

DOI: 10.3969/j.issn.1009-9492.2020.05.002

黄美娇. 柔性透明薄膜掺杂微纳米粒子的光谱特性研究 [J]. 机电工程技术, 2020, 49 (05): 5-7.

柔性透明薄膜掺杂微纳米粒子的光谱特性研究*

黄美娇

(中国科学院 长春光学精密机械与物理研究所, 长春 130033)

摘要: 柔性材料因杨氏模量较小, 在外力作用下易变形而受到广泛研究和应用。聚二甲基硅氧烷(PDMS)是一种高分子聚合物, 并且具有光学透明、化学惰性等特点。Ni在 $0.3 \sim 2 \mu\text{m}$ 具有高吸收性, Al_2O_3 在 $0.4 \sim 0.8 \mu\text{m}$ 具有高反射性。提出将微纳米Ni或 Al_2O_3 粒子掺杂到PDMS薄膜中的结构, 先利用米氏散射理论计算出单个粒子的辐射特性, 再利用蒙特卡洛方法求解整个模型的辐射特性。研究发现, 薄膜模型的光谱特性受粒径影响: 当波长不变时, 掺杂Ni粒子的模型的吸收率与粒子浓度和膜厚成正比; 掺杂 Al_2O_3 粒子的模型的反射率与粒子浓度和膜厚成正比; 2种模型的透射率均与粒子浓度和膜厚成反比。最后根据布格尔定律推出的关系式证明了光谱特性变化的机理。

关键词: PDMS薄膜; 微纳米粒子; 光谱特性; 米氏散射理论; 蒙特卡洛方法

中图分类号: TK124; O43

文献标志码: A

文章编号: 1009-9492(2020)05-0005-03

开放科学(资源服务)标识码(OSID):



Research on Spectral Characteristics of the Flexible Transparent Films Doped with Micro Particles

HUANG Meijiao

(Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics of CAS, Changchun 130033, China)

Abstract: The flexible material whose Young's modulus is small has been widely researched and applied in many fields. It is easy to deform under the external forces. Polydimethylsiloxane (PDMS) is a high polymer having the characteristics of optical transparency and chemical inertia. Ni has high absorptivity, Al_2O_3 has high reflectivity. The PDMS film doped with micro Ni or Al_2O_3 particles was proposed. Mie scattering theory was applied to calculate the radiation characteristics of a single particle, and the Monte Carlo method was used to simulate the radiation characteristics of the whole model. It can be seen that the size of the particle has influence on the spectral characteristics of the film. If the wavelength was constant, the absorptivity of the Ni-doped film and the reflectivity of the Al_2O_3 -doped film were proportional to the film thickness and the volume fraction of the particles, and the transmissivity of both films was inversely proportional to the film thickness or the volume fraction of the particles. Finally, the rules of the spectral characteristics of the films doped with micro particles was verified by the relation derived from bouguer's law.

Key words: PDMS film; micro particles; spectral characteristics; Mie scattering theory; Monte Carlo method

0 引言

柔性材料因对光谱具有可逆动态调控的特点而具有很大的应用潜能, 例如: 对光的透射性可调可应用到车窗设计; 吸收性可调能够应用到墙体设计; 发射性可调在隐身衣的设计和制造上具有重要价值。

国内外学者已经对柔性材料的光谱调控特性进行了大量研究。Kim等^[1]设计了“M-Ink”, 是一种具有弹性的材料, 在磁场力作用下改变结构的周期性, 从而使表面的光谱透射率和反射率发生改变。Zhu等^[2]在水凝胶膜上开圆柱孔, 外界水环境能够改变孔的大小, 孔的大小影响光的透过性。Lee等^[3]在褶皱的弹性体PDMS上镶嵌纳米线, 构成一种可逆调控的光学窗口, 通过拉力改变PDMS褶皱的程度使纳米线的倾斜角度发生改变, 从而实现对光谱透射率的可逆调控。Park等^[4]将材料为硅的纳米柱子周期性排列在聚二甲基硅氧烷薄膜中, 通过机械力改变纳米柱子的排列周期, 导致在结构表面的偏振角上发生改变, 以此实现结构光学特性的可逆动态调控。Liu等^[5]将W掺杂 VO_2 的薄膜沉积在石英基底上, 制备了一种W- VO_2 薄膜, 在温度作

