

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 o avtorstvu in objavi elektronske oblike zaključnega dela**

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 ter
- da Fakulteti za matematiko in fiziko Univerze v Ljubljani dovoljujem objavo elektronske oblike svojega dela na spletnih straneh.

Ljubljana, 26. 8. 2013

Miha Čančula



Iskreno se zahvaljujem mentorju, prof. dr. Slobodanu Žumru, in somentorju, doc. dr. Mihu Ravniku, za strokovno vodstvo in pomoč pri uvajjanju v raziskovalno delo.

Zahvala gre tudi Davidu Seču, dr. Tinetu Parenti in dr. Simonu Čoparju, ki so mi ves čas pisanja sedeli ob strani s koristnimi nasveti in pripombami.



## 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, kjer se dielektrični tenzor poljubno spreminja po prostoru. Postopek reševanja temelji na metodi končnih diferenc v časovni domeni. Tekoči kristal je modeliran kot enoosno dvolomna snov s krajevno odvisno optično osjo. Izračunamo prepustnost plasti tekočega kristala med prekrižanima polarizatorjem, fotonski prepovedani pas v periodični strukturi in lastne načine širjenja svetlobe v optično anizotropnem vlaknu. Prepoznamo lastne načine valovanja v tekočekristalnih vlaknih z različnimi defekti vzdolž osi in možne polarizacije svetlobe, ki bi jih lahko dobili z vodenjem svetlobe skozi takšna vlakna. Opazimo zanimivo povezavo med ovojnimi števili tekočekristalnih defektov in defektov v polarizaciji svetlobe, kar je eden prvih korakov k raziskavam povezane topologije dveh sklopljenih prostorskih polj.

**Ključne besede:** nematski tekoči kristal, elektromagnetno valovanje, dvolomnost, polarizacija svetlobe, metoda FDTD, topološki defekti.

## Abstract

Propagation of light through liquid crystal fibres with various director profiles is explored. We develop a numerical method for modelling the propagation of electromagnetic fields through optically anisotropic media where the dielectric tensor is a general three-dimensional spatial field. The method is based on the finite-difference time-domain method, adapted for the variability of the liquid crystalline profile. 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. We identify the eigenmodes of liquid crystal fibres with defect lines of various winding numbers along the axis and the possible polarizations of light that could be achieved by shining through such fibres. We find an exciting coupling between the winding numbers of liquid crystal defects and the winding numbers of light polarization, which is a novel step towards achieving a coupled topology of two different spatially varying fields.

**Keywords:** nematic liquid crystal, electromagnetic wave, birefringence, light polarization, finite-difference time domain, topological defects.

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

**Smer študija:** računalniška fizika



# Kazalo

---

<b>1</b>	<b>Uvod</b>	<b>11</b>
<b>2</b>	<b>Tekoči kristali kot optični materiali</b>	<b>13</b>
2.1	Tekočekristalne mezofaze . . . . .	13
2.2	Orientacijski red . . . . .	13
2.3	Deformacije direktorja in prosta energija . . . . .	15
2.4	Topološki defekti . . . . .	18
2.5	Direktor v cilindrični kapilari . . . . .	19
<b>3</b>	<b>Elektromagnetno valovanje</b>	<b>21</b>
3.1	Maxwellove enačbe v optično anizotropnem mediju . . . . .	21
3.2	Dvolomnost . . . . .	22
3.3	Defekti v polarizaciji svetlobe . . . . .	23
3.4	Dielektrični tenzor v tekočem kristalu . . . . .	23
3.5	Povezava med defekti v tekočem kristalu in defekti v optičnem polju .	25
<b>4</b>	<b>Numerična metoda</b>	<b>27</b>
4.1	Mreža . . . . .	28
4.2	Postopek reševanja . . . . .	29
4.3	Izvor valovanja . . . . .	30
4.4	Robni pogoji . . . . .	31
4.5	Absorpcija na robu . . . . .	33
<b>5</b>	<b>Primeri uporabe metode</b>	<b>35</b>
5.1	Izotopen dielektrik . . . . .	35
5.2	Lom valovanja . . . . .	36
5.3	Uniformen dvolomni kristal . . . . .	37
5.4	Eno-dimenzionalen fotonski kristal . . . . .	37
5.5	Uniformno nematsko vlakno . . . . .	40
<b>6</b>	<b>Širjenje laserskega sunka vzdolž nematskih defektnih linij</b>	<b>43</b>
6.1	Radialni profil direktorja . . . . .	43
6.2	Hiperbolični profil direktorja . . . . .	45
6.3	Defekti s polovično močjo . . . . .	45
6.4	Posplošitev in splošne značilnosti . . . . .	47

<b>7 Stalna laserska svetloba</b>	<b>49</b>
7.1 Radialni profil direktorja . . . . .	49
7.2 Hiperbolični profil direktorja . . . . .	51
7.3 Defekti s polovično močjo . . . . .	52
7.4 Radialno polarizirana svetloba . . . . .	54
<b>8 Zaključek</b>	<b>55</b>
<b>9 Literatura</b>	<b>57</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 fotoniki [2].

Praviloma so tekoči kristali sestavljeni iz paličastih ali diskastih molekul. Položaji gradnikov nimajo reda dolgega dosega, ali pa je ta red samo v eni ali dveh prostorskih 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 velikostni skali, ki je tipično med nekaj 10 nm in nekaj 10  $\mu\text{m}$ . To je večje od velikosti molekul, ki sestavljajo tekoči kristal, zato lahko govorimo o redu dolgega dosega, je pa primerljivo z valovno dolžino vidne svetlobe [3]. Za razliko od običajnih kristalov lahko orientacijski red vsilimo z obdelavo površine ali z zunanjimi polji. Zaradi možnosti zunanjega nadzora so tekoči kristali ključnega pomena v mnogih optičnih napravah.

Orientacijski red v tekočih kristalih makroskopsko opišemo s povprečno orientacijo molekul, t.j. direktorjem  $\mathbf{n}$  in stopnjo reda  $S$ . Na prosto energijo in s tem na ureditev tekočega kristala v zunanjih električnih ali optičnih poljih ključno vplivajo predvsem krajevno spremicanje direktorja, temperatura in dielektrična interakcija med molekulami in zunanjim poljem. Tekoči kristali se obnašajo kot efektivno elastični medij, kjer direktorju lahko pripisemo tri osnovne deformacijske načine: pahljačo, zvoj in upogib. Z določeno izbiro robnih pogojev, zunanjimi polji ali dodatkom koloidnih 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 količnik odvisen od smeri polarizacije vpadne svetlobe [4]. Večina dvolomnih snovi je enoosnih, kar pomeni, da obstaja ena izredna os z drugačnim lomnim količnikom, vse nanjo pravokotne smeri pa so enakovredni. Tipične enoosne snovi so kristali s tetragonalno ali heksagonalno mrežo, kjer je optična os enaka po celiem kristalu. V tekočem kristalu z orientacijskim redom dvolomna os sledi povprečni orientaciji molekul, torej direktorju. 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

spreminjamo orientacijski red in s tem prepustnost vsake točke na zaslonu [2]. Zaradi občutljivosti na električno polje se tekoči kristali uporabljajo v različnih elektro-optičnih napravah, na primer v nastavljenih svetlobnih filtrih [5]. 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 [6]. V zadnjem času so veliko pozornosti deležni tekočekristalni laserji, ki izkoriščajo pojav fotonskega prepovedanega pasu v periodičnih strukturah [7, 8]. Zanimiva je tudi uporaba tekočih kristalov v napravah, ki spreminja polarizacijo svetlobe. Poleg linearne in eliptične polarizacije lahko z njimi dosežemo tudi osno simetrično polarizacijo, na primer radialno ali azimutalno [9, 10].

Obstaja več metod za modeliranje širjenja svetlobe skozi optično anizotropne snovi. Z Jonesovim vektorjem predstavimo 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 linearne, krožne ali eliptične polarizirane svetlobe [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 z visoko simetrijo, manj pa v tekočih kristalih, kjer je dvolomna os krajevno odvisna. Za modeliranje anizotropnih snovi je bolj primerna Berremanova metoda [11, 12], pri kateri je svetloba predstavljena s štirimi transverzalnimi komponentami električnega in magnetnega polja. Berremanova metoda zataji v prisotnosti neveznosti dielektričnega tenzorja, kot na primer v okolici tekočekristalnih defektov [13, 14].

Vse naštete metode uporabljajo poenostavljen opis svetlobe. V zadnjem času so računalniki že dovolj zmogljivi, da lahko opišemo svetobo direktno z vektorjema 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 poljubno optično zapletenih strukturah [15].

Magistrsko delo je organizirano v sedem vsebinskih sklopov. V drugem poglavju je razložena osnovna teorija ureditve tekočih kristalov in njihove optične lastnosti. V tretjem poglavju so navedene Maxwellove enačbe, ki opisujejo širjenje svetlobe skozi anizotropno snov. Poseben poudarek je na dvolomnosti. V četrtem poglavju je predstavljena numerična metoda, s katero smo modelirali 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. V petem poglavju so opisani preizkusi metode, vključno z širjenjem ravnega vala po praznem prostoru, po fotonskem kristalu in po tekočekristalnem vlaknu. V šestem poglavju prikazani rezultati propagacije zelo kratkih laserskih sunkov skozi tekočekristalna vlakna z različnimi direktorskimi profili. V sedmem poglavju je opisana 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 kot optični materiali

---

### 2.1 Tekočekristalne mezofaze

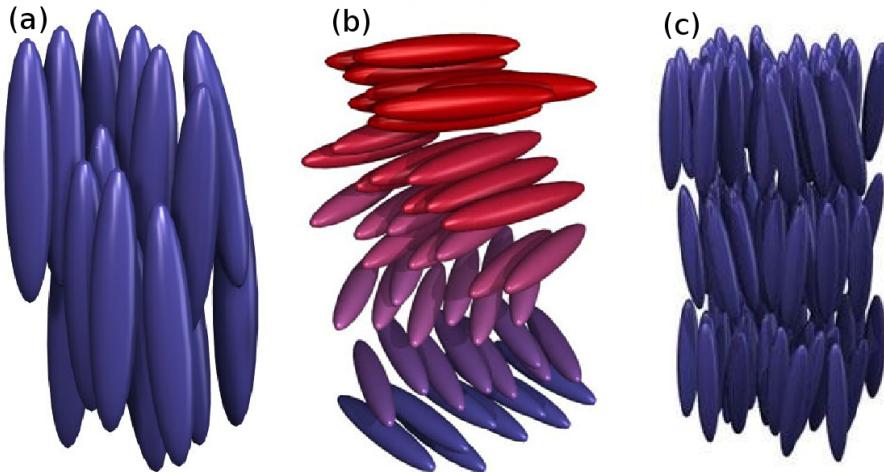
Tekoči kristali so mehke snovi, ki združujejo lastnosti kristalov in tekočin [1]. Praviloma so tekoči kristali sestavljeni iz paličastih ali diskastih molekul, tekočekristalne mezofaze pa tvorijo tudi segmenti DNK, molekule nekaterih virusov in primerni koloidni delci. Položaj gradnikov nima reda dolgega dosega v vseh smereh, zato se snov obnaša kot tekočina. Tekočekristalne mezofaze se pojavijo v določenem temperaturnem in koncentracijskem razponu.

Tekoče kristale delimo na več mezofaz glede na orientacijski in pozicijski red gradnikov. Molekule nematskih tekočih kristalov imajo samo orientacijski red dolgega dosega. Smektki imajo pozicijski red v eni smeri, tako da se gradniki uredijo v plasti, znotraj katerih se snov obnaša kot tekočina. Prisotnost kiralnih 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.

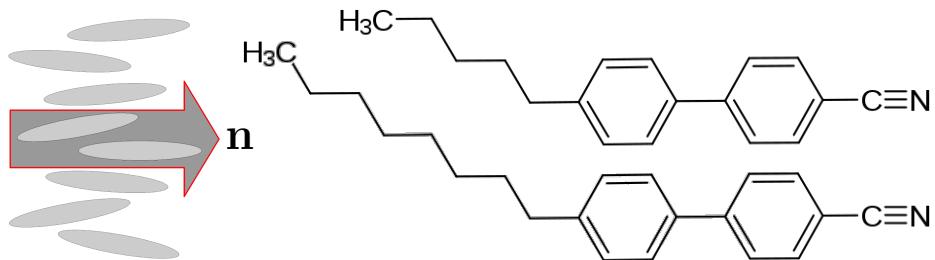
### 2.2 Orientacijski red

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 [17].

Orientacijski red dolgega dosega je tipično realiziran s paličastimi gradniki. Najpogosteje se uporabljajo 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. Tipična dolžina takšnih molekul je nekaj nanometrov.



**Slika 2.1** Shematski prikaz treh najpogostejših tekočekristalnih mezofaz: (a) nematik, (b) kiralni nematik ali holesterik in (c) smektik [16].



**Slika 2.2** Levo: Gradniki imajo različne orientacije, povprečno orientacijo pa poda direktor  $\mathbf{n}$ . Desno: Strukturni formuli molekul 5CB (zgoraj) in 8CB (spodaj) [18]

Direktor  $\mathbf{n}$  podaja povprečno smer gradnikov, ne pa dejanske orientacije posameznih gradnikov, t.i. molekularnih direktrijev. Zato uvedemo še stopnjo reda  $S$  (angl. *degree of order*), ki nam pove, koliko smeri molekul v povprečju odstopajo od direktrja. Zaradi simetrije  $\mathbf{n} \leftrightarrow -\mathbf{n}$  ne moremo vzeti kar povprečne vrednosti kota med gradnikom in direktrjem, saj je ta vrednost enaka nič. Namesto tega uporabimo povprečni kvadrat kota, ki je enakovreden kvadrupolnemu momentu [3]

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

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

Direktor in nematsko stopnjo reda lahko 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 vzdolž osi  $e^{(1)}$ , 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. V izrazu za  $Q_{ij}$  nastopajo le produkti dveh komponent  $n_i$ , zato 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  $\mathbf{e}^{(1)}$ ,  $\mathbf{e}^{(2)}$  in  $\mathbf{n}$ , lahko matriko zapišemo kot

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

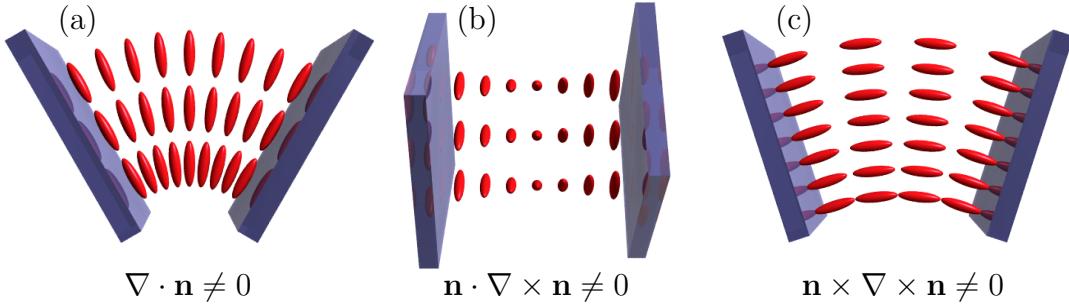
S takšnim zapisom je razvidno, kako lahko iz podanega tenzorja  $Q_{ij}$  izračunamo direktor  $\mathbf{n}$  in stopnjo reda  $S$ . Stopnja reda je enaka največji lastni vrednosti matrike  $Q$ , direktor pa je lastni vektor, ki ustrezza tej lastni vrednosti. Račun lastnih vektorjev ne loči med vektorji, 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 najpogosteša in najbolj enostavna. K prosti energiji nematika prispevajo elastične deformacije, stopnja reda in dielektrična interakcija z električnim poljem. Drugi prispevki, npr. magnetna interakcija in fleksoelektričnost, so pri običajno uporabljenih snoveh in optičnem polju zanemarljivi.

