

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Національний університет «Запорізька політехніка»

Інститут інформатики та радіоелектроніки
Факультет радіоелектроніки і телекомунікацій
(повне найменування інституту, факультету)

Кафедра мікро- та наноелектроніки
(повне найменування кафедри)

Пояснювальна записка

до магістерської роботи

магістр

(ступінь вищої освіти)

на тему Вплив металевих наночастинок на ефективність елементів
фотовольтаїки

Виконав: студент(ка) ІІ курсу, групи РТ-419м

Спеціальності

152 - Метрологія та інформаційно-
вимірювальна техніка

(код і найменування спеціальності)

Освітня програма (спеціалізація)

Якість, стандартизація та сертифікація

Михайлов Д. В.

(прізвище та ініціали)

Керівник

Рева В. І

(прізвище та ініціали)

Рецензент

Фомічева В. І.

(прізвище та ініціали)

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Національний університет «Запорізька політехніка»
 (повне найменування закладу вищої освіти)

Інститут, факультет Радіоелектроніки та телекомунікації
 Кафедра Мікро та наноелектроніки
 Ступінь вищої освіти магістр
 Спеціальність 152 «Метрологія та інформаційно-вимірвальна техніка»
 (код і найменування)
 Освітня програма (спеціалізація) «Якість, стандартизація та сертифікація»
 (назва освітньої програми (спеціалізації))

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри
мікро- та наноелектроніки
В. В. Погосов
 « » 2020 року

ЗАВДАННЯ
НА МАГІСТЕРСЬКУ РОБОТУ СТУДЕНТА

Михайлову Данилу Володимировичу

(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема проекту (роботи) Вплив металевих наночастинок на ефективність елементів фотовольтаїки

керівник проекту (роботи) Рева Віталій Ігорович, доцент, канд. фіз.-мат. наук
 (прізвище, ім'я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання)

затверджені наказом закладу вищої освіти від «13» листопада 2020 року №333

2. Строк подання студентом проекту (роботи) 07 грудня 2020 року

3. Вихідні дані до проекту (роботи) склад і морфологія наночастинок, параметри металів, діелектриків і напівпровідників

4. Зміст розрахунково-пояснювальної записки (перелік питань, які потрібно розробити) будова та принципи дії сучасних сонячних елементів; дослідження властивостей композитних наночастинок; техніко-економічне обґрунтування; охорона праці та безпека у надзвичайних ситуаціях

5. Перелік графічного матеріалу (з точним зазначенням обов'язкових креслень)

6. Консультанти розділів проекту (роботи)

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	прийняв виконане завдання
1-3	Рева В. І., доцент каф. МіНЕ		
4	Круглікова В. В., доцент каф. ПТБД		
5	Якімцов Ю. В., доцент каф. ОПІНС		
Нормо-контроль	Коротун А.В., доцент, канд. фіз.-мат.наук		

7. Дата видачі завдання « 30 » вересня 2020 року.

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№ з/п	Назва етапів дипломного проекту (роботи)	Строк виконання етапів проекту (роботи)	Примітка
1	Збір і аналіз інформації щодо сучасних проблем плазмонном фотовольтаїки	30.09. – 11.10.	виконано
2	Систематизація літературних даних	12.10. – 18.10.	виконано
3	Складання і затвердження наукового завдання	19.10. – 20.10.	виконано
4	Формування та уточнення наукового завдання	21.10. – 22.10.	виконано
5	Одержання співвідношень для поляризованостей, перерізів поглинання і розсіювання та оптичної радіаційної ефективності	23.10. – 31.10.	виконано
6	Складання процедури розрахунку	01.11. – 08.11.	виконано
7	Одержання чисельних результатів та їх аналіз	09.11. – 12.11	виконано
8	Аналіз економічної ефективності проекту	13.11. – 17.11	виконано
9	Розробка заходів по охороні праці	18.11. – 21.11	виконано
10	Оформлення графічної частини	22.11. – 24.11	виконано
11	Оформлення ПЗ	25.11. – 30.11.	виконано

Студент(ка)

(підпис)

Д.В. Михайлов
(прізвище та ініціали)

Керівник проекту (роботи)

(підпис)

А.В. Коротун
(прізвище та ініціали)

АНОТАЦІЯ

ПЗ: 118 с., 17 рис., 17 табл., 69 джерел.

Мета роботи: дослідження розмірно-частотних залежностей поляризованості, перерізів поглинання і розсіювання та оптичної радіаційної ефективності композитних наночастинок, використовуваних у плазмонній фотовольтаїці.

Об'єкт та предмет дослідження: об'єктом дослідження виступають плазмонні наночастинок, що застосовуються у сонячних елементах; предметом дослідження є оптичні властивості композитних наночастинок з точки зору покращення характеристик сонячних батарей.

Методи дослідження: розрахунково-аналітичний.

Результати: результатом дослідження є аналітичні вирази для поляризованості, перерізів поглинання і розсіювання, оптичної радіаційної ефективності та розрахунки залежностей цих величин від частоти і розмірів наночастинок.

Рекомендації щодо впровадження: робота носить фундаментальний характер, проте деякі її результати можуть бути використані для покращення технічних характеристик сучасних сонячних елементів.

Практична цінність: досліджено вплив розміру і складу двошарових наночастинок та можливість підсилення поглинання у матричній речовині сонячного елемента.

СОНЯЧНИЙ ЕЛЕМЕНТ, ДВОШАРОВА НАНОЧАСТИНКА,
ПОЛЯРИЗОВАНІСТЬ, ОПТИЧНА РАДІАЦІЙНА ЕФЕКТИВНІСТЬ,
ПЕРЕРІЗ ПОГЛИНАННЯ І РОЗСІЮВАННЯ

ЗМІСТ

Вступ	5
1 Сучасний стан фотовольтаїки	7
1.1 Класифікація сонячних елементів за принципом дії	7
1.2 Основні характеристики сонячних елементів	14
1.3 Плазмонна фотовольтаїка	19
1.4 Світлоуловлюючі структури поза межою Яблоновича	29
1.4.1 Межа Яблоновича	29
1.4.2 Захоплення світла за рахунок плазмонних резонансів	31
2 Властивості плазмонних наночастинок, що використовуються в якості пригнічувачів розсіяння у фотовольтаїці	36
2.1 Оптична ефективність плазмонної наночастинки	36
2.2 Поляризованість сферичної біметалевої наночастинки	37
2.2.1 Поверхневе розсіяння	41
2.2.2 Радіаційне загасання	50
2.2.3 Об'ємне загасання	53
2.3 Поляризованість сферичної металевої нанооболонки	54
3 Результати розрахунків та їх обговорення	65
3.1 Біметалеві наночастинок	65
3.2 Оболонкові наночастинок	70
3.3 Оптична радіаційна ефективність двошарових наночастинок у кремнії	74
4 Охорона праці та безпека в надзвичайних ситуаціях	77
4.1 Аналіз потенційних небезпек	77
4.2 Заходи по забезпеченню безпеки	78
4.3 Заходи по забезпеченню виробничої санітарії та гігієни праці	81
4.4 Заходи з пожежної безпеки та цивільної оборони	84
4.4.1 Заходи з пожежної безпеки	84

4.4.2	Заходи з цивільної оборони	86
4.5	Висновки з розділу “Охорона праці” та підрозділу “Заходи з цивільної оборони”	87
5	Економічне обґрунтування	92
5.1	Стейкхолдери	92
5.2	Розрахунок витрат на проведення НДР	103
5.3	Розрахунок економічної ефективності НДР	107
	Висновки	111
	Перелік посилань	113

ВСТУП

Для сучасної цивілізації поновлювані джерела енергії життєво необхідні. Вуглецеві джерела енергії (газ, нафта, вугілля, що складань поки 87% від всієї світової енергетики) мають величезні, але все ж обмежені запаси носіїв, які до того ж розподілені на Землі дуже нерівномірно. Атомні електростанції (4% ринку світової енергії) і водні генератори (7%) мають жорстку прив'язку до місця і щільності населення. Крім того, вони мають на увазі протяжні, громіздкі і недостатньо безпечні лінії електропередач. У той же час електроенергія, що отримується від Сонця, може проводитися безпосередньо в будинки споживачів, причому в силу технологічного розвитку це стає з кожним роком все доступніше. Не дивно, що сонячній фотовольтаїці присвячено величезний пласт досліджень. Сучасний стан цієї галузі науки відображено не лише в статтях, але і у наукових книгах, серед яких на початку XXI ст. повнотою і актуальністю виділялися [1-3].

Не відстає від науки і енергетика. Починаючи з 2000 р. потужність сонячних електростанцій в світі подвоюється кожні три роки [4].

Проте, незважаючи на значний поступ у технології сонячних елементів на основі кремнію, їх ціна ще дуже висока для широкого застосування. Один зі способів зменшення вартості полягає у використанні надтонких кремнієвих поглиначів у фотовольтаїчних елементах. Однак ефективність таких тонкоплівкових сонячних елементів мала порівняно з традиційними шаруватими структурами через відносно погане поглинання світла і високу швидкість поверхневої та об'ємної рекомбінації.

Для підвищення ефективності роботи сонячних елементів можна використовувати металеві наночастинки. При цьому покращення характеристик фотовольтаїчних елементів за допомогою металевих наночастинок може відбуватися за двома сценаріями [5]. По-перше, наночастинки використовуються для розсіяння падаючого сонячного світла у товщу напівпровідника. Завдяки багатократному розсіянню зростає частка

поглинутого напівпровідником світла. По-друге, збуджені у наночастинках локалізовані плазмонні резонанси посередництвом ближнього поля взаємодіють із напівпровідником, збільшуючи ефективний переріз розсіяння. Обидва процеси дозволяють зменшувати фізичну товщину фотовольтаїчного елемента при збереженні його оптичної товщини [6, 7]. Існує певний оптимальний діапазон розмірів металевих частинок, оскільки дуже малі частинки сильно поглинають світло, що призводить до втрат. У той самий час, їх розмір повинен відповідати умовам збудження локалізованого поверхневого плазмона, тобто не має перевищувати довжину хвилі світла [8, 9]. Крім того, в якості ефективних поглиначів можна використовувати не тільки металеві, а і біметалеві або оболонкові наночастинки

Тому питання про дослідження впливу морфології на характеристики поглинання таких наночастинок є актуальним.

1 СУЧАСНИЙ СТАН ФОТОВОЛЬТАЇКИ

1.1 Класифікація сонячних елементів за принципом дії

За методом перетворення енергії сонячного випромінювання в електричну сонячні елементи (СЕ) можна розділити на чотири типи: діодні, фотоелектрохімічні, екситонні і термофотовольтаїчні [1-4, 10-14]. Сонячні елементи діодного типу створюються на основі великого класу матеріалів: напівпровідників (Si, Ge), багатокомпонентних напівпровідникових сполук $A^{III}B^V$ і $A^{II}B^{VI}$, а також органічних матеріалів, в яких фотоэффект подібний до фотоэффекту в напівпровідниках. У даному типі сонячних елементів поділ зарядів, створених зовнішнім освітленням, відбувається на межі поділу двох середовищ з p - і n -типом провідності.

В залежності від товщини активної області, сонячні елементи діодного типу підрозділяються на системи на основі об'ємних кристалічних підкладок (таких як Si, Ge, GaAs) і на основі тонких плівок різної структури (кристалічної, мікрокристалічної, аморфної). СЕ на основі об'ємних кристалічних матеріалів володіють відносно високим ККД і характеризуються стабільною роботою, але при цьому відрізняються великою вартістю виробництва. СЕ на основі багатокомпонентних напівпровідникових сполук $A^{III}B^V$ і $A^{II}B^{VI}$ володіють високими ККД та характеризуються високою стабільністю параметрів і стійкістю до впливу навколишнього середовища, однак є найбільш дорогими і вимогливими з точки зору технології. СЕ на основі тонких плівок з високим коефіцієнтом поглинання (α -Si:H, CIGS, CdTe) характеризуються більш низьким ККД і відносно меншою стабільністю параметрів. Проте, в процесі їх виробництва витрачається значно менше сировини, і відповідно істотно знижується вартість [1-3, 12].

СЕ фотоелектрохімічного типу, наприклад, так звані елементи Гретцеля напівпровідникового p - n -переходу не мають. Як правило (див., наприклад, [1, 2]), СЕ Гретцеля включають мікрометровий шар широкозонного пористого або

структурованого напівпровідника з розвиненою поверхнею (зазвичай діоксид титану), нанесений на скло, покрите прозорим для сонячного світла провідним шаром субмікрометрової товщини, що відіграє роль анода. Зі зворотного боку поверхню TiO_2 , включаючи внутрішні поверхні пор, покривають найтоншим шаром барвника (зазвичай це мономолекулярний шар). Барвник (як правило, природний пігмент) володіє фотоелектричним ефектом, але, на відміну від напівпровідника, не може підтримувати фотострум. Світло, що поглинається молекулами пігменту, індукує екситони, які швидко дисоціюють, причому фотоелектрони тунелюють в TiO_2 і дифундують крізь цей матеріал, який є гарним провідником, до металу, що покриває скляну підкладку. Катод з боку пігменту формується з субмікрометрового шару платини, відокремленого від пігменту електролітом. Електроліт забезпечує транспорт електронів від платинового катода до пігменту, заповнюючи в барвнику недолік негативних зарядів, що утворилися, і замикаючи електричний ланцюг. Шар напівпровідникового матеріалу (TiO_2) в таких СЕ використовується тільки для транспорту носіїв, що генеруються в фотоелектричному шарі.

Альтернативною конструкцією СЕ є структура, що складається з шару органічного полімеру (донора), на який нанесено шар прозорого для сонячного світла матеріалу з електронним типом провідності (акцептора). У фотоелектричному шарі під дією сонячного випромінювання генеруються екситони, поділ яких на вільні електрони і дірки, що створюють фотострум, відбувається при досягненні екситонами границі донорного шару і електронного акцептора [1, 2, 15]. Такі СЕ називають екситонними.

Крім органічних СЕ на плоских гетеропереходах, існують (і є більш ефективними) СЕ на об'ємних гетеропереходах і СЕ на металоорганічних перовскітах. Зазвичай до екситонних сонячних елементів відносять структури, в яких екситони існують досить довго і проходять значний шлях до їх дисоціації на два вільних заряди. Скоріш за все, елементи Гретцеля також слід відносити до екситонних СЕ в силу двох причин. По-перше, фотоелектричний ефект в

кристалах призводить до народження екситонів, по-друге, SE Гретцеля, як і інші екситонні SE, є тонкоплівковими.

Розглянемо коротко термофотовольтаїчні (ТФВ) перетворювачі стосовно їх використання в сонячній фотовольтаїці. Принцип дії будь-якого ТФВ-приладу заснований на перетворенні енергії інфрачервоного (ІЧ) випромінювання розігрітого тіла з високою світністю, що має назву теплового емітера, в електричну за допомогою вузькосмугового напівпровідникового фотоелемента. Це перетворення можливо лише за відсутності контакту фотоелемента з тепловим емітером з двох причин. По-перше, високі температури призводять до появи в діоді темного струму, спрямованого протилежно фотоструму. По-друге, генерація фононів (з огляду на фононну теплопровідність напівпровідника) призводить до різкого зниження його спектральної чутливості [14]. Тому конструктивно ТФВ-перетворювач являє собою порожнину (TRV cavity [14]).

Стосовно до сонячної енергетики ТФВ-перетворювач використовуються в двох видах. Перший вид досить добре представлений в науковій літературі, хоча так і не був впроваджений в промисловість. Це низькотемпературний ТФВ-перетворювач, що доповнює тонкий SE діодного типу. Такий SE, що має товщину разом з підкладкою не більше декількох мікрометрів і виконаний з германію (матеріалу, в якому темновий струм діода залишається малим при температурах до 500°C), є верхньою стінкою ТФВ-порожнини. Нижньої стінкою служить ІЧ-фотоелемент, покритий шаруватої діелектричної структурою, що грає роль оптичного фільтра. Фотоелектричний шар виконується зазвичай з антімоніда індію або антімоніду галію – матеріалів, у яких ширина забороненої зони відповідає середній ІЧ-області спектра [14].

При освітленні SE концентрованим сонячним світлом весь об'єм елемента (тобто верхня стінка ТФВ-порожнини) нагрівається до температури близько $400 - 500^{\circ}\text{C}$, достатньої для створення всередині ТФВ-порожнини ІЧ-випромінювання в зазначеному діапазоні. Відповідно до закону Віна, велика частина спектра випромінювання сконцентрована у довгохвильовій (ДВ)

частині середнього ІЧ-діапазону, де фотоелектрична конверсія неможлива (точніше, можлива, але лише у фотодіодах на основі деяких сполук свинцю за умови криогенного охолодження [14]). До фотоелементу з антімоніда індію або галію ця частина спектра не пропускається оптичним фільтром.

Інша частина спектра випромінювання, яке нагрітий СЕ створює в ТФВ-порожнині, лежить вище частоти забороненої зони нижнього елемента. Для цієї області частот оптичний фільтр грає роль просвітлюючого покриття. Оскільки лише невелика частина теплового випромінювання СЕ може конвертуватися в фотострум ІЧ-фотоелемента і оскільки ККД цієї конверсії далекий від 100%, приріст електричної потужності за рахунок додавання ТФВ-системи до верхнього СЕ виявляється невеликим. Основною перевагою такого тандему є радіаційне охолодження СЕ [2, 14].

Окремий напрямок в літературі формують високотемпературні ТФВ-перетворювачі, що працюють за рахунок сонячного випромінювання і мають назву сонячних ТФВ-систем (solar TPV systems) [14]. У таких системах верхню стінку ТФВ-порожнини утворює спеціально розроблений емітер, освітлюваний концентрованим сонячним світлом, а не СЕ. Енергія світла майже повністю витрачається на нагрів емітера, причому досягаються температури понад 1000°C, тому що властивості верхньої сторони емітера, що освітлюється Сонцем, близькі до властивостей чорного тіла у всьому спектральному діапазоні сонячного світла.

Нижню стінку порожнини як і раніше утворює вузькосмуговий ІЧ-фотодіод. Проте, верхня стінка порожнини, тобто нижній бік емітера, робиться спеціальним чином наноструктурованим. Тому вона випускає, крім звичайного – широкосмугового і некогерентного – теплового випромінювання, ще й вузькосмугове теплове випромінювання в ближньому ІЧ-діапазоні. Це виявляється можливим через високу температуру у всьому об'ємі емітера і частотну вибірковість його нижньої (структурованої) поверхні. Така вибірковість досягається шляхом розміщення на цій поверхні або ІЧ-наноантенн, або ІЧ-метаматеріалів [14, 16, 17].

Резонансне теплове випромінювання в ближньому ІЧ-діапазоні конвертується у фотострум з високою ефективністю. Решта широкосмугового теплового випромінювання відбивається оптичним фільтром назад на катод. Оскільки ця частина енергії в ідеальному випадку не пропадає, а служить для підтримки високої температури емітера, такі перетворювачі можуть мати ККД близький до 40% [14] і навіть вище [16]. Проте, найкращий результат, досягнутий на практиці, поки що дорівнює 3,2% [17]. Такий відрив експерименту від теорії пов'язаний, в першу чергу, з тим, що емітер в експерименті [17] є плоским шаром і тому випускає теплове випромінювання зі своєю верхньої сторони, яке нічим не утримується. Це випромінювання призводить до радіаційного охолодження емітера до температури приблизно 1000°C.

В ідеальному випадку теплової емітер повинен виконуватися у вигляді циліндричної оболонки циліндричної ТФВ-порожнини. У свою чергу оболонка повинна бути укладена в циліндричну шарувату структуру, яка називається фотонним термосом [14, 16, 17]. Концентроване сонячне випромінювання буде потрапляти всередину фотонного термоса крізь вузьку щілину. При цьому теплове випромінювання з зовнішнього боку емітера буде на 80-90% замикатися в ньому, і емітер зможе мати температуру близьку до 2000°C [14, 16, 17]. Сонячні ТФВ-системи, так само як і тандеми СЕ з ТФВ-перетворювачем, промисловістю поки не виробляються.

Нарешті, з точки зору використовуваних оптичних систем, всі фотоелектричні перетворювачі можна розділити на прилади, що працюють без концентрації і з концентрацією сонячного випромінювання за допомогою фокусуєчих систем (найчастіше лінз, рідше – параболічних дзеркал [1-3, 12, 13]).

1.2 Основні характеристики сонячних елементів

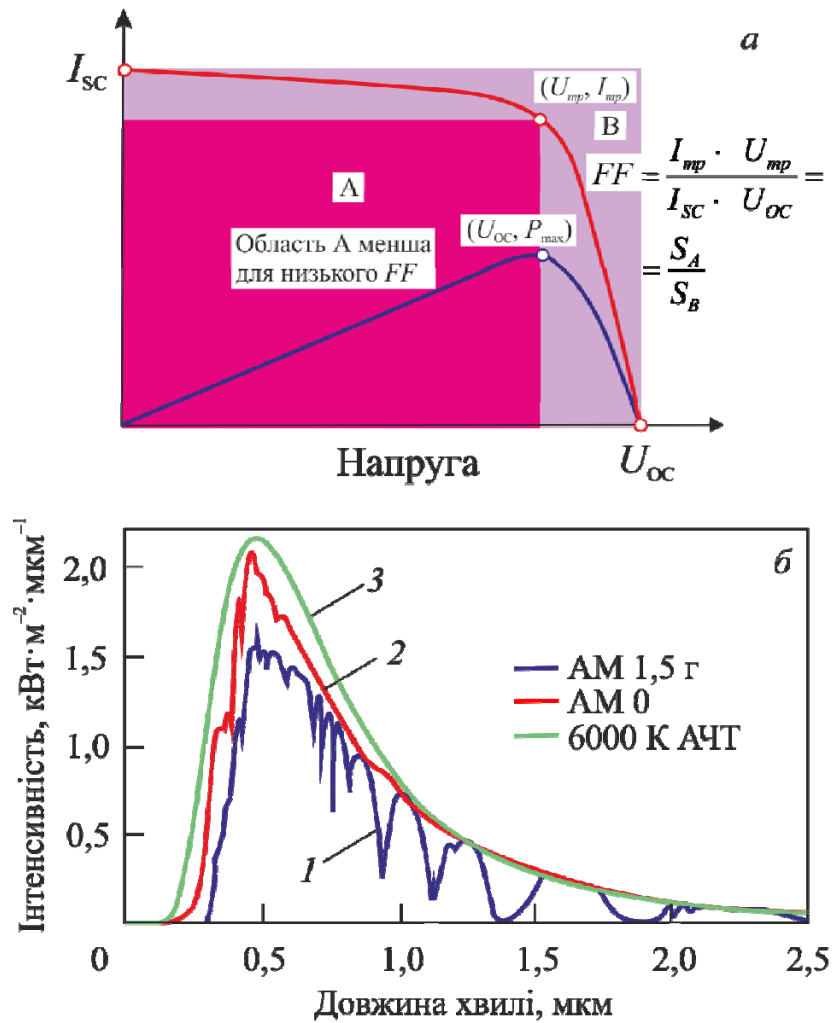
Робота всіх СЕ, незалежно від типу використовуваних матеріалів, характеризується наступними параметрами: напруга холостого ходу V_{oc} (open circuit), струм короткого замикання I_{sc} (short circuit), коефіцієнт заповнення FF (fill factor) і коефіцієнт корисної дії (ККД). Графічна ілюстрація цих параметрів дана на рис. рис. 1.1, *a*. Важливими вихідними даними для розрахунку зазначених параметрів є спектральні характеристики СЕ, що визначають квантовий вихід структур, що входять до нього, і в першу чергу – квантова ефективність [1-3, 12, 13, 15, 18]. Квантова ефективність (КЕ) визначається як відношення числа носіїв заряду, зібраних сонячним елементом, до числа падаючих фотонів цієї енергії (в одиничному інтервалі спектра). КЕ ідеального СЕ не залежить від фотонів з енергією, більшою, ніж ширина забороненої зони, а для фотонів з меншою енергією КЕ дорівнює нулю. На відхилення форми кривої КЕ від ідеальної в короткохвильовій (КХ) і довгохвильовій (ДХ) областях спектра поглинання впливає безліч факторів, що ведуть до втрат корисної енергії (в кремнієвих СЕ, в першу чергу, якість пасивації поверхонь кремнію). У центральній області спектра поглинання визначальними є втрати на відбиття, а також низьке значення довжини дифузії фотоіндукованих носіїв.

Другою найважливішою характеристикою СЕ є спектральна чутливість SR (photovoltaic spectral response), тобто відношення фотоструму, що генерується в фотоелектричному шарі, до потужності поглиненого в ньому випромінювання в одиничному інтервалі частот. Залежність SR від частоти випромінювання про при кімнатній температурі для деяких матеріалів (кристалічний кремній, германій, основні багатоконпонентні напівпровідники) може бути приблизно замінена ідеалізованою залежністю: $SR = 0$ для фотонів з енергією нижче ширини забороненої зони $E_g = h\omega_g$ і $SR = e/h\omega$ для фотонів більш високих енергій (тут e – заряд електрона, h – постійна Планка). Проте,

для багатьох фотоелектричних матеріалів функції $SR(\omega)$ мають інший вигляд і по різному залежать від температури. Квантова ефективність і спектральна чутливість визначають робочий діапазон частот СЕ.

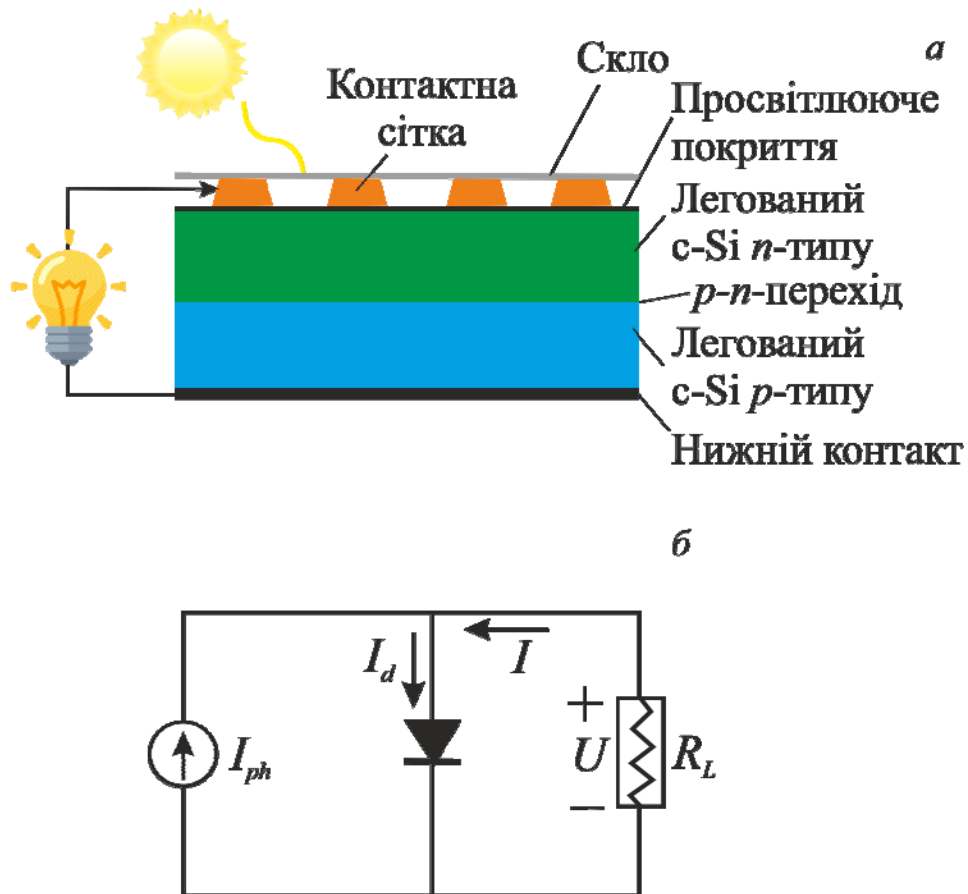
У СЕ діодного типу величина фотоструму визначається числом надлишкових носіїв заряду, створених світлом в результаті фотоефекту і розділюваних $p-n$ - переходом або межею напівпровідникових матеріалів. При цьому електрони виявляються в n - області, а дірки – в p - області. В ідеальному СЕ фотострум I_{ph} є максимальним струмом, що виникає під дією сонячного світла, тобто струм короткого замикання I_{sc} , який створюється, коли освітлений СЕ замкнений у зовнішній ланцюг накоротко. Струм I_{sc} залежить від площі елемента S , числа падаючих фотонів різних енергій (тобто від інтенсивності падаючого випромінювання і його спектра) і від коефіцієнта корисного поглинання СЕ, який також називається оптичною ефективністю. Цей коефіцієнт визначається втратами потужності падаючого світла, тобто втратами на відбиття, а в тонко плівкових СЕ – також втратами на паразитне проходження світла крізь фотоелектричний шар.

