

Magistrsko delo

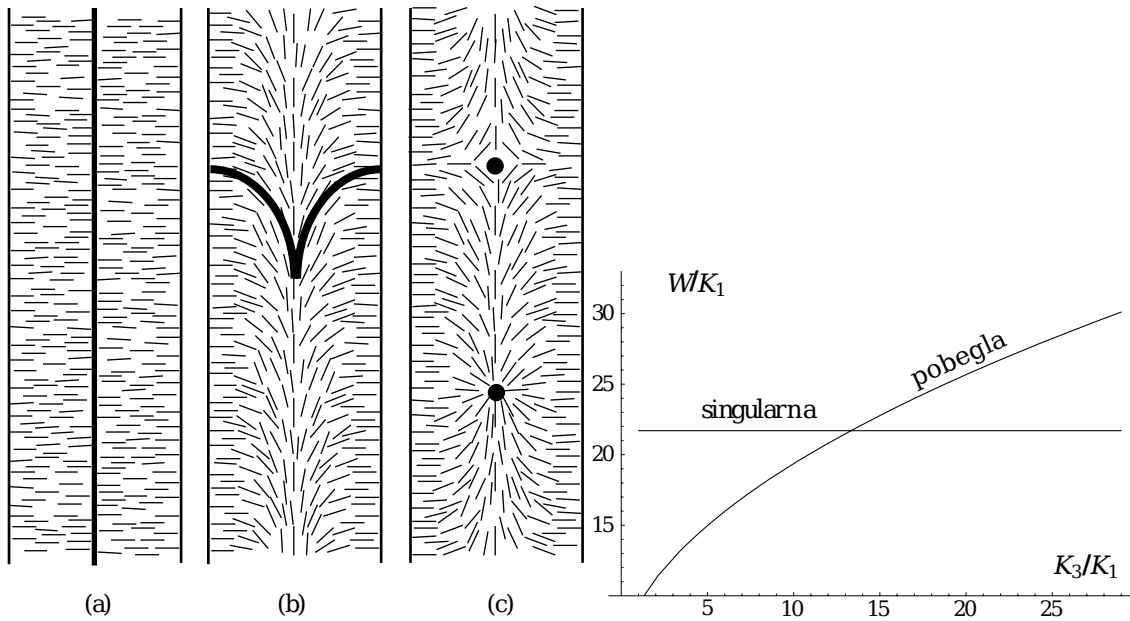
Miha Čančula

21. marec 2013

1 Uvod

2 Teoretično ozadje

2.1 Direktor v cilindrični kapilari



Slika 1: 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 [1].

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[1]

$$\mathbf{n} = (n_r, n_\phi, n_z) = (\cos \chi(r), 0, \sin \chi(r)) \quad (1)$$

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

kjer je R polmer valja. Takšen profil je prikazan na sliki 1b.

V primeru pobega v tretjo dimenzijo je direktor povsod dobro definiran. Če pa do pobega ne pride, je tik ob osi valja območje zmanjšane reda, kjer ureditveni parameter S pade na 0.

2.2 TK kot anizotropni dielektrik

Slika pobega je v Kleman-Lavrentovich, stran 397.

2.3 Maxwellove enačbe v neizotropnem sredstvu

2.4 Teorija valovodov

(TODO: Preberi članke)

3 Numerična metoda

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

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E}, \quad \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \varepsilon^{-1} \nabla \times \mathbf{B} \quad (3)$$

V zgornjih enačbah smo implicitno upoštevali, da v celici ni izvorov, uporabili pa smo brezdimenzijske enote, zato je $c = 0$.

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.

Običajne implementacije metode FDTD gredo še korak dlje, tako da so tudi posamezne komponente električnega in magnetnega polja definirane na različnih točkah[2]. 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.

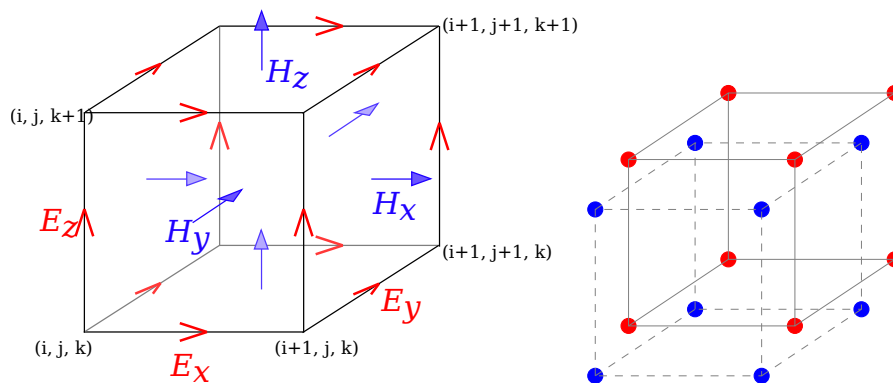
V tekočih kristalih je dielektrični tenzor anizotropen in se močno spreminja s krajem. Zaradi krajevnega spreminjanja ne moremo tako obrniti koordinatnega sistema, da bi bil tenzor diagonalen v vseh točkah. Poleg tega obstoječe modeliranje ureditve tekočih kristalov poda vse komponente dielektričnega tenzorja na istem mestu. 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 2.

