

UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO
ODDELEK ZA FIZIKO

Miha Čančula

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

Magistrsko delo

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

Ljubljana, 2013

Izjava

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

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

Ljubljana, 4. 9. 2013

Miha Čančula

Povzetek

Magistrsko delo obravnava širjenje svetlobe po tekočerkristalnih vlaknih z različnimi direktorskimi profili. Opisan je razvoj numerične metode za modeliranje propagacije elektromagnetnih polj skozi optično anizotropna sredstva, kjer se dielektrični tenzor poljubno spreminja po prostoru. Postopek reševanja temelji na metodi končnih diferenc v časovni domeni. Tekoči kristal je modeliran kot enoosno dvolomna snov s krajevno odvisno optično osjo. Izračunamo prepustnost plasti tekočega kristala med prekrizanimi polarizatorjema, fotonski prepovedani pas v periodični strukturi in lastne načine širjenja svetlobe v optično anizotropnem vlaknu. Prepoznamo lastne načine valovanja v tekočerkristalnih vlaknih z različnimi defekti vzdolž osi in možne polarizacije svetlobe, ki bi jih lahko dobili s svetenjem skozi takšna vlakna. Opazimo zanimivo povezavo med ovojnimi števili tekočerkristalinih defektov in defektov v polarizaciji svetlobe, kar je eden prvih korakov k raziskavam povezane topologije dveh sklopljenih prostorskih polj.

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

Abstract

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

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

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

Smer študija: računalniška fizika

Kazalo

1	Uvod	7
2	Tekoči kristali kot optični materiali	9
2.1	Tekočekristalne mezofaze	9
2.2	Orientacijski red	9
2.3	Deformacije direktorja in prosta energija	11
2.4	Topološki defekti	13
2.5	Direktor v cilindrični kapilari	15
3	Elektromagnetno valovanje	17
3.1	Maxwellove enačbe v optično anizotropnem mediju	17
3.2	Dvolomnost	18
3.3	Defekti v polarizaciji svetlobe	19
3.4	Dielektrični tenzor v tekočem kristalu	20
3.5	Povezava med defekti v tekočem kristalu in defekti v optičnem polju . .	21
4	Numerična metoda	23
4.1	Mreža	24
4.2	Postopek reševanja	25
4.3	Izvor valovanja	27
4.4	Robni pogoji	28
5	Primeri uporabe metode	31
5.1	Izotropen dielektrik	31
5.2	Lom in odboj	32
5.3	Uniformen dvolomni kristal	33
5.4	Eno-dimenzionalen fotonski kristal	33
5.5	Dvolomno vlakno	36
5.6	Robni pogoji	37
6	Širjenje laserskega sunka	39
6.1	Radialni profil direktorja	39
6.2	Hiperbolični profil direktorja	40
6.3	Defekti s polovično močjo	41

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

1

Uvod

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

Praviloma so tekoči kristali sestavljeni iz paličastih ali diskastih molekul. Položaji gradnikov nimajo reda dolgega dosega, ali pa je ta red samo v eni ali dveh prostorskih dimenzijah, zato se snov obnaša kot tekočina. Imajo pa red dolgega dosega v orientaciji gradnikov, iz katerega izvira dvolomnost. Preferenčna orientacija gradnikov v tekočem kristalu se spreminja na velikostni skali, ki je tipično med nekaj 10 nm in nekaj 10 μm . To je večje od velikosti molekul, zato lahko govorimo o redu dolgega dosega, je pa primerljivo z valovno dolžino vidne svetlobe[3]. Za razliko od običajnih kristalov lahko orientacijski red vsilimo z obdelavo površine ali z zunanji polji. Zaradi možnosti zunanjega nadzora so tekoči kristali ključnega pomena v mnogih optičnih napravah.

Orientacijski red v tekočih kristalih makroskopsko opišemo s povprečno orientacijo molekul, t.j. direktorjem \mathbf{n} in stopnjo reda S . Na prosto energijo in s tem na ureditev tekočega kristala v zunanjih električnih ali optičnih poljih ključno vplivajo predvsem krajevno spreminjanje direktorja, temperatura in dielektrična interakcija med molekulami in zunanjim poljem. Tekoči kristali se obnašajo kot efektivno elastični medij, kjer direktorju lahko pripišemo tri osnovne deformacijske načine: pahljačo, zvoj in upogib. Z določeno izbiro robnih pogojev, zunanji polji ali dodatkom koloidnih delcev v tekočem kristalu lahko vsilimo defekte. To so področja zmanjšane reda, kjer direktor ni definiran. V treh dimenzijah ločimo točkaste in linijske defekte.

