

Magistrsko delo

Miha Čančula

3. avgust 2013

Povzetek

V nalogi je opisan razvoj numerične metode za modeliranje sirjenja svetlobe po optično anizotropnem mediju, kot je na primer tekoči kristal. Postopek reševanja temelji na metodi končnih differenc v časovni domeni, ki podaja časovne odvode elektromagnetskih polj na podlagi Maxwellovih enačb. Mreža za diskretizacijo je izbrana tako, da sta električno in magnetno polje znana ob različnih časih in na različnih položajih. Za razliko od Yee-jeve mreže, ki je v literaturi najpogosteje uporabljena in privzame diagonalen dielektrični tenzor, so tu vse komponente električnega polja znane na istem mestu. Taksna izbira omogoča računanje z anizotropnim in neuniformnim dielektričnim tenzorjem, hkrati pa je kompatibilna z obstoječimi programi za določanje ureditve tekočega kristala. Priporočljiva krajevna in časovna resolucija mreže je taksna, da je znotraj ene periode valovanja vsaj 10 točk, kar pri optičnih frekvencah pomeni okrog 40 nanometrov oz 0.15 femtosekunde. Pri dosegljivih računalnikih zmogljivosti je možno modelirati sistem v obliki kocke s stranico okrog 10 mikrometrov.

Medij je nematski tekoči kristal, ki je modeliran kot enosno dvolomna snov s krajevno odvisnostjo optične osi. Anizotropni del dielektričnega tenzorja je sorazmeren s tenzorjem ureditvenih parametrov Q v tekočem kristalu. Na enem izmed robov celice je izvor valovanja, ki je lahko poljubne oblike, na vseh ostalih pa Berengerjeva absorbirajoča plast PML. Absorbiраjoč robni pogoj z uporabo nefizikalnih materialnih parametrov poskrbi, da na robovih celice ni odbora. Natančnost metode je preizkušena na različnih testnih ureditvah tekočega kristala, za katere poznamo točne rešitve. Preizkusi vključujejo lom in odboj na meji med sredstvi, prepustnost plasti tekočega kristala med prekrižanima polarizatorjema, pojav fotonskega prevedanega pasu v periodičnih strukturah, ter razcep na redni in izredni žarek v dvolomni snovi.

Uporaba metode na tekočekristalnem vlaknu z radialnim profilom direktorja napove razcep kratkega laserskega sunca v dva lastna načina propagacije. Polarizacija svetlobe v obeh lastnih načinu tvori defekt z enakim ovojnim številom kot defekt v direktorskem polju. Ta povezava med defekti v tekočem kristalu in optičnem polju je preizkušena še na vlaknih z različnimi direktorskimi profili, kjer v vseh obravnavanih primerih najdemo enako ujemanje v ovojnem številu defektov. Iz natančnejšega opisa polja je mogoče izluščiti splošne zakonitosti propagacije laserskih pulzov po linjskih defektih. Pri uporabi stalnega vira laserske svetlobe metoda napove obliko polja, kjer se moč defekta v polarizaciji spreminja s krajem. Na ta način bi lahko generirali zapletena svetlobna polja z vsiljevanjem ureditve tekočemu kristalu.

Kazalo

1 Uvod	3
2 Tekoči kristali	3
2.1 Tekočekristalne mezofaze	3
2.2 Orientacijski red	3
2.3 Deformacije direktorja in prosta energija	5
2.4 Defekti	6
2.5 Direktor v cilindrični kapilari	7
3 Elektromagnetno valovanje	8
3.1 Maxwellove enačbe v neizotropnem sredstvu	8
3.2 Dvolomnost	9
3.3 Defekti v polarizaciji svetlobe	10
4 Sklopitev tekočega kristala s svetlobo	10
4.1 Dielektrični tenzor v tekočem kristalu	10
4.2 Povezava med defekti v tekočem kristalu in defekti v optičnem polju	11
5 Numerična metoda	11
5.1 Mreža	12
5.2 Enačbe	12
5.3 Izvor valovanja	13
5.4 Robni pogoji	14
5.5 Opis valovoda	14
6 Preverjanje metode	14
6.1 Prazen prostor	15
6.2 Lom in odboj	15
6.3 Uniformen direktor	16
6.4 Periodična modulacija	17
6.5 Dvolomno vlakno	19
6.6 Robni pogoji	19
7 Rezultati	20
7.1 Radialni profil direktorja	20
7.2 Hiperbolični profil direktorja	21
7.3 Defekti z necelo močjo	21
7.4 Splošne zakonitosti	22
7.5 Stalna laserska svetloba	23
8 Zaključek	24
9 Literatura	25

1 Uvod

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

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

Tekočekristalni 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 zunanjega nadzora s spremiščanjem električnega polja ali temperature.

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

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

2 Tekoči kristali

2.1 Tekočekristalne mezofaze

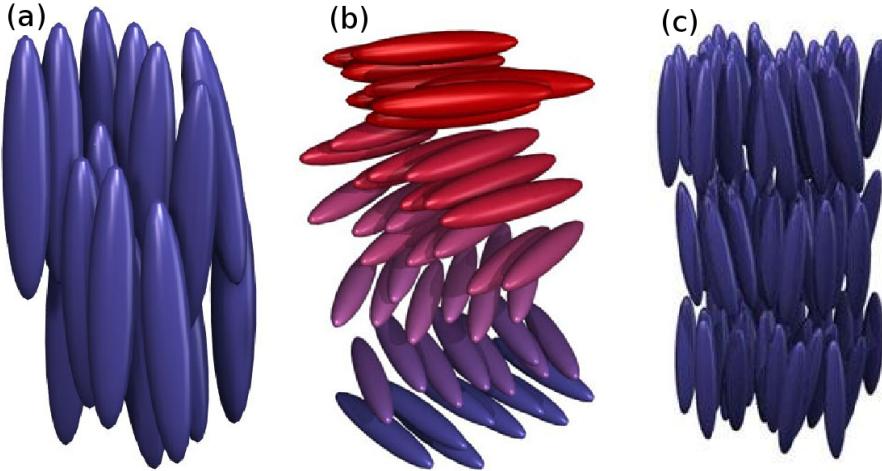
Tekoči kristali so mehke snovi, ki združujejo lastnosti kristalov in tekočin[2]. Praviloma so tekoči kristali sestavljeni iz paličastih ali diskastih molekul, tekočekristalne mezofaze pa tvorijo tudi segmenti DNK, molekule nekaterih virusov in primerni koloidni delci. Položaji gradnikov nimajo reda dolgega dosega v vseh smereh, zato se snov obnaša kot tekočina. Tekoči kristali imajo orientacijski red dolgega dosega, lahko pa imajo tudi delni pozicijski red, na primer ureditev molekul v plasti. Tekočekristalne mezofaze se pojavijo pri določeni temperaturi ali koncentraciji molekul.

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

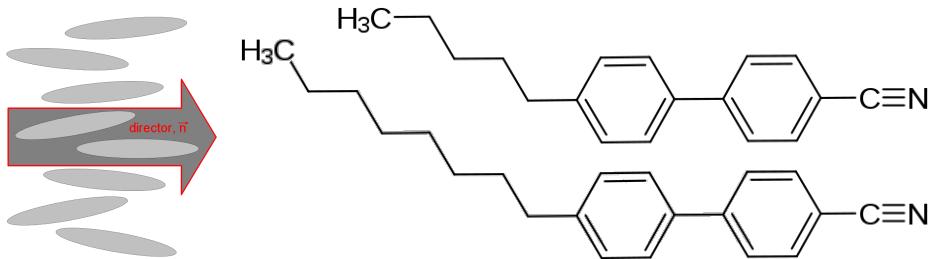
Tekočekristalne mezofaze se med seboj razlikujejo tudi po orientacijskem redu. Prisotnost kiralnih molekul tekočemu kristalu vsili lasten zvoj, tako da se preferenčna smer orientacijskega reda s krajem spreminja. Glede na moč tega zvoja snov tvori kiralno nematsko fazo, kjer je zvoj le v eni smeri, ali modre faze, kjer je zvoj prisoten v vseh smereh. Orientacija molekul v nekaj najpogostejših tekočekristalnih mezofazah je prikazana na sliki 1. Poleg naštetih obstaja še veliko različnih mezofaz z različnim orientacijskim in pozicijskim redom.

2.2 Orientacijski red

V vseh tekočekristalnih mezofazah imajo gradniki orientacijski red dolgega dosega. Definiramo lahko enotski vektor \mathbf{n} , ki določa povprečno smer gradnikov in ga imenujemo direktor. Direktor ni pravi vektor, saj v tekočem kristalu ne ločimo med smerjo \mathbf{n} in $-\mathbf{n}$. Tudi če sami gradniki nimajo takšne simetrije, jo imajo njihove fluktuacije, zato lahko ureditev dobro opišemo z direktorjem[7].



Slika 1: Shematski prikaz treh najpogostejših tekočekristalnih mezofaz: nematic (a), kiralni nematic ali holesterik (b) in smektič (c)[6].



Slika 2: Levo: Gradniki imajo različne orientacije, preferenčno smer pa poda direktor. Desno: Strukturni formuli molekul 5CB (zgoraj) in 8CB (spodaj)[6]

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. Velikosti takšnih molekul so nekaj nanometrov.

Direktor \mathbf{n} podaja povprečno smer gradnikov, ne pa dejanske orientacije posameznih gradnikov. Zato uvedemo še stopnjo reda S (*angl. degree of order*), ki nam pove, koliko smeri molekul v povprečju odstopajo od direktorja. Zaradi simetrije $\mathbf{n} \leftrightarrow -\mathbf{n}$ ne moremo vzeti kar povprečne vrednosti kota med gradnikom in direktorjem, saj je ta vrednost enaka nič. Namesto tega uporabimo povprečni kvadrat kota, ki je ekvivalenten kvadrupolnemu momentu[8]

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

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 tekočekristalno 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 sekundarni direktor. Ker komponente n_i nastopajo le v kvadratu, s takšnim zapisom avtomatsko upoštevamo simetrijo direktorja, saj zamenjava \mathbf{n} z $-\mathbf{n}$ tenzorja Q_{ij} ne spremeni. Ker je \mathbf{n} enotski vektor, je tenzor Q_{ij} brezsleden, zato so v izotropni snovi vse njegove komponente enake 0 in je primeren ureditveni parameter za opis faznih prehodov.