Оптична ефективність робиться за можливості близькою до 100%, для чого використовується широкосмугове оптичне просвітлення і спеціальні структури для захоплення світла. При оціночному розрахунку фотоструму, що збирається з одиничної площі СЕ ($J_{ph} = I_{sc}/S$), $SR(\omega)$ помножується на спектральну густину потоку поглиненого випромінювання $P_A(\omega)$ і інтегрується за шириною спектра. $P_A(\omega)$ є добутком спектральної густини потоку падаючого сонячного випромінювання, яку показано на рис. 1.1, б, на коефіцієнт корисного поглинання [1, 2]. Такий спрощений розрахунок дає оптимістичну оцінку поверхневої густини фотоструму I_{ph} в діодному СЕ, яка також залежить від ймовірності поділу носіїв, що визначається, в свою чергу, пасивацією поверхонь діода і часом життя носіїв заряду [1, 10, 12].



- (а) - вольт-амперна і ват-амперна характеристики сонячного елемента
- (б) - спектри сонячного випромінювання біля поверхні Землі (АМ – повітряна маса, АМ 1,5G – на широті 50° (крива 1) і АМ 0 – на навколосемній орбіті (крива 2)); для порівняння показаний спектр абсолютно чорного тіла (АЧТ) з температурою фотосфери Сонця (крива 3)

Рисунок 1.1 – Електричні параметри та спектр сонячного елемента



(а) найпростіший варіант з сітчастим верхнім електродом;

(б) еквівалентна схема СЕ

Рисунок 1.2 – СЕ діодного типу на основі кремнію: струм I в навантаженні R_L складається з темного струму діода I_d і фотоструму I_{ph} .

Струм у зовнішньому ланцюзі фотодіода складається з темного струму діода (струму прямого зміщення) I_d і фотоструму I_{ph} (рис. 1.2, б). При розриві зовнішньої ланцюга поділ носіїв заряду призводить до збільшення кількості електронів в n -області і дірок в p -області, а отже, до появи вторинного електричного поля, протилежного власному полю $p-n$ -переходу. При цьому встановлюється нове положення рівноваги і відбувається збільшення дифузійного струму носіїв до значення I_d , причому повний струм через діод виявляється рівним нулю, а напруга на його розімкнених клеммах дорівнює

напрузі холостого ходу V_{oc} . I_{sc} і V_{oc} є максимальними величинами струму і напруги, які можна отримати від СЕ, причому потужність, що виробляється в обох описаних режимах дорівнює нулю.

Коефіцієнт заповнення FF – параметр, який в поєднанні з фотострумом (струмом короткого замикання) і напругою холостого ходу визначає максимальну потужність на виході СЕ. FF визначається як відношення максимальної потужності СЕ до добутку $I_{sc} V_{oc}$ і дорівнює максимальній площі прямокутника, який можна вписати в область, обмежену вольт-амперною характеристикою СЕ (рис. 1.1, *a*).

ККД визначається як відношення потужності, що виробляється СЕ, до потужності падаючого на нього сонячного випромінювання і є параметром порівняння різних СЕ. ККД можна представити у вигляді добутку інтегральної (за спектром) квантової ефективності на наступні множники: коефіцієнт заповнення, інтегральну оптичну ефективність і, нарешті, так звану граничну ефективність (UCE) (ultimate conversion efficiency) [1, 2, 12, 14]. Відзначимо, що інтегральна оптична ефективність СЕ іноді залежить не тільки від конструкції самого СЕ, а і від оптичної системи, якщо остання може концентрувати світло в СЕ. По-перше, концентрація світла сприяє нагріванню, що в певному інтервалі температур може бути навіть корисним для підвищення напруги холостого ходу без шкоди для фотоструму. По-друге, сфокусоване світло поглинається краще, ніж плоска хвиля [13].

Гранична ефективність UCE при заданому спектрі падаючого випромінювання залежить від спектральної чутливості. Саме UCE і задає так звану межу Шоклі-Квайссера (Shockley-Queisser limit), тобто максимально досяжний ККД. Математично ця межа з'являється внаслідок зменшення SR в високочастотній області сонячного спектра. Якщо фотоелемент на основі напівпровідника, у якого SR близька до ідеальної, освітлюється випромінюванням з частотою ω_g і відносною шириною не більшою за 20%, то UCE такого фотоелемента буде більшою за 80% [14]. Тому для фотоелементів,

що працюють в вузькосмуговому світлі, межа Шоклі -Квайссера не відіграє ролі, тоді як для широкосмугових СЕ UCE виявляється, як уже зазначалося, близькою до 30%.

Можна виділити основні умови ефективної роботи СЕ. По-перше, оптичний коефіцієнт поглинання фотоелектричного шару повинен бути близьким до одиниці, для того щоб забезпечити поглинання за можливістю всієї енергії падаючого випромінювання. По-друге, фотогенеровані носії повинні ефективно збиратися на контактних електродах з обох сторін фотоелектричного шару, що містить $p-n$ - перехід. По-третє, СЕ повинен володіти оптимальною висотою бар'єру в $p-n$ - переході, достатньою для забезпечення високого значення V_{oc} , але не настільки великим, щоб запобігати поглинанню фотонів сонячного спектра. По-четверте, повний опір зовнішньої ланцюга, увімкненого послідовно з сонячним елементом, має відповідати критерію передачі максимальної потужності в навантаження, тобто дорівнювати опору самого СЕ.

1.3 Плазмонна фотовольтаїка

Підвищення ефективності перетворювачів сонячної енергії пов'язане насамперед із уловлюванням якомога більшої кількості електромагнітного випромінювання у широкому спектральному діапазоні [19]. Одним із шляхів досягнення цієї мети є використання металевих наноструктур, у яких можливе виникнення поверхневих електронних збуджень – локалізованих поверхневих плазмонів і плазмон-поляритонів, що поширюються вздовж межі поділу метал-діелектрик. За посередництва таких структур світло можна “стискати” у тонкий шар субмікронної товщини, що, з одного боку, веде до зменшення товщини фотовольтаїчних елементів, а з другого боку – до збільшення поглинання світла. Саме завдяки істотно асиметричній діаграмі розсіяння світла

наночастинками з'являється можливість концентрації світла у певних напрямках [20].

Покращення характеристик фотовольтаїчних елементів за допомогою металевих наночастинок може відбуватися за двома сценаріями [21]. По-перше, наночастинки використовуються для розсіяння падаючого сонячного світла у товщу напівпровідника. Завдяки багатократному розсіянню зростає частка поглинутого напівпровідником світла. По-друге, збуджені у наночастинках локалізовані плазмонні резонанси посередництвом ближнього поля взаємодіють із напівпровідником, збільшуючи ефективний переріз розсіяння. Обидва процеси дозволяють зменшувати фізичну товщину фотовольтаїчного елемента при збереженні його оптичної товщини. Існує певний оптимальний діапазон розмірів металевих частинок, оскільки дуже малі частинки ($< 0,1 \text{ \AA}$) сильно поглинають світло, що призводить до втрат. У той самий час, їх розмір повинен відповідати умовам збудження ЛППР, тобто не має перевищувати довжину хвилі світла.

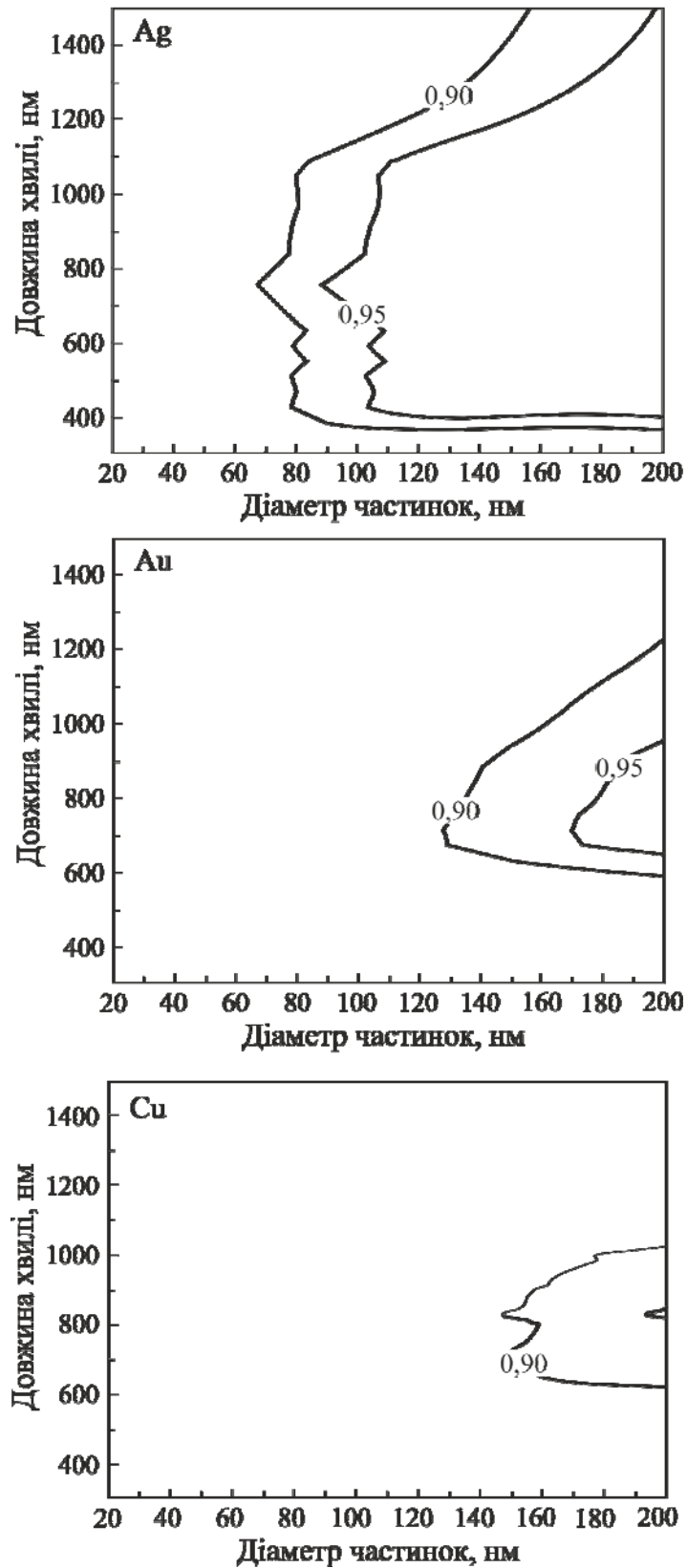


Рисунок 1.3 – Лінії однакового альбедо (оптичної ефективності) на рівні 0,9 та 0,95 наночастинок Ag, Au та Cu в залежності від діаметра наночастинок та довжини хвилі. Розрахунки проводилися за теорією Мі

Порівняльною кількісною характеристикою наночастинок різної природи та розміру як розсіювачів електромагнітної енергії зручно використовувати їх альbedo – відношення енергії електромагнітного поля, що розсіюється наночастинками, до енергії падаючої електромагнітної хвилі. Tanabe запропонував назвати цю величину оптичною радіаційною ефективністю наночастинок; її знаходять із відношення перерізів розсіяння та екстинкції [22]:

$$\eta^{\text{rad}} = \frac{C_{\text{sca}}}{C_{\text{ext}}} = \frac{C_{\text{sca}}}{C_{\text{abs}} + C_{\text{sca}}} \quad (1.1)$$

Для обчислення альbedo наночастинок ряду металів при фіксованих довжинах хвиль ним було використано квазістатичне наближення. Одразу зазначимо, що квазістатичне наближення дає істотно занижені результати. Наприклад, згідно з розрахунками Tanabe, альbedo сферичних наночастинок срібла діаметром понад 150 нм у видимій області спектра перевищує 90%. Із врахуванням ефектів запізнення за теорією Мі відповідний діаметр становить 90 нм [23]. Для більшої наочності спектральні значення альbedo наночастинок різного розміру зручно подати як діаграму у координатах діаметр наночастинок - спектральний діапазон (рис. 1.3). На діаграмі показано лінії однакових значень альbedo наночастинок срібла, золота та міді на рівні 90% та 95%. Як бачимо, альbedo наночастинок має тенденцію до зростання при збільшенні діаметра частинок. Це відбувається внаслідок збільшення поляризованості великих частинок, а також того, що переріз розсіяння пропорційний R^6 , коли переріз поглинання змінюється пропорційно R^3 .

Крім того, у роботах [24-29] було теоретично розраховано, а в деяких випадках і експериментально спостережено такі нові способи збільшення ефективності сонячних елементів з використанням принципів плазмоніки:

– збільшення пропускання світла у фотоактивну область напівпровідника завдяки тонкій провідній (металевій) плівці з

антикорельованим рельєфом, коли реалізується перенос енергії поверхневими плазмонними поляритонами;

– збільшення пропускання світла в напівпровідник і темпу генерації нерівноважних електронно-діркових пар у ньому завдяки розсіянню світла в далекій зоні і збудженню ближнього електричного поля біля металевих частинок на фронтальній або задній поверхні сонячного елемента;

– збільшення поглинання в напівпровідниковій базі завдяки захопленню (trapping) світла і генерації пар в ближньому полі періодичної системи металевих нанодротів на фронтальній поверхні сонячного елемента. Ефект може досягати 40-60% у випадку нанодротів Au на поверхні GaAs сонячного елемента з бар'єром Шотткі.

Фізичною причиною цих позитивних ефектів є розширення спектральної області фоточутливості і зниження швидкості поверхневої рекомбінації при заміні суцільного провідного покриття на періодичну систему нанодротів (контактна сітка). Результати перевірки зазначених вище теоретичних передбачень частково перевірялися експериментально на Au/GaAs сонячних елементах.

Перспективність використання наночастинок металів (срібла) у фотовольтаїці успішно продемонстрована у роботі [30]. Експериментально порівнювалися три типи тонкоплівкових α -Si:H сонячних елементів: із пласким заднім текстурованим рефлексором, та з рефлексором, вкритим наночастинками срібла. Останній виявив безперечні переваги як у порівняній простоті виготовлення, так і у характеристиках. Частка дифузного відбивання таким рефлексором становить 80% від загального відбивання у діапазоні 520-1100 нм, а струм короткого замикання елемента – 15,1 мА/см² (14,8 мА/см² для текстурованого).

У роботі [31] детально вивчено вплив морфології наночастинок срібла на оптичні характеристики заднього рефлексора. Наночастинки отримувалися шляхом відпалу тонких плівок срібла. Внаслідок поганого змочування поверхні плівки срібла збігалися (dewetting), утворюючи наночастинки різного розміру

та форми. Авторами побудовано структурну фазову діаграму острівцевих плівок срібла залежно від початкової товщини плівки та умов відпалу. Виявлено, що основним чинником впливу структури острівцевої плівки на її оптичні властивості є середній розмір наночастинок, обчислений із коефіцієнта заповнення поверхні. Отриманим у такий спосіб наночастинкам властиве підвищене власне поглинання у всій видимій області спектра, яке автори пояснюють полікристалічною будовою наночастинок. Для інтерпретації експериментальних результатів роботи використовувалася теорія Мі. Зростання поглинання у довгохвильовій області пов'язане, у першу чергу, із формою наночастинок – сплюснутих еліпсоїдів – для яких теорія Мі непридатна. Експериментально встановлено, що найефективнішими розсіювачами світла є Ag наночастинки розміром понад 100 нм, а починаючи від 160 нм ефективність розсіювання виходить на насичення [31]. Зростання квантової ефективності мікрокристалічних сонячних елементів $\mu\text{Si:H}$ з вкритим наночастинками срібла заднім рефлектором також продемонстровано у роботі [32]. Покриття шару наночастинок прозорим провідним оксидним шаром (ZnO) веде до зменшення оптичних втрат.

Hagglund зі співавторами показали, що нанесення еліптичних нанодисків Au на Si $p-n$ - перехід призводить як до збільшення, так і до деякого зменшення фотоструму на довжинах хвиль поблизу ЛППР [33]. На довжинах хвиль, що відповідають резонансу, розсіювання назад та сильне поглинання наночастинками призводить до втрат, а отже, до зменшення фотоструму. Навпаки, поза резонансом фотострум зростає. Експериментальні результати та розрахунки методом скінчених елементів показали, що такі зміни фотоструму є проявом радше ЛППР у далекому полі, ніж ближньопольових ефектів.

Збільшення густини струму короткого замикання та підвищення ефективності перетворення енергії досягнуто і для сонячних елементів з аморфного кремнію із фронтальним покриттям наночастинками Au діаметром 100 нм [34]. Внаслідок сильного розсіювання світла наночастинками вперед

збільшилася кількість захопленого елементом світла, що зумовило зростання струму короткого замикання на 8,1% та ефективності перетворення енергії на 8,3%. Поверхнева концентрація наночастинок Au становила : $3,7 \cdot 10^8 \text{ см}^{-2}$, тобто наночастинки розташовувалися достатньо далеко одна від одної, щоб їх можна було вважати ізольованими. Це підтверджено зображеннями, отриманими за допомогою електронного мікроскопа [34]. Виникнення міжчастинкових взаємодій у щільноспакваному шарі наночастинок може призвести до значних змін індикатриси розсіяння. Для вивчення наслідків міжчастинкових взаємодій авторами [34] було застосовано теоретичне моделювання сонячного елемента із щільним покриттям наночастинками методом скінчених елементів. Показано, що існує оптимальне значення поверхневої концентрації наночастинок Au : $2,9 \cdot 10^9 \text{ см}^{-2}$, при якій струм короткого замикання та ефективність перетворення енергії зростає утричі порівняно із експериментальними даними. Зростання фотоструму у 1,7 раз теоретично передбачено для тандемних сонячних елементів на основі аморфного та мікрокристалічного кремнію $\alpha\text{-Si}/\mu\text{cSi}$, вкритих наночастинками срібла [35].

Використання наночастинок срібла на фронтальній поверхні тонкоплівкових та пластинчастих (wafer-based) Si фотоелектричних елементів збільшує кількість поглинутого елементом світла [35]. Наприклад, для пластинчастих елементів із наночастинками спостерігався 7-кратне зростання поглинання на краю забороненої зони кремнію при $\lambda = 1200 \text{ нм}$. Слабке поглинання світла поблизу непрямой забороненої зони кремнію є вагомим недоліком цього елемента, тому збільшення поглинання за допомогою наночастинок благородних металів видається дуже перспективним. Для тонкоплівкових сонячних елементів товщиною 1,25 мкм при $\lambda = 1050 \text{ нм}$ поглинання світла збільшилося у 16 разів порівняно із аналогічним елементом без наночастинок [36].

Завдяки своїй поширеності у природі, технологічності та відсутності токсичних властивостей, кремній досі є основним матеріалом для виготовлення сонячних елементів. Проте непрямі заборонена зона кремнію накладає істотні обмеження на його використання у фотовольтаїці. Поглинання фотонів у Si з енергіями приблизно рівними ширині забороненої зони може відбуватися лише за участю фононів. Оскільки таке поглинання дуже слабе, то необхідно збільшувати товщину сонячного елемента. Це одразу призводить до ускладнення та подорожчання технології виготовлення фотоелектричних елементів. Ефективність перетворення світлової енергії падає також внаслідок зростання швидкості рекомбінації електронно-діркових пар у товщі напівпровідника. Розглянуті вище механізми впливу наночастинок на характеристики фотоелектричних елементів визначаються здатністю попередніх до розсіяння значної частки випромінювання, що на них падає та збільшенням перерізу поглинання за рахунок ближньопольових ефектів. Проте окрім вказаних ефектів, існує ще один, який лишився дещо осторонь уваги. Йдеться про можливість генерації електронно-діркових пар без участі фононів, а шляхом передачі імпульсу електромагнітної хвилі напівпровіднику через збудження ЛППР у металевих наночастинках. Електродинамічні розрахунки, проведені у роботі [37], вказують не тільки на можливість існування такого механізму, а й дозволяють зробити деякі кількісні висновки. Зокрема знайдено, що поглинання світла кремнієм за участю ЛППР у металевих наночастинках прямо пропорційне величині $(\hbar\omega - E_g)^2$. Така ж залежність характерна і для непрямих електрон-фононних переходів, але на відміну від них поглинання за участю ЛППР не залежить від температури. На думку авторів [37], існування описаного методу генерації електронно-діркових пар є вагомим аргументом на користь розташування наночастинок благородних металів у об'ємі напівпровідника, а не на задній чи передній поверхні.

Гетероперехідні кремнієві $(n)\alpha - \text{Si} / (p)c - \text{Si}$ сонячні елементи володіють значно покращеними характеристиками порівняно із традиційними

Si $p-n$ - комірками. Тим часом, Losurdo та ін. продемонстрували подальше підвищення ефективності гетероперехідних фотоелектричних елементів за допомогою наночастинок золота [38]. Наночастинки золота наносилися безпосередньо на поверхню $\alpha-Si$ n -типу провідності методом магнетронного напилення. Середній діаметр наночастинок становив 20 нм. При поверхневій концентрації наночастинок $: 1,3 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ підвищення струму короткого замикання елемента наночастинка $Au / (n)\alpha-Si / (p)c-Si$ становило 20%, вихідної потужності – 25%, а фактора заповнення – 3% порівняно із елементом без наночастинок. Значення поверхневої концентрації наночастинок майже у 50 разів перевищує знайдене теоретично (див. [34]). Така відмінність може бути наслідком істотної різниці у розмірах наночастинок – 20 нм у роботі [38] проти 100 нм у [34].

Підвищення ефективності фотоелектричних елементів на основі GaAs за допомогою наночастинок срібла продемонстровано у роботі [39]. Періодичний масив наночастинок утворювався на поверхні елемента шляхом напилення крізь маску із анодного оксиду алюмінію. Така методика дозволяє отримувати масиви наночастинок із добре контрольованими розмірами наночастинок та відстанню між ними. Наночастинки являли собою конусоподібні стовпчики середнього діаметра 110 нм. Виготовлялися чотири типи зразків: із наночастинками висотою 55 та 220 нм та поверхневою концентрацією $1,8 \cdot 10^9$ та $3,3 \cdot 10^9 \text{ см}^{-2}$. Збільшення густини струму короткого замикання на 8% спостерігалось для фотоелектричних елементів, вкритих “високими” наночастинками із більшою поверхневою концентрацією.

Намагання знайти дешевші замітники кремнію привели до появи гібридних сонячних елементів, у яких органічні речовини (спряжені полімери) поглинають світло та стають донорами електронів, транспортуючи при цьому дірки. Неорганічні напівпровідники використовуються як електронні акцептори. іншою перевагою гібридних сонячних елементів є їх гнучкість. Проте низька, порівняно із традиційними сонячними елементами, ефективність

перетворення енергії змушує шукати шляхи до її підвищення. Наночастинки благородних металів видаються перспективними у цьому напрямку. Перш за все завдяки збудженню ЛППР у наночастинках збільшується частка поглинутого світла, що йде на перетворення у електричну енергію. Наприклад, використання наночастинок срібла розміром 2-4 нм у гетероперехідному фотовольтаїчному елементі на основі полі(3-гексилтіофену) (РЗНТ) та (6, 6)-феніл С61 метилового ефіру бутанової кислоти (РСВМ) дозволило майже вдвічі (до 2,2%) збільшити ефективність перетворення сонячної енергії в електричну [40]. Схожий елемент із : 13 нм Ag наночастинками демонструє ефективність у 3,69% [41].

У роботі [42] масив наночастинок срібла виготовляли методом наносферної літографії. Значна частина смуги поглинання РЗНТ:РСВМ перекривається зі смугою ЛППР наночастинок. Отримано такі параметри сонячного елемента: густина струму короткого замикання $J_{sc} = 7,56 \text{ mA/cm}^2$, напруга розімкненого кола $V_{oc} = 0,56 \text{ В}$, коефіцієнт заповнення 0,57 при ККД 2,42%. Дещо більших значень вказаних параметрів досягнуто на гібридному елементі із використанням нанодротин Si, вкритих наночастинками Ag діаметром 19, 23 та 26 нм [43]. Густина струму короткого замикання таких елементів становить $16,6 \text{ mA/cm}^2$, $\eta = 2,47\%$. Загальне підвищення ефективності елемента за рахунок Ag наночастинок становить 30%.

Кіт та Carroll відзначають, що основним механізмом підвищення ККД гібридних фотовольтаїчних елементів із металевими наночастинками є краща провідність елемента за рахунок “домішкових” енергетичних рівнів, пов’язаних із наночастинками та розташованих у забороненій зоні між найвищою зайнятою (НОМО) та найнижчою незайнятою (LUMO) молекулярними орбіталями полі(3-октилтіофену) (РЗОТ) [44]. На думку авторів, внесок розсіяння світла наночастинками у підвищення ефективності є незначним. Це можна легко пояснити малим розміром наночастинок, що використовуються – : 6 нм для срібла та : 5 нм для золота – для яких, як відомо, поглинання світла

домінує над розсіянням. Загалом, кращі результати отримані для наночастинок Ag [44].

Дещо іншу роль наночастинок золота у гібридних сонячних елементах показано у роботі [45]. Наночастинки золота використано як буферний шар для збирання дірок замість широко вживаного провідного полімеру PEDOT:PSS. Останній, як виявилось, досить чутливий до вологи та УФ випромінювання, що значно понижує роботу виходу матеріалу. Шар наночастинок володіє меншим електричним опором, вищим значенням роботи виходу та меншою шорсткістю поверхні порівняно із шаром PEDOT:PSS.

1.4 Світлоуловлюючі структури поза межею Яблоновича

1.4.1 Межа Яблоновича

Здатність текстурованих поверхонь перенаправляти падаюче світло в суцільний шар матеріалу обмежена мінімальною товщиною останнього. Ця товщина повинна бути не дуже мала в порівнянні з висотою зубців (або будь-яких інших нерівностей) і бути порядку або більшою за довжину хвилі світла в середовищі. Це фундаментальне обмеження було отримано групою Яблоновича в 1982-1984 рр. [46-48] і діє не тільки для текстур, похило заломлюючих або відбиваючих світлові промені в рамках геометричної оптики, але і для дифракційних ґраток, і взагалі для будь-яких структур, для яких справедливе наближення хвильової оптики. Іншими словами, воно справедливе для всіх структур, в яких світлові хвилі залишаються хвильовими пучками, тобто не відбувається генерації еванесцентних хвиль [49].

Іноді межею Яблоновича називають граничний виграш у поглинанні плоскої хвилі світла даної частоти, що падає на шар середовища з показником заломлення n і коефіцієнтом загасання k (причому $k = n$), який можуть забезпечити будь-які пасивні періодичні структури, що знаходяться як

всередині шару, так і поза ним, і не створюють еванесцентні хвиль. Цей виграш досягається перерозподілом світлового потоку і при достатній товщині шару для нормально падаючої хвилі він дорівнює $4n^2$ [46].

Для більшості фотоелектричних матеріалів граничний виграш Яблоновича означає можливість збільшення корисного поглинання сонячного світла за рахунок деякої періодичної структури мінімум в 20 разів (для аморфного кремнію приблизно в 50 разів). Двадцятикратного виграшу може бути недостатньо хіба що для органічних СЕ з плоским гетеропереходом, у яких фотоелектричний шар настільки тонкий, що поглинає менше 5% падаючого світла. Проте, навіть наблизитися до такого виграшу, тобто ефективно задіяти механізм перерозподілу енергії світлового потоку, можна тільки в шарі з товщиною, близькою до довжини хвилі в матеріалі [47]. Ця умова не виконується для багатьох екситонних СЕ, а відтак їхня оптична ефективність дуже мала. Нарешті, якщо товщина текстурованої або структурованої частини фотоелектричного шару істотно перевищує товщину його суцільної частини, то світловий потік перерозподіляється в основному в текстурованій (структурованій) частині. В цьому випадку корисного захоплення світла не відбувається через наявність в цій області електродів, матеріал яких володіє в тій чи іншій мірі оптичним поглинанням.

В результаті корисне поглинання світла в текстурованому СЕ з виступами або заглибленнями, більшими, ніж товщина суцільної частини фотоелектричного шару, не наближається до межі $4n^2$ [48]. Оскільки для застосування періодичних текстур або дифракційних ґраток характерний розмір виступу або поглиблення повинен бути не меншим ніж 1 мкм, то для всіх тонкоплівкових СЕ тонших за 1 мкм результати досліджень Яблоновича означають безглуздість такого текстурування або структурування [47-51].

Серед тонкоплівкових СЕ субмікрометрової товщини можна виділити діодні СЕ на основі багатокомпонентних напівпровідників типу CdTe, багатоперехідних СЕ субмікрометрової товщини і СЕ на основі перовскітів.

Всі ці СЕ, хоча і мають оптимальну товщину фотоелектричного шару меншу за 1 мкм, але, як уже вказувалося, не потребують пристроїв для захоплення світла. Всі інші екситонні СЕ, а також СЕ на основі аморфного кремнію мають таку оптимальну (з точки зору квантової ефективності і коефіцієнта заповнення) товщину фотоелектричного шару, яка є недостатньою для поглинання світла за один прохід, а в ряді випадків – і за два проходи. Ці СЕ потребують світлоуловлюючі структури, які працюють поза межі Яблоновича.

1.4.2 Захоплення світла за рахунок плазмонних резонансів

Таким чином, для захоплення світла поза межею Яблоновича треба сконцентрувати світло в області суттєво меншого розміру, ніж $1,22\lambda_m/NA$, створивши в такій області еванесцентні хвилі. Така область в нанооптиці називається гарячею плямою (hot spot). Перетворення просторово-однорідного поля плоскої хвилі, що падає на поверхню СЕ, в систему гарячих плям [52], як правило, здійснюється за рахунок так званих плазмонних резонансів [53, 54].