用下, 薄膜的发射率发生改变。Zhang等^[6]用光学涂层技术得到一种Ge(高折射率材料)、ZnS(低折射率材料)交叉叠放到石英基底上的微结构, 整个结构在 $3 \sim 5 \mu\text{m}$ 和 $8 \sim 14 \mu\text{m}$ 具有低发射率。Li等^[7]研究了Sn中掺杂ZnO而成的薄膜结构的红外辐射特性。

聚二甲基硅氧烷(PDMS)是一种高弹性的有机化合物, 具有良好的透光性、化学稳定性和低杨氏模量等特性, 在光学波导^[8]、生物医学^[9]和人造电子皮肤^[10]等领域应用广泛。以PDMS作为基底, 掺杂微纳米粒子, 外界拉伸力能够调节其形变, 从而实现光谱特性的可逆动态调控。

1 基本理论

1.1 建立模型

图1所示为掺杂粒子的PDMS薄膜模型, 在柔性高分子透明材料PDMS中掺杂材料为Ni或 Al_2O_3 的微纳米粒子。由于Ni在 $0.3 \sim 2 \mu\text{m}$ 波长范围内具有较强吸收性, Al_2O_3 在 $0.4 \sim 0.8 \mu\text{m}$ 波长范围内具有较强反射性, 故在PDMS薄膜中分别掺杂Ni粒子和 Al_2O_3 粒子, 能够使薄膜在 $0.3 \sim 2 \mu\text{m}$ 范围内的吸收率和 $0.4 \sim 0.8 \mu\text{m}$ 范围内的反射率发生改变。

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(编号: 61605203); 中国科学院青年创新促进会资助项目(编号: 2015173)

收稿日期: 2020-02-09

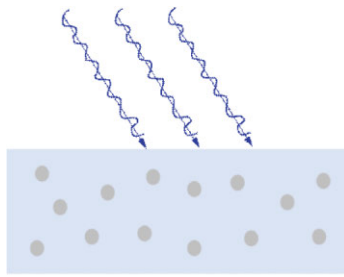


图1 掺杂粒子的PDMS薄膜模型

1.2 数值计算

本文先利用米氏散射理论计算出单个粒子的辐射特性，然后利用蒙特卡洛方法求解辐射传输方程，得到薄膜的辐射特性。

1.2.1 米氏散射理论

米氏散射公式是球形均质粒子对无偏振平面电磁波的麦克斯韦方程的远场解，远场解是从麦克斯韦方程的精确解简化而来的，其衰减因子、散射因子和散射相函数公式^[11]分别为：

$$Q_{\text{ext}} = \frac{2}{\chi^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \operatorname{Re}[a_n + b_n] \quad (1)$$

$$Q_{\text{scat}} = \frac{2}{\chi^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) (|a_n|^2 + |b_n|^2) \quad (2)$$

$$\Phi(\theta) = 2 \frac{i_1 + i_2}{\chi^2 Q_{\text{scat}}} \quad (3)$$

式中： χ 为尺度参数； a_n 与 b_n 称为米氏散射系数。

$$i_1(\chi, m, \theta) = |S_1|^2, i_2(\chi, m, \theta) = |S_2|^2 \quad (4)$$

$$S_1(\theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2n+1)}{n(n+1)} [a_n \pi_n(\cos \theta) + b_n \tau_n(\cos \theta)] \quad (5)$$

$$S_2(\theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2n+1)}{n(n+1)} [b_n \pi_n(\cos \theta) + a_n \tau_n(\cos \theta)] \quad (6)$$