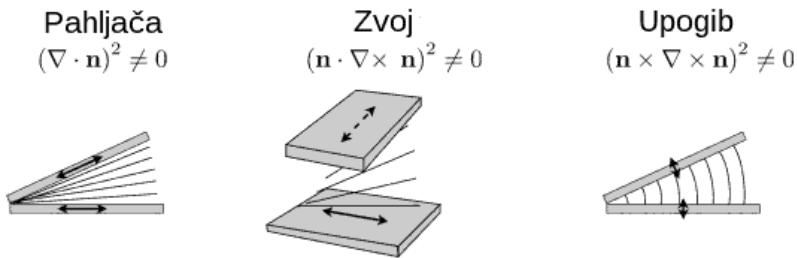
Tenzor ureditvenih parametrov Q_{ij} lahko v vsaki točki predstavimo kot matriko velikosti 3×3 , ki je simetrična in zato diagonalizabilna. V lastnem sistemu direktorja, kjer za osi koordinatnega sistema vzamemo \mathbf{n} , $\mathbf{e}^{(1)}$ in $\mathbf{e}^{(2)}$, lahko matriko zapišemo kot

$$Q = \begin{pmatrix} S & \frac{-S+P}{2} & \frac{-S-P}{2} \\ \frac{-S+P}{2} & S & \frac{-S-P}{2} \\ \frac{-S-P}{2} & \frac{-S-P}{2} & S \end{pmatrix} \quad (3)$$

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

2.3 Deformacije direktorja in prosta energija

Ureditiv tekočega kristala lahko opišemo s tensorskim 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 dve izmed mnogih tekočekratalnih 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 uporabljenih snoveh in optičnem polju zanemarljivi.



Slika 3: Trije načini elastične deformacije direktorja.

Posamezni gradniki imajo največjo svobodo gibanja in s tem največjo entropijo, če je direktor in s tem tudi tezor Q_{ij} uniformen. Krajevno spremenjanje ureditvenega parametra Q_{ij} v katerikoli smeri povzroči, da sistemu prosta energija naraste. To povečanje je odvisno od smeri spremenjanja Q_{ij} glede na smer direktorja. Na sliki 3 so prikazani trije načini deformacije direktorja, s katerimi lahko lokalno opišemo poljubno krajevno odvisnost. Ti trije načini so pahljača (angl. *splay*), zvoj (angl. *twist*) in upogib (angl. *bend*).

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

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

(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

$$f_{\text{el}}^{Ch} = \frac{K_1}{2}(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \frac{K_2}{2}(\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n} - q)^2 + \frac{K_3}{2}(\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2. \quad (5)$$

Razvoj elastične proste energije po krajevnih odvodih direktorja je lažja za predstavo, saj člene lahko povežemo z načini deformacije na sliki 3. Za numerično modeliranje pa je bolj ugodno, če jo izrazimo s komponentami tenzorja Q , ki poleg direktorja vključuje tudi stopnjo reda in dvoosnost[9]. V tej sliki se izraz glasi

$$f_{\text{el}} = \frac{1}{2}L_1 \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k} \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k} + \frac{1}{2}L_2 \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_j} \frac{\partial Q_{ik}}{\partial x_k} + \frac{L_3}{Q_{ij}} \frac{\partial Q_{kl}}{\partial x_i} \frac{\partial Q_{kl}}{\partial x_l} + 2Lq\epsilon_{ikl}Q_{ij} \frac{\partial Q_{lj}}{\partial x_k} \quad (6)$$

kjer je ϵ_{ijk} Levi-Civit'ajev popolnoma antisimetrični tenzor tretjega reda.

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

$$f_L = \frac{1}{2}a(T - T^*)Q_{ij}Q_{ji} + \frac{1}{3}BQ_{ij}Q_{jk}Q_{ki} + \frac{1}{4}C(Q_{ij}Q_{ji})^2, \quad (7)$$

kjer je T temperatura, T^* najnižja možna temperatura podhlajene izotropne faze, a , B in C pa členi Landauovega razvoja in so odvisni od snovi. Ker sta konstanti a in C pozitivni, je pri temperaturi nad T^* najugodnejše stanje $Q_{ij} = 0$ oz. $S = 0$, kar ustrezha 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

$$f_{\text{EM}} = -\frac{1}{2}\epsilon_0 \left(\bar{\epsilon}E_i E_i + \frac{2}{3}\epsilon_a^{\text{mol}}Q_{ij}E_i E_j \right), \quad (8)$$

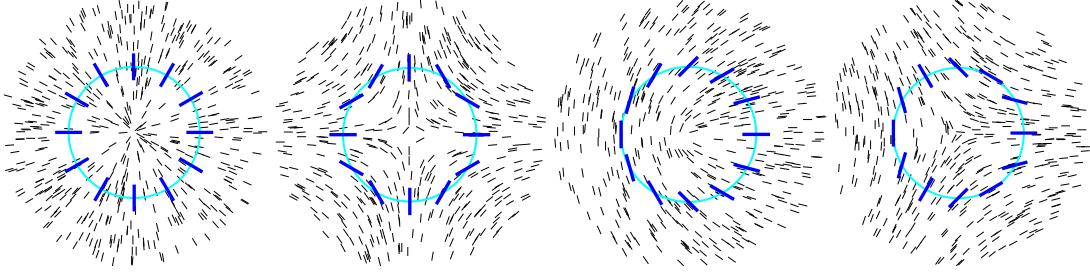
kjer je $\bar{\epsilon}$ povprečna dielektrična konstanta, $\epsilon_a^{\text{mol}} = \epsilon_{||}^{\text{mol}} - \epsilon_{\perp}^{\text{mol}}$ dielektrična anizotropija posamezne molekule, E_i pa zunanje električno polje. Če na tekoči kristal svetimo, ureditev molekul ne more slediti hitremu spremjanju 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.

2.4 Defekti

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[7]. Pod vplivom ograjenosti ali zunanjega polja pa lahko pride do stanja, kjer zvezno direktorsko polje ne more zadostiti robnim pogojem. V tem primeru se pojavi območja z nedifiniranim direktorjem. Takšnim območjem, kjer orientacijski red ne drži, pravimo defekti.

V treh dimenzijah lahko obstajajo točkasti in linijiški defekti[2, 8]. V vlaknih nastopajo le linijiški defekti, zato se bomo posvetili zlasti tistim. Linijiški defekti so lažji za razvrščanje, saj se lahko omejimo na ravnino, pravokotno na linijo, in problem prevedemo na dve dimenziji. V tem primeru lahko linijiški 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.



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 (*angl. winding number*) oz. moč defekta kot

$$s = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left(\frac{d\theta}{d\phi} \right) d\phi \quad (9)$$

kjer kot θ opisuje smer direktorja, ϕ pa položaj na 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 $-\mathbf{n}$ predstavlja enak red. Zato je možno, da pri obkroženju defekta direktor naredi le pol obrata, topološki naboj s pa je zato lahko tudi polcelo število.

Vsi defekti z enakim ovojnim številom so si topološko ekvivalentni, saj lahko enega zvezno transformiramo v drugega. Zato moči defekta pravimo tudi topološka invarianta oz. topološki naboji. Defekti se lahko združujejo in pretvarjajo eden v drugega, skupen topološki naboj pa se ohranja. Dva defekti z nasprotnim nabojem se lahko izničita, defekt z večjim nabojem pa se lahko razcepi na dva defekta z manjšim nabojem. Pri tem velja omejitev, da je naboj vsakega defekta lahko le polcelo število.

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

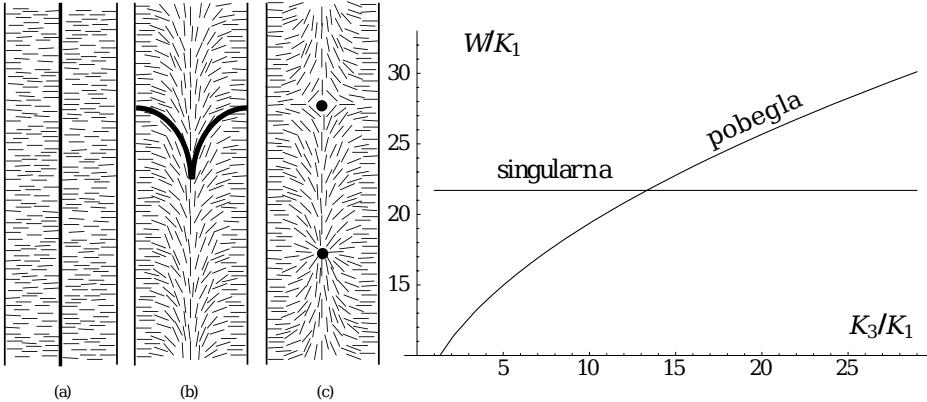
$$\frac{F_d}{L} = \frac{K}{2} \int_{r_{min}}^{r_{max}} \frac{k^2}{r^2} 2\pi r dr = K s^2 \pi \ln \frac{r_{max}}{r_{min}} \quad (10)$$

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

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

2.5 Direktor v cilindrični kapilarji

Nematski tekoči kristal se spontano uredi tako, da minimizira prosto energijo. V odsotnosti zunanjega polja je prosta energija najnižja, če ni elastičnih deformacij, torej je direktor uniformen.



Slika 5: Levo: Prerezi valja s singularno (a) in nesingularno pobeglo disklinacijo (b). Različne smeri pobjega povzročijo nastanek točkastih singularnosti (c). Desno: Energija singularne in pobegle konfiguracije v odvisnosti od razmerja med elastičnima kostantama K_1 in K_3 [8].