Posamezni gradniki imajo največjo svobodo gibanja in s tem največjo entropijo, če je direktor in s tem tudi tezor  $Q_{ij}$  uniformen. Krajevno spreminjanje ureditvenega parametra  $Q_{ij}$  v katerikoli smeri povzroči, da sistem prostega energije 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 direktorja. Ti trije načini so pahljača (*angl. splay*), zvoj (*angl. twist*) in upogib (*angl. bend*).

Pri pahljačni deformaciji je neničelna divergenca direktorja, pri zvoju z direktorjem vzporedna komponenta rotorja, pri upogibu pa pravokotna komponenta rotorja.



**Slika 2.3** Tresje načini elastične deformacije direktorja: (a) pahljača, (b) zvoj in (c) upogib [19].

Deformacijo zato kvantiziramo s temi tremi količinami. Vsi tresje načini deformacije so elastični, zato je prispevek k prosti energiji sorazmeren s kvadratom deformacije. V tekočih kristalih so v splošnem elastične konstante, ki pripadajo vsakemu izmed treh osnovnih načinov, med seboj različne. Prispevek h gostoti proste energije zaradi elastičnih deformacij nematskega tekočega kristala je tako enak

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

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

$$f_{\text{el}} = \frac{K}{2} [(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + (\nabla \times \mathbf{n})^2] = \frac{K}{2} \cdot \frac{\partial n_i}{\partial x_j} \frac{\partial n_j}{\partial x_i} \quad (2.5)$$

kjer je  $K$  edina elastična konstanta. Razvoj elastične proste energije po krajevnih odvodih direktorja je lažji za predstavo, saj člene lahko povežemo z načini deformacije na sliki 2.3. Za numerično modeliranje pa je bolj ugodno, če prosto energijo izrazimo s komponentami tenzorja  $Q$ , ki poleg direktorja vključuje tudi stopnjo reda in dvoosnost [19]. V tej sliki se izraz glasi

$$f_{\text{el}} = \frac{1}{2} L_1 \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k} \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k} + \frac{1}{2} L_2 \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_j} \frac{\partial Q_{ik}}{\partial x_k} + \frac{L_3}{2} Q_{ij} \frac{\partial Q_{kl}}{\partial x_i} \frac{\partial Q_{kl}}{\partial x_j}, \quad (2.6)$$

kjer so  $L_i$  elastične konstante. V enokonstantnem približku se zgornji izraz poenostavi v

$$f_{\text{el}} = \frac{L}{2} \times \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k} \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k} \quad (2.7)$$

kjer je elastična konstanta enaka  $L = 2K/9S^2$  [20].

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

$$f_L = \frac{1}{2}a(T - T^*)Q_{ij}Q_{ji} + \frac{1}{3}BQ_{ij}Q_{jk}Q_{ki} + \frac{1}{4}C(Q_{ij}Q_{ji})^2, \quad (2.8)$$

kjer je  $T$  temperatura,  $T^*$  najnižja možna temperatura podhlajene izotropne faze,  $a$ ,  $B$  in  $C$  pa členi Landauovega razvoja, ki 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, 20].

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

$$f_{EM} = -\frac{1}{2}\varepsilon_0 \left( \bar{\epsilon}E_iE_i + \frac{2}{3}\varepsilon_a^{\text{mol}}E_iQ_{ij}E_j \right), \quad (2.9)$$

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 komponente zunanjega električnega polja. Ta sklopitev izhaja iz polarizabilnosti molekul, ki je odvisna od njihove oblike. Zunanje polje v molekuli inducira električni dipolni moment, ki je sorazmeren z dolžino molekule in je zato največji, če je polje vzporedno z osjo molekule. V snovi s pozitivno dielektrično anizotropijo je najugodnejša orientacija gradnikov vzporedna z zunanjim poljem.

Tipičen relaksacijski čas lahko ocenimo s primerjavo viskoznosti ter elastične in dielektrične proste energije

$$\frac{1}{\tau} \sim \frac{f_{el} + f_{EM}}{\gamma_1}, \quad (2.10)$$

kjer je  $\gamma_1$  rotacijska viskoznost. Ker nas zanima le red velikosti, lahko uporabimo eno-konstantni približek, krajevni odvod direktorja pa zamenjamo z obratno vrednostjo dolžinske skale  $l$ , na kateri se direktor spreminja. Ta dolžnina je tipično velikostnega reda mikrometra [3]. V električnem prispevku za oceno velikostnega reda privzamemo popolnoma urejen nematik in električno polje, vzporedno z direktorjem. S temi predpostavkami lahko ocenimo relaksacijski čas tekočega kristala v električnem polju

$$\tau \sim \frac{\gamma_1}{K/l^2 + \varepsilon_0\varepsilon_a^{\text{mol}}E^2} \sim 1 \text{ ms}. \quad (2.11)$$

Pri vrednosti viskoznosti  $\gamma_1 \approx 0,06 \text{ Pa s}$ , elastične konstante  $K \approx 6 \times 10^{-12} \text{ N}$  in dielektrične anizotropije  $\varepsilon_a^{\text{mol}} \approx 0,4$  za 5CB [21, 22] in jakosti električnega polja  $E = 1\text{V}/\mu\text{m}$ , tipični za optične pincete, relaksacijski čas znaša približno 1 ms. Ta vrednost je odvisna od jakosti električnega polja, vednar je preureditev tekočega kristala tudi pri zelo močnem polju več velikostnih redov počasnejša od nihanja optičnega polja s periodo velikostnega reda femtosekunde. Če na tekoči kristal svetimo, ureditev molekul ne more slediti hitremu spreminjanju optičnega električnega polja, ampak nanje efektivno deluje povprečen kvadrat polja.

## 2.4 Topološki defekti

Pod vplivom ograjenosti ali zunanjega polja se lahko v nematiku pojavi orientacijsko polje, kjer zvezno direktorsko polje ne more zadostiti robnim pogojem. V tem primeru se pojavijo območja z nedefiniranim direktorjem. Takšnim območjem pravimo topološki defekti.

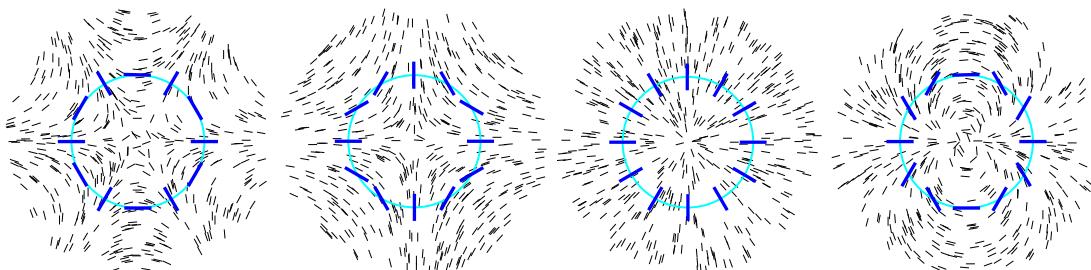
V treh dimenzijah lahko obstajajo točkasti in linijski defekti [1, 3]. V vlaknih nastopajo le linijski defekti, imenovani tudi disklinacije, zato se bomo posvetili zlasti tem. Linijski defekti so lažji za razvrščanje, saj se lahko omejimo na ravnino, pravokotno na linijo, in problem prevedemo na dve dimenziji. V tem primeru lahko praviloma linijski defekt obravnavamo kot točkasti defekt v dveh dimenzijah.

Disklinacije v nematskem tekočem kristalu delimo glede na to, kako se smer direktorja spreminja v okolini disklinacije. Zanima nas zlasti, koliko obratov naredi direktorsko 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

$$s = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left( \frac{d\theta}{d\phi} \right) d\phi \quad (2.12)$$

kjer kot  $\theta$  opisuje smer direktorja,  $\phi$  pa položaj na zanki (svetlo moder krog na slikah 2.4 in 2.5).

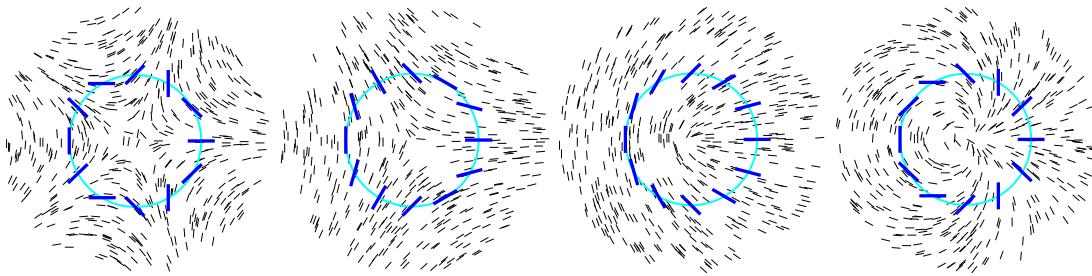
Direktorsko polje je zvezno povsod razen v jedru defekta, zato mora direktor pri  $\phi = 0$  enak kot pri  $\phi = 2\pi$ , ko upoštevamo se simetrijo  $\mathbf{n} \leftrightarrow -\mathbf{n}$ . Ta pogoj določa možne vrednosti za  $s$ . Za prava vektorska polja mora biti  $s$  celo število, saj mora 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, zaradi katere lahko direktor pri obkroženju defekta naredi le pol obrata, ovojno število  $s$  pa je zato lahko tudi polcelo število. Primeri takšnih defektov so na sliki 2.5.

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 znotraj tekočega kristala lahko združujejo in pretvarjajo eden v drugega, vsota njihovih moči pa se ohranja. Dva defekta z nasprotno močjo se lahko izničita,



**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  $3/2$ .

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 lokalno veliko gostoto proste energije na mestu defekta. 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  $\nabla\theta = \frac{s}{r}\hat{e}_\phi$ . Skupni prispevek enega defekta k prosti energiji na enoto dolžine  $l$  je enak [1]

$$\frac{F_d}{l} = \frac{K}{2} \int_{r_{min}}^{r_{max}} \frac{s^2}{r^2} 2\pi r \, dr = K s^2 \pi \ln \frac{r_{max}}{r_{min}} \quad (2.13)$$

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 ni stabilen, razen če ga vsiljujejo robni pogoji. Jedro defekta se pogosto obravnava kot območje izotropne faze z  $S=0$ . Velikost jedra opisuje  $r_{min}$  in je tipično okrog 10 nm.

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 kapilari

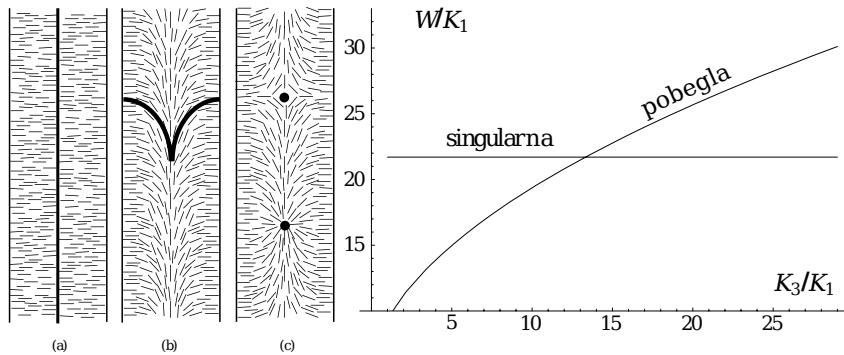
V cilindrični geometriji s homeotropnimi robnimi pogoji ureditev z uniformnim direktorjem ni mogoča. Glede na razmerja med elastičnimi konstantami se tekoči kristal uredi v eno izmed konfiguracij na sliki 2.6. V profilu s singularno disklinacijo v osi kapilare je prisotna le pahljačna deformacija, zato je energija tega stanja odvisna od konstante  $K_1$ . Kljub temu, da robni pogoji vsiljujejo direktor v ravnini, pravokotni na os kapilare, ima lahko direktor znotraj kapilare tudi komponento, vzporedno z osjo. Pojavu imenujemo pobeg v tretjo dimenzijo, zaradi njega pa je lahko v kapilari direktorsko polje brez defektov. 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 v tretjo dimenzijo pride, če je razmerje  $K_3/K_1$  manjše od 13 [3], kar velja za večino nematskih tekočih kristalov. Z minimizacijo energije lahko izpeljemo

ravnovesni radialni profil direktorja v cilindričnih koordinatah. V poenostavljenem primeru, ko sta elastični konstanti  $K_3$  in  $K_1$  enaki, je energijsko najugodnejše stanje

$$\mathbf{n} = (n_r, n_\phi, n_z) = (\cos \chi(r), 0, \sin \chi(r)) \quad (2.14)$$

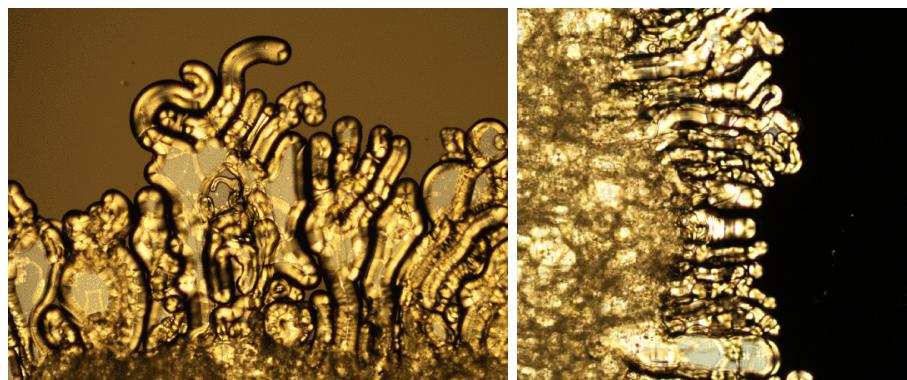
$$\chi(r) = 2 \arctan \frac{R - r}{R + r} \quad (2.15)$$

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



**Slika 2.6** Levo: Prerezi kapilare s singularno (a) in nesingularno (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  $K_3$  [3].