Dvolomnost je lastnost snovi, v kateri je lomni količnik odvisen od smeri polarizacije vpadne svetlobe[4]. Večina dvolomnih snovi je enoosnih, kar pomeni, da obstaja ena izredna os z različnim lomnim količnikom, ostali dve pravokotni smeri pa sta enakovredni. Tipične enoosne snovi so kristali s tetragonalno ali heksagonalno mrežo, kjer optična os enaka po celem kristalu. V tekočem kristalu z orientacijskim redom dvolomna os sledi povprečni orientaciji molekul, torej direktorju. Optična anizotropija tekočih kristalov izhaja iz oblike gradnikov, ki so v večini primerov paličaste molekule.

Dvolomnost tekočih kristalov ponuja številne možnosti uporabe v optičnih napravah. Najbolj znani so tekočokristalni zaslони, kjer z zunanjim električnim poljem spremeni-

njamo orientacijski red in s tem prepustnost vsake točke na zaslonu. Zaradi občutljivosti na električno polje se tekoči kristali uporabljajo v različnih elektrooptičnih napravah, na primer v nastavljivih filtrih. Občutljivost orientacijskega reda na temperaturo omogoča uporabo v termometrih. Sprememba temperature vpliva na količino in barvo prepuščene svetlobe, zato so takšni termometri primerni za iskanje vročih točk v industrijskih napravah[5]. V zadnjem času so veliko pozornosti deležni tekočokristalni laserji, ki izkoriščajo pojav fotonskega prepovedanega pasu v periodičnih strukturah[6, 7]. Zanimiva je tudi uporaba tekočih kristalov v napravah, ki spreminjajo polarizacijo svetlobe. Poleg linearne in eliptične polarizacije lahko z njimi dosežemo tudi osno simetrično polarizacijo, torej radialno ali azimutalno[8, 9].

Obstaja več metod za modeliranje propagacije svetlobe skozi optično anizotropne snovi. Jonesov vektor predstavi električno polje svetlobe, ki se širi v smeri z , kot vektor s komponentama v smereh x in y , med katerima je lahko tudi fazni zamik. S takšnim zapisom lahko opišemo linearno, krožno ali eliptično polarizirano svetlobo[2]. Optično aktivne snovi, kot so polarizatorji in plasti tekočega kristala, so predstavljeni z matrikami velikosti 2×2 , ki delujejo na vektor (E_x, E_y) . Za opis delno polarizirane svetlobe moramo opis razširiti na Stokesove vektorje s štirimi komponentami, naprave pa so opisane z Muellerjevimi matrikami velikosti 4×4 . Jonesova in Muellerjeva metoda sta uporabni v sistemih, kjer je os dvolomnosti pravokotna na smer širjenja valovanja, ne pa v tekočih kristalih. Za modeliranje anizotropnih snovi je bolj primerna Berremanova metoda[10, 11], pri kateri je svetloba predstavljena s transverzalnimi komponentami električnega in magnetnega polja.

Vse našteje metode uporabljajo poenostavljen opis svetlobe. V zadnjem času so računalniki že dovolj zmogljivi, da lahko opišemo svetlobo direktno z vektorjema električnega in magnetnega polja po celotnem prostoru. Opis polja vsebuje vseh šest komponent električnega in magnetnega polja, časovni razvoj pa podajajo Maxwellove enačbe. Takšen pristop je računsko mnogo bolj zahteven, omogoča pa modeliranje širjenja svetlobe po poljubno optično zapletenih strukturah[12, 13].

Magistrsko delo je organizirano v sedem vsebinskih sklopov. V drugem poglavju je razložena osnovna teorija ureditve tekočih kristalov in njihove optične lastnosti. V tretjem poglavju so navedene Maxwellove enačbe, ki opisujejo širjenje svetlobe skozi anizotropno snov. Poseben poudarek je na dvolomnosti. V četrtem poglavju je predstavljena numerična metoda, s katero smo modelirali širjenje svetlobe skozi tekočokristalne strukture na podlagi Maxwellovih enačb. Opisana je diskretizacijska mreža, ki je primerna za obravavo optično anizotropnih snovi, naštetih je nekaj preizkusov pravilnosti izbrane metode. V petem poglavju so opisani preizkusi metode, vključno z širjenjem ravnega vala po praznem prostoru, fotonskim kristalom in tekočokristalnim vlaknom. V šestem poglavju prikazani rezultati propagacije zelo kratkih laserskih sunkov skozi tekočokristalna vlakna z različnimi direktorskimi profili. V sedmem poglavju je opisana propagacija stalne laserske svetlobe, ki je bolj primerna za eksperimentalno opazovanje, s katero lahko pridobimo različne profile polarizacije svetlobe, na primer radialno polarizacijo.

