1,58	-1,421	4,266
500	0,74	1,58	-1,949	2,338
525	0,45	1,92	-3,484	1,728
550	0,28	2,30	-5,212	1,288
575	0,20	2,61	-6,772	1,044
600	0,16	2,89	-8,326	0,925
625	0,12	3,19	-10,162	0,766
650	0,105	3,44	-11,823	0,722
675	0,090	3,72	-13,83	0,67
700	0,080	3,94	-15,517	0,63
725	0,072	4,17	-17,384	0,6
750	0,070	4,25	-18,058	0,595
775	0,068	4,44	-19,709	0,604
800	0,066	4,50	-20,246	0,594

На рис. 7 показана угловая зависимость степени поляризации P рассеянного света частицами меди в кристалле NaCl. Отношение χ'/n' для меди таково, что максимум на кривой P(θ) смещается в область малых углов рассеяния при увеличении размеров частиц, (для других систем может наблюдаться и иная картина).

Система Au-H₂O. В табл. 4 приведены оптические постоянные массивного золота согласно данным [15].

Эти оптические постоянные массивного золота были использованы для расчета спектров поглощения света системой Au-H₂O.

При этом $\omega_p^2 = 188,5129 \times 10^{30} \text{ c}^{-2}$, $\sum \frac{1}{\tau_i} = 0,0406 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$, $U = 1,39 \cdot 10^{15} \text{ нм/с}$.

7. Методика эксперимента

Для приготовления гидрозоль золота мы воспользовались методом, который был предложен Оствальдом [16].

Во всех опытах исходили из 1 процентного водного раствора хлорного золота (AuCl₃, Aur. Chlorat.fus-сит). Этот раствор первоначально доводили до нейтральной или слабощелочной реакции, по лакмусу, прибавляя по каплям раствора Na₂CO₃.

1. Красный гидрозоль золота А. 100 см³ дистиллированной воды +5 см³ 0,01 процентного раствора хлорного золота нагревают в эрленмейровской колбе до кипения, затем прибавляют 10 капель с паузами 30 с при взбалтывании свежеприготовленный водный раствор танина до появления интенсивно красной окраски.

2. Красный гидрозоль золота В. 100 см³ дистиллированной воды +8 см³ 0,012 процентного раствора хлорного золота нагревают в эрленмейровской колбе до кипения, затем прибавляют 12-15 капель с паузами 30 с при взбалтывании свежеприготовленный водный раствор танина до появления красной окраски раствора.

3. Красный гидрозоль золота С. 100 см³ дистиллированной воды +12 см³ 0,015 процентного раствора хлорного золота нагревают в эрленмейровской колбе до кипения, затем прибавляют 12-20 капель с паузами 30 с при взбалтывании свежее – приготовленный водный раствор танина до появления интенсивно красной окраски раствора.

Спектры поглощения света снимали на свежеприготовленных растворах золь золота на спектрофотометре СФ-16. Длина кюветы при этом была равна $l = 4,505 \text{ мм}$.

На рис. 8 показаны измеренные спектральные зависимости коэффициентов ослабления света этими растворами.

На рис. 9 показаны измеренные и расчетные спектры поглощения света сферическими частицами золота в воде.

Полученный нами расчетный материал для спектров ослабления, рассеяния, чистого поглощения, степени поляризации и индикатрис рассеянного света в широком спектральном диапазоне совокупности коллоидных частиц в разных средах дает возможность сделать следующие выводы:

1. Ряд металлов в коллоидном раздроблении даёт несколько максимумов на кривых $k_{осл}(\lambda)$ и $k_{рас}(\lambda)$. Соотношение между максимумами зависит от отношения χ'/n' в этих спектральных областях и от размеров частиц при вычислении $k_{осл}(\lambda)$ и $k_{рас}(\lambda)$ с учетом размерных эффектов (см., например, рис. 2 и 3).

2. Для большей части исследованных веществ в массивном состоянии энергия плазменных колебаний ≤ 20 эВ, поэтому они в коллоидном распределении дают соответствующие полосы при $m_0 \leq 2$ в ультрафиолетовой области. С увеличением размеров частиц эти полосы, смещаясь в длинноволновую область, могут охватывать видимую область спектра. Они имеют большую полуширину и малое значение $k_{осл\ max}$. Это относится и к тем веществам, которые имеют коллоидные полосы в видимой области спектра. С этим связана трудность обнаружения крупных частиц по спектрам ослабления (подробнее см. [3]).