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

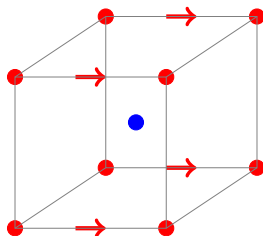
3.2 Enačbe

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 3.

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



Slika 2: Levo: Yeejeva celica, pri kateri so komponente električnega polja znane na razpoloviščih robov konce, komponente magnetnega polja pa v središčih ploskev. 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. (TODO: citiraj za sliko, je z wikipedije)



Slika 3: 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.

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

Poljubno vpadno valovanje lahko modeliramo z robnimi pogoji, če izkoristimo linearnost Maxwellovih enačb. Električno in magnetno polje lahko namreč razcepimo na vsoto vpadnega in sipanega valovanja[2]. 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. (TODO: slikca)

3.4 Robni pogoji

Če imamo na robu celice Dirichletov, Neumannov ali mešani robni pogoj, se bo celotno valovanje odbilo in vrnilo v celico. To lahko preprečimo z uporabo absorbirajočega robnega pogoja (angl. Absorbing boundary condition – ABC). Obstaja več različnih absorbirajočih robnih pogojev, v zadnjem času se največ uporablja t.i. popolnoma ujemaajoča plast (angl. Perfectly matched layer – PML)[2].

Material v plasti PML zagotavlja eksponentno pojemanje 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 pa odpravi odboj na meji le za valovanje, ki vpada pravokotno na mejo. Odboj valovanja pod poljubnim kotom pa 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

$$\varepsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma E_x = \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} . \quad (4)$$

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

$$\varepsilon \frac{\partial E_{xy}}{\partial t} + \sigma_y E_{xy} = \frac{\partial}{\partial y} (H_{zx} + H_{zy}) \quad (5)$$

$$\varepsilon \frac{\partial E_{xz}}{\partial t} + \sigma_z E_{xz} = -\frac{\partial}{\partial z} (H_{yx} + H_{yz}) , \quad (6)$$

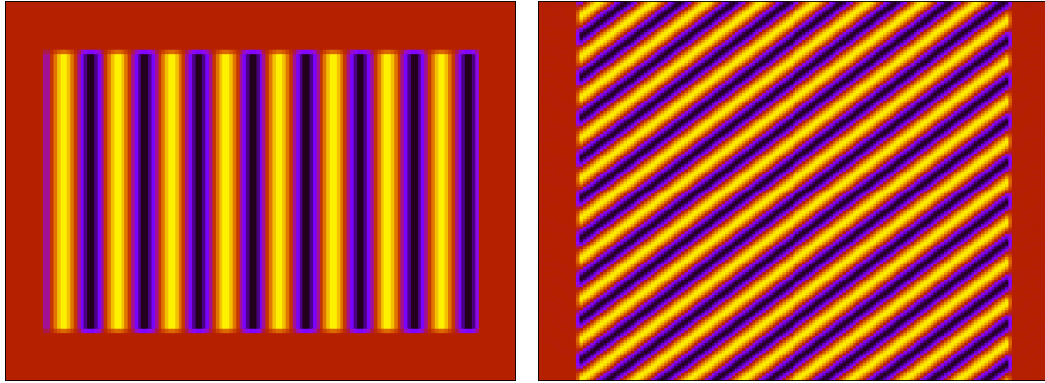
kjer smo razcepljenima komponentoma pripisali različni prevodnosti. Na enak način so razcepljene ostale komponente električnega in magnetnega polja.

4 Preverjanje metode

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

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.



