

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ЦВЕТОВ НА ОСНОВЕ
МАССИВОВ СФЕРИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ**

**Бизюкова А. А. (ГФМЛ 30), Семенов А.А. (ФТШ),
Симаков А.А. (ФТШ), Шапля О.Е. (ФТШ)**
Научный руководитель – Пантюхина П.А. (ИТМО)

Введение. Яркие цвета, которые наблюдаются в окраске бабочек, птиц, осьминогов и рыб, обусловлены структурными цветами, возникающими в результате взаимодействия света с наноструктурами, покрывающими тела животных. Механизмы образования структурных цветов могут быть различными, в основном этот эффект возникает из-за дифракции, интерференции на тонких плёнках, в фотонных кристаллах и при многократном рассеянии. В данной работе рассмотрены структуры, состоящие из наноразмерных сферических частиц диэлектрика, расположенных в один слой на подложке. Для моделирования структурных цветов на основе наночастиц мы учитывали такие параметры, как размер частиц, их оптические свойства, расположение, а также материал подложки. Подобные исследования позволяют предсказать спектральные характеристики структурных цветов и оптимизировать дизайн наноструктур для конкретных приложений [1]. Исследование структурных цветов способствует развитию передовых технологий, таких как создание новых оптических устройств, дисплеев высокого разрешения и датчиков [2].

Основная часть. В данной работе проведено численное моделирование наноструктур, образованных однослойными массивами сферических диэлектрических частиц на подложке. Расчеты проводились в Python-библиотеке Smuthi, позволяющей рассчитывать спектры рассеяния конфигураций массивов частиц. Результатом вычисления являлись графики зависимости интенсивности рассеянного света от длины волны (полное сечение рассеяния и зависимость для конкретных значений полярного угла) при падении на структуру плоской волны. После этого график переводился в воспринимаемый глазом цвет при помощи CIE-диаграммы. В работе исследовалась зависимость описанных выше параметров от материала, радиуса и относительного расположения частиц.

В частности, найдены спектры рассеяния для структур с

- 1) Различными типами периодических решёток (прямоугольной, гексагональной плотно упакованной) – на примере частиц Si радиусом 85 и 125 нм, а также TiO₂ – 80 и 180 нм. Отдельно исследован на широком диапазоне радиусов частиц случай с прямоугольной (радиус 25 нм-300 нм) и треугольной (радиус 60 нм – 260 нм) решеткой.
- 2) Введением структурного беспорядка в периодической прямоугольной решётке – на примере частиц SiO₂ радиуса 100 нм - получена зависимость от степени беспорядка;
- 3) Полностью неупорядоченным распределением наночастиц - в качестве примера рассмотрен кремний с радиусом частиц 65 нм.
- 4) Смесью наночастиц из разных материалов, например, Ti и SiO₂

Далее полученные спектры были переведены в RGB и найдены в цветовом пространстве CIE для дальнейшего анализа проявившихся эффектов.

Также был проведён эксперимент по получению спектров образцов из стеклянных наночастиц (диаметром 259 нм) на кремниевой подложке. Экспериментальные спектры были сопоставлены с численными.

Выводы. С помощью данных численного моделирования проведен анализ взаимосвязи между параметрами наноструктуры и полученным спектром рассеяния. Показаны закономерности, возникающие в изменении структурного цвета при увеличении радиуса частиц, возникновении структурного беспорядка и наличии примесей частиц из других материалов. Численный метод был верифицирован с помощью экспериментальных данных.

Список использованных источников:

1. Chen G., Hong W. Mechanochromism of structural-colored materials //Advanced Optical Materials. – 2020. – Т. 8. – №. 19. – С. 2000984.
2. Fu Y. et al. Structural colors: from natural to artificial systems //Wiley Interdisciplinary Reviews: Nanomedicine and Nanobiotechnology. – 2016. – Т. 8. – №. 5. – С. 758-775.