式中： π_n 和 τ_n 称为散射角函数，二者皆和连带的勒让德多项式 P_n 有关。

利用米氏散射理论计算单个粒子的辐射特性。计算代码是在Modest^[11]写的基础上修正得到的。

1.2.2 蒙特卡洛方法

本文所研究的粒子满足独立散射条件^[12]。如果粒子半径为 r_i ， N_i 为单位体积薄膜中粒子的个数，则散射因子、吸收因子和散射相函数的计算式分别为：

$$\sigma_{\text{sa}} = \sum_{i=1}^m \pi r_i^2 N_i Q_{\text{scat},i} \quad (7)$$

$$k_{\text{a}} = \sum_{i=1}^m \pi r_i^2 N_i Q_{\text{abs},i} \quad (8)$$

$$\Phi_{\text{TA}}(\theta) = \frac{1}{\sigma_{\text{sa}}} \sum_{i=1}^m \pi r_i^2 N_i Q_{\text{abs},i} \Phi(r_i, \theta) \quad (9)$$

式中： $Q_{\text{scat},i}$ 、 $Q_{\text{abs},i}$ 和 $\Phi(r_i, \theta)$ 由式(1)~(3)和方程 $Q_{\text{ext},i} = Q_{\text{abs},i} + Q_{\text{scat},i}$ 得出。

求解辐射传输方程^[11]：

$$\frac{dI_{\lambda}}{ds} = k_{\lambda} I_{\lambda} - (k_{\lambda} + \sigma_{\text{sa}}) I_{\lambda} + \frac{\sigma_{\text{sa}}}{4\pi} \int_{\Omega} I_{\lambda}(\hat{s}_i) \Phi_{\lambda}(\hat{s}, \hat{s}_i) d\Omega_i \quad (10)$$

用蒙特卡洛方法求解辐射传输方程时，能量束的数量越多，越接近精确解。文中的每个算例用1 000 000个能量束，为验证所选取的能量束数量对蒙特卡洛方法的计算精度没有影响，本文设定薄膜厚度 $s=20 \mu\text{m}$ ；掺杂的Ni粒子直径 $d=$

$1 \mu\text{m}$ ；体积分数 $f_v=1.5\%$ 。对能量束分别为1 000 000和10 000 000的2个薄膜模型的计算结果进行比较，发现两者的吸收率曲线吻合得很好，故1 000 000个能量束足以满足计算精度，如图2所示。本文用“散射或者反射能量份额分布^[13-14]”方法来追踪能量束的路径。