Плазмонні резонанси в оптиці пов'язані з наявністю колективних коливань електронного газу металів. Колективні ефекти електронної плазми у таких металів, як, наприклад, срібло або золото, в області частот сонячного спектра істотно переважають над ефектами провідності. Тому їх комплексна діелектрична проникність ϵ близька до негативного дійсного числа (уявна частина ϵ мала). Це властивість призводить до резонансного збудження сонячним світлом як металевих наночастинок самих різних форм, так і нанорозмірних нерівностей або отворів на металевій поверхні. Для плазмонного резонансу періодичної структури важливо, щоб розмір неоднорідності був не дуже великий (інакше страждає синхронізм колективного коливання) і не занадто малий (інакше істотним стає розсіювання електронів на поверхні) [54]. Практично розміри включень або неоднорідностей

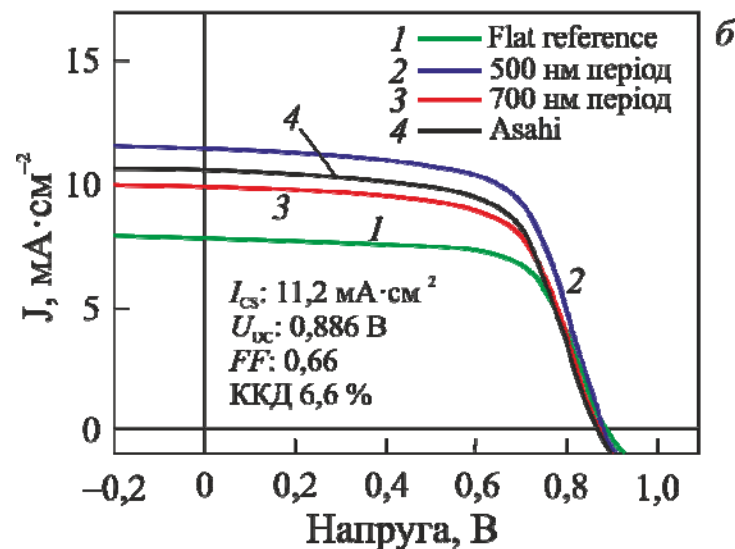
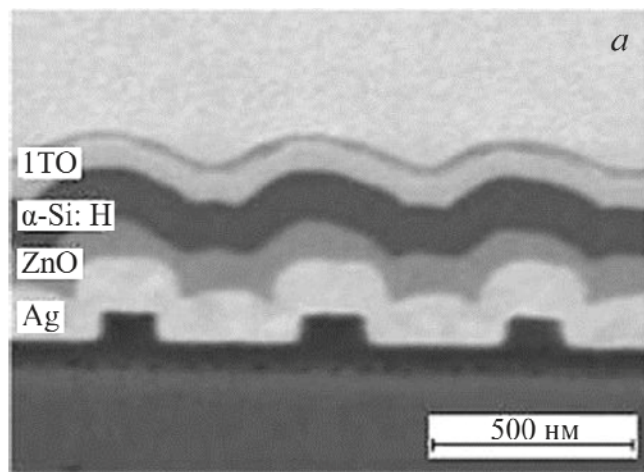
в золотій або срібній структурах, які відповідають плазмонним резонансам в видимій області, лежать в межах від 10 нм до 1 - 2 мкм.

Плазмонний резонанс у періодичних структурах з золота або срібла може бути колективним. Збудження плазмонів дифракційної ґратки плоскою хвилею на частоті колективного плазмонного резонансу призводить до відомої в теорії дифракції аномалії Вуда [55]. Цей ефект полягає в тому, що генерація дифракційних максимумів і навіть відбиття від дифракційної ґратки з періодом більшим за довжину хвилі не відбувається, зате в ній збуджуються власні коливання, в які і перекачується енергія падаючої хвилі. Ці власні хвилі не є витікаючими, тому що відповідають найвищим гармонікам Флоке дифракційної ґратки. Така хвиля називається поверхневим плазмон-поляритоном (ППП). За своїми властивостями вона аналогічна поверхневій хвилі на плоскій границі плазми або суцільного плазмонного металу з вільним простором.

Внаслідок того, що гармонік Флоке нескінченно багато, то при збудженні плоскою хвилею в плазмонній ґратці виникає не одна така мода, а хвильовий пакет ППП. Поширюючись уздовж ґратки, розташованій на непоглинаючих підкладках, всі гармоніки цього хвильового пакета швидко загасають внаслідок дисипації в елементах ґратки. При розміщенні плазмонної дифракційної ґратки на межі фотоелектричного шару падаюча плоска хвиля, що має частоту, відповідну аномалії Вуда, збуджує хвильовий пакет ППП (наявність поглинаючого шару тільки зміщує частоту, але не гасить сам ефект), причому деякі гармоніки хвильового пакета ППП знаходяться у фазовому синхронізмі з хвилеводними модами фотоелектричного шару. В цьому випадку дисипація світла в елементах плазмонної ґратки в значній мірі заміщається корисним поглинанням в шарі. На практиці за допомогою цього механізму вдається захопити світло в шарах аморфного кремнію товщиною 240 - 400 нм [56-58].

Захоплення світла відбувається в декількох частотних діапазонах, сумарна ширина яких досить мала в порівнянні з шириною сонячного спектра. За межами цих частотних смуг ґратка металевих елементів відбиває сонячне

світло. Тому загальний ефект від її присутності на верхній межі SE виявляється шкідливим. Для того щоб забезпечувати більш ефективне захоплення світла і не збільшувати втрати на відбиття, плазмонна ґратка повинна розташовуватися на нижній межі шару аморфного кремнію. Зазвичай її реалізують як ґратку нанорозмірних виступів на поверхні нижнього електрода, що виконується з золота або срібла, як це показано на рис. 1.4, *a*. Для кращого омичного контакту з кремнієм використаний шар оксиду цинку. Внаслідок того, що показник заломлення оксиду цинку в видимому діапазоні близький до 2, то довжина хвилі в цьому середовищі зменшується вдвічі. Через це період ґратки, який дорівнює 500 нм, виявляється достатнім для збудження в ній трьох і навіть чотирьох (в залежності від кута падіння) аномалій Вуда на частотах сонячного світла [58].



(а) - вертикальний переріз структури, отриманий за допомогою скануючого електронного мікроскопа

(б) - вольт-амперна характеристика СЕ (синя лінія 2); для порівняння наведено вольт-амперні характеристики аналогічного СЕ з неоптимальним періодом 700 нм (3), СЕ з плоским нижнім електродом без просвітлюючого покриття (flat reference 1) і такого ж СЕ з покриттям (Asahi U glass 4)

Рисунок 1.4 – СЕ на основі аморфного кремнію з загальною товщиною $p-i-n$ - структури 220 нм і срібним електродом, текстурованим нанодисками діаметром 150-160 нм заввишки 70-80 нм, на поверхні якої збуджується ППП

Ефект аномалії Вуда, як і будь-який плазмонний резонанс, передбачає виникнення пакета еванесцентних хвиль, причому в даному випадку гаряча пляма розмивається за товщиною фотоелектричного шару, накриваючи також і самі металеві виступи. Через це виникає паразитне поглинання. Відповідно вигреш від використання такої текстури нижнього електрода не дуже великий. Відповідно до рис. 1.4,б, фотострум для текстури з періодом 700 нм виявляється приблизно на 45% більшим, ніж в аналогічному плоскому СЕ без просвітлюючого покриття (flat reference), але програє СЕ з текстурованим ПП (Asahi). При оптимальному періоді текстури (500 нм) фотострум перевищує величину, отриману для СЕ з покриттям, приблизно на 10%. Цей вигреш, вочевидь, не такий великий, щоб виправдати виготовлення таких складних СЕ. Справа в тому, що для збудження ППП важливою є регулярність структури, а тому вимоги до розкиду геометричних параметрів текстури не допускають використання відносно дешевих хімічних нанотехнологій для виготовлення текстури. Внаслідок того, що технологія нанодруку в цьому випадку також не застосовується, виготовлення таких СЕ видається дуже дорогим, тому відомості про промислове впровадження світлоуловлюючих структур такого роду відсутні.

В роботі [59] для захоплення світла в тонкоплівкових СЕ на аморфному кремнії було запропоновано використовувати індивідуальний резонанс плазмонних наночастинок. Відповідне плазмове коливання називається локалізованим поверхневим плазмоном [53]. На частотах цього коливання окрема наночастинка плазмонного металу створює гарячу пляму з ефективним розміром від кількох десятків нанометрів до 100 нм, максимуми інтенсивності якого розташовані на поверхні частинки. У цих максимумах напруженість локального електричного поля може перевищувати напруженість падаючої хвилі в 10-20 (частинка золота) або навіть в 40 – 50 разів (частинка срібла). Якщо така частинка знаходиться в однорідному середовищі, то величезне локальне електричне поле всередині частинки призводить до ефекту резонансного поглинання в металі.

У підсумку за допомогою масивів наночастинок срібла або золота, розташованих поблизу поверхні фотоелектричного шару СЕ, вдається збільшити корисне поглинання. Для цього механізму захоплення світла регулярність масиву не потрібна. Розкид у розмірах наночастинок навіть корисний, тому що дозволяє розширити сумарну смугу плазмонних резонансів. Можливість реалізації цієї ідеї за допомогою дешевого хімічного методу самоорганізації [59] (з подальшим відпалом при 400 ° С) призвела до того, що ідея локального захоплення світла окремими наночастинками вилася в цілий напрям [60-63].

2 ВЛАСТИВОСТІ ПЛАЗМОННИХ НАНОЧАСТИНОК, ЩО ВИКОРИСТОВУЮТЬСЯ В ЯКОСТІ ПРИГНІЧУВАЧІВ РОЗСІЯННЯ У ФОТОВОЛЬТАЇЦІ

2.1 Оптична ефективність плазмонної наночастинки

Оптична ефективність є важливою складовою коефіцієнта корисної дії сонячного елемента. Стівідсоткова оптична ефективність визначає той факт, що все падаюче на сонячний елемент випромінювання поглинається його фотоелектричним шаром. Для того щоб наблизитися до цієї мети, необхідно уникати втрат енергії на розсіяння світла. Проте, всі фотоелектричні матеріали мають великий показник заломлення (особливо у видимій частині спектра електромагнітних хвиль), а, отже, є розсіювачами. Тому важливим є питання пригнічення розсіяння, одним із шляхів вирішення якого є занурення в напівпровідникову матрицю металевих наночастинок, що поглинають світло внаслідок плазмонних явищ.

Оптичну ефективність металеві плазмонної наночастинки можна визначити так

$$\xi^{\text{rad}} = \frac{C_{\text{abs}}}{C_{\text{abs}} + C_{\text{sca}}}, \quad (2.1)$$

де перерізи поглинання C_{abs} і розсіювання C_{sca} визначають поляризованістю частинки

$$C_{\text{abs}} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\Gamma_m} \text{Im} \alpha; \quad (2.2)$$

$$C_{\text{sca}} = \frac{\omega^4}{6\pi c^4} \Gamma_m^2 |\alpha|^2. \quad (2.3)$$

Тут α – поляризованість металевої наночастинки; ω – частота падаючої електромагнітної хвилі; c – швидкість світла; τ_m – діелектрична проникність оточуючого середовища.

Отже, для визначення оптично ефективності наночастинки потрібно знати її поляризованість, яка в значній мірі залежить від морфології частинки. Тому перейдемо до питання про одержання частотних залежностей поляризованості біметалевої та металевої оболонки наночастинки.

2.2 Поляризованість сферичної біметалевої наночастинки

Розглянемо тепер біметалеву сферу загальним радіусом R , що знаходиться у діелектричній матриці з постійною τ_m . Ядро радіусом R_c вкрито оболонкою товщиною t , $R_c + t = R$ (рис. 2.1). Дипольна поляризованість $\alpha_{@}$ такої частинки може бути записана у вигляді

$$\alpha_{@} = R^3 \frac{\tau_s \epsilon_a - \tau_m \tau_b}{\tau_s \tau_a + 2\tau_m \tau_b}, \quad (2.4)$$

де діелектричні функції ядра й оболонки

$$\tau_c = \tau_c^I + i\tau_c^{II};$$

$$\tau_s = \tau_s^I + i\tau_s^{II};$$

$$\tau_a = (1 + 2\beta_c)\tau_c + 2(1 - \beta_c)\tau_s; \quad (2.5)$$

$$\tau_b = (1 - \beta_c)\tau_c + (2 + \beta_c)\tau_s, \quad (2.6)$$

$$a \beta_c = (R_c / R)^3.$$

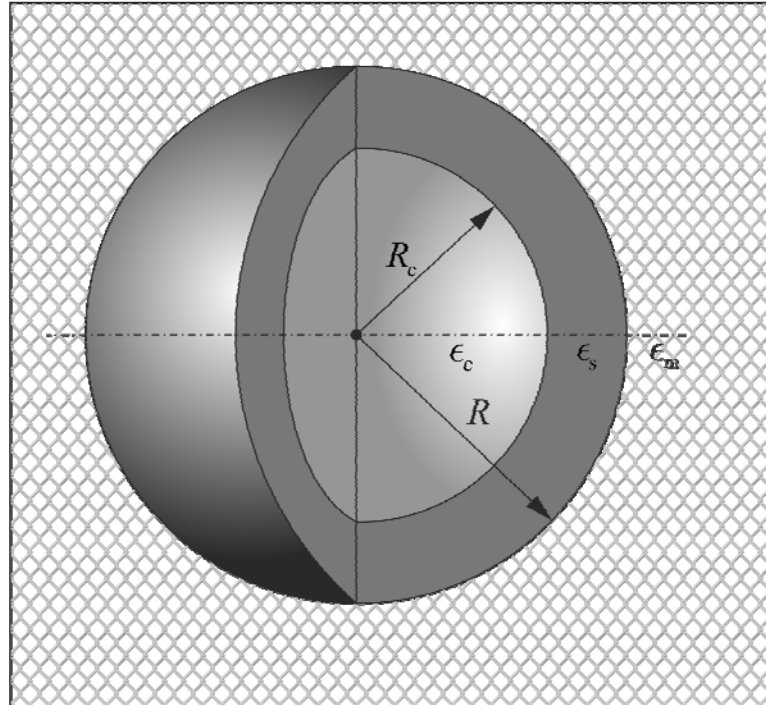


Рисунок 2.1 – Біметалева наночастинка у діелектричному середовищі

Якщо R_c або t дорівнюють нулю ($\beta_c = 0$ або 1), то біметалева частинка стає монометалевою ($\tau_c = \tau_s \equiv \tau$). Проте формула (2.4) виводиться в припущенні ненульової товщини оболонки ($\beta_c < 1$), тобто з урахуванням умов на межі поділу оболонки і діелектрика матриці. Використовувати рівність $\beta_c = 1$ потрібно з обережністю, оскільки це може привести до нефізичних результатів при описі плазмонного резонансу.

Дійсна та уявна частини діелектричної функції металів ядра й оболонки визначаються модифікованими виразами теорії Друде – Лоренца – Зоммерфельда:

$$\tau_1^{c(s)} = \tau_{c(s)}^\infty - \frac{\omega_{p,c(s)}^2 \left(\tau_{c(s)}^{\text{eff}} \right)^2}{1 + \omega^2 \left(\tau_{c(s)}^{\text{eff}} \right)^2}; \quad (2.7)$$

$$\tau_2 = \frac{\omega_{p,c(s)}^2 \tau_{c(s)}^{\text{eff}}}{\omega \left(1 + \omega^2 \left(\tau_{c(s)}^{\text{eff}} \right)^2 \right)}. \quad (2.8)$$

Плазмонні збудження можуть затухати безвипромінювально, передаючи енергію гратці, або випромінювально. Починаючи з великих частинок, при зменшенні їх розмірів, крім розсіяння електронів на фонах, домішках та інших дефектах, необхідно враховувати радіаційне випромінювання електронів, а у випадку, коли характерні розміри стають менше за довжину вільного пробігу електронів в об'ємі, необхідно враховувати також розсіяння на поверхні частинки.

Для монометалевиих сфер ефективний час релаксації τ^{eff} визначається виразом

$$\frac{1}{\tau^{\text{eff}}} = \frac{1}{\tau^{\text{bulk}}} + \frac{1}{\tau^{\text{surf}}} + \frac{1}{\tau^{\text{rad}}}, \quad (2.9)$$

де τ^{bulk} – час релаксації в об'ємі 3D-металу.

Другий доданок у виразі (2.9), зумовлений розсіянням електронів на поверхні, в літературі прийнято записувати у вигляді [64]:

$$\frac{1}{\tau^{\text{surf}}} = \frac{v_F}{\langle l \rangle_R} \equiv \mathcal{A} \frac{v_F}{R}, \quad (2.10)$$

де $\langle l \rangle_R$ – середня довжина вільного пробігу,

$$v_F = \frac{\hbar}{m^*} (3\pi^2 n_e)^{1/3}, \quad (2.11)$$

– швидкість фермівських електронів.

Коефіцієнт \mathcal{A} в (2.10) – ефективний параметр, описує ступінь втрати при розсіянні електрона на поверхні частинки. Так, для класичного (дифузного) режиму розсіяння $\mathcal{A} = 1$ [64], а для ізотропного – $\mathcal{A} = 3/4$. В загальному випадку параметр \mathcal{A} може бути функцією частоти падаючого світла і латерального розміру системи [65, 66].

Останній із враховуваних факторів уширення плазмонних ліній в (2.9) це радіаційний внесок, зумовлений випромінюванням прискорених внутрішнім електричним полем електронів в усіх напрямках [67],

$$\frac{1}{\tau^{\text{rad}}} = \frac{2}{9} \frac{e^2 N \omega}{m^* c^3 T_0 \sqrt{T_m}} \text{Re} \sigma(\omega), \quad (2.12)$$

де N – повне число електронів провідності, $\text{Re} \sigma(\omega)$ – дійсна частина провідності металу.

Умовою рівноправного врахування τ^{surf} і τ^{rad} для монометалевих частинок є нерівність $l^{\text{bulk}} > 2R$ для довжини вільного пробігу електронів в об'ємі (l^{bulk} оцінюється як $l^{\text{bulk}} = v_F \tau^{\text{bulk}}$). При виконанні умови $l^{\text{bulk}} < 2R$ роль радіаційного загасання стає домінуючою [67].

У випадку біметалевих частинок аналогічні нерівності

$$l_c^{\text{bulk}} > 2R_c, \quad l_s^{\text{bulk}} > 2t, \quad (2.13)$$

$$l_c^{\text{bulk}} \leq 2R_c, \quad l_s^{\text{bulk}} \leq 2t \quad (2.14)$$

поширюватимемо на металеві області ядра й оболонки.

Як виявилось, при збереженні стилю розрахунків часів зіткнення (2.9) – (2.12) для композитної металеві частинки, виникли принципові труднощі.

Якщо для розрахунку τ^{surf} монометалевої частинки достатньо було знайти середню довжину вільного пробігу $\langle l \rangle_R$, то для мультиметалевої частинки слід вже розраховувати середній час $\langle \tau_{@}^{\text{surf}} \rangle_R$. Це є наслідком того, що деякі траєкторії електронів перетинають області різних металів (рис. 2.2). Таке ж зауваження відноситься і до решти компонентів ефективного часу релаксації. Тепер і для них необхідна чіткість у визначенні траєкторії з урахуванням параметрів металів, через які вони проходять. Чіткість траєкторії має на увазі здатність виразити її через геометричні параметри частинки. А це можна зробити лише тоді, коли початок і кінець класичної траєкторії знаходиться на поверхні. Таким чином всі компоненти часу в

$$\frac{1}{\tau_{@}^{\text{eff}}} = \frac{1}{\langle \tau_{@}^{\text{bulk}} \rangle_R} + \frac{1}{\langle \tau_{@}^{\text{surf}} \rangle_R} + \frac{1}{\langle \tau_{@}^{\text{rad}} \rangle_R} \quad (2.15)$$

записуються у вигляді усереднених величин.

Доданки в (2.15) є свого роду ”перехресними“ і створюють ефект ”внутрішнього перемішування“ діелектричних функцій τ_c і τ_s у нашій задачі, як, наприклад, це відбувається при ”зовнішньому перемішуванні“ діелектричних функцій згідно формули (2.4). Їх неможна віднести цілком або до ядра або до оболонки. Внаслідок цього, у використуванні при прямих розрахунках вирази (2.7) і (2.8) для ядра й оболонки, необхідно замінити величини $\tau_{c(s)}^{\text{eff}}$ на вираз $\tau_{@}^{\text{eff}}$ із (2.15).

2.2.1 Поверхнєве розсіяння

Для благородних металів за кімнатної температури ($l^{\text{bulk}} = 10 - 100$ нм, довжина хвилі де Бройля електронів $\sim 0,3$ нм) істотними виявляються

нерівності поверхні атомного масштабу. У зв'язку з цим вважатимемо, що розсіяння електронів на поверхні біметалевої сферичної частинки є дифузним. Умовою застосування класичного підходу до опису розсіяння є нерівність $\hbar\omega = \varepsilon_F$.

Вираз для ймовірності розсіяння електронів за всіма напрямками, під кутами, які лежать в інтервалі між $(\theta, \theta + d\theta)$ і $(\varphi, \varphi + d\varphi)$ по відношенню до дотичної площини сфери (рис. 2.2), має вигляд

$$dW = W_0 \cos\theta d\theta d\varphi,$$

$$\theta \in (0, \pi/2), \varphi \in (0, 2\pi).$$

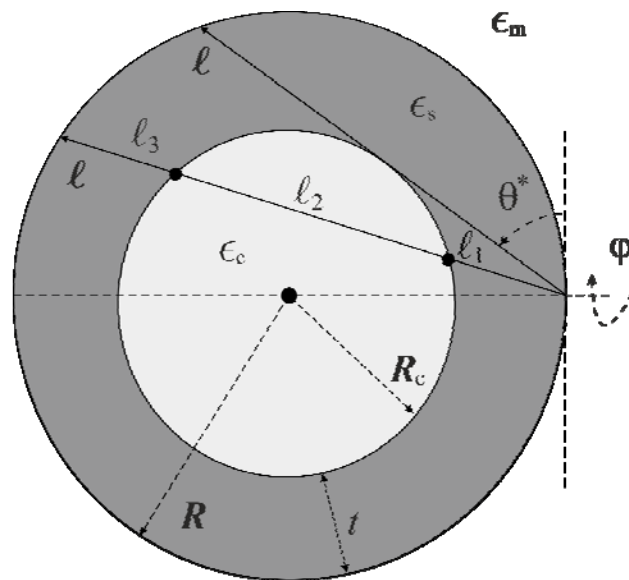


Рисунок 2.2 – До розрахунку часів релаксації

Фактично мова йде про усереднення вектора (довжини вільного пробігу) \mathbf{l} за всіма напрямками. Для "докритичних" кутів $\theta \leq \theta^*$, де $\cos\theta^* = R_c/R$, електрон розсіюється в металі оболонки, а для $\theta > \theta^*$ - розсіюється в обох металах. У цьому випадку запишемо \mathbf{l} у вигляді суми колінеарних векторів $\mathbf{l} = \mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2 + \mathbf{l}_3$ і середнє суми дорівнюватиме сумі середніх.

При перетворенні вектора до вигляду $\frac{l_1}{v_{F,s}} + \frac{l_2}{v_{F,c}} + \frac{l_3}{v_{F,s}}$ його напрямок не змінюється (розсіянням на межі металів нехтуємо), а зміниться лише довжина (тепер вже розмірності часу), тому усереднення за напрямками проводиться аналогічно.

Середній час релаксації на поверхні визначається як

$$\langle \tau_{@}^{\text{surf}} \rangle_R = \frac{\int \tau_{@}^{\text{surf}} dW}{\int dW}. \quad (2.16)$$

Тоді

$$\langle \tau_{@}^{\text{surf}} \rangle_R = \int_0^{\theta^*} \frac{2R \sin \theta}{v_{F,s}} \cos \theta d\theta + \int_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{l_1}{v_{F,s}} + \frac{l_2}{v_{F,c}} + \frac{l_3}{v_{F,s}} \right) \cos \theta d\theta. \quad (2.17)$$

Розв'язуючи геометричну задачу, маємо квадратне рівняння $l_1^2 = R_c^2 - R^2 + 2l_1 R \sin \theta$, розв'язком якого є

$$l_1 = R \sin \theta - \sqrt{R_c^2 - R^2 \cos^2 \theta},$$

а також

$$l_2 = \frac{R^2 - R_c^2 - l_1^2}{l_1}, \quad l_3 = 2R \sin \theta - l_2 - l_1.$$

Граничні переходи, що перетворюють біметалеву частинку на дві різних монометалевих частинки, простіше зробити на цьому етапі.

Вважаючи $R_c, \beta_c \rightarrow 0$, маємо в (2.17) $\theta^* \rightarrow \pi/2$, $\frac{l_2}{v_{F,c}} \rightarrow 0$ і в результаті

$$\langle \tau_{@}^{\text{surf}} \rangle_R \rightarrow \frac{R}{v_{F,c}}. \quad (2.18)$$

Розраховуючи інтеграли в (2.17) з урахуванням виразів для l_1, l_2 і l_3 , матимемо

$$\left\langle \frac{l_R}{v_F} \right\rangle = \int_0^{\theta^*} \frac{2R \sin \theta}{v_F^s} \cos \theta d\theta + \int_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{l_1}{v_F^s} + \frac{l_2}{f_F^c} + \frac{l_3}{v_F^s} \right) \cos \theta d\theta = I_1 + I_2 + I_3 + I_4,$$

де

$$\cos \theta^* = \frac{R_c}{R}, \quad \theta^* = \arccos \left(\frac{R_c}{R} \right).$$

Розраховуючи інтеграли, отримаємо

$$\begin{aligned} I_1 &= \frac{2R}{v_F^s} \int_0^{\theta^*} \sin \theta \cos \theta d\theta = \frac{2R}{v_F^s} \int_0^{\theta^*} \sin \theta d(\sin \theta) = \frac{R}{v_F^s} \sin^2 \theta \Big|_0^{\theta^*} = \\ &= \frac{R}{v_F^s} \sin^2 \theta^* = \frac{R}{v_F^s} (1 - \cos^2 \theta^*) = \frac{R}{v_F^s} \left(1 - \frac{R_c^2}{R^2} \right). \end{aligned}$$

Тоді

$$l_1 = R \sin \theta - \sqrt{R_c^2 - R^2 \cos^2 \theta};$$

$$l_1^2 - l_1 R \sin \theta - R_c^2 + R^2 = 0,$$

звідки

$$\begin{aligned} l_{1,2} &= \frac{2R \sin \theta \pm \sqrt{4R^2 \sin^2 \theta - 4(R^2 - R_c^2)}}{2} = R \sin \theta - \sqrt{R^2 \sin^2 \theta - R^2 + R_c^2} = \\ &= R \sin \theta - \sqrt{R_c^2 - R^2 \cos^2 \theta}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} I_2 &= \int_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} \frac{l_1}{v_F^s} \cos \theta d\theta = \frac{R}{v_F^s} \int_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} \sin \theta \cos \theta d\theta - \frac{1}{v_F^s} \int_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{R_c^2 - R^2 \cos^2 \theta} \cos \theta d\theta = \\ &= \frac{R}{2v_F^s} \sin^2 \theta \Big|_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} - \frac{R}{v_F^s} \int_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{\sin^2 \theta - 1 + \frac{R_c^2}{R^2}} d(\sin \theta) = \frac{R(1 - \sin^2 \theta^*)}{2v_F^s} - \\ &- \frac{R}{v_F^s} \int_{\sin \theta^*}^1 \sqrt{x^2 - 1 + \frac{R_c^2}{R^2}} dx = \frac{R}{2v_F^s} \frac{R_c^2}{R^2} - \frac{R}{v_F^s} I_2^*. \end{aligned}$$

$$I_2^* = \int_{\sin \theta^*}^1 \sqrt{x^2 - \left(1 - \frac{R_c^2}{R^2}\right)} dx = \int_{\sin \theta^*}^1 \sqrt{x^2 - \sin^2 \theta^*} dx.$$

Використовуючи формулу для інтегрування

$$\int x^n z_k^m dx = \frac{x^{n+1} z_k^m}{km + n + 1} + \frac{amk}{km + n + 1} \int x^n z_k^{m-1} dx,$$

де

$$z_k = a + bx^k; \quad n = 0, \quad k = 2, \quad m = \frac{1}{2}, \quad b = 1, \quad a = -\sin^2 \theta^*, \quad m - 1 = -\frac{1}{2}.$$