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 5.

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 pobjega 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[8]

$$\mathbf{n} = (n_r, n_\phi, n_z) = (\cos \chi(r), 0, \sin \chi(r)) \quad (11)$$

$$\chi(r) = 2 \arctan \frac{R - r}{R + r} \quad (12)$$

kjer je R polmer valja. Takšen profil je prikazan na sliki 5b. V primeru pobjega v tretjo dimenzijo je direktor povsod dobro definiran. Če pa do pobjega ne pride, je tik ob osi valja defekt območje zmanjšanega reda, kjer ureditveni parameter S pada na 0. Okrog defekta je direktorsko polje radialno, torej je linijski defekt z ovojnim številom $s = +1$.

V večini nematikov so vse tri elastične konstante istega velikostnega reda, zato je stanje s pobegom v tretjo dimenzijo bolj ugodno. Veliko razmerje K_3/K_1 pa opazimo blizu faznega prehoda v smektično fazo. Z uporabo 8CB, ki tvori tako nematsko kot tudi smektično fazo, je mogoče v laboratoriju sintetizirati vlakna z radialnim profilom direktorja[10]. Primer tvorbe takšnih vlaken je na sliki 6.

3 Elektromagnetno valovanje

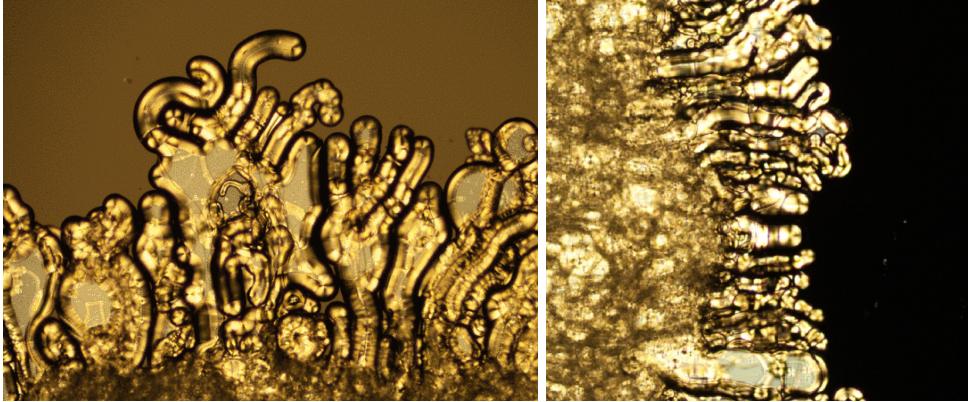
3.1 Maxwellove enačbe v neizotropnem sredstvu

Širjenje svetlobe po snovi opisujejo štiri Maxwellove enačbe

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{D} &= \rho_f & \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} & \nabla \times \mathbf{H} &= \mathbf{J}_f + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \end{aligned} \quad (13)$$

kjer veljata zvezi $\mathbf{D} = \epsilon \epsilon_0 \mathbf{E}$ 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



Slika 6: Rast vlaken z radialnim direktorjem na meji med tekočim kristalom 8CB in vodo[10]

nabojev v vzorcu ni. Z upoštevanjem zgornjih predpostavk lahko Maxwellove enačbe zapišemo v poenostavljeni obliki

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{E} &= 0 & \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} & \nabla \times \mathbf{B} &= \sigma \mathbf{E} + \epsilon \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \end{aligned} \quad (14)$$

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. 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[?, 11]. 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

$$D_i = \epsilon_0 \epsilon_{ij} E_j \quad (15)$$

Hitrost svetlobe v takšni snovi je enaka

$$c = \sqrt{\frac{1}{\epsilon_{\text{eff}} \epsilon_0 \mu_0}} = \frac{c_0}{\sqrt{\epsilon_{\text{eff}}}} = c_0 \sqrt{\frac{E_i E_i}{E_i \epsilon_{ij} E_j}} \quad (16)$$

in je odvisna od smeri električnega polja.

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

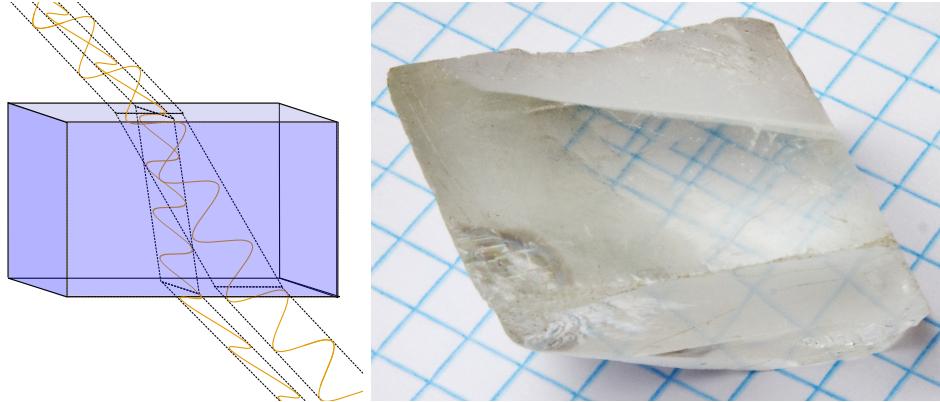
$$\epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon_{\perp} & & \\ & \epsilon_{\perp} & \\ & & \epsilon_{\parallel} \end{pmatrix} \quad (17)$$

Tu je ϵ_{\parallel} lastna vrednost, ki ustrezajo polarizaciji svetlobe, vzporedni z optično osjo. Tej polarizaciji pravimo izredna (*angl. extraordinary*), ustrezne moramo 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

$$\Delta n = n_e - n_o , \quad (18)$$

ki je lahko pozitivna ali negativna.



Slika 7: Levo: Prehod svetlobnih žarkov z različnimi polarizacijama skozi dvolomno snov. Zaradi različnih polarizacij se žarka različno lomita. Desno: Pogled skozi dvolomni kristal kalcita. Vidni sta dve sliki vzorca pod kristalom. [11]

Enako kot dielektričnost ϵ lahko tudi anizotropna magnetna permeabilnost μ povzroči dvolomnost. Pri optičnih frekvencah je magnetna anizotropija večine snovi zanemarljiva, je dovolj obravnavati le električno.

3.3 Defekti v polarizaciji svetlobe

Električno in magnetno polje sta prava vektorja, zato imata lahko le defekte s celoštevilskim ovojnim številom. 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 8.

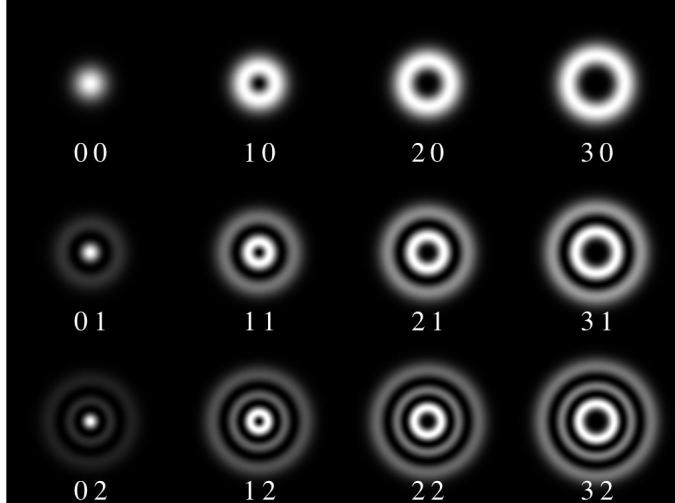
V optičnih poljih je nihanje električnega in magnetnega polja tako hitro, da z nobeno merilno napravo ne moremo izmeriti samega polja, ampak le njegovo časovno povprečje. Med polarizacijo svetlobe \mathbf{P} in $-\mathbf{P}$ je razlika zgolj v fazi, zato ju lahko obravnavamo kot enaki. V tem smislu je 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.

4 Sklopitev tekočega kristala s svetlobo

4.1 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, 13]

$$\epsilon_{ij} = \bar{\epsilon} + (\epsilon_a)_{ij} = \bar{\epsilon} + \frac{2}{3} \epsilon_a^{\text{mol}} Q_{ij} \quad (19)$$



Slika 8: Nekaj osnovnih Laguerre-Gaussovih načinov. Temne pege v notranjosti snopov predstavljajo defekte v polarizaciji svetlobe. [12]

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

Če primerjamo enačbi (8) in (19) opazimo dvosmerno povezavo med ureditvijo tekočega kristala in elektromagnetnim poljem. Zaradi dielektrične sklopite svetlobe vpliva na ureditev tekočega kristala, zaradi optične anizotropije pa tekoči kristal vpliva na širjenje svetlobe po njem. Računske 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 poenostavitev 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 periodom 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[13]. 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.

4.2 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, opisana v poglavju 4.1. Podobno so med seboj povezani tudi defekti.

5 Numerična metoda

Za samo računanje sem implementiral metodo končnih differenc v časovni domeni (*angl. Finite-difference time-domain – FDTD*)[14]. Pri tej metodi časovno propagiramo električno in magnetno polje v vsaki točki po Maxwellovih enačbah.

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

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

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E}, \quad \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \varepsilon^{-1}(\nabla \times \mathbf{B} - \sigma \mathbf{E}). \quad (20)$$

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

$$\frac{\partial y}{\partial x} \rightarrow \frac{y(x + \delta) - y(x)}{\delta} \quad (21)$$

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

Pri računih sem upošteval le dielektrično anizotropijo tekočega kristala, magnetno pa zanemaril. Zaradi simetrije Maxwellovih enačb bi na enak način kot dielektričnost ε lahko upošteval tudi magnetno permeabilnost μ . Podobno bi lahko poleg električne prevodnosti σ upošteval magnetne izgube σ^* .

5.1 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[14].

Običajne implementacije metode FDTD gredo še korak dlje, tako da so tudi posamezne komponente električnega in magnetnega polja definirane na različnih točkah[15, 16]. 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, 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.

