

Magistrsko delo

Miha Čančula

29. julij 2013

1 Uvod

Strukture za usmerjanje svetlobe igrajo pomembno vlogo v sodobnih optičnih komunikacijskih sistemih[1]. (**TODO: Zakaj so valovodi dobri**)

Tekoči kristali so mehke snovi, ki združujejo lastnosti kristalov in tekočin[2]. Praviloma so tekoči kristali sestavljeni iz paličastih ali diskastih molekul, tekočerkristalne mezofaze pa tvorijo tudi segmenti DNK, molekule nekaterih virusov in primerni koloidni delci. Položaji gradnikov nimajo reda dolgega dosega, ali pa ta red ne drži v vseh treh dimenzijah, zato se snov obnaša kot tekočina.

Orientacijski red v tekočih kristalih lahko takšen red opišemo s preferenčno orientacijo oz. direktorjem \mathbf{n} in stopnjo reda S . Na prosto energijo in s tem na ureditev tekočega kristala vplivajo krajevno spreminjanje direktorja, temperatura in dielektrična interakcija. Za optične lastnosti je pomembna predvsem dvolomnost, kar pomeni, da je lomni količnik snovi odvisen od polarizacije svetlobe. Ta anizotropija izhaja iz oblike gradnikov, ki so v večini primerov paličaste molekule. V tekočem kristalu z orientacijskim redom os dvolomnosti sledi orientaciji gradnikov.

Tekočerkristalni laserji so v zadnjem času deležni veliko pozornosti [3, 4, 5]. Ključna dejavnika pri uporabi tekočih kristalov v laserjih sta prisotnost fotonskega prepovedanega pasu (ang. photonic bandgap) in možnost zunanega nadzora s spreminjanjem električnega polja ali temperature.

V teoretičnem delu te naloge je opisana osnovna teorija ureditve tekočih kristalov, njihove optične lastnosti in širjenje svetlobe skozi njega. Poudarek je na cilindričnih strukturah, ki so najbolj primerne za tvorbo valovodov. Poleg tega so opisane sploše lastnosti in uporabe valovodov in posebnosti tekočerkristalnih valovodov.

V tretjem poglavju je predstavljena numerična metoda, s katero sem modeliral širjenje svetlobe skozi tekočerkristalne valovode, in nekaj preizkusov njene pravilnosti. V četrtem poglavju so rezultati (**TODO: kaj točno?**).

2 Teoretično ozadje

2.1 Tekoči kristal kot anizotropni dielektrik

V tekočem kristalu imajo gradniki orientacijski red dolgega dosega. Definiramo lahko enotski vektor \mathbf{n} , ki določa povprečno smer gradnikov in ga imenujemo direktor. Direktor ni pravi vektor, saj v tekočem kristalu ne ločimo med smerjo \mathbf{n} in $-\mathbf{n}$. Tudi če sami gradniki nimajo takšne simetrije, jo imajo njihove fluktuacije, zato lahko ureditev dobro opišemo z direktorjem[6].

Direktor \mathbf{n} podaja povprečno smer gradnikov, ne pa dejanske orientacije posameznih gradnikov. Zato uvedemo še stopnjo reda S (angl. *degree of order*), ki nam pove, koliko smeri molekul v povprečju odstopajo od direktorja. Zaradi simetrije $\mathbf{n} \leftrightarrow -\mathbf{n}$ ne moremo vzeti kar povprečne vrednosti kota med gradnikom in direktorjem, saj je ta vrednost enaka nič. Namesto tega uporabimo povprečni kvadrat kota, ki je ekvivalenten kvadrupolnemu momentu[7]

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

kjer je ϑ kot med osjo gradnika in direktorjem, $\langle \rangle$ pa prostorsko ali časovno povprečje. Pri takšni definiciji ima popolnoma urejen tekoči kristal, kjer so vsi gradniki vzporedni z direktorjem, vrednost

$S = 1$, povsem neurejen tekoči kristal z naključnimi orientacijami molekul pa $S = 0$. V Landauovi teoriji faznih prehodov je ureditveni parameter neka količina, ki je v eni fazi enaka nič, v drugi pa od nič različna. Zgoraj definirana stopnja reda S je tako primeren ureditveni parameter za prehod med izotropno tekočino in tekočokristalno fazo[2].

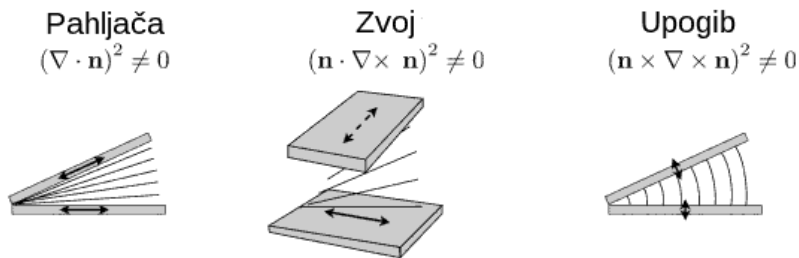
Direktor in nematsko stopnjo reda lahko hkrati opišemo z eno tenzorsko količino. V ta namen uvedemo tenzor ureditvenih parametrov Q_{ij} kot

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

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

2.1.1 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 tekočokristalne mezofaze. V tej nalogi obravnavamo le dve izmed mnogih tekočokristalnih mezofaz, in sicer nematsko in holesterično. K prosti energiji teh dveh mezofaz prispevajo elastične deformacije, stopnja reda in dielektrična interakcija z električnim poljem. Drugi prispevki, npr. magnetna interakcija in fleksoelektričnost, so pri običajno uporabljanih snoveh in optičnem polju zanemarljivi.



Slika 1: Trije načini elastične deformacije direktorja.

Posamezni gradniki imajo največjo svobodo gibanja in s tem največjo entropijo, če je direktor in s tem tudi tenzor Q_{ij} uniformen. Krajevno spreminjanje ureditvenega parametra Q_{ij} v katerikoli smeri povzroči, da sistemu prosta energija naraste. To povečanje je odvisno od smeri spreminjanja Q_{ij} glede na smer direktorja. Na sliki 1 so prikazani trije načini deformacije direktorja, s katerimi lahko lokalno opišemo poljubno krajevno odvisnost. Ti trije načini so pahljača (*angl. splay*), zvoj (*angl. twist*) in upogib (*angl. bend*).