Slika 4: Levo: Trenutna slika valovanja v celici. Desno: Časovna in krajevna odvisnost valovanja. (TODO: Boljši opis, puščice na slikah)

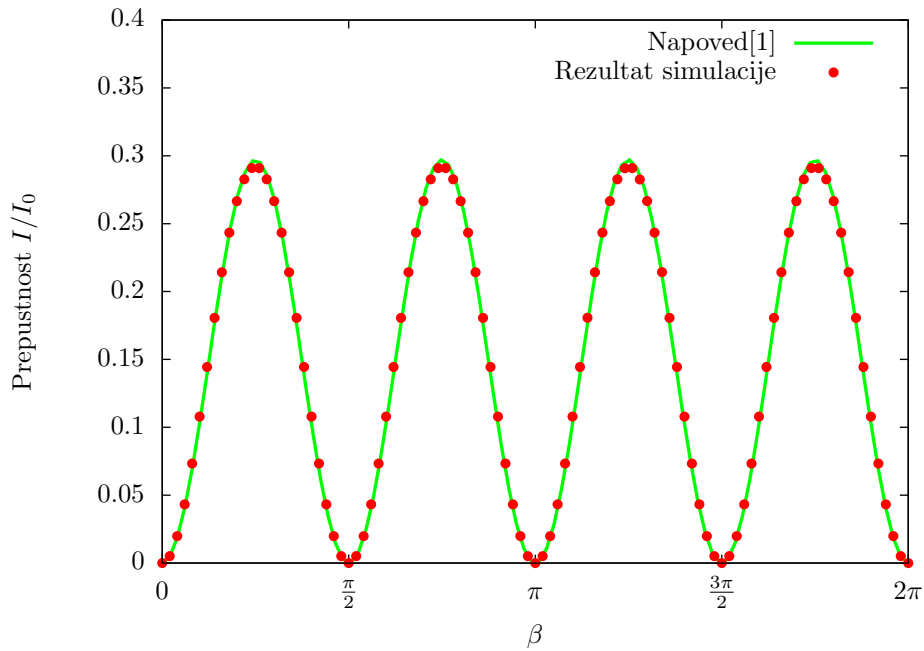
4.2 Uniformen direktor

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. Intenziteto prepuščene svetlobe lahko izpeljemo analitično[1], enaka je

$$I = I_0 \sin^2 2\beta \sin^2 \left[\frac{\pi d}{\lambda_0} \left(\frac{n_o n_e}{\sqrt{n_e^2 \cos^2 \theta + n_o^2 \sin^2 \theta}} - n_o \right) \right], \quad (7)$$

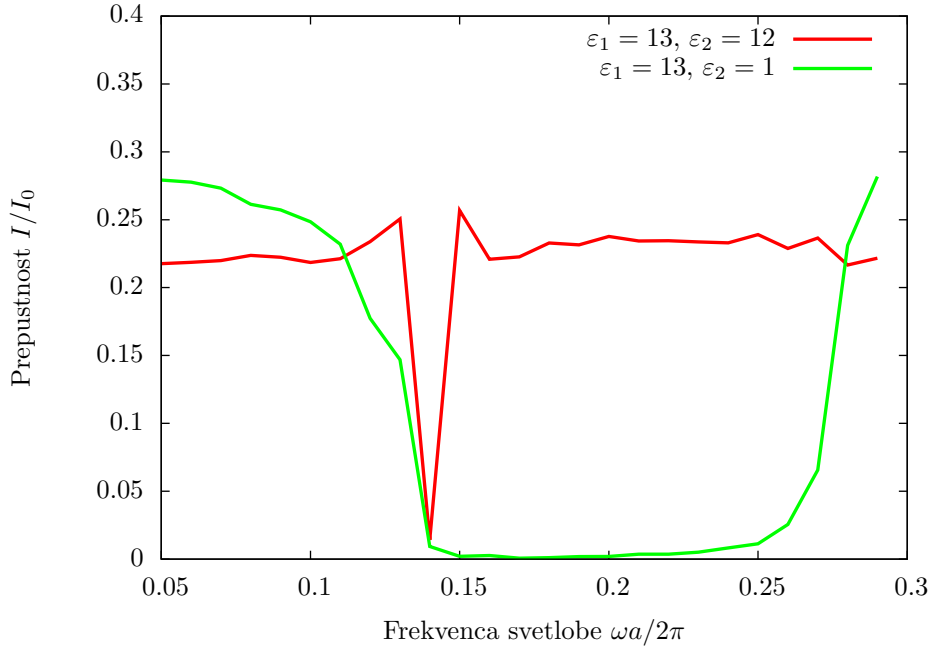
kjer sta I_0 in λ_0 intenziteta in valovna dolžina vpadne svetlobe, d debelina vzorca, n_o in n_e pa redni in izredni lomni količnik. Ujemanje rezultatov z napovedjo je prikazano na sliki 5. (**TODO: vnesi parametre v graf**)



Slika 5: Rezultati preizkusa z uniformnim in anizotropnim dielektričnim tenzorjem