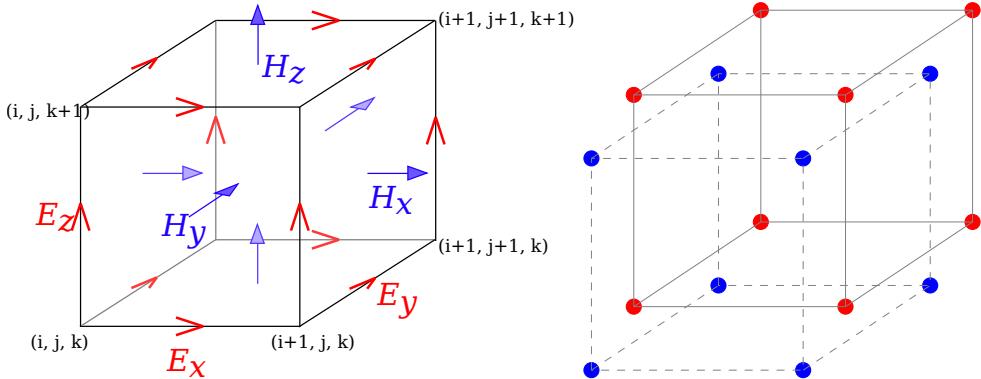
V tekočih kristalih je dielektrični tenzor anizotropen in se močno spreminja s krajem. Zaradi krajevnega spremicanja ne moremo tako obrniti koordinatnega sistema, da bi bil tenzor diagonalen v vseh točkah. Poleg tega obstoječi programi za modeliranje ureditve tekočih kristalov podajo vse komponente dielektričnega tenzorja na istem mestu[13]. 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 9.

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 9), vendar ob času, ko je podan \mathbf{B} .

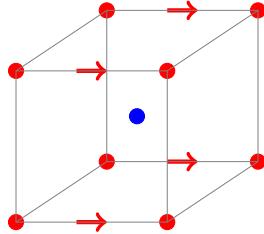
5.2 Enačbe

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 10.

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 tistem, ki bi ga potrebovali z uporabo Yeejeve mreže.



Slika 9: Levo: Yeejeva celica, pri kateri so komponente električnega polja znane na razpoloviščih robov konce, komponente magnetnega polja pa v središčih ploskev[16]. 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.



Slika 10: 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.

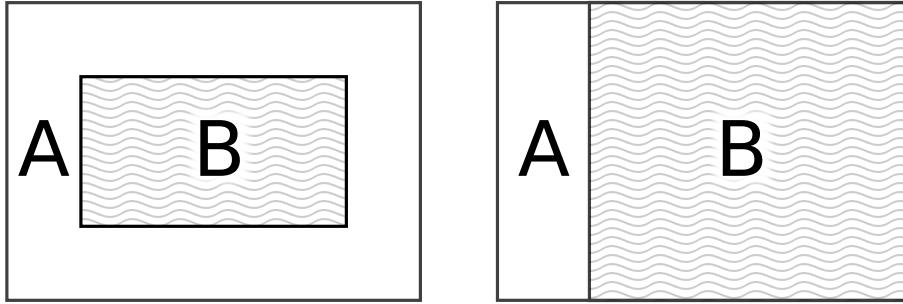
5.3 Izvor valovanja

V enačbah (20) ne nastopajo izvori valovanja, zato jih moramo moramo modelirati z robnimi pogoji. To je v skladu z eksperimenti, saj svetloba pride od zunaj, zanima pa nas predvsem njeno širjenje skozi snov.

Poljubno vpadno valovanje lahko modeliramo z robnimi pogoji, če izkoristimo linearnost Maxwellovih enačb. Električno in magnetno polje lahko namreč razcepimo na vsoto vpadnega in sisanega valovanja[14]. 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 zunanjem pa polje razcepimo in shranjujemo le sipani del. Optično anizotropna snov mora biti v celoti v notranjem območju, izvor valovanja modeliramo na prehodu med območjem.

Delitev na notranje in zunanje območje je učinkovita, če se efektivni lomni količnik v notranem območju ne razlikuje močno od zunanjega. V tem primeru je fazna razlika na zadnji stranici notrenjega območja dovolj majhna, da pretvorba na 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 tekočekristalnem 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 11, 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 \mathbf{A} pretirana zaradi preglednosti. V vseh primerih je bila debelina območja \mathbf{A} enaka dva koraka mreže.



Slika 11: 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.

5.4 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*) [14, 17].

Material v plasti PML zagotavlja eksponentno pojemanje vpadnega vala, neodvisno od njegove frekvence in smeri širjenja. Absorpциjo 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 $\sigma/\sigma^* = \epsilon_1/\mu_1$, kjer sta ϵ_1 in μ_1 dielektričnost in magnetna permeabilnost v notranosti. To ujemanje izgub odpravi odboj na meji le za valovanje, ki vpada pravokotno na mejo. Odboj valovanja pod poljubnim kotom preprečimo, če vsako komponento električnega in magnetnega polja razdelimo na dva prispevka. Tak material je nefizikalnen, saj imamo dodatne prostostne stopnje, polje pa ne sledi več Maxwellovim enačbam.

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

$$\epsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma E_x = \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z}. \quad (22)$$

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

$$\epsilon \frac{\partial E_{xy}}{\partial t} + \sigma_y E_{xy} = \frac{\partial}{\partial y} (H_{zx} + H_{zy}) \quad (23)$$

$$\epsilon \frac{\partial E_{xz}}{\partial t} + \sigma_z E_{xz} = - \frac{\partial}{\partial z} (H_{yx} + H_{yz}), \quad (24)$$

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

5.5 Opis valovoda

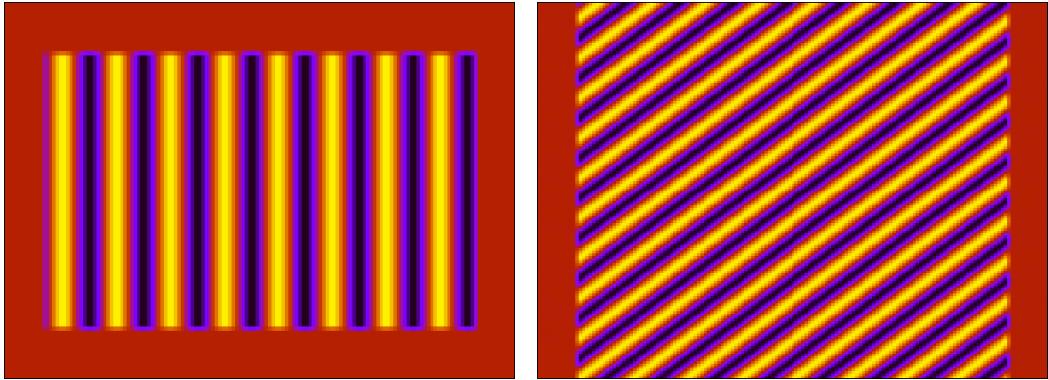
6 Preverjanje metode

(TODO: Test z dejasnkim profilom, ki ga imajo v optičnih vodnikih)

6.1 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 12 potrjuje pravilnost metode, saj res vidimo ravne valove s konstantno frekvenco in valovno dolžino.



Slika 12: 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 valovanje in rob, kjer valovanja ni. To je posledica modeliranja izvora valovanja okrog in okrog celice, kot je prikazano na levi strani slike 11. Valovanje se širi od leve proti desni, tako si lahko predstavljam izvir valovanja ne levi strani in ponor na desni. Dejstvo, da ponor valovanja na desni strani uspešno pobere celotno valovanje potrjuje natančnost računanja.

6.2 Lom in odboj

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

$$\frac{\sin \alpha}{\sin \beta} = \frac{n_2}{n_1} = \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}}, \quad (25)$$

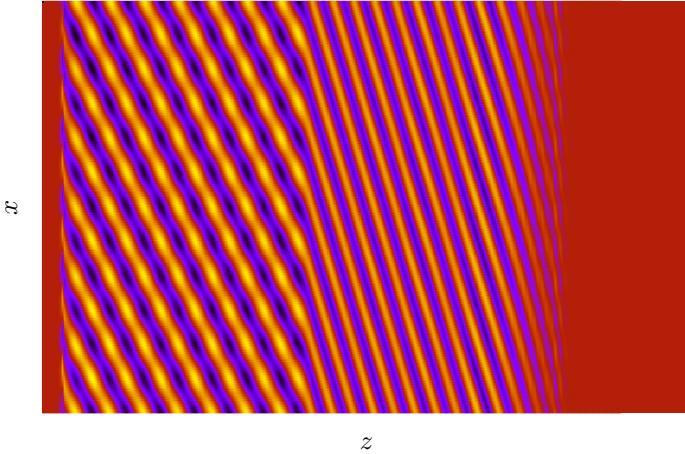
kjer je α vpadni kot valovanja, β pa lomni kot oz. kot med pravokotnico in smerjo širjenja lomljenega vala.

Deleža odbitega in prepuščenega valovanja sta odvisna od vpadnega kota α in polarizacije svetlobe[18]. Pri določenem kotu α se komponenta svetlobe s polarizacijo v ravni žarka in normale na površino ne odbije in se v celoti lomi. Tamu kotu rečemo Brewsterjev kot in je enak

$$\theta_B = \arctan \left(\frac{n_2}{n_1} \right) = \arctan \sqrt{\frac{n_2}{n_1}} \quad (26)$$

Če propagacijo svetlobe simuliramo z metodo FDTD, v sliki trenutnega električnega polja ne moremo ločiti med vpadnim in odbitim valovanjem. Za prikaz delovanja sem zato uporabil vpadni kot, ki je zelo blizu Brewsterjevemu. Na ta način opazimo le šibko odbito valovanje, tako da lahko še vedno preverimo, ali lomni zakon drži. Slika električnega polja ob prehodu meje v bližini Brewsterjevega kota je na sliki 13.