Таким чином,

$$\begin{aligned}
\int_{\sin \theta^*}^1 \sqrt{x^2 - \sin^2 \theta^*} dx &= \frac{x^{0+1} z_2^{\frac{1}{2}}}{2 \frac{1}{2} + 0 + 1} - \frac{2 \frac{1}{2} \sin^2 \theta^*}{2 \frac{1}{2} + 0 + 1 \sin \theta^*} \int_{\sin \theta^*}^1 x^0 z_2^{\frac{1}{2}} dx = \\
&= \frac{1}{2} x \sqrt{x^2 - \sin^2 \theta^*} \Big|_{\sin \theta^*}^1 - \frac{1}{2} \sin^2 \theta^* \int_{\sin \theta^*}^1 \frac{dx}{\sqrt{x^2 - \sin^2 \theta^*}} = \frac{1}{2} \cos \theta^* - \\
&- \frac{1}{2} \sin^2 \theta^* \ln \left| x + \sqrt{x^2 - \sin^2 \theta^*} \right| \Big|_{\sin \theta^*}^1 = \frac{1}{2} \frac{R_c}{R} - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{R_c^2}{R^2} \right) \times \\
&\times \left[\ln \left(1 + \cos \theta^* \right) - \ln \sin \theta^* \right] = \frac{1}{2} \left\{ \frac{R_c}{R} - \left(1 - \frac{R_c^2}{R^2} \right) \left[\ln \left(1 + \frac{R_c}{R} \right) - \right. \right. \\
&\left. \left. - \ln \sqrt{1 - \frac{R_c^2}{R^2}} \right] \right\} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{R_c}{R} - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{R_c^2}{R^2} \right) \ln \frac{1 + \frac{R_c}{R}}{1 - \frac{R_c}{R}} \right\}.
\end{aligned}$$

Тоді

$$I_2 = \frac{R}{2v_F^s} \frac{R_c^2}{R^2} - \frac{R}{2v_F^s} \left\{ \frac{R_c}{R} - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{R_c^2}{R^2} \right) \ln \frac{1 + \frac{R_c}{R}}{1 - \frac{R_c}{R}} \right\},$$

або

$$\begin{aligned}
I_2 &= \frac{R^2 - R_c^2 - l_1^2}{l_1} = \frac{R^2 - R_c^2 - \left(R \sin \theta - \sqrt{R_c^2 - R^2 + R^2 \sin^2 \theta} \right)^2}{R \sin \theta - \sqrt{R_c^2 - R^2 + R^2 \sin^2 \theta}} = \\
&= R \left\{ \frac{\sin^2 \theta^*}{\sin \theta - \sqrt{\sin^2 \theta - \sin^2 \theta^*}} - \sin \theta + \sqrt{\sin^2 \theta - \sin^2 \theta^*} \right\}.
\end{aligned}$$

$$I_3 = \frac{R}{v_F^c} \int_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} \left\{ \frac{\sin^2 \theta^*}{\sin \theta - \sqrt{\sin^2 \theta - \sin^2 \theta^*}} - \sin \theta + \sqrt{\sin^2 \theta - \sin^2 \theta^*} \right\} \cos \theta d\theta =$$

$$= \frac{R}{v_F^c} (I_3^{(1)} + I_3^{(2)} + I_3^{(3)});$$

$$I_3^{(2)} = -\int_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} \sin \theta \cos \theta d\theta = -\frac{1}{2} \sin^2 \theta \Big|_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} = -\frac{1}{2} (1 - \sin^2 \theta^*) = -\frac{1}{2} \cos^2 \theta^* = -\frac{1}{2} \frac{R_c^2}{R^2};$$

$$\begin{aligned} I_3^{(3)} &= \int_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{\sin^2 \theta - \sin^2 \theta^*} \cos \theta d\theta = \int_{\sin \theta^*}^1 \sqrt{x^2 - \sin^2 \theta^*} dx = \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \frac{R_c}{R} - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{R_c^2}{R^2} \right) \ln \frac{1 + \frac{R_c}{R}}{1 - \frac{R_c}{R}} \right\}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} I_3^{(1)} &= \sin^2 \theta^* \int_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} \frac{\cos \theta d\theta}{\sin \theta - \sqrt{\sin^2 \theta - \sin^2 \theta^*}} = \sin^2 \theta^* \int_{\sin \theta^*}^1 \frac{dx}{x - \sqrt{x^2 - \sin^2 \theta^*}} = \\ &= \left\| y = \frac{x}{\sin \theta^*}; x = y \sin \theta^* \right\| = \sin^2 \theta^* \int_1^{\frac{1}{\sin \theta^*}} \frac{dy}{y - \sqrt{y^2 - 1}} = \\ &= \sin^2 \theta^* \int_1^{\frac{1}{\sin \theta^*}} \frac{y + \sqrt{y^2 - 1}}{y^2 - (y^2 - 1)} dy = \sin^2 \theta^* \int_1^{\frac{1}{\sin \theta^*}} (y + \sqrt{y^2 - 1}) dy = \\ &= \frac{1}{2} \sin^2 \theta^* y^2 \Big|_1^{\frac{1}{\sin \theta^*}} + \sin^2 \theta^* \int_1^{\frac{1}{\sin \theta^*}} \sqrt{y^2 - 1} dy = \frac{1}{2} \cos^2 \theta^* + \\ &+ \sin^2 \theta^* \int_1^{\frac{1}{\sin \theta^*}} \sqrt{y^2 - 1} dy = \frac{1}{2} \frac{R_c^2}{R^2} + \int_{\sin \theta^*}^1 \sqrt{x^2 - \sin^2 \theta^*} dx = \frac{1}{2} \frac{R_c}{R^2} + \\ &+ \frac{1}{2} \left\{ \frac{R_c}{R} - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{R_c^2}{R^2} \right) \ln \frac{1 + \frac{R_c}{R}}{1 - \frac{R_c}{R}} \right\}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_3 &= \frac{R}{v_F^c} \left\{ -\frac{1}{2} \frac{R_c^2}{R} + \frac{1}{2} \left[\frac{R_c}{R} - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{R_c^2}{R^2} \right) \ln \frac{1 + \frac{R_c}{R}}{1 - \frac{R_c}{R}} \right] + \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \frac{R_c^2}{R^2} + \frac{1}{2} \left[\frac{R_c}{R} - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{R_c^2}{R^2} \right) \ln \frac{1 + \frac{R_c}{R}}{1 - \frac{R_c}{R}} \right] \right\} = \\
&= \frac{R}{v_F^c} \left[\frac{R_c}{R} - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{R_c^2}{R^2} \right) \ln \frac{1 + \frac{R_c}{R}}{1 - \frac{R_c}{R}} \right].
\end{aligned}$$

Тоді

$$l_3 = 2R \sin \theta - l_2 - l_1;$$

$$\begin{aligned}
I_4 &= \int_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} \frac{l_3(\theta)}{v_F^s} \cos \theta d\theta = \frac{1}{v_F^s} \int_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} (2R \sin \theta - l_2 - l_1) \cos \theta d\theta = \\
&= \frac{2R}{v_F^s} \int_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} \sin \theta \cos \theta d\theta - \frac{R}{v_F^s} \left[\frac{R_c}{R} - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{R_c^2}{R^2} \right) \ln \frac{1 + \frac{R_c}{R}}{1 - \frac{R_c}{R}} \right] - \\
&\quad - \frac{R}{2v_F^s} \frac{R_c^2}{R^2} + \frac{R}{2v_F^s} \left[\frac{R_c}{R} - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{R_c^2}{R^2} \right) \ln \frac{1 + \frac{R_c}{R}}{1 - \frac{R_c}{R}} \right] = \\
&= \frac{R}{2v_F^s} \frac{R_c^2}{R^2} - \frac{R}{2v_F^s} \left[\frac{R_c}{R} - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{R_c^2}{R^2} \right) \ln \frac{1 + \frac{R_c}{R}}{1 - \frac{R_c}{R}} \right]
\end{aligned}$$

Отже, остаточно матимемо

$$\begin{aligned}
\left\langle \frac{l_R}{v_F} \right\rangle &= \frac{R}{v_F^s} \left(1 - \frac{R_c^2}{R^2} \right) + \frac{R}{2v_F^s} \frac{R_c^2}{R^2} - \frac{R}{2v_F^2} \left[\frac{R_c}{R} - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{R_c^2}{R^2} \right) \ln \frac{1 + \frac{R_c}{R}}{1 - \frac{R_c}{R}} \right] + \\
&+ \frac{R}{v_F^c} \left[\frac{R_c}{R} - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{R_c^2}{R^2} \right) \ln \frac{1 + \frac{R_c}{R}}{1 - \frac{R_c}{R}} \right] + \frac{R}{2v_F^s} \frac{R_c^2}{R^2} - \\
&- \frac{R}{v_F^s} \left[\frac{R_c}{R} - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{R_c^2}{R^2} \right) \ln \frac{1 + \frac{R_c}{R}}{1 - \frac{R_c}{R}} \right] = \\
&= \frac{R}{v_F^s} + R \left(\frac{1}{v_F^c} - \frac{1}{v_F^s} \right) \left[\frac{R_c}{R} - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{R_c^2}{R^2} \right) \ln \frac{1 + \frac{R_c}{R}}{1 - \frac{R_c}{R}} \right],
\end{aligned}$$

або

$$\left\langle \tau_{@}^{\text{surf}} \right\rangle_R = \frac{R}{\mathcal{A} v_{F,c}},$$

де

$$\mathcal{A} = \left\{ 1 + \left(\frac{v_{F,s}}{v_{F,c}} - 1 \right) \left[\beta_c^{\frac{1}{3}} + \frac{1}{2} \left(1 - \beta_c^{\frac{2}{3}} \right) \ln \left(\frac{1 - \beta_c^{\frac{1}{3}}}{1 + \beta_c^{\frac{1}{3}}} \right) \right] \right\}^{-1}. \quad (2.19)$$

2.2.2 Радіаційне загасання

Використовуючи у формулі (2.12)

$$\operatorname{Re}\sigma(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 + (\omega\tau^{\text{eff}})^2}, \quad \sigma_0 = \frac{e^2 n_e \tau^{\text{eff}}}{m^*},$$

а також нерівності в області плазмових частот $\omega\tau^{\text{eff}} \gg 1$ і, отже, заміну $\omega \rightarrow \omega_p$, отримуємо

$$\langle \tau_{@}^{\text{rad}} \rangle_R = \frac{9}{2} c^3 \sqrt{T_m} \langle \mathcal{B} \tau^{\text{rad}} \rangle_R, \quad \mathcal{B} = \frac{1}{\omega_p^3 V}. \quad (2.20)$$

1. Випадок (2.14).

$$\begin{aligned} \langle \tau_{@}^{\text{rad}} \rangle_R &= \frac{9}{2} c^3 \sqrt{T_m} \left[\int_0^{\theta^*} \mathcal{B}_s \tau_s^{\text{bulk}} \cos\theta d\theta + \int_0^{\frac{\pi}{2}} (2\mathcal{B}_s \tau_s^{\text{bulk}} + \mathcal{B}_c \tau_c^{\text{bulk}}) \cos\theta d\theta \right] = \\ &= \frac{9}{2} c^3 \sqrt{T_m} \left[(2 - \sqrt{1 - \beta_c^{2/3}}) \mathcal{B}_s \tau_s^{\text{bulk}} + (1 - \sqrt{1 - \beta_c^{2/3}}) \mathcal{B}_c \tau_c^{\text{bulk}} \right] = \\ &= \frac{9}{2} c^3 \sqrt{T_m} \left[\frac{(2 - \sqrt{1 - \beta_c^{2/3}}) \tau_s^{\text{bulk}}}{\frac{4\pi}{3} (1 - \beta_c) R^3 \omega_{bp,s}^3} + \frac{(1 - \sqrt{1 - \beta_c^{2/3}}) \tau_c^{\text{bulk}}}{\frac{4\pi}{3} \beta_c R^3 \omega_{bp,c}^3} \right]. \end{aligned}$$

Нехай $V_0 \equiv \frac{4\pi}{3} R^3$, тоді

$$\langle \tau_{@}^{\text{rad}} \rangle_R = \frac{9}{2} c^3 \frac{\sqrt{T_m}}{V} \left[\frac{(2 - \sqrt{1 - \beta_c^{2/3}}) \tau_s^{\text{bulk}}}{(1 - \beta_c) \omega_{bp,s}^3} + \frac{(1 - \sqrt{1 - \beta_c^{2/3}}) \tau_c^{\text{bulk}}}{\beta_c \omega_{bp,c}^3} \right]. \quad (2.21)$$

2. Випадок (2.13)

$$\begin{aligned} \langle \tau_{@}^{\text{rad}} \rangle_{\text{R}} &= \frac{9}{2} c^3 \sqrt{T_{\text{m}}} \left[\int_0^{\theta^*} B_s \frac{2R \sin \theta}{v_{\text{F},s}} \cos \theta d\theta + \int_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} \left(\mathcal{B}_s \frac{l_1}{v_{\text{F},s}} + \mathcal{B}_c \frac{l_2}{v_{\text{F},c}} + \mathcal{B}_s \frac{l_3}{v_{\text{F},s}} \right) \cos \theta d\theta \right] = \\ &= \frac{9}{2} c^3 \sqrt{T_{\text{m}}} [\mathcal{B}_s I_1 + \mathcal{B}_s I_2 + \mathcal{B}_c I_3 + \mathcal{B}_s I_4], \end{aligned}$$

де

$$I_1 = \frac{R}{v_{\text{F},s}} (1 - \beta_c^{2/3}); \quad \mathcal{B}_s I_1 = \frac{R}{V_0 v_{\text{F},s}} \frac{1 - \beta_c^{2/3}}{(1 - \beta_c) \omega_{bp,s}^3};$$

$$\begin{aligned} I_2 &= \frac{R}{2v_{\text{F},s}} \beta_c^{2/3} - \frac{R}{2v_{\text{F},s}} \left\{ \beta_c^{1/3} - \frac{1}{2} (1 - \beta_c^{2/3}) \ln \frac{1 + \beta_c^{1/3}}{1 - \beta_c^{1/3}} \right\} = \\ &= \frac{R}{2v_{\text{F},s}} \left\{ \beta_c^{2/3} - \beta_c^{1/3} + \frac{1}{2} (1 - \beta_c^{2/3}) \ln \frac{1 + \beta_c^{1/3}}{1 - \beta_c^{1/3}} \right\} \end{aligned}$$

$$\mathcal{B}_s I_2 = \frac{R}{2V_0 v_{\text{F},s} \omega_{bp,s}^3} \frac{\beta_c^{2/3} - \beta_c^{1/3} + \frac{1}{2} (1 - \beta_c^{2/3}) \ln \frac{1 + \beta_c^{1/3}}{1 - \beta_c^{1/3}}}{1 - \beta_c};$$

$$I_3 = \frac{R}{v_{\text{F},c}} \left[\beta_c^{1/3} - \frac{1}{2} (1 - \beta_c^{2/3}) \ln \frac{1 + \beta_c^{1/3}}{1 - \beta_c^{1/3}} \right];$$

$$\mathcal{B}_c I_3 = \frac{R}{V_0 v_{\text{F},c} \omega_{bp,c}^3} \frac{\beta_c^{1/3} - \frac{1}{2} (1 - \beta_c^{2/3}) \ln \frac{1 + \beta_c^{1/3}}{1 - \beta_c^{1/3}}}{\beta_c};$$

$$\begin{aligned}
I_4 &= \frac{R}{2v_{F,s}} \beta_c^{\frac{2}{3}} - \frac{R}{2v_{F,s}} \left[\beta_c^{\frac{1}{3}} - \frac{1}{2}(1 - \beta_c^{2/3}) \ln \frac{1 + \beta_c^{1/3}}{1 - \beta_c^{1/3}} \right] = \\
&= \frac{R}{2v_{F,s}} \left[\beta_c^{2/3} - \beta_c^{1/3} + \frac{1}{2}(1 - \beta_c^{2/3}) \ln \frac{1 + \beta_c^{1/3}}{1 - \beta_c^{1/3}} \right]; \\
\mathcal{B}_4 I_4 &= \frac{R}{2V_0 v_{F,s} \omega_{bp,s}^3} \frac{\beta_c^{2/3} - \beta_c^{1/3} + \frac{1}{2}(1 - \beta_c^{2/3}) \ln \frac{1 + \beta_c^{1/3}}{1 - \beta_c^{1/3}}}{1 - \beta_c}.
\end{aligned}$$

Отже, остаточно

$$\begin{aligned}
\langle \tau_{@}^{\text{rad}} \rangle_{\text{R}} &= \frac{9}{2} c^3 \frac{\sqrt{T_m}}{V_0} \frac{R}{v_{F,s}} \times \\
&\times \left[\frac{1 - \beta_c^{2/3}}{(1 - \beta_c) \omega_{bp,s}^3} + \frac{\beta_c^{2/3} - \beta_c^{1/3} + \frac{1}{2}(1 - \beta_c^{2/3}) \ln \frac{1 + \beta_c^{1/3}}{1 - \beta_c^{1/3}}}{(1 - \beta_c) \omega_{bp,s}^3} + \right. \\
&\left. + \frac{v_{F,s}}{v_{F,c}} \frac{\beta_c^{\frac{1}{3}} - \frac{1}{2}(1 - \beta_c^{2/3}) \ln \frac{1 + \beta_c^{1/3}}{1 - \beta_c^{1/3}}}{\beta_c \omega_{bp,c}^3} \right] = \\
&= \frac{9}{2} c^3 \frac{\sqrt{T_m}}{V_0} \frac{R}{v_{F,s}} \left[\frac{1 - \beta_c^{1/3} + \frac{1}{2}(1 - \beta_c^{2/3}) \ln \frac{1 + \beta_c^{1/3}}{1 - \beta_c^{1/3}}}{(1 - \beta_c) \omega_{bp,s}^3} + \right. \\
&\left. + \frac{v_{F,s}}{v_{F,c}} \frac{\beta_c^{\frac{1}{3}} - \frac{1}{2}(1 - \beta_c^{2/3}) \ln \frac{1 + \beta_c^{1/3}}{1 - \beta_c^{1/3}}}{\beta_c \omega_{bp,c}^3} \right] = \frac{9}{2} \frac{\sqrt{T_m}}{V_0} \frac{R}{v_{F,s}} \left(\frac{c}{\omega_{bp,s}} \right)^3 \times
\end{aligned}$$

$$\times \left[\frac{1 - \beta_c^{1/3} + \frac{1}{2}(1 - \beta_c^{2/3}) \ln \frac{1 + \beta_c^{1/3}}{1 - \beta_c^{1/3}}}{1 - \beta_c} + \frac{v_{F,s} \left(\frac{\omega_{bp,s}}{\omega_{bp,c}} \right) \beta_c^{\frac{1}{3}} - \frac{1}{2}(1 - \beta_c^{2/3}) \ln \frac{1 + \beta_c^{1/3}}{1 - \beta_c^{1/3}}}{\beta_c} \right],$$

або

$$\langle \tau_{@}^{\text{rad}} \rangle_{\text{R}} = \frac{9}{2} \frac{\sqrt{T_m}}{V_0} \frac{R}{v_{F,s}} \left(\frac{c}{\omega_{bp,s}} \right)^3 \left[\frac{1 - \beta_c^{1/3} + \frac{1}{2}(1 - \beta_c^{2/3}) \ln \frac{1 + \beta_c^{1/3}}{1 - \beta_c^{1/3}}}{1 - \beta_c} + \frac{v_{F,s} \left(\frac{\omega_{bp,s}}{\omega_{bp,c}} \right) \beta_c^{\frac{1}{3}} - \frac{1}{2}(1 - \beta_c^{2/3}) \ln \frac{1 + \beta_c^{1/3}}{1 - \beta_c^{1/3}}}{\beta_c} \right]. \quad (2.22)$$

2.2.3 Об'ємне загасання

Зберігаючи стиль розрахунків у дифузному наближенні, запишемо

$$\begin{aligned} \langle \tau_{@}^{\text{bulk}} \rangle &= \int_0^{\theta^*} \tau_s^{\text{bulk}} \cos \theta d\theta + \int_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} (2\tau_s^{\text{bulk}} + \tau_c^{\text{bulk}}) \cos \theta d\theta = \tau_s^{\text{bulk}} \sin \theta \Big|_0^{\theta^*} + \\ &+ (2\tau_s^{\text{bulk}} + \tau_c^{\text{bulk}}) \sin \theta \Big|_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} = \tau_s^{\text{bulk}} \sin \theta^* + (2\tau_s^{\text{bulk}} + \tau_c^{\text{bulk}}) \times \\ &\times (1 - \sin \theta^*) = 2\tau_s^{\text{bulk}} + \tau_c^{\text{bulk}} - (\tau_s^{\text{bulk}} + \tau_c^{\text{bulk}}) \sin \theta^*. \end{aligned}$$

Оскільки $\cos \theta^* = \frac{R_c}{R}$, то

$$\theta^* = \arccos\left(\frac{R_c}{R}\right), \text{ а } \frac{R_c}{R} = \beta_c^{\frac{1}{3}}, \text{ і } \sin \theta^* = \sqrt{1 - \cos^2 \theta^*} = \sqrt{1 - \beta_c^{\frac{2}{3}}}.$$

Тому

$$\begin{aligned} \langle \tau_{@}^{\text{bulk}} \rangle &= 2\tau_s^{\text{bulk}} + \tau_c^{\text{bulk}} - (\tau_s^{\text{bulk}} + \tau_c^{\text{bulk}}) \sqrt{1 - \beta_c^{\frac{2}{3}}} = \\ &= (2\sqrt{1 - \beta_c^{\frac{2}{3}}}) \tau_s^{\text{bulk}} + (1 - \sqrt{1 - \beta_c^{\frac{2}{3}}}) \tau_c^{\text{bulk}}. \end{aligned} \quad (2.23)$$

2.3 Поляризованість сферичної металевої наноболонки

Розглянемо тепер композитну двошарову частинку (рис. 2.3) з діелектричним ядром радіусом R_c , що характеризується діелектричною проникністю τ_c , вкритим металевою оболонкою товщиною t ($R = R_c + t$ – загальний радіус двошарової наночастинки).

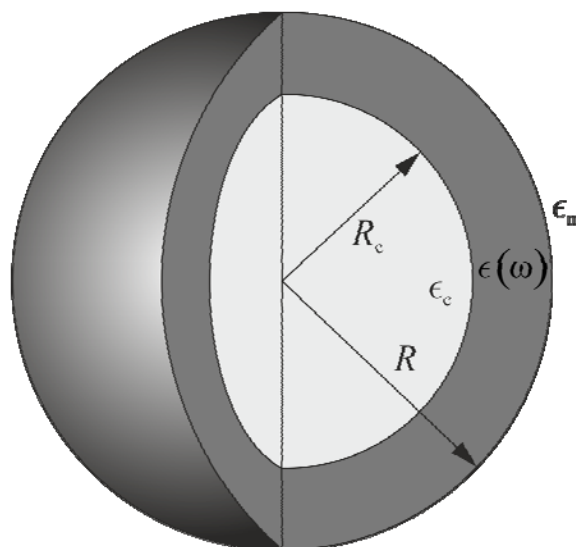


Рисунок 2.3 – Оболонкова наночастинка у діелектричному середовищі

Поляризованність такої частинки також описується виразом (2.4).
Позначаючи $A = \tau_s \tau_a$, $B = \tau_m \tau_b$, перепишемо (2.4) у вигляді

$$\alpha = R^3 \frac{A - B}{A + 2B}.$$

Розділяючи дійсну та уявну частини поляризованності, матимемо

$$\begin{aligned} \alpha_{@} &= R^3 \frac{(A - B)(A + 2B)^*}{(A + 2B)(A + 2B)^*} = \\ &= R^3 \frac{[\operatorname{Re}(A - B) + i \operatorname{Im}(A - B)][\operatorname{Re}(A + 2B) - i \operatorname{Im}(A + 2B)]}{[\operatorname{Re}(A + 2B)]^2 + [\operatorname{Im}(A + 2B)]^2} = \\ &= R^3 \frac{\operatorname{Re}(A - B)\operatorname{Re}(A + 2B) + \operatorname{Im}(A - B)\operatorname{Im}(A + 2B)}{[\operatorname{Re}(A + 2B)]^2 + [\operatorname{Im}(A + 2B)]^2} + \\ &+ i \frac{\operatorname{Re}(A + 2B)\operatorname{Im}(A - B) - \operatorname{Re}(A - B)\operatorname{Im}(A + 2B)}{[\operatorname{Re}(A + 2B)]^2 + [\operatorname{Im}(A + 2B)]^2} = \\ &= R^3 \left(\frac{\operatorname{Re}(A - B)\operatorname{Re}(A + 2B) + \operatorname{Im}(A - B)\operatorname{Im}(A + 2B)}{[\operatorname{Re}(A + 2B)]^2 + [\operatorname{Im}(A + 2B)]^2} + \right. \\ &\left. + i \frac{\operatorname{Re}(A + 2B)\operatorname{Im}(A - B) - \operatorname{Re}(A - B)\operatorname{Im}(A + 2B)}{[\operatorname{Re}(A + 2B)]^2 + [\operatorname{Im}(A + 2B)]^2} \right) = R^3 \frac{\operatorname{Re} \Lambda + i \operatorname{Im} \Lambda}{\Xi}, \end{aligned}$$

де введено позначення

$$\operatorname{Re}(A + 2B) = \operatorname{Re} A + 2 \operatorname{Re} B, \quad (2.24)$$

$$\operatorname{Im}(A + 2B) = \operatorname{Im} A + 2 \operatorname{Im} B, \quad (2.25)$$

$$\operatorname{Re}(A - B) = \operatorname{Re} A - \operatorname{Re} B, \quad (2.26)$$

$$\operatorname{Im}(A - B) = \operatorname{Im} A - \operatorname{Im} B, \quad (2.27)$$

Дійсні та уявні частини складових виразу для $\alpha_{@}(\omega)$ можна записати у вигляді

$$\operatorname{Re} A = 2(1 - \beta_c)(T_1^2 - T_2^2) + (1 + 2\beta_c)T_c T_1; \quad (2.28)$$

$$\operatorname{Im} A = T_2 [4(1 - \beta_c)T_1 + (1 + 2\beta_c)T_c]; \quad (2.29)$$

$$\operatorname{Re} B = T_m [(2 + \beta_c)T_1 + (1 - \beta_c)T_c]; \quad (2.30)$$

$$\operatorname{Im} B = T_m T_2 (2 + \beta_c), \quad (2.31)$$

а вирази для A та B мають вигляд

$$\begin{aligned} A &= T_s [(1 + 2\beta_c)T_c + 2(1 - \beta_c)T_s] = 2(1 - \beta_c)(T_1 + iT_2)^2 + \\ &+ (1 + 2\beta_c)T_c(T_1 + iT_2) = 2(1 - \beta_c)(T_1^2 - T_2^2 + 2iT_1T_2) + \\ &+ (1 + 2\beta_c)(T_c T_1 + iT_c T_2) = 2(1 - \beta_c)(T_1^2 - T_2^2) + (1 + 2\beta_c)T_c T_1 + \\ &+ i\{4(1 - \beta_c)T_1 T_2 + (1 + 2\beta_c)T_c T_2\}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B &= [(1 - \beta_c)T_c + (2 + \beta_c)T_s]T_m = (1 - \beta_c)T_c T_m + (2 + \beta_c)T_m(T_1 + iT_2) = \\ &= (2 + \beta_c)T_m T_1 + (1 - \beta_c)T_c T_m + iT_2 T_m (2 + \beta_c) = \\ &= T_m [(2 + \beta_c)T_1 + (1 - \beta_c)T_c + iT_2(2 + \beta_c)]. \end{aligned}$$

Тому

$$\begin{aligned}\operatorname{Re}(A - B) &= \operatorname{Re} A - \operatorname{Re} B = 2(1 - \beta_c)(\tau_1^2 - \tau_2^2) + \\ &+ (1 + 2\beta_c)\tau_c\tau_1 - (2 + \beta_c)\tau_m\tau_1 - (1 - \beta_c)\tau_m\tau_c = \\ &(1 - \beta_c)(2\tau_1^2 - 2\tau_2^2 - \tau_m\tau_c) + (1 + 2\beta_c)\tau_c\tau_1 - (2 + \beta_c)\tau_m\tau_1;\end{aligned}$$

$$\operatorname{Im}(A - B) = \operatorname{Im} A - \operatorname{Im} B = \tau_2 \left[4(1 - \beta_c)\tau_1 + (1 + 2\beta_c)\tau_c - (2 + \beta_c)\tau_m \right];$$

$$\begin{aligned}\operatorname{Re}(A + 2B) &= 2(1 - \beta_c)(\tau_1^2 - \tau_2^2) + (1 + 2\beta_c)\tau_c\tau_1 + \\ &+ 2\tau_m \left[(2 + \beta_c)\tau_1 + (1 - \beta_c)\tau_c \right] = 2(1 - \beta_c)(2\tau_1^2 - 2\tau_2^2 + \tau_m\tau_c) + \\ &+ (1 + 2\beta_c)\tau_c\tau_1 + 2(2 + \beta_c)\tau_m\tau_1 = \operatorname{Re} A - 2\operatorname{Re} B;\end{aligned}$$

$$\operatorname{Im}(A + 2B) = \operatorname{Im} A - 2\operatorname{Im} B = \tau_2 \left[4(1 - \beta_c)\tau_1 + (1 + 2\beta_c)\tau_c + 2(2 + \beta_c)\tau_m \right].$$