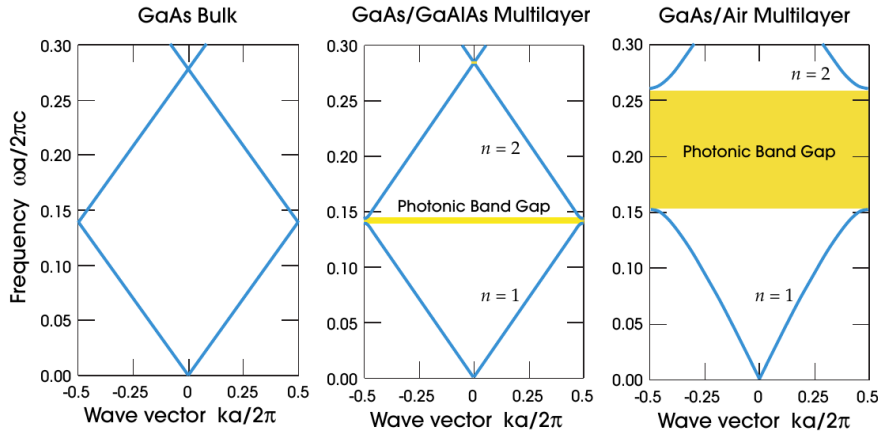
4.3 Periodična modulacija

Pri periodični modulaciji lomnega količnika opazimo pojav, da se svetloba določenih frekvenc ne more širiti po mediju[3]. Temu pojavu pravimo prepovedani pas (angl. band gap). Širina in oblika tega 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 . V smereh x in y sem uporabil periodične robne pogoje, 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 6.



Slika 6: Rezultati preizkusa s periodično modulacijo lomnega količnika

Na sliki res opazimo oster padec prepustnosti v določenem frekvenčnem pasu. Ta frekvenčni pas se dobro ujema s pričakovanim, ki je na sliki 7. Metoda torej pravilno napove položaj in širino prepovedanih pasov.

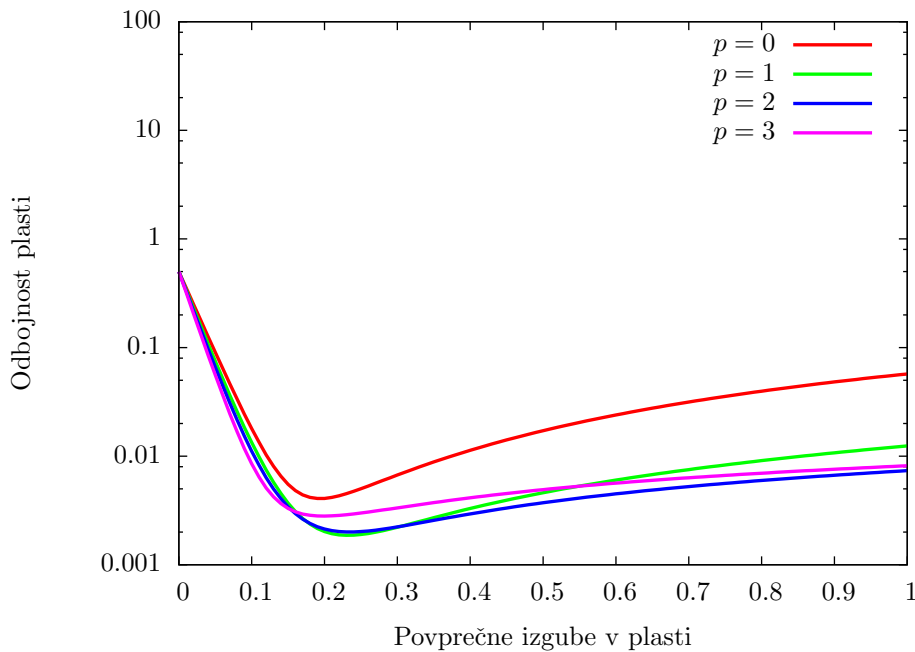


Slika 7: Pojav energijske reža v fotonskem kristalu. Levo: celotna plast ima dielektričnost $\varepsilon = 13$. Sredina: Izmenjevanje plasti z dielektričnima konstantama 13 in 12. Desno: Izmenjevanje plasti z dielektričnima konstantama 13 in 1. [3]

4.4 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 ostri meji in izgube zvezno naraščajo od notranjosti proti robu. V literaturi[2] 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 8.



Slika 8: 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**)

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 Smektični valood

6 Zaključek

7 Literatura

- [1] D. Kleman in O. D. Lavrentovich. *Soft Matter Physics: An Introduction*. Springer (2003).
- [2] A. Taflove in S. C. Hagness. *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*. Artech House (2005).
- [3] 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).