V večini nematikov so vse tri elastične konstante istega velikostnega reda, zato je stanje s pobegom v tretjo dimenzijo bolj ugodno. V smektični fazi pahljačna deformacija nosi mnogo manjšo energijo kot ostala dva načina, saj je edina kompatibilna z ureditvijo v plasti. V cilindrični kapilari se smekтик zato uredi v radialen profil. Veliko razmerje  $K_3/K_1$  opazimo tudi v nematikih blizu faznega prehoda v smektično fazo. Z uporabo tekočega kristala 8CB, ki tvori tako nematsko kot tudi smektično fazo, je mogoče v laboratoriju sintetizirati vlakna z radialnim profilom direktorja [23]. Primer tvorbe takšnih vlaken je na sliki 2.7.



**Slika 2.7** Rast vlaken z radialnim direktorjem na meji med 8CB in vodo [23]

# 3

## Elektromagnetno valovanje

---

### 3.1 Maxwellove enačbe v optično anizotropnem mediju

Širjenje svetlobe po snovi opisujejo štiri Maxwellove enačbe [15]

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

kjer sta  $\mathbf{E}$  in  $\mathbf{D}$  jakost in gostota električnega polja,  $\mathbf{H}$  in  $\mathbf{B}$  pa jakost in gostota magnetnega polja. Med njimi veljata konstitutivni zvezi  $\mathbf{D} = \epsilon\epsilon_0\mathbf{E}$  in  $\mathbf{B} = \mu\mu_0\mathbf{H}$ . V enačbah nastopata izvora elektromagnetnih polj, in sicer gostota prostih nabojev  $\rho_f$  in gostota prostega toka  $J_f$ .

V tekočih kristalih sta dielektričnost  $\epsilon$  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 tipično v tekočekristliah sistemih ni, zato je  $\rho_f = 0$ . Z upoštevanjem zgornjih predpostavk lahko Maxwellove enačbe zapišemo v poenostavljeni obliki

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{E} &= 0 & \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} & \nabla \times \mathbf{B} &= \sigma\mathbf{E} + \epsilon\epsilon_0\mu_0\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}\end{aligned}\tag{3.2}$$

V zadnji enačbi smo privzeli, da se dielektrični tenzor  $\epsilon$  ne spreminja s časom, zato nastopa izven 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 [4, 24]. 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

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

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. Njenostavnejša 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

$$\epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon_{\perp} & & \\ & \epsilon_{\perp} & \\ & & \epsilon_{\parallel} \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

Tu je  $\epsilon_{\parallel}$  lastna vrednost, ki ustreza polarizaciji svetlobe, vzporedni z optično osjo. Tej polarizaciji pravimo izredna (*angl. extraordinary*), ustreznemu 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

$$\Delta n = n_e - n_o , \quad (3.5)$$

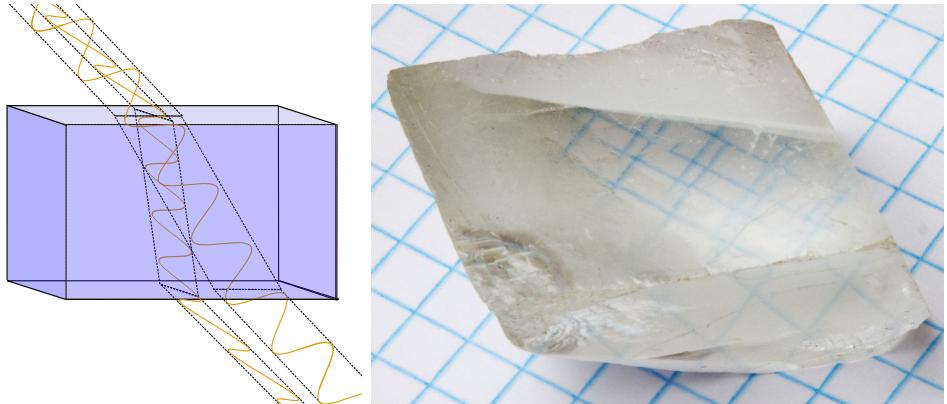
ki je lahko pozitivna ali negativna.

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.

Hitrost svetlobe v takšni snovi je enaka

$$c = \sqrt{\frac{1}{\epsilon_{\text{eff}} \epsilon_0 \mu_0}} = \frac{c_0}{\sqrt{\epsilon_{\text{eff}}}} = c_0 \sqrt{\frac{E_i E_i}{E_i \epsilon_{ij} E_j}} \quad (3.6)$$

in je odvisna od smeri električnega polja.



**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 [24].

### 3.3 Defekti v polarizaciji svetlobe

Električno in magnetno polje sta prava vektorja, zato imata lahko le defekte s celoštevilskim ovojnim številom. Defekt v elektromagnetnem polju je točka oz. območje, kjer polarizacija in faza valovanja nista definirani. Amplituda valovanja v takšni točki mora biti enaka nič, zato se defekti izrazijo kot temne pege. Primer so temne pege v osi Laguerre-Gaussovih snopov, prikazanih na sliki 3.2. Poleg tistih na sliki so možne še drugačne polarizacije snopov z istim ovojnim številom. Snop z ovojnim številom 1 ima lahko azimutalno polarizacijo, kot na sliki 3.2a, ali pa radialno [25, 26].

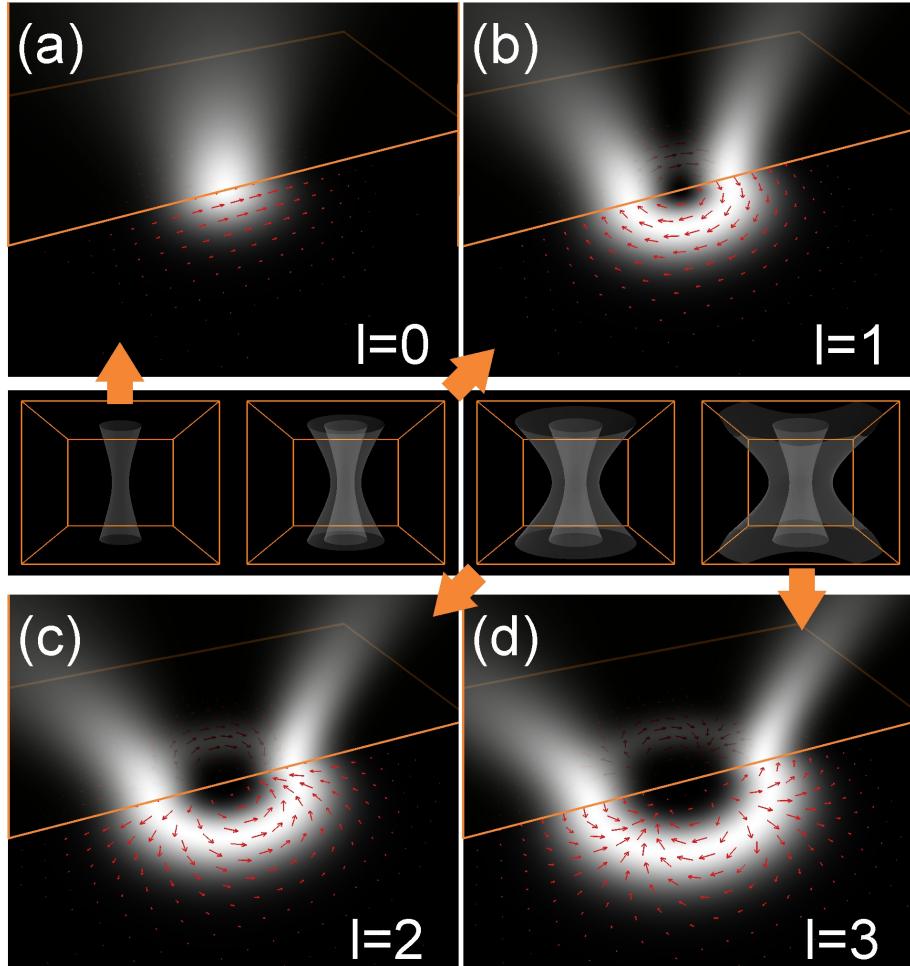
Kljub topološki podobnosti pa so defekti v polarizaciji svetlobe fizikalno zelo različni od defektov v ureditvi tekočega kristala. Deformacije elektromagnetnega polja ne nosijo elastične energije, ki bi jo ravnovesno stanje minimiziralo. S primernimi optičnimi elementi lahko skonstruiramo svetlobo z defekti v polarizaciji, kot je npr. simetrijska ravnina 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  $S$  in je neposredno povezan z nematskim tenzorjem ureditvenega paramtera  $Q_{ij}$ . Dielektrični tenzor pogosto zapišemo kot vsoto izotropnega in brezslednega dela [1, 20]

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

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.



**Slika 3.2** Intenziteta in polarizacija v nekaterih Laguerre-Gaussovi načinih. Slike (a), (b), (c) in (d) prikazujejo snope z ovojnimi števili  $l = 0, 1, 2, 3$ . Bela barva predstavlja območja z visoko intenziteto svetlobe v dveh ravninah, pravokotni in vzporedni s snopom. Rdeče puščice prikazujejo električno polje v ravnini grla snopa [25].

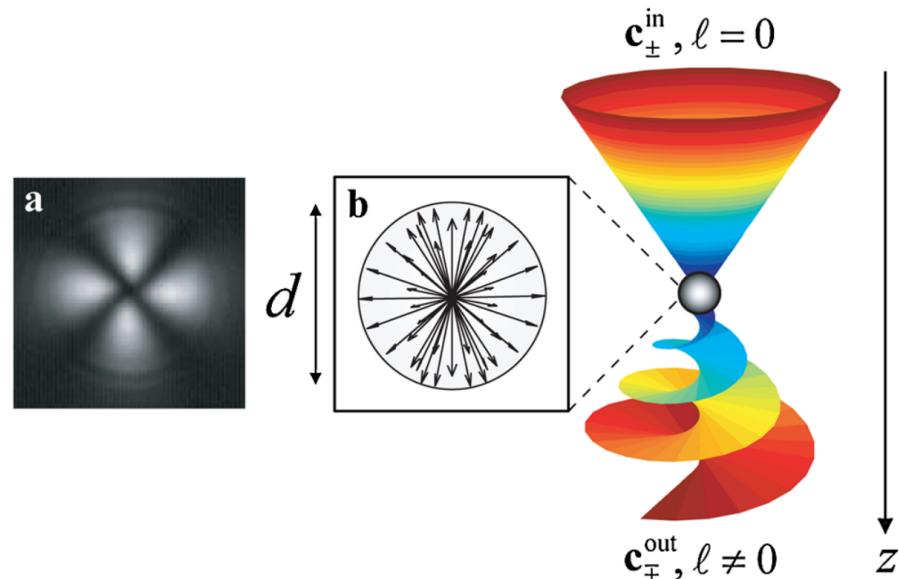
Če primerjamo enačbi (2.9) in (3.7) opazimo dvosmerno povezavo med ureditvijo tekočega kristala in elektromagnetskim poljem. Zaradi dielektrične sklopite svetloba vpliva na ureditev tekočega kristala, zaradi optične anizotropije pa tekoči kristal vpliva na širjenje svetlobe po njem. Računsko orodje, 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 določeno z drugimi mehanizmi, tipično s površinskim pogoji. Močno se razlikujeta tudi časovni skali obeh pojavov, saj optična polja pa nihajo s periodom okrog femtosekunde, metdem ko je tipičen relaksacijski čas tekočega kristala nekaj milisekund.

V tem magistrskem delu sem se omejil le na širjenje svetlobe, pri čemer je direktorsko polje določeno in časovno nespremenljivo. Sama računska metoda pa je zasnovana tako, da je kompatibilna z obstoječimi programi za izračun ureditve tekočih kristalov [20]. 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 singularnost, 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 [27]. Defekte v polarizaciji svetlobe opazimo tudi pri prehodu krožno polarizirane svetlobe skozi defektne linije v tankem nematskem filmu. Vrtilna količina izhodne svelobe je odvisna od ovojnega števila defekta [28].



**Slika 3.3** Prehod krožno polarizirane svetlobe skozi kapljico z radialnim direktorskim profilom. Val z gladko valovno fronto ( $l = 0$ ) se deloma pretvori v stanje s singularnostjo v fazi ( $l \neq 0$ ) [27]. Levo: (a) slika kapljice med prekrižanimi polarizatorji, ki potrjuje cilindrično simetrično direktorsko polje in (b) shema radialnega direktorja.



# 4

## Numerična metoda

---

Za izračun propagacije svetlobe skozi močno optično anizotropne tekočekristalne vzorce smo implementirali metodo končnih diferenc v časovni domeni (*angl. Finite-difference time-domain – FDTD*) [15]. Pri tej metodi časovno propagiramo električno in magnetno polje v vsaki točki po Maxwellovih enačbah.

Pri numeričnem reševanju potrebujemo le tisti dve Maxwellovi enačbi, ki vsebujejo časovne odvode polj. Konsistenco Maxwellovih enačb zagotavlja, da će prvi dve enačbi držita na začetku, bosta avtomatsko izpolnjeni ob vsakem času [15]. 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 ( $c = \epsilon_0 = \mu_0 = 1$ ), se glasita

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

V zgornjih enačbah smo implicitno upoštevali, da v celici ni prostih nabojev. V enačbah nastopajo le prvi odvodi, ki jih za numerično računanje nadomestimo s simetričnimi končnimi diferencami

$$\frac{\partial y}{\partial x} \rightarrow \frac{y(x + \delta/2) - y(x - \delta/2)}{\delta} \quad (4.2)$$

kjer je  $\delta$  korak diskretizacije,  $y(x)$  pa poljubna skalarna funkcija. Na ta način diskretiziramo krajevno in časovno odvisnost vseh komponent elektromagnetskih polj.

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

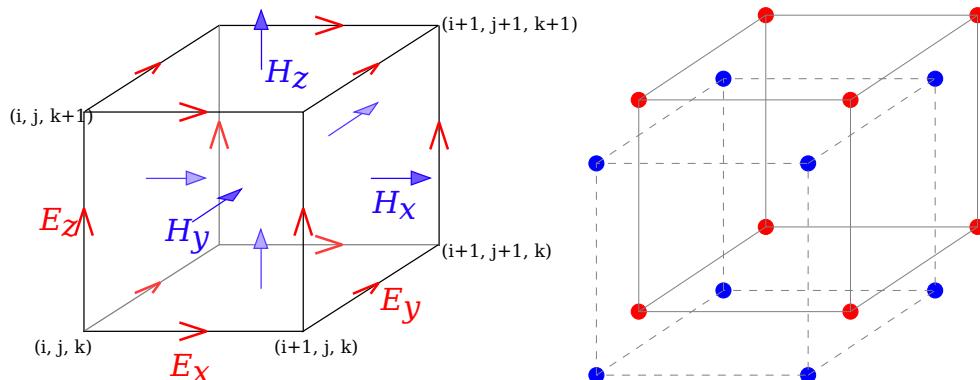
Zaradi simetrije Maxwellovih enačb bi na enak način kot dielektričnost  $\epsilon$  lahko upoštevali tudi magnetno permeabilnost  $\mu$ . Podobno bi lahko poleg električne prevodnosti  $\sigma$  upoštevali magnetne izgube  $\sigma^*$ .

## 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 [15].

Običajne implementacije metode FDTD gredo še korak dlje, tako da so tudi posamezne komponente električnega in magnetnega polja definirane na različih točkah [29, 30]. Takšno mrežo je predlagal Yee in izkorišča 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 [20]. 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.



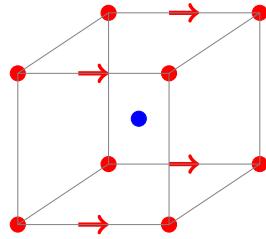
**Slika 4.1** Levo: Yeejeva celica, pri kateri so komponente električnega polja znane na razpoloviščih robov kocke, komponente magnetnega polja pa v središčih ploskev [30]. Desno: Celica, ki smo jo uporabili pri izračunih. Komponente električnega polja so znane v ogliščih kocke, komponente magnetnega 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 smo za odvod polja po vsaki koordinati v središču kocke uporabili 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 smo uporabili 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 vsak 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  $k\Delta t$ ,  $k \in \mathbb{N}$ , 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  $\Delta x$ . V kompoktnem zapisu označimo

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

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

in zapišemo krajevne odvode vsake komponente elektromagnetskih polj

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{i,j,k}^n = \frac{1}{4\Delta x} \sum_{\substack{k'=k, k+1 \\ j'=j, j+1}} \phi|_{i+1,j',k'}^n - \phi|_{i,j',k'}^n \quad (4.5)$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial y} \right|_{i,j,k}^n = \frac{1}{4\Delta y} \sum_{\substack{i'=i, i+1 \\ k'=k, k+1}} \phi|_{i',j+1,k'}^n - \phi|_{i',j,k'}^n \quad (4.6)$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial z} \right|_{i,j,k}^n = \frac{1}{4\Delta z} \sum_{\substack{j'=j, j+1 \\ i'=i, i+1}} \phi|_{i',j',k+1}^n - \phi|_{i',j',k}^n \quad (4.7)$$

kjer je  $\phi$  poljubna komponenta električnega ali magnetnega polja. Rotorje polj, ki nastopajo v Maxwelllovih enačbah, izrazimo z odvodi

$$(\nabla \times \mathbf{A})_x|_{i,j,k}^n = \frac{\partial A_z}{\partial y}\Big|_{i,j,k}^n - \frac{\partial A_y}{\partial z}\Big|_{i,j,k}^n \quad (4.8)$$

$$(\nabla \times \mathbf{A})_y|_{i,j,k}^n = \frac{\partial A_x}{\partial z}\Big|_{i,j,k}^n - \frac{\partial A_z}{\partial x}\Big|_{i,j,k}^n \quad (4.9)$$

$$(\nabla \times \mathbf{A})_z|_{i,j,k}^n = \frac{\partial A_y}{\partial x}\Big|_{i,j,k}^n - \frac{\partial A_x}{\partial y}\Big|_{i,j,k}^n \quad (4.10)$$

kjer je  $\mathbf{A}$  električno ali magnetno 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 nadalnjih izračunih pa smo uporabili kvadratno mrežo, kjer je  $\Delta x = \Delta y = \Delta z$ . Maxwellove enačbe v tem zapisu se glasijo

$$E_\alpha|_{i,j,k}^{n+1} = E_\alpha|_{i,j,k}^n + \Delta t \cdot (\varepsilon^{-1})_{\alpha\beta}|_{i,j,k} \cdot (\nabla \times \mathbf{H})_\beta|_{i-1,j-1,k-1}^n \quad (4.11)$$

$$H_\alpha|_{i,j,k}^{n+1} = H_\alpha|_{i,j,k}^n + \Delta t \cdot (\nabla \times \mathbf{E})_\beta|_{i,j,k}^{n+1} \quad (4.12)$$

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 (4.11) izračunamo električno polje ob času  $(n+1)\Delta t$ , nato pa po enačbi (4.12) še magnetno polje ob času  $(n+3/2)\Delta t$ . Izmenično računanje lahko ponavljamo poljubno dolgo.

Pomembna lastnost obeh zgornjih enačb je, da med računanjem 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.

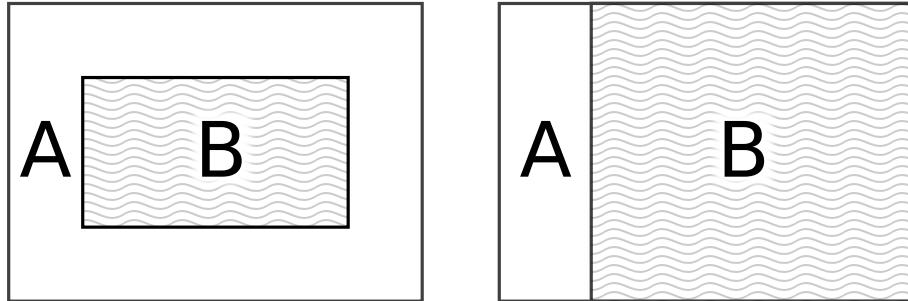
Pri zgornjem zapisu smo implicitno privzeli, da je dielektrične tenzor  $\varepsilon_{\alpha\beta}$  odvisen od kraja, ne pa od časa. Privzetek je smiseln v trdnih snoveh, pa tudi v tekočih kristalih, saj je značilen relaksacijski čas snovi mnogo večji od periode nihanja optičnih polj. Ker nastopa pri 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 Maxwelllovih enačb. Električno in magnetno polje lahko namreč razcepimo

na vsoto vpadnega in sisanega valovanja [15]. Takšen razcep polja je možen le, če je širjenje vpadnega valovanja dobro znano in enostavno izračunamo. Najpogosteje uporabimo ravne valove ali Laguerre-Gaussove snope. Mrežo zato razdelimo na dve območji, v notranjem območju računamo s skupnim poljem, v zunanjem pa polje razcepimo in shranjujemo le sipani del. Optično anizotropna snov mora biti v celoti v notranjem območju, izvor valovanja pa modeliramo na celotni meji 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. Na sliki je velikost območja **A** pretirana zaradi preglednosti, v vseh primerih je bila debelina območja **A** enaka dva koraka mreže.

Delitev na notranje in zunanje območje je učinkovita, če se efektivni lomni količnik v notranem območju ne razlikuje močno od zunanjega. Na ta način lahko modeliramo poljuben izvor valovanja iz katerekoli smeri. Velikokrat pa želimo imeti izvor valovanja le na eni strani, na ostalih pa širjenja svetlobe ne želimo motiti. V tem primeru razdelimo prostor kot na desni strani slike 4.3, tako da je izvor le na eni izmed sten. Takšen pristop je smeselen za obravnavo valovodov, kjer svetloba prihaja le z ene strani. Delitev na zunanje in notranje območje, 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.

## 4.4 Robni pogoji

Če imamo na robu celice določeno vrednost električnega in magnetnega polja, se bo celotno valovanje odbilo in vrnilo v celico. Če so določeni odvodi polj, ali pa linearne kombinacije vrednosti in odvodov, se bo valovanje odbilo z določenim faznim zamikom. 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*) [15, 31].

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 ima elektromagnetno polje v njem dodatne prostostne stopnje, polje pa ne sledi več Maxwellovim enačbam.

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

$$\varepsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma E_x = \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z}. \quad (4.13)$$

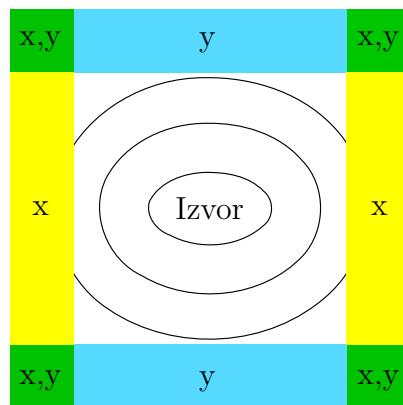
V plasti PML pa električno polje razdelimo na dva prispevka,  $E_x = E_{xy} + E_{xz}$ , ki zadoščata enačbam

$$\varepsilon \frac{\partial E_{xy}}{\partial t} + \sigma_y E_{xy} = \frac{\partial H_z}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y}(H_{zx} + H_{zy}) \quad (4.14)$$

$$\varepsilon \frac{\partial E_{xz}}{\partial t} + \sigma_z E_{xz} = -\frac{\partial H_y}{\partial z} = -\frac{\partial}{\partial z}(H_{yx} + H_{yz});, \quad (4.15)$$

kjer smo razcepljenima komponentoma pripisali različni prevodnosti. Na enak način so razcepljene ostale komponente električnega 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.

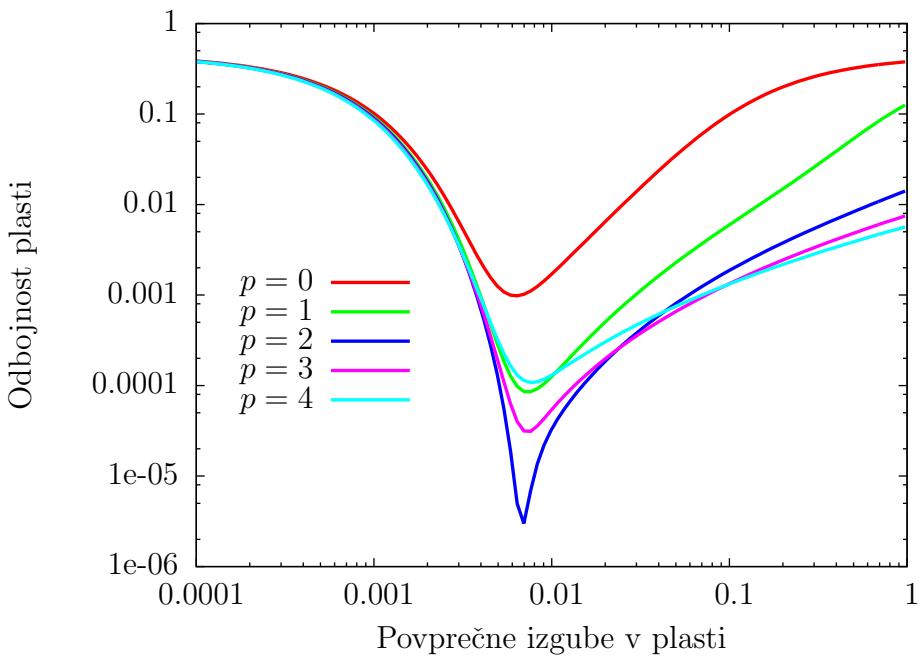


**Slika 4.4** Shema postavitve plasti PML okrog ombočja, v katerem opazujemo propagacijo svetlobe. V rumenih območjih je neničelna prevodnost  $\sigma_x$ , v modrih je neničelna le  $\sigma_y$ , v zelenih območjih pa sta prisotni obe. Takšna postavitev preprečuje odboj svetlobe pri poljubnem vpadnem kotu [15].

## 4.5 Absorpcija na robu

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 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, s čimer 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 [15] 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 16 enot diskretizacije. Rezultati so prikazani na sliki 4.5.



**Slika 4.5** Odbojnost robne plasti v odvisnosti od povprečne prevodnosti  $\bar{\sigma}$  pri različnih profilih električnih in magnetnih izgub. Najbolje se izkaže material, kjer izgube naraščajo kvadratno z oddaljenostjo od roba celice ( $p = 2$ ). Debelina robnega sloja je 16 enot diskretizacije, valovna dolžina svetlobe pa 12 enot. Pri tej debelini dosežemo, da je intenziteta odbitega žarka pet velikostnih redov nižja od intenzitete vpadnega žarka.

V primeru, da v plasti ni izgub, je njena odbojnost enaka 1, saj gre celotno valovanje skozi plast in se odbije na zunanjji meji. Če izgube malo povečamo, odbojnost v vseh primerih strmo pada. Pri profilih, kjer imamo neveznost 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.

# 5

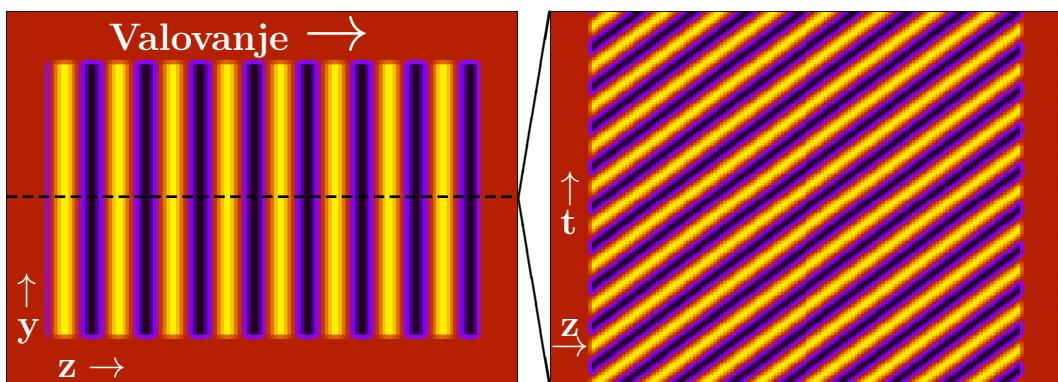
## Primeri uporabe metode

---

### 5.1 Izotropen dielektrik

Prvi preizkus metode, ki smo ga opravili, je širjenje svetlobe skozi izotropen dielektrik, kot je npr. 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 območjema. 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. Vidni so ravni valovi, rumena barva prikazujejo območja s pozitivno komponento  $E_x$ , modra z negativno, rdeča pa območja brez električnega polja. Desno: Presek po črtkani črti ob različnih časih. Navpična os predstavlja čas; valovi potujejo v desno s konstantno hitrostjo, na levi je izvor valovanja, na desni pa ponor.

Na obeh slikah opazimo notranjost celice z valovanjem 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 in ustreznno implementirane robne pogoje.

## 5.2 Lom valovanja

Enostaven preizkus metode za modeliranje širjenja 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

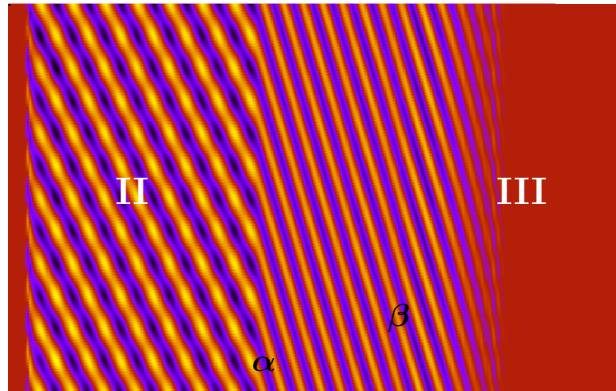
$$\frac{\sin \alpha}{\sin \beta} = \frac{n_2}{n_1} = \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}}, \quad (5.1)$$

kjer je  $\alpha$  vpadni kot valovanja,  $\beta$  lomni kot oz. kot med pravokotnico in smerjo širjenja lomljenega vala,  $n_1$  in  $n_2$  pa sta lomna količnika obeh medijev.