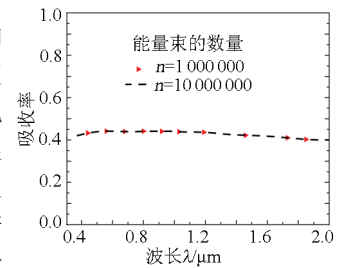


图2 能量束的数量对蒙特卡洛计算精度的影响

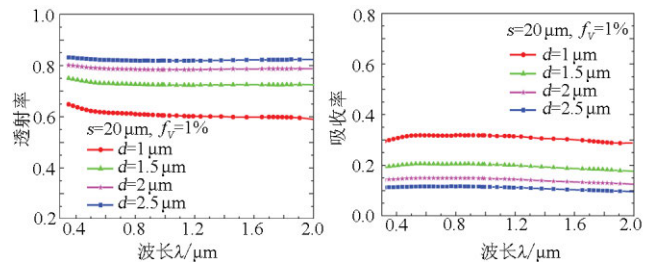
2 结果分析

2.1 粒径对光谱特性的影响

本节分别讨论了PDMS薄膜中掺杂Ni和 Al_2O_3 纳米粒子，粒径对薄膜模型光谱特性的影响。

2.1.1 Ni粒径

不同Ni粒径下的薄膜模型的光谱透射率和吸收率如图3所示，薄膜厚度 $s=20 \mu\text{m}$ ，粒子的体积分数 $f_v=1\%$ 。如图3(a)所示，薄膜模型的透射率在 $0.3 \sim 2 \mu\text{m}$ 波段范围内随波长变化十分平缓，同一波长下的透射率随粒径增大而增大；如图3(b)所示，模型的吸收率在 $0.3 \sim 2 \mu\text{m}$ 波段范围内的变化也十分平缓，同一波长下的吸收率随粒径增大而减小。掺杂Ni粒子的薄膜模型的反射率几乎为0，不再讨论。



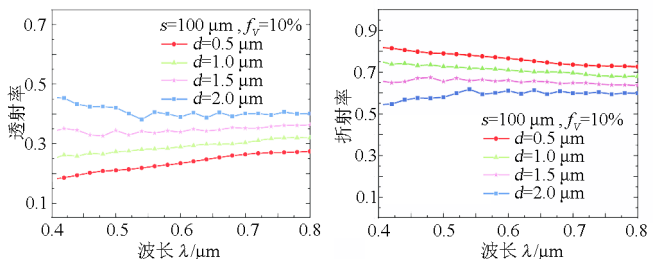
(a) 光谱透射率

(b) 光谱吸收率

图3 不同Ni粒径下薄膜模型的光谱特性

2.1.2 Al_2O_3 粒径

图4为掺杂 Al_2O_3 粒子的薄膜模型在 $0.4 \sim 0.8 \mu\text{m}$ 波段范围内的透射率和反射率随粒径的变化规律。薄膜厚度 $s=100 \mu\text{m}$ ，粒子的体积分数 $f_v=10\%$ 。如图4(a)所示，当波长一定时，模型的透射率随粒径增大而增大；如图4(b)所示，当波长一定时，模型的反射率随粒径增大而减小。掺杂 Al_2O_3 粒子的薄膜模型的吸收率几乎为0，不再讨论。



(a) 光谱透射率

(b) 光谱反射率

图4 不同 Al_2O_3 粒径下薄膜模型的光谱特性

2.2 体积分数对光谱特性的影响

本节分别讨论了PDMS薄膜中掺杂Ni和 Al_2O_3 纳米粒子的

体积分数对薄膜模型光谱特性的影响。

2.2.1 Ni粒子的体积分数

图5为掺杂Ni粒子的薄膜模型在0.3~2 μm波段范围内的透射率和吸收率随粒子浓度的变化规律。薄膜厚度 $s=20\text{ }\mu\text{m}$, 粒径 $d=1\text{ }\mu\text{m}$ 。如图5(a)所示, 薄膜模型的透射率随波长变化十分平缓, 同一波长下的透射率随体积分数的增大而减小; 如图5(b)所示, 模型的吸收率随波长变化也十分平缓, 同一波长下的吸收率随体积分数增大而增大。

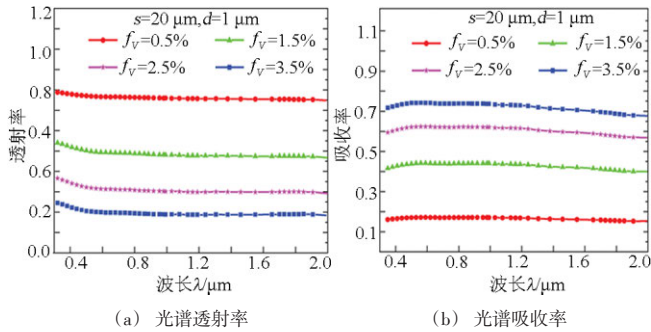


图5 不同浓度Ni粒子的薄膜模型的光谱特性

2.2.2 Al₂O₃粒子的体积分数

图6所示为掺杂Al₂O₃粒子的薄膜模型在0.4~0.8 μm波段范围内的透射率和反射率随粒子浓度的变化规律。薄膜厚度 $s=100\text{ }\mu\text{m}$, 粒径 $d=1\text{ }\mu\text{m}$ 。如图6(a)所示, 当波长一定时, 模型的透射率随粒子体积分数的增大而减小; 如图6(b)所示, 当波长一定时, 模型的反射率随粒子体积分数的增大而增大。