V splošnem so elastične konstante, ki pripadajo vsakemu izmed treh osnovnih načinov deformacije, med seboj različne. Prispevek k gostoti proste energije zaradi elastičnih deformacij nematskega tekočega kristala je tako enak

$$f_{\text{el}}^N = \frac{K_1}{2}(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \frac{K_2}{2}(\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + \frac{K_3}{2}(\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2. \quad (3)$$

(**TODO: tipične vrednosti konstant**), (**TODO: izražava s Q_{ij}**)

V kiralnem nematiku oz. holesteriku pa ima stanje z najnižjo prosto energijo konstanten zvoj s periodo $a = 2\pi/q$. Drugi člen tako ni več simetričen glede na smer deformacije, gostota proste energije v holesteriku pa je enaka

$$f_{\text{el}}^{Ch} = \frac{K_1}{2}(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \frac{K_2}{2}(\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n} - q)^2 + \frac{K_3}{2}(\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2. \quad (4)$$

V tekočih kristalih je stabilnost nematske mezofaze 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

$$f_L = \frac{1}{2}a(T - T^*)Q_{ij}Q_{ji} + \frac{1}{3}BQ_{ij}Q_{jk}Q_{ki} + \frac{1}{4}C(Q_{ij}Q_{ji})^2, \quad (5)$$

kjer je T temperatura, T^* najnižja možna temperatura podhlajene izotropne faze, a , B in C pa členi Landauovega razvoja in so odvisni od snovi. 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

$$f_{\text{EM}} = -\frac{1}{2}\epsilon_0 \left(\bar{\epsilon} E_i E_i + \frac{2}{3}\epsilon_a^{\text{mol}} Q_{ij} E_i E_j \right), \quad (6)$$

kjer je $\bar{\epsilon}$ povprečna dielektrična konstanta, $\epsilon_a^{\text{mol}} = \epsilon_{\parallel}^{\text{mol}} - \epsilon_{\perp}^{\text{mol}}$ dielektrična anizotropija posamezne molekule, E_i pa zunanje električno polje. Če na tekoči kristal svetimo, ureditev molekul ne more slediti hitremu spreminjanju optičnega električnega polja, ampak nanj efektivno deluje povprečen kvadrat 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.

2.1.2 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 ϵ_a^{mol} , direktorja in nematske stopnje reda S . Odvisnost od direktorja in stopnje reda lahko opišemo s tenzorskim ureditvenim parametrom Q_{ij} . Ta je brezsleden, zato tudi dielektrični tenzor zapišemo kot vsoto izotropnega in brezslednega tenzorja kot [2, 8]

$$\epsilon_{ij} = \bar{\epsilon} + (\epsilon_a)_{ij} = \bar{\epsilon} + \frac{2}{3}\epsilon_a^{\text{mol}} Q_{ij} \quad (7)$$

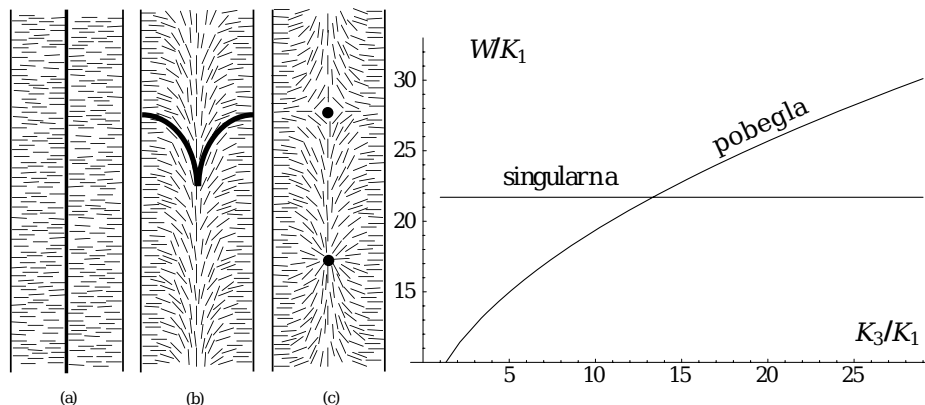
Lastni vektorji tenzorja Q_{ij} so direktor in dve pravokotni smeri, po zgornji zvezi pa so enake tudi lastne osi dielektričnega tenzorja. V enosnem tekočem kristalu je tako optična os z izrednim lomnim količnikom vzporedna z direktorjem.

Če primerjamo enačbi (6) in (7) opazimo dvosmerno povezavo med ureditvijo tekočega kristala in elektromagnetnim poljem. Zaradi dielektrične sklopitve svetloba vpliva na ureditev tekočega kristala, zaradi optične anizotropije pa tekoči kristal vpliva 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 poenostavitvam oz. limitam močnega ali šibkega polja. Če je elektromagnetno polje dovolj močno, se bo direktor orientiral v smeri polja, torej svetloba vedno čuti izredni lomni količnik. V tem režimu tekoči kristal ne vpliva na širjenje svetlobe. Če pa je svetloba zelo šibka, ne spremeni orientacije molekul in lahko privzamemo, da je direktorsko polje fiksirano. Močno se razlikujeta tudi časovni skali obeh pojavov, saj je karakteristični čas relaksacije tekočega kristala velikostnega reda sekunde, optična polja pa nihajo s periodo okrog femtosekunde. Zato lahko preučujemo propagacijo svetlobe preden se tekoči kristal lahko preuredi.

V tem magistrskem delu sem se omejil le na širjenje svetlobe, pri čemer je direktorsko polje konstantno. Sama računska metoda pa je zasnovana tako, da je kompatibilna z obstoječimi programi za izračun ureditve tekočih kristalov[8]. 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.

2.1.3 Direktor v cilindrični kapilari

Nematski tekoči kristal se spontano uredi tako, da minimizira prosto energijo. V odsotnosti zunanega polja je prosta energija najnižja, če ni elastičnih deformacij, torej je direktor uniformen. V cilindrični geometriji s homeotropnimi robnimi pogoji pa takšna ureditev ni možna. Glede na razmerja med elastičnimi konstantami se tekoči kristal uredi v eno izmed konfiguracij na sliki 2.