Deleža odbitega in prepuščenega valovanja sta odvisna od vpadnega kota  $\alpha$  in polarizacije svetlobe [32]. 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

$$\theta_B = \arctan \left( \frac{n_2}{n_1} \right) = \arctan \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}} \quad (5.2)$$

Za prikaz delovanja smo uporabili vpadni kot, enak Brewsterjevemu. Na ta način opazimo le vpadno in lomljeno valovanje, tako da lahko vedno preverimo, metoda izpoljuje lomni zakon. Prikaz električnega polja ob prehodu meje, kjer je vpadni kot enak Brewsterjevemu, je na sliki 5.2.



**Slika 5.2** Trenutna slika električnega polja ob prehodu valovanja v medij z drugačnim lomnim količnikom. Barva predstavlja lokalno električno polje, črna krta lomno pravokotnico, bele puščice pa smer širjenja valovanja. Lomni količnik na levem je enak  $n_1 = 1$ , na desni pa  $n_2 = 1,594$ .

Na sliki 5.2 so jasno vidna štiri območja. Čisto na levi (I) je rob z absorbirajočim robnim pogojem PML, ki absorbira odbito valovanje in preprečuje nadaljnji odboj. Naslednje (II) je območje z dielektričnostjo  $\varepsilon_1$ , kjer je superpozicija vpadnega in odbitega valovanja. Pri Brewsterjevem kotu odbitega valovanja ni, zato so valovi ravni. Na sredini slike je meja med območjem, desno od nje (III) je snov z dielektričnostjo  $\varepsilon_2 > \varepsilon_1$ . V tem delu je le prepuščeno lomljeno valovanje, ki ima ustreznou manjšou valovno dolžino. Na desnem robu (IV) je absorbirajoča plast, kjer je vidna postopna absorpcija lomljenega valovanja. Absorpcija je tako dobra, da odbito valovanje na sliki ni vidno. Uporabljeni metoda pravilno napove, da se svetloba s polarizacijo v ravnini žarka in normale na površino ob vpodu pod Brewsterjevim kotom ne odbije.

Veljavnost lomnega zakona potrdimo, če primerjamo kota vpadnega in lomljenega valovanja. Lomni zakon trdi, da je lomni kot enak

$$\beta = \arcsin \left( \frac{n_1}{n_2} \sin \alpha \right) = \arcsin \left( \frac{1}{1,594} \times \sin 58^\circ \right) \approx 32^\circ \quad (5.3)$$

kjer je  $\beta$  lomni kot,  $\alpha$  pa vpadni kot. Z opazovanjem valovanja na desnem delu slike 5.2 lahko potrdimo, da metoda pravilno opiše lom svetlobe.

### 5.3 Uniformen dvolomni kristal

Modelirali smo dvolomni kristal, torej snov, kjer je dielektrični tenzor uniformen, ne pa tudi izotropen. 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 polarizatorjema 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.

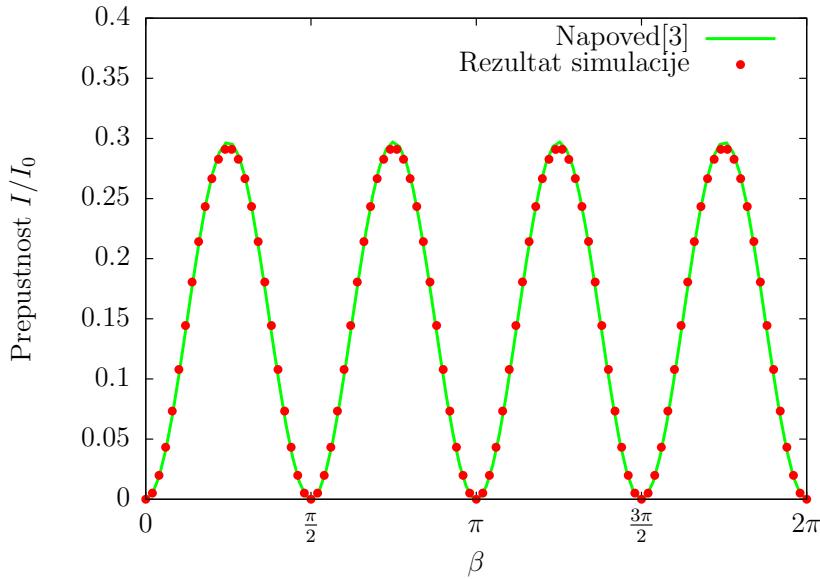
Svetloba se širi v smeri osi  $z$ , optična os pa oklepa kot  $\theta$  z ravnino  $x$ - $y$  in kot  $\beta$  s polarizacijo vpadne svetlobe. Če je direktor uniformen po celotni debelini vzorca, lahko intenzitetu prepuščene svetlobe izpeljemo analitično [3]. Enaka je

$$I = I_0 \sin^2 2\beta \sin^2 \left[ \frac{\pi d}{\lambda_0} \left( \frac{n_o n_e}{\sqrt{n_e^2 \cos^2 \theta + n_0^2 \sin^2 \theta}} - n_o \right) \right], \quad (5.4)$$

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. Odlično kvantitativno ujemanje z analiticno pričakovano odvisnostjo je prikazano na sliki 5.3. To nadalje potrjuje pravilno delovanje metode v optično anizotropni snovi.

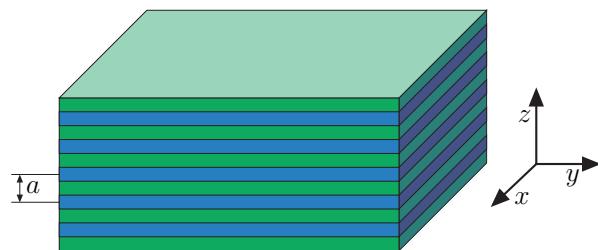
### 5.4 Eno-dimenzionalen fotonski kristal

V snoveh s periodično modulacijo lomnega količnika se svetloba določenih frekvenc ne more širiti [33, 34]; takšne materiale imenujemo tudi fotonski kristali. Temu



**Slika 5.3** Odvisnost prepustnosti uniformnega dvolomnega kristala od kota  $\beta$  med optično osjo kristala in vpadnim polarizatorjem.

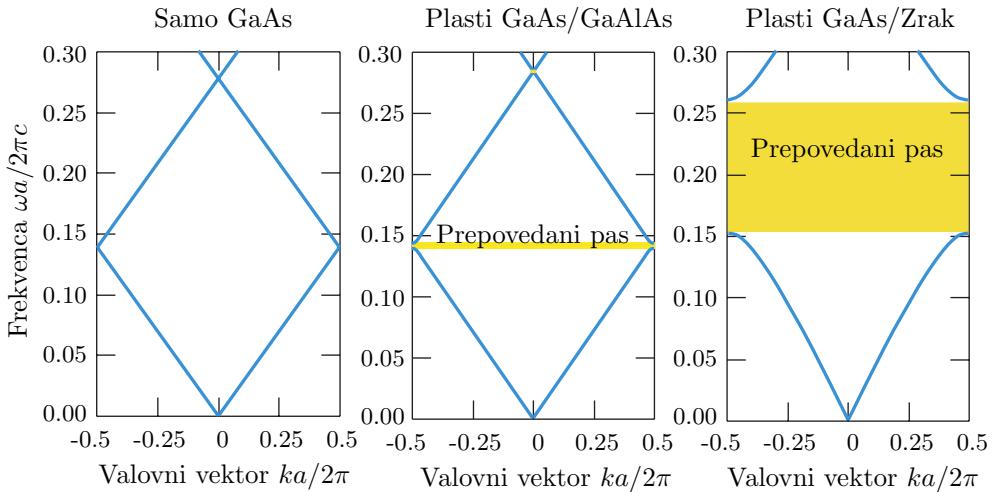
pravimo pojav prepovedanega pasu (*angl. band gap*) in je soroden elektronski energijski reži pri molekulskih kristalih. Za pojav fotonskega prepovedanega pasu potrebujemo kristal oz. periodično strukturo, kjer je perioda primerljiva z valovno dolžino svetlobe. Fotonsko energijsko režo za vidno svetlobo lahko ustvarimo npr. v koloidnih kristalih z velikostjo osnovne celice okrog  $1 \mu\text{m}$  [35]. Širina in oblika prepovedanega pasu sta odvisni od razmerja lomnih količnikov oz. dielektričnega kontrasta, periode modulacije in velikosti kristala. Za preverjanje metode smo modelirali enodimenzionalen fotonski kristal, kjer se izmenjujejo plasti z debelino  $a/2$  in z izotropno dielektričnostjo  $\epsilon_1$  in  $\epsilon_2$ , kot je prikazano na sliki 5.4.



**Slika 5.4** Periodična struktura, kjer se izmenjujeta plasti z različnima dielektričnima konstantama. Svetloba se širi v smeri osi  $z$  [34].

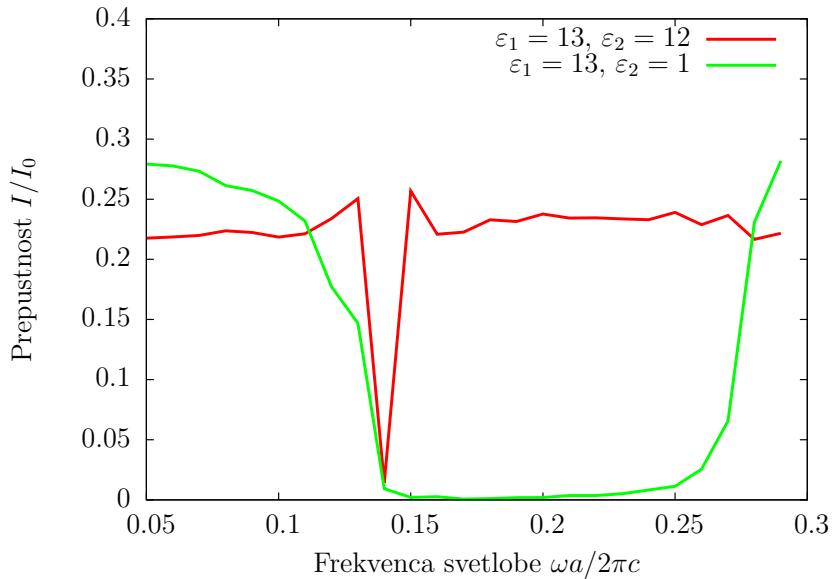
V literaturi določeni fotonski pasovi, torej odvisnosti frekvence  $\omega$  od valovnega vektorja  $k$ , so prikazani na sliki 5.5 [34]. Če se dielektrični konstanti obeh plasti razlikujeta, opazimo interval frekvenc, pri katerih ni možen noben valovni vektor, torej se valovanje ne more širiti skozi 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 [34].

Za modeliranje opisanega fotonskega kristala smo uporabili periodične robne



**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 [34].

pogoje v smereh  $x$  in  $y$ , v smeri  $z$  pa celico dolžine 1024 enot z 20 enotami absorbitajoče plasti na vsakem koncu. Grafa prepustnosti kristalov z različnimi izbirami za dielektričnosti sta na sliki 5.6. Valovanje, ki se je od periodične strukture zaradi prepovedanega pasu odbilo, smo zajeli v absorbitajoči plasti okrog celice.



**Slika 5.6** Rezultati preizkusa s periodično modulacijo lomnega količnika. Prikazana je odvisnost prepustnosti enodimensionalnega fotonskega kristala v odvisnosti od frekvence vpadne svetlobe pri različnih razmerjih dielektričnih konstant.

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 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.

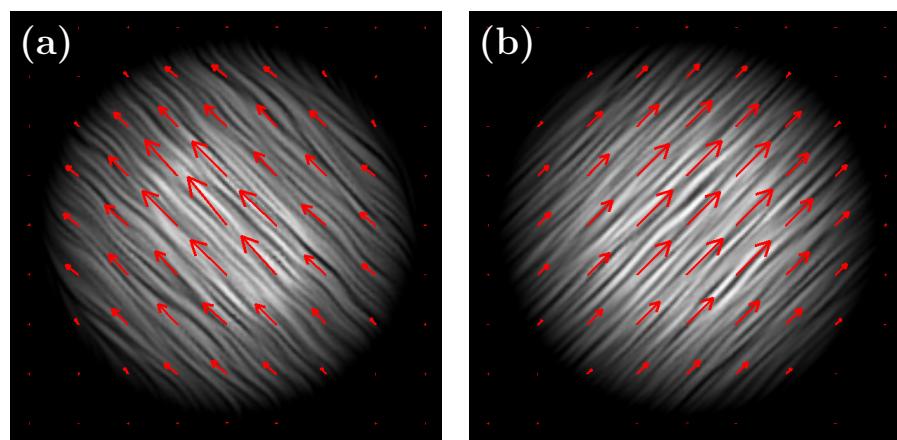
Periodična modulacija lomnega količnika je pomembna za tvorbo metamaterialov [36]. To so umetne snovi z nenavadnimi fizikalnimi lastnostmi, ki jih ne najdemo v naravi. Največ pozornosti na področju metamaterialov je posvečene snovem z negativnim lomnim količnikom pri določeni valovni dolžini svetlobe. 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 Uniformno nematsko vlakno

V delu bomo v nadaljevanju smo preučevali širjenje svetlobe po cilindričnih vlaknih z različnimi profili direktorja. Računsko metodo smo preizkusil na sistemu, ki je podoben obravnavanim, še vedno pa toliko poenostavljen, da lahko napovemo rezultat. V ta namen smo modeliral cilindrično vlakno, v katerem je uniformen nematik, direktor pa je pravokoten na os vlakna. Vanj pošljemo kratek laserski sunek, tako da je polarizacija vpadne svetlobe nagnjena za  $45^\circ$  glede na direktor. V vlaknu se se vpadni žarek razcepi na redno in izredno komponento. Zaradi dvolomnosti obe komponenti polarizacije potujeta z različnima hitrostma, laserski sunek pa se razdeli na dva dela. Direktorsko polje je uniformno in homogeno, 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 [15].

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 sliki 5.7b, občuti manjši lomni količnik in se zato širi hitreje kot izredna.



**Slika 5.7** Lastna načina širjenja svetlobe skozi vlakno z uniformnim profilom direktorja. Vpadna svetloba je polarizirana vodoravno, optična os pa z vodoravnico oklepala kot  $45^\circ$ . Z belo barvo so prikazane silnice električnega polja, njihova svetlost pa je sorazmerna z intenziteto svetlobe. Rdeče puščice prikazujejo trenutno električno polje.