2

Tekoči kristali kot optični materiali

2.1 Tekočekristalne mezofaze

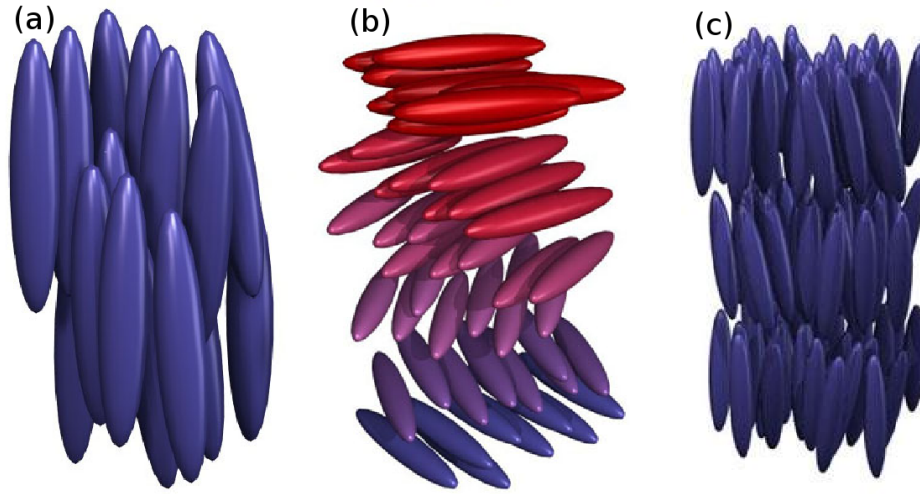
Tekoči kristali so mehke snovi, ki združujejo lastnosti kristalov in tekočin[1]. Praviloma so tekoči kristali sestavljeni iz paličastih ali diskastih molekul, tekočekristalne mezofaze pa tvorijo tudi segmenti DNK, molekule nekaterih virusov in primerni koloidni delci. Položaji gradnikov nimajo reda dolgega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

Tekoče kristali delimo na večje mezofaz glede na orientacijski in pozicijski red gradnikov. Molekule nematskih tekočih kristalov imajo samo orientacijski red dolgega dosega. Smektiki imajo pozicijski red v eni smeri, tako da se gradniki uredijo v plasti, znotraj katerih se snov obnaša kot tekočina. Prisotnost kiralnih molekul tekočemu kristalu vsili lasten zvoj, tako da se preferenčna smer orientacijskega reda s krajem spreminja. Glede na moč tega zvoja snov tvori kiralno nematsko fazo, kjer je zvoj le v eni smeri, ali modre faze, kjer je zvoj prisoten v vseh smereh. Orientacija molekul v nekaj najpogostejših tekočekristalnih mezofazah je prikazana na sliki 2.1. Poleg naštetih obstaja še veliko različnih mezofaz z različnim orientacijskim in pozicijskim redom.

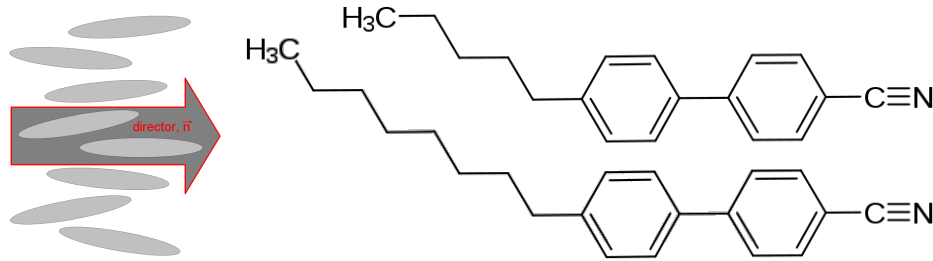
2.2 Orientacijski red

V vseh tekočekristalnih mezofazah imajo gradniki orientacijski red dolgega dosega. Definiramo lahko enotski vektor \mathbf{n} , ki določa povprečno smer gradnikov in ga imenujemo direktor. Direktor ni pravi vektor, saