

UNIVERZA V LJUBLJANI  
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO  
ODDELEK ZA FIZIKO

Miha Čančula

**Modeliranje širjenja svetlobe vzdolž  
ograjenih tekočekristalnih defektnih linij**

---

Magistrsko delo

MENTOR: prof. dr. Slobodan Žumer  
SOMENTOR: doc. dr. Miha Ravnik

Ljubljana, 2013

## **Izjava**

Podpisani Miha Čančula, rojen 10. 4. 1989 v Postojni, izjavljam:

- da sem magistrsko delo z naslovom *Modeliranje širjenja svetlobe vzdolž ograjenih tekočekristalnih defektnih linij* izdelal samostojno pod mentorstvom prof. dr. Slobodana Žumra in somentorstvom doc. dr. Miha Ravnika in
- da Fakulteti za matematiko in fiziko Univerze v Ljubljani dovoljujem objavo elektronske oblike svojega dela na spletnih straneh.

Ljubljana, 4. 9. 2013

Miha Čančula

## Povzetek

Magistrsko delo obravnava širjenje svetlobe po tekočekristalnih vlaknih z različnimi direktorskimi profili. Opisan je razvoj numerične metode za modeliranje propagacije elektromagnetnih polj skozi optično anizotropna sredstva. Postopek reševanja temelji na podlagi metode končnih differenc v časovni domeni. Tekoči kristal je modeliran kot enoosno dvolomna snov s krajevno odvisnostjo optične osi. Izračunana je prepustnost plasti tekočega kristala med prekrižanima polarizatorjema, fotonski prepovedani pas v periodični strukturi in lastni načini širjenja svetlobe v optično anizotropnem vlaknu. Prepoznani so lastni načini valovanja v tekočekristalnih vlaknih z različnimi defekti vzdolž osi. Opisane so možne polarizacije svetlobe, ki bi jih lahko dobili s svetjenjem skozi takšna vlakna.

**Ključne besede:** nematski tekoči kristal, elektromagnetno valovanje, dvolomnost, polarizacija svetlobe.

## Abstract

Propagation of light through liquid crystal fibres with various director profiles is explored. The development of a numerical method for modelling the propagation of electromagnetic fields through optically anisotropic media is described. Solving is based on the finite-difference time-domain method. The liquid crystal is modelled as a uniaxial birefringent material with a position-dependent optical axis. Transmittivity of a liquid crystal layer between crossed polarizers, photonic band gap, and eigenmodes of an anisotropic fibre are calculated. Eigenmodes of liquid crystal fibres with various defects along the axis are identified. Possible polarizations of light that could be achieved by shining through such fibres are described.

**Keywords:** nematic liquid crystal, electromagnetic wave, birefringence, light polarization.

**PACS:** 42.70.Df, 61.30.-v, 61.30.Jf

**Smer študija:** računalniška fizika



# Kazalo

---

<b>1 Uvod</b>	<b>7</b>
<b>2 Tekoči kristali</b>	<b>9</b>
2.1 Tekočekristalne mezofaze . . . . .	9
2.2 Orientacijski red . . . . .	9
2.3 Deformacije direktorja in prosta energija . . . . .	11
2.4 Defekti . . . . .	13
2.5 Direktor v cilindrični kapilari . . . . .	15
<b>3 Elektromagnetno valovanje</b>	<b>17</b>
3.1 Maxwellove enačbe v neizotropnem sredstvu . . . . .	17
3.2 Dvolomnost . . . . .	17
3.3 Defekti v polarizaciji svetlobe . . . . .	18
3.4 Dielektrični tenzor v tekočem kristalu . . . . .	19
3.5 Povezava med defekti v tekočem kristalu in defekti v optičnem polju . . . . .	20
<b>4 Numerična metoda</b>	<b>23</b>
4.1 Mreža . . . . .	23
4.2 Postopek reševanja . . . . .	25
4.3 Izvor valovanja . . . . .	26
4.4 Robni pogoji . . . . .	27
<b>5 Primeri uporabe metode</b>	<b>31</b>
5.1 Prazen prostor . . . . .	31
5.2 Lom in odboj . . . . .	32
5.3 Uniformen direktor . . . . .	33
5.4 Periodična modulacija . . . . .	33
5.5 Dvolomno vlakno . . . . .	36
5.6 Robni pogoji . . . . .	36
<b>6 Širjenje laserskega sunka</b>	<b>39</b>
6.1 Radialni profil direktorja . . . . .	39
6.2 Hiperbolični profil direktorja . . . . .	40
6.3 Defekti s polovično močjo . . . . .	41

6.4	Splošne zakonitosti . . . . .	41
<b>7</b>	<b>Stalna laserska svetloba</b>	<b>45</b>
7.1	Radialni profil direktorja . . . . .	45
7.2	Hiperbolični profil direktorja . . . . .	45
7.3	Defekti z necelo močjo . . . . .	47
7.4	Radialno polarizirana svetloba . . . . .	48
<b>8</b>	<b>Zaključek</b>	<b>51</b>
<b>9</b>	<b>Literatura</b>	<b>53</b>

# 1

## Uvod

---

Tekoči kristali so mehke snovi, ki združujejo lastnosti kristalov in tekočin[1]. Njihova najpomembnejša optična lastnost je dvolomnost, zaradi česar so osrednji optično aktivni materiali v sodobni optiki in fototniku[2].

Praviloma so tekoči kristali sestavljeni iz paličastih ali diskastih molekul. Položaji gradnikov nimajo reda dolgega dosega, ali pa ta red ne drži v vseh treh dimenzijah, zato se snov obnaša kot tekočina. Imajo pa red dolgega dosega v orientaciji gradnikov, iz katerega izvira dvolomnost. Preferenčna orientacija gradnikov v tekočem kristalu se spreminja na velikostnih skalah, mnogo večjih od velikosti molekul, ampak primerljivih z valovno dolžino vidne svetlobe. Za razliko od običajnih kristalov lahko orientacijski red vsilimo z obdelavo površine ali zunanjimi polji. Zaradi možnosti zunanjega nadzora so tekoči kristali ključnega pomena v mnogih optičnih napravah.

Orientacijski red v tekočih kristalih makroskopsko opišemo s preferenčno orientacijo oz. direktorjem  $\mathbf{n}$  in stopnjo reda  $S$ . Na prosto energijo in s tem na ureditev tekočega kristala vplivajo krajevno spreminjanje direktorja, temperatura in dielektrična interakcija. Tekoči kristali se obnašajo kot elastični medij, na katerega lahko vplivamo z zunanjimi polji. Z določeno izbiro robnih pogojev, zunanjih polj ali delcev v tekočem kristalu lahko vsilimo defekte. To so področja zmanjšanega reda, kjer direktor ni definiran. V treh dimenzijah ločimo točkaste in linijske defekte.

Dvolomnost je lastnost snovi, v kateri je lomni količnih odvisen od smeri polarizacije svetlobe[3]. Večina dvolomnih snovi je enoosnih, kar pomeni, da obstaja ena izredna os z različnim lomnim količnikom, ostali dve pravokotni smeri pa sta enakovredni. Tipične enoosne snovi so kristali s tetragonalno ali heksagonalno mrežo, kjer optična os enaka po celiem kristalu. V tekočem kristalu z orientacijskim redom os dvolomnosti sledi orientaciji gradnikov. Ti so še posebej zanimivi, saj se direktor in s tem dvolomnost spreminja s krajem, nadzorujemo pa jo lahko tudi z zunanjimi vplivi. Optična anizotropija tekočih kristalov izhaja iz oblike gradnikov, ki so v večini primerov paličaste molekule.

Dvolomnost tekočih kristalov ponuja številne možnosti uporabe v optičnih napravah. Najbolj znani so tekočekristalni zasloni, kjer z zunanjim električnim poljem spremimo orientacijski red in s tem prepustnost vsake točke na zaslonu. Zaradi občutljivosti

na električno polje se tekoči kristali uporabljajo v različnih elektrooptičnih napravah, na primer v nastavljivih filtrih. Občutljivost orientacijskega reda na temperaturo omogoča uporabo v termometrih. Sprememba temperature vpliva na količino in barvo prepuščene svetlobe, zato so takšni termometri primerni za iskanje vročih točk v industrijskih napravah[4]. V zadnjem času so veliko pozornosti deležni tekočekristalni laserji, ki izkoriščajo pojav fotonskega prepovedanega pasu v periodičnih strukturah[5, 6]. Zanimiva je tudi uporaba tekočih kristalov v napravah, ki spremiščajo polarizacijo svetlobe. Poleg linearne in eliptične polarizacije lahko z njimi dosežemo tudi osno simetrično polarizacijo, torej radialno ali azimutalno[7, 8].

Obstaja več metod za modeliranje propagacije svetlobe skozi anizotropne snovi. Jonesov vektor predstavi električno polje svetlobe, ki se širi v smeri  $z$ , kot vektor s komponentama v smereh  $x$  in  $y$ , med katerima je lahko tudi fazni zamik. S takšnim zapisom lahko opišemo linearno, krožno ali eliptično polarizirano svetlubo[2]. Optično aktivne snovi, kot so polarizatorji in plasti tekočega kristala, so predstavljeni z matrikami velikosti  $2 \times 2$ , ki delujejo na vektor  $(E_x, E_y)$ . Za opis delno polarizirane svetlobe moramo opis razširiti na Stokesove vektorje s štirimi komponentami, naprave pa so opisane z Muellerjevimi matrikami velikosti  $4 \times 4$ . Jonesova in Muellerjeva metoda sta uporabni v sistemih, kjer je os dvolomnosti pravokotna na smer širjenja valovanja, ne pa v tekočih kristalih. Za modeliranje anizotropnih snovi je bolj primerna Berremanova metoda[9, 10], ki prav tako opiše valovanje kot vektor s štirimi komponentami. Pri tej metodi je svetloba predstavljena s transverzalnimi komponentami električnega in magnetnega polja.

Vse naštete metode uporabljajo poenostavljen opis svetlobe. V zadnjem času so računalniki že dovolj zmogljivi, da lahko opišemo svetlobo direktno z vektorjem električnega in magnetnega polja po celotnem prostoru. Opis polja vsebuje vseh šest komponent električnega in magnetnega polja, časovni razvoj pa podajajo Maxwellove enačbe. Takšen pristop je računsko mnogo bolj zahteven, omogoča pa modeliranje širjenja svetlobe po zapletenih strukturah[11, 12].

V teoretičnem delu te naloge je razložena osnovna teorija ureditve tekočih kristalov in njihove optične lastnosti. Navedene so Maxwellove enačbe, ki opisujejo širjenje svetlobe skozi anizotropno snov. Poseben poudarek je na dvolomnosti. V tretjem poglavju je predstavljena numerična metoda, s katero sem modeliral širjenje svetlobe skozi tekočekristalne strukture na podlagi Maxwellovih enačb. Opisana je diskretizacijska mreža, ki je primerna za obravovo optično anizotropnih snovi, naštetih je nekaj preizkusov pravilnosti izbrane metode. Vključeni so preizkusi od najbolj enostavnih, širjenje ravnega vala po praznem prostoru, do bolj zapletenih fotonskih kristalov in tekočekristalnih vlaken. Rezultati prikazujejo propagacijo zelo kratkih laserskih sunkov skozi tekočekristalna vlakna z različnimi direktorskimi profili. Metoda napove razcep sunka v dva lastna načina, ki zadostita tako simetriji direktorja kot tudi simetriji začetne polarizacije svetlobe. Opisana je tudi propagacija stalne laserske svetlobe, ki je bolj primerna za eksperimentalno opazovanje, s katero lahko pridobimo različne profile polarizacije svetlobe, na primer radialno polarizacijo.

# 2

## Tekoči kristali

---

### 2.1 Tekočekristalne mezofaze

Tekoči kristali so mehke snovi, ki združujejo lastnosti kristalov in tekočin[1]. Praviloma so tekoči kristali sestavljeni iz paličastih ali diskastih molekul, tekočekristalne mezofaze pa tvorijo tudi segmenti DNK, molekule nekaterih virusov in primerni koloidni delci. Položaji gradnikov nimajo reda dolgega dosega v vseh smereh, zato se snov obnaša kot tekočina. Tekoči kristali imajo orientacijski red dolgega dosega, lahko pa imajo tudi delni pozicijski red, na primer ureditev molekul v plasti. Tekočekristalne mezofaze se pojavijo pri določeni temperaturi ali koncentraciji molekul.

Tekoče kristali delimo na večje mezofaze glede na orientacijski in pozicijski red gradnikov. Nematski tekoči kristali imajo orientacijski red dolgega dosega, ne pa tudi pozicijskega. Matematično lahko takšen red opišemo z direktorjem  $\mathbf{n}$  in stopnjo reda  $S$ . Smektički imajo pozicijski red v eni smeri, tako da se gradniki uredijo v plasti, znotraj katerih se snov obnaša kot dvodimensionalna tekočina. Če je direktor pravokoten na ravnino plasti, je to mezofaza Sm A, v nasprotnem primeru pa Sm C.

Tekočekristalne mezofaze se med seboj razlikujejo tudi po orientacijskem redu. Priblizno 50% molekul tekočemu kristalu vsili lasten zvoj, tako da se preferenčna smer orientacijskega reda s krajem spreminja. Glede na moč tega zvoja snov tvori kiralno nematsko fazo, kjer je zvoj le v eni smeri, ali modre faze, kjer je zvoj prisoten v vseh smereh. Orientacija molekul v nekaj najpogostejših tekočekristalnih mezofazah je prikazana na sliki 2.1. Poleg naštetih obstaja še veliko različnih mezofaz z različnim orientacijskim in pozicijskim redom.

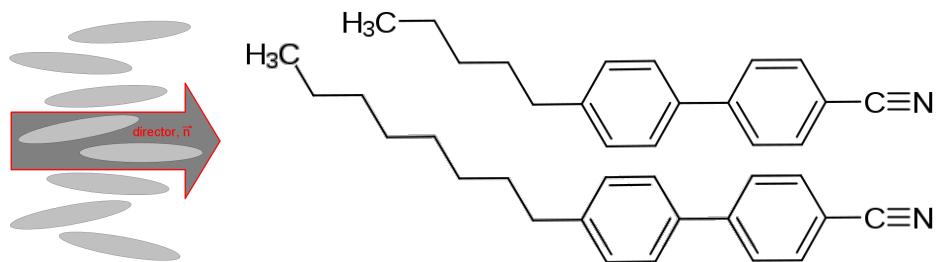
### 2.2 Orientacijski red

V vseh tekočekristalnih mezofazah imajo gradniki orientacijski red dolgega dosega. Definiramo lahko enotski vektor  $\mathbf{n}$ , ki določa povprečno smer gradnikov in ga imenujemo direktor. Direktor ni pravi vektor, saj v tekočem kristalu ne ločimo med smerjo  $\mathbf{n}$  in  $-\mathbf{n}$ . Tudi če sami gradniki nimajo takšne simetrije, jo imajo njihove fluktuacije, zato



**Slika 2.1** Shematski prikaz treh najpogostejših tekočekristalnih mezofaz: (a) nematik, (b) kiralni nematic ali holesterik in (c) smektik[13].

lahko ureditev dobro opišemo z direktorjem[14].



**Slika 2.2** Lev: Gradniki imajo različne orientacije, preferenčno smer pa poda direktor. Desno: Strukturni formuli molekul 5CB (zgoraj) in 8CB (spodaj)[15]

Orientacijski red dolgega dosega je tipično realiziran s paličastimi gradniki. Najpogosteje se uporabljo organske molekule z dvema benzenovima obročema, na katera so vezane različne skupine. Primera takšnih molekul sta 4-ciano-4'-pentilbifenil (5CB) in 4-ciano-4'-oktilbifenil (8CB), katerih strukturni formuli sta prikazani na Sliki 2.2. Velikosti takšnih molekul so nekaj nanometrov.

Direktor  $\mathbf{n}$  podaja povprečno smer gradnikov, ne pa dejanske orientacije posameznih gradnikov. Zato uvedemo še stopnjo reda  $S$  (*angl. degree of order*), ki nam pove, koliko smeri molekul v povprečju odstopajo od direktorja. Zaradi simetrije  $\mathbf{n} \leftrightarrow -\mathbf{n}$  ne moremo vzeti kar povprečne vrednosti kota med gradnikom in direktorjem, saj je ta vrednost enaka nič. Namesto tega uporabimo povprečni kvadrat kota, ki je ekvivalenten kvadrupolnemu momentu[16]

$$S = \frac{1}{2} (3\langle \cos^2 \vartheta \rangle - 1), \quad (2.1)$$

kjer je  $\vartheta$  kot med osjo gradnika in direktorjem,  $\langle \rangle$  pa prostorsko ali časovno povprečje. Pri takšni definiciji ima popolnoma urejen tekoči kristal, kjer so vsi gradniki vzporedni z direktorjem, vrednost  $S = 1$ , povsem neurejen tekoči kristal z naključnimi orientacijami molekul pa  $S = 0$ . V Landauovi teoriji faznih prehodov je ureditveni parameter neka količina, ki je v eni fazi enaka nič, v drugi pa od nič različna. Zgoraj definirana stopnja reda  $S$  je tako primeren ureditveni parameter za prehod med izotropno tekočino in tekočekristalno fazo[1].

Direktor in nematsko stopnjo reda lahko hkrati opišemo z eno tenzorsko količino. V ta namen uvedemo tenzor ureditvenih parametrov  $Q_{ij}$  kot

$$Q_{ij} = \frac{S}{2}(3n_i n_j - \delta_{ij}) + \frac{P}{2}(e_i^{(1)} e_j^{(1)} - e_i^{(2)} e_j^{(2)}), \quad (2.2)$$

kjer sta  $\mathbf{e}^{(1)}$  in  $\mathbf{e}^{(2)}$  enotska vektorja, pravokotna na  $\mathbf{n}$  in med seboj. Uvedli smo še biaksialnost  $P$ , ki je neničelna, če fluktuacije molekul niso simetrične na vrtenje okrog direktorja. V tem primeru imamo orientacijski red tudi v sekundarni osi, ki je pravokotna na direktor in jo imenujemo sekundarni direktor. Parameter  $P$  ima podoben pomen kot  $S$  in nam pove, kako dobro so gradniki urejeni glede na sekundarni direktor. Ker komponente  $n_i$  nastopajo le v kvadratu, s takšnim zapisom avtomatsko upoštevamo simetrijo direktorja, saj zamenjava  $\mathbf{n}$  z  $-\mathbf{n}$  tenzorja  $Q_{ij}$  ne spremeni. Ker je  $\mathbf{n}$  enotski vektor, je tenzor  $Q_{ij}$  brezsleden, zato so v izotropni snovi vse njegove komponente enake 0 in je primeren ureditveni parameter za opis faznih prehodov.

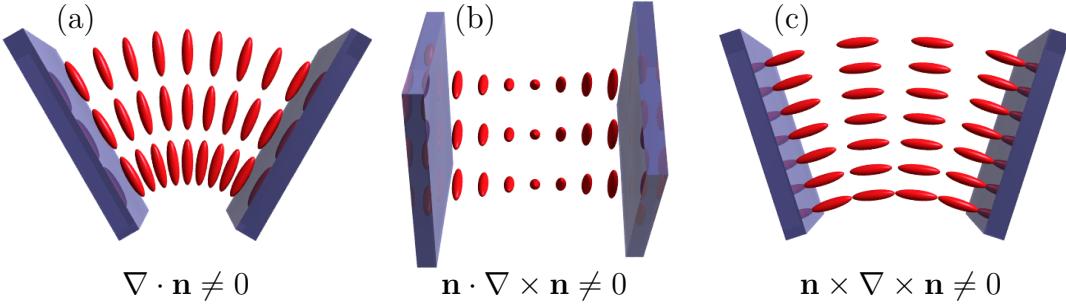
Tenzor ureditvenih parametrov  $Q_{ij}$  lahko v vsaki točki predstavimo kot matriko velikosti  $3 \times 3$ , ki je simetrična in zato diagonalizabilna. V lastnem sistemu direktorja, kjer za osi koordinatnega sistema vzamemo  $\mathbf{n}$ ,  $\mathbf{e}^{(1)}$  in  $\mathbf{e}^{(2)}$ , lahko matriko zapišemo kot

$$Q = \begin{pmatrix} S & \frac{-S+P}{2} & \frac{-S-P}{2} \\ \frac{-S+P}{2} & S & \frac{-S-P}{2} \\ \frac{-S-P}{2} & \frac{-S-P}{2} & S \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

S takšnim zapisom je razvidno, kako lahko iz podanega tenzorja  $Q_{ij}$  izračunamo direktor  $\mathbf{n}$  in stopnjo reda  $S$ . Stopnja reda je enaka največji lastni vrednosti matrike  $Q$ , direktor pa je lastni vektor, ki ustreza tej lastni vrednosti. Račun lastnih vektorjev ne loči med vektorji, ki se razlikujejo le za predznak, tako da na ta način zadostimo simetriji direktorja.

## 2.3 Deformacije direktorja in prosta energija

Ureditev tekočega kristala lahko opišemo s tenzorskim poljem  $Q_{ij}(\mathbf{r})$ , ki podaja tenzor ureditvenih parametrov v vsaki točki. Skupno prosto energijo lahko izrazimo kot funkcional polja  $Q_{ij}(\mathbf{r})$ , ki pa je odvisen od tekočekristalne mezofaze. V tej nalogi obravnavamo le nematsko mezofazo, ki je najpogostejsa in najbolj enostavna. K prosti energiji nematica prispevajo elastične deformacije, stopnja reda in dielektrična interakcija z električnim poljem. Drugi prispevki, npr. magnetna interakcija in fleksoelektričnost, so pri običajno uporabljanih snoveh in optičnem polju zanemarljivi.



**Slika 2.3** Tриje načini elastične deformacije direktorja: (a) pahljača, (b) zvoj in (c) upogib[17].

Posamezni gradniki imajo največjo svobodo gibanja in s tem največjo entropijo, če je direktor in s tem tudi teznor  $Q_{ij}$  uniformen. Krajevno spreminjanje ureditvenega parametra  $Q_{ij}$  v katerikoli smeri povzroči, da sistemu prosta energija naraste. To povečanje je odvisno od smeri spreminjanja  $Q_{ij}$  glede na smer direktorja. Na sliki 2.3 so prikazani trije načini deformacije direktorja, s katerimi lahko lokalno opišemo poljubno krajevno odvisnost. Ti trije načini so pahljača (*angl. splay*), zvoj (*angl. twist*) in upogib (*angl. bend*).

Vsi trije načini deformacije so elastični, zato je prispevek v prosti energiji sorazmeren s kvadratom deformacije. V splošnem so elastične konstante, ki pripadajo vsakemu izmed treh osnovnih načinom, med seboj različne. Prispevek k gostoti proste energije zaradi elastičnih deformacij nematskega tekočega kristala je tako enak

$$f_{\text{el}}^N = \frac{K_1}{2}(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \frac{K_2}{2}(\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + \frac{K_3}{2}(\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2. \quad (2.4)$$

Razvoj elastične proste energije po krajevnih odvodih direktorja je lažja za predstavo, saj člene lahko povežemo z načini deformacije na sliki 2.3. Za numerično modeliranje pa je bolj ugodno, če jo izrazimo s komponentami tenzorja  $Q$ , ki poleg direktorja vključuje tudi stopnjo reda in dvoosnos[17]. V tej sliki se izraz glasi

$$f_{\text{el}} = \frac{1}{2}L_1 \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k} \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k} + \frac{1}{2}L_2 \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_j} \frac{\partial Q_{ik}}{\partial x_k} + \frac{L_3}{2}Q_{ij} \frac{\partial Q_{kl}}{\partial x_i} \frac{\partial Q_{kl}}{\partial x_l}. \quad (2.5)$$

Tri elastične konstante  $K_i$  so v splošnem različne. Tipično je konstanta  $K_3$ , ki ustreza upogibni deformaciji, mnogo večja od ostalih dveh, konstanta  $K_2$ , ki ustreza zvoju, pa malo manjša od  $K_1$ . Kljub temu pa so v večini nematikov vse tri konstante istega velikostnega reda[1]. Modeliranje tekočega kristala lahko poenostavimo, če privzamemo, da so vse tri konstante enake. V t. i. enokonstantnem približku je gostota elastične proste energije enaka

$$f_{\text{el}} = \frac{1}{2}L \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k} \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k} \quad (2.6)$$

kjer je  $L$  edina elastična konstanta[18].

Stabilnost nematske mezofaze je odvisna od temperature ali od koncentracije. Za termotropske tekoče kristale, kjer je mezofaza odvisna od temperature, lahko zapišemo Landauov razvoj proste energije po ureditvenem parametru  $Q_{ij}$  kot

$$f_L = \frac{1}{2}a(T - T^*)Q_{ij}Q_{ji} + \frac{1}{3}BQ_{ij}Q_{jk}Q_{ki} + \frac{1}{4}C(Q_{ij}Q_{ji})^2, \quad (2.7)$$

kjer je  $T$  temperatura,  $T^*$  najnižja možna temperatura podhlajene izotropne faze,  $a$ ,  $B$  in  $C$  pa členi Landauovega razvoja in so odvisni od snovi. Zaradi definicije stopnje reda stanji s  $S$  in  $-S$  nista enakovredni, zato v razvoju nastopa tudi člen tretjega reda v  $S$  oz. v  $Q_{ij}$ [1, 18].

Ker sta konstanti  $a$  in  $C$  pozitivni, je pri temperaturi nad  $T^*$  najugodnejše stanje  $Q_{ij} = 0$  oz.  $S = 0$ , kar ustreza izotropni snovi. Pri temperaturi pod  $T^*$  pa kvadratni člen zamenja predznak, zaradi česar postane stabilno tudi stanje z neničelnim ureditvenim parametrom, torej nematska mezofaza.

Na ureditev pa vpliva tudi zunanje električno polje. Prispevek k prosti energiji lahko razdelimo na prispevek izotropnega dela dielektričnega tenzorja  $\bar{\epsilon}$ , ki ni odvisen od ureditve tekočega kristala, in prispevka dielektrične anizotropije, ki predstavlja sklopitev med ureditvijo in električnim poljem. Skupna sprememba proste energije je enaka

$$f_{EM} = -\frac{1}{2}\varepsilon_0 \left( \bar{\epsilon}E_iE_i + \frac{2}{3}\varepsilon_a^{\text{mol}}Q_{ij}E_iE_j \right), \quad (2.8)$$

kjer je  $\bar{\epsilon}$  povprečna dielektrična konstanta,  $\varepsilon_a^{\text{mol}} = \varepsilon_{\parallel}^{\text{mol}} - \varepsilon_{\perp}^{\text{mol}}$  dielektrična anizotropija posamezne molekule,  $E_i$  pa zunanje električno polje. Ta sklopitev izhaja iz polarabilnosti molekul, ki je odvisna od njihove oblike. Zunanje polje v molekulah inducira električni dipolni moment, ki je sorazmeren z dolžino molekule in je zato največji, če je polje vzporedno z osjo molekule. Če na tekoči kristal svetimo, ureditev molekul ne more slediti hitremu spremenjanju optičnega električnega polja, ampak nanj efektivno deluje povprečen kvadrat polja.

## 2.4 Defekti

Ravnovesno stanje nematika minimizira prosto energijo. V odsotnosti zunanjih polj je to ureditev z uniformnim direktorjem, kjer je celotna elastična prosta energija enaka 0[14]. Pod vplivom ograjenosti ali zunanjega polja pa lahko pride do stanja, kjer zvezno direktorsko polje ne more zadostiti robnim pogojem. V tem primeru se pojavi območja z nedifiniranim direktorjem. Takšnim območjem, kjer orientacijski red ne drži, pravimo defekti ali disklinacije.

V treh dimenzijah lahko obstajajo točkasti in linijski defekti[1, 16]. V vlaknih nastopajo le linijski defekti, zato se bomo posvetili zlasti tistim. Linijski defekti so lažji za razvrščanje, saj se lahko omejimo na ravnino, pravokotno na linijo, in problem prevedemo na dve dimenziji. V tem primeru lahko linijski defekt obravnavamo kot točkasti defekt v dveh dimenzijah.

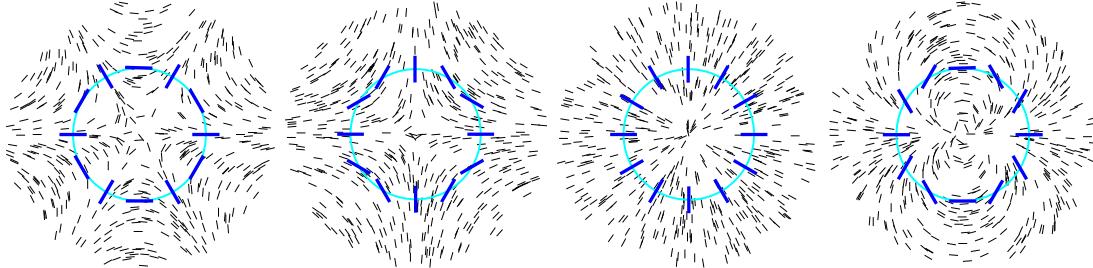
Disklinacije v nematskem tekočem kristalu delimo glede na to, kako se smer direktora spreminja v okolici disklinacije. Zanima nas zlasti, koliko obratov naredi direktersko polje, če defekt obkrožimo po zaključeni zanki.

V dveh dimenzijah lahko nematski direktor zapišemo kot  $\mathbf{n} = (\cos \theta, \sin \theta, 0)$ . Definiramo lahko ovojno število (*angl. winding number*) oz. moč defekta kot

$$s = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left( \frac{d\theta}{d\phi} \right) d\phi \quad (2.9)$$

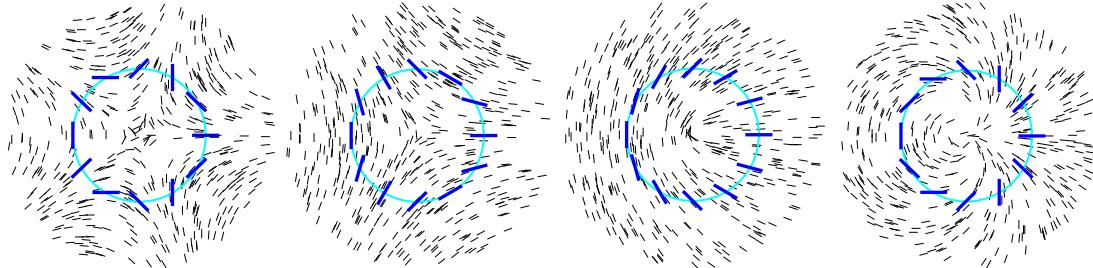
kjer kot  $\theta$  opisuje smer direktorja,  $\phi$  pa položaj na na svetlo modrem krogu.

Direktersko polje je zvezno povsod razen v defektu, zato mora direktor pri  $\phi = 0$  enak kot pri  $\phi = 2\pi$ . Ta pogoj določa možne vrednosti za  $s$ . Za prava vektorska polja mora biti  $s$  celo število, saj mora biti kot  $\theta$  na koncu enak kot na začetku. Primeri takšnih defektov so na sliki 2.4.



**Slika 2.4** Linijski defekti s celoštevilsko močjo. Moč defekta je odvisna od tega, kolikokrat se zavrti direktor (temno modre črte), ko naredimo en krog po svetlo modrem krogu. Od leve proti desni so moči  $-2, -1, 1$  in  $2$ .

Nematski direktor pa ima dodatno simetrijo, saj stanji  $\mathbf{n}$  in  $-\mathbf{n}$  predstavljata enak red. Zato je možno, da pri obkroženju defekta direktor naredi le pol obrata, ovojno število  $s$  pa je zato lahko tudi polcelo število. Primeri takšnih defektov so na sliki 2.5.



**Slika 2.5** Linijskih defekti s polcelo močjo. Polcele vrednosti so možne zaradi simetrije direktorja. Od leve proti desni so moči  $-3/2, -1/2, 1/2$  in  $3/2$ .

Vsi defekti z enakim ovojnim številom so si topološko ekvivalentni, saj lahko enega zvezno transformiramo v drugega. Moči defekta pravimo tudi topološka invarianta, saj

se defekti lahko združujejo in pretvarjajo eden v drugega, skupen topološki naboј pa se ohranja. Dva defekta z nasprotno močjo se lahko izničita, defekt z večjo močjo pa se lahko razcepi na dva defekta z manjšo močjo. Pri tem velja omejitev, da je moč vsakega defekta lahko le polcelo število.

Vsak defekt v tekočem kristalu povzroči elastično deformacijo direktorskega polja, kar pomeni zvišano prosto energijo sistema. Za linijske defekte v enokonstantnem približku je gostota elastična proste energije enaka  $\frac{K}{2}(\nabla\theta)^2$ . V bližini defekta lahko privzamemo odvisnost  $\theta(\phi) = s\phi + \theta_0$ , iz česar sledi  $\nabla\theta = \frac{k}{r}\hat{e}_\phi$ . Skupni prispevek enega defekta k prosti energiji na enoto dolžine je tako[1]

$$\frac{F_d}{L} = \frac{K}{2} \int_{r_{min}}^{r_{max}} \frac{k^2}{r^2} 2\pi r \, dr = Ks^2\pi \ln \frac{r_{max}}{r_{min}} \quad (2.10)$$

Zgornji izraz divergira tako v bližini defekta kot tudi za velike oddaljenosti. Velikostna skala  $r_{max}$  je povezana z velikostjo sistema oz. z razdaljo do sosednjega defekta. En sam izoliran defekt torej nosi zelo veliko energijo, zato ni stabilen, razen če ga vsiljujejo robni pogoji. V neposredni bližini defekta pa je gostota proste energije tako velika, da je za tekoči kristal bolj ugodno, da se stali v izotropno fazo. Velikost staljenega dela opisuje  $r_{min}$ .

V zgornji enakosti je pomembna odvisnost od ovojnega števila. Elastična energija zaradi defekta je sorazmerna z  $s^2$ , zato je bolj ugodno, da se defekt z večjim ovojnim številom razcepi na več manjših defektov. Stabilni defekti so le tisti z ovojnim številom  $s = \pm 1/2$ , vsi ostali razpadajo na več defektov z manjšim nabojem.

## 2.5 Direktor v cilindrični kapilarji

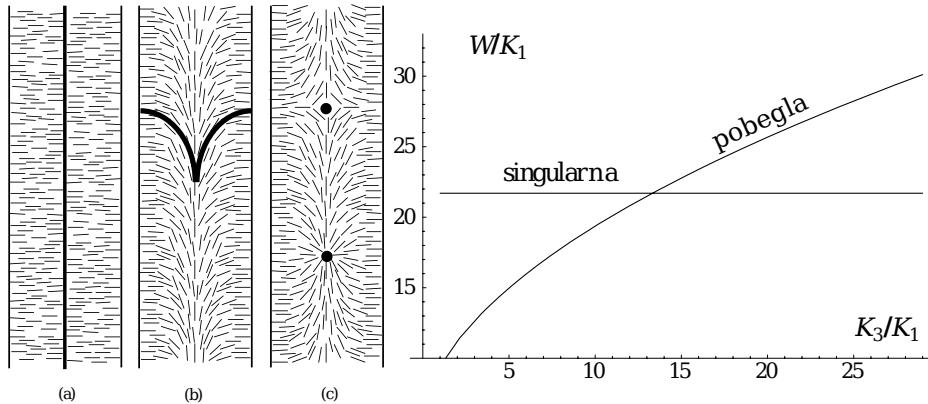
V cilindrični geometriji s homeotropnimi robnimi pogoji ureditev z uniformnim direktorjem ni možna. Glede na razmerja med elastičnimi konstantami se tekoči kristal uredi v eno izmed konfiguracij na sliki 2.6.

V profilu s singularno disklinacijo v osi valja je prisotna le pahljačna deformacija, zato je energija tega stanja odvisna od konstante  $K_1$ . V pobeglem profilu pa sta prisotni tako pahljačna kot upogibna deformacija. Energija tega stanja je odvisna od konstant  $K_1$  in  $K_3$ . Do pobega pride, če je razmerje  $K_3/K_1$  manjše od 13, kar velja za večino nematskih tekočih kristalov. Z minimizacijo energije lahko izpeljemo ravovesni radialni profil direktorja v cilindričnih koordinatah. V poenostavljenem primeru, ko sta elastični konstanti  $K_3$  in  $K_1$  enaki, je energijsko najugodnejše stanje[16]

$$\mathbf{n} = (n_r, n_\phi, n_z) = (\cos \chi(r), 0, \sin \chi(r)) \quad (2.11)$$

$$\chi(r) = 2 \arctan \frac{R - r}{R + r} \quad (2.12)$$

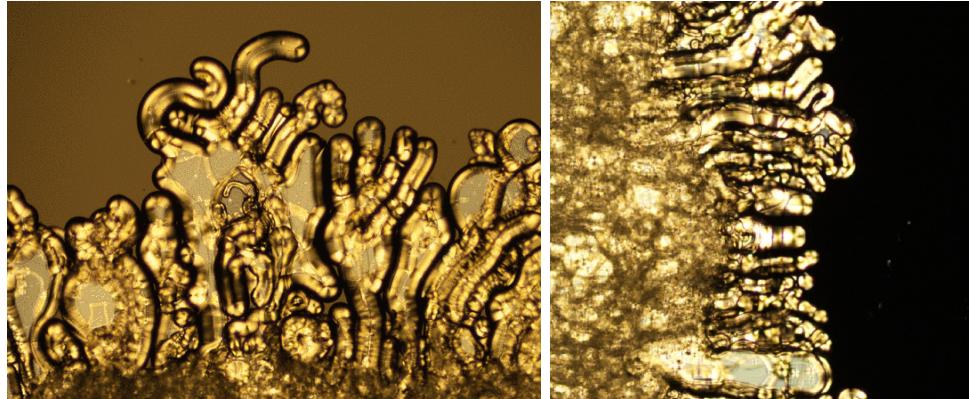
kjer je  $R$  polmer valja. Takšen profil je prikazan na sliki 2.6b. V primeru pobega v tretjo dimenzijo je direktor povsod dobro definiran. Če pa do pobega ne pride, je tik ob



**Slika 2.6** Levo: Prerezi valja s singularno (a) in nesingularno pobeglo defektno linijo (b). Različne smeri pobega povzročijo nastanek točkastih defektov (c). Desno: Energijski diagram singularne in pobegle konfiguracije v odvisnosti od razmerja med elastičnima kostantama  $K_1$  in  $K_3$ [16].

osi valja defekt. Okrog defekta je direktorsko polje radialno, torej je to linijski defekt z ovojnim številom  $s = +1$ .

V večini nematikov so vse tri elastične konstante istega velikostnega reda, zato je stanje s pobegom v tretjo dimenzijo bolj ugodno. Veliko razmerje  $K_3/K_1$  pa opazimo blizu faznega prehoda v smektično fazo. Z uporabo 8CB, ki tvori tako nematsko kot tudi smektično fazo, je mogoče v laboratoriju sintetizirati vlakna z radialnim profilom direktorja[19]. Primer tvorbe takšnih vlaken je na sliki 2.7.



**Slika 2.7** Rast vlaken z radialnim direktorjem na meji med tekočim kristalom 8CB in vodo[19]

# 3

## Elektromagnetno valovanje

---

### 3.1 Maxwellove enačbe v neizotropnem sredstvu

Širjenje svetlobe po snovi opisujejo štiri Maxwellove enačbe[11]

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{D} &= \rho_f & \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} & \nabla \times \mathbf{H} &= \mathbf{J}_f + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}\end{aligned}\tag{3.1}$$

kjer veljata zvezi  $\mathbf{D} = \varepsilon \varepsilon_0 \mathbf{E}$  in  $\mathbf{B} = \mu \mu_0 \mathbf{H}$ . V tekočih kristalih sta dielektričnost  $\varepsilon$  in permeabilnost  $\mu$  anizotropna tenzorja. Običajno je pri optičnih frekvencah magnetna anizotropija mnogo šibkejša od električne, zato jo lahko zanemarimo in privzamemo  $\mu = 1$ .

Izvori in ponori valovanja znotraj vzorca so posledica neničelne električne prevodnosti materiala. Zaradi prevodnosti  $\sigma$  ob prisotnosti električnega polja v snovi teče tok, ki je enak  $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$ . Prostih nabojev v vzorcu ni. Z upoštevanjem zgornjih predpostavk lahko Maxwellove enačbe zapišemo v poenostavljeni obliki

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{E} &= 0 & \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} & \nabla \times \mathbf{B} &= \sigma \mathbf{E} + \varepsilon \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}\end{aligned}\tag{3.2}$$

V zadnji enačbi smo privzeli, da se dielektrični tenzor  $\varepsilon$  ne spreminja s časom, zato nastopa izved časovnega odvoda. Ta predpostavka je smiselna pri obravnavi optičnih polj, saj je relaksacija tekočega kristala mnogo počasnejša od sprememb električnega in magnetnega polja. V tipičnem tekočem kristalu in frekvencah vidne svetlobe je razlika v časovni skali okrog 15 redov velikosti.

### 3.2 Dvolomnost

Dvolomnost (*angl. birefringence*) je pojav, pri katerem je lomni količnik snovi odvisen od polarizacije svetlobe[3, 20]. Opazimo jo predvsem pri kristalih, kot sta kalcit in

vodni led, pa tudi nekaterih vrstah plastike. Lahko je posledica same strukture snovi, na primer pri kristalih, oblike gradnikov kot pri tekočih kristalih, ali pa jo vsilimo z mehansko obremenitvijo.

V dvolomnih snoveh zveze med jakostjo električnega polja  $E$  in gostoto električnega polja  $D$  ne moremo opisati s skalarjem, ampak s tenzorjem

$$D_i = \epsilon_0 \epsilon_{ij} E_j \quad (3.3)$$

Hitrost svetlobe v takšni snovi je enaka

$$c = \sqrt{\frac{1}{\epsilon_{\text{eff}} \epsilon_0 \mu_0}} = \frac{c_0}{\sqrt{\epsilon_{\text{eff}}}} = c_0 \sqrt{\frac{E_i E_i}{E_i \epsilon_{ij} E_j}} \quad (3.4)$$

in je odvisna od smeri električnega polja.

Dielektrični tenzor  $\epsilon_{ij}$  je linearna zveza med dvema vektorskima količinama. Predstavimo ga z matriko velikosti  $3 \times 3$ , torej ima tri lastne smeri in tri lastne vrednosti. Najenostavnejša in najpogostejsa vrsta dvolomnosti je takšna, pri katerem sta dve izmed lastnih vrednosti enaki, tretja pa različna. Lastni smeri, ki ustreza različni lastni vrednosti, pravimo optična os. V takšni snovi je le ena privilegirana os, zato rečemo, da je snov optično enoosna. V lastnem sistemu lahko tenzor zapišemo kot

$$\epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon_{\perp} & & \\ & \epsilon_{\perp} & \\ & & \epsilon_{\parallel} \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

Tu je  $\epsilon_{\parallel}$  lastna vrednost, ki ustreza polarizaciji svetlobe, vzporedni z optično osjo. Tej polarizaciji pravimo izredna (*angl. extraordianry*), ustrezno lomnemu količniku  $n_e = \sqrt{\epsilon_{\parallel}}$  pa izredni lomni količnik. Polarizacija svetlobe, pravokotna na optično os je redna (*angl. ordinary*), ustreza pa ji redni lomni količnik  $n_o = \sqrt{\epsilon_{\perp}}$ . Dvolomnost snovi lahko kvantitativno opišemo z razliko med izrednim in rednim lomnim količnikom

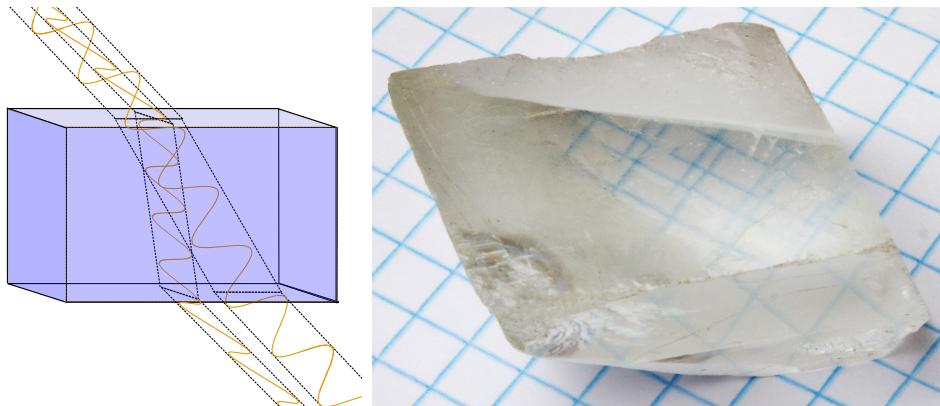
$$\Delta n = n_e - n_o , \quad (3.6)$$

ki je lahko pozitivna ali negativna.

Enako kot dielektričnost  $\epsilon$  lahko tudi anizotropna magnetna permeabilnost  $\mu$  povzroči dvolomnost. Pri optičnih frekvencah je magnetna anizotropija večine snovi zanemarljiva, zato je dovolj obravnavati le električno.

### 3.3 Defekti v polarizaciji svetlobe

Električno in magnetno polje sta prava vektorja, zato imata lahko le defekte s celoštevilskim ovojnim številom. Defekt v elektromagnetsnem polju je točka oz. območje, kjer polarizacija in faza valovanja nista definirani. Amplituda valovanja v takšni točki mora biti



**Slika 3.1** Levo: Prehod svetlobnih žarkov z različnima polarizacijama skozi dvolomno snov. Zaradi različnih polarizacij se žarka različno lomita. Desno: Pogled skozi dvolomni kristal kalcita. Vidni sta dve sliki vzorca pod kristalom. [20]

enaka nič, zato se defekti izrazijo kot temne pege. Primer so Laguerre-Gaussovi snopi, prikazani na sliki 3.2.

Klub topološki podobnosti pa so defekti v polarizaciji svetlobe fizikalno zelo različni od defektov v ureditvi tekočega kristala. Deformacije elektromagnetnega polja ne nosijo elastične energije, ki bi jo ravnovesno stanje minimiziralo. S primernimi optičnimi elementi lahko skonstruiramo svetlobo z defekti v polarizaciji, kot je npr. simetrijska ravina z obratom polarizacije, ki bi v tekočem kristalu razpadli zaradi previsoke energije.

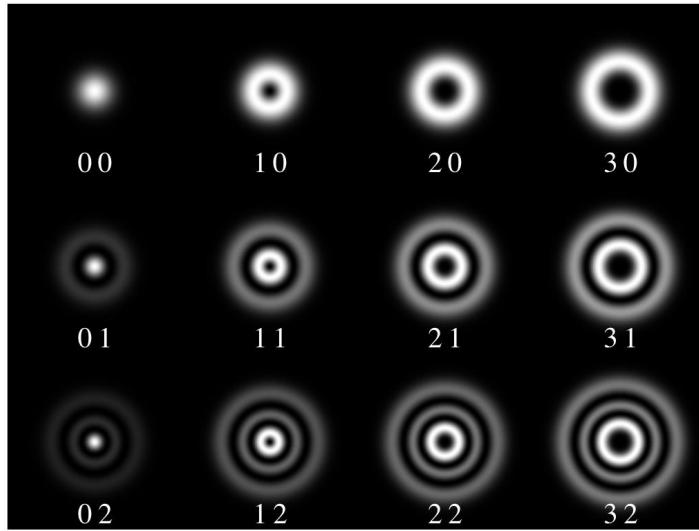
### 3.4 Dielektrični tenzor v tekočem kristalu

Oblika in polarizabilnost molekul v tekočem kristalu vplivata na njegove optične lastnosti. Dielektrični tenzor v tekočem kristalu je odvisen od molekularne anizotropije  $\varepsilon_a^{\text{mol}}$ , direktorja in nematske stopnje reda  $S$ . Odvisnost od direktorja in stopnje reda lahko opišemo s tensorskim ureditvenim parametrom  $Q_{ij}$ . Ta je brezsleden, zato tudi dielektrični tenzor zapišemo kot vsoto izotropnega in brezslednega dela[1, 18]

$$\varepsilon_{ij} = \bar{\varepsilon} + (\varepsilon_a)_{ij} = \bar{\varepsilon} + \frac{2}{3}\varepsilon_a^{\text{mol}}Q_{ij} \quad (3.7)$$

Lastni vektorji tenzorja  $Q_{ij}$  so direktor in dve pravokotni smeri, po zgornji zvezi pa so enake tudi lastne osi dielektričnega tenzorja. V enoosnem tekočem kristalu je tako optična os z izrednim lomnim količnikom vzporedna z direktorjem.

Če primerjamo enačbi (2.8) in (3.7) opazimo dvosmerno povezavo med ureditvijo tekočega kristala in elektromagnetnim poljem. Zaradi dielektrične sklopitve svetloba vpliva na ureditev tekočega kristala, zaradi optične anizotropije pa tekoči kristal vpliva



**Slika 3.2** Nekaj osnovnih Laguerre-Gaussovih načinov. Temne pege v notranjosti snopov predstavljajo defekte v polarizaciji svetlobe. [21]

na širjenje svetlobe po njem. Računsko orodje, ki naj bi natančno napovedalo direktorsko polje ob prisotnosti svetlobe ali širjenje svetlobe skozi tekoči kristal, bi moralo upoštevati to dvosmerno povezavo in hkrati računati oboje. V praksi pa se pogosto zatečemo k poenostavljivam oz. limitam močnega ali šibkega polja. Če je elektromagnetno polje dovolj močno, se bo direktor orientiral v smeri polja, torej svetloba vedno čuti izredni lomni količnik. V tem režimu tekoči kristal ne vpliva na širjenje svetlobe. Če pa je svetloba zelo šibka, ne spremeni orientacije molekul in lahko privzamemo, da je direktorsko polje fiksirano. Močno se razlikujeta tudi časovni skali obeh pojavov, saj je karakteristični čas relaksacije tekočega kristala velikostnega reda sekunde, optična polja pa nihajo s periodo okrog femtosekunde. Zato lahko preučujemo propagacijo svetlobe preden se tekoči kristal lahko preuredi.

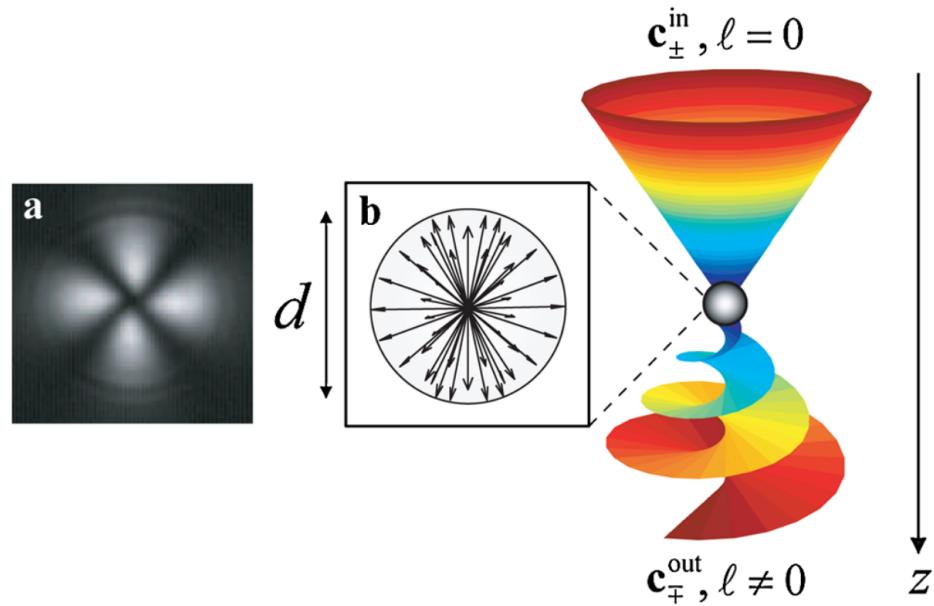
V tem magistrskem delu sem se omejil le na širjenje svetlobe, pri čemer je direktorsko polje konstantno. Sama računska metoda pa je zasnovana tako, da je kompatibilna z obstoječimi programi za izračun ureditve tekočih kristalov[18]. Z isto metodo bo v prihodnosti mogoče upoštevati dvosmerno sklopitev med optičnim poljem in tekočim kristalom, premostiti pa bo treba še razliko v časovnih skalah.

### 3.5 Povezava med defekti v tekočem kristalu in defekti v optičnem polju

Orientacijski red v tekočem kristalu je tesno povezani z optičnimi polji. Med njimi obstaja dvosmerna povezava, opisana v poglavju 3.4. Podobno so med seboj povezani tudi defekti.

Svetloba ob prehodu defekta v ureditvi tekočega kristala lahko pridobi fazno singu-

larnost, torej območje, kjer faza valovanja ni definirana. Primer je krožno polarizirana svetloba, ki preide skozi tekočekristalno kapljico s točkastim defektom v sredini, kot je prikazano na sliki 3.3. V tem primeru svetloba dobi neničelno vrtilno količino  $l$ , na sredini pa nastane temna pika[22].



**Slika 3.3** Prehod krožno polarizirane svetlobe skozi kapljico z radialnim direkторskim profilom. Val z gladko valovno fronto ( $l = 0$ ) se deloma pretvori v stanje s singularnostjo v fazi ( $l \neq 0$ )[22]. Levo: (a) slika kapljice med prekrižanimi polarizatorja, ki potrjuje cilindrično simetrično direktorsko polje in (b) shema radialnega direkторja.

S primerno ureditvijo tekočega kristala lahko ustvarimo tudi svetobo z več singularnostmi. Z zunanjimi vplivi, na primer z električnim poljem, lahko tekoči kristal preuredimo. Na ta način lahko nastavljamo število in razporeditev defektov v svetlobnem polju[23].



# 4

## Numerična metoda

---

Za samo računanje smo implementirali metodo končnih differenc v časovni domeni (*angl. Finite-difference time-domain – FDTD*)[11]. Pri tej metodi časovno propagiramo električno in magnetno polje v vsaki točki po Maxwellovih enačbah.

Pri numeričnem reševanju potrebujemo le zadnji dve enačbi, ki vsebujejo časovne odvode polj. Prvi dve enačbi bosta s tem avtomatsko izpolnjeni. Izvore valovanja namesto z dodajanjem nabojev in tokov v vzorec raje simuliramo z robnimi pogoji, kot da valovanje prihaja od zunaj. Ta pristop je smiseln, saj v eksperimentih tekoči kristal opazujemo tako, da svetimo skozenj.

Če izrazimo časovna odvoda in enačbi prepišemo v brezdimenzijsko obliko ( $c = \varepsilon_0 = \mu_0 = 1$ ), se glasita

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E}, \quad \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \varepsilon^{-1}(\nabla \times \mathbf{B} - \sigma \mathbf{E}). \quad (4.1)$$

V zgornjih enačbah smo implicitno upoštevali, da v celici ni izvorov, uporabili pa smo brezdimenzijske enote, zato je  $c = 1$ . V enačbah nastopajo le prvi odvodi, ki jih za numerično računanje nadomestimo s končnimi differencami

$$\frac{\partial y}{\partial x} \rightarrow \frac{y(x + \delta) - y(x)}{\delta} \quad (4.2)$$

Znotraj tekočega kristala lahko električno prevodnost zanemarimo in izpustimo člen  $\sigma \mathbf{E}$ . Prevodnost pa je pomembna v robni plasti, kjer želimo absorpcijo valovanja.

Pri računih smo upoštevali le dielektrično anizotropijo tekočega kristala, magnetno pa zanemarili. Zaradi simetrije Maxwellovih enačb bi na enak način kot dielektričnost  $\varepsilon$  lahko upoštevali tudi magnetno permeabilnost  $\mu$ . Podobno bi lahko poleg električne prevodnosti  $\sigma$  upoštevali magnetne izgube  $\sigma^*$ .

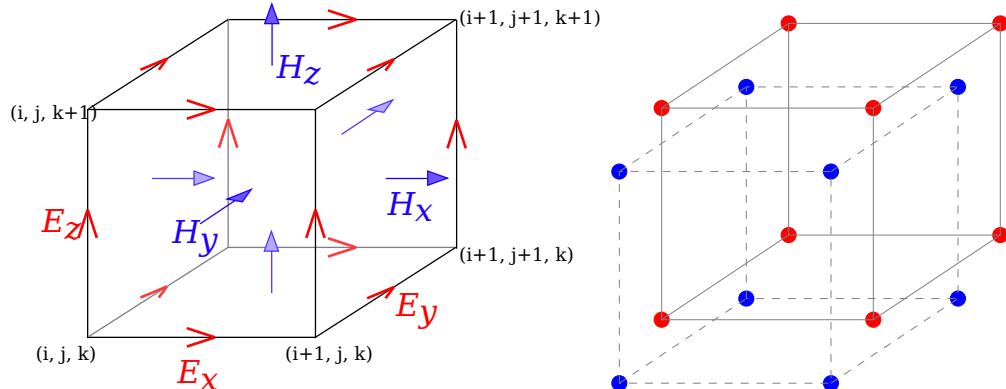
### 4.1 Mreža

Pri diskretizaciji si lahko pomagamo z obliko obeh enačb. Za izračun časovnega odvoda vsakega izmed polj  $\mathbf{E}, \mathbf{B}$  potrebujemo le vrednosti drugega polja. Poleg tega obe

enačbi povezujeta časovni odvod enega polja s krajevnim odvodom drugega. Zaradi obeh opisanih lastnosti lahko dvignemo red metode, in s tem izboljšamo natančnost, če vrednosti polj poznamo ob različnih časih in na različnih mestih[11].

Običajne implementacije metode FDTD gredo še korak dlje, tako da so tudi posamezne komponente električnega in magnetnega polja definirane na različnih točkah[24, 25]. Takšno mrežo je predlagal Yee in izkorisča dejstvo, da pri časovnem odvodu vsake komponente posameznega polja nastopata le krajevna odvoda ostalih dveh komponent drugega polja. Z ustrezeno izbiro točk, kjer so definirane posamezne komponente, vse krajevni odvode potrebujemo ravno na sredini med ustreznima točkama mreže. Za učinkovito delovanje pa takšna mreža zahteva, da je dielektrični tenzor  $\epsilon$  diagonalen, njegove komponente pa morajo biti znane na različnih točkah mreže. V praznem prostoru ali v trdnih kristalih temu pogoju lahko zadostimo, po možnosti z vrtenjem koordinatnega sistema.

V tekočih kristalih je dielektrični tenzor anizotropen in se močno spreminja s krajem. Zaradi krajevnega spreminjanja ne moremo tako obrniti koordinatnega sistema, da bi bil tenzor diagonalen v vseh točkah. Poleg tega obstoječi programi za modeliranje ureditve tekočih kristalov podajo vse komponente dielektričnega tenzorja na istem mestu[18]. Ta omejitev močno zmanjša prednosti Yeejeve mreže, zato smo raje uporabili svojo. Odločili smo se za srednjo pot, kjer sta polji  $\mathbf{E}$  in  $\mathbf{B}$  definirani ob različnih časih in na različnih točkah mreže, vse tri komponente vsakega izmed polj pa so podane na istem mestu. Obe mreži prikazuje slika 4.1.



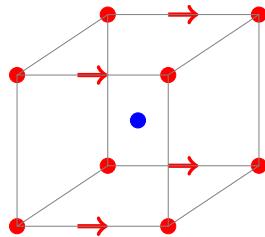
**Slika 4.1** Levo: Yeejeva celica, pri kateri so komponente električnega polja znane na razpoloviščih robov konce, komponente magnetnega polja pa v središčih ploskev[25]. Desno: Celica, ki smo jo uporabili pri izračunih. Komponente električnega polja so znane v ogliščih kocke, komponente magnetnega polja pa v njenem središču. V obeh primerih sta električno in magnetno polje določena ob različnih časih, kar na sliki ni prikazano.

Za račun potrebujemo še inverz dielektričnega tenzorja, ki pa se med propagacijo svetlobe ne spreminja, zato ga lahko izračunamo predhodno. Lahko neposredno predpišemo vse komponente tenzorja, bolj priročno pa je podati le direktor in stopnjo reda, iz katerih nato izračunamo dielektrični tenzor in njegov inverz. Pomembno je le,

da je znan na istem mestu kot  $\mathbf{E}$  (rdeče točke na sliki 4.1).

## 4.2 Postopek reševanja

Na izbrani mreži ne moremo neposredno izračunati rotorja polj, ker ta ni definiran v pravih točkah. Električno polje je definirano na ogliščih kocke, zato so krajevni odvodi tega polja definirani na razpoloviščih robov, potrebujemo pa jih na mestu magnetnega polja, torej v središču kocke. V svoji metodi sem za odvod polja po vsaki koordinati v središču kocke uporabil povprečje odvodov na vseh štirih robovih, ki potekajo v smeri izbrane koordinate, kot prikazuje slika 4.2.



**Slika 4.2** Krajevni odvodi komponent polja  $\mathbf{E}$  v smeri  $x$  so definirani na štirih robovih, označenih s puščicami. Vrednost potrebujemo v središču kocke (modra pika), zato sem uporabil povprečje štirih vrednosti na robu.

V primerjavi z Yeejevo celico povprečenje poveča čas računanja, saj moramo namesto vsakega krajevnega odvoda izračunati štiri. Na srečo pa si vsah rob delijo štiri kocke, tako da se s sprotnim shranjevanjem odvodov lahko izognemo večkratnemu računanju istega odvoda. Na ta način je število računskih operacij blizu tistemu, ki bi ga potrebovali z uporabo Yeejeve mreže. Na izbrani mreži so vse komponente električnega polja znane ob časih  $k\Delta t$ ,  $k \in \mathbf{N}$ , in sicer na položajih, kjer so vse tri prostorske koordinate celoštevilski večkratniki enote diskretizacije  $\Delta x$ . Magnetno polje je znano ob časih  $(k + 1/2)\Delta t$  na položajih, kjer so vse tri prostorske koordinate polceloštevilski večkratniki  $\Delta x$ . S poenostavljenim zapisom

$$E_\alpha|_{i,j,k}^n = E_\alpha(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z, n\Delta t) \quad (4.3)$$

$$H_\alpha|_{i,j,k}^n = H_\alpha\left(\left(i + \frac{1}{2}\right)\Delta x, \left(j + \frac{1}{2}\right)\Delta y, \left(k + \frac{1}{2}\right)\Delta z, \left(n + \frac{1}{2}\right)\Delta t\right) \quad (4.4)$$

lahko zapišemo krajevne odvode elektromagnetnih polj

$$(\nabla \times \mathbf{A})_x|_{i,j,k}^n = \frac{1}{4\Delta y} \sum_{\substack{i'=i, i+1 \\ k'=k, k+1}} A_z|_{i',j+1,k'}^n - A_z|_{i',j,k'}^n \quad (4.5)$$

$$(\nabla \times \mathbf{A})_y|_{i,j,k}^n = \frac{1}{4\Delta z} \sum_{\substack{j'=j, j+1 \\ i'=i, i+1}} A_x|_{i',j',k+1}^n - A_x|_{i',j',k}^n \quad (4.6)$$

$$(\nabla \times \mathbf{A})_z|_{i,j,k}^n = \frac{1}{4\Delta x} \sum_{\substack{k'=k, k+1 \\ j'=j, j+1}} A_y|_{i+1,j',k'}^n - A_y|_{i,j',k'}^n \quad (4.7)$$

kjer je  $\mathbf{A}$  poljubno vektorsko polje. Pri zgornjem zapisu je rotor polja definiran med točkami mreže, torej na mestih  $A_\alpha|_{i+1/2,j+1/2,k+1/2}$ . Ker rotor polja potrebujemo pri časovnem odvodu drugega optičnega polja, ki je definiran ravno na teh mestih, je zgornji zapis primeren za izbrano mrežo. V splošnem je diskretizacija lahko anizotropna, v vseh nadaljnjih izračunih pa smo uporabili kvadratno mrežo, kjer je  $\Delta x = \Delta y = \Delta z$ . Maxwellove enačbe v tem zapisu se glasijo

$$E_\alpha|_{i,j,k}^{n+1} = E_\alpha|_{i,j,k}^n + \Delta t \cdot (\varepsilon^{-1})_{\alpha\beta}|_{i,j,k} \cdot (\nabla \times \mathbf{H})_\beta|_{i-1,j-1,k-1}^n \quad (4.8)$$

$$H_\alpha|_{i,j,k}^{n+1} = H_\alpha|_{i,j,k}^n + \Delta t \cdot (\nabla \times \mathbf{E})_\beta|_{i,j,k}^{n+1} \quad (4.9)$$

Iz zgornjih dveh enačb je razvidno, da lahko obe polji računamo izmenično. Če poznamo električno polje ob času  $n\Delta t$  in magnetno polje ob času  $(n + 1/2)\Delta t$ , lahko po enačbi izračunamo (4.8) električno polje ob času  $(n + 1)\Delta t$ , nato pa po enačbi (4.9) magnetno polje ob času  $(n + 3/2)\Delta t$ . Izmenično računanje lahko ponavljamo poljubno dolgo.

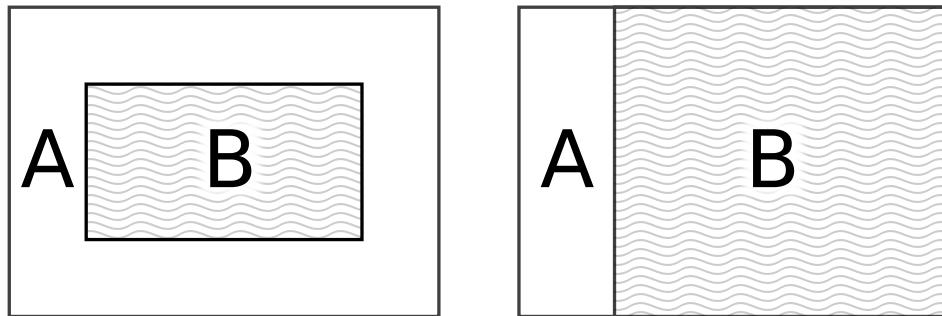
Pomembna lastnost obeh zgornjih enačb je, da med računanje enega izmed polj potrebujemo le vrednosti drugega polja, ne pa tudi istega polja na sosednjih mestih. Časovni odvodi istega polja na različnih mestih so med seboj popolnoma neodvisni. Vsak korak metode, torej računanje enega izmed polj, lahko razdelimo na veliko število neodvisnih računskih enot. To omogoča paralelno izvajanje programa na računalnikih z več jedri, kot so računalniške gruče, pa tudi novejši osebni računalniki.

Pri zgornjem zapisu smo implicitno privzeli, da je dielektrične tenzor  $\varepsilon_{\alpha\beta}$  odvisen od kraja, ne pa od časa. Privzetek je smiseln v trdnih snoveh, pa tudi v tekočih kristalih, saj je značilen relaksacijski čas snovi mnogo večji od periode nihanja optičnih polj. Ker nastopa pri časovnem odvodu električnega polja, mora biti podan na istih mestih kot  $E_\alpha$ , torej v točkah s celostevilskimi koordinatami.

### 4.3 Izvor valovanja

V enačbah (4.1) ne nastopajo izvori valovanja, zato jih moramo modelirati z robnimi pogoji. To je v skladu z eksperimenti, saj svetloba pride od zunaj, zanima pa nas predvsem njeno širjenje skozi snov.

Poljubno vpadno valovanje lahko modeliramo z robnimi pogoji, če izkoristimo linearnost Maxwellovih enačb. Električno in magnetno polje lahko namreč razcepimo na vsoto vpadnega in sisanega valovanja[11]. Takšen razcep polja je možen le, če je širjenje vpadnega valovanja dobro znano. To velja za ravne valove, pa tudi za bolj zavzetene primere kot so Laguerre-Gaussovi snopi. Mrežo zato razdelimo na dve območji, v notranjem območju računamo s skupnim poljem, v zunanjem pa polje razcepimo in shranjujemo le sisan del. Optično anizotropna snov mora biti v celoti v notranjem območju, izvor valovanja modeliramo na prehodu med območjema.



**Slika 4.3** Delitev mreže na dve območji. V območju **A** računamo le z sisanim valovanjem, v območju **B** pa s celotnim valovanjem. Delitev na levi sliki je primerena, če je razlika med lomnima količnikoma **A** in **B** dovolj majhna. V nasprotnem primeru uporabimo delitev na desni sliki.

Delitev na notranje in zunanje območje je učinkovita, če se efektivni lomni količnik v notranem območju ne razlikuje močno od zunanjega. V tem primeru je fazna razlika na zadnji stranici notrenjega območja dovolj majhna, da pretvorba na sisan valovanje odstrani večino valovanja. Če pa je fazna razlika primerljiva s  $\pi/2$  ali večja, lahko odstranitev vpadnega vala celo poveča amplitudo valovanja. To se zgodi npr. v tekočekristalnem valovodu, ki je mnogo daljši od valovne dolžine svetlobe. Takrat je bolj učinkovito upoštevati izvor valovanja le na vpadni strani, na drugi strani pa postavimo plast, ki absorbira valovanje.

Delitev na zunanje in notranje območji, ki je prikazana na levi strani slike 4.3, smo uporabili le s preprostimi primeri za preverjanje delovanja metode. Vse ostale izračune smo izvedli z delitvijo na desni strani. Na sliki je velikost območja **A** pretirana zaradi preglednosti. V vseh primerih je bila debelina območja **A** enaka dva koraka mreže.

## 4.4 Robni pogoji

Če imamo na robu celice Dirichletov, Neumannov ali mešani robni pogoj, se bo celotno valovanje odbilo in vrnilo v celico. Tega si ne želimo, saj pri izvedbi eksperimentov običajno svetloba najprej preide skozi vzorec, nato pa jo zajamemo in preučimo. Odbita svetloba, ki bi se vrnila v vzorec, bi zmotila svetlobno polje in otežila opazovanje. Za modeliranje takšnega eksperimenta bi morali uporabiti zelo veliko prazno območje,

v katerega bi se svetloba širila, kar pa močno upočasni delovanje metode. Širjenje v prazen prostor brez odboja pa lahko učinkoviteje simuliramo z uporabo absorbirajočega robnega pogoja (*angl. Absorbing boundary condition – ABC*). Obstaja več različnih implementacij absorbirajočih robnih pogojev, v zadnjem času se največ uporablja t.i. popolnoma ujemajoča plast (*angl. Perfectly-matched layer – PML*) [11, 26].

Material v plasti PML zagotavlja eksponentno pojemanje vpadnega vala, neodvisno od njegove frekvence in smeri širjenja. Absorpcijo valovanja dosežemo z uporabo električne prevodnosti  $\sigma$  in magnetnih izgub  $\sigma^*$ . Odboju na meji med notranjostjo celice in plastjo PML se izognemo, če izgube v robni plasti zadoščajo pogoju  $\sigma/\sigma^* = \varepsilon_1/\mu_1$ , kjer sta  $\varepsilon_1$  in  $\mu_1$  dielektričnost in magnetna permeabilnost v notranjosti. To ujemanje izgub odpravi odboj na meji le za valovanje, ki vpada pravokotno na mejo. Odboj valovanja pod poljubnim kotom preprečimo, če vsako komponento električnega in magnetnega polja razdelimo na dva prispevka. Tak material je nefizikalnen, saj imamo dodatne prostostne stopnje, polje pa ne sledi več Maxwellovim enačbam.

Komponenta  $E_x$  električnega polja vala v običajnem mediju z dielektričnostjo  $\varepsilon$  in električno prevodnostjo  $\sigma$  zadošča Maxwellovi enačbi

$$\varepsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma E_x = \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z}. \quad (4.10)$$

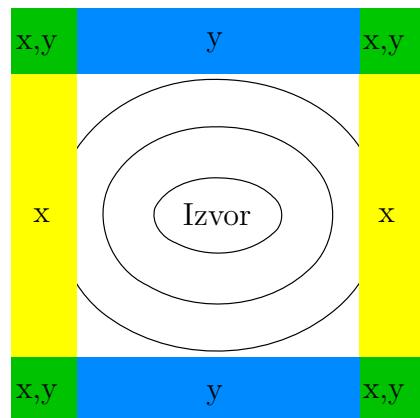
V plasti PML pa električno polje razdelimo na dva prispevka,  $E_x = E_{xy} + E_{xz}$ , ki zadoščata enačbam

$$\varepsilon \frac{\partial E_{xy}}{\partial t} + \sigma_y E_{xy} = \frac{\partial}{\partial y} (H_{zx} + H_{zy}) \quad (4.11)$$

$$\varepsilon \frac{\partial E_{xz}}{\partial t} + \sigma_z E_{xz} = - \frac{\partial}{\partial z} (H_{yx} + H_{yz}), \quad (4.12)$$

kjer smo razcepljenima komponentoma pripisali različni prevodnosti. Na enak način so razcepljene ostale komponente eletričnega in magnetnega polja.

Razcep polj omogoča anizotropno absorpcijo v robni plasti. Izberemo lahko takšne vrednosti za  $\sigma_i$  in  $\sigma_i^*$ , da se absorbira le komponenta, ki se širi pravokotno na plast. Komponenta svetlobe, ki se širi vzporedno s plastjo, se ohrani in potuje znotraj robne plasti, tako da ne zmoti valovanja v celici. Na ta način preprečimo odboj valovanja na meji med notranjostjo in plastjo PML pri poljubnem vpadnem kotu valovanja. Primer postavitve plasti PML, ki zadosti temu pogoju, je na sliki 4.4.



**Slika 4.4** Shema postavitve plasti PML okrog ombočja, v katerem opazujemo propagacijo svetlobe. V rumenih območjih je neničelna prevodnost  $\sigma_x$ , v modrih je neničelna le  $\sigma_y$ , v zelenih območjih pa sta prisotni obe. Takšna postavitev preprečuje odboj svetlobe pri poljubnem vpadnem kotu[11].



# 5

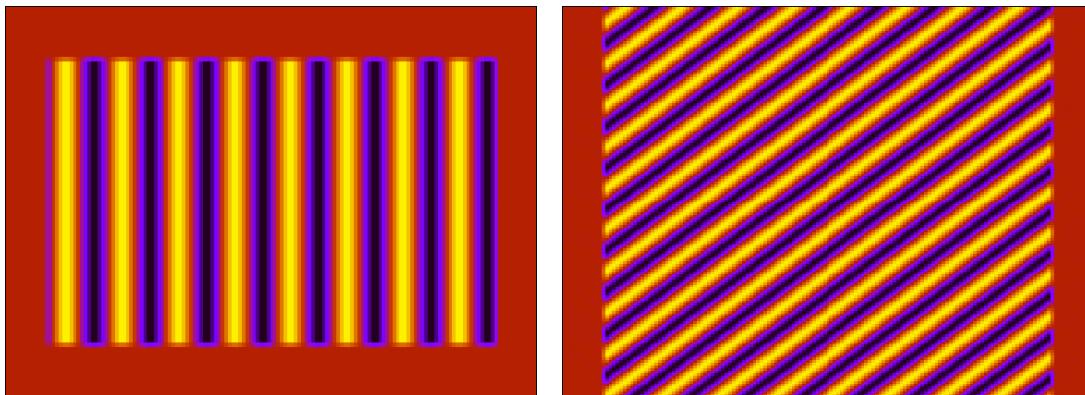
## Primeri uporabe metode

---

### 5.1 Prazen prostor

Prvi preizkus metode, ki smo ga opravili, je širjenje svetlobe skozi prazen prostor. Prazen prostor je modeliran kot snov, kjer je dielektrični tenzor uniformen in izotropen. Če na eno stran celice postavimo planarni izvir ravnega valovanja, pričakujemo ravne valove po celotnem mediju.

Pri tem preizkusu sta lomna količnika v obeh območjih enaka, zato smo mrežo razdelili na notranje in zunanje območje, izvor valovanja pa smo postavili po celotnem robu med območjem. Prikaz valovanja na sliki 5.1 potrjuje pravilnost metode, saj res vidimo ravne valove s konstantno frekvenco in valovno dolžino.



**Slika 5.1** Levo: Trenutna slika valovanja v celici. Desno: Časovna in krajevna odvisnost valovanja. Barva predstavlja komponento električnega polja v smeri  $x$ , rumena je pozitivna, vijolična pa negativna. (**TODO: puščice na slikah**)

Na obeh slikah opazimo notranjost celice z valovanje in rob, kjer valovanja ni. To je posledica modeliranja izvora valovanja okrog in okrog celice, kot je prikazano na levi strani slike 4.3. Valovanje se širi od leve proti desni, tako da si lahko predstavljamo izvir valovanja ne levi strani in ponor na desni. Dejstvo, da ponor valovanja na desni

strani uspešno pobere celotno valovanje potrjuje natančnost računanja.

## 5.2 Lom in odboj

Enostaven preizkus za širjenje valovanja je prehod čez mejo med medijema z različnima lomnima količnikoma. Del valovanja se na meji odbije po odbojnem zakonu, tako da je odbojni kot enak vpadnemu. Preostanek valovanja se na meji lomi, lomni kot pa je odvisen od lomnih količnikov obeh snovi. Izračunamo ga po lomnem zakonu

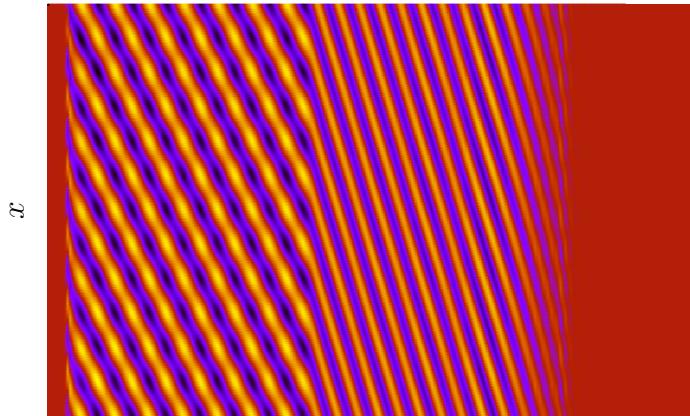
$$\frac{\sin \alpha}{\sin \beta} = \frac{n_2}{n_1} = \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}}, \quad (5.1)$$

kjer je  $\alpha$  vpadni kot valovanja,  $\beta$  pa lomni kot oz. kot med pravokotnico in smerjo širjenja lomljenega vala.

Deleža odbitega in prepričenega valovanja sta odvisna od vpadnega kota  $\alpha$  in polarizacije svetlobe[27]. Pri določenem kotu  $\alpha$  se komponenta svetlobe s polarizacijo v ravnini žarka in normale na površino ne odbije in se v celoti lomi. Temu kotu rečemo Brewsterjev kot in je enak

$$\theta_B = \arctan \left( \frac{n_2}{n_1} \right) = \arctan \sqrt{\frac{n_2}{n_1}} \quad (5.2)$$

Če propagacijo svetlobe simuliramo z metodo FDTD, v sliki trenutnega električnega polja ne moremo ločiti med vpadnim in odbitim valovanjem. Za prikaz delovanja sem zato uporabil vpadni kot, ki je zelo blizu Brewsterjevemu. Na ta način opazimo le šibko odbito valovanje, tako da lahko še vedno preverimo, ali lomni zakon drži. Slika električnega polja ob prehodu meje v bližini Brewsterjevega kota je na sliki 5.2.



**Slika 5.2** Preizkus veljavnosti lomnega zakona ob prehodu valovanja v medij z drugačnim lomnim količnikom

Na sliki so jasno vidna štiri območja. Čisto na levi je rob z absorbirajočim robnim pogojem PML, ki absorbira odbito valovanje in preprečuje nadaljnji odboj. Naslednje

je območje z dielektričnostjo  $\varepsilon_1$ , kjer je superpozicija vpadnega in odbitega valovanja. Odbito valovanje je mnogo šibkejše od vpadnega, zato so valovi skoraj ravni. Na sredini slike je meja med območjem, desno od nje je snov z dielektričnostjo  $\varepsilon_2 > \varepsilon_1$ . V tem delu je le prepuščeno lomljeno valovanje, ki ima ustrezeno manjšo valovno dolžino. Na desnem robu je prazno območje, ki ga valovanje še ni doseglo.

Veljavnost lomnega zakona lahko preverimo, če primerjamo kota vpadnega in lomljenega valovanja.

### 5.3 Uniformen direktor

Modelirali smo dvolomni kristal, torej snov, kjer je dielektrični tenzor uniformen, ne pa tudi izotropen. Svetloba se širi v smeri osi  $z$ , optična os pa oklepa kot  $\theta$  z ravnino  $x-y$  in kot  $\beta$  s polarizacijo vpadne svetlobe. Zanima nas prepustnost takšnega sistema, če za celico postavimo polarizator, ki je pravokoten na polarizacijo vpadne svetlobe.

Ta preizkus temelji na najpogosteje uporabljeni metodi za eksperimentalno opazivanje tekočih kristalov. Tanko plast tekočega kristala postavimo med dva prekrižana polarizatorja. Če je med polarizatorjem optično izotropna snov, ali pa je optična os vzporedna z enim izmed polarizatorjev, sistem ne prepušča svetlobe. V ostalih primerih pa vidimo nekaj prepuščene svetlobe, intenziteta pa je odvisna od dvolomnosti in orientacije vmesne snovi. Na ta način se jasno vidijo defekti v tekočem kristalu.

Če je direktor uniformen po celotni debelini vzorca, lahko intenziteto prepuščene svetlobe izpeljemo analitično[16]. Enaka je

$$I = I_0 \sin^2 2\beta \sin^2 \left[ \frac{\pi d}{\lambda_0} \left( \frac{n_o n_e}{\sqrt{n_e^2 \cos^2 \theta + n_0^2 \sin^2 \theta}} - n_o \right) \right], \quad (5.3)$$

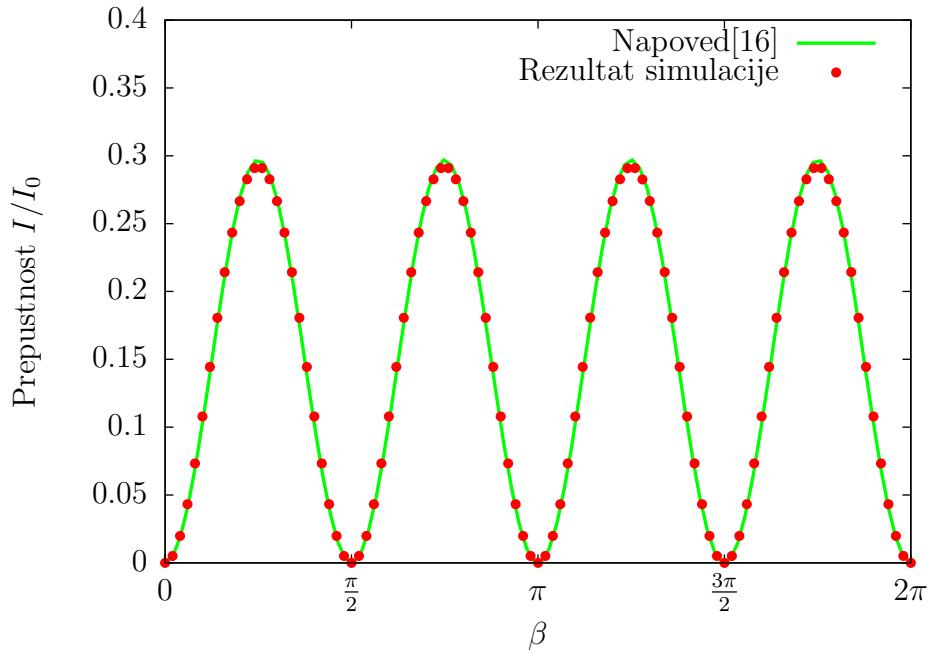
kjer sta  $I_0$  in  $\lambda_0$  intenziteta in valovna dolžina vpadne svetlobe,  $d$  debelina vzorca,  $n_o$  in  $n_e$  pa redni in izredni lomni količnik. Ujemanje rezultatov z napovedjo je prikazano na sliki 5.3.

Na sliki vidimo zelo dobro ujemanje med simulacijo in teoretično napovedjo. To potrjuje pravilno delovanje metode v optično anizotropni snovi.

### 5.4 Periodična modulacija

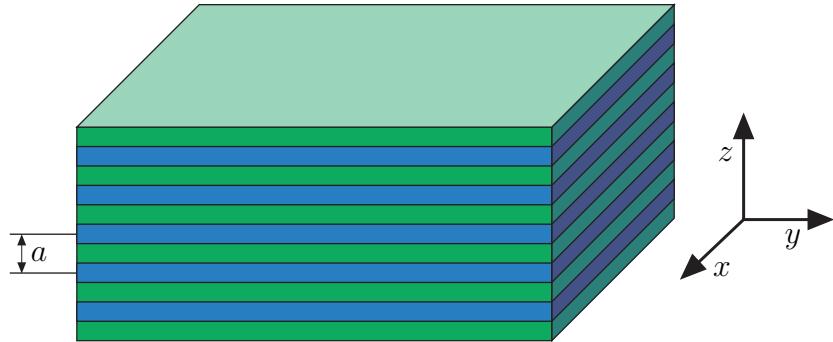
Pri periodični modulaciji lomnega količnika opazimo pojav, da se svetloba določenih frekvenc ne more širiti po mediju[28, 29]. Temu pojavu pravimo prepovedani pas (*angl. band gap*) in je soroden elektronski energijski reži pri molekulskih kristalih. Za prisotnost fotonskega prepovedanega pasu potrebujemo kristal oz. periodično strukturo, kjer je perioda primerljiva z valovno dolžino svetlobe. Fotonsko energijsko režo za vidno svetobo zato opazimo pri koloidnih kristali, ki imajo periodo okrog  $1 \mu\text{m}$ .

Širina in oblika prepovedanega pasu sta odvisni od obeh lomnih količnikov, periode modulacije in velikosti kristala. Za preverjanje metode sem modeliral kristal, kjer se



Slika 5.3 Rezultati preizkusa z uniformnim in anizotropnim dielektričnim tenzorjem

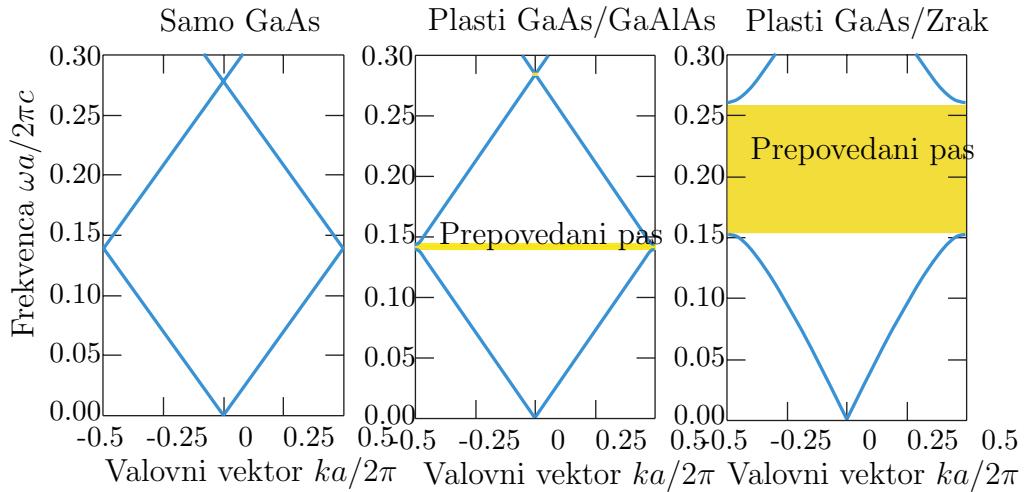
izmenjujejo plasti z izotropno dielektričnostjo  $\varepsilon_1$  in  $\varepsilon_2$ . Takšna struktura je prikazana na sliki 5.4.



Slika 5.4 Periodična struktura, kjer se izmenjujeta plasti z različnimi dielektričnimi konstantama. Svetloba se širi v smeri osi  $z$ [29].

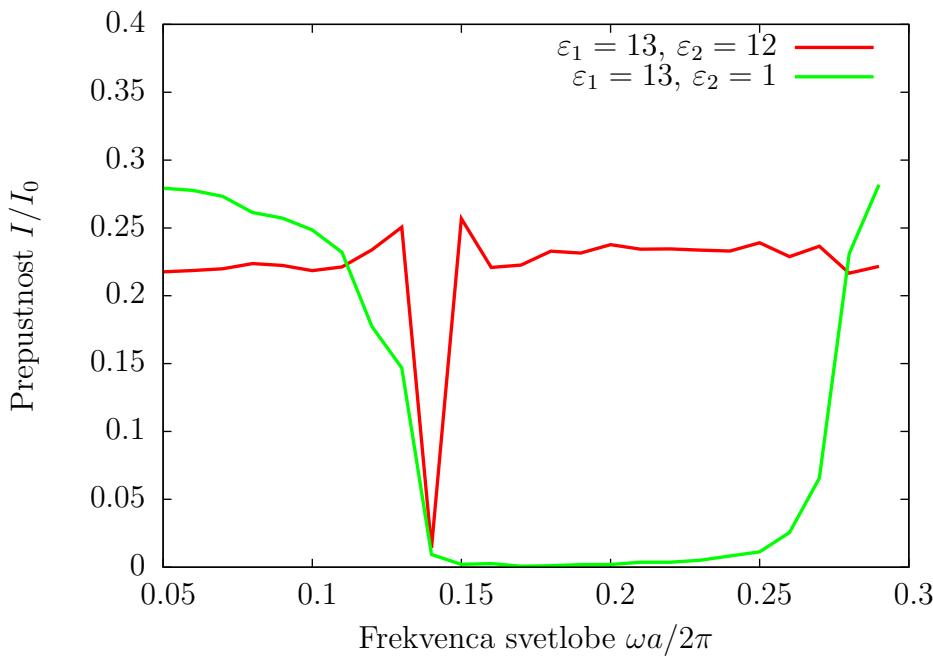
Teoretičen izračun odvisnosti frekvence  $\omega$  od valovnega vektorja  $k$  je prikazan na sliki 5.5. Če se dielektrični konstanti obeh plasti razlikujeta, opazimo interval frekvenc, pri katerih ni možen noben valovni vektor, torej se valovanje ne more širiti skozi kristal. S povečevanjem razlike v dielektričnosti plasti se prepovedani pas razširi.

Po napovedi naj bi bila spodnja meja prepovedani pasu okrog  $\frac{\omega a}{2\pi c} \approx 0,15$ , kjer je  $a$  perioda kristala,  $c$  pa hitrost svetlobe. Zgornja meja je močneje odvisna od razlike v dielektričnosti[29].



**Slika 5.5** Pojav energijske reže v fotonskem kristalu. Levo: celotna plast ima dielektričnost  $\varepsilon = 13$ . Sredina: Izmenjevanje plasti z dielektričnima konstantama 13 in 12. Desno: Izmenjevanje plasti z dielektričnima konstantama 13 in 1. [29]

Za modeliranje takšnega kristala smo uporabili periodične robne pogoje v smereh  $x$  in  $y$ , v smeri  $z$  pa celico dolžine 1024 enot z 20 enotami absorbirajoče plasti na vsakem koncu. Grafa prepustnosti kristalov z različnimi izbirami za dielektričnosti sta na sliki 5.6.



**Slika 5.6** Rezultati preizkusa s periodično modulacijo lomnega količnika

Na sliki res opazimo oster padec prepustnosti v določenem frekvenčnem pasu, ki se dobro ujema s pričakovanim na sliki 5.5. Metoda torej pravilno napove položaj in širino prepovedanih pasov. Zlasti pri veliki razliki v dielektričnosti plasti meja prepovedanega pasu ni ostra, ampak krivulja postane zaobljena. To je posledica končne velikosti sistema, saj so teoretični izračuni napravljeni za neskončen kristal, z metodo FDTD pa lahko modeliramo le končnega. Kljub temu pa metoda da kvalitativno in kvantitativno pravilne rezultate za pojav fotonskega prepovedanega pasu.

Periodična modulacija lomnega količnika je pomembna za tvorbo metamaterialov[30]. To so umetne snovi z nenavadnimi fizikalnimi lastnostmi, ki jih ne najdemo v naravi. Največ pozornosti na področju metamaterialov je posvečene snovem z negativnim lomnim količnikom pri določeni valovni dolžini svetlobe. Takšni materiali so sestavljeni iz periodičnih struktur, manjših od valovne dolžine svetlobe. Dobro ujemanje med rezultati numerične metode in napovedjo potrjuje, da je z isto metodo mogoče raziskovati tudi optične lastnosti metamaterialov.

## 5.5 Dvolomno vlakno

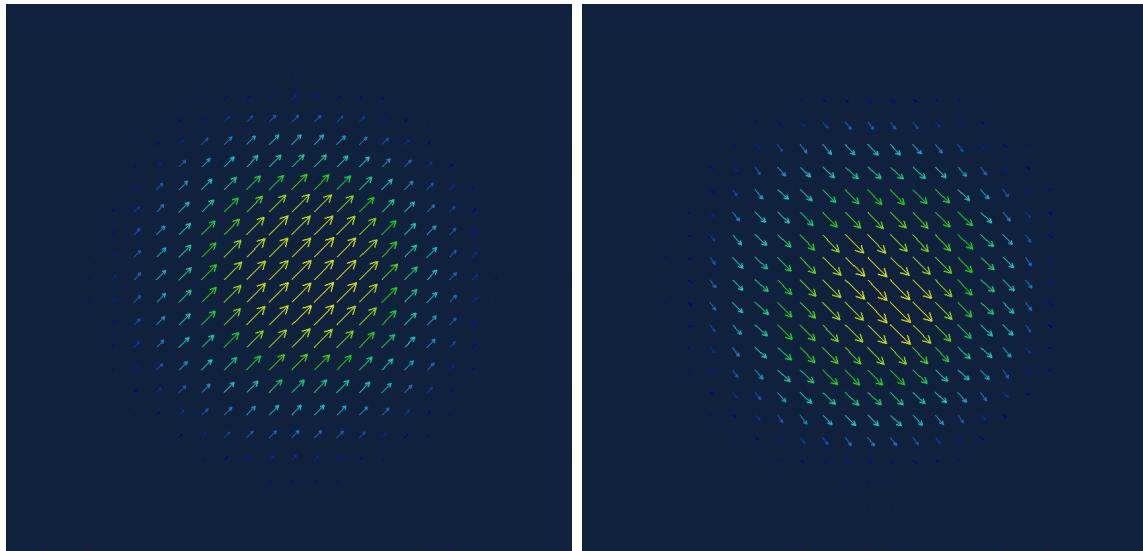
V magistrskem delu smo preučevali širjenje svetlobe po cilindričnih vlaknih z različnimi profili direktorja. Računsko metodo smo preizkusili na sistemu, ki je podoben obravnavanim, še vedno pa lahko napovemo rezultat. V ta namen smo modeliral cilindrično vlakno, v katerem je uniformen dvolomen kristal, vanj pa pošljemo kratek laserski sunek. Polarizacija vpadne svetlobe je nagnjena za  $45^\circ$  glede na optično os, tako da se vpadni žarek razcepi na redno in izredno komponento. Zaradi dvolomnosti obe komponenti potujeta z različnima hitrostma, laserski sunek pa se razdeli na dva dela. Direktorsko polje je regularno, brez defektov, zato ne pričakujemo defektov v polarizaciji svetlobe.

Simulirani laserski pulz je trajal le nekaj valovnih dolžin svetlobe. Na ta način sta se obe komponenti znotraj vlakna jasno ločili in smo ju lahko primerjali. Ker se sunek hitro razcepi, je takšen postopek primeren za iskanje lastnih načinov širjenja po valovodih[11].

Rezultati na sliki 5.7 potrjujejo pravilno delovanje metode. Vpadnja svetloba se razcepi na komponenti z redno in izredno polarizacijo, ki se širita z različnima hitrostma. Redna komponenta, prikazana na levi sliki, občuti manjši lomni količnik in je zato hitrejša.

## 5.6 Robni pogoji

Za preprečevanje odboja na stranskih ploskvah smo uporabili absorbirajoče robne pogoje. Plast PML nam omogoča, da imamo material s poljubno velikimi izgubami, pa vseeno ne dobimo odboja na meji, vse dokler so električne in magnetne izgube v primernem razmerju. V praksi pa se zaradi diskretizacije vseeno nekaj valovanja odbije na meji med notranjostjo celice in robno plastjo. Najti moramo torej ravnotežje med

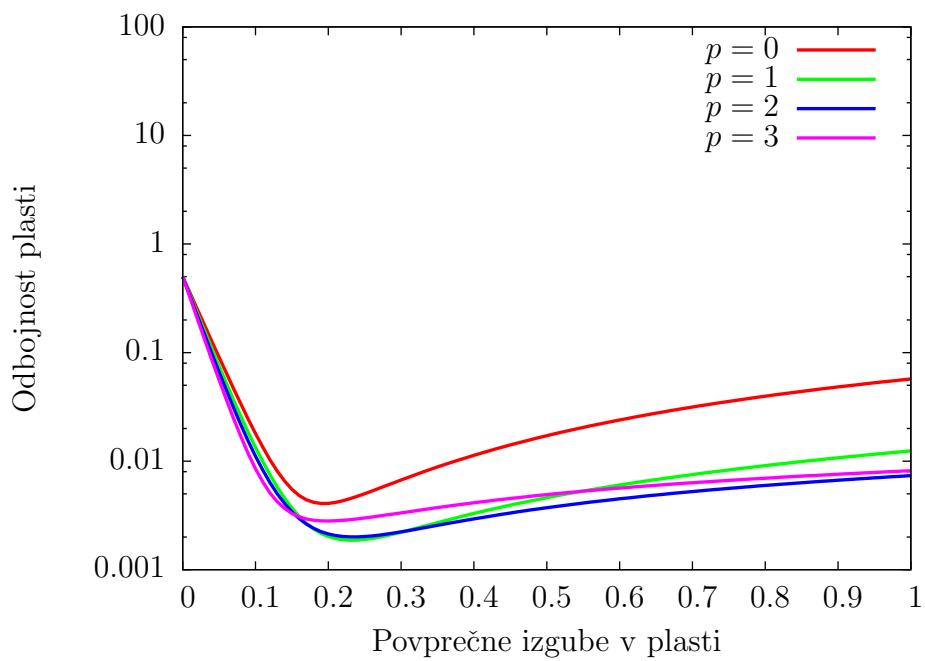


**Slika 5.7** Lastna načina širjenja svetlobe skozi vlakno z uniformnim profilom direktorja. Vpadna svetloba je polarizirana vodoravno, optična os pa z vodoravnico oklepa kot  $45^\circ$ .

dvema prispevkoma: če so izgube majhne, bo del valovanja prišel skozi robno plast in se odbil na zunanjem robu. Če pa so izgube prevelike, se bo del valovanja odbil že na notranjem robu. Oba prispevka lahko zmanjšamo, če povečamo debelino robne plasti, ampak s tem se poveča tudi čas računanja. Odboj na notranji steni pa lahko omilimo, če se izognemo ostri meji in izgube zvezno naraščajo od notranjosti proti robu. V literaturi[11] priporočajo potenčno naraščanje izgub,  $\sigma \propto (d-d_0)^p$ , kjer je  $d$  oddaljenost od zunanjega roba,  $d_0$  pa debelina plasti.

Za nekaj vrednosti  $p$  smo izračunali odbojnost robne plasti z debelino 10 enot diskretizacije. Rezultati so prikazani na sliki 5.8.

V primeru, da v plasti ni izgub, je njena odbojnost enaka 1, saj gre celotno valovanje skozi plast in se odbije na zunanji meji. Če izgube malo povečamo, odbojnost v vseh primerih strmo pada. Pri profilih, kjer imamo nezveznost v izgubah ali v njihovem odvodu ( $p < 2$ ) pa odbojnost kmalu začne spet naraščati, saj postane odboj na notranji meji že opazen. Pri večjih potencah lahko izgube še povečamo in s tem dosežemo nižjo odbojnost plasti. V zgornjem primeru se za najboljši profil izkaže kvadratno naraščanje absorpcije, zato smo za vse nadaljnje račune uporabili takšno plast. Z debelino robne plasti 16 enot in s primerno izbiro za prevodnost  $\sigma$  v robnem pasu lahko dosežemo, da je odbito valovanje za 5 velikostnih redov šibkejše od vpadnega. Pri uporabljeni ločljivosti metode je debelina plasti med eno in dvema valovnima dolžinama svetlobe.



**Slika 5.8** Odbojnost robne plasti debeline 10 enot pri različnih profilih električnih in magnetnih izgub  $\sigma$ . Najbolje se izkaže material, kjer izgube naraščajo kvadratno z oddaljenostjo od roba celice ( $p = 2$ ).

# 6

## Širjenje laserskega sunka

---

### 6.1 Radialni profil direktorja

Tekočekristalna vlakna, pridobljena v laboratoriju, imajo radialen direktorski profile[19]. Ugotavljali, kako defekt v sredici vlakna vpliva na širjenje svetlobe. Vrednosti parametrov, ki smo jih uporabili pri simulaciji, so našteti v tabeli 6.1.

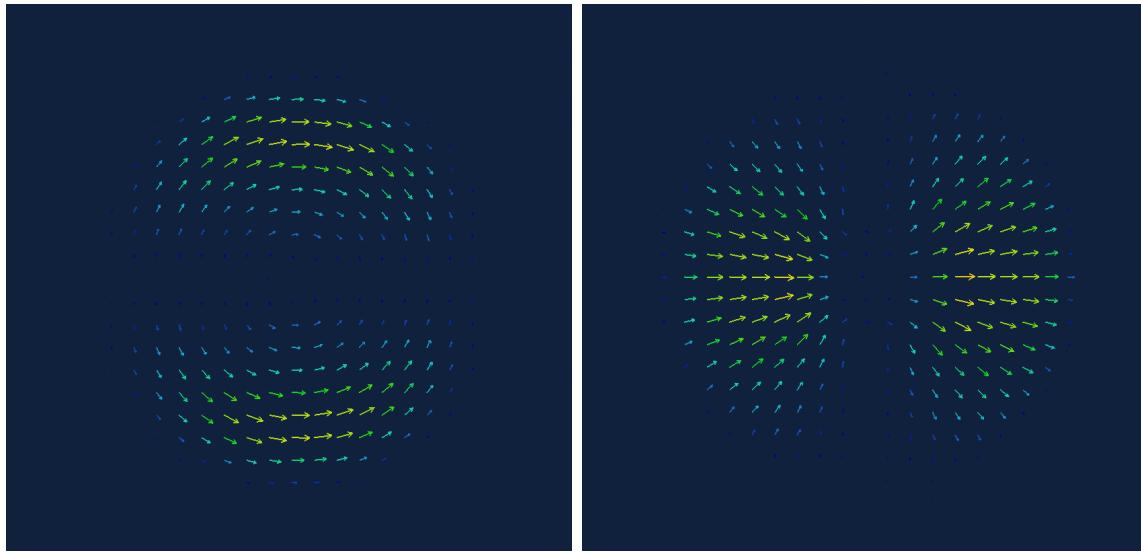
Valovna dolžina svetlobe	480 nm
Premer vlakna	3 $\mu\text{m}$
Enota diskretizacije	40 nm
Redni lomni količnik v vlaknu	1,52
Izredni lomni količnik v vlaknu	1,68
Lomni količni okoliške snovi	1,33
Širina grla laserskega sunka	3 $\mu\text{m}$
Trajanje sunka	40 fs

**Tabela 6.1** Parametri materiala in laserskega sunka, uporabljeni pri izračunih

Podobno kot pri preizkušanju z uniformnim direktorjem smo najprej v vlakno poslali zelo kratek laserski sunek. Zaradi dvolomnosti tekočega kristala smo spet opazili razcep sunka na dve komponenti oz. dva lastna načina širjenja svetlobe. Ker pa je direktorsko polje singularno, sta tudi polarizaciji obeh načinov singularni, kot prikazuje slika 6.1.

S slike takoj opazimo podobnost med polarizacijo svetlobe, zlasti pri počasnejšem nihajnjem načinu (slika 6.1 desno), in direktorskim poljem. Če na polarizacijo gledamo kot na vektor z direktorsko simetrijo, lahko z enačbo (2.9) obema načinoma priredimo ovojno število +1. Dodatno pa imata oba načina še defektno ravnino, kjer se polarizacija svetlobe obrne, intenziteta svetlobe pa je enaka 0. V enem izmed načinov je ta ravnina navpična, v drugem pa vodoravna. Če polarizacijo svetlobe na eni strani te ravnine obrnemo, dobimo pravi linijski defekt moči +1.

Direktorsko polje znotraj vlakna ima radialno simetrijo, saj se ne spremeni če vlakno vrtimo okrog svoje osi. To simetrijo pa zlomi vpadna svetloba, ki uvede preferenčno smer, in sicer smer polarizacije. Po dolgem času v vlaknu mora svetlobni žarek zadostiti



**Slika 6.1** Lastna načina širjenja svetlobe skozi vlakno z radialnim profilom direktorja ( $s = +1$ )

obem simetrijam. Oba načina na sliki 6.1 si lahko predstavljamo kot defekta z ovojnim številom  $+1$ , ki jim odstranimo vse tiste dele, kjer bi polarizacija morala kazati pravokotno na vpadno polarizacijo.

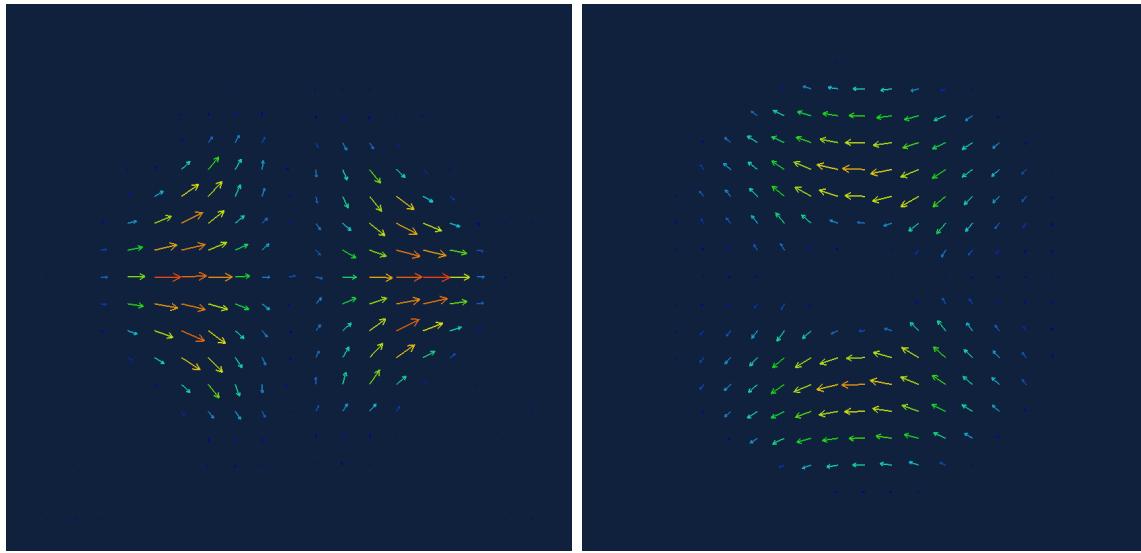
## 6.2 Hiperbolični profil direktorja

V vlaknu z radialnim direktorskim profilom opazimo tesno povezavo med simetrijo tekočega kristala in polarizacijo svetlobe. Na podlagi tega lahko pričakujemo podobno povezavo tudi, če namesto defekta z ovojnim številom  $+1$  v sredino vlakna postavimo drug defekt. Z vektorskim poljem so kompatibilni le takšni s celoštevilsko močjo, zato sem izbraj hiperbolični defekt z  $s = -1$ .

Radialni direktorski profil znotraj vlakna opazimo eksperimentalno, ker površinsko aktivna snov na robu vlakna vsiljuje pravokotno smer direktorja. Drugačnih direktorskih polj, na primer takšnega s hiperboličnim defektom, pa ne moremo ustvariti samo z izbiro robnih pogojev. Poljuben direktorski profil je mogoče tekočemu kristalu vsiliti z zunanjim poljem, nato pa ga stabilizirati s polimerizacijo.

Kratek laserski sunek se podobno kot pri radialnem profilu razdeli na dva načina, ki sta skladna s simetrijo direktorja. Oba načina sta prikazana na sliki 6.2.

Območja z višjo intenziteto svetlobe so razporejena enako kot na sliki 6.1, polarizacijo svetlobe pa tvori defekt z ovojnim številom  $-1$ . Spet sta vidni ravnini brez svetlobe, kjer se smer polarizacije obrne.



**Slika 6.2** Lastna načina širjenja svetlobe skozi vlakno s hiperboličnim profilom direktorja ( $s = -1$ )

### 6.3 Defekti s polovično močjo

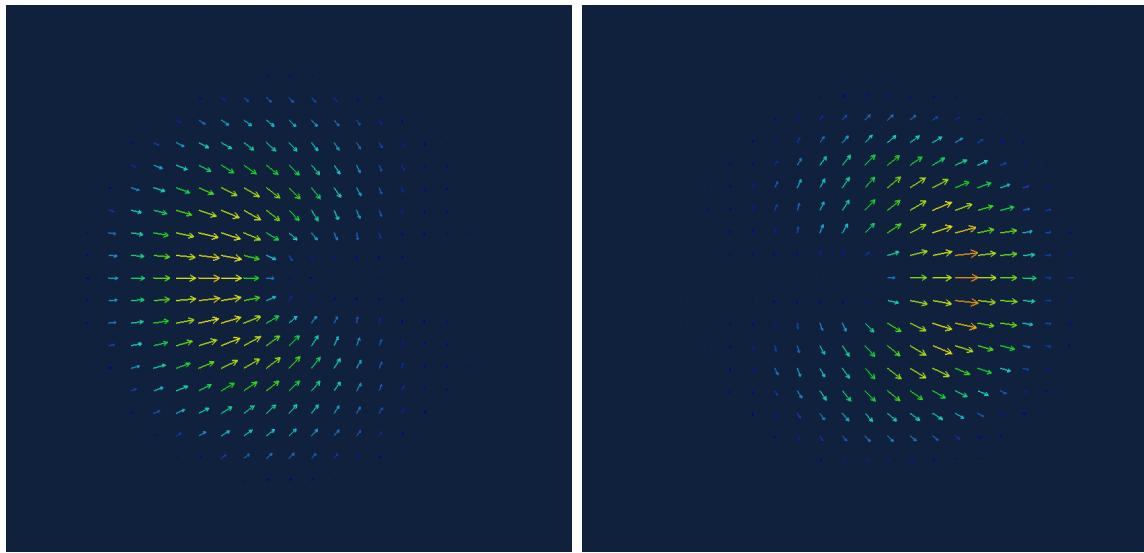
Videli smo, da radialni in hiperbolični profil direktorja znotraj tekočekristalnega vlakna vsili svojo simetrijo svetlobi. Na mestih, kjer ta simetrija ni kompatibilna s polarizacijo vpadne svetlobe, svetlobe ni. V obeh primerih bi lahko z obratom polarizacije na delu vlakna dosegli, da polarizacija svetlobe tvori defekt s celoštevilsko močjo. Takšni defekti so kompatibilni z vektorskimi polji, kot je električno polje svetlobe.

V tekočem kristalu pa lahko ustvarimo tudi defekte s polcelo močjo, ki jih prava vektorska polja ne morejo tvoriti. Ti so še posebej zanimivi za eksperimentalno delo, saj se zaradi nižje energije pogosto pojavljajo v različnih vzorcih tekočih kristalov, ne samo v vlaknih. Simulirali smo širjenje svetlobe skozi tekočekristalno vlakno, ki ima v osi linijski defekt z ovojnim številom  $s \pm 1/2$ . Izkaže se, da se tudi v tem primeru laserski sunek razcepi na dva dela, ki ustrezata redni in izredni polarizaciji.

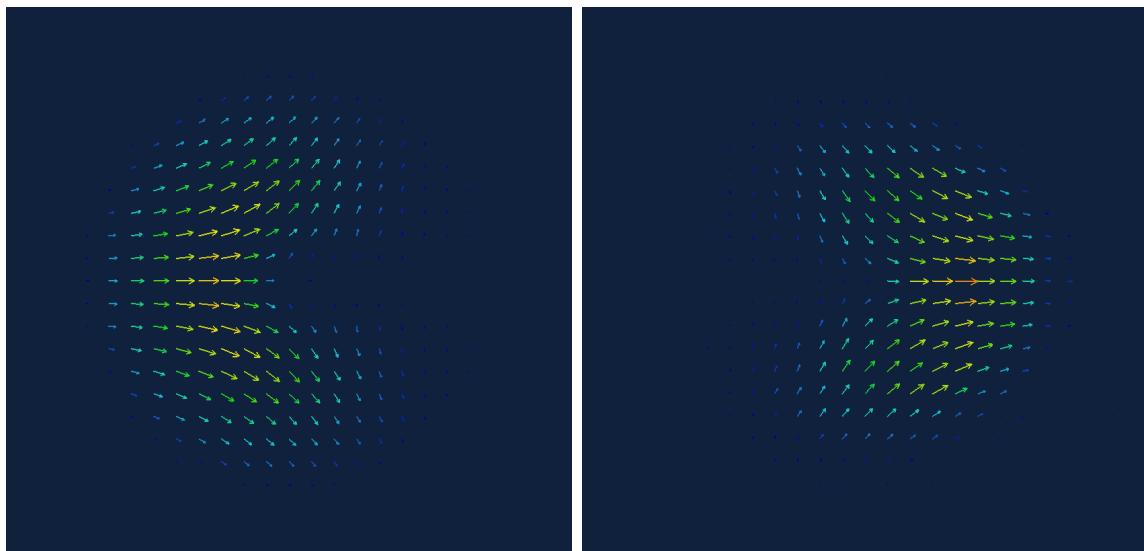
V nasprotju z radialnim in hiperboličnim profilom pri propagaciji svetlobe skozi defekte z necelo močjo ne opazimo ravnin brez svetlobe. Znotraj vsakega lastnega načina je le eno intenzitetno območje. Simetrijski ravnini, opaženi pri celoštevilskih defektih, nista kompatibilni s simetrijo defekta s polcelim ovojnim številom. Spet pa so opazna temna območja, kjer bi morala biti polarizacija svetlobe pravokotna na vpadno polarizacijo.

### 6.4 Splošne zakonitosti

Nekaj lastnosti lastnih načinov propagacije svetlobe lahko obrazložimo s simetrijo. Polarizacija vpadne svetlobe je linearна in uniformna. Njeno ovojno število je enako 0,



**Slika 6.3** Lastna načina širjenja svetlobe skozi vlakno z defektom z necelim ovojnim številom  $s = +1/2$



**Slika 6.4** Lastna načina širjenja svetlobe skozi vlakno z defektom z necelim ovojnim številom  $s = -1/2$

torej ima dvoštevno rotacijsko os in dve zrcalni osi. Če je svetloba polarizirana v smeri osi  $x$ , sta zrcalni osi os  $x$  in os  $y$ . Kakšna izmed teh dve zrcalnih osi je prisotne tudi v direktorskem defektu, ne pa nujno obe. Polarizacija svetlobe znotraj vlakna bo obdržala vse simetrijske osi, ki so prisotne tako v vpadni svetlobe kot tudi v tekočem kristalu.

V zgorjih opažanjih lahko najdemo podobnosti in izpeljemo splošne zakonitosti.

- Sunek linearno polarizirane svetlobe se vedno razdeli na dva lastna načina, ki ustreza redni in izredni polarizaciji.
- Polarizacija svetlobe v obeh načinih tvori defekt z enakim ovojnim številom kot defekt v tekočem kristalu.
- V enem izmed načinov je polarizacija svetlobe vzporedna z direktorjem, v drugem pa je nanj pravokotna.
- V območjih, kjer bi po prejšnjem pravilu morala biti svetloba polarizirana pravokotna na vpadno polarizacijo, svetlobe ni.
- Lastna načina imata enako simetrijo, simetrijske ravnine pa so presek simetrijskih ravnin tekočega kristala in polarizacije vpadne svetlobe.

S pomočjo teh zakonitosti lahko napovemo, kako se bo svetloba širila po vlaknu s poljubnim linijskim defektom po sredini.



# 7

## Stalna laserska svetloba

---

Zelo kratki laserski sunki so zanimivi za teoretično obravnavo, ker lahko z njimi najdemo lastne načine širjenja svetlobe po snovi. Z eksperimentalnega vidika pa so izjemno zahtevni, tako za ustvarjanje pulza kot za njegovo opazovanje. Sunek, uporabljen na zgornjih slikah je trajal le okrog 40 fs, kar je sicer v dosegu ultrahitrih femtosekundnih laserjev. Mnogo bolj enostavno pa je opazovanje z laserjem, ki sveti konstantno.

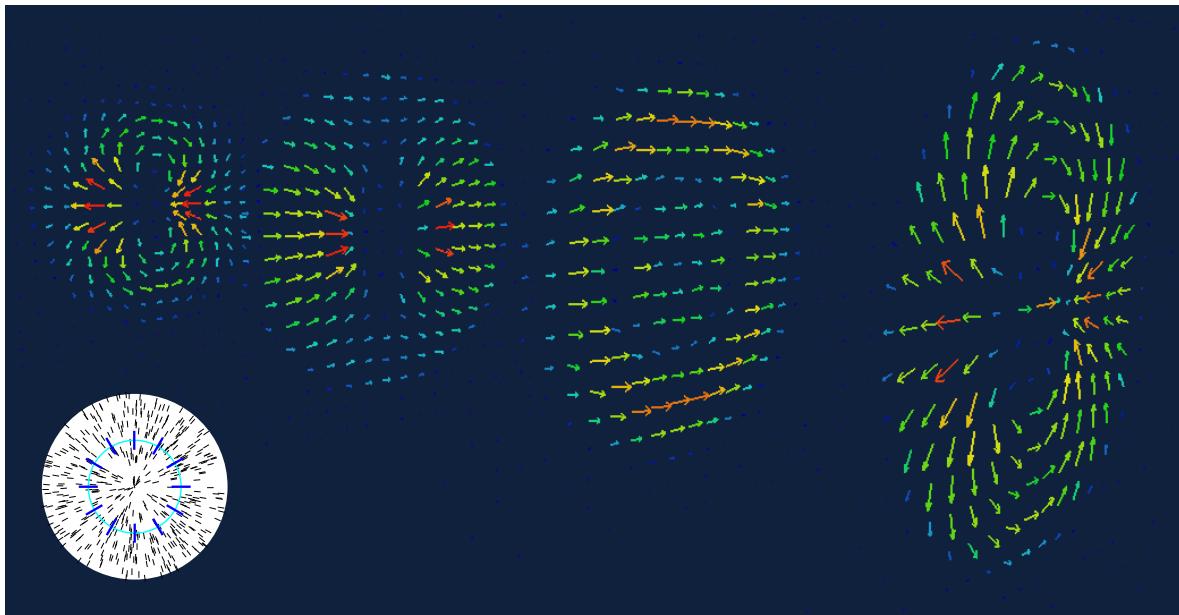
### 7.1 Radialni profil direktorja

Pri enakomernem laserskem žarku je svetloba v vlaknu kombinacija obeh lastnih načinov, ki se širita z različnima hitrostma. Frekvenca svetlobe je nespremenjena in zato enaka po celotnem vlaknu, opazimo pa močno krajevno odvisnost oblike polja. Trenutne slike električnega polja znotraj vsakna so prikazane na sliki 7.1.

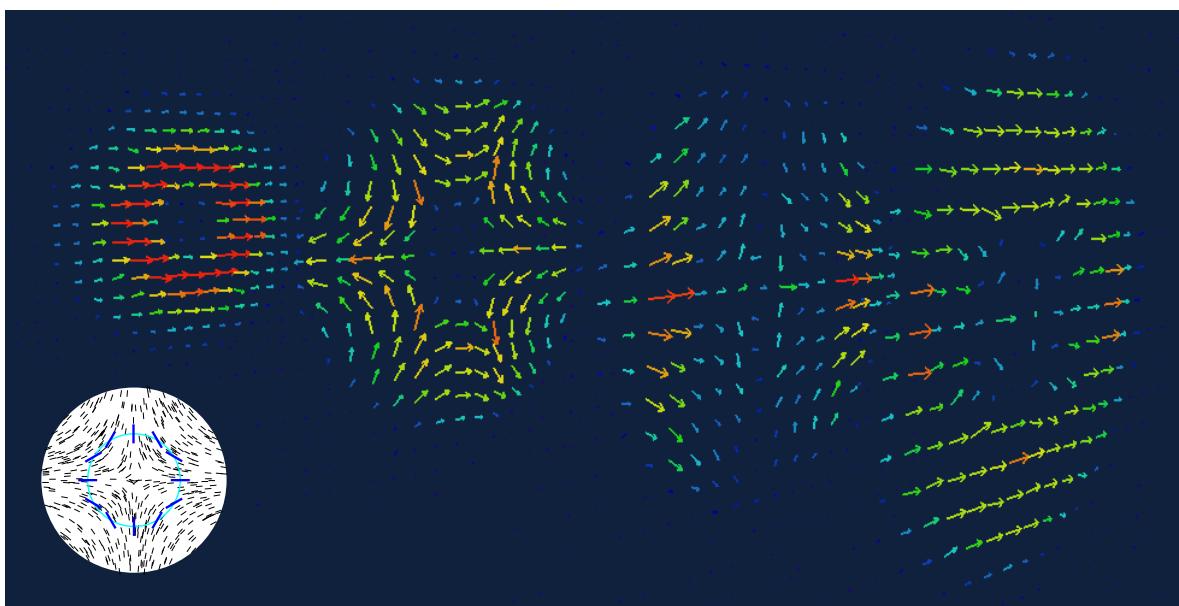
Na sliki je dobro vidno izmenjevanje konfiguracij električnega polja z ovojnima številoma  $s = 0$  in  $s = +2$ . Zaradi razlike v hitrosti propagacije se na nekaterih mestih v vlaknu oba valovna načina z ovojnim številom  $+1$  seštejeta, na drugih pa odštejeta. Rezultati nakazujejo, da se podobno zgodi tudi z defektom v polarizaciji svetlobe. Na prvem in zadnjem preseku na sliki 7.1 lahko vidimo defekt moči  $s = +2$ , na drugi sliki z desne pa je vidna uniformna konfiguracija električnega polja brez defektov. Vmes, kot na primer na tretji sliki z desne, pa opazimo vmesno stanje. Konfiguracija ustreza defektu z ovojnim številom  $+1$ , kjer zaradi nekompatibilnosti s smerjo polarizacije manjka del, kjer bi moralo biti polje v smeri  $y$ . Presek polja je zelo podoben lastnemu načinu vlakna, prikazanemu na desni strani slike 6.1.

### 7.2 Hiperbolični profil direktorja

Podobno obnašanje opazimo tudi v vlaknu s hiperboličnim direktorskim profilom, ki ima v osi defekt z ovojnim številom  $-1$ . V tem primeru polarizacija svetlobe prehaja med načinoma z ovojnim številom  $0$  in  $-2$ , spet pa so opazna tudi vmesna stanja z ovojnim številom  $-1$ . Primer svetlobnega polja v takšnem vlaknu je na sliki 7.2



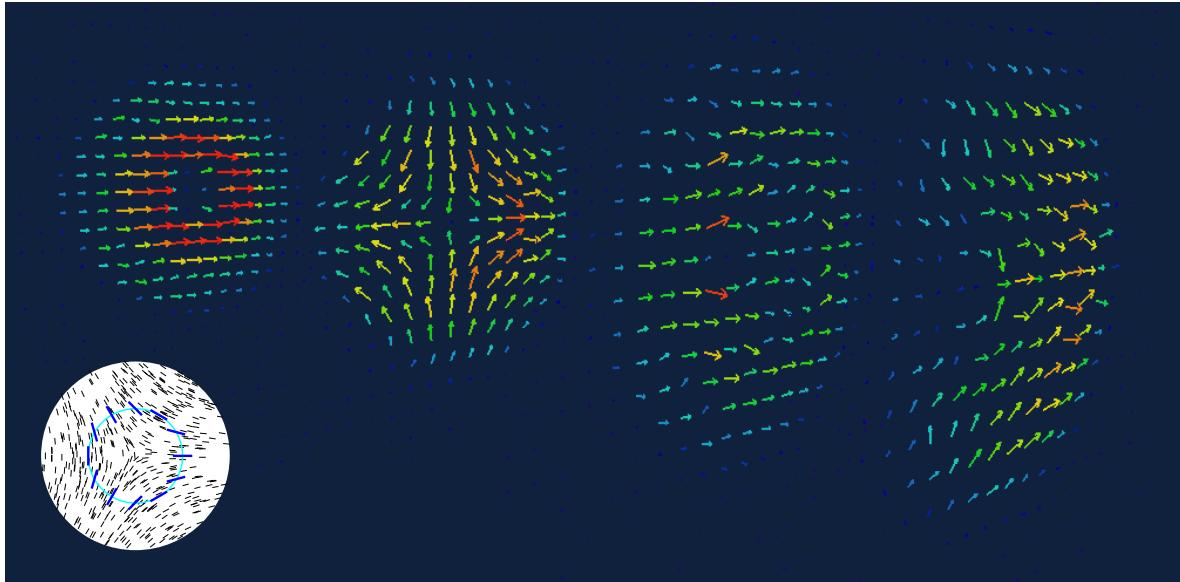
**Slika 7.1** Posnetki električnega polja na različnih mestih znotraj vlakna z radialnim direktorskim profilom ob stalni osvetlitvi. Vidno je izmenjevanje konfiguracij z ovojnima številoma  $s = 0$  in  $s = +2$ .



**Slika 7.2** Posnetki električnega polja na različnih mestih znotraj vlakna s hiperboličnim direktorskim profilom ob stalni osvetlitvi. Vidno je izmenjevanje konfiguracij z ovojnima številoma  $s = 0$  in  $s = -2$ .

### 7.3 Defekti z necelo močjo

Nazadnje smo simulacijo ponovili tudi z vlaknom, v katerem ima ureditev tekočega kristala defekt s polcelo močjo. Takšen primer je še posebej zanimiv, ker imata lastna načina le eno simetrijsko ravnino, in sicer tisto, ki vsebuje polarizacijo vpadne svetlobe.



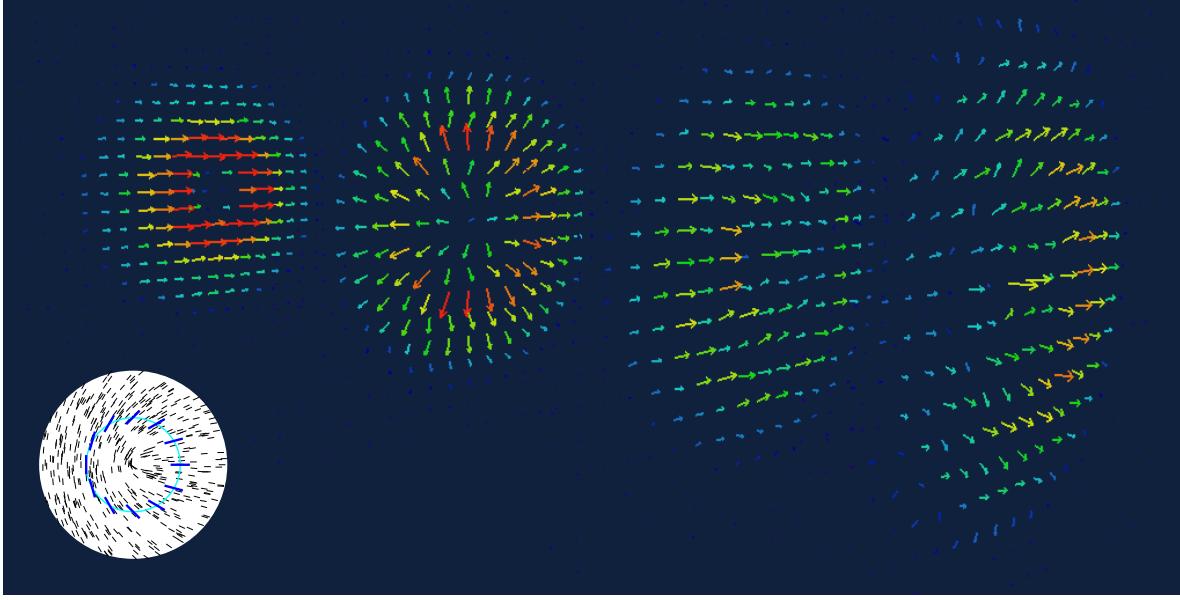
**Slika 7.3** Posnetki električnega polja na različnih mestih znotraj vlakna z direktorskim profilom z defektom moči  $-1/2$  ob stalni osvetlitvi. Vidno je izmenjevanje konfiguracij z ovojnima številoma  $s = 0$  in  $s = -1$ .

Na slikah lahko prepoznamo uniformno polje brez defektov (skrajno levi presek) in polje z defektom moči  $-1$  (drugi presek z leve). Za razlike od defekta moči  $1$ , ki ga opazimo v vlaknu s hiperboličnim profilom, pa je na zgornji sliki jasno vidna tudi komponenta svetlobe s polarizacijo v smeri  $y$ . Takšna polarizacija je v vlaknu "prepovedana", saj je pravokotna na vpadno polarizacijo. Često desen presek na sliki 7.3 prikazuje vmesno stanje z defektom moči  $-1/2$ , kjer zopet manjka komponenta v smeri  $y$ .

Podobno velja za defekt z ovojnim številom  $+1/2$ , ki je prikazan na sliki 7.4.

Na drugi sliki z leve je lepo viden radialen profil polarizacije svetlobe. Tako enakomerne radialne polarizacije ne moremo dobiti z radialnim profilom tekočekristalnega direktorja. Z uporabo defekta s polovično močjo pa lahko žarek linearne polarizirane laserske svetlobe pretvorimo v žarek z radialno polarizacijo.

Na podlagi rezultatov lahko zaključimo, da "prepovedana" pravokotna polarizacija manjka le pri načinu oz. konfiguracijah polja, kjer polje tvori defekt z enako močjo kot defekt v tekočem kristalu. S konstantnim laserskim žarkom dosežemo seštevanje obeh propagacijskih načinov, ki na določenih mestih v vlaknu privede do komponente s pravokotno polarizacijo. Tu je pomembno, da pri lastnih načinih ni vsa svetloba polarizirana v smeri  $x$ , le tam, kjer bi zaradi topologije defekta moralna biti polarizirana



**Slika 7.4** Posnetki električnega polja na različnih mestih znotraj vlakna z direktorskim profilom z defektom moči  $+1/2$  ob stalni osvetlitvi. Vidno je izmenjevanje konfiguracij z ovojnima številoma  $s = 0$  in  $s = +1$ .

v smeri  $y$ , intenziteta svetlobe močno pade. Pri konstantnem svetjenju pa se lastni načini seštejejo tako, da imajo ombočja, kjer topologija defekta narekuje polarizacijo v smeri  $y$ , enako intenzitetu svetlobe kot okolica.

## 7.4 Radialno polarizirana svetloba

Radialno polarizirana svetloba je uporabna za laserske pasti[31]. Z radialno polariziranim žarkom lahko ujamemo tudi delce, ki jih z linearно polarizirano svetlobo zelo težko, na primer mikroskopske kovinske delce. Radialno polarizirano svetlobo je možno fokusirati v piko velikosti  $0,16\lambda^2$ , kar je občutno manj od meje  $0,26\lambda^2$  za linearno polarizirano svetlobo[32]. S primerno dvolomnostjo tekočega kristala in dolžino vlakna lahko linijski defekt z ovojnim številom  $s = 1/2$  služi kot pretvornik med linearno in radialno polarizacijo svetlobe.

Če želimo, da se lastna načina propagacije svetlobe po vlaknu z defektom moči  $1/2$  (na sliki 6.3) seštejeta v radialno polarizacijo, mora biti fazna razlika med njima polnihaja. V vlaknu z dolžino  $L$  bo redni žarek naredil  $L/\lambda_o = Ln_o/\lambda$  nihajev, izredni pa  $L/\lambda_e = Ln_e/\lambda$  nihajev, kjer je  $\lambda$  valovna dolžina svetlobe v vakuumu. Želeno radialno polarizacijo bomo dobili, če bo razlika med številoma nihajev polcelo število.

$$k + \frac{1}{2} = \frac{L}{\lambda} (n_e - n_o) = \frac{L}{\lambda} \Delta n \quad (7.1)$$

kjer je  $k$  poljubno celo število. Za tipične vrednosti lomnih količnikov v tekočih kristalih

in valovne dolžine svetlobe lahko izračunamo optimalno dolžino vlakna kot

$$L = \frac{\lambda}{2\Delta n} \approx \frac{480 \text{ nm}}{2 \cdot 0,16} \approx 1,5 \mu\text{m} \quad (7.2)$$

če izberemo vrednosti  $k = 1$ . Ker je število  $k$  poljubno, lahko isto stvar dosežemo tudi z daljšimi vlakni. Dolžina, potrebna za pretvorbo iz linearne v radialno polarizacijo, se spremeni tudi ob uporabi tekočega kristala z drugačno dvolomnostjo ali laserja z drugo valovno dolžino. Dvolomnost tekočega kristala je odvisna od stopnje reda  $S$  in s tem tudi od temperature, kar omogoča uravnavanje delovanja takšne naprave.



8

## Zaključek

---



# 9

## Literatura

---

- [1] P. G. de Gennes in J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals, Second Edition*. Oxford University Press (1995).
- [2] P. Yeh in C. Gu, *Optics of Liquid Crystal Displays*. Wiley (2010).
- [3] L. D. Landau in E. M. Lifsic, *Electrodynamics of Continuous Media*. Butterworth-Heinemann (1984).
- [4] John Hiatt, Reliability Physics Symposium, 1981. 19th Annual, 130–133 (1981).
- [5] M. Humar in I. Mušević, Opt. Express **18**, 26995–27003 (2010).
- [6] H. Coles in S. Morris, Nat. Photonics **4**, 676–685 (2010).
- [7] M. Stalder in M. Schadt, Opt. Lett. **21**, 1948–1950 (1996).
- [8] S.-W. Shih-Wei Ko, C.-L. Ting, A. Y.-G. Fuh in T.-H. Lin, Opt. Express **18**, 3601–3607 (2010).
- [9] D. W. Berreman, J. Opt. Soc. Am. **62**, 502–510 (1972).
- [10] S Stallinga, J. Appl. Phys. **85**, 3023 (1999).
- [11] A. Taflove in S. C. Hagness, *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*. Artech House (2005).
- [12] D. K. Hwang in A. D. Rey, Applied Optics **44**, 4513–4522 (2005).
- [13] [http://barrett-group.mcgill.ca/tutorials/liquid\\_crystal/LC02.htm](http://barrett-group.mcgill.ca/tutorials/liquid_crystal/LC02.htm) (Na spletu; dostopano 7. 8. 2013).
- [14] N. D. Mermin, Rev. Mod. Phys **51**, 591–648 (1979).
- [15] [https://en.wikipedia.org/wiki/Liquid\\_crystal](https://en.wikipedia.org/wiki/Liquid_crystal) (Na spletu; dostopano 19. 11. 2012).

- [16] D. Kleman in O. D. Lavrentovich, *Soft Matter Physics: An Introduction*. Springer (2003).
- [17] Simon Čopar, *Topologija in geometrija defektov v ograjenem nematiku*, (2012).
- [18] M. Ravnik in S. Žumer, Liq. Cryst. **36**, 1201–1214 (2009).
- [19] K. Peddireddy, P. Kumar, S. Thutupalli, S. Herminghaus in C. Bahr, Langmuir **28**, 12426–12431 (2012).
- [20] <https://en.wikipedia.org/wiki/Birefringence> (Na spletu; dostopano 1. 8. 2013).
- [21] [https://en.wikipedia.org/wiki/Gaussian\\_beam](https://en.wikipedia.org/wiki/Gaussian_beam) (Na spletu; dostopano 29. 7. 2013).
- [22] E. Brasselet, N. Murazawa, H. Misawa in S. Juodkazis, Phys. Rev. Lett. **103**, 103903 (2009).
- [23] Etienne Brasselet, Phys. Rev. Lett. **108**, 087801 (2012).
- [24] K. Yee, IEEE T. Antenn. Propag. **14**, 302–307 (1966).
- [25] [http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/Yee\\_lattices](http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/Yee_lattices) (Na spletu; dostopano 27. 4. 2013).
- [26] J.-P. Berenger, J. Comput. Phys. **114**, 185–200 (1994).
- [27] E. Hecht, *Optics*. Addison-Wesley Longman (2002).
- [28] L. Novotny in B. Hecht, *Principles of Nano-Optics*. Cambridge University Press (2006).
- [29] J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, J. N. Winn in R. D. Meade, *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light (Second Edition)*. Princeton University Press (2011).
- [30] N. Engheta in R.W. Ziolkowski, *Metamaterials: Physics and Engineering Explorations*. Wiley (2006).
- [31] Q Zhan, Opt. Express **12**, 3377–3382 (2004).
- [32] R. Dorn, S. Quabis in G. Leuchs, Phys. Rev. Lett. **91** (2003).