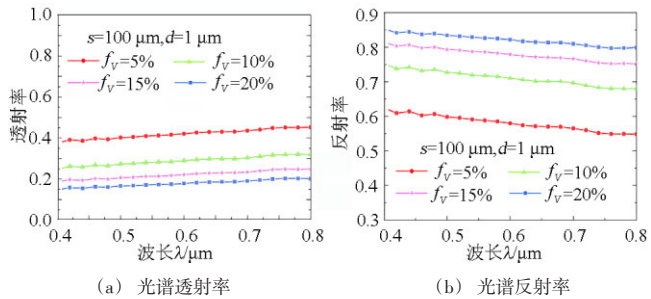


图6 不同浓度Al₂O₃粒子的薄膜模型的光谱特性

2.3 膜厚对光谱特性的影响

本节分别讨论了掺杂Ni和Al₂O₃纳米粒子的薄膜厚度对模型光谱特性的影响。

2.3.1 掺杂Ni粒子的薄膜模型的厚度

图7所示为掺杂Ni粒子的薄膜模型在0.3~2 μm波段范围内的透射率和吸收率随膜厚的变化规律。粒径 $d=1\text{ }\mu\text{m}$, 粒子

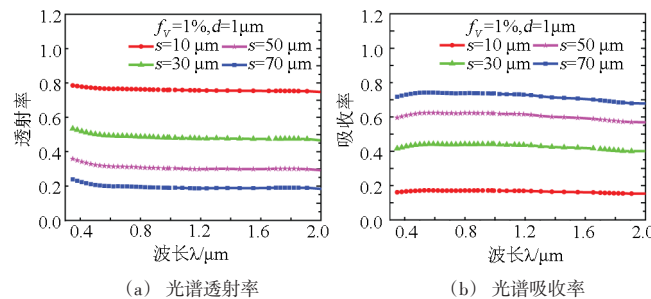


图7 掺杂Ni粒子的薄膜模型的光谱特性随膜厚变化规律

的体积分数 $f_v=1\%$ 。如图7(a)所示, 模型的透射率随波长变化十分平缓, 同一波长下的透射率随膜厚的增大而减小; 如图7(b)所示, 模型的吸收率随波长变化也十分平缓, 同一波长下的吸收率随膜厚的增大而增大。

2.3.2 掺杂Al₂O₃粒子的薄膜模型的厚度

图8所示为掺杂Al₂O₃粒子的薄膜模型在0.4~0.8 μm波段范围内的透射率和反射率随膜厚的变化规律。粒径 $d=1\text{ }\mu\text{m}$, 粒子的体积分数 $f_v=10\%$ 。如图8(a)所示, 当波长一定时, 模型的透射率随膜厚的增大而减小; 如图8(b)所示, 当波长一定时, 模型的反射率随膜厚的增大而增大。

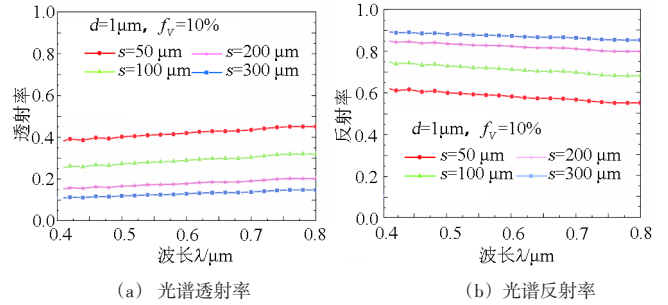


图8 掺杂Al₂O₃粒子的薄膜模型的光谱特性随膜厚变化规律

3 结果验证

通过以上结果可发现: 掺杂微纳米粒子的柔性薄膜模型的光谱特性受粒径影响。当波长不变时, 掺杂Ni粒子的模型的吸收率与粒子浓度和膜厚成正比; 掺杂Al₂O₃粒子的模型的反射率与粒子浓度和膜厚成正比; 2种模型的透射率均与粒子浓度和膜厚成反比。下面依据布格尔定律^[12]的表达式进行验证。

由布格尔定律得:

$$\tau_a = \exp(-k_{ca}s) \quad (11)$$

式中: τ_a 为光谱透射率; s 和 k_{ca} 分别为介质中射线的行程长度(薄膜厚度)和衰减系数。

k_{ca} 可以表示为:

$$k_{ca} = NC_{ca} \quad (12)$$

式中: C_{ca} 为光谱衰减截面, 且只与波长和粒径有关; N 为粒子的数密度。

结合粒子的体积分数 f_v 与数密度 N 之间的关系式, 得:

$$\tau_a = \exp\left(-\frac{3s \cdot f_v \cdot C_{ca}}{4\pi r^3}\right) \quad (13)$$

光谱吸收率 α_a 、反射率 r_a 和透射率 τ_a 之间的关系为:

$$\alpha_a + r_a + \tau_a = 1 \quad (14)$$

掺杂Ni粒子的柔性薄膜, 光谱吸收率为:

$$\alpha_a = 1 - \exp\left(-\frac{3s \cdot f_v \cdot C_{ca}}{4\pi r^3}\right) \quad (15)$$

掺杂Al₂O₃粒子的柔性薄膜, 光谱反射率为:

$$r_a = 1 - \exp\left(-\frac{3s \cdot f_v \cdot C_{ca}}{4\pi r^3}\right) \quad (16)$$

由式(13)、(15)和(16)可得: 上节得到的变化规律正确。

4 结束语

本文设计了一种在PDMS柔性透明材料中掺杂微纳米Ni或Al₂O₃粒子的薄膜模型, 先利用米氏散射理论计算出单个粒

6 结束语

(1) 该控制系统主要是基于以人工控制为基础的掘进机截割参数, PLC 编程控制器则作为核心技术应用于自动化控制系统中, 采用分阶段控制的办法来调整截割臂摆动的速度及采取慢启慢停加速控制的方法。

(2) 该控制系统所包含的硬件器件主要有电源、控制板、转化器等, 处于 PLC 控制技术的环境下, 对于摇臂截割的速度, 可以运用三阶段电压来进行调整, 以完成截割的自动化控制。

(3) 在自动化控制的背景下, EBZ200 型悬臂式掘进机所截割的巷道具有较好的质量, 减少了工作人员的工作量, 确保了巷道生产的安全性, 提升了巷道的掘进效率。

参考文献:

- [1] 王焱金, 季清华, 白雪峰, 等. 掘进机截割部液压系统分析[J]. 机床与液压, 2018(01): 79-81.
- [2] 王辉. 掘进机截割主轴用机械密封可靠性分析[J]. 煤矿机械, 2017(02): 56-58.

(上接第 7 页)

子的辐射特性, 再利用蒙特卡洛方法求解得到模型的辐射特性。研究发现, 薄膜模型的光谱特性受粒径影响: 当波长不变时, 掺杂 Ni 粒子的模型的吸收率与粒子浓度和膜厚成正比; 掺杂 Al_2O_3 粒子的模型的反射率与粒子浓度和膜厚成正比; 2 种模型的透射率均与粒子浓度和膜厚成反比。本文最后根据布格定律推出的关系式证明了光谱特性变化的机理。这种掺杂微纳米粒子的柔性薄膜结构, 其光谱特性可以通过外界拉伸力进行可逆调控, 故在军民事领域具有很大的应用潜能。

参考文献:

- [1] Kim H, Ge J, Kim J, et al. Structural colour printing using a magnetically tunable and lithographically fixable photonic crystal[J]. Nature Photonics, 2009(3): 534-540.
- [2] Zhu X L, Wu G, Dong R, et al. Capillarity induced instability in responsive hydrogel membranes with periodic hole array[J]. Soft Matter, 2012(8): 8088-8093.
- [3] Lee E, Zhang M, Cho Y, et al. Tilted pillars on wrinkled elastomers as a reversibly tunable optical window[J]. Advanced Materials, 2014, 26(24): 4127-4133.
- [4] Park W, Lee J-B. Mechanically tunable photonic crystal structure[J]. Applied Physics Letters, 2004(85): 4845-4847.
- [5] Liu F, Shao XP, Han PL, et al. Detection of infrared stealth aircraft through their multispectral signatures [J]. Optical Engineering, 2014, 53(9): 094101.
- [6] Zhang W, Xu C, Zhang J, et al. Infrared spectrally selective low emissivity from Ge/ZnS one-dimensional heterostructure photonic crystal[J]. Optical Materials, 2014(37): 343-346.
- [7] Li YQ, Shen YZ, Du FL. Infrared emissivity properties of Sn doped ZnO films deposited by sol-gel method[J]. Materials Research

- [3] 王继玲. 基于故障树的掘进机截割部摆动故障分析[J]. 煤炭与化工, 2015(03): 75-77.
- [4] 刘洋. 掘进机截割机构截割特性的优化研究[J]. 机械管理开发, 2019(01): 44-46.
- [5] 王国柱. 采煤掘进机截割部问题分析及改进[J]. 矿业装备, 2018(06): 33-35.
- [6] 毛清华, 陈磊, 闫昱州, 等. 煤矿悬臂式掘进机截割头位置精确控制方法[J]. 煤炭学报, 2018(10): 31-33.
- [7] 李云艳. 对掘进机截割头的设计改进分析[J]. 科技创新导报, 2017(08): 71-73.
- [8] 彭天好, 汲方林, 许贤良, 等. 横轴式掘进机截割头运动参数优化及载荷模拟分析[J]. 矿山机械, 2016(09): 81-83.

第一作者简介: 曲广财 (1990-), 男, 吉林辽源人, 大学本科, 助理工程师, 研究领域为井巷工程。

(编辑: 王智圣)

search Innovations, 2014(18): 57-62.

- [8] Cai D K, Neyer A, Kuckuk Rand Heise H M. Optical absorption in transparent PDMS materials applied for multimode waveguides fabrication[J]. Optical Materials, 2008, 30(7): 1157-1161.
- [9] Mata A, Fleischman A J, Roy S. Characterization of Polydimethylsiloxane (PDMS) Properties for Biomedical Micro/Nanosystems[J]. Biomedical Microdevices, 2005, 7(4): 281-293.
- [10] Tee B C, Chortos A, Berndt A, et al. A skin-inspired organic digital mechanoreceptor[J]. Science, 2015, 350(6258): 313-316.
- [11] Modest M F. Radiative Heat Transfer. [M]. second edition San Diego: Academic Press, 2003.
- [12] 余其铮. 辐射换热原理[M]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学出版社, 2000.
- [13] Zhou H C, Cheng Q, Huang Z F, et al. The influence of anisotropic scattering on the radiative intensity in a gray, plane-parallel medium calculated by the DRESOR method[J]. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2007, 104(1): 99-115.
- [14] Huang Z, Zhou H, Cheng Q, et al. Solution of radiative intensity with high directional resolution in three-dimensional rectangular enclosures by DRESOR method[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2013, 60(1): 81-87.

作者简介: 黄美娇 (1992-), 女, 内蒙古赤峰人, 硕士研究生, 研究领域为微纳米材料的辐射特性和航天热控等。

(编辑: 刁少华)