Таким чином, вирази для знаменника і дійсної та уявної частин чисельника виразу $\alpha_{@}(\omega)$ набувають вигляду

$$\begin{aligned}\Xi &= \left[\operatorname{Re}(A + 2B) \right]^2 + \left[\operatorname{Im}(A + 2B) \right]^2 = \left[2(1 - \beta_c)(\tau_1^2 - \tau_2^2 + \tau_m\tau_c) + (1 + 2\beta_c)\tau_c\tau_1 + \right. \\ &\left. + 2(2 + \beta_c)\tau_m\tau_1 \right]^2 + \tau_2^2 \left[4(1 - \beta_c)\tau_1 + (1 + 2\beta_c)\tau_c + 2(2 + \beta_c)\tau_m \right]^2;\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\operatorname{Re} \Lambda &= \operatorname{Re}(A - B)\operatorname{Re}(A + 2B) + \operatorname{Im}(A - B)\operatorname{Im}(A + 2B) = \left[(1 - \beta_c) \times \right. \\ &\times (2\tau_1^2 - 2\tau_2^2 - \tau_m\tau_c) + (1 + 2\beta_c)\tau_c\tau_1 - (2 + \beta_c)\tau_m\tau_1 \left. \right] \left[2(1 - \beta_c)(\tau_1^2 - \tau_2^2 + \tau_m\tau_c) + \right. \\ &\left. + (1 + 2\beta_c)\tau_c\tau_1 + 2(2 + \beta_c)\tau_m\tau_1 \right] + \tau_2^2 \left[4(1 - \beta_c)\tau_1 + (1 + 2\beta_c)\tau_c - 2(2 + \beta_c)\tau_m \right] \times \\ &\times \left[4(1 - \beta_c)\tau_1 + (1 + 2\beta_c)\tau_c + 2(2 + \beta_c)\tau_m \right];\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\operatorname{Im} \Lambda &= \operatorname{Re}(A + 2B)\operatorname{Im}(A - B) - \operatorname{Re}(A - B)\operatorname{Im}(A + 2B) = \tau_2 \left[2(1 - \beta_c) \times \right. \\ &\times (\tau_1^2 - \tau_2^2 + \tau_m\tau_c) + (1 + 2\beta_c)\tau_c\tau_1 + 2(2 + \beta_c)\tau_m\tau_1 \left. \right] \left[4(1 - \beta_c)\tau_1 + (1 + 2\beta_c)\tau_c - \right. \\ &\left. - (2 + \beta_c)\tau_m \right] - \left[(1 - \beta_c)(2\tau_1^2 - 2\tau_2^2 - \tau_m\tau_c) + (1 + 2\beta_c)\tau_c\tau_1 - (2 + \beta_c)\tau_m\tau_1 \right] \times \\ &\times \left[4(1 - \beta_c)\tau_1 + (1 + 2\beta_c)\tau_c + 2(2 + \beta_c)\tau_m \right].\end{aligned}$$

Дійсна та уявна частини діелектричної функції металу оболонки також визначаються модифікованими виразами теорії Друде – Лоренца – Зоммерфельда:

$$\tau_1 = \tau^\infty - \frac{\omega_p^2 (\tau_{@}^{\text{eff}})^2}{1 + \omega^2 (\tau_{@}^{\text{eff}})^2}; \quad (2.32)$$

$$\tau_2 = \frac{\omega_p^2 \tau_{@}^{\text{eff}}}{\omega (1 + \omega^2 (\tau_{@}^{\text{eff}})^2)}. \quad (2.33)$$

Тут $\tau_{@}^{\text{eff}}$ – ефективний час релаксації електронів у двошаровій композитній наночастинці, який можна записати у вигляді:

$$\frac{1}{\tau_{@}^{\text{eff}}} = \frac{1}{\tau^{\text{bulk}}} + \frac{1}{\tau_{@}^{\text{surf}}} + \frac{1}{\tau_{@}^{\text{rad}}}, \quad (2.34)$$

де $\tau_{@}^{\text{surf}}$ – поверхнева складова часу релаксації, що визначається як

$$\tau_{@}^{\text{surf}} = \left\langle \frac{l}{v_F} \right\rangle = \int_0^{\theta^*} \frac{2R \sin \theta}{v_F} \cos \theta d\theta + \int_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} \frac{L}{v_F} \cos \theta d\theta, \quad (2.35)$$

де $\theta^* = \arccos \beta_c^{\frac{1}{3}}$ – критичний кут;

$$L = R \sin \theta - \sqrt{R_c^2 - R^2 \cos^2 \theta} \quad (2.36)$$

– довжина вільного пробігу електрона у металевій оболонці

Розраховуючи перший та другий інтеграли у виразі (2.35), отримаємо

$$\begin{aligned} \int_0^{\theta^*} \frac{2R \sin \theta}{v_F} \cos \theta d\theta &= \frac{2R}{v_F} \int_0^{\theta^*} \sin \theta d(\sin \theta) = \frac{2R}{v_F} \frac{1}{2} \sin^2 \theta \Big|_0^{\theta^*} = \\ &= \frac{R}{v_F} \sin^2 \theta^* = \frac{R}{v_F} (1 - \cos^2 \theta^*) = \frac{R}{v_F} \left(1 - \frac{R_c^2}{R^2}\right) = \frac{R}{v_F} (1 - \beta_c^{2/3}); \end{aligned}$$

$$\int_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} \frac{L}{v_F} \cos \theta d\theta = \frac{R}{v_F} \int_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} \sin \theta \cos \theta d\theta - \frac{1}{v_F} \int_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{R_c^2 - R^2 \cos^2 \theta} \cos \theta d\theta;$$

$$\frac{R}{v_F} \int_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} \sin \theta d(\sin \theta) = \frac{R}{2v_F} \sin^2 \theta \Big|_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} = \frac{R}{2v_F} (1 - \sin^2 \theta^*) = \frac{R}{2v_F} \cos^2 \theta^* = \frac{R}{2v_F} \beta_c^{\frac{2}{3}};$$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{v_F} \int_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{R_c^2 - R^2 \cos^2 \theta} \cos \theta d\theta = \frac{R}{v_F} \int_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{\beta_c^{\frac{2}{3}} - 1 + \sin^2 \theta} d(\sin \theta) = \\
& = \left\| \begin{array}{l} x = \sin \theta \quad \theta = \theta^* \quad \frac{\pi}{2} \\ dx = d(\sin \theta) \quad x = \sin \theta^* \quad 1 \end{array} \right\| = \frac{R}{v_F} \int_{\sin \theta^*}^1 \sqrt{x^2 - \left(1 - \beta_c^{\frac{2}{3}}\right)} dx = \\
& = \frac{R}{2v_F} \left(x \sqrt{x^2 - \sin^2 \theta^*} - \sin^2 \theta^* \ln \left(x + \sqrt{x^2 - \sin^2 \theta^*} \right) \right) \Big|_{\sin \theta^*}^1 = \\
& = \frac{R}{2v_F} \left(\cos \theta^* - \sin^2 \theta^* \ln \left(1 + \cos \theta^* \right) + \sin^2 \theta^* \ln \sin \theta^* \right) = \\
& = \frac{R}{2v_F} \left(\cos \theta^* - \sin^2 \theta^* \ln \frac{\sin \theta^*}{1 + \cos \theta^*} \right) = \\
& = \left\| \begin{array}{l} \cos \theta^* = \beta_c^{\frac{1}{3}} \\ \sin \theta^* = \sqrt{1 - \cos^2 \theta^*} = \sqrt{1 - \beta_c^{\frac{2}{3}}} \end{array} \right\| = \\
& = \frac{R}{2v_F} \left(\beta_c^{\frac{1}{3}} \left(1 - \beta_c^{\frac{2}{3}} \right) \ln \frac{\sqrt{\left(1 - \beta_c^{\frac{1}{3}} \right) \left(1 + \beta_c^{\frac{1}{3}} \right)}}{1 + \beta_c^{\frac{1}{3}}} \right) = \\
& = \frac{R}{2v_F} \left(\beta_c^{\frac{1}{3}} - \frac{1}{2} \left(1 - \beta_c^{\frac{2}{3}} \right) \ln \frac{1 - \beta_c^{\frac{1}{3}}}{1 + \beta_c^{\frac{1}{3}}} \right)
\end{aligned}$$

Таким чином,

$$\tau_{@}^{\text{surf}} = \frac{v_F}{\mathcal{A} R}, \quad (2.37)$$

де

$$\mathcal{A} = \left\{ 1 - \frac{1}{2}\beta_c^{\frac{1}{3}} - \frac{1}{2}\beta_c^{\frac{2}{3}} + \frac{1}{4}\left(1 - \beta_c^{\frac{2}{3}}\right) \ln \frac{1 - \beta_c^{\frac{1}{3}}}{1 + \beta_c^{\frac{1}{3}}} \right\}^{-1}. \quad (2.38)$$

Розрахуємо тепер $\tau_{@}^{\text{rad}}$ для двох випадків, коли $l_{\text{bulk}} > 2t$ і $l_{\text{bulk}} \leq 2t$:

1) При $l_{\text{bulk}} > 2t$ маємо

$$\tau_{@}^{\text{rad}} = \frac{9}{2}c^3 \sqrt{T_m} \left[\int_0^{\theta^*} \mathbf{B} \frac{2R \sin \theta}{v_F} \cos \theta d\theta + \int_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} \mathbf{B} \frac{L}{v_F} \cos \theta d\theta \right], \quad (2.39)$$

де

$$\mathbf{B} = \frac{1}{\omega_p^3 (V - V_c)} = \frac{1}{\omega_p^3 \frac{4}{3} \pi (R^3 - R_c^3)} = \frac{1}{\omega_p^3 V (1 - \beta_c)}; \quad (2.40)$$

Отже,

$$\begin{aligned} \tau_{@}^{\text{rad}} &= \frac{9}{2} \frac{c^3}{\omega_p^3} \frac{\sqrt{T_m}}{V(1 - \beta_c)} \left[\int_0^{\theta^*} \frac{2R \sin \theta}{v_F} \cos \theta d\theta + \int_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} \frac{L}{v_F} \cos \theta d\theta \right] = \\ &= \frac{9}{2} \left(\frac{c}{\omega_p} \right)^3 \frac{\sqrt{T_m}}{V(1 - \beta_c)} \frac{R}{v_F} \left\{ 1 - \frac{1}{2}\beta_c^{\frac{1}{3}} - \frac{1}{2}\beta_c^{\frac{2}{3}} + \frac{1}{4}\left(1 - \beta_c^{\frac{2}{3}}\right) \ln \frac{1 - \beta_c^{\frac{1}{3}}}{1 + \beta_c^{\frac{1}{3}}} \right\}. \end{aligned} \quad (2.41)$$

2) При $l_{\text{bulk}} \leq 2t$ маємо

$$\begin{aligned}
\tau_{@}^{\text{rad}} &= \frac{9}{2} c^3 \sqrt{T_m} \left[\int_0^{\theta^*} \mathbf{B} \tau_{\text{bulk}} \cos \theta d\theta + \int_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} 2\mathbf{B} \tau_{\text{bulk}} \cos \theta d\theta \right] = \\
&= \frac{9}{2} c^3 \sqrt{T_m} \frac{\tau_{\text{bulk}}}{\omega_p^3 V (1 - \beta_c)} \left[\int_0^{\theta^*} \cos \theta d\theta + 2 \int_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} \cos \theta d\theta \right] = \\
&= \frac{9}{2} \left(\frac{c}{\omega_p} \right)^3 \frac{\sqrt{T_m}}{V (1 - \beta_c)} \tau_{\text{bulk}} \left\{ \sin \theta \Big|_0^{\theta^*} + 2 \sin \theta \Big|_{\theta^*}^{\frac{\pi}{2}} \right\} = \\
&= \frac{9}{2} \left(\frac{c}{\omega_p} \right)^3 \frac{\sqrt{T_m}}{V (1 - \beta_c)} \tau_{\text{bulk}} (2 - \sin \theta^*) = \\
&= \frac{9}{2} \left(\frac{c}{\omega_p} \right)^3 \frac{\sqrt{T_m}}{V (1 - \beta_c)} \tau_{\text{bulk}} \left(2 - \sqrt{1 - \beta_c^{\frac{2}{3}}} \right),
\end{aligned}$$

або

$$\tau_{@}^{\text{rad}} = \frac{9}{2} \left(\frac{c}{\omega_p} \right)^3 \frac{\sqrt{T_m}}{V (1 - \beta_c)} \tau_{\text{bulk}} \left(2 - \sqrt{1 - \beta_c^{\frac{2}{3}}} \right). \quad (2.42)$$

Умова рівності нулю дійсної частини знаменника (2.4) призводить до рівняння відносно частот поверхневих плазмонів $\omega_{sp}^@$:

$$\text{Re}(T_s T_a + 2 T_m T_b) = 0, \quad (2.43)$$

де T_a і T_b визначаються виразами (2.5) і (2.6).

Підставляючи ці вирази в (2.43), отримуємо квадратне рівняння відносно

$$T_s(\omega_{sp}^@)$$

$$2(1-\beta_c)\left(\Gamma(\omega_{sp}^@)-\Gamma^{(+)}\right)\left(\Gamma(\omega_{sp}^@)-\Gamma^{(-)}\right)=0, \quad (2.44)$$

де $\Gamma^{(\pm)}$ визначаються співвідношеннями

$$\Gamma^{(\pm)} = \frac{-4\Gamma_m - \Gamma_c - 2(\Gamma_c + \Gamma_m)\beta_c}{4(1-\beta_c)} \pm \frac{\sqrt{(4\Gamma_m + \Gamma_c + 2(\Gamma_c + \Gamma_m)\beta_c)^2 - 16(1-\beta_c)^2\Gamma_m\Gamma_c}}{4(1-\beta_c)}, \quad (2.45)$$

а частоти поверхневих плазмонів визначаються з рівняння

$$\Gamma(\omega_{sp}^@) = \Gamma^{(\pm)}. \quad (2.46)$$

За відсутності загасання ($\tau_{@}^{\text{eff}} = 0$) з (2.32) матимемо

$$\Gamma^\infty - \frac{\omega_p^2}{(\omega_{sp}^@)^2} = \Gamma^{(\pm)}, \quad (2.47)$$

або остаточно

$$\omega_{sp}^{@(\pm)} = \frac{\omega_p}{\sqrt{\Gamma^\infty - \Gamma^{(\pm)}}}. \quad (2.48)$$

Розв'язок у вигляді (2.48) є громіздким, тому для спрощення вважатимемо, що $\Gamma^\infty = \Gamma_m = \Gamma_c = 1$. Тоді

$$\begin{aligned}
T^{(\pm)} &= \frac{-5 - 4\beta_c \pm \sqrt{(5 + 4\beta_c)^2 - 16(1 - \beta_c)^2}}{4(1 - \beta_c)} = \\
&= \frac{-5 - 4\beta_c \pm \sqrt{25 + 40\beta_c + 16\beta_c^2 - 16 + 32\beta_c - 16\beta_c^2}}{4(1 - \beta_c)} = \\
&= \frac{-5 - 4\beta_c \pm 3\sqrt{1 + 8\beta_c}}{4(1 - \beta_c)}
\end{aligned}$$

або

$$\begin{aligned}
T^\infty - T^{(\pm)} &= 1 - \frac{-5 - 4\beta_c \pm \sqrt{1 + 8\beta_c}}{4(1 - \beta_c)} = \frac{4 - 4\beta_c + 5 + 4\beta_c \pm 3\sqrt{1 + 8\beta_c}}{4(1 - \beta_c)} = \\
&= \frac{9 \pm 3\sqrt{1 + 8\beta_c}}{4(1 - \beta_c)} = \frac{3(3 \pm \sqrt{1 + 8\beta_c})}{4(1 - \beta_c)},
\end{aligned}$$

звідки

$$\omega_{sp}^{(\pm)} = \omega_p \sqrt{\frac{4(1 - \beta_c)}{3(3 \pm \sqrt{1 + 8\beta_c})}}. \quad (2.49)$$

З формули (2.32) випливає, що при $\beta_c \rightarrow 0$

$$\omega_{sp}^{(-)} = \frac{\omega_p}{\sqrt{3}}; \quad \omega_{sp}^{(+)} = \omega_p \sqrt{\frac{2}{3}}, \quad (2.50)$$

а при $\beta_c \rightarrow 1$

$$\omega_{sp}^{(-)} = 0; \quad \omega_{sp}^{(+)} = \omega_p. \quad (2.51)$$

3 РЕЗУЛЬТАТИ РОЗРАХУНКІВ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Розрахунки проводилися для сферичних двошарових наночастинок різного складу та морфології. Параметри металів і діелектриків наведені в табл. 3.1 і 3.2, відповідно

Таблиця 3.1 – Параметри металів [68]

Параметр	Метал		
	Cu	Au	Ag
r_s / a_0	2,11	3,01	3,02
m^* / m_e	1,49	0,99	0,96
Γ^∞	12,03	9,84	3,7
$\gamma_{\text{bulk}}, 10^{14} \text{ s}^{-1}$	0,37	0,35	40

Таблиця 3.2 – Параметри ядра (τ_c) і матриці (τ_m)

Ядро	Матриця	
HfO ₂	тефлон	Si
4,6	2,3	13,4

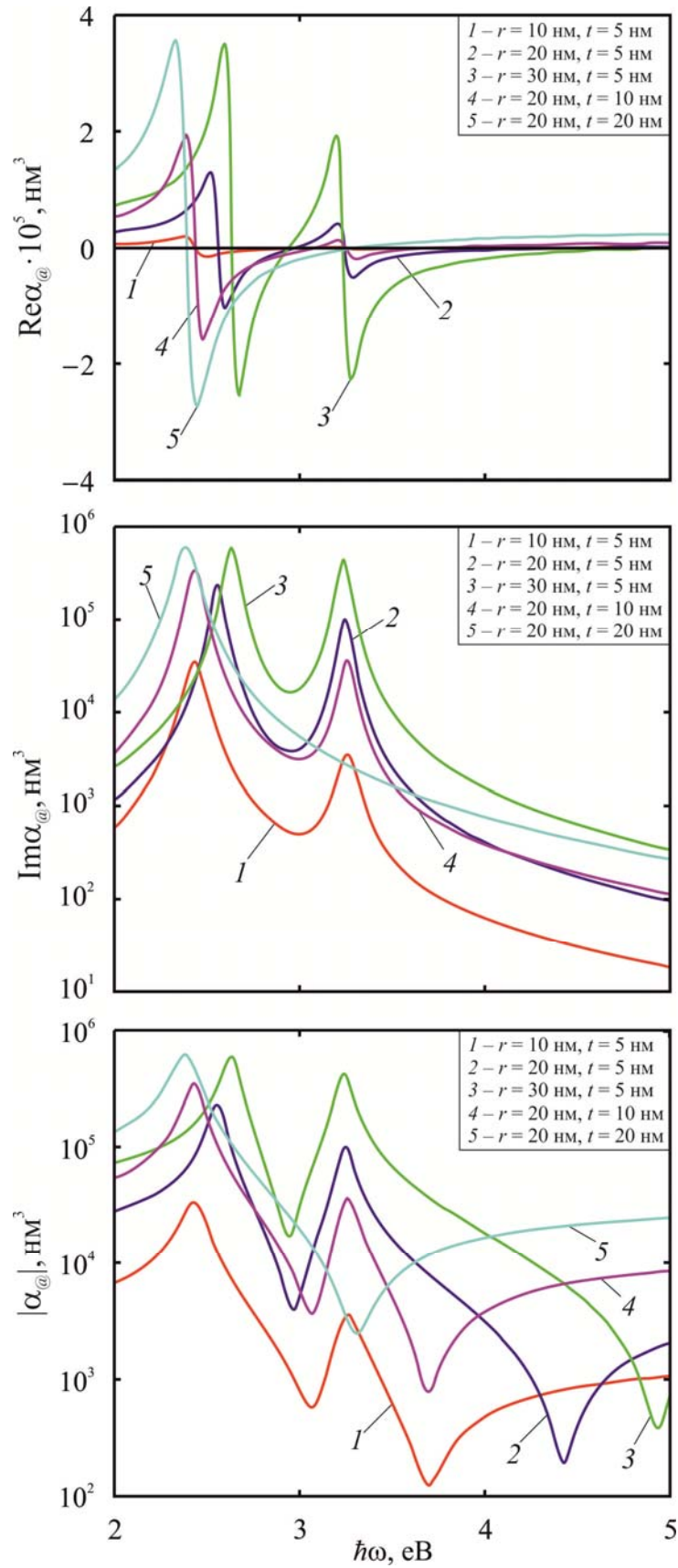
3.1 Біметалеві наночастинки

Графіки частотних залежностей дійсної та уявної частин, а також модуля поляризованості наносфер Ag@Au різних розмірів наведені на рис. 3.1. Функція $\text{Re}\alpha_{@}(\omega)$ є знакозмінною функцією, в той час як $\text{Im}\alpha_{@}(\omega) > 0$ у всьому діапазоні частот. Крім того, збільшення радіуса ядра, тобто збільшення

фракції Ag в наночастинці (максимуми кривих у послідовності $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3$) призводить до того, що перші максимуми $\text{Im}\alpha_{@}$ і $|\alpha_{@}|$ стають більш вираженими, а також до зменшення відстані ($\Delta\omega_{sp}^{@} = \omega_{sp}^{@(+)} - \omega_{sp}^{@(-)}$), або до «притягання» між цими максимумами і збільшенню їх чисельного значення.

У біметалевій частинці зі зменшенням R_c при постійній товщині оболонки t так, що загальний радіус наносфери зменшується (рис. 3.1, б) спостерігається «червоний» зсув першого резонансу $\omega_{sp}^{@(-)}$, тобто максимуми кривих у послідовності $3 \rightarrow 2 \rightarrow 1$ за шкалою частот зсуваються ліворуч. Для другого резонансу $\omega_{sp}^{@(+)}$ на тих самих кривих, навпаки, має місце слабкий «блакитний» зсув. Отже, зі зменшенням радіусу частинки резонанси $\omega_{sp}^{@(-)}$ і $\omega_{sp}^{@(+)}$ – «відштовхуються» один від одного.

Для кривих у послідовності $5 \rightarrow 4 \rightarrow 2$ перший максимум зі зменшенням товщини t при $R_c = \text{const}$, так що загальний радіус наносфери також зменшується (рис. 3.1, б) зазнає «блакитного» зсуву. У цьому випадку зі зменшенням радіуса сфери резонанси $\omega_{sp}^{@(-)}$ і $\omega_{sp}^{@(+)}$ – «притягуються» один до одного. Відмітимо цікавий факт, що поведінка поверхневих плазмонних резонансів у частинці Ag@Au протилежна поведінці цих резонансів у частинці Au@Ag [69], що свідчить про можливість впливу на оптичні і плазмонні властивості шляхом інверсії елементного складу наночастинки – заміни металів ядра й оболонки місцями.



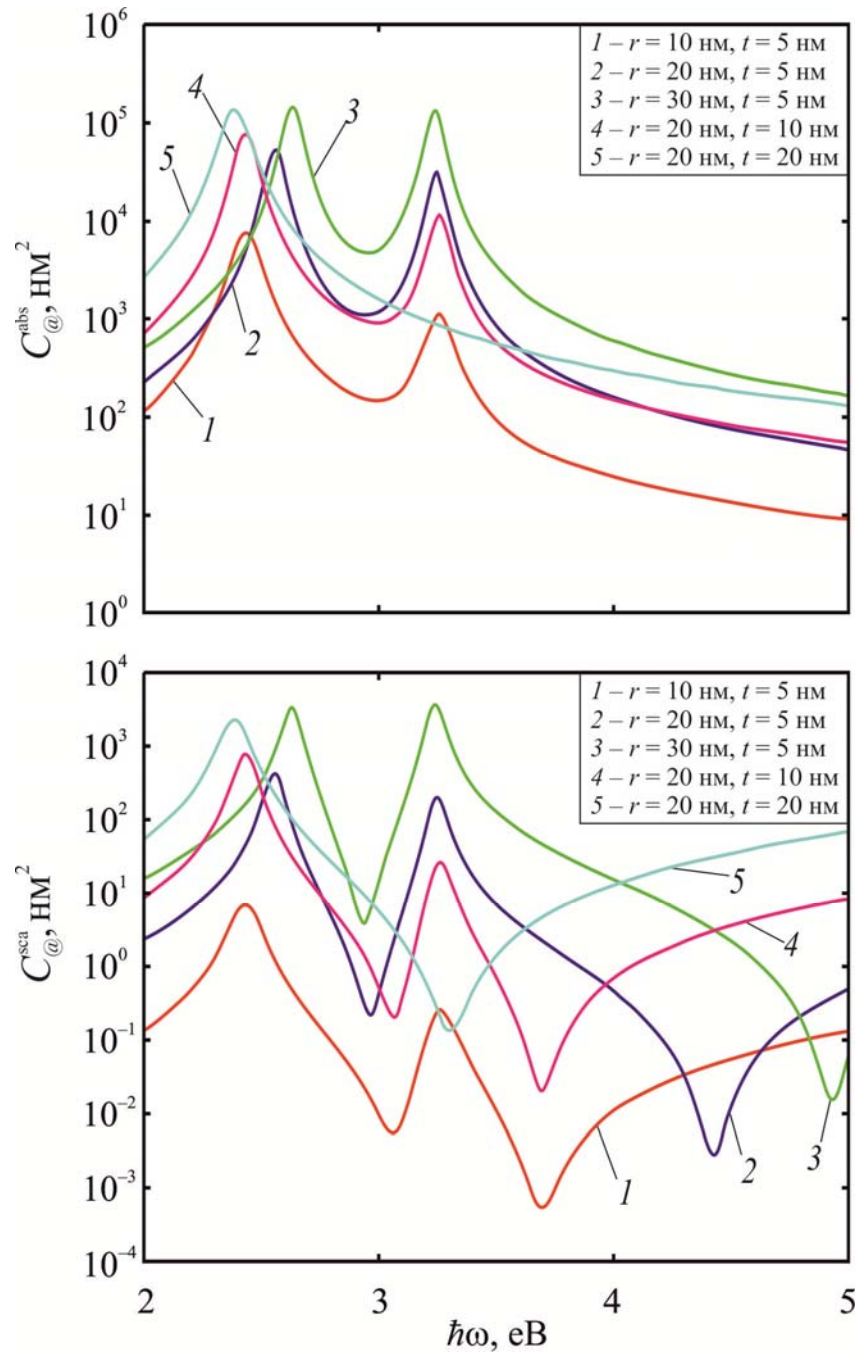
a – дійсна частина; *б* – уявна частина; *в* – модуль

Рисунок 3.1 – Частотні залежності поляризованості наночастинок Ag@Au різних розмірів у тефлоні

Частотні залежності перерізів поглинання і розсіювання наночастинок $\text{Ag}@Au$ зображені на рис. 3.2. Внаслідок того, що $C_{@}^{\text{abs}} \sim \text{Im}\alpha_{@}$, характер кривих $C_{@}^{\text{abs}}(\omega)$ подібний до аналогічних залежностей $\text{Im}\alpha_{@}(\omega)$ на рис. 3.1, б. Крім того, $C_{@}^{\text{sca}} = C_{@}^{\text{abs}}$, отже, втрати енергії падаючої електромагнітної хвилі визначаються переважно процесами поглинання.

На рис. 3.3 у діапазоні $h\omega \in (2,8)$ еВ наведено графіки частотної залежності радіаційної ефективності наночастинок $\text{Ag}@Au$ різного розміру, розташованих у тefлоні. Відмітимо сильну залежність $\xi_{@}^{\text{rad}}$ від розмірів ядра й оболонки. У видимій області спектра ($h\omega \geq 1$ еВ) величина $\xi_{@}^{\text{rad}}$ є малою, а на резонансних частотах, внаслідок сильного поглинання ($C_{@}^{\text{abs}}(\omega_{sp}^{@(\pm)}) \approx C_{@}^{\text{sca}}(\omega_{sp}^{@(\pm)})$), має порядок 10^{-4} . Близькість величини $\xi_{@}^{\text{rad}}$ до 1 спостерігається вже у середній та дальній ультрафіолетовій області спектра, коли металеві частинки відбивають практично всі електромагнітні хвилі. Така сама поведінка при великих частотах має місце і для частинок менших розмірів. Проте, у видимому діапазоні величина $\xi_{@}^{\text{rad}}$ для них зменшується більше ніж на порядок. Відмітимо, що залежності $\xi_{@}^{\text{rad}}(\omega)$ для наночастинок $\text{Ag}@Au$ і $\text{Au}@Ag$ якісно подібні.