Slika 2: Levo: Prerezi valja s singularno (a) in nesingularno pobeglo disklinacijo (b). Različne smeri pobega povzročijo nastanek točkastih singularnosti (c). Desno: Energija singularne in pobegle konfiguracije v odvisnosti od razmerja med elastičnima konstantama K_1 in K_3 [7].

V profilu s singularno disklinacijo v osi valja je prisotna le pahljačna deformacija, zato je energija tega stanja odvisna od konstante K_1 . V pobeglem profilu pa sta prisotni tako pahljačna kot upogibna deformacija. Energija tega stanja je odvisna od konstant K_1 in K_3 . Do pobega pride, če je razmerje K_3/K_1 manjše od 13, kar velja za večino nematskih tekočih kristalov. Z minimizacijo energije lahko izpeljemo ravnovesni radialni profil direktorja v cilindričnih koordinatah. V poenostavljenem primeru, ko sta elastični konstanti K_3 in K_1 enaki, je energijsko najugodnejše stanje[7]

$$\mathbf{n} = (n_r, n_\phi, n_z) = (\cos \chi(r), 0, \sin \chi(r)) \quad (8)$$

$$\chi(r) = 2 \arctan \frac{R-r}{R+r} \quad (9)$$

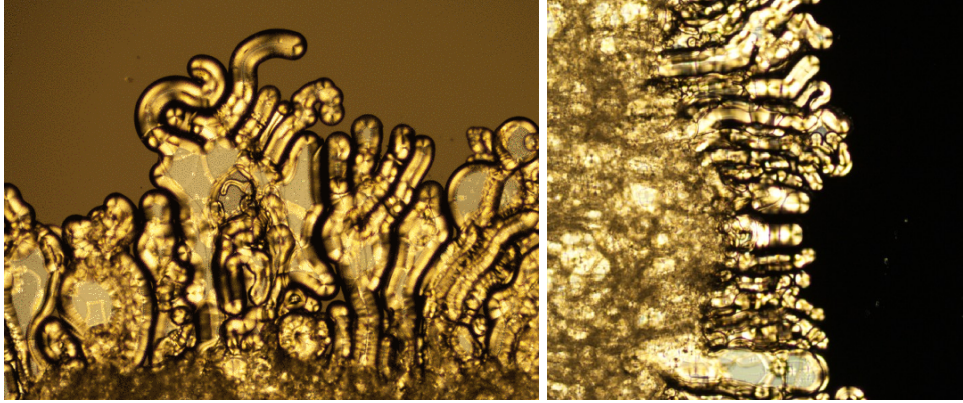
kjer je R polmer valja. Takšen profil je prikazan na sliki 2b. V primeru pobega v tretjo dimenzijo je direktor povsod dobro definiran. Če pa do pobega ne pride, je tik ob osi valja območje zmanjšanege reda, kjer ureditveni parameter S pade na 0.

V večino nematikov so vse tri konstante istega velikostnega reda, zato je stanje s pobegom v tretjo dimenzijo bolj ugodno. Veliko razmerje K_3/K_1 pa opazimo blizu faznega prehoda v smektično fazo. Z uporabo 8CB, ki tvori tako nematsko kot tudi smektično fazo, je mogoče v laboratoriju sintetizirati vlakna z radialnim profilom direktorja[9]. Primer tvorbe takšnih vlaken je na sliki 3.

2.2 Defekti

2.2.1 Disklinacije v nematiku

Ravnovesno stanje nematika je takšno, ki minimizira prosto energijo. V odsotnosti zunanjih polj je to ureditev z uniformnim direktorjem, kjer je celotna elastična prosta energija enaka 0. Pod

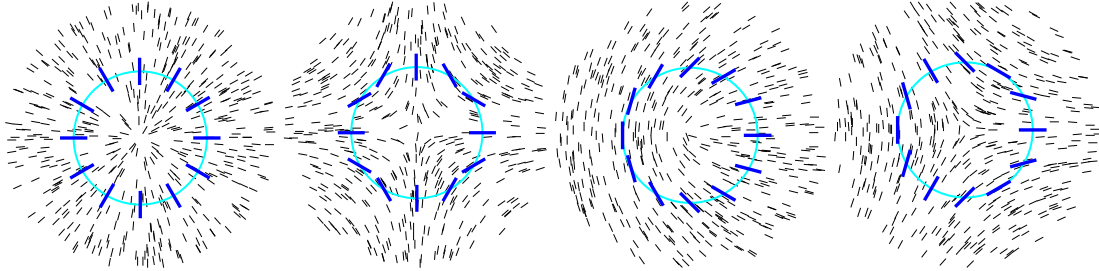


Slika 3: Rast vlaken z radialnim direktorjem na meji med tekočim kristalom 8CB in vodo[9]

vplivom ograjenosti ali zunanega polja pa lahko pride do stanja, kjer zvezno direktorsko polje ne more zadostiti robnim pogojem. V tem primeru se pojavijo območja z nedefiniranim direktorjem. Takšnim območjem, kjer orientacijski red ne drži, pravimo defekti oz. natančneje disklinacije.

V treh dimenzijah lahko obstajajo točkasti in linijski defekti[2, 7]. V vlaknih nastopajo le linijski defekti, zato se bomo posvetili zlasti tistim. Linijski defekti so lažji za razvrščanje, saj se lahko omejimo na ravnino, pravokotno na linijo, in problem prevedemo na dve dimenziji.

Disklinacije v nematskem tekočem kristalu delimo glede na to, kako se smer direktorja spreminja v okolici disklinacije. Zanima nas zlasti, za koliko se obrne direktorsko polje, če defekt obkrožimo.



Slika 4: Nekaj možnih linijskih defektov. 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 1, -1, 1/2 in -1/2. Polcele vrednosti so možne zaradi simetrije direktorja.

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

$$s = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left(\frac{d\theta}{d\phi} \right) d\phi \quad (10)$$

kjer kot θ opisuje smer direktorja, ϕ pa položaj na svetlo modrem krogu.

Direktorsko polje je zvezno povsod razen v defektu, zato mora direktor pri $\phi = 0$ enak kot pri $\phi = 2\pi$. Ta pogoj določa možne vrednosti za s . Za prava vektorska polja mora biti s celo število, saj mora biti kot θ na koncu enak kot na začetku. Nematski direktor pa ima dodatno simetrijo, saj stanji \mathbf{n} in $-\mathbf{n}$ predstavljata enak red. Zato je možno, da pri obkroženju defekta direktor naredi le pol obrata, topološki naboj s pa je zato lahko tudi polcelo število.