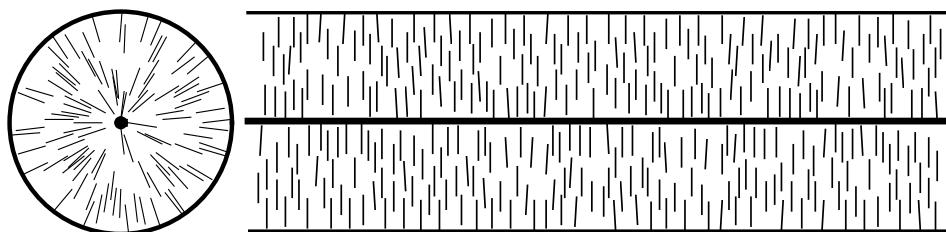
# 6

## Širjenje laserskega sunka vzdolž nematskih defektnih linij

---

### 6.1 Radialni profil direkторja

Tekočekristalna vlakna na osnovi sklenjenih smekticnih A slojev, ki so jih nedavno izdelali v laboratorijih prof I. Muševiča in prof. C. Bahra [23], imajo radialne direktorske profile. Shema takšnega vlakna je prikazana na sliki 6.1. Vzdolž osi vlakna je defektna linija, okrog katere je območje zmanjšanega reda, t.i. jedro defekta, s stopnjo reda  $S = 0$ . Polmer tega območja je mnogo manjši od valovne dolžine svetlobe, zato ga pri modeliranju nismo upoštevali. Kot eden prvih problemov tega dela nas bo zanimalo, kako defekt v sredici vlakna z radialnim profilom direktoja vpliva na širjenje svetlobe.



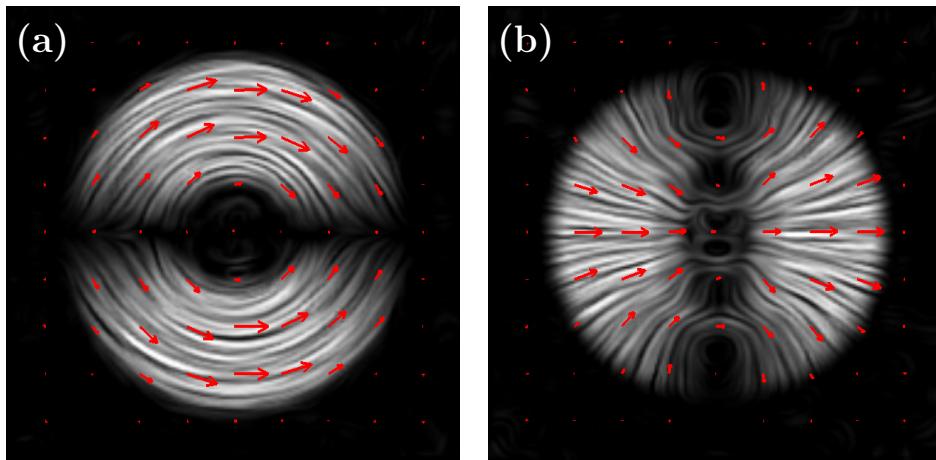
**Slika 6.1** Čelni in stranski prerez nematskega vlakna z radialnim direktorskim profilom.

Vrednosti parametrov, ki smo jih uporabili pri simulaciji, so našteti v tabeli 6.1. Obravnavali smo vlakno s premerom  $3 \mu\text{m}$ , obkroženo z vodo in zaprto v celico s kvadratnim presekom  $5 \mu\text{m} \times 5 \mu\text{m}$ . Del valovanja potuje tudi izven vlakna, zato smo vedno zagotovili dovolj prostora med vlaknom in zunanjim robom celice.

Najprej smo v vlakno poslali kratek laserski sunek vidne svetlobe z valovno dolžino 480 nm in trajanjem sunka 40 fs. Zaradi dvolomnosti tekočega kristala smo opazili razcep sunka na dve komponenti oz. dva stacionarna načina širjenja svetlobe. Obe komponenti sunka potujeta po vlaknu, polarizacija svetlobe znotraj vsakega načina pa ostaja nespremenjena. Ker je direktorsko polje singularno, sta tudi električni polji

Valovna dolžina svetlobe	480 nm
Premer vlakna	3 $\mu\text{m}$
Dolžina vlakna	40 $\mu\text{m}$
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 snovi in laserskega sunka, uporabljeni pri izračunih



**Slika 6.2** Stacionarna načina širjenja svetlobe skozi vlakno z radialnim profilom direktorja ( $s = +1$ )

v obeh načinih singularni, kot prikazuje slika 6.2. S slike takoj opazimo podobnost med električnim poljem, zlasti pri počasnejšem nihajnjem načinu (slika 6.2 desno), in direktorskim poljem. Trenutna slika električnega polja v eni ravnini ni dovolj, da ločimo med linearno in eliptično polarizacijo svetlobe. Polarizacijo smo določili z ogledom polja vzdolž sunka svetlobe. Znotraj posameznega načina je v vsaki točki svetloba polarizirana linearно, tako da je profil polarizacije enak trenutni sliki polja. Če na polarizacijo  $\mathbf{P}$  gledamo kot na enotski vektor z direktorsko simetrijo, lahko z enačbo (2.12) obema načinoma priredimo ovojno število +1. Dodatno pa ima vsak izmed načinov po eno ravnino ravnino ničelne intenzitete, kjer se smer električnega polja obrne. Pri vodoravno polarizirani vpadni svetlobi je v enem izmed načinov ta ravnina navpična, v drugem pa vodoravna. Če električno polje na eni strani te ravnine obrnemo, dobimo pravi linijski defekt moči +1.

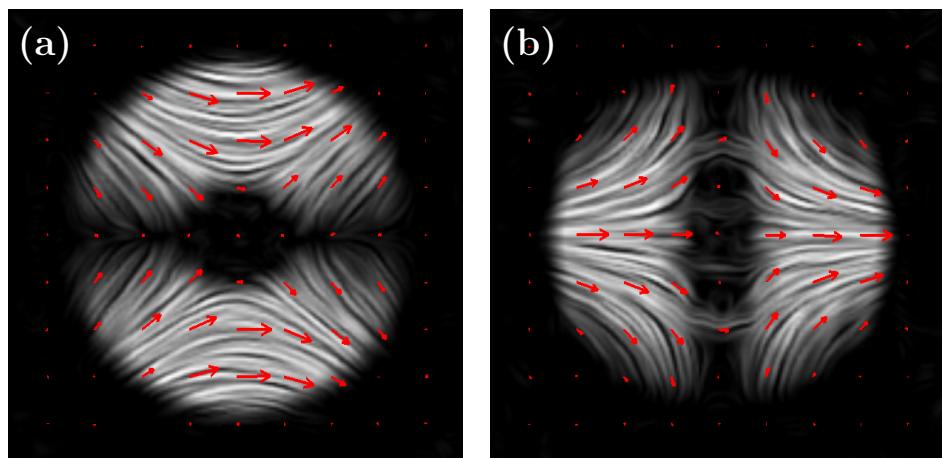
Direktorsko polje znotraj vlakna ima radialno simetrijo, saj se ne spremeni, če vlakno vrtimo okrog svoje osi. To simetrijo pa zlomi vpadna svetloba, ki uvede preferenčno smer, in sicer smer polarizacije. Po dolgem času v vlaknu mora svetlobni žarek zadostiti obema simetrijama. Efektivno si oba načina na sliki 6.2 lahko predstavljamo kot defekta v polarizaciji z ovojnim številom +1, ki jim odstranimo vse tiste dele, kjer bi polarizacija moral 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 smo najprej izbrali hiperbolični defekt z močjo  $s = -1$ .

Radialni direktorski profil znotraj vlakna opazimo eksperimentalno, ker sidranje na robu vlakna vsiljuje pravokotno smer direktorja. Drugačnih direktorskih polj, na primer takšnega s hiperboličnim defektom, pa v vlaknu ne moremo ustvariti samo z izbiro robnih pogojev. Nedavno pa je raziskovalni skupini z Univerze v Bordeauxu uspelo sintetizirati direktorska polja z defekti moči do  $|s| \leq 3/2$  v tankem filmu [28]. V nematskem filmu defektni običajno hitro razpadajo do takšnih z močjo  $\pm 1/2$ , z dodatkom primesi pa so lahko všji defekti stabilni tudi do nekaj dni.

Kratek laserski sunek se podobno kot pri radialnem profilu razdeli na dva načina, rednega in izrednega, ki sta skladna s simetrijo direktorja. Oba načina sta prikazana na sliki 6.3.



**Slika 6.3** Stacionarna načina širjenja svetlobe skozi vlakno s hiperboličnim profilom direktorja ( $s = -1$ )

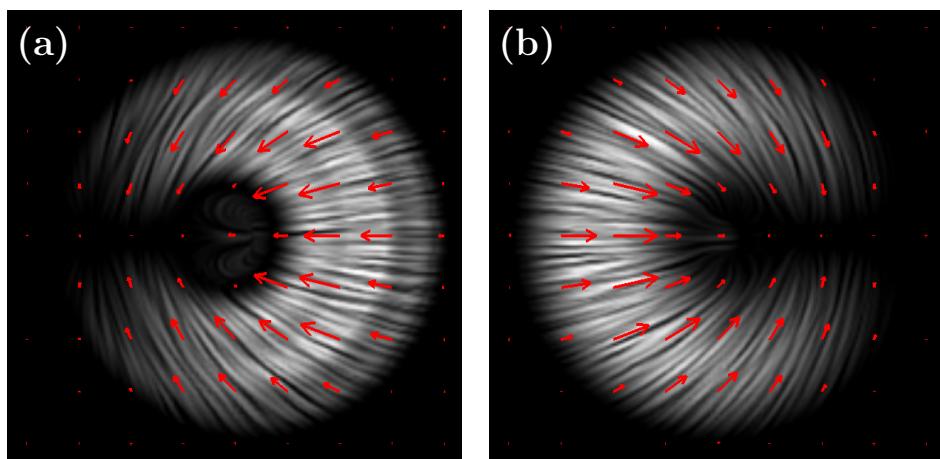
Območja z višjo intenziteto svetlobe so razporejena enako kot na sliki 6.2. Svetloba je v vseh točkah polarizirana linearно, polarizacija svetlobe pa tvori defekt z ovojnim številom  $-1$ . Spet sta vidni ravnini ničelne intenzitete, kjer se smer električnega polja obrne, ki sta posledica polarizacije vpadne svetlobe.

## 6.3 Defekti s polovično močjo

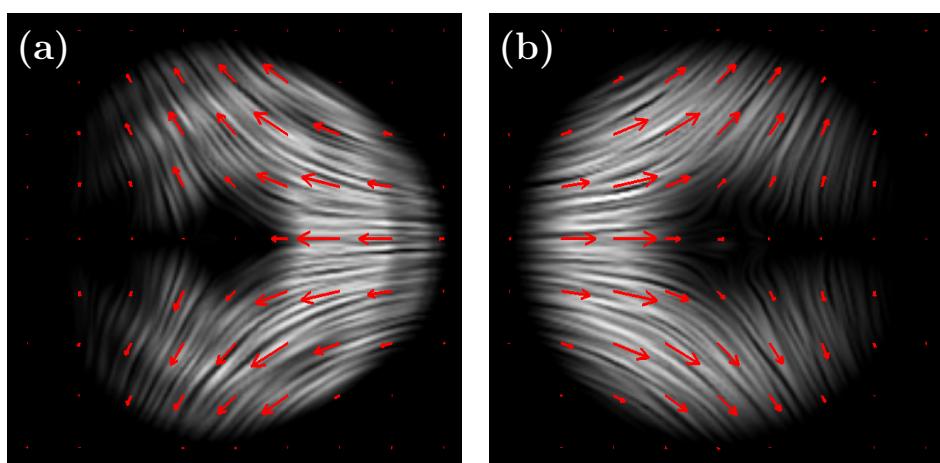
Radialni in hiperbolični profil direktorja znotraj tekočekristalnega vlakna vsili svojo simetrijo polarizaciji svetlobe. Na mestih, kjer ta simetrija ni kompatibilna s polarizacijo vpadne svetlobe, pa se pojavijo območja ničelne intenzitete svetlobe. V obeh primerih bi lahko z obratom električnega polja 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 s polovično močjo ne opazimo ravnin brez svetlobe. Znotraj vsakega lastnega načina je le eno intenzitetno območje, poleg središčnega defekta pa opazimo polravnino z ničelno intenziteto. Simetrijski ravnini, opaženi pri celostevilskih defektih, nista kompatibilni s simetrijo defekta s polcelim ovojnim številom. Podrobnej ogled električnega polja v celotnem sunku spet potrdi, da je svetloba po celiem sunku polarizirana linearno. Spet so opazna temna območja, kjer bi morala biti polarizacija svetlobe pravokotna na vpadno polarizacijo.



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



**Slika 6.5** Stacionarna načina širjenja svetlobe skozi vlakno z defektom z necelim ovojnim številom  $s = -1/2$

## 6.4 Posplošitev in splošne značilnosti

Nekaj lastnosti lastnih načinov propagacije svetlobe lahko obrazložimo s simetrijo. Polarizacija vpadne svetlobe je linearна in uniformna. Njeno ovojno število je enako 0, 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 prisotna 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; za propagacijo linearно polarizirane svetlobe vzdolž nematskih defektnih linij velja:

- Sunek linearно polarizirane svetlobe se vedno razdeli na dva stacionarna načina, ki ustrezata redni in izredni polarizaciji.
- Svetloba v obeh načinih je lokalno linearно polarizirana
- Polarizacija svetlobe v obeh načinih tvori defekt z enakim ovojnim številom kot defekt v tekočem kristalu, če pri dolocitvi ovojnega stivila polarizacije predpostavimo simetrijo  $\mathbf{P} \leftrightarrow -\mathbf{P}$  in gladek prehod čez mesta z ničelno intenziteto svetlobe.
- V območjih, kjer topologija defekta narekuje, da je svetloba polarizirana pravokotna na vpadno polarizacijo, se pojavijo "temna" območja – območja ničelne intenzitete svetlobe.
- Stacionarna načina imata iste simetrijske ravnine, ki so presek simetrijskih ravnin tekočega kristala in polarizacije vpadne svetlobe.

V vseh primerih opazimo ob osi vlakna, torej v jedru tekočekristalnega defekta, temno pego z ničelno intenziteto svetlobe. Ta temna pega je posledica prisotnosti defekta v vlaknu. Zaradi vzbujanja pa opazime še dodatne ravnine ničelne intenzitete, ki se pojavijo na mestih, kjer je polarizacija vpadnega valovanja enaka redni ali izredni polarizaciji. Pojav teh ravnin je pogojen z izvorom vpadnega valovanja in ne samo z ureditvijo tekočega kristala. Stacionarni načini širjenja valovanja, ki smo jih prepoznali v tem poglavju, torej niso odvisni le od ureditve tekočega kristala, ampak tudi od polarizacije vpadne svetlobe. To tudi niso nujno vsi lastni načini, saj je npr. v vlaknu z radialnim profilom direktorja možno tudi širjenje valovanja z radialno polarizacijo svetlobe, seveda ob prvem vzbujanju. Analiza vseh lastnih načinov valovanja v tekočekristalnih vlaknih presega okvire tega dela. Modelirali smo širjenje svetlobe po vlaknu, dolgem približno 100 valovnih dolžin svetlobe, in na tej razdalji se vsi prikazani načini širjenja zdijo stabilni. Zato jih lahko upravičeno poimenujemo lastni načini, kljub temu da je povsem možno, da so v resnici sestavljeni iz kombinacije več osnovnih načinov, ki potujejo z enako hitrostjo.