Відомо, що коли металеві наночастинки вбудовано у напівпровідник зі складними зонами, то за рахунок плазмонних резонансів за посередництвом ближнього поля можливо досягти зворотного ефекту – підсилення взаємодії з напівпровідником, збільшуючи тим самим ефективний переріз розсіювання, і, відповідно, величину $\xi_{@}^{\text{rad}}$.



a – переріз поглинання; *б* – переріз розсіювання

Рисунок 3.2 – Частотні залежності перерізів наночастинок Ag@Au різних розмірів у тefлоні

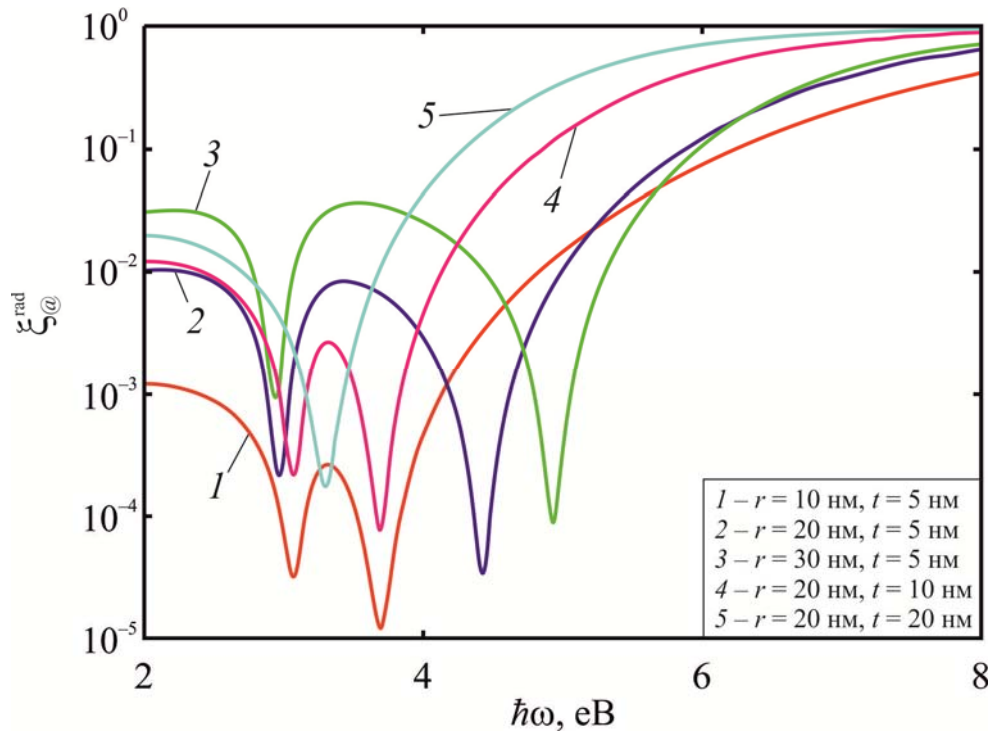


Рисунок 3.3 – Частотні залежності оптичної радіаційної ефективності наночастинок Ag@Au різних розмірів у тefлоні

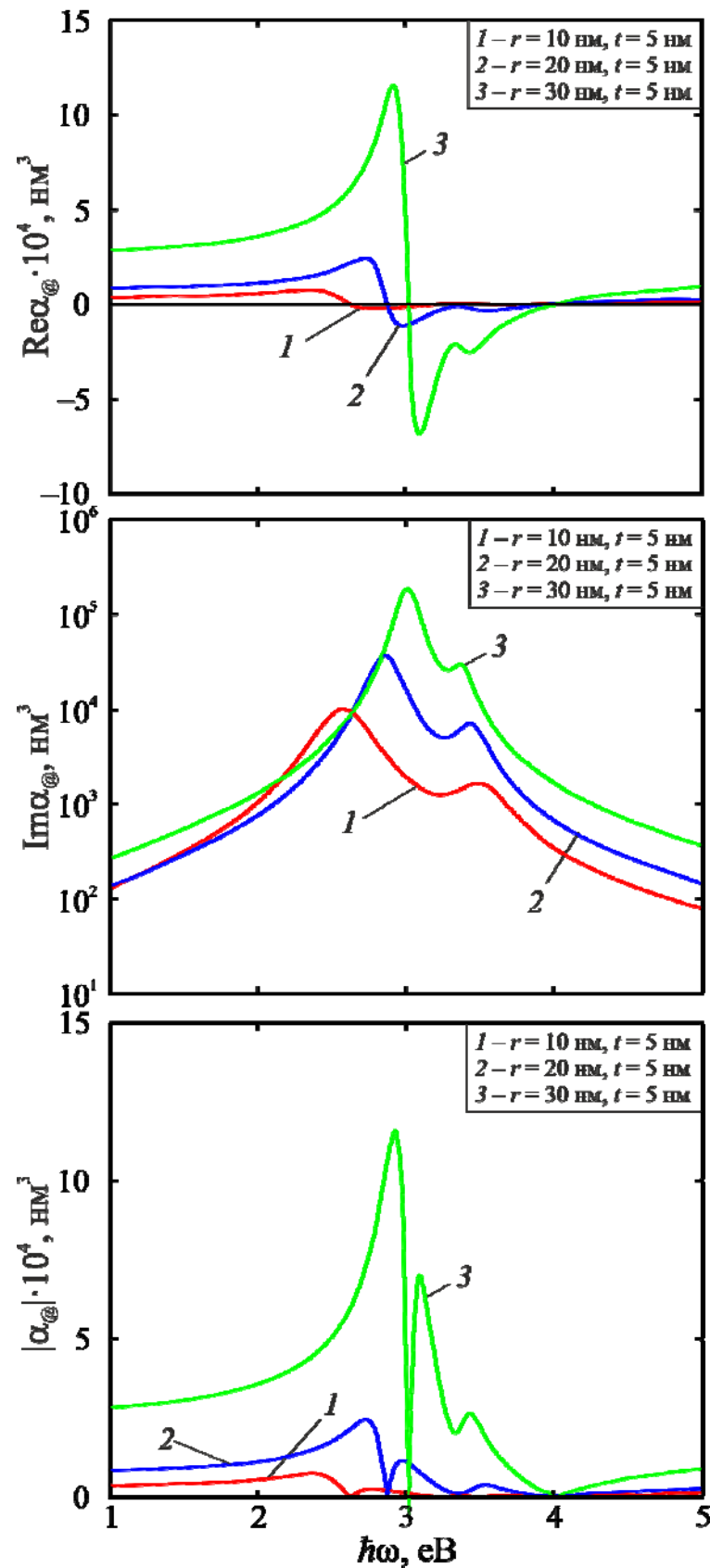
3.2 Оболонкові наночастинок

Графіки частотних залежностей дійсної та уявної частини, а також модуля поляризованості двошарових наночастинок $\text{HfO}_2@Si$ різних розмірів наведено на рис. 3.4. Подібно до випадку біметалевих частинок функція $\text{Re}\alpha_{@}(\omega)$ також є знакозмінною функцією частоти, в той час як $\text{Im}\alpha_{@}(\omega)$ завжди додатна. Збільшення товщини оболонки, тобто збільшення вмісту металевої фракції призводить до того, що перші та другі максимуми на рис. 3.4, б і в стають більш вираженими. Крім того, має місце «блакитний» зсув першого резонансу $\omega_{sp}^{@(-)}$ і «червоний» зсув другого резонансу $\omega_{sp}^{@(+)}$, а, отже, і зменшення відстані $\Delta\omega_{sp}^{@} = \omega_{sp}^{@(+)} - \omega_{sp}^{@(-)}$, тобто «притягання» максимумів.

На рис. 3.5 зображено графіки частотних залежностей перерізів поглинання і розсіювання. Як і у випадку біметалевих наночастинок, характер

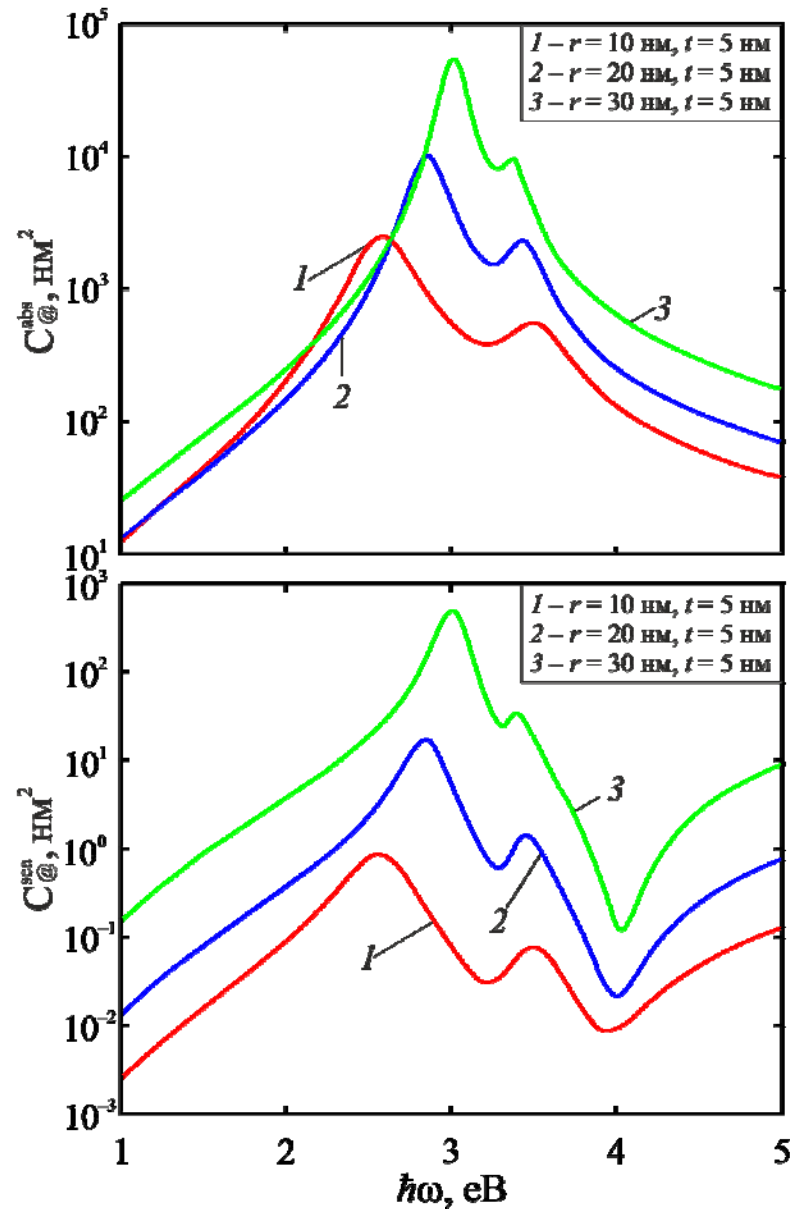
кривих $C_{@}^{\text{abs}}(\omega)$ подібний до залежності $\text{Im}\alpha_{@}(\omega)$, $C_{@}^{\text{sca}} = C_{@}^{\text{abs}}$, і тому практично всі втрати енергії визначаються поглинанням.

Частотні залежності радіаційної ефективності двошарових наночастинок $\text{HfO}_2@{\text{Cu}}$ різного розміру у діапазоні $h\omega \in (1,5, \dots, 10)$ еВ продемонстровано на рис. 3.6. Ці результати також якісно подібні до аналогічних розрахунків для біметалевих наночастинок відповідних розмірів (рис. 3.3). Проте, у цьому випадку мінімуми $\xi_{@}^{\text{rad}}(\omega)$ є менш вираженими і відстані між ними значно менші, ніж у випадку біметалевих наночастинок. Така поведінка кривих $\xi_{@}^{\text{rad}}(\omega)$ для оболонкових частинок пов'язана з наявністю діелектричного ядра.



a – дійсна частина; *b* – уявна частина; *c* – модуль

Рисунок 3.4 – Частотні залежності поляризованості наночастинок $\text{HfO}_2@Cu$ різних розмірів у тефлоні



a – переріз поглинання; *b* – переріз розсіювання

Рисунок 3.5 – Частотні залежності перерізів наночастинок $\text{HfO}_2@Si$ різних розмірів у тефлоні

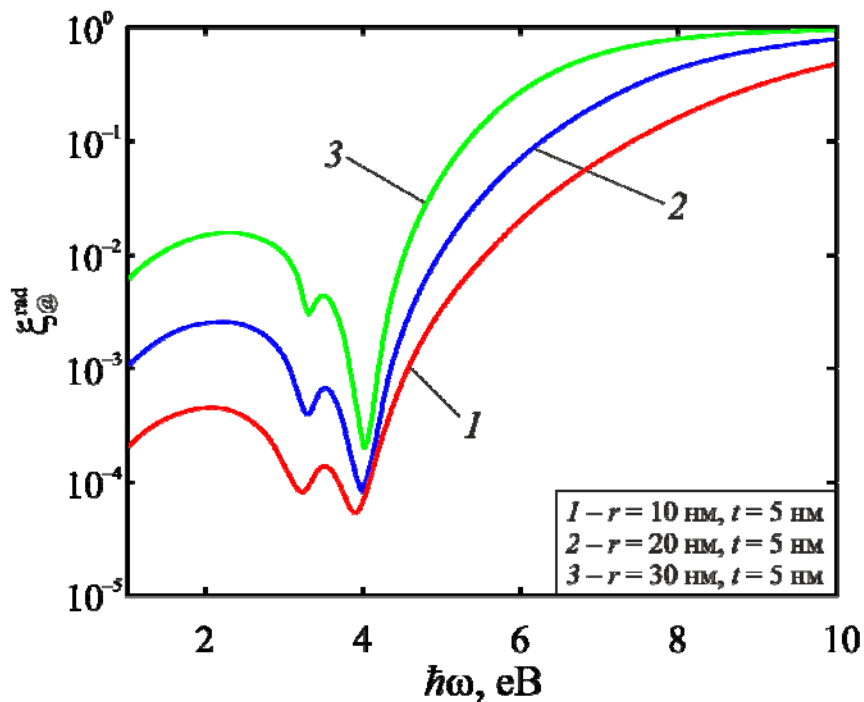


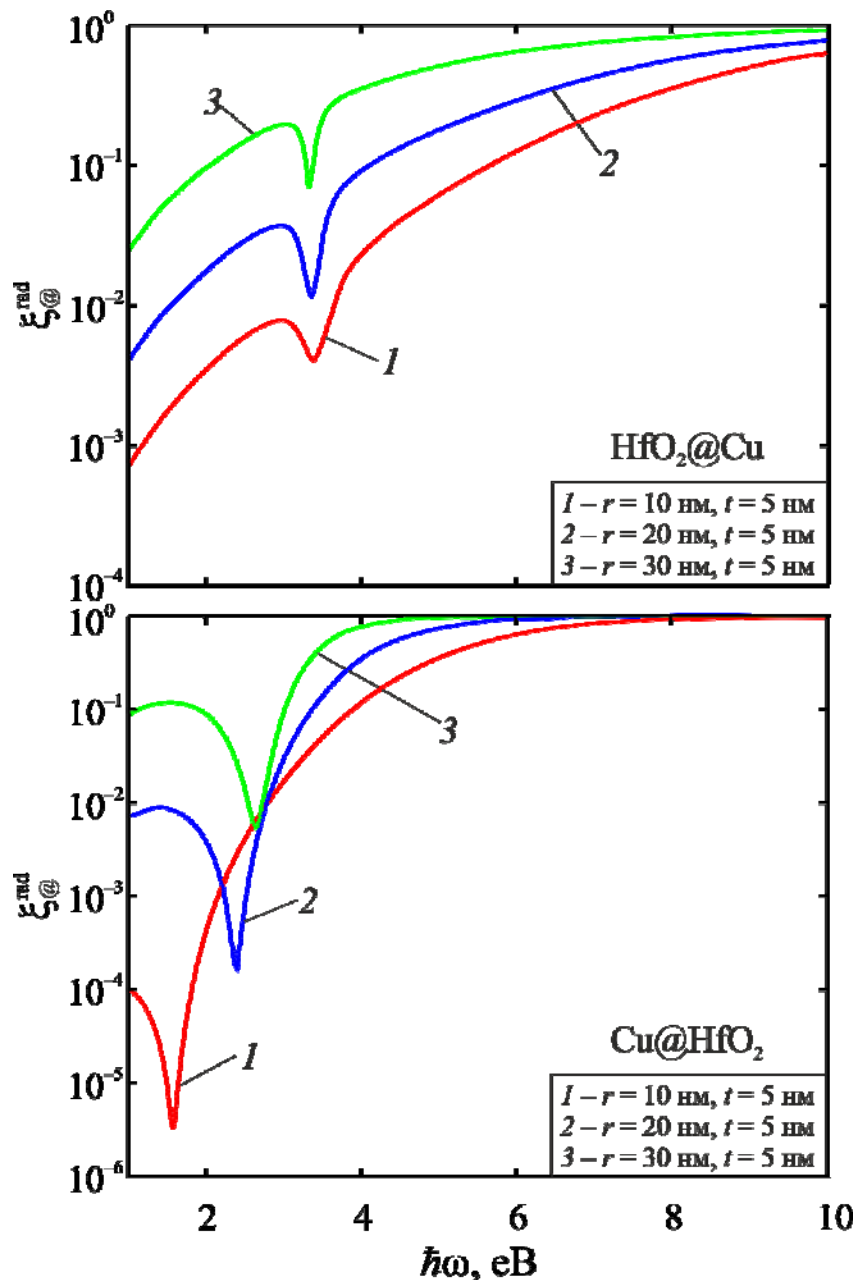
Рисунок 3.6 – Частотні залежності оптичної радіаційної ефективності наночастинок $\text{HfO}_2@Cu$ різних розмірів у тефлоні

3.3 Оптична радіаційна ефективність двошарових наночастинок у кремнії

Частотні залежності оптичної радіаційної частинок $\text{HfO}_2@Cu$ і $Cu@HfO_2$, що знаходяться у кремнії ($\tau_m = 13,6$), наведено на рис. 3.7. На відміну від випадку таких самих наночастинок, розташованих у органічній речовині (тефлоні), оптична ефективність має один мінімум, що відповідає фіолетовій частині спектра, при цьому положення цього мінімуму практично не залежить від розміру наночастинок $\text{HfO}_2@Cu$ (рис. 3.7, а).

У випадку металевих частинок міді, вкритих шаром діелектрика HfO_2 , частотна залежність оптичної радіаційної ефективності також має один мінімум, проте його положення суттєво залежить від розмірів двошарової наночастинок (рис. 3.7, б). Отже, при зануренні у кремній наночастинок $Cu@HfO_2$ шляхом варіації їх радіусу можна досягти підсилення поглинання у

всьому видимому діапазоні електромагнітних хвиль та збільшити ККД кремнієвих сонячних елементів. З цього також випливає, що за рахунок інверсії складу наночастинок (заміни місцями матеріалів ядра й оболонки) можна змінювати фотовольтаїчні властивості матричного кремнію, а, отже, і технічні характеристики сонячних елементів.

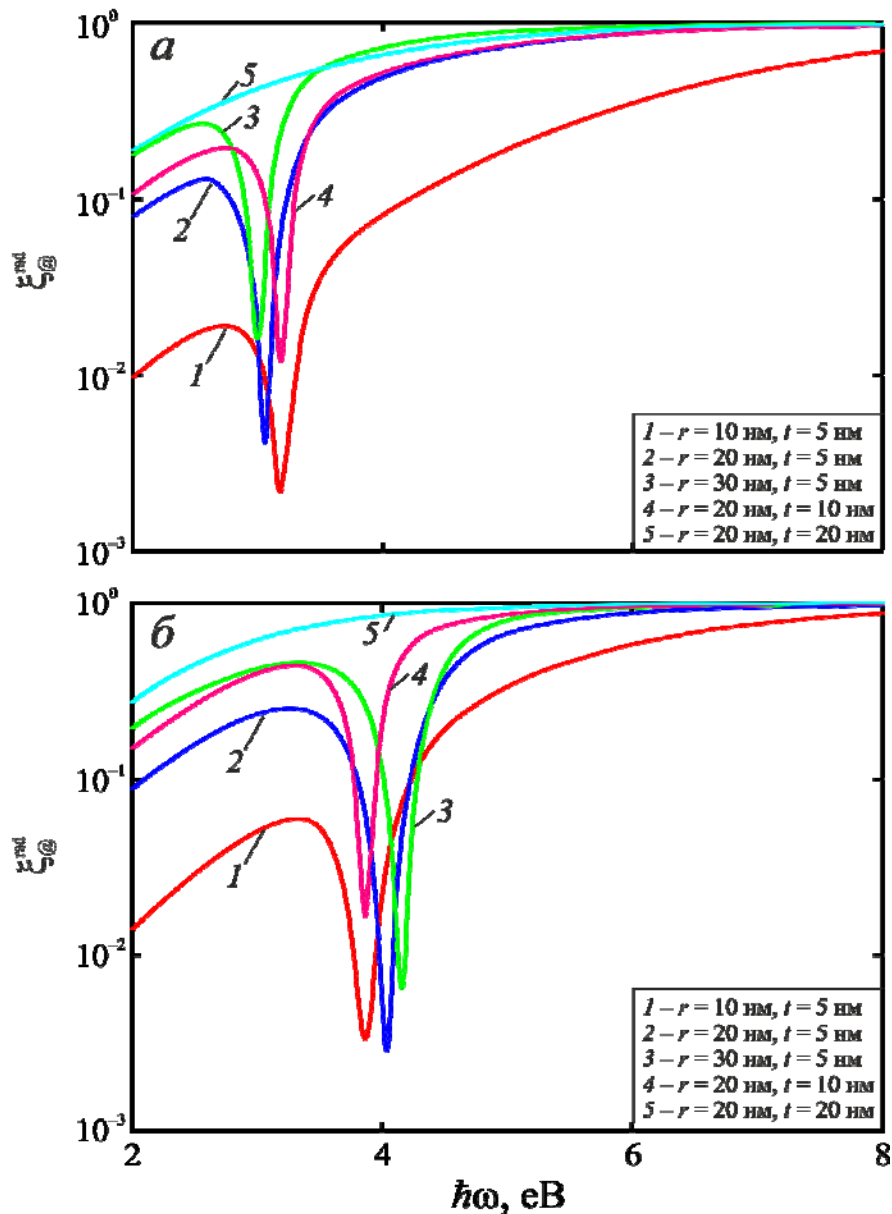


a – $HfO_2@Cu$;

б – $Cu@HfO_2$

Рисунок 3.7 – Частотні залежності оптичної радіаційної ефективності двошарових метал-діелектричних наночастинок різних розмірів у кремнії

Наведені вище міркування стосуються також і випадку занурених у кремній біметалевих наночастинок (рис. 3.8). Так, оптична радіаційна ефективність наночастинок Ag@Au у кремнії досягає мінімуму при $\hbar\omega$; 3 еВ, тобто у видимій частині спектра, тоді як зміна архітектури наночастинок на Au@Ag зміщує цей мінімум у ближню ультрафіолетову область, а його положення визначається розміром наночастинок.



a – Ag@Au ;

б – Au@Ag

Рисунок 3.8 – Частотні залежності оптичної радіаційної ефективності двошарових біметалевих наночастинок різних розмірів у кремнії

4 ОХОРОНА ПРАЦІ ТА БЕЗПЕКА В НАДЗВИЧАЙНИХ СИТУАЦІЯХ

4.1 Аналіз потенційних небезпек

1. Ураження електричним струмом – може виникнути в разі пошкодження ізоляції та порушень правил техніки безпеки, наслідком чого може буде отримання електричного удару;

2. Негативний вплив ЕМП на людину – обумовлений тим, що робота користувача персонального комп'ютера проходить навпроти наелектризованого монітора та у приміщенні з різноманітною електронною технікою, такий вплив викликає захворювання загального характеру та зниження імунітету людини;

3. Фізичні перевантаження - обумовлені неергономічністю робочого місця (робота користувача вимагає тривалого статичного напруження м'язів ший, спини, рук, ніг), монотонністю роботи, що призводить до втоми і кістково-м'язових порушень;

4. Нервопсихічні перевантаження – викликані порушеннями, пов'язаними зі стресовими ситуаціями та нервооемоційними перевантаженнями, що призводить до захворювань загальноневротичного характеру у вигляді головного болю, відчуття важкості в голові, поганого сну, підвищеної втоми;

5. Механічні травми – виникають через нераціональну організованість робочого місця, захаращеність приміщення;

6. Недостатня освітленість робочого місця – обумовлена нераціональним освітленням, світлотехнічної специфікою робочих місць з ПК, виходом з ладу освітлювальних пристроїв та недотриманням режиму праці, що може призвести до порушення зору;

7. Незадовільні параметри мікроклімату робочого місця – визвані нераціональними температурою та вологістю повітря, недостатньою чи надмірною швидкістю руху повітря, інтенсивністю теплового опромінення, все це може викликати захворювання загального характеру;

8. Можливість виникнення пожегу - виникає внаслідок порушення правил пожежної безпеки та коротких замикань, що можуть бути обумовлені дуже щільною упаковкою електронних схем у сучасних ПК, що веде, в свою чергу, до їх перегріву, який може призвести до оплавлення ізоляції та її оголення;

9. Неправильні дії персоналу в умовах надзвичайної ситуації.

4.2 Заходи по забезпеченню безпеки

Для забезпечення електробезпечності устаткування, вибір технічних засобів захисту здійснюється відповідно до вимог, за ДСТУ 7237:2011 («Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты»)

Електроустаткування відповідно до умов, у яких воно експлуатується, відповідає вимогам ПУЕ та ГОСТу 12.2.007.0-75 («Система стандартов безопасности труда. Изделия электро технические. Общие требования безопасности»). Експлуатація електроустановок і електроустаткування проводиться відповідно до «Правил технічної експлуатації електроустановок» (ПТЭ) і «Правилами технічної безпеки при експлуатації електроустановок споживачів» (ПТБ) з доповненнями й змінами.

Для забезпечення електробезпеки всі дроти, що перебувають під напругою, надійно обгороджені або розташовані на висоті (більше двох метрів), що виключає можливість випадкового дотику до них.

Заземлення електроустановок виконане відповідно до вимог ПУЕ і становить 4 Ом.

У схемі електричних кіл обладнання передбачений пристрій централізованого відключення від живильної мережі всіх електричних кіл, згідно ГОСТ 12.2.007.0-75 «Изделия электротехнические. Общие требования безопасности»

Для попередження виникнення електробезпеки усі працівники повинні мати досконалі знання з техніки безпеки при роботі з електрообладнанням та

пройти інструктаж по електробезпеці з атестацією на групу допуску (друга група).

В лабораторії джерелом електромагнітного випромінювання є монітор комп'ютера. Рівні електромагнітних випромінювань моніторів, що вважаються безпечними для здоров'я, регламентуються нормами MPR II 1990:10 та ДСанПіН 3.3.2.007-98 «Державні санітарні правила і норми роботи з візуальними дисплейними терміналами електронно-обчислювальних машин», які встановлюють вимоги до обладнання, організації робочих місць, режимів праці та відпочинку. Відповідно стандартам MPR II напруженість електромагнітного поля на відстані 50 см по електричній складовій повинна бути не більше:

- у діапазоні частот 5 Гц - 2 кГц; 25 В/м;
- у діапазоні частот 2 - 400 кГц 2,5 В/м.

Щільність магнітного потоку повинна бути не більше:

- у діапазоні частот 5 Гц - 2 кГц; 250 нТл;
- у діапазоні частот 2 - 400 кГц. 25 нТл.

Виходячи з вище сказаного, вибрали монітор, який відповідає зазначеним нормативним документам.

Характер праці приводить до обмеженої рухової активності, що супроводжується малими м'язовими зусиллями (гіподинамією). При деяких видах праці (введення і редагування інформації) мається значне, але одноманітне і спрощене навантаження на невеликі групи м'язів рук (гіпокінезія). Для усунення шкідливого впливу гіподинамії і гіпокінезії вводяться паузи для виконання комплексу вправ, спрямованих на збільшення витрат енергії на м'язову роботу і на усунення змін, викликаних локальним характером м'язових дій.

Для основних видів робіт, виконуваних за відео терміналом, вводяться офіційно передбачені перерви (5 хвилин на годину).

Спеціальні вправи для очей, що сприяють посиленню кровообігу, збалансуванню тону очних м'язів, профілактиці стомлення, виконуються на

початку регламентованих перерв, протягом 2-3 хвилин, сидячи на робочому місці.

У випадку виникнення надмірної зорової напруги, що супроводжується погіршенням самопочуття, незважаючи на гарну ергономічну організацію роботи і дотримання режимних моментів, необхідний індивідуальний підхід в обмеженні часу роботи, корекція тривалості перерв для відпочинку чи зміна діяльності інший, не зв'язаної з використання ПК.

Нервова перенапруга обумовлена напругою уваги. Часта й тривала перенапруга може служити джерелом ряду захворювань серцево-судинної, нервової, зорової й іншої систем організму.

Розумова перенапруга. Розумова діяльність - це діяльність, насамперед, центральної нервової системи, її вищого відділу кори головного мозку. При розумовій роботі відбувається звуження судин кінцівок і розширення судин внутрішніх органів.

Для запобігання розумової та нервової перенапруги під час роботи рекомендована зміна уваги, зміна роду діяльності, перерви (10-15 хв. 2-3 рази за робочу зміну).

Механічні травми виникають внаслідок нераціональної організації робочих місць, розташування офісного обладнання та недотримання робітниками правил техніки безпеки на робочому місці.

Для запобігання механічних травм необхідно забезпечити виконання робітниками правил техніки безпеки на робочому місці. Потрібно слідкувати за тим, щоб проходи не були захащені, а робочі місця були організовані раціонально.

4.3 Заходи по забезпеченню виробничої санітарії та гігієни праці

У лабораторії застосовується змішане освітлення. При цьому додаткове штучне освітлення застосовується не тільки в темний, але й у світлий час доби. Розрахунок штучного освітлення у лабораторії розміром 8×5×3,1 м матиме вигляд, приведений нижче.

Вихідні данні для розрахунку загального освітлення:

$$A = 8 \text{ м}$$

$$B = 5 \text{ м}$$

$$H = 3,1 \text{ м}$$

Для лабораторії з розрядом зорових робіт III обирається система загального освітлення.