Vsak defekt v tekočem kristalu povzroči elastično deformacijo direktorskega polja, kar pomeni zvišano prosto energijo sistema. Za linijske defekte v enokonstantnem približku je gostota elastične proste energije enaka $\frac{K}{2}(\nabla\theta)^2$. V bližini defekta lahko privzamemo odvisnost $\theta(\phi) = s\phi + \theta_0$, iz

česar sledi $\nabla\theta = \frac{k}{r}\hat{e}_\phi$. Skupni prispevek enega defekta k prosti energiji na enoto dolžine je tako

$$\frac{F_d}{L} = \frac{K}{2} \int_{r_{min}}^{r_{max}} \frac{k^2}{r^2} 2\pi r \, dr = K s^2 \pi \ln \frac{r_{max}}{r_{min}} \quad (11)$$

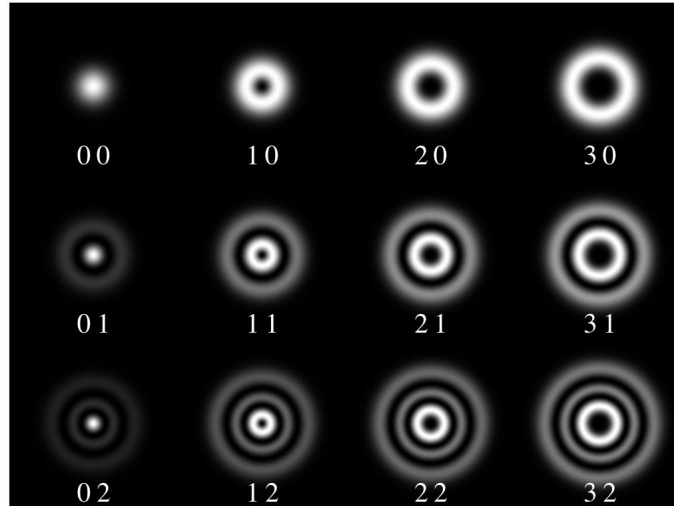
Zgornji izraz divergira tako v bližini defekta kot tudi za velike oddaljenosti. Velikostna skala r_{max} je povezana z velikostjo sistema oz. z razdaljo do sosednjega defekta. En sam izoliran defekt torej nosi zelo veliko energijo, zato ni stabilen, razen če ga vsiljujejo robni pogoji. V neposredni bližini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

V zgornji enakosti je pomembna odvisnost od ovojnega števila. Elastična energija zaradi defekta je sorazmerna z s^2 , zato je bolj ugodno, da se defekt z večjim ovojnim številom razcepi na več manjših defektov.

2.2.2 Defekti v polarizaciji svetlobe

Električno in magnetno polje sta prava vektorja, zato imata lahko le defekte s celoštevilskim ovojnim številom. Za razliko od direktorskega polja v tekočih kristalih pa deformacije elektromagnetnih polj ne nosijo energije, zato so stabilne poljubne konfiguracije.

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 Laguerre-Gaussovi snopi, prikazani na sliki 5.



Slika 5: Nekaj osnovnih Laguerre-Gaussovih načinov. Temne pege predstavljajo defekte. [10]

V optičnih poljih je nihanje električnega in magnetnega polja tako hitro, da z nobeno merilno napravo ne moremo izmeriti samega polja, ampak le njegovo časovno povprečje. Med polarizacijo svetlobe \mathbf{P} in $-\mathbf{P}$ je razlika zgolj v fazi, zato ju lahko obravnavamo kot enaki. V tem smislu je polarizacija svetlobe podobna nematskemu direktorju. Kljub temu da z električnim poljem ne moremo skonstruirati pravega defekta s polcelim ovojnim številom, imamo lahko na neki točki obrat polja, ki ne poveča proste energije.

2.2.3 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 dvo-smerna povezava: Podobno so med seboj povezani tudi defekti.

2.3 Maxwelllove enačbe v neizotropnem sredstvu

Širjenje svetlobe po snovi opisujejo štiri Maxwelllove enačbe

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{D} &= \rho_f & \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} & \nabla \times \mathbf{H} &= \mathbf{J}_f + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}\end{aligned}\quad (12)$$

kjer veljata zvezi $\mathbf{D} = \varepsilon \varepsilon_0 \mathbf{E}$ in $\mathbf{B} = \mu \mu_0 \mathbf{H}$. V tekočih kristalih sta dielektričnost ε in permeabilnost μ anizotropna tenzorja. Običajno pa je 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 σ ob prisotnosti električnega polja v snovi teče tok, ki je enak $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$. Prostih nabojev v vzorcu ni. Z upoštevanjem zgornjih predpostavk lahko Maxwelllove enačbe zapišemo kotom

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{E} &= 0 & \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} & \nabla \times \mathbf{B} &= \sigma \mathbf{E} + \varepsilon \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}\end{aligned}\quad (13)$$

V zadnji enačbi smo privzeli, da se dielektrični tenzor ε ne spreminja s časom, zato nastopa izved časovnega odvoda. Ta predpostavka je smiselna pri obravnavi optičnih polj, saj je relaksacija tekočega kristala mnogo počasnejša od sprememb električnega in magnetnega polja.