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



Slika 13: Preizkus veljavnosti lomnega zakona ob prehodu valovanja v medij z drugačnim lomnim količnikom

ε_1 , kjer je superpozicija vpadnega in odbitega valovanja. Odbito valovanje je mnogo šibkejše od vpadnega, zato so valovi skoraj ravni. Na sredini slike je meja med območjem, desno od nje je snov z dielektričnostjo $\varepsilon_2 > \varepsilon_1$. V tem delu je le prepuščeno lomljeno valovanje, ki ima ustrezno manjšo valovno dolžino. Na desnem robu je prazno območje, ki ga valovanje še ni doseglo.

Veljavnost lomnega zakona lahko preverimo, če primerjamo kota vpadnega in lomljenega valovanja. Dolžini stranic na sliki nista v enakem merilu, zato kotov ne moremo odčitati s slike.

(**TODO:** Simuliraj lom na novo, izracunaj oba kota)

6.3 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.

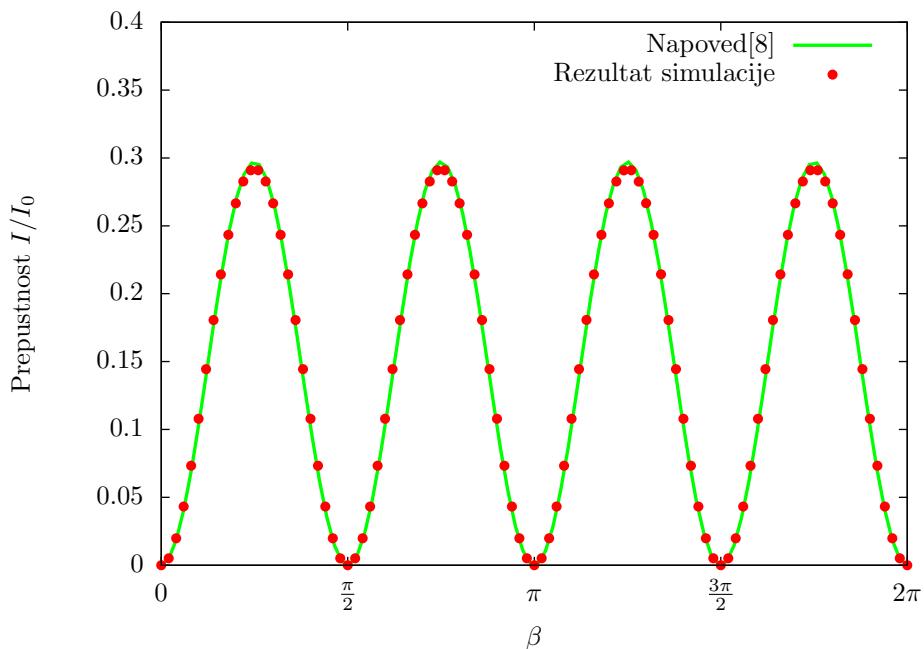
Ta preizkus temelji na najpogosteje uporabljeni metodi za eksperimentalno opazivanje tekočih kristalov. Tanko plast tekočega kristala postavimo med dva prekrižana polarizatorja. Če je med polarizatorjema optično izotropna snov, ali pa je optična os vzporedna z enim izmed polarizatorjev, sistem ne prepušča svetlobe. V ostalih primerih pa vidimo nekaj prepuščene svetlobe, 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 intenzitetu prepuščene svetlobe izpeljemo analitično[8]. Enaka je

$$I = I_0 \sin^2 2\beta \sin^2 \left[\frac{\pi d}{\lambda_0} \left(\frac{n_o n_e}{\sqrt{n_e^2 \cos^2 \theta + n_o^2 \sin^2 \theta}} - n_o \right) \right], \quad (27)$$

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 14. (**TODO: vnesi parametre v graf**)

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

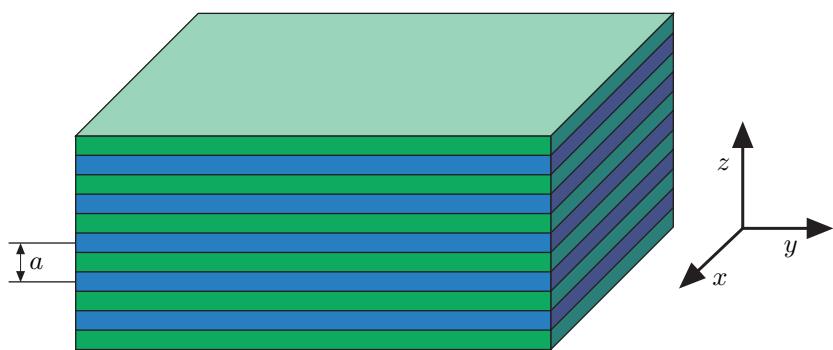


Slika 14: Rezultati preizkusa z uniformnim in anizotropnim dielektričnim tenzorjem

6.4 Periodična modulacija

Pri periodični modulaciji lomnega količnika opazimo pojav, da se svetloba določenih frekvenc ne more širiti po mediju[19]. 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 μm .

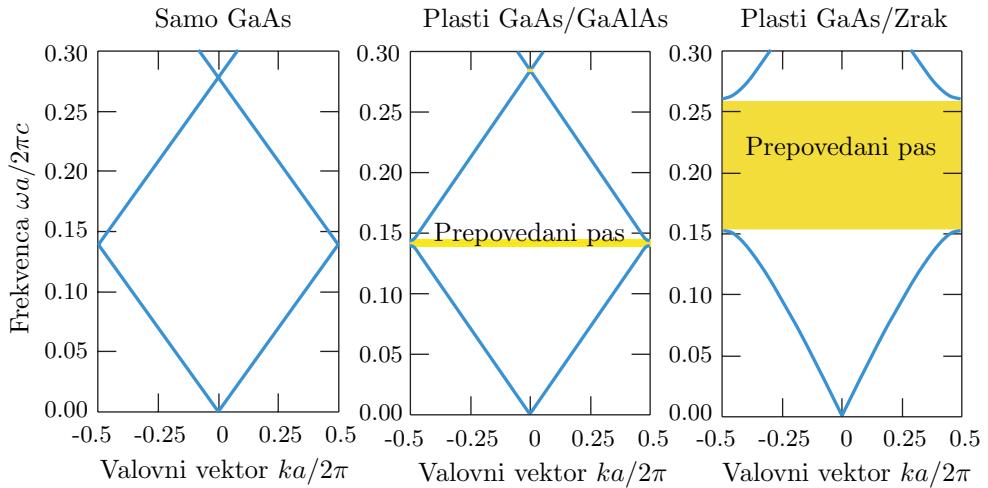
Širina in oblika prepovedanega pasu sta odvisni od obeh lomnih količnikov, periode modulacije in velikosti kristala. Za preverjanje metode sem modeliral kristal, kjer se izmenjujejo plasti z izotropno dielektričnostjo ε_1 in ε_2 . Takšna struktura je prikazana na sliki 15.



Slika 15: Periodična struktura, kjer se izmenjujeta plasti z različima dielektričnima konstantama. Svetloba se širi v smeri osi z [19].

Teoretičen izračun odvisnosti frekvence ω od valovnega vektorj k je prikazan na sliki 16. 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.

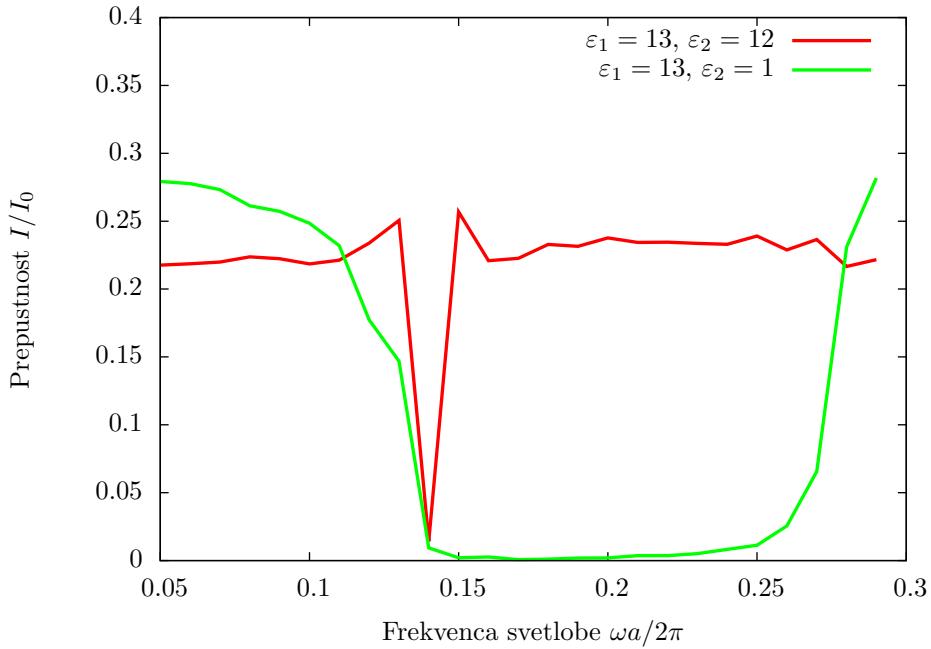
Po napovedi naj bi bila spodnja meja prepovedani pasu okrog $\frac{\omega a}{2\pi c} \approx 0,15$, kjer je a perioda



Slika 16: Pojav energijske reže v fotonskem kristalu. Levo: celotna plast ima dielektričnost $\epsilon = 13$. Sredina: Izmenjevanje plasti z dielektričnima konstantama 13 in 12. Desno: Izmenjevanje plasti z dielektričnima konstantama 13 in 1. [19]

kristala, c pa hitrost svetlobe. Zgornja meja je močneje odvisna od razlike v dielektričnosti[19].

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 17.