Нормована освітленість для даного розряду зорової роботи буде становити $E_n=300$ лк.

Для лабораторії, приміщення якої висотою 3,1 м, доцільно обрати лампу люмінесцентну. Тип світильника ЛСП02-2×40-04-06, тип лампи ЛБ40, з габаритними розмірами 1234×280×159 мм, $F_{\text{л}} = 3200$ лм, для якого $[L/h] = 1,3$.

Висота розміщення світильників над робочою поверхнею

$$h = H - h_c - h_p = 3,1 - 0,8 = 2,3 \text{ м}$$

де H – висота приміщення, м;

h_c – відстань від світильника до перекриття

h_p – висота робочої поверхні над підлогою, м (висота умовної робочої поверхні приймається 0,8 м).

Чисельне значення індексу приміщення визначають із співвідношення

$$i_n = \frac{A \cdot B}{h(A + B)} = \frac{8 \cdot 5}{2,3(8 + 5)} = 1,33$$

де A ; B довжина і ширина приміщення, м ;

h – висота розміщення світильників над робочою поверхнею, м.

Для світлих приміщень відбиття поверхонь у приміщенні складає:

- відбиття від стелі $\rho_{\text{ст}}=50\%$;
- відбиття від стін $\rho_{\text{с}}=50\%$;
- відбиття від підлоги $\rho_{\text{п,}}=10\%$

Для даних умов значення коефіцієнта використання світлового потоку:
 $\eta \cong 84 \%$.

Коефіцієнт нерівномірності освітленості $Z = 1,1$

Коефіцієнта запасу $K_3 = 1,4$

Визначимо відстань між рядами світильників. Згідно для світильників, які мають КСС типу Д - 2 $L/h \cong 1,3$

$$L_{\max} = [L/h] \times h = 2,5\text{м}$$

Кількість рядів світильників

$$N_p = \frac{B}{L_{\max}} = 2$$

Приймаємо для установки 2 ряди світильників.

Визначимо світловий потік одного ряду світильників.

$$F_p = \frac{E_n \cdot k_3 \cdot S \cdot z}{N_p \cdot \eta} = \frac{300 \cdot 1,4 \cdot 1,1 \cdot 8 \cdot 5}{2 \cdot 0,84} = 11000_{\text{лм}}$$

Визначимо світлопоток однієї лампи.

$$F_l = \frac{F_p}{6} = \frac{11000}{6} = 1830_{\text{лм}}$$

де E_n – нормоване значення освітленості, лк;

k_3 – коефіцієнт запасу;

S – площа освітлюваної поверхні, м^2 ;

z – коефіцієнт нерівномірності освітленості;

N_l – загальна кількість ламп у складі освітлювальної установки;

η – коефіцієнт використання світлового потоку.

Визначаємо розрахункову загальну кількість світильників

$$N^* = N_{\text{led}}^* = (AB/L_{\text{max}}^2) / 2 = (40/6,25) / 2 = 3 \text{ світильника в ряду.}$$

Обираємо люмінесцентну лампу: ЛД-30.

Приміщення з ПК, його розміри (площа, об'єм) повинні в першу чергу відповідати кількості людей, що знаходяться в ньому. В ньому передбачені відповідні параметри температури, освітлення, чистоти повітря та ін.

Відповідно до ДСанПіН 3.3.2.007-98 «Державних санітарних правил і норм роботи з візуальними дисплейними терміналами електронно-обчислювальних машин» встановлено санітарно-гігієнічні вимоги до параметрів виробничого середовища приміщень з КТ. Площа приміщення на одне робоче місце користувача повинна становити 6 м^2 , а об'єм не менше ніж 20 м^3 .

У виробничих приміщеннях на робочих місцях з КТ мають забезпечуватись оптимальні значення параметрів мікроклімату: температура $22 \dots 24 \text{ }^\circ\text{C}$, відносна вологість повітря 40...60%, швидкість руху повітря 0,1...0,2 м/с (ГОСТ 12.1.005-88, СН 4088-8Є, ДСН 3.3.6.042-99), рівень позитивних і негативних іонів у повітрі 1,5...3 тис./см³ та 3...5 тис./см³. Підтримувати оптимальний рівень легких позитивних і негативних аерофонів у повітрі на робочих місцях рекомендується за допомогою біполярних коронних аероіонізаторів. У приміщеннях з КТ має бути забезпечений трикратний обмін повітря за годину. Для забезпечення постійних параметрів мікроклімату (температури, вологості, швидкості руху і чистоти повітря) у приміщенні встановлен побутовий кондиціонер.

Рациональне колірне оформлення приміщення спрямоване на поліпшення санітарно-гігієнічних умов праці, підвищення його продуктивності і безпеки.

4.4 Заходи з пожежної безпеки та цивільної оборони

4.4.1 Заходи з пожежної безпеки

Пожежна профілактика – це комплекс організаційних і технічних заходів, спрямованих на забезпечення безпеки людей, на запобігання пожежі, обмеження її поширення, а так само на створення умов для успішного гасіння пожежі.

В офісному приміщенні знаходиться дерев'яні меблі, електронна апаратура, паперові носії інформації. Клас пожежі у офісному приміщенні (згідно із ДБН В.1.1.7-2002 «Захист від пожежі. Пожежна безпека об'єктів будівництва») – пожежі твердих речовин, переважно органічного походження, горіння яких супроводжується тлінням (деревина, пластмаси, папір) визначається як клас А та Е. Категорія приміщення (згідно із НАПБ Б.03.002-2007 «Норми визначення категорій приміщень, будинків тазовнішніх установок заввибухопожежною тапожежною небезпекою») – визначається як категорії Д. Визначення типу тарозрахунок кількостіпервинних засобів пожежегасіння (згідно із ДБН В.1.1.7-2002 «Захист від пожежі. Пожежна безпека об'єктів будівництва») – для адміністративного приміщення площею 40 м² слід застосовувати один вуглекислотних ВВК – 3,5(1,4) і порошкових ВП-5 вогнегасника (НАПБ Б.03.002-2007 «Нормивизначення категорій приміщень, будинків тазовнішніх установок заввибухопожежною тапожежноюнебезпекою»). ДБН В.1.1.7-2002 «Пожежна безпекаоб'єктів будівництва»). Крім цього адміністративні приміщення повинні бути обладнані автоматичними пожежними сповіщувачами, що реагують на підвищення температури, дим, полум'я, наприклад, сповіщувачі моделей ДТЛ, ІТМ.

Однією з найбільш важливих задач пожежної профілактики є захист будівельних конструкцій від руйнування і забезпечення їхньої достатньої міцності в умовах впливу високих температур при пожежі. У залежності від меж вогнестійкості будівельних конструкцій СНіП 2.01.02-85

«Противопожарные нормы проектирования зданий и сооружений» для ОЦ і частин будинків іншого призначення, у яких передбачене розміщення ЕОМ, запроектований II ступень вогнестійкості.

У сучасних ЕОМ дуже висока щільність розміщення елементів електронних схем. У безпосередній близькості один від одного розташовуються сполучні проводи, комутаційні кабелі. При протіканні по них електричного струму виділяється значна кількість теплоти, що може привести до підвищення температури окремих вузлів до 80 – 100 °С. При цьому можливо оплавлення ізоляції сполучних проводів, їхнє оголення і як наслідок коротке замикання, що супроводжується іскрінням, яке веде до неприпустимих перевантажень елементів електронних схем. Останні, перегріваючи, згоряють з розкиданням іскор, що може спричинити пожежу.

Для відводу надлишкового тепла від ЕОМ запроектована система вентиляції і кондиціонування повітря.

Обладнання лабораторії ОЦ відповідає вимогам Правил пожежної безпеки в Україні, оскільки виконано відповідно до ПУЕ та ГОСТу 12.1.009-76 «Электробезопасность. Термины и определения».

Для виявлення загоряння і пожеж у приміщенні встановлена система автоматичної пожежної сигналізації з димовими пожежними сповіщувачами у двох місцях, оскільки площа приміщення становить приблизно 180 м².

У будинку ОЦ пожежні крани запроектовані в коридорах, на площадках сходових кліток, біля входів (у нішах на висоті 1,35 м.).

В приміщенні ОЦ встановлено 2 ручних вуглекислотних вогнегасника ВВ-5 на відстані 5 метрів один від одного.

4.4.2 Заходи з цивільної оборони

Захист ЕОМ від впливу електромагнітних імпульсів ядерного вибуху

Вплив ЕМІ може призвести до згорання чутливих електронних і електричних елементів, пов'язаних з великими антенами або відкритими проводами, а також до серйозних порушень в цифрових і контрольних пристроях, зазвичай без необоротних змін.

Особливістю ЕМІ як вражаючого фактора є його здатність поширюватися на десятки і сотні кілометрів в навколишньому середовищі і по різних комунікацій. Тому ЕМІ може вплинути там, де ударна хвиля, світлове випромінювання і проникаюча радіація втрачають своє значення як вражаючі фактори.

Ступінь ушкодження залежить в основному від амплітуди наведеного імпульсу напруги або струму та електричної міцності обладнання.

Головне завдання захисних пристроїв від ЕМІ - виключити доступ наведених струмів до чутливих вузлів і елементів устаткування, що захищається. Проблема захисту від ЕМІ ускладнюється тим, що імпульс протікає приблизно в 50 разів швидше, ніж, наприклад, розряд блискавки, і тому прості газові розрядники в даному випадку є малоефективними.

У кожному конкретному випадку повинні бути знайдені найбільш ефективні та економічно доцільні методи захисту електронної апаратури і великих розгалужених електротехнічних систем. Розглянемо основні методи захисту :

- Екрани й захисні пристрої.

Металеві екрани відображають електромагнітні хвилі і гасять високочастотну енергію. Через систему заземлення струм, наведений ЕМІ, стікає в землю, не завдаючи шкоди електронній апаратурі, що знаходиться усередині металевих шаф або коробів.

- Захист кабелів.

Сполучні кабелі для захисту прокладають в земляних траншеях під цементним або бетонованим підлогою будівель або укладають в сталеві коробки, які заземлюють. Можна розміщувати кабелю та на поверхні поля, закривши їх заземленими швелерами.

Надійність підвищується, якщо кабель розгалужується і підводиться до декількох шаф з розділовими трансформаторами. У цьому випадку ізольовані ділянки мережі мають великим опором ізоляції й малої ємністю проводів відносно землі. Також доцільно застосовувати фільтри від високочастотних перешкод.

- Захисні розрядники і плавкі запобіжники.

Основні функції захисного розрядника - розімкнути лінію або відвести енергію для запобігання пошкодження в захищуваному обладнанні. Встановлюється на входи і виходи апаратури.

Для захисту апаратури можуть бути рекомендовані плавкі запобіжники та захисні вхідні пристосування, які являють собою різні релейні або електронні пристрої, що реагують на перевищення струму або напруги в ланцюзі.

- Грозозахисні пристрою.

Забезпечують "стікання" великого розряду в землю без пошкодження ізоляційних елементів ліній.

- Використання симетричних двопровідних ліній.

- Захист периферійних пристроїв.

Зазначені способи і засоби захисту повинні впроваджуватися в усі види електротехнічної та радіоелектронної апаратури з урахуванням характеру вражаючої дії електромагнітних випромінювань ядерного вибуху для забезпечення надійності роботи підприємств.

4.5 Висновки з розділу “Охорона праці” та підрозділу “Заходи з цивільної оборони”

1 Для попередження поразки електричним струмом необхідні:

а) ізоляція струмоведучих частин ГОСТ 12.2.007.0-75
«Изделияэлектротехнические. Общитребованиябезопасности»;

б) захисне відключення ГОСТ 12.2.007.0-75
«Изделияэлектротехнические. Общитребованиябезопасности»;

в) захисне заземлення, виконане згідно ПУЭ і становить 4 Ом;

г) досконале знання робітниками техніки безпеки при роботі з електрообладнанням та проходження інструктажу по електробезпеці з атестацією на групу допуску.

2 Для попередження негативного впливу ЕМП та ЕМВ використовується монітор з рівнем ЕМВ безпечним для здоров'я людини відповідно нормам МРК ІІ 1990:10 Шведського національного комітету по вимірах і випробовуваннях, ДНАОП 0.00-1.31-99 та ДСанПіН 3.3.2.007-98;

3 Для запобігання появи фізичних перевантажень та нервопсихічних перевантажень вводяться паузи для виконання комплексу вправ, у конструкцію устаткування робочого місця входять сидіння, що враховує індивідуальні антропометричні характеристики людини відповідно до вимог ДСТ 12.2.032-78 „Робоче місце при виконанні робіт сидячи”.

4 Для попередження появи механічних травм усе офісне обладнання розташоване доцільно, робочі місця організовані раціонально. Здійснюється контроль за зашарашеністю коридорів та за виконанням робітниками техніки безпеки на робочому місці.

5 Для створення необхідної освітленості у приміщенні застосовується змішане освітлення, відповідно до норм СНіП ІІ-4-79 «Естественное и искусственное освещение. Нормы проектирования» для приміщення площею 180 м² та висотою 3 м, встановлюємо 24 люмінесцентних ламп типу ЛБ40 та світильника ЛСП02-2×40-04-06.

6 Тип світильника ЛСП02-2×40-04-06, Для створення сприятливих умов мікроклімату у приміщенні забезпечуються оптимальні значення таких параметрів, як:

- температура □22...□24⁰С;
- відносна вологість повітря 40...60%;
- швидкість руху повітря 0,1...0,2 м/с (ГОСТ 12.1.005-88, СН 4088-8С, ДСН 3.3.6.042-99);

- рівень позитивних і негативних іонів у повітрі 1,5...3 тис./см³ та 3...5 тис./см³;

Для забезпечення постійних параметрів мікроклімату (температури, вологості, швидкості руху і чистоти повітря) у приміщенні встановлений побутовий кондиціонер.

7 Для попередження загорянь лабораторія обладнана відповідно до СНіП 2.09.02-85 «Производственные здания» та СНіП 2.01.02-85 «противопожарные нормы». Для виявлення загорання і пожеж у приміщенні встановлена система автоматичної пожежної сигналізації з димовими пожежними оповіщувачами у двох місцях, оскільки площа приміщення становить 180 м². У будинку лабораторії розташовані пожежні крани. В приміщенні лабораторії встановлено ручні вуглекислотних вогнегасника;

8 Для захисту радіоелектронної апаратури від електромагнітного імпульсу використовуються металеві екрани, струмопровідні сітки, чи плівкові покриття для вікон, стільникові металеві конструкції для повітря забірників і вентиляційних отворів і контактні пружинні прокладки, розташовувані по периметру дверей і люків. Також для захисту від електромагнітного імпульсу використовуються розрядники, які встановлені на входах і виходах апаратури, у повітряні і підземні лінії зв'язку і електропостачання.

5. ЕКОНОМІЧНА ЧАСТИНА

5.1 Стейкхолдери

Відомо, що незважаючи на значний поступ у технології сонячних елементів на основі кремнію, їх ціна ще дуже висока для широкого застосування. Один зі способів зменшення вартості полягає у використанні надтонких кремнієвих поглиначів у фотовольтаїчних елементах.

В таблиці 5.1 описано ідею створення та використання надтонких кремнієвих поглиначів у фотовольтаїчних елементах.

Таблиця 5.1 - Опис ідеї

Зміст ідеї	Напрямки застосування	Користь для споживачів (користувачів)
Створення та використання надтонких кремнієвих поглиначів у фотовольтаїчних елементах.	Енергетика	Економія енергоресурсів.
	Медицина	Біохімія. Плазмонні резонанси. Об'єктивна інформація про стан здоров'я.

Так як створення та використання надтонких кремнієвих поглиначів у фотовольтаїчних елементах може бути широко застосований у різних сферах, треба детальніше охарактеризувати потенційний ринок в Україні, що наведено у таблиці 5.2.

Таблиця 5.2 - Попередня характеристика потенційного ринку

№	Показники стану ринку (найменування)	Характеристика
1	Головні конкуренти	ІТ-компанії

		Компанії, що працюють в галузі енергетики
2.	Динаміка ринку (якісна оцінка)	Зростає
3.	Наявність обмежень для входу (вказати характер обмежень)	Потребує великих інвестицій
4.	Специфічні вимоги до стандартизації та сертифікації	Треба розробляти специфічні сертифікації та стандартизації

Тобто, як видно з таблиці 5.2, даний ринок стагнує, тому що ніхто в Україні не використовує на даний момент надтонких кремнієвих поглиначів у фотовольтаїчних елементах.

Тому, основними конкурентами можуть бути ІТ-компанії, що можуть почати використовувати цей метод, компанії, що надають охоронні послуги. Але так як цей метод тільки набирає оберти, він потребує значних інвестицій та розробки специфічних стандартизацій та специфікацій. Тобто зайти на ринок з цією технологією, з одного боку, не складно, бо ніхто ще її не використовує, але і важко, бо це потребує великих інвестицій.

Тому, для детального визначення потенційних груп клієнтів, їх характеристики, та формування орієнтовного переліку вимог до даного методу для кожної групи, було зроблено таблицю 5.3.

Таблиця 5.3 – Попередня характеристика потенційних клієнтів

№ п/п	Потреба, що формує ринок	Цільова аудиторія (цільові сегменти ринку)	Відмінності у поведінці різних потенційних цільових груп клієнтів	Вимоги споживачів (користувачів)
2.	Енергозбереження	Споживачі електроенергії	Налаштовуваність під особливі потреби, ефективність, виробництво сонячних батарей.	Ефективність, швидкість та надійність заходів забезпечення енергозберегаючими технологіями
3.	Медицина	Лікарні	Виявлення та лікування хвороб.	Об'єктивна інформація стану здоров'я.

Із таблиці 5.3 можна зробити висновок, що для користувачів нанотехнологій, об'єктів та комп'ютерів або мобільних пристроїв важливі ефективність, надійність, швидкість методів забезпечення безпеки, вартість, легкість впровадження і підтримки, а також – налаштування під особливі потреби.

Для визначення сильних та слабких сторін використання капсульного методу штучних нейронних мереж, був здійснений SWOT-аналіз середовища реалізації інноваційного проекту, що наведений у таблиці 5.4

Таблиця 5.4- SWOT-аналіз

Сильні сторони:	Слабкі сторони:
<ul style="list-style-type: none"> - Інноваційність; - порівняна ефективність забезпечення енергозбереження; - висока інтегрованість у різні сфери; - відсутність аналогів на ринку; - доступність технології. 	<ul style="list-style-type: none"> - Недопрацьованість технології, як нової; - потребує специфічних спеціалістів для реалізації; - низька розповсюдженість методу; - неможливість використання одразу, потрібен час для тестувань.
Можливості:	Загрози:
<ul style="list-style-type: none"> - Може використовуватись у багатьох сферах, де потребується енергозбереження; - залучення інвестицій; - висока конкуренція серед аналогічних пропозицій; - великий потенціал розвитку методу; - буде більш доступний з часом. 	<ul style="list-style-type: none"> - Може зайняти багато часу для впровадження; - не буде достатньої кількості спеціалістів (кваліфікованих кадрів); - великі витрати праці спеціалістів; - може з'явитися більш доступна та продуктивна технологія; - міжнародний ринок витіснить український потенціал.

Також, щоб більш розгорнуто розглянути ідею створення та використання остріцевих плівок, треба розробити ринкову стратегію проекту. Розроблення ринкової стратегії першим кроком передбачає визначення стратегії охоплення ринку: опис цільових груп потенційних споживачів, що описано в таблиці 5.5.

Таблиця 5.5 - Вибір цільових груп потенційних споживачів

№ п/п	Опис профілю цільової групи потенційних клієнтів	Готовність споживачів сприйняти продукт	Орієнтовний попит в межах цільової групи (сегменту)	Інтенсивність конкуренції в сегменті	Простота входу у сегмент
1.	Енергетика	У найближчий час не дуже велика готовність, бо метод ще новий.	Низький попит, тому що існуючі методи розвинені.	Конкуренція досить велика, тому що існує багато енергогосподарств, служб, які надають свої послуги.	Складно, тому що сфера енергетики потребують великих інвестицій.
2.	Сфера медицини	У найближчий час не дуже велика готовність, бо метод ще новий.	Низький попит, тому що існуючі методи розвинені та на даний момент можуть бути ефективнішим	Велика на міжнародному ринку.	Складно, тому що сфера енергетики потребують великих інвестицій.

			и і		
дешевшими.					
Які цільові групи обрано: Всі користувачі електроенергії.					

Тепер потрібно ідентифікувати стейкхолдерів, здійснити їх пріоритетизацію та побудувати карту стейкхолдерів, яка дозволить візуалізувати картину взаємозв'язків стейкхолдерів. Вона позначена на рисунку 5.1.

Створення карти проводилось у 4 етапи:

1) ідентифікація – окреслення актуальних груп стейкхолдерів. Це ІТ-компанії, бізнес-партнери, держава, інвестори, фіскальна служба, споживачі, міжнародні організації та наукові організації та установи;

2) аналіз – дослідження впливу та інтересів стейкхолдерів;

3) візуалізація – візуальна ілюстрація взаємодії зі стейкхолдерами;

4) пріоритетизація – вибір ключових стейкхолдерів, які найкраще відповідали б істотним питанням, визначеним на попередньому етапі.

З метою відображення взаємозв'язків стейкхолдерів на карті на рис. 5.1 виокремлено три концентричних області, в яких розміщено всіх зацікавлених осіб інноваційного проекту за можливостями впливу на них ініціатора проекту. Область внутрішніх стейкхолдерів – область повноважень або відповідальності ініціатора. Внутрішні зацікавлені сторони знаходяться в прямій підлеглості ініціатора, що дозволяє використовувати досить прості методи адміністрування проекту.

Залежні зацікавлені сторони формально ініціатору проекту не підлеглі, проте тісні ділові стосунки потребують на пошук взаємовигідних рішень та компромісів. На периферії ж знаходяться зовнішні зацікавлені сторони. Це область стейкхолдерів опосередкованого впливу на успішність реалізації інноваційного проекту.



Рис. 5.4 – Карта стейкхолдерів

У розробці моделі беруть участь один науковий консультант (НК) і науковий співробітник (НС). Весь комплекс науково-дослідних робіт можна підрозділити на типові етапи – таблиця 5.6. При кожному етапі вказуються виконавці і тривалість виконання робіт.

Таблиця 5.6. – Етапи роботи

Номер етапу	Найменування етапу	Тривалість, днів	Зміст роботи
I	Підготовчий	6	Робота на збиранням інформації

II	Сучасний стан фотовольтаїки	7	Вивчення основних характеристик сонячних елементів
III	Властивості плазмонних наночастинок, що використовуються в якості пригнічувачів розсіяння у фотовольтаїці	18	Оптична ефективність плазмонної наночастинок
IV	Поляризованість сферичної металевої нанооболонки	11	Поверхнєве розсіяння Радіаційне загасання Об'ємне загасання Поляризованість сферичної металевої нанооболонки
V	Результати розрахунків та їх обговорення	7	Біметалеві наночастинок Оболонкові наночастинок
VI	Результат досліджень	6	Оптична радіаційна ефективність двошарових наночастинок у кремнії
VII	Заключний	10	Економічне обґрунтування проекту

Трудомісткість НДР розраховується в людино-днях витрат робочого часу основних виконавців і залежить від складності розробки й ступеня її новизни, кваліфікації виконавців, наявності у них навичок дослідницької роботи, від використовуваних матеріалів, вимог надійності, технічних умов комплектуючих схем і таке інше.

Спочатку розрахуємо трудомісткість Q кожного етапу:

I етап: $Q_1 = 4 \times 2 = 8$ люд. дн.

II етап: $Q_2 = 6 \times 2 = 12$ люд. дн.

III етап: $Q_3 = 16 \times 1 = 16$ люд. дн.

IV етап: $Q_4 = 9 \times 1 = 9$ люд. дн.

V етап: $Q_5 = 5 \times 2 = 10$ люд. дн.

VI етап: $Q_6 = 4 \times 2 = 8$ люд. дн.

VII етап: $Q_7 = 8 \times 1 = 8$ люд. дн.

Розрахуємо тривалість етапів:

$$T_{ц} = \frac{Q}{R \cdot k_{в.н.}}, \quad (5.1)$$

де $T_{ц}$ – тривалість циклу, дні;

Q – трудомісткість робіт, люд.-днів.;

R – кількість виконавців, люд.;

$k_{в.н.}$ – плановий коефіцієнт виконання норм ($k_{в.н.} = 1,1$)

$$T_{ц1} = \frac{8}{2 \cdot 1,1} = 3,63 \text{ дн.}$$

$$T_{ц2} = \frac{12}{2 \cdot 1,1} = 5,45 \text{ дн.}$$

$$T_{ц3} = \frac{16}{1 \cdot 1,1} = 14,54 \text{ дн.}$$

$$T_{ц4} = \frac{9}{1 \cdot 1,1} = 8,18 \text{ дн.}$$

$$T_{ц5} = \frac{10}{2 \cdot 1,1} = 4,55 \text{ дн.}$$

$$T_{ц6} = \frac{8}{2 \cdot 1,1} = 3,63 \text{ дн.}$$

$$T_{ц7} = \frac{8}{1 \cdot 1,1} = 7,27 \text{ дн}$$

В результаті отримуємо, що тривалість всього процесу НДР займає 47,25 днів.

Результати розрахунків зводять у табл. 5.7.

Таблиця 5.7 – Тривалість етапів НДР

Етап НДР	Трудомісткість		Виконавці		Тривалість, днів
	ГРУНТ	% до під-сумку	Спеціальність	Кількість, чол.	
1	4	7,69	НС, НК	2	3,63

2	6	11,54	НС, НК	2	5,45
3	16	30,77	НС	1	14,54
4	9	17,31	НС	1	8,18
5	5	9,62	НС, НК	2	4,55
6	4	7,69	НС, НК	2	3,63
7	8	15,38	НС	1	7,27
Разом	52	100	-	2	47,25

У ряді випадків дуже важко встановити загальну трудомісткість проведеної НДР. У таких випадках використовують дві чи три вірогідні оцінки часу, що даються відповідальним виконавцям по кожному етапі робіт. Ці оцінки звичайно виражають в днях і є вихідними для розрахунку очікуваного часу виконання етапу робіт із формули:

$$t_{oc} = \frac{3t_{min} + 2t_{max}}{5}, \quad (5.2)$$

де t_{oc} – очікувана оптимальна оцінка часу виконання етапу НДР, дні;
 t_{min} – мінімально необхідний час на виконання роботи при найбільш сприятливих умовах, дні;
 t_{max} – максимальні витрати часу на виконання роботи даного етапу при несприятливих умовах, дні.

Ступінь правильності визначення t_{oc} перевіряють розрахунком дисперсії (5.3) (розкиду між мінімальними та максимальними оцінками часу виконання робіт).

$$\sigma^2(t) = \left(\frac{t_{max} - t_{min}}{5} \right)^2 \quad (5.3)$$

Таблиця 5.8 – Тривалість НДР

Етапи НДР	Оцінка часу, днів			Дисперсія σ^2	Виконавці	
	t_{min}	t_{max}	$t_{оч}$		Спеціальність	Кількість, чол.
1	3	5	3,8	0,16	НС, НК	2
2	5	6	5,4	0,04	НС, НК	2
3	13	16	14,2	0,36	НС	1
4	7	11	8,6	0,64	НС	1
5	4	6	4,8	0,16	НС, НК	2
6	2	5	3,2	0,36	НС, НК	1
7	7	8	7,4		НС	1
Разом	41	57	47,4	-	-	2

Використовуючи таблиці 5.7 і 5.8 можна побудувати календарний графік виконання НДР. Він може бути сітковим чи лінійним у залежності від можливості паралельного виконання суміжної праці. Так як виконання етапів НДР відбувається послідовно, то будемо використовувати лінійний календарний графік виконання НДР. Графік виконання НДР наведений на
рисунку

4.

5.2 Розрахунок витрат на проведення НДР

Для визначення грошових витрат на проведення науково-дослідної роботи складають кошторис витрат по статтях:

- матеріали;
- енергія зі сторони;
- амортизація устаткування;
- заробітна плата основна і додаткова;
- відрахування на соціальне страхування;
- накладні витрати.

У вартість матеріалів включаються витрати на матеріали для проведення дослідження (наприклад папір).

Розрахуємо вартість основних матеріалів M_O за формулою:

$$M_O = (1 + K_{ТЗ}) \cdot \sum_{i=1}^n (C_i \cdot N_i - C_{i0} \cdot N_{i0}), \quad (5.4)$$

де $K_{ТЗ}$ – коефіцієнт, що враховує транспортно-заготівельні витрати ($K_{ТЗ}=0,15$);

C_i – ціна i -го найменування матеріалу, грн.;

N_i – необхідна потреба в матеріалі i -го найменування;

C_{i0} – ціна зворотних відходів i -го найменування матеріалу, грн.;

N_{i0} – кількість зворотних відходів i -го найменування матеріалу;

n – кількість найменувань матеріалів.

Вихідні дані і розрахунки вартості матеріалів занесемо в таблицю 5.9.