Pri numeričnem reševanju potrebujemo le zadnji dve enačbi, ki vsebujeta časovne odvode polj. Če izrazimo časovna odvoda in enačbi prepišemo v brezdimenzijsko obliko ($c = \varepsilon_0 = \mu_0 = 1$), se glasita

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E}, \quad \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \varepsilon^{-1}(\nabla \times \mathbf{B} - \sigma \mathbf{E}) \quad (14)$$

2.4 Teorija valovodov

(TODO: Preberi članke)

2.5 Defekti v optičnih poljih

3 Numerična metoda

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

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E}, \quad \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \varepsilon^{-1} \nabla \times \mathbf{B} \quad (15)$$

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

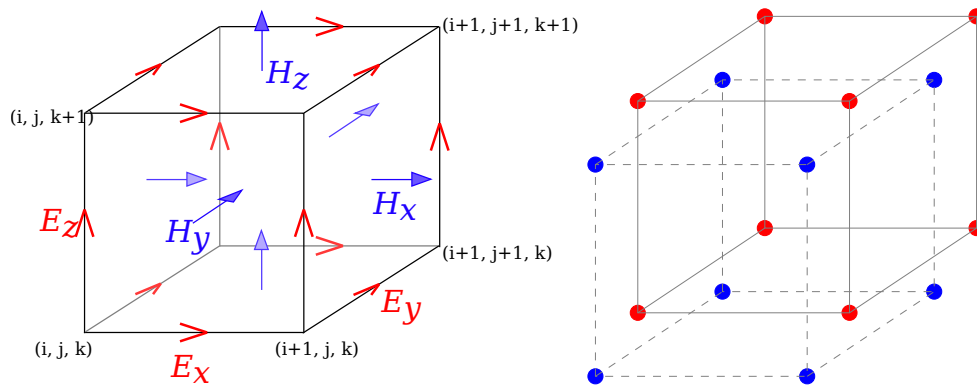
$$\frac{\partial y}{\partial x} \rightarrow \frac{y(x + \delta) - y(x)}{\delta} \quad (16)$$

3.1 Mreža

Pri diskretizaciji si lahko pomagamo z obliko obeh enačb. Za izračun časovnega odvoda vsakega izmed polj \mathbf{E}, \mathbf{B} potrebujemo le vrednosti drugega polja. Poleg tega obe enačbi povezujeta časovni odvod enega polja s krajevnim odvodom drugega. Zaradi obeh opisanih lastnosti lahko dvignemo red metode, in s tem izboljšamo natančnost, če vrednosti polj poznamo ob različnih časih in na različnih mestih[11].

Običajne implementacije metode FDTD gredo še korak dlje, tako da so tudi posamezne komponente električnega in magnetnega polja definirane na različnih točkah[12, 13]. 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 ustrezno izbiro točk, kjer so definirane posamezne komponente, so vsi krajevni odvodi izračunani ravno na sredini med ustreznima točkama mreže. Za učinkovito delovanje pa takšna mreža zahteva, da je dielektrični tenzor ϵ 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[8]. Odločil sem 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 6.



Slika 6: Levo: Yeejeva celica, pri kateri so komponente električnega polja znane na razpoloviščih robov konca, komponente magnetnega polja pa v središčih ploskev[13]. Desno: Celica, ki sem jo uporabil 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. Pomembno je le, da je znan na istem mestu kot \mathbf{E} (rdeče točke na sliki 6), vendar ob času, ko je podan \mathbf{B} .

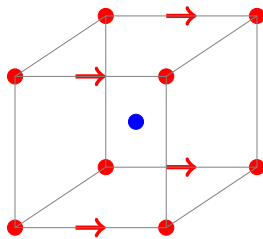
3.2 Enačbe

Na izbrani mreži ne moremo neposredno izračunati rotorja polj, ker ta ni definiran v pravih točkah. Električno polje je definirano na ogliščih kocke, zato so krajevni odvodi tega polja definirani na razpoloviščih robov, potrebujemo pa jih na mestu magnetnega polja, torej v središču kocke. V svoji metodi sem za odvod polja po vsaki koordinati v središču kocke uporabil povprečje odvodov na vseh štirih robovih, ki potekajo v smeri izbrane koordinate, kot prikazuje slika 7.

V primerjavi z Yeejevo celico povprečenje poveča čas računanja, saj moramo namesto vsakega krajevnega odvoda izračunati štiri. Na srečo pa si vsah rob delijo štiri kocke, tako da se s sprotnim shranjevanjem odvodov lahko izognemo večkratnemu računanju istega odvoda. Na ta način je število računskih operacij blizu tistemu, ki bi ga potrebovali z uporabo Yeejeve mreže.

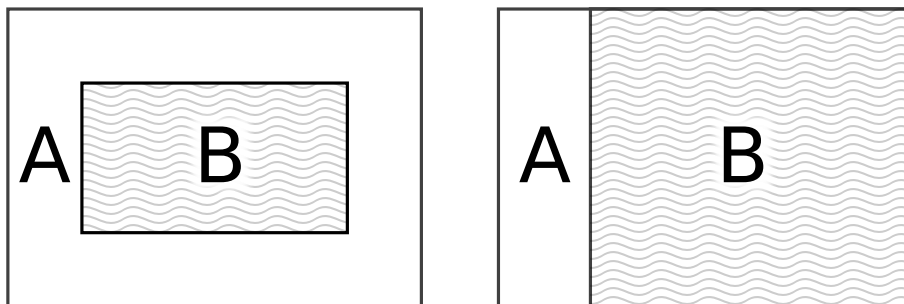
3.3 Izvor valovanja

V enačbah (15) 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.



Slika 7: Krajevni odvodi komponent polja \mathbf{E} v smeri x so definirani na štirih robovih, označenih s puščicami. Vrednost potrebujemo v središču kocke (modra pika), zato sem uporabil povprečje štirih vrednosti na robu.

Poljubno vpadno valovanje lahko modeliramo z robnimi pogoji, če izkoristimo linearnost Maxwellovih enačb. Električno in magnetno polje lahko namreč razcepimo na vsoto vpadnega in sipanega valovanja[11]. Takšen razcep polja je možen le, če je širjenje vpadnega valovanja dobro znano. Mrežo zato razdelimo na dve območji, v notranjem območju računamo s skupnim poljem, v zunanem pa polje razcepimo in shranjujemo le sipani del. Optično anizotropna snov mora biti v celoti v notranjem območju, izvor valovanja modeliramo na prehodu med območjema.



Slika 8: Delitev mreže na dve območji. V območju **A** računamo le z sipanim valovanjem, v območju **B** pa s celotnim valovanjem. Delitev na levi sliki je primerna, če je razlika med lomnima količnikoma **A** in **B** dovolj majhna. V nasprotnem primeru uporabimo delitev na desni sliki.

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

Delitev na zunanje in notranje območji, ki je prikazana na levi strani slike 8, sem uporabil le s preprostimi primeri za preverjanje delovanja metode. Vse ostale izračune sem izvajal z delitvijo na desni strani. Na sliki je velikost območja **A** pretirana zaradi preglednosti. V vseh primerih je bila debelina območja **A** enaka dva koraka mreže.

3.4 Robni pogoji

Če imamo na robu celice Dirichletov, Neumannov ali mešani robni pogoj, se bo celotno valovanje odbilo in vrnilo v celico. Tega si ne želimo, pri izvedbi eksperimentov običajno svetloba najprej preide skozi vzorec, nato pa jo zajamemo in preučimo. To lahko simuliramo z uporabo absorbirajočega robnega pogoja (*angl. Absorbing boundary condition – ABC*). Obstaja več različnih implementacij absorbirajočih robnih pogojev, v zadnjem času se največ uporablja t.i. popolnoma ujemajoča plast (*angl. Perfectly-matched layer – PML*)[11, 14].

Material v plasti PML zagotavlja eksponentno pojevanje vpadnega vala, neodvisno od njegove frekvence in smeri širjenja. Absorpcijo valovanja dosežemo z uporabo električne prevodnosti σ in magnetnih izgub σ^* . 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 ε_1 in μ_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 nefizikalen, saj imamo dodatne prostostne stopnje, polje pa ne sledi več Maxwellovim enačbam.

Komponenta E_x električnega polja vala v običajnem mediju z dielektričnostjo ε in električno prevodnostjo σ zadošča Maxwellovi enačbi

$$\varepsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma E_x = \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} . \quad (17)$$

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

$$\varepsilon \frac{\partial E_{xy}}{\partial t} + \sigma_y E_{xy} = \frac{\partial}{\partial y} (H_{zx} + H_{zy}) \quad (18)$$

$$\varepsilon \frac{\partial E_{xz}}{\partial t} + \sigma_z E_{xz} = -\frac{\partial}{\partial z} (H_{yx} + H_{yz}) , \quad (19)$$

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

3.5 Opis valovoda

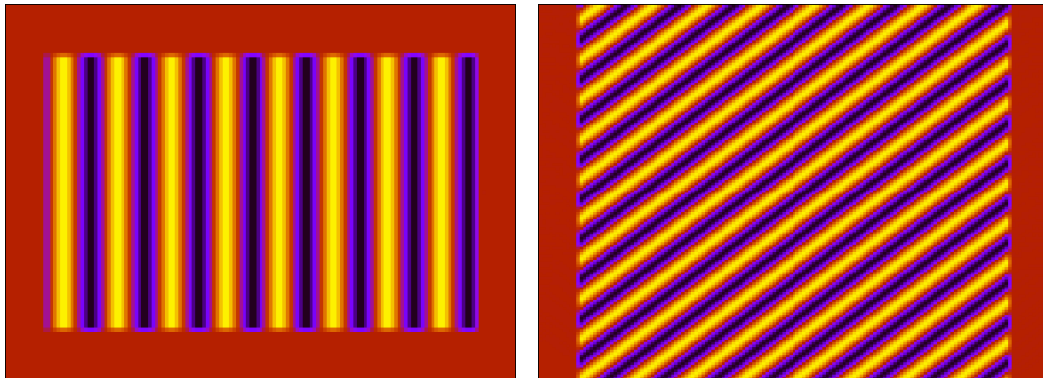
4 Preverjanje metode

(TODO: Test z dejanskim profilom, ki ga imajo v optičnih vodniki)

4.1 Prazen prostor

Prvi preizkus metode, ki sem ga opravil, je širjenje svetlobe skozi prazen prostor. Prazen prostor sem modeliral 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 sem mrežo razdelil na notranje in zunanje območje, izvor valovanja pa sem postavil po celotnem robu med območjema. Prikaz valovanja na sliki 9 potrjuje pravilnost metode, saj res vidimo ravne valove s konstantno frekvenco in valovno dolžino.



Slika 9: Levo: Trenutna slika valovanja v celici. Desno: Časovna in krajevna odvisnost valovanja. (TODO: Boljši opis, puščice na slikah)

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 8. Valovanje

se si”ri od leve proti desni, tako si lahko predstavljamo izvir valovanja na levi strani in ponor na desni. Dejstvo, da ponor valovanja na desni strani uspešno pobere celotno valovanje potrjuje natančnost računanja.

4.2 Lom in odboj

4.3 Uniformen direktor

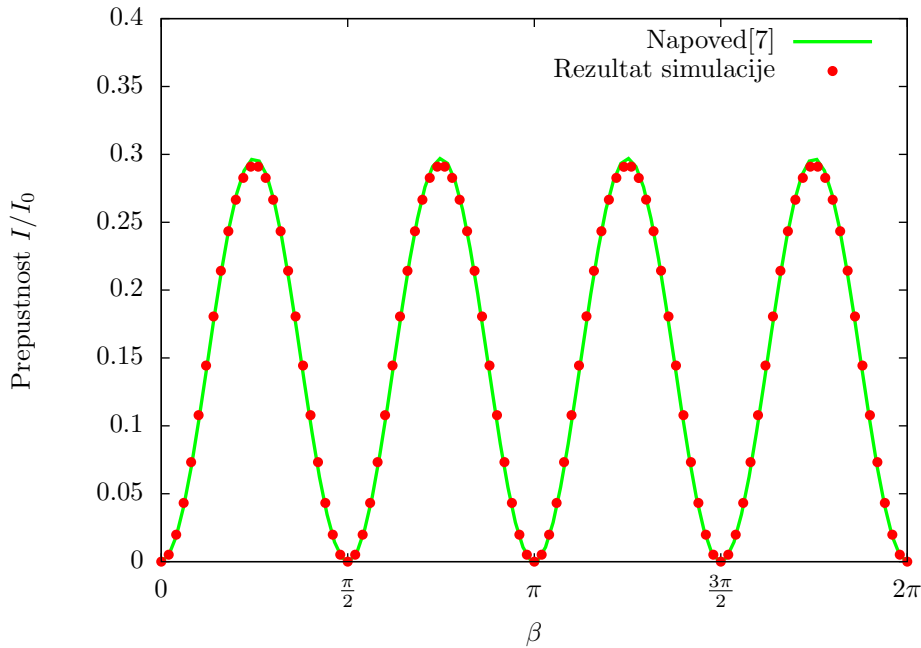
Za naslednji preizkus sem simuliral dvolomni kristal, torej snov, kjer je dielektrični tenzor uniformen, ne pa tudi izotropen. Svetloba se je širila v smeri osi z , optična os pa je oklepala kot θ z ravnino $x-y$ in kot β s polarizacijo vpadne svetlobe. Preučeval sem prepustnost takšnega sistema, če za celico postavimo polarizator, ki je pravokoten na polarizacijo vpadne svetlobe.

Ta preizkus temelji na najpogostejše uporabljani metodi za eksperimentalno opazivanje tekočih kristalov. Tanko plast tekočega kristala postavimo med dva prekrizana 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, njena intenziteta je odvisna od dvolomnosti in orientacije vmesne snovi. Na ta način se jasno vidijo defekti v tekočem kristalu.

Če je direktor uniformen po celotni debelini vzorca, lahko intenziteto prepuščene svetlobe izpeljemo analitično[7]. Enaka je

$$I = I_0 \sin^2 2\beta \sin^2 \left[\frac{\pi d}{\lambda_0} \left(\frac{n_o n_e}{\sqrt{n_e^2 \cos^2 \theta + n_o^2 \sin^2 \theta}} - n_o \right) \right], \quad (20)$$

kjer sta I_0 in λ_0 intenziteta in valovna dolžina vpadne svetlobe, d debelina vzorca, n_o in n_e pa redni in izredni lomni količnik. Ujemanje rezultatov z napovedjo je prikazano na sliki 10. (**TODO: vnesi parametre v graf**)



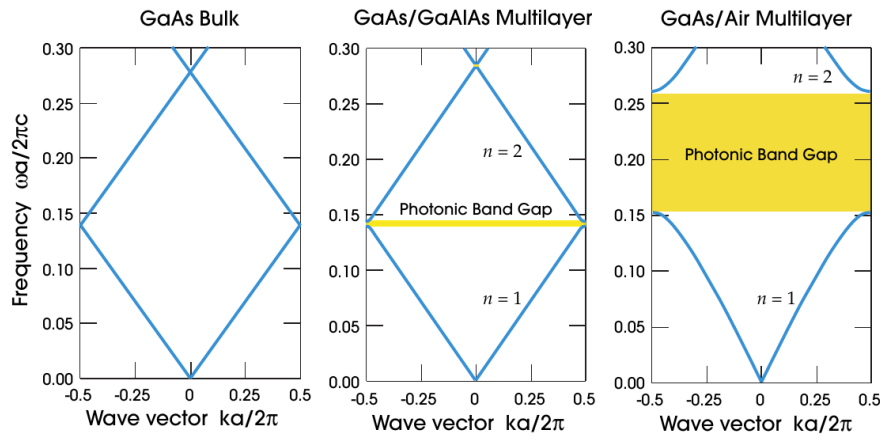
Slika 10: Rezultati preizkusa z uniformnim in anizotropnim dielektričnim tenzorjem

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

4.4 Periodična modulacija

Pri periodični modulaciji lomnega količnika opazimo pojav, da se svetloba določenih frekvenc ne more širiti po mediju[15]. Temu pojavu pravimo prepovedani pas (*angl. band gap*) in je soroden elektronski energijski reži pri molekulskih kristalih. Za prisotnost fotonskega prepovedanega pasu pa potrebujemo kristal oz. periodično strukturo, kjer je perioda primerljiva z valovno dolžino svetlobe. Fotonsko energijsko režo za vidno svetlobo zato opazimo pri koloidnih kristali, ki imajo periodo okrog $1\ \mu\text{m}$.

Širina in oblika prepovedanega pasu sta odvisni od obeh lomnih količnikov, periode modulacije in velikosti kristala. Za preverjanje metode sem modeliral kristal, kjer se izmenjujejo plasti z izotropno dielektričnostjo ε_1 in ε_2 . Teoretičen izračun odvisnosti frekvence ω od valovnega vektorja k je prikazan na sliki 11. 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.

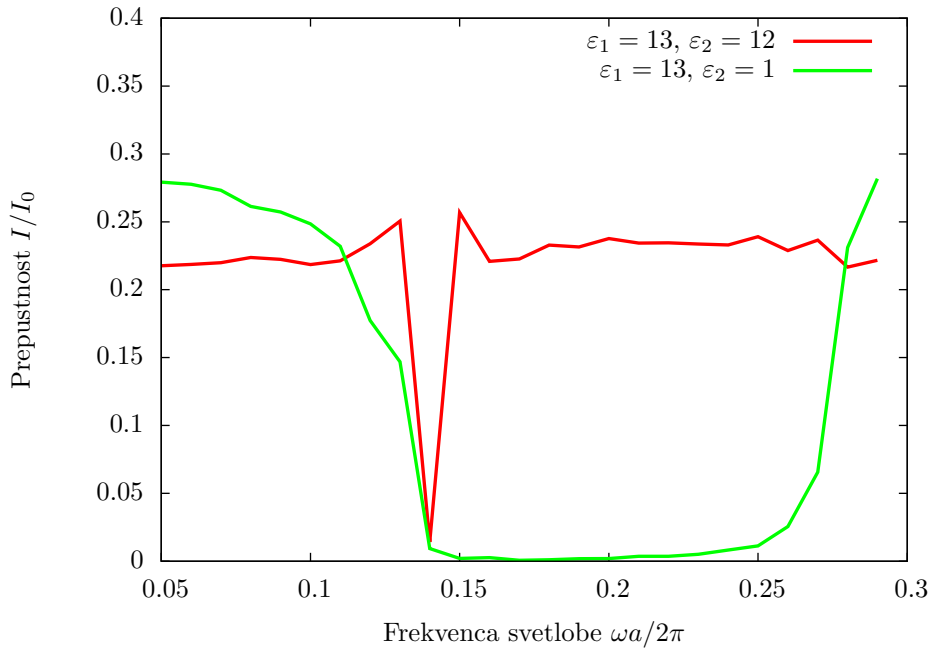


Slika 11: Pojav energijske reže v fotonskem kristalu. Levo: celotna plast ima dielektričnost $\varepsilon = 13$. Sredina: Izmenjevanje plasti z dielektričnima konstantama 13 in 12. Desno: Izmenjevanje plasti z dielektričnima konstantama 13 in 1. [15]

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 močnejše odvisna od razlike v dielektričnosti[15].