# 7

## Stalna laserska svetloba

---

### 7.1 Radialni profil direktorja

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 v prejšnjem poglavju je trajal le okrog 40 fs, kar je sicer v dosegu ultrahitrih femtosekundnih laserjev. Mnogo bolj enostavno pa je opazovanje z laserjem, ki sveti stalno s konstantno intenziteto.

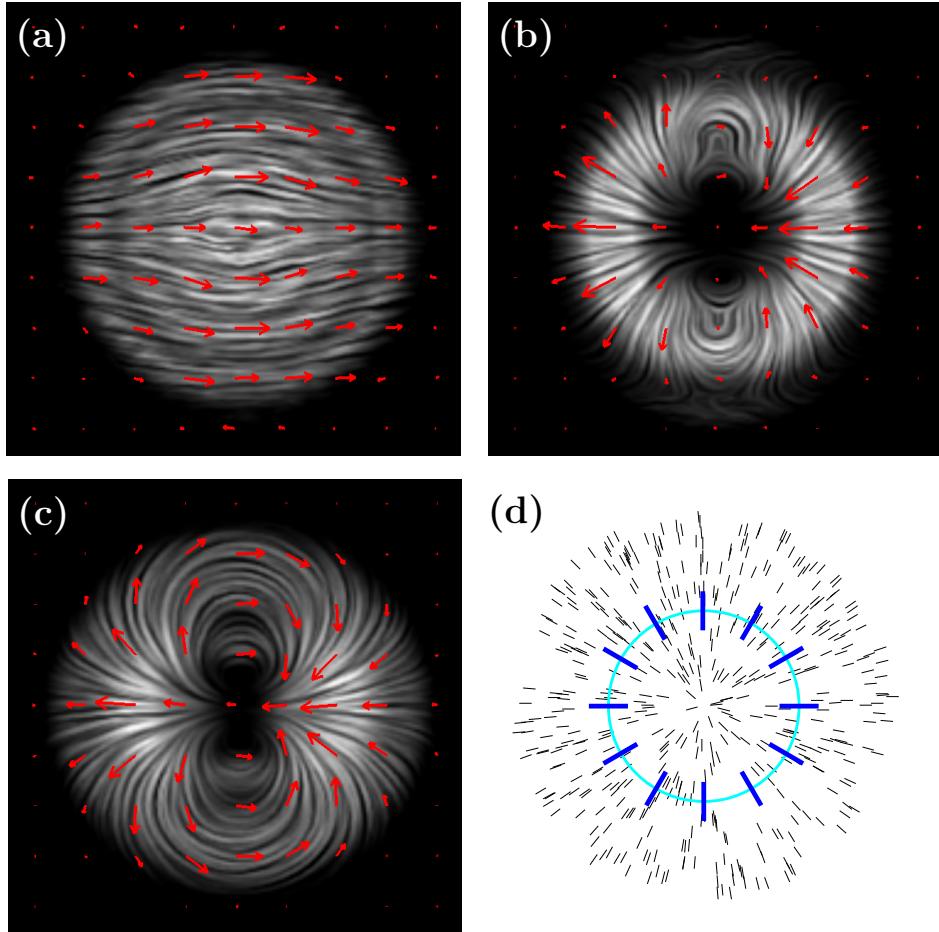
Pri enakomernem laserskem žarku je svetloba v vlaknu z radialnim profilom direktorja kombinacija obeh lastnih načinov, prepoznavanih v prejšnjem poglavju, ki se širita z različnima hitrostma. Frekvenca svetlobe je nespremenjena in zato enaka po celotnem vlaknu, opazimo pa močno krajevno odvisnost oblike polja. Za razliko od sunkovnega vzbujanja, kjer valovni paketi potujejo stran od izvora, pa se pri stalni svetlobi vzpostavi stacionarno stanje. Na vsakem mestu v vlaknu električno polje niha, njegova amplituda in polarizacija pa ostajata nespremenjeni. Strukture v električnem polju, prikazane na slikah v tem poglavju, se s časom ne premikajo, zato jih lahko natančneje opazujemo.

Trenutne slike električnega polja znotraj vlakna so prikazane na sliki 7.1. Zaradi jasnosti smo uporabili vlakno z nižjo dvolomnostjo kot v sunkovnem načinu; tu je bila razlika med izrednim in rednim lomnim količnikom le  $\Delta n = 0,04$ . Značilno dolžino pojavorov v dvolomnem vlaknu lahko ocenimo kot

$$d_1 \sim \frac{\lambda}{\Delta n} \quad (7.1)$$

kjer je  $\lambda$  valovna dolžina svetlobe,  $\Delta n$  pa razlika lomnih količnikov. Izbrali smo takšno dvolomnost, da je bila ta dolžina mnogo večja od valovne dolžine, zato smo lahko pojave natančneje opazovali. Vse slike v tem poglavju prikazujejo intenziteto svetlobe in trenutno električno polje na različnih položajih v vlaknu. V vlakno vsakič vstopa svetloba z linearno polarizacijo v vodoravni smeri. Prva slika (a) prikazuje polje eno valovno dolžino po vstopu v vlakno, kjer je ravno že vidno odstopanje od linearnega profila. Na tretji sliki (c) je vsakič polje, kjer je fazni zamik med lastnima načinoma z redno in izredno polarizacijo enak poloviči nihaja. Pri izbranih parametrih se to zgodi približno  $15 \mu\text{m}$  po vstopu v vlakno. Dodatno smo prikazali

vmesno stanje (c), ki nastopi  $10 \mu\text{m}$  po vstopu v vlakno, kjer je zamik med obema lastnima načinoma tretjina nihaja.



**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  $s = 0$  (a) in  $s = +2$  (c). Na sliki (b) je vmesno stanje, kjer je električno polje podobno kot pri defektu moči  $s = +1$ . Direktorsko polje v vlaknu je prikazano na sliki (d).

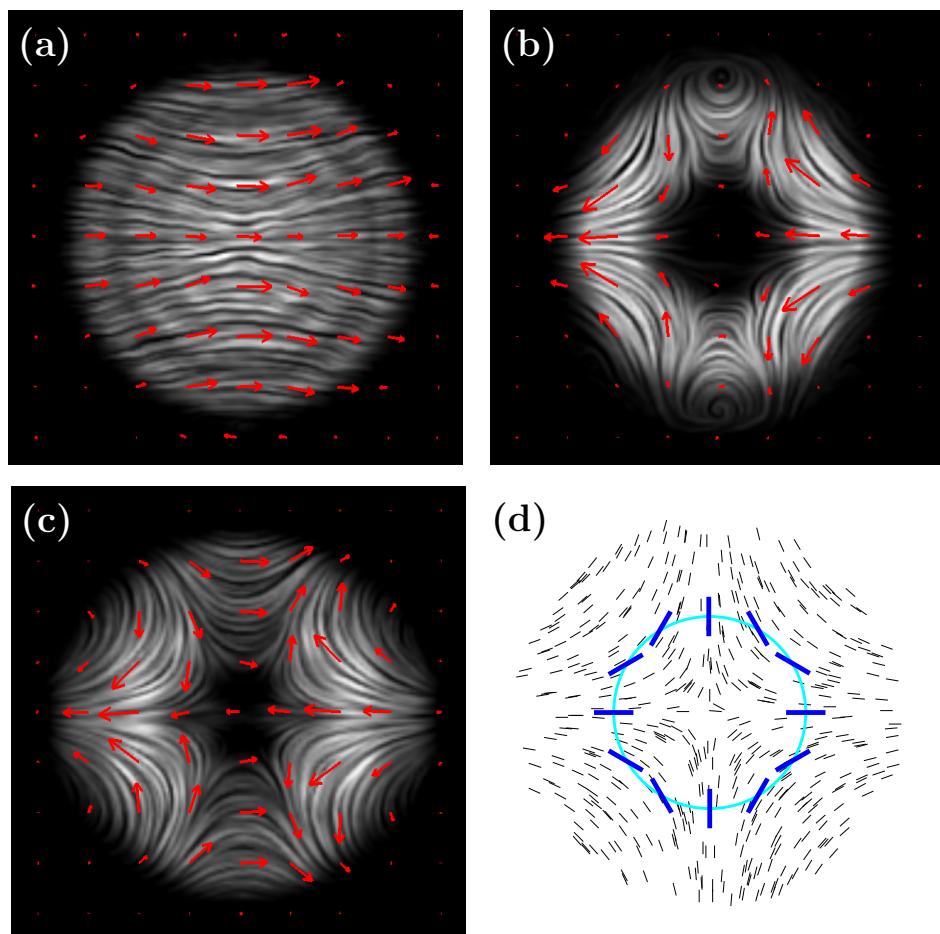
Na sliki je dobro vidno izmenjevanje konfiguracij električnega polja z ovojnima številoma  $s = 0$  in  $s = +2$ . Zaradi razlike v hitrosti propagacije se na nekaterih mestih v vlaknu oba valovna načina z ovojnim številom  $+1$  seštejeta, na drugih pa odštejeta. Rezultati nakazujejo, da se podobno zgodi tudi z močjo defekta 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 približno ustreza defektu z ovojnim številom  $+1$ , presek polja pa je podoben stacionarnemu načinu vlakna, prikazanemu na desni strani slike 6.2.

Zanimivo je tudi spremenjanje polarizacije svetlobe vzdolž vlakna. V obeh lastnih načinih je svetloba polarizirana linearно, kar opazimo tudi na mestih, kjer se načina seštejeta z enako ali nasprotno fazo. V vmesnih stanjih, kot npr. na sliki 7.1b, pa je polarizacija svetlobe eliptična. Tam je med redno in izredno komponento fazni

zamik, ki ni celoštevilski večkratnik  $\pi$ , smer električnega polje pa se s premikanjem v kraju in času vrti. Polarizacija svetlobe torej je odvisna od položaja znotraj vlakna in je ne moremo opisati le s trenutno sliko električnega polja.

## 7.2 Hiperbolični profil direktorja

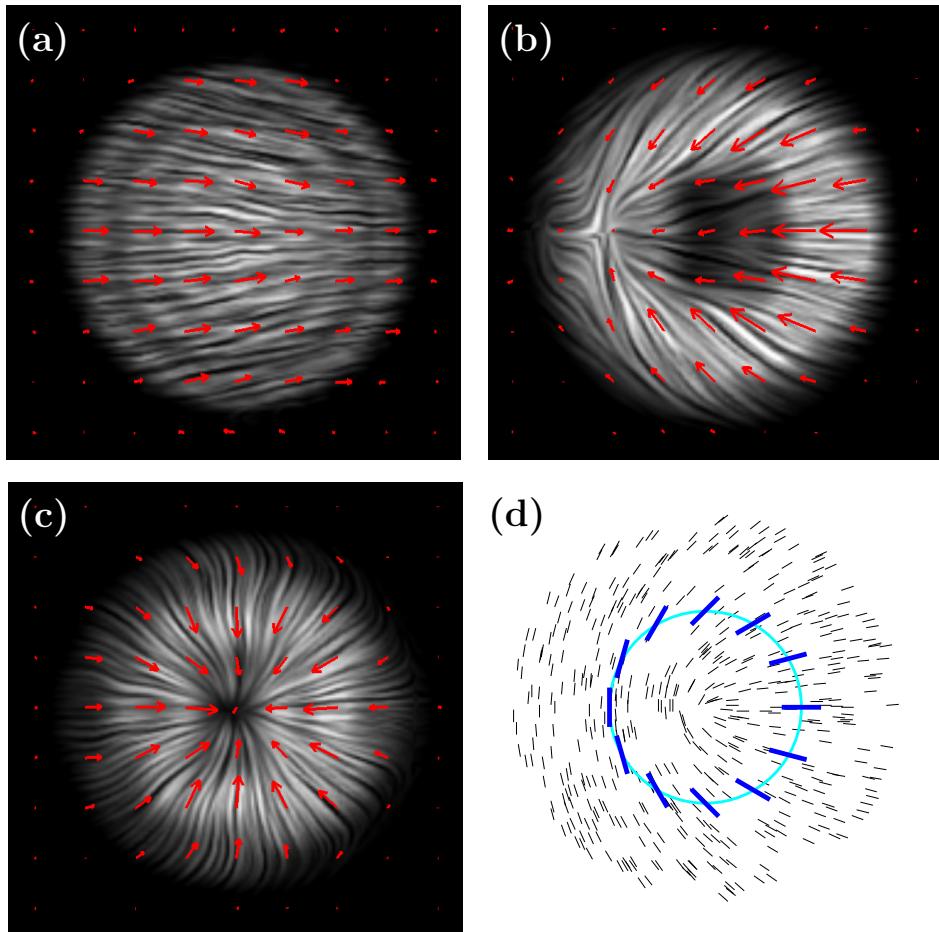
Podobno obnašanje opazimo tudi v vlaknu s hiperboličnim direktorskim profilom, ki ima v osi defekt z ovojnim številom  $-1$ . V tem primeru polarizacija svetlobe prehaja med načinoma z ovojnim številom  $0$  in  $-2$ , spet pa so opazna tudi vmesna stanja z eliptično polarizacijo. Primer slike električnega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



**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  $s = 0$  (a) in  $s = -2$  (c). Na sliki (b) je vmesno stanje, kjer je električno polje podobno kot pri defektu moči  $s = -1$ . Direktorsko polje v vlaknu je prikazano na sliki (d).

### 7.3 Defekti s polovično 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. Posnetki električnega polja v vlaknu z defektom moči  $s = +1/2$  so prikazani na sliki 7.3.