Таблиця 5.9 – Витрати на матеріали

Матеріал	Одиниця виміру	Кількість	Ціна за одиницю, грн.	Сума витрат, грн.
Папір формату А4	шт.	500	0,17	85,00
Флеш-накопичувач	шт.	1	200,00	200,00
Картридж на принтер	шт.	1	335,00	335,00

Ручка	шт.	5	8,00	40,00
Олівець	шт.	2	12,00	24,00
Маркер	шт.	4	15,00	60,00
Ластик	шт.	1	7,00	7,00
Усього				751,00

Для розрахунку витрат на електроенергію E використовуємо формулу:

$$E = \frac{P_y \cdot \Phi_{ef} \cdot K_e \cdot C_e}{KKД}, \quad (5.5)$$

де P_y – установлена потужність енергетичних струмоприймачів устаткування, кВт;

Φ_{ef} – ефективний фонд часу роботи даного виду устаткування, год;

K_e – коефіцієнт використання енергетичних установок по потужності і часу ($K_e = 0,9$);

C_e – ціна 1кВт·година електроенергії ($C_e = 2,68$ грн. (з НДС)).

$KKД = 0,9$.

Розрахунки використання електроенергії приведені в таблиці 5.10

Таблиця 5.10 – Розрахунок вартості енергоресурсів

Найменування устаткування	Вид енергоресурсів	Установлена потужність, кВт	Тривалість використання, год.	Тариф, за кВт год, грн.	Вартість енергоресурсів, грн.
1. Ноутбук	Е/енергія	0,6	190	2,68	305
2. Принтер	Е/енергія	0,25	20		13,40
3. Сканер	Е/енергія	0,1	28		7,50
Усього:					365,50

До спеціального обладнання належить таке обладнання, яке використовується тільки для проведення окремої дослідної роботи. Вартість спеціального устаткування для проведення НДР визначають на підставі їхньої кількості, цін по прейскурантах. Питома вага в загальній собівартості складає 20%. Результати розрахунку занесено до таблиці 5.11.

Таблиця 5.11 – Розрахунок вартості спец обладнання

Устаткування	Марка, ДСТ	Кількість на тему	Ціна за одиницю, грн.	Вартість, грн.
1. Ноутбук	Acer Nitro 5	1	20148	20148
2. Принтер	Canon Pixma TS705	1	1840	1840
3. Сканер	Canon CanoScan LIDE 300	1	1727	1727
Усього				23715

Розрахуємо суму амортизаційних відрахувань. Так як основна робота проводиться на комп'ютері, розрахуємо для нього амортизаційні відрахування. Ціна обладнання – 23715 грн. Результати розрахунку занесені у таблицю 5.12.

Таблиця 5.12 – Розрахунок суми амортизаційних відрахувань

Найменування устаткування	Балансова вартість, грн.	Нормативний строк експлуатації, %	Зайнятість устаткування, год.	Річні амортизаційні відрахування, грн
1. Ноутбук	20148,00	5	190	4029,60
2. Принтер	1840,00	3	20	613,33
3. Сканер	1727,00	3	28	575,66
Усього:				5218,59

Розрахуємо заробітну плату всіх категорій працівників, що безпосередньо зайняті в процесі проведення всіх етапів НДР. Сума заробітної плати розраховується на основі зайнятості виконавців по окремих етапах робіт і

середньоденного заробітку для кожної категорії персоналу. Результати розрахунку занесені в таблицю 5.13.

Таблиця 5.13 – Заробітна плата

Професія (посада)	Місячний оклад, грн.	Середньо денна зарплата, грн./день	Кількість виконавців	Зайнятість НДР, днів	Заробітна плата, грн.
Науковий співробітник	8750	352,17	1	52	20312,84
Науковий консультант	6320	241,81	1	19	4594,39
Усього	-	-	2	-	24907,23

Сума по основній заробітній платі складає 24907,23грн. Додаткова плата приймається 12% від основної заробітної плати, що складає 2748,86 грн. Підсумкова сума заробітної плати складає 25656,09 грн..

Єдиний соціальний внесок – 22% (6084,3398грн.).

Складемо кошторис усіх витрат, результати розрахунку занесемо в таблицю 5.14.

В результаті отримали, що сума усіх витрат, необхідних для проведення НДР, складає 71996,365.

Таблиця 5.14 – Кошторис витрат на виконання НДР

Вид витрат	Сума витрат, грн.	Процент витрат
Основні матеріали	751,00	1,04
Амортизаційні відрахування	5218,59	7,25
Енергоносії	365,50	0,51

Продовження таблиці 5.14

1	2	3
Основна заробітна плата	24907,2	31,82

Додаткова заробітна плата	2748,9	3,82
Відрахування на соціальні потреби	6084,33	7,84
Накладні витрати (150% від основної заробітної плати)	34361	47,73
Разом	74436,52	100

5.3. Розрахунок економічної ефективності НДР

Ефективність прикладних НДР визначається, як зіставлення річного економічного ефекту від застосування результатів розрахункових досліджень в умовах виробництва та використаних капіталовкладень для здійснення досліджень та втілення їх у виробництво.

$$E_{\text{фак}} = \frac{\text{Економ.ефект}}{\text{Капіталовк ладення}}. \quad (5.6)$$

Зіставляючи фактичну економічну ефективність з нормативною ($E_n=0,10\dots0,15$), робиться висновок про доцільність досліджень. Якщо $E_{\text{фак}} >$ або $= E_n$ то дослідження визнаються економічно ефективними. У зворотному випадку дослідження не слід виконувати, тому що економічний зиск від таких досліджень малий. Економічну ефективність досліджень можливо оцінити по строку окупності витрат на їхнє проведення та втілення.

$$T_{\text{ок}}^{\text{фак}} = \frac{\text{Капіталовк ладення}}{\text{Економ.ефект}}. \quad (5.7)$$

Фактичний строк окупності капіталовкладень зіставляється з нормативним строком окупності капіталовкладень, прийнятий для

промисловості (приблизно 6 років), і на основі порівняння робиться висновок про доцільність досліджень.

Для теоретичних досліджень у більшості випадків важко чи навіть неможливо розрахувати економічний ефект, тому доцільно визначити їхню техніко-економічну ефективність з урахуванням наступних показників:

- важливість дослідження;
- складності розробки;
- результативності й можливості використання.

Важливість теоретичного дослідження оцінюють по його призначенню:

- рішення проблемних питань;
 - задоволення вимог спеціальної техніки; пошук принципово нових конструктивних і технологічних рішень і т.п.

Складність виконання роботи визначають порівнянням отриманих результатів даного дослідження з результатами відомих аналогічних досліджень з обліком грошових і трудових витрат на їхнє проведення.

Результативність НДР можна визначити по повноті рішень поставленого завдання: отриманий результат відповідає плановому, задовільний (часткове рішення) чи негативний.

Аналіз залежності між цими показниками й витратами на їхнє досягнення дає можливість кількісної оцінки техніко-економічної ефективності теоретичних НДР по формулі:

$$K_{\text{НДР}} = \frac{J^n \cdot R \cdot T}{B_{\text{НДР}} \cdot t_{\text{НДР}}}, \quad (5.8)$$

де $K_{\text{НДР}}$ – рівень ефективності дослідження (коефіцієнт техніко-економічної ефективності НДР);

J^n – важливість роботи;

R – результативність роботи;

T – технічна складність виконання НДР;

$V_{\text{НДР}}$ – витрати на проведення НДР;

$t_{\text{НДР}}$ – час проведення НДР;

n – показник використання результатів НДР ($n = 0$ – результати НДР не використовуються; $n = 1$ – результати НДР використовуються частково; $n = 2$ – результати НДР використовуються в дослідно-конструкторських роботах (ДКР); $n = 3$ – результати НДР можуть бути використані без проведення ДКР).

При значенні $K_{\text{НДР}} \geq 1$ дослідницька робота вважається ефективною. Наприклад, для НДР, у яких $V_{\text{НДР}} < 100000$ тис. грн. і $t_{\text{НДР}} \leq 2$ років, можна застосовувати значення $J=2..5$; $R=2..5$; $T=1..3$ (таблиця 5.15).

Таблиця 5.15 – Значення оцінних факторів

Оцінні фактори	J	R	T	n
Припустимі значення	2...5	1...4	1...3	1...8
Прийняті значення	4	4	3	4

Отже, розрахуємо $K_{\text{НДР}}$, при $J^n = 4^n$; $R=4$, бо отриманий результат відповідає плановому і всі поставлені завдання виконано у повному обсязі; $T = 3$, тому що при виконанні розрахунків використовувався числовий метод; $V_{\text{НДР}} = 71996,365$; $t_{\text{НДР}} = 52$ днів або 0,14 року; $n = 5$.

$$K_{\text{ндр}} = \dots = 1,65$$

Після розрахунку (5.8) отримаємо рівень ефективності дослідження $K_{\text{НДР}} = 1,65$. Це більше 1, тому робимо висновок, що дана дослідницька робота є ефективною.

Результати науково-дослідної роботи мають велике практичне значення для розвитку нанотехнологій . Проведення досліджень показало ,що для підвищення ефективності роботи сонячних елементів можна використовувати металеві наночастинки.

У даному розділі дипломного проєкту було визначено маркетингові аспекти, а саме: описана ідея, проведена попередня характеристика потенційного ринку та клієнтів, зроблений SWOT-аналіз, обрані групи потенційної цільової аудиторії, а також складена карта стейкхолдерів. Також, було розраховано витрати на проведення НДР на 90 днів реалізації проєкту, що складає **74436,52** грн. з урахуванням річної заробітної плати молодшого наукового співробітника, його керівника і лаборанта, та їх ЄСВ. Також, були розраховані вартість спожитих послуг, в тому числі і специфічного обладнання, а також – амортизація до нього за 3 місяці. Було розраховано рівень ефективності дослідження $K_{НДР} = 1,65$. Це більше 1, тому робимо висновок, що дана дослідницька робота є ефективною.

ВИСНОВКИ

Одержано частотні залежності поляризованості, перерізів поглинання і розсіювання та оптичної радіаційної ефективності двошарових наночастинок різного складу і різних розмірів, розташованих у тефлоні і кремнії.

Встановлено, що у випадку наночастинок $\text{Ag}@Au$ зі збільшенням радіусу ядра має місце «притягання» максимумів, що відповідають поверхневим плазмонним резонансам, а зі зменшенням радіусу ядра, навпаки, – «відштовхування» резонансних максимумів. Крім того, поведінка поверхневих плазмонних резонансів цієї частинки протилежна поведінці резонансів у частинки $Au@Ag$, що вказує на можливість впливу на оптичні і плазмонні властивості шляхом зміни металів ядра й оболонки місцями.

Доведено, що для біметалевих наночастинок переріз поглинання суттєво переважає переріз розсіювання, а, отже, втрати енергії падаючої електромагнітної хвилі визначаються переважно процесами поглинання.

Показано, що радіаційна ефективність наночастинок $\text{Ag}@Au$ різного розміру, занурених у тефлон, суттєво залежить від розмірів ядра й оболонки і має два мінімуми на резонансних частотах внаслідок сильного поглинання у цьому спектральному інтервалі.

Графіки частотних залежностей оболонкової наночастинок $\text{HfO}_2@Cu$ якісно подібні відповідним графікам для біметалевої частинки, проте всі другі максимуми, а для радіаційної ефективності перший і другий мінімуми є менш вираженими внаслідок наявності діелектричного ядра.

Встановлено, що частотні залежності оптичної радіаційної ефективності двошарових наночастинок, занурених у кремній, суттєво відрізняється від випадку, коли частинки розташовано в органічній сполуці – тефлоні. Так, на графіках залежностей $\xi_{@}^{\text{rad}}(\omega)$ спостерігається один мінімум, положення якого визначається розмірами наночастинок. Крім того, важливою є та обставина, що при інверсії матеріалів ядра й оболонки положення мінімумів оптичної

радіаційної ефективності змінюється, що, в свою чергу, вказує на шлях зміни ККД кремнієвих сонячних елементів.

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. **Green, M. A.** Third Generation Photovoltaics: Advanced solar energy conversion [Text] / M. A. Green. – Springer-Verlag Berlin Heidelberg. – 2003. – V. 12. – P. XI, 160.
2. **Marti, A.** Next Generation Photovoltaics: High efficiency through full spectrum utilization [Text] / Marti A., Luque A. (Eds). – Series in Optics and Optoelectronics Institute of Physics Publishing Bristol and Philadelphia. – 2004. – P. 344.
3. **Ginley, D. S.** Fundamentals of Materials for Energy and Environmental Sustainability [Text] / Ginley D. S., Cahen D. (Eds). – Cambridge University Press. – Materials Research Society. – 2012. – P. 771.
4. **Алферов, Ж. И.** Тенденции и перспективы развития солнечной фотоэнергетики [Текст] / Ж. И. Алферов, В. М. Андреев, В. Д. Румянцев // Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия. – 2004. – В. 8. – С. 937.
5. **Stoletow, A.** Suite des recherches actino-électriques [Text] / A. Stoletow // Comptes Rendus CVII: 91 (1888). – Abstract, Weibl. Ann. Physik 12 723 (1888).
6. **Миличко, В. А.** Солнечная фотовольтаика: современное состояние и тенденции развития [Текст] / В. А. Миличко, А. С. Шалин, И. С. Мухин, А. Э. Ковров, А. А. Красилин, А. В. Виноградов, П. А. Белов, К. Р. Симовский // УФН. – 2016. – Т. 186. – №8. – С. 801–852.
7. **Дмитрук, М. Л.** Поверхневі плазмонні резонанси та їх прояв у оптичних властивостях ноструктур благородних металів [Текст] / М.Л. Дмитрук, С.З. Малинич // УФЖ. – 2014. – Т. 9., № 1. – С. 3–37.
8. **Arefinia, Z.** Analytical Modeling Based on Modified Effective Medium Theories for Optical Properties of Photovoltaic Material-Incorporated Plasmonic Nanoparticles [Text] / Z. Arefinia // Plasmonics. – 2020. – V. 15. – P. 1661–1673.

9. **He, Z.** Efficient volumetric method of moments for modeling plasmonic thin-film solar cells with periodic structures [Текст] / Z. He, J.H. Gu, W.E.I. Sha, R.S.Chen // Optics Express. – 2018. – V. 26. – No 19. – P. 25037-25046.
10. **Рывкин, С. М.** Фотоэлектрические явления в полупроводниках [Текст] / С. М. Рывкин; серия: "Физика полупроводников и полупроводниковых приборов". – М. ФИЗМАТГИЗ, 1963. – 496 с.
11. **Джафаров, Т. Д.** Фотостимулированные атомные процессы в полупроводниках [Текст] / Т. Д. Джафаров; М.: Энергоатомиздат, 1984. – 134 с.
12. **Фаренбрух, А.** Солнечные элементы: теория и эксперимент [Текст] / А. Фаренбрух, Р. М. Бьюб; Пер. с англ. под ред. М. М. Колтуна. – М.: Энергоатомиздат, 1987. – 280 с.
13. **Andreev, V. M.** Photovoltaic Conversion of Concentrated Sunlight [Текст] / V. M. Andreev, V. A. Grilikhes, V. D. Rumyantsev Published by Wiley. – Chichester, 1997.
14. **Bauer, T.** Thermophotovoltaics: Basic Principles and Critical Aspects of System Design [Текст] / T. Bauer; Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2011. – P. XX, 202.
15. **Чопра, К.** Тонкопленочные солнечные элементы [Текст] / К. Чопра, С. Дас; Пер. с англ, с сокращениями. – М.: Мир, 1986. – 435 с.
16. **Chihhui, Wu** Metamaterial-based integrated plasmonic absorber/emitter for solar thermo-photovoltaic systems [Текст] / Wu Chihhui, N. III. Burton, J. Jeremy, M. Andrew, Z. Byron, S. Steve, S. Gennady // January 2012, Journal of Optics 14(2):024005. – 2012.
17. **Lenert, A.** A nanophotonic solar thermophotovoltaic device [Текст] / A. Lenert, D. M. Bierman, Y. Nam, W. R. Chan, I. Celanović, M. Soljačić, E. N. Wang // Nature Nanotechnol. 9 126. – 2014.
18. **Афанасьев, В. П.** Тонкопленочные солнечные элементы на основе кремния [Текст] / В. П. Афанасьев, Е. И. Теруков, А. А. Шерченков; 2-е изд. – СПб.: Издательство СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2011. – 168 с.

19. **Mokkapati, S.** Nanophotonic light trapping in solar cells [Текст] / S. Mokkapati, K.R. Catchpole // Journal of Applied Physics 112, 101101. – 2012.
20. **Catchpole, K. R.** Plasmonic Solar Cells [Текст] / K. R. Catchpole, A. Polman // Optics Express 16 (26): 21793-800. – January 2008.
21. **Atwater, H. A.** Plasmonics for improved photovoltaic devices [Текст] / H. A. Atwater, A. Polman // Nature Materials. – 2010. – V. 9. – PP. 205–213.
22. **Tanabe, K.** Optical radiation efficiencies of metal nanoparticles for optoelectronic applications [Текст] / K. Tanabe // Materials Letters. – 2007. – V. 61. – PP. 4573-4575.
23. **Dmitruk, N. L.** Optical efficiency of Ag and Au nanoparticles [Текст] / N. L. Dmitruk, S. Z. Malynych, I. E. Moroz, V. Yu. Kurlyak // Semiconductor Physics Quantum Electronics & Optoelectronics. – 2010. – T. 13. – № 4. – С. 369-373.
24. **Dmitruk, N. L.** Efficiency enhancement of surface barrier solar cells due to excitation of surface plasmon polaritons [Текст] / N. L. Dmitruk, A. V. Korovin, I. B. Mamontova // Semiconductor science and technology. – 2009. – T. 24. – № 12. – С. 125011.
25. **Ditruk, N. L.** Plasmonic photovoltaics: near-field of a metal nanowire array on the interface for solar cell efficiency enhancement [Текст] / N. L. Dmitruk, A.V. Korovin // Semiconductor Science and Technology. – 2013. – V. 28. – N. 5.
26. **Dmitruk, N. L.** Proc. 24th European Photovoltaic Solar Energy Conference [Текст] / N. L. Dmitruk, A. V. Korovin // Hamburg, 2009. – P. 566–569.
27. **Dmitruk, N. L.** Proc. 25th European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition [Текст] / N. L. Dmitruk, A.V. Korovin // Valencia, 2010. – P. 385–388.
28. **Dmitruk, N. L.** Proc. 26th European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition [Текст] / N. L. Dmitruk, A.V. Korovin // Hamburg, 2011. – P. 237–240.
29. **Dmitruk, N. L.** Plasmonic Photovoltaics: Self-Organized Metal Nanowires on the Solar Cell Surface/Interface [Текст] / N. L. Dmitruk, A. V. Korovin, O. Yu. Borkovskaya, A. M. Dmytruk, I. B. Mamontova, S. V. Mamykin // Proc. 27th

- European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition. – Frankfurt, 2012. – P. 408–411.
30. **Tan, H.** Zeman Plasmonic light trapping in thin-film silicon solar cells with improved self-assembled silver nanoparticles [Текст] / H. Tan, R. Santbergen, A. H. M. Smets, M. Zeman // Nano Lett. – 2012. – V. 12(8) . – P. 4070–4076.
31. **Morawiec, S.** Self-assembled silver nanoparticles for plasmon-enhanced solar cell back reflectors: correlation between structural and optical properties [Текст] / S. Morawiec, M. J. Mendes, S. Mirabella, F. Simone, F. Priolo, I. Crupi, Nanotechnology. – 2013 – V. 24 . – P. 265601.
32. **Moulin, E.** Improved light absorption in thin-film silicon solar cells by integration of silver nanoparticles [Текст] / E. Moulin, J. Sukmanowski, P. Luo, R. Carius, F.X.Royer, H. Stiebig, J. // Journal of non-crystalline solids. – 2008. – V. 354 (19-25). – P. 2488-2491.
33. **Hägglund, C.** Electromagnetic coupling of light into a silicon solar cell by nanodisk plasmons [Текст] / C. Hägglund, M. Zäch, G. Petersson, B. Kasemo // Appl. Phys. Lett. 92, 053110. – 2008.
34. **Derkacs, D.** Improved performance of amorphous silicon solar cells via scattering from surface plasmon polaritons in nearby metallic nanoparticles [Текст] / D. Derkacs, S.H. Lim, P. Matheu, W. Mar, E.T. Yu // Appl. Phys. Lett. 89, 093103. – 2006.
35. **Catchpole, K. R.** Surface plasmons for enhanced silicon light-emitting diodes and solar cells [Текст] / K. R. Catchpole, S. Pillai // Journal of Luminescence. – 2006. – V. 121 (2). – P. 315-318.
36. **Pillai, S.** Surface plasmon enhanced silicon solar cells [Текст] / S. Pillai, K. R. Catchpole, T. Trupke, M.A. Green // Journal of applied physics. – 2007. – V. 101 (9). –P. 093105.
37. **Kirkengen, M.** Direct generation of charge carriers in c-Si solar cells due to embedded nanoparticles [Текст] / M. Kirkengen, J. Bergli, Y. M. Galperin // Journal of Applied Physics. – 2007. – V. 102. – P. 093713.

38. **Losurdo, M.** Enhanced absorption in Au nanoparticles/a-Si:H/c-Si heterojunction solar cells exploiting Au surface plasmon resonance [Текст] / M. Losurdo, M. M. Giangregorio, G. V. Bianco, A. Sacchetti, P. Capezzuto, G. Bruno // *Solar Energy Materials & Solar Cells*. – 2009. – V. 93. – P. 1749–1754.
39. **Nakayama, K.** Plasmonic nanoparticle enhanced light absorption in GaAs solar cells [Текст] / K. Nakayama, K. Tanabe, H. A. Atwater // *Appl. Phys. Lett.* – 2008. – V. 93. – P 121904 .
40. **Morfa, A. J.** Plasmon-enhanced solar energy conversion in organic bulk heterojunction photovoltaics [Текст] / A. J. Morfa, K. L. Rowlen, T. H. Reilly III, M. J. Romero, J. van de Lagemaat // *Appl. Phys. Lett.* – 2008. – V. 92. – P 013504.
41. **Kim, S.-S.** Plasmon enhanced performance of organic solar cells using electrodeposited Ag nanoparticles [Текст] / S.-S. Kim, S.-I. Na, J. Jo, D.-Y. Kim, and Y.-C. Nah // *Appl. Phys. Lett.* – 2008. – V. 93. – P. 073307.
42. **Chang, Y.C.** Effects of surface plasmon resonant scattering on the power conversion efficiency of organic thin-film solar cells [Текст] / Y. C. Chang, F. Y. Chou, P. H. Yeh, H. W. Chen, S.-H. Chang, Y. C. Lan, T. F. Guo, T. C. Tsai, C. T. Lee, J. // *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena*. – 2007. – V. 25. – P. 1899.
43. **Liu, K.** Improved photovoltaic performance of silicon nanowire/organic hybrid solar cells by incorporating silver nanoparticles [Текст] / K. Liu, S. Qu, X. Zhang, F. Tan, Z. Wang // *Nanoscale Research Letters*. – 2013. – V. 8. – P. 88.
44. **Kim, K.** Roles of Au and Ag nanoparticles in efficiency enhancement of poly(3-octylthiophene)/C60 bulk heterojunction photovoltaic devices [Текст] / K. Kim, D. L. Carroll // *Appl. Phys. Lett.* – 2005. – V. 87. – P. 203113.
45. **Tong, S. W.** The use of thermal initiator to make organic bulk heterojunction solar cells with a good percolation path [Текст] / S. W. Tong, C. F. Zhang, C. Y. Jiang, G. Liu, Q. D. Ling, E. T. Kang, D. S. H. Chan, C. Zhu // *Appl. Phys. Lett.* – 2008. – V. 453. – P. 73.

46. **Yablonovitch, E.** Cody Intensity enhancement in textured optical sheets for solar cells [Текст] / E. Yablonovitch, G. D. Cody // IEEE Transactions on Electron Devices. – 1982. – V. 29. – P. 300-305.
47. **Yablonovitch, E.** Statistical ray optics [Текст] / E. Yablonovitch // Journal of the Optical Society of America. – 1982. – V. 72. – P. 899-907.
48. **Tiedje, T.** Limiting efficiency of silicon solar cells [Текст] / T. Tiedje, E. Yablonovitch, G. D. Cody, B. G. Brooks // IEEE Transactions on Electron Devices. – 1984. – V. 31. – P. 711-716.
49. **Yu, Z.** Fundamental limit of light trapping in grating structures [Текст] / Z. Yu, A. Raman, S. Fan // Optics Express. – 2010. – V. 18. – P. A366-A380.
50. **Bermel, P.** Improving thin-film crystalline silicon solar cell efficiencies with photonic crystals [Текст] / P. Bermel, C. Luo, L. Zeng, L. C. Kimerling, J. D. Joannopoulos // Optics Express. – 2007. – V. 15. – P. 16986-17000.
51. **Mallick, S B.** Optimal light trapping in ultra-thin photonic crystal crystalline silicon solar cells [Текст] / S. B. Mallick, M. Agrawal, P. Peumans // Optics Express. – 2007. – V. 18. – P. 5691-5706.
52. **Atwater, H. A.** Plasmonics for improved photovoltaic devices [Текст] / H. A. Atwater, A. Polman // Nature Mater. – 2010. – V. 9. – P. 205-213.
53. **Новотный, Л.** Основы нанооптики [Текст] / Л. Новотный, Б. Хехт; М.: Физматлит, 2009. – 484 с.
54. **Климов, В. В.** Наноплазмоника [Текст] / В. В.Климов; М.: Физматлит, 2010; Klimov V. Nanoplasmonics [Текст] / V. Klimov; Boca Raton, FL: CRC Press, Taylor and Francis Group, 2014.
55. **Agranovich, V. M.** Surface Polaritons. Electromagnetic Waves at Surfaces and Interfaces [Текст] / V. M. Agranovich, D. L. Mills (Eds); Amsterdam: North-Holland, 1982. – 717 p.
56. **Panoiu, N. C.** waveguide and plasmon-polariton modes [Текст] / N. C. Panoiu, R. M. Osgood // Optics Letters. – 2007. – V. 32. – P. 2825-2827.

57. **Ferry, V. E.** Plasmonic Nanostructure Design for Efficient Light Coupling into Solar Cells [Текст] / Vivian E. Ferry, Luke A. Sweatlock, D. Pacifici, Harry A. Atwater // Nano Lett. – 2008. – V. 8. – P. 4391-4397.
58. **Spinelli, P.** Plasmonic light trapping in thin-film Si solar cells [Текст] / P. Spinelli, V. E. Ferry, J. van de Groep, M. van Lare, M. A. Verschuuren, R. E. I. Schropp, H. A. Atwater, A. Polman // Journal of Optics. – 2012. – V. 14. – N. 2. – P. 024002.
59. **Pillai, S.** Surface plasmon enhanced silicon solar cells [Текст] / S. Pillai, K. R. Catchpole, T. Trupke, M. A. Greenet // Journal of Applied Physics. – 2007. – V. 101. – P. 093105.
60. **Catchpole, K. R.** Design principles for particle plasmon enhanced solar cells [Текст] / K. R. Catchpole, A. Polman // Appl. Phys. Lett. – 2008. – V. 93. – P. 191113.
61. **Tan, H.** Plasmonic Light Trapping in Thin-film Silicon Solar Cells with Improved Self-Assembled Silver Nanoparticles [Текст] / H. Tan, R. Santbergen, Arno H. M. Smets, M. Zemanet // Nano Lett. – 2012. – V. 12. – P. 4070-4076.
62. **Akimov, Y. A.** Surface Plasmon Enhancement of Optical Absorption in Thin-Film Silicon Solar Cells [Текст] / Y. A. Akimov, K. Ostrikov, E. P. Li // Plasmonics. – 2009. – V. 4. – P. 107-113.
63. **Pfeiffer, T. V.** Plasmonic Nanoparticle Films for Solar Cell Applications Fabricated by Size-selective Aerosol Deposition [Текст] / T. V. Pfeiffer, J. Ortiz-Gonzalez, R. Santbergen, H. Tana, A. Schmidt Ott, M. Zeman, A. H. M. Smets // Energy Procedia. – 2014. – V. 60. – P. 3-12.
64. **Kreibig, U.** Optical properties of metal clusters [Текст] / U. Kreibig, M. Volmer // Berlin: Springer. – 1995.
65. **Grigorchuk, N. I.** Optical and transport properties of spheroidal metal nanoparticles with account for the surface effect [Текст] / N. I. Grigorchuk, P. M. Tomchuk // Phys. Rev. – 2011. – B 84, 085448.
66. G.N. Blackman III, D.A. Genov. Phys. Rev. B 97, 115440 (2018).
67. N.I. Grigorchuk. J. Opt. Soc. Am. B 29, 3404 (2012).

68. **Коротун, А. В.** Оптическое поглощение композита на основе двухслойных металл-диэлектрических сферических наночастиц [Текст] / А.В. Коротун, А.А. Коваль, И. Н. Титов // Журнал прикладной спектроскопии. – 2020. – Т. 87. – №2. – С. 224–232.
69. **Коротун, А. В.** К расчету оптических характеристик и размерных сдвигов поверхностных плазмонов сферических биметаллических наночастиц [Текст] / А.В. Коротун, В.В. Погосов // Физика твердого тела. – 2021. – Т. 63. – №1. – С. 120-131.