Za modeliranje takšnega kristala sem uporabil periodične robne pogoje v smereh x in y , v smeri z pa celico dolžine 1024 enot z 20 enotami absorbirajoče plasti na vsakem koncu. Grafa prepustnosti kristalov z različnimi izbirami za dielektričnosti sta na sliki 12.

Na sliki res opazimo oster padec prepustnosti v določenem frekvenčnem pasu, ki se dobro ujema s pričakovanim na sliki 11. Metoda torej pravilno napove položaj in širino prepovedanih pasov. Zlasti pri veliki razliki v dielektričnosti plasti meja prepovedanega pasu ni ostra, ampak krivulja postane zaobljena. To je posledica končne velikosti sistema, saj so teoretični izračuni napravljeni za neskončen kristal, z metodo FDTD pa lahko modeliramo le končnega. Kljub temu pa metoda da kvalitativno in kvantitativno pravilne rezultate za pojav fotonskega prepovedanega pasu.



Slika 12: Rezultati preizkusa s periodično modulacijo lomnega količnika

4.5 Robni pogoji

Za preprečevanje odboja na stranskih ploskvah sem uporabil 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, ampak s tem se poveča tudi čas računanja. Odboj na notranji steni pa lahko omilimo, če se izognemo ostrim mejam in izgube zvezno naraščajo od notranjosti proti robu. V literaturi[11] priporočajo potenčno naraščanje izgub, $\sigma \propto (d - d_0)^p$, kjer je d oddaljenost od zunanjega roba, d_0 pa debelina plasti.

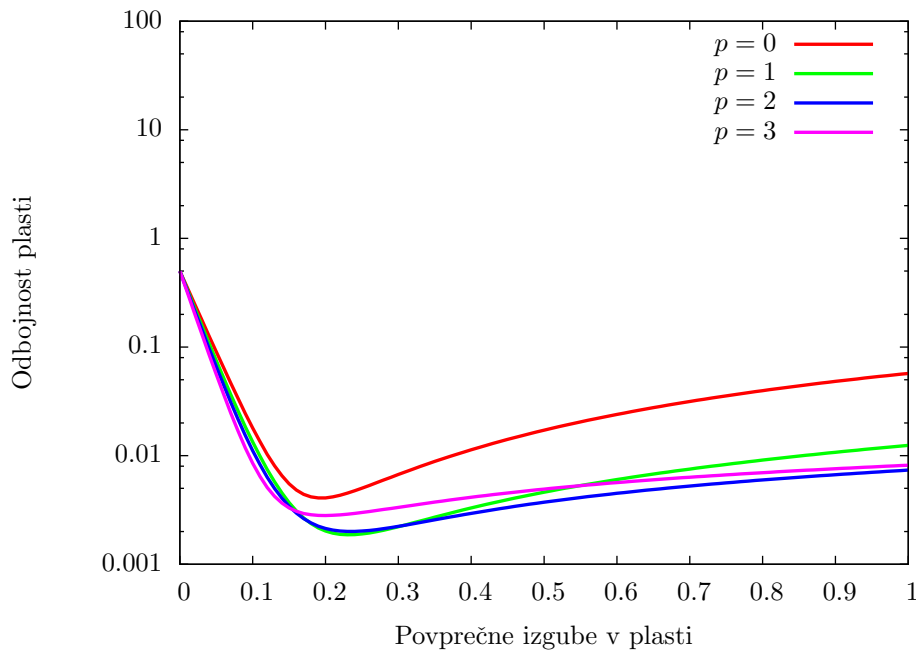
Za nekaj vrednosti p sem izračunal odbojnost robne plasti z debelino 10 enot diskretizacije. Rezultati so prikazani na sliki 13.

V primeru, da v plasti ni izgub, je njena odbojnost enaka 1, saj gre celotno valovanje skozi plast in se odbije na zunanji meji. Če izgube malo povečamo, odbojnost v vseh primerih strmo pade. Pri profilih, kjer imamo nezveznost v izgubah ali v njihovem odvodu ($p < 2$) pa odbojnost kmalu začne spet naraščati, saj postane odboj na notranji meji že opazen. Pri večjih potencah pa lahko izgube še povečamo in s tem dosežemo nižjo odbojnost plasti. V zgornjem primeru se za najboljši profil izkaže kvadratno naraščanje absorpcije, zato sem za vse nadaljnje račune uporabil takšno plast.

5 Rezultati

5.1 Valovod z radialnim profilom direktorja

6 Zaključek



Slika 13: Odbojnost robne plasti debeline 10 enot pri različnih profilih električnih in magnetnih izgub σ . Najbolje se izkaže material, kjer izgube naraščajo kvadratno z oddaljenostjo od roba celice ($p = 2$). (**TODO: Uporabi tako debelino, da bodo krivulje bolj različne**)

7 Literatura

- [1] M. Rüetsci, P. Grütter, J. Fünfschilling in H.-J. Güntherodt, *Science* **265**, 512–514 (1994).
- [2] P. G. de Gennes in J. Prost. *The Physics of Liquid Crystals, Second Edition*. Oxford University Press (1995).
- [3] H. Coles in S. Morris, *Nat. Photonics* **4**, 676–685 (2010).
- [4] M. Humar in I. Muševič, *Opt. Express* **18**, 26995–27003 (2010).
- [5] M. Humar, M. Ravnik, S. Pajk in I. Muševič, *Nat. Photonics* **3**, 595–600 (2009).
- [6] N. D. Mermin, *Rev. Mod. Phys.* **51**, 591–648 (1979).
- [7] D. Kleman in O. D. Lavrentovich. *Soft Matter Physics: An Introduction*. Springer (2003).
- [8] M. Ravnik in S. Žumer, *Liq. Cryst.* **36**, 1201–1214 (2009).
- [9] K. Peddireddy, P. Kumar, S. Thutupalli, S. Herminghaus in C. Bahr, *Langmuir* **28**, 12426–12431 (2012).
- [10] https://en.wikipedia.org/wiki/Gaussian_beam (Na spletu; dostopano 29. 7. 2013).
- [11] A. Taflovie in S. C. Hagness. *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*. Artech House (2005).
- [12] K. Yee, *IEEE T. Antenn. Propag.* **14**, 302–307 (1966).
- [13] http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/Yee_lattices (Na spletu; dostopano 27. 4. 2013).
- [14] J.-P. Berenger, *J. Comput. Phys.* **114**, 185–200 (1994).
- [15] 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).