Для веществ, действительная часть диэлектрической проницаемости которых $\epsilon_1(\lambda)$ имеет малый угол наклона с осью λ (например, Rb), в коллоидном распределении имеются довольно широкие полосы ослабления излучения в инфракрасной области спектра (см., например, рис. 4).

3. Своеобразная спектральная зависимость оптических постоянных золота и меди (в области $\lambda > 550$ нм $n \leq \chi$) приводит к насыщенной окраске всех реальных сред ($1 \leq m_0 \leq 3$) с этими металлами, так как соответствующая коллоидная полоса ослабления (для частиц с $r \geq 5$ нм) имеет максимум в средней части видимой области спектра, где глаз обладает наибольшей чувствительностью к изменению оттенков.

Расчет с учетом размерных эффектов показывает, что для частиц малых размеров максимум на кривой $k_{осл}(\lambda)$ для этих металлов в видимой области почти полностью исчезает. Однако поглощение (ослабление) в ультрафиолетовой области остается достаточно большим. Соотношение между максимумами в коротковолновой и видимой областях

спектра для частиц этих металлов может служить надежным способом определения их наличия в разных – средах.

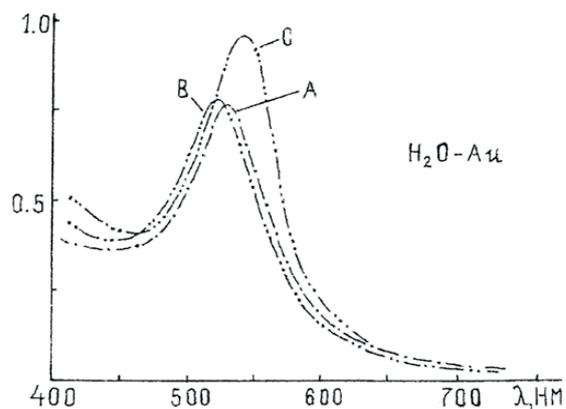


Рис. 8. Экспериментальные спектральные зависимости коэффициентов ослабления света красными коллоидными растворами в воде

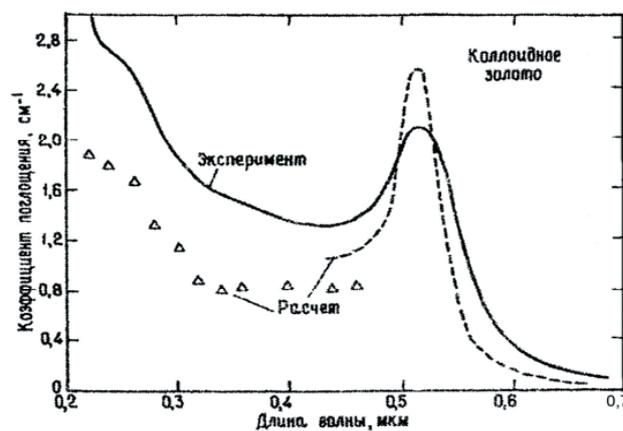


Рис. 9. Измеренные и расчетные спектры поглощения света коллоидными растворами золота

Литература

1. Савостьянова, М.В. Теоретические и прикладные проблемы рассеяния света [Текст] / М.В.Савостьянова. – М.: Наука и техника, 1971. – 376-381 с.
2. Mie, G. Beitrage zur Optik truber Medien speciell kolloidaler Metallosungen. Ann. d. Phys., 1908. – P. 377-445.
3. Савостьянова, М.В. Мельчайшие частицы металла. [Текст] // Успехи физических наук. М.: Наука и техника, 1939. Т.22. – С.168-216.
4. Frolich H., Pelzer H. Plasma oscillations and energy loss of charged particles in solids. Proc. Phys. Soc. Lond. – 1955. –V. A68. P. 525-529.
5. Bischoff M., Finkenrath H., Waidelich W. Optische Plasmaresonanz in CdO. Z.Physik. – 1970. – B. 231. S. 193-202.
6. Ruppin R. Optical absorption of copper colloids in photochromic glasses. J. Appl.Phys. – 1986. V.59. P.1355-1359.
7. Skillman D.C., Berry C.R. Effect of Particle Shape on the Spectral Absorption of Colloidal Silver in Gelatin. The journal of Chemical Physics. – 1968. – V.48. – P.3297-3304.
8. Kawabata A., Kubo R. Electronic properties of fine metallic particles. II. Plasma resonance absorption J.Phys.Soc.Japan. – 1966. V.21. P.1765-1772.
9. Kreibitz U., Fragstein C. The limitation of electron mean free path in small silver particles. Z. Phys. – 1969. – B.224. – S. 307-323.
10. Радченко, И.С. Расчет коэффициентов ослабления света коллоидными частицами золота и серебра в воде [Текст] // Журнал прикладной спектроскопии. – 1967. Т.6. – С.215-521.