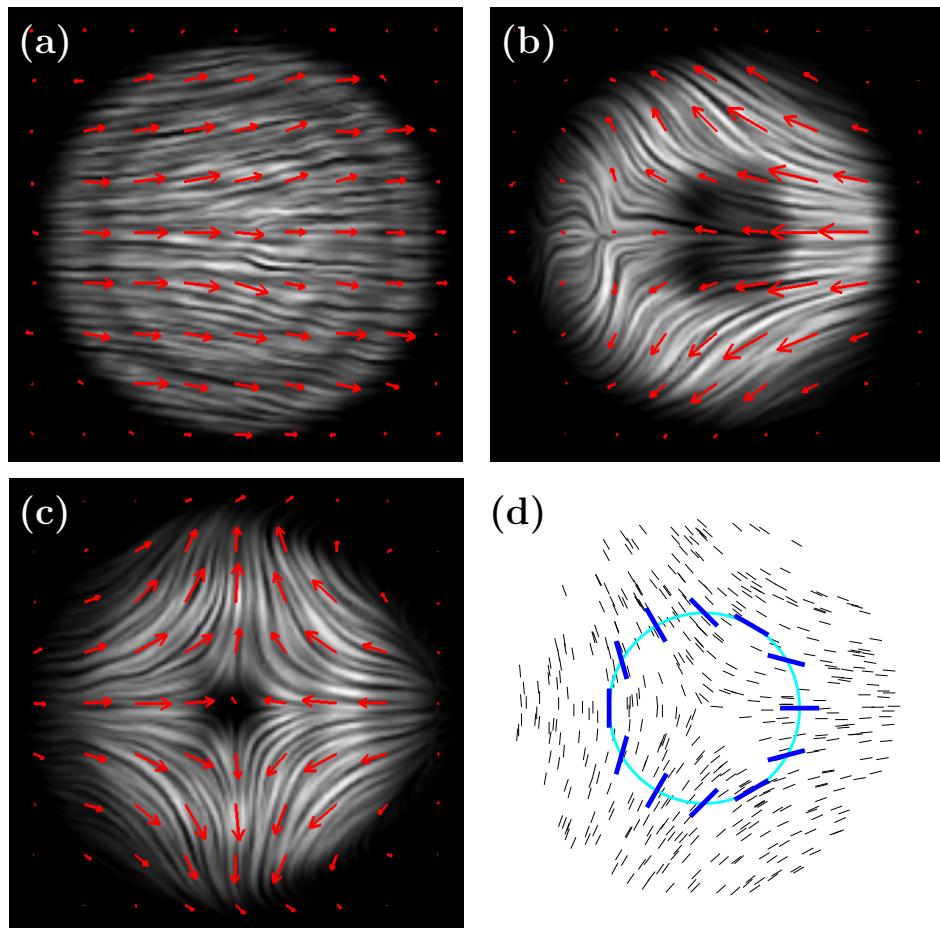


**Slika 7.3** Posnetki električnega polja na različnih mestih znotraj vlakna z direktorskim profilom z defektom moči  $+1/2$  ob stalni osvetlitvi. Vidno je izmenjevanje konfiguracij z ovojnimi števili  $s = 0$  (a),  $s = +1/2$  (b) in  $s = +1$  (c). Z belo barvo so prikazane silnice električnega polja, njihova svetlost pa je sorazmerna z intenziteto svetlobe. Rdeče puščice prikazujejo trenutno električno polje. Direktorsko polje v vlaknu je prikazano na sliki (d).

Na slikah lahko prepoznamo uniformno polje brez defektov, ki postopoma preide v polje z defektom moči +1. Za razlike od defekta moči +1, ki ga opazimo v vlaknu z radialnim profilom, pa je na zgornji sliki jasno vidna tudi komponenta svetlobe s polarizacijo, ki je pravokotna na vpadno polarizacijo. Direktor tam oklepa kot  $45^\circ$  s polarizacijo vpadne svetlobe, zato ureditev tekočega kristala lokalno deluje kot ploščica  $\lambda/2$ , ki polarizacijo svetlobe zavrti za  $90^\circ$ . V vsaki točki je polarizacija svetlobe linear, smer polarizacije pa je odvisna od položaja na preseku vlakna.

Presek na sliki 7.4b prikazuje vmesno stanje z defektom moči  $+1/2$ , kjer zopet manjka komponenta v smeri  $y$ . Tako enakomerne radialne polarizacije ne moremo dobiti z radialnim profilom tekočekristalnega direktorja in z linearno polarizirno vpadno svetlogo. Z uporabo defekta s polovično močjo pa lahko žarek linearne polarizirane laserske svetlobe pretvorimo v žarek z radialno polarizacijo.

Podobno velja za defekt z ovojnimi številom  $-1/2$ , ki je prikazan na sliki 7.3. V tem primeru opazimo izmenjevanje uniformnega električnega polja in polja z defektom moči  $-1$ , pojavi pa se tudi vmesno stanje z defektom moči  $-1/2$ . Na sliki 7.3c je lepo viden hiperboličen profil polarizacije svetlobe.



**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 ovojnimi števili  $s = 0$  (a),  $s = -1/2$  (b) in  $s = -1$  (c). Z belo barvo so prikazane silnice električnega polja, njihova svetlost pa je sorazmerna z intenziteto svetlobe. Rdeče puščice prikazujejo trenutno električno polje. Direktorsko polje v vlaknu je prikazano na sliki (d).

Na podlagi rezultatov lahko zaključimo, da komponenta električnega polja, pravokotna na vpadno polarizacijo, 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 stacionarnih načinu ni vsa svetloba polarizirana vzporedno z vpadno polarizacijo. Le

tam, kjer bi zaradi topologije defekta svetloba morala biti polarizirana v pravokotni smeri, intenziteta svetlobe močno pade. Pri konstantnem svetlenju pa se lastni načini seštejejo tako, da imajo območja, kjer topologija defekta narekuje polarizacijo v smeri, pravokotni na vpadno polarizacijo, enako intenzitetu svetlobe kot okolica.

## 7.4 Radialno polarizirana svetloba

Radialno polarizirana svetloba je uporabna za laserske pasti [37]. Z radialno polariziranim žarkom lahko ujamemo tudi delce, ki jih z linearno polarizirano svetobo zelo težko, na primer mikroskopske kovinske delce. Radialno polarizirano svetlobo je možno fokusirati v piku velikosti  $0,16\lambda^2$ , kar je občutno manj od meje  $0,26\lambda^2$  za linearno polazirino svetobo [38, 39]. 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 stacionarna načina propagacije svetlobe po vlaknu z defektom moči  $1/2$  (na sliki 6.4) seštejeta v radialno polarizacijo, mora biti fazna razlika med njima pol nihaja. V vlaknu z dolžino  $d$  bo redni žarek naredil  $d/\lambda_o = dn_o/\lambda$  nihajev, izredni pa  $d/\lambda_e = Ln_e/\lambda$  nihajev, kjer je  $\lambda$  valovna dolžina svetlobe v vakuumu. Želeno radialno polarizacijo bomo dobili, če bo razlika med številoma nihajev polcelo število.

$$k + \frac{1}{2} = \frac{d}{\lambda} (n_e - n_o) = \frac{d}{\lambda} \Delta n \quad (7.2)$$

kjer je  $k$  poljubno celo število. Za tipične vrednosti lomnih količnikov v tekočih kristalih in valovne dolžine svetlobe lahko izračunamo optimalno dolžino vlakna kot

$$d = \frac{\lambda}{2\Delta n} \approx \frac{480 \text{ nm}}{2 \times 0,16} \approx 1,5 \mu\text{m} \quad (7.3)$$

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 tudi od stopnje reda  $S$  in s tem od temperature, kar omogoča uravnavanje delovanja takšne naprave.

# 8

## Zaključek

---

V nalogi smo preučili širjenje kratkih sunkov in stalne laserske svetlobe po tekočekristalnih vlaknih z defektnimi linijami vzdolž osi. Opazili smo zanimivo povezavo med topološkim defektom v tekočem kristalu in topološkem defektu v polarizaciji svetlobe. Laserski sunek, ki ima na začetku linearno polarizacijo, razпадa na dva stacionarna načina širjenja, znotraj katerih polarizacija svetloba tvori defekt, ki je po ovojnem številu enak defektu v tekočem kristalu. Tesna povezava med tekočekristalnim direktorskim poljem in elektromagnetnim poljem velja tudi v primeru, ko je znotraj vlakna defekt s polovično močjo, ki ga polarizacija svetlobe kot pravi vektor ne more tvoriti. Napovedali smo, da lahko s stalnim svetenjem skozi defektne linije spremenimo polarizacijo svetlobe iz linearne v radialno, hiperbolično, ali takšno z višjimi ovojnimi števili.

Implementirali smo numerično metodo za modeliranje širjenja svetlobe po optično anizotropnih sredstvih, kot so tekoči kristali. Metoda temelji na metodi končnih diferenc v časovni domeni (FDTD), ki svetobo opisuje s šestimi komponentami elektromagnetnih polj, njihov časovni razvoj pa z Maxwellovimi enačbami. Izvori svetlobe so modelirani z robnim pogojem, na ostalih robovih pa je absorbirajoča plast, ki preprečuje odboj valovanja. Izbrali smo diskretizacijsko mrežo, ki omogoča optimalno natančnost metode pri določeni računski zahtevnosti, hkrati pa omogoča modeliranje optično anizotropnih snovi. Metoda pravilno napove odboj in lom valovanja ob prehodu v medij z drugačnim lomnim količnikom, prepustnost uniformne dvolomne plasti in prepovedani pas v enodimensionalnem fotonskem kristalu. Kratek laserski sunek se v uniformnem nematskem vlaknu razdeli na dva dela, ki ustrezata redni in izredni polarizaciji svetlobe.

Vsaj nekatere rezultate v tej nalogi bo možno eksperimentalno preveriti, npr. s posilanjem svetlobe skozi tekočekristalna vlakna z radialnim direktorskim profilom, ki so jih nedavno ustvarili v laboratorijih. Povezavo med topologijo defektov v tekočem kristalu in v polarizaciji svetlobe lahko opazujemo tudi v tankem filmu, kjer je defektna linija vsiljena z robnimi pogoji. Zanimiv rezultat je tudi napoved novega načina za pretvarjanje polarizacije svetlobe iz linearne v radialno, ki predstavlja nov izziv za eksperimentalno delo.

Opisana numerična metoda je primerna za modeliranje optično poljubno zapletenih snovi. Ker upošteva vseh šest komponent elektromagnetnih polj, pravilno deluje tudi v tekočih kristalih z močno krajevno odvisnostjo dvolomnosti, na primer

v bližini defektov, kjer druge metode odpovejo, s čimer ponuja mnoge možnosti za nadaljnje raziskave. Med elektromagnetnim poljem in tekočimi kristali velja dvo-smerna sklopitev, ki jo bo mogoče upoštevati s kombinacijo zgoraj opisane metode z obstoječimi programi za izračun ureditve tekočih kristalov v prisotnosti zunanjih polj. Z isto metodo lahko ustvarimo natančne transmisiojske slike različnih direk-torskih profilov, s pomočjo katerih lahko prepoznamo ureditev tekočega kristala v laboratoriju. Pravilno modeliranje in prepoznavanje zapletenih struktur olajša povezovanje med teoretičnimi in eksperimentalnimi raziskavami. Ob dodatku optično aktivnih barvil lahko raziskujemo zanimive pojave, ki so jih opazili v laboratorijih, npr. lasersko svetjenje tekočekristalnih kapljic in vlaken. Nadalje bi lahko preučevali materiale z zapleteno strukturo, kot so samourejeni metamateriali in fotonski kristali. Raziskovali bi lahko tudi in prehod svetlobe med sklopljenimi resonatorji, valovodi in drugimi optičnimi elementi. Zanimiva možnost uporabe je tudi pri iskanju novih tekočekristalnih struktur za vodenje svetlobe.

# 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] D. Kleman in O. D. Lavrentovich, *Soft Matter Physics: An Introduction.* Springer (2003).
- [4] L. D. Landau in E. M. Lifšic, *Electrodynamics of Continuous Media.* Butterworth-Heinemann (1984).
- [5] A. Sneh in Kristina M. Johnson, J. Lightwave Technol. **14**, 1067–1080 (1996).
- [6] John Hiatt, Reliability Physics Symposium, 130–133 (1981).
- [7] M. Humar in I. Mušševič, Opt. Express **18**, 26995–27003 (2010).
- [8] H. Coles in S. Morris, Nat. Photonics **4**, 676–685 (2010).
- [9] M. Stalder in M. Schadt, Opt. Lett. **21**, 1948–1950 (1996).
- [10] S.-W. Shih-Wei Ko, C.-L. Ting, A. Y.-G. Fuh in T.-H. Lin, Opt. Express **18**, 3601–3607 (2010).
- [11] D. W. Berreman, J. Opt. Soc. Am. **62**, 502–510 (1972).
- [12] S Stallinga, J. Appl. Phys. **85**, 3023 (1999).
- [13] Emmanouil E. Kriezis in Steve J. Elston, Opt. Commun. **177**, 69 – 77 (2000).
- [14] D. K. Hwang in A. D. Rey, Applied Optics **44**, 4513–4522 (2005).
- [15] A. Tafove in S. C. Hagness, *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method.* Artech House (2005).
- [16] [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).

- [17] N. D. Mermin, Rev. Mod. Phys **51**, 591–648 (1979).
- [18] [https://en.wikipedia.org/wiki/Liquid\\_crystal](https://en.wikipedia.org/wiki/Liquid_crystal) (Na spletu; dostopano 19. 11. 2012).
- [19] Simon Čopar, *Topologija in geometrija defektov v ograjenem nematiku*, disertacija (2012).
- [20] M. Ravnik in S. Žumer, Liq. Cryst. **36**, 1201–1214 (2009).
- [21] Miha Ravnik, *Vpliv svetlobnega snopa na koloidne delce v nematiku*, diplomsko delo (2004).
- [22] I. Chirtoc, M. Chirtoc, C. Glorieux in J. Thoen, Liquid Crystals **31**, 229–240 (2004).
- [23] K. Peddireddy, P. Kumar, S. Thutupalli, S. Herminghaus in C. Bahr, Langmuir **28**, 12426–12431 (2012).
- [24] <https://en.wikipedia.org/wiki/Birefringence> (Na spletu; dostopano 1. 8. 2013).
- [25] T. Porenta, M. Ravnik in S. Žumer, Soft Matter **8**, 1865–1870 (2012).
- [26] A. A. Tovar, J. Opt. Soc. Am. A **15**, 2705–2711 (1998).
- [27] E. Brasselet, N. Murazawa, H. Misawa in S. Juodkazis, Phys. Rev. Lett. **103**, 103903 (2009).
- [28] C. Loussert, U. Delabre in E. Brasselet, Phys. Rev. Lett. **111**, 037802 (2013).
- [29] K. Yee, IEEE T. Antenn. Propag. **14**, 302–307 (1966).
- [30] [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).
- [31] J.-P. Berenger, J. Comput. Phys. **114**, 185–200 (1994).
- [32] E. Hecht, *Optics*. Addison-Wesley Longman (2002).
- [33] L. Novotny in B. Hecht, *Principles of Nano-Optics*. Cambridge University Press (2006).
- [34] 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).
- [35] Y.-H. Ye, F. LeBlanc, A. Hache in V.-V. Truong, Appl. Phys. Lett. **78**, 52–54 (2001).
- [36] N. Engheta in R.W. Ziolkowski, *Metamaterials: Physics and Engineering Explorations*. Wiley (2006).

- [37] Q Zhan, Opt. Express **12**, 3377–3382 (2004).
- [38] R. Dorn, S. Quabis in G. Leuchs, Phys. Rev. Lett. **91** (2003).
- [39] Y. Kozawa in S. Sato, J. Opt. Soc. Am. A **24**, 1793–1798 (2007).