Slika 17: Rezultati preizkusa s periodično modulacijo lomnega količnika

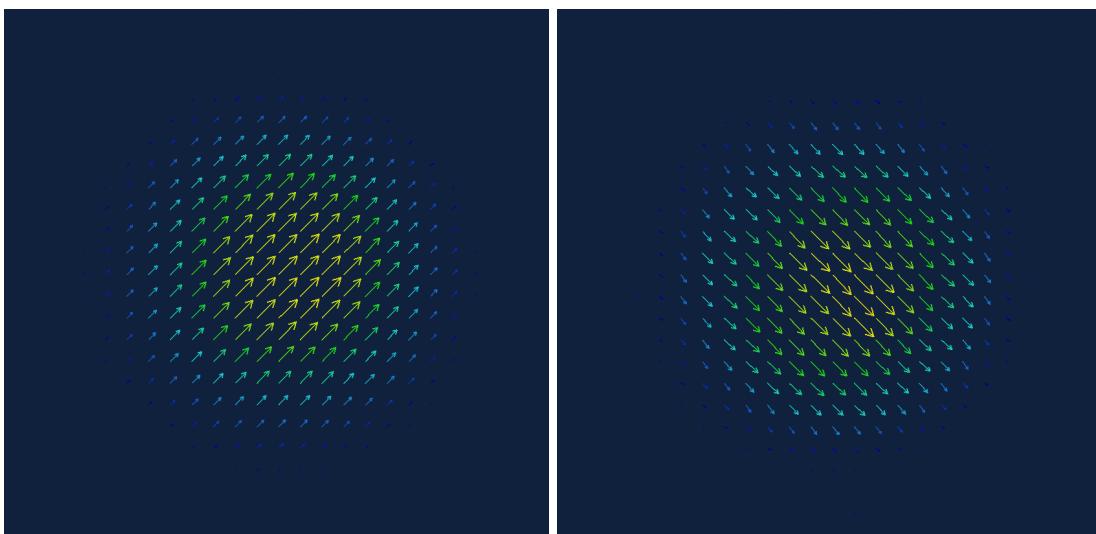
Na sliki res opazimo oster padec prepustnosti v določenem frekvenčnem pasu, ki se dobro ujema s pričakovanim na sliki 16. Metoda torej pravilno napove položaj in širino prepovedanih pasov. Zlasti pri veliki razlike v dielektričnosti plasti meja prepovedanega pasu ni ostra, ampak krivulja postane zaobljena. 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.

6.5 Dvolomno vlakno

V magistrskem delu sem preučeval širjenje svetlobe po cilindričnih vlaknih z različnimi profili direktorja. Računsko metodo sem preizkusil na sistemu, ki je čim bolj podoben obravnavanim, še vedno pa lahko napovemo rezultat. V ta namen sem modeliral cilindrično vlakno, v katerem je uniformen dvolomen kristal, vanj pa sem posvetim s kratkim laserskim sunkom. Polarizacija vpadne svetlobe je bila nagnjena za 45° glede na optično os, tako da se je vpadni žarek razcepil na redno in izredno komponento. Zaradi dvolomnosti obe komponenti potujeta z različnima hitrostma, tako da se laserski žarek razdeli na dva dela. Direktorsko polje je regularno, brez defektov, zato ne pričakujemo defektov v polarizaciji svetlobe.

Simuliral sem zelo kratek laserski pulz, ki je trajal le nekaj valovnih dolžin svetlobe. Na ta način sta se obe komponenti znotraj vlakna jasno ločili in sem ju lahko primerjal. Ker se sunek hitro razcepi je takšen postopek primeren za iskanje lastnih načinov širjenja po valovodih[14].



Slika 18: Lastna načina širjenja svetlobe skozi vlakno z uniformnim profilom direktorja. Vpadna svetloba je polarizirana vodoravno, optična os pa z vodoravnico oklepa kot 45° .

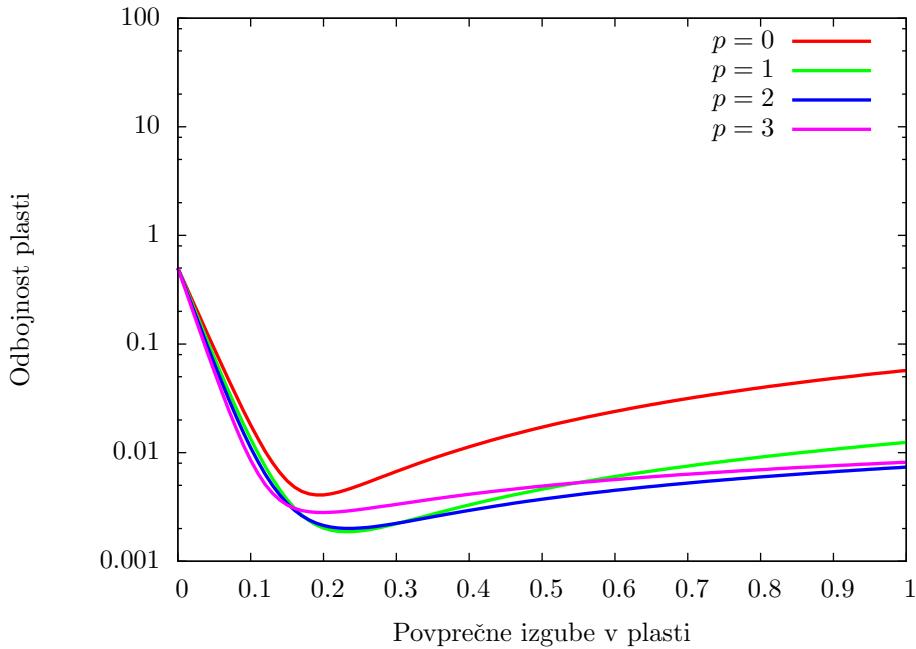
Rezultati na sliki 18 potrjujejo pravilno delovanje metode. Vpadna svetloba se razcepi na komponenti z redno in izredno polarizacijo, ki se širita z različnima hitrostma. Redna komponenta, prikazana na levi sliki, občuti manjši lomni količnik in je zato hitrejša.

6.6 Robni pogoji

Za preprečevanje odbaja na stranskih ploskvah sem uporabil absorbirajoče robne pogoje. Plast PML nam omogoča, da imamo material s poljubno velikimi izgubami, pa vseeno ne dobimo odbaja 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 ostri meji in izgube zvezno naraščajo od notranjosti proti robu. V literaturi[14] 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 19.

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



Slika 19: 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)

pade. 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 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.

7 Rezultati

7.1 Radialni profil direktorja

Tekočekristalna vlakna, pridobljena v laboratoriju, imajo radialen direktorski profile. Najprej sem ugotavljal, kako defekt v sredici vlakna vpliva na širjenje svetlobe.

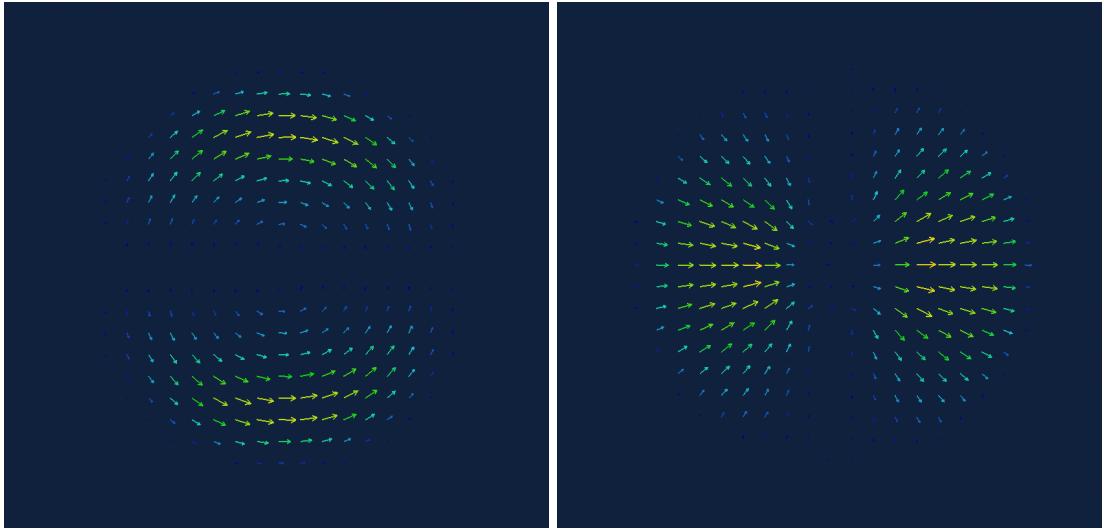
Vrednosti parametrov, ki sem jih uporabil pri simulaciji, so našteti v tabeli 1.

Valovna dolžina svetlobe	480 nm
Premer vlakna	3 μm
Enota diskretizacije	40 nm
Redni lomni količnik v vlaknu	1,52
Izredni lomni količnik v vlaknu	1,68
Lomni količni okoliške snovi	1,33

Tabela 1: Materialni parametri, uporabljeni pri izračunih

Podobno kot pri preizkušanju z uniformnim direktorjem sem najprej v vlakno poslal zelo kratek laserski sunek. Zaradi dvolomnosti tekočega kristala sem spet opazil razcep sunka na dve komponenti oz. dva lastna načina širjenja svetlobe. Ker pa je direktorsko polje singularno, sta tudi polarizaciji obeh načinov singularni, kot prikazuje slika 20.

Slike takoj opazimo podobnost med polarizacijo svetlobe, zlasti pri počasnejšem nihajnjem načinu (slika 20 desno), in direktorskim poljem. Če na polarizacijo gledamo kot na vektor brez



Slika 20: Lastna načina širjenja svetlobe skozi vlakno z radialnim profilom direktorja ($s = +1$)

puščice, lahko z enačbo (9) obema načinoma priredimo ovojno število $+1$. Dodatno pa imata oba načina še zrcalno ravnino, kjer se polarizacija svetlobe obrne. V enem izmed načinov je ta ravnina navpična, v drugem pa vodoravna. Če polarizacijo svetlobe na eni strani te ravnine obrnemo, dobimo pravi linijski defekt moči $+1$.

Direktorsko polje znotraj vlakna ima radialno simetrijo, saj se ne spremeni če vlakno vrtimo okrog svoje osi. To simetrijo pa zlomi vpadna svetloba, ki uvede preferenčno smer, in sicer smer polarizacije. Po dolgem času v vlaknu mora svetlobni žarek zadostiti obem simetrijam. Oba načina na sliki 20 si lahko predstavljamo kot defekta z ovojnim številom $+1$, ki jim odstranimo vse tiste dele, kjer bi polarizacija moralna kazati pravokotno na vpadno polarizacijo.

7.2 Hiperbolični profil direktorja

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

Radialni direktorski profil znotraj vlakna opazimo eksperimentalno, ker površinsko aktivna snov na robu vlakna vsiljuje pravokotno smer direktorja. Drugačnih direktorskih polj, na primer takšnega s hiperboličnim defektom, pa ne moremo ustvariti samo z izbiro robnih pogojev.

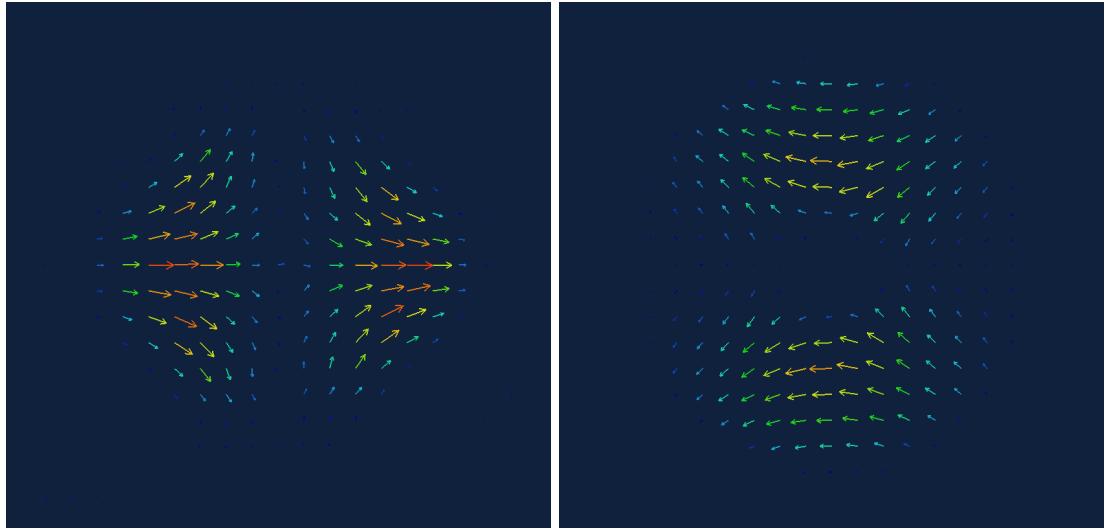
Kratek laserski sunek se podobno kot pri radialnem profilu razdeli na dva načina, ki sta skladna s simetrijo direktorja. Oba načina sta prikazana na sliki 21.

Območja z višjo intenziteto svetlobe so razporejena enako kot na sliki 20, polarizacijo svetlobe pa tvori defekt z ovojnim številom -1 . Spet sta vidni ravnini brez svetlobe, kjer se smer polarizacije obrne.

7.3 Defekti z necelo močjo

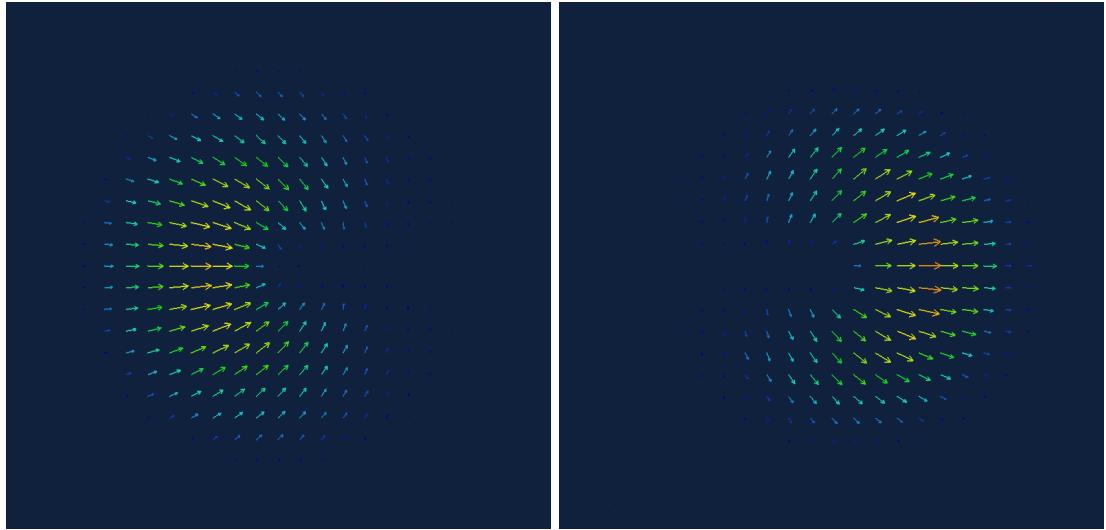
Videli smo, da radialni in hiperbolični profil direktorja znotraj tekočekristalnega vlakna vsili svojo simetrijo svetlobi. Na mestih, kjer ta simetrija ni kompatibilna s polarizacijo vpadne svetlobe, svetlobe ni. V obeh primerih bi lahko z obratom polarizacije na delu vlakna dosegli, da polarizacija svetlobe tvori defekt s celoštivilsko 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. Simuliral sem



Slika 21: Lastna načina širjenja svetlobe skozi vlakno s hiperboličnim profilom direkторja ($s = -1$)

širjenje svetlobe skozi tekočekristalno vlakno, ki ima v osi linijski defekt z ovojnim številom $s \pm 1/2$. Izkazalo se je, da se tudi v tem primeru laserski sunek razcepi na dva dela, ki ustreza redni in izredni polarizaciji.



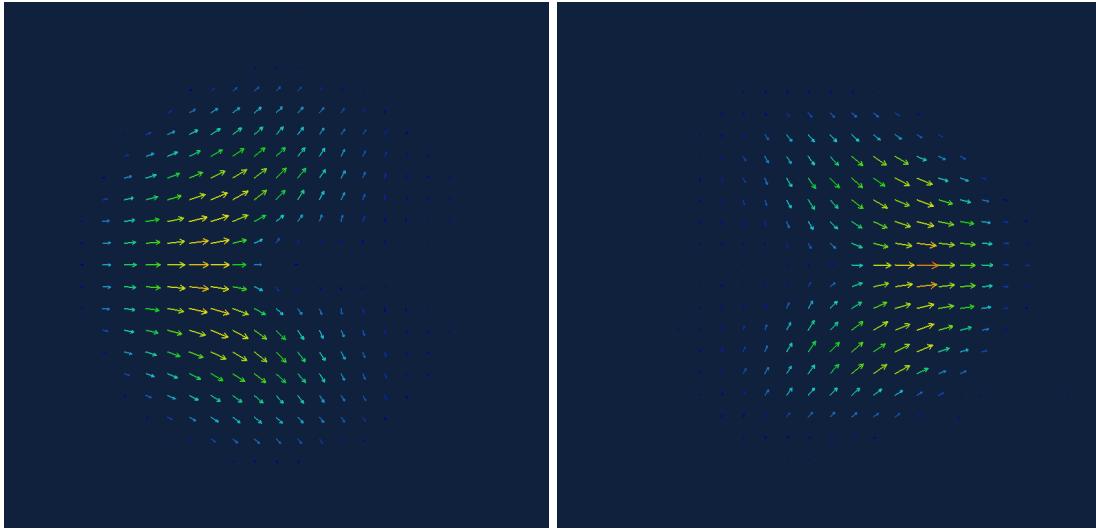
Slika 22: Lastna načina širjenja svetlobe skozi vlakno z defektom z necelim ovojnim številom $s = +1/2$

V nasprotju z radialnim in hiperboličnim profilom pri propagaciji svetlobe skozi defekte z celo močjo ne opazimo ravnin brez svetlobe. Znotraj vsakega lastnega načina je le eno intenzitetno območje.

7.4 Splošne zakonitosti

Na podlagi vseh zgorjih opažanj lahko najdemo podobnosti in izpeljemo splošne zakonitosti.

- Pulz linearne polarizirane svetlobe se vedno razdeli na dva lastna načina, ki ustreza redni in izredni polarizaciji.



Slika 23: Lastna načina širjenja svetlobe skozi vlakno z defektom z necelim ovojnim številom $s = -1/2$

- Polarizacija svetlobe v obeh načinih tvori defekt z enakim ovojnim številom kot defekt v tekočem kristalu.
- V enem izmed načinov je polarizacija svetlobe vzporedna z direktorjem, v drugem pa je nanj pravokotna.
- V območjih, kjer bi po prejšnjem pravilu morala biti svetloba polarizirana pravokotna na vpadno polarizacijo, svetlobe ni.

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

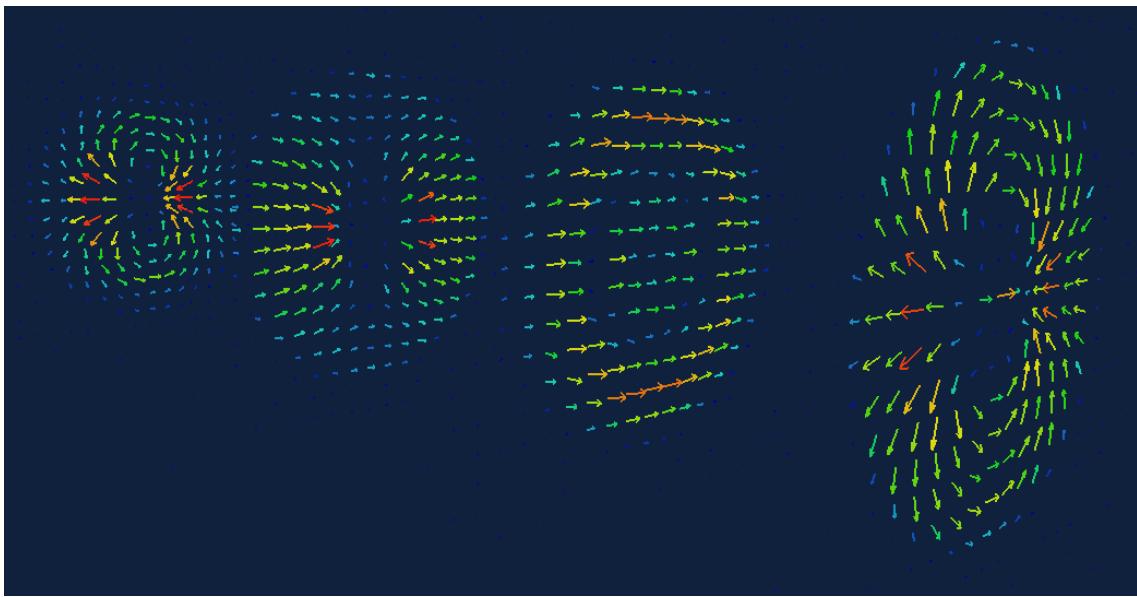
7.5 Stalna laserska svetloba

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

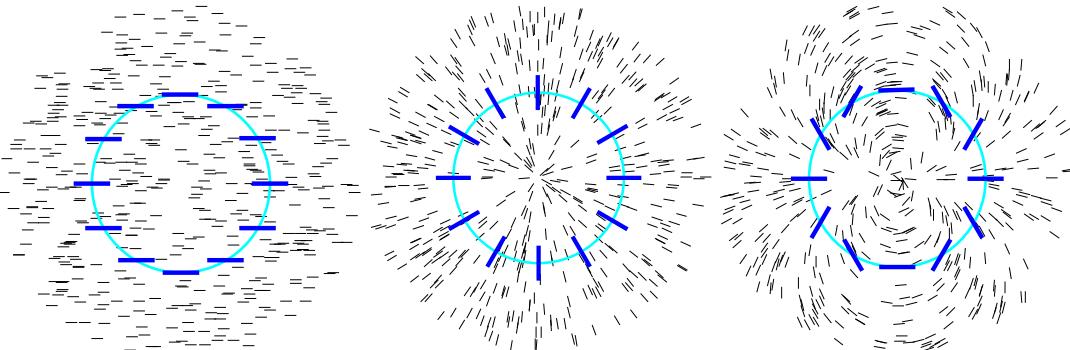
Pri enakomerneh laserskem žarku je svetloba v vlaknu kombinacija obeh lastnih načinov, ki se seštejeta z različnima hitrostma. Frekvenca svetlobe je nespremenjena in zato enaka po celotnem vlaknu, opazimo pa močno krajevno odvisnost oblike polja. Trenutne slike električnega polja znotraj vsakna so prikazane na sliki 24.

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 obo valovna načina seštejeta, na drugih pa odštejeta. Rezultati nakazujejo, da se podobno zgodi tudi z defektom v polarizaciji svetlobe. Na prvem in zadnjem preseku na sliki 24 lahko vidimo defekt moči $s = 2$, ki pa ni točkast, ampak razпадa na dva defekta moči $s = 1$. Na drugi sliki z desne je vidna uniformna konfiguracija električnega polja brez defektov. Vmes, kot na primer na tretji sliki z desne, pa opazimo vmesno stanje. Konfiguracija ustreza defektu z ovojnim številom $+1$, kjer zaradi nekompatibilnosti s smerjo polarizacija manjka del, kjer bi moralo biti polje v smeri y . Presek polja je zelo podoben lastnemu načinu vlakna, prikazanemu na desni strani slike 20.

Podobne obnašanje opazimo tudi v vlakni s hiperboličnim direktorskim profilom, ki ima v osi defekt z ovojnim številom -1 . V tem primeru polarizacija svetlobe prehaja med načinoma z ovojnim številom 0 in -2 , spet pa so opazna tudi vmesna stanja z ovojnim številom -1 . Primer svetlobnega polja v takšnem vlaknu je na sliki 26

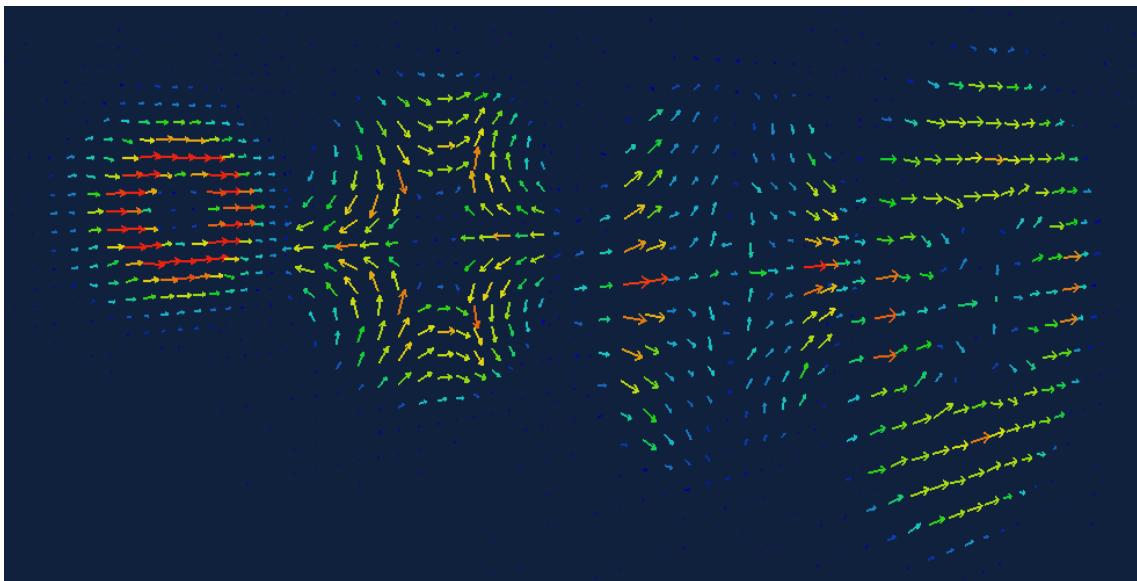


Slika 24: Posnetki električnega polja na različnih mestih znotraj vlakna z radialnim direktorskim profilom ob stalni osvetlitvi. Vidno je izmenjevanje konfiguracij z ovojnima številoma $s = 0$ in $s = +2$.

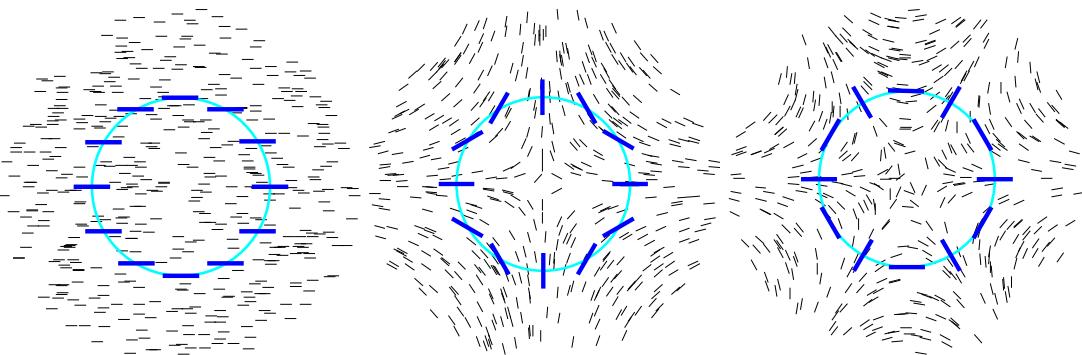


Slika 25: Shematski prikaz defektov z ovojnimi števili (od leve proti desni) 0, +1 in +2.

8 Zaključek



Slika 26: Posnetki električnega polja na različnih mestih znotraj vlakna s hiperboličnim direktorskim profilom ob stalni osvetlitvi. Vidno je izmenjevanje konfiguracij z ovojnima številoma $s = 0$ in $s = -2$.



Slika 27: Shematski prikaz defektov z ovojnimi števili (od leve proti desni) 0, -1 in -2 .

9 Literatura

- [1] M. Rüetschi, 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] https://en.wikipedia.org/wiki/Liquid_crystal (Na spletu; dostopano 19. 11. 2012).
- [7] N. D. Mermin, Rev. Mod. Phys **51**, 591–648 (1979).
- [8] D. Kleman in O. D. Lavrentovich, *Soft Matter Physics: An Introduction*. Springer (2003).
- [9] Simon Čopar, *Topologija in geometrija defektov v ograjenem nematiku*, (2012).

- [10] K. Peddireddy, P. Kumar, S. Thutupalli, S. Herminghaus in C. Bahr, Langmuir **28**, 12426–12431 (2012).
- [11] <https://en.wikipedia.org/wiki/Birefringence> (Na spletu; dostopano 1. 8. 2013).
- [12] https://en.wikipedia.org/wiki/Gaussian_beam (Na spletu; dostopano 29. 7. 2013).
- [13] M. Ravnik in S. Žumer, Liq. Cryst. **36**, 1201–1214 (2009).
- [14] A. Taflove in S. C. Hagness, *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*. Artech House (2005).
- [15] K. Yee, IEEE T. Antenn. Propag. **14**, 302–307 (1966).
- [16] http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/Yee_lattices (Na spletu; dostopano 27. 4. 2013).
- [17] J.-P. Berenger, J. Comput. Phys. **114**, 185–200 (1994).
- [18] https://en.wikipedia.org/wiki/Brewster%27s_angle (Na spletu; dostopano 30. 7. 2013).
- [19] 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).