11. Радченко, И.С. Коллоидные центры окраски в кристаллах фторида лития [Текст] // Физика твердого тела. – 1969. Т.11. Вып.7. – С.1830-1834.
12. Радченко, И.С. Метод радиационных воздействий в исследовании структуры и свойств твердых тел. Коллоидные центры окраски магния в кристалле LiF [Текст] / И.С. Радченко. – Т.: Техника, 1972. – С.145-152.
13. Радченко, И.С. Спектральный ход коэффициентов ослабления света коллоидными частицами калия в кристалле KCl [Текст] // Оптика и спектроскопия. – 1968. Т.25. Вып.6. – С.892-902.
14. Шифрин, К. С. Рассеяние света в мутной среде [Текст] / К.С. Шифрин. – М.: Государственное издательство технико-теоретической литературы, 1951. – 288 с.
15. Weaver J., Krafka C., Lynch D., Koch E. Physics Data: Optical Properties of metals. Fach-Information-Zentrum, Karlsruhe. – 1981. – с.501.
16. В.Оствальд. Краткое практическое руководство по коллоидной химии. [Текст] / В.Оствальд. Научное химико-техническое издательство. Научно-технический отдел В.С.Н.Х. Ленинград, 1925. – с.230.

УДК 655.3.026.27

Дано загальну характеристику багатошарового пакувального матеріалу. Описані основні механізми проведення випробування, а також основні властивості досліджених зразків

Ключові слова: скріплення шарів, багатошарові матеріали, ламінат, упаковка

Дана общая характеристика многослойного упаковочного материала. Описаны основные механизмы проведения испытания, а также основные свойства исследованных образцов

Ключевые слова: скрепление слоев, многослойные материалы, ламинат, упаковка

A general characteristic of laminated packaging material. Describes the basic mechanisms of the test, as well as the basic properties of the samples

Key words: bonding layers, laminates, laminates, packaging

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КАЧЕСТВА МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ИЗГОТОВЛЕНИЯ ТАРЫ И УПАКОВКИ ЖИРОСОДЕРЖАЩИХ ПРОДУКТОВ

Л. А. Яценко

Ассистент*

А. В. Миняйло*

E-mail: little-ann@ukr.net

О. С. Ратинова*

E-mail: o_star@bk.ru

*Кафедра инженерной и компьютерной графики
Харьковский национальный университет
радиоэлектроники
пр. Ленина, 14, г. Харьков, Украина, 61166

1. Введение

Сегодня упаковка играет очень важную роль при выборе потребителем того или иного товара. Однако, наряду с привлекательностью упаковки, стоят такие немаловажные характеристики как степень сохранности естественных свойств продукта, защиты его от внешних факторов, таких как свет, газ, влага, тепло и механические повреждения.

Многослойные пленки и комбинированные пленочные материалы, которые производятся на основе различных полимерных пленок (PP, PE, PA, PET, и др.), алюминиевой фольги и бумаги, имеют важные преимущества перед широко распространенными в качестве упаковки обычными пленочными материалами с печатью благодаря длительному сроку хранения упаковочной продукции; высоким механическим свойствам; межслойной печати, защищенной от повреждений; улучшению внешнего вида. В зависимости от необходимых барьерных свойств, производитель подбирает

оптимальный состав композиционных материалов, в некоторых случаях используется металлизация, покрытие термопаком и др. виды покрытий.

2. Цель исследования

Целью работы является определение качества ламинации многослойных материалов, заключающегося в прочности сцепления слоев ламинированного материала, что дает возможность отличить качественную ламинацию материалов от некачественной.

3. Теоретическая часть

Широта применения гибких многослойных упаковочных материалов объясняется практически неограниченными возможностями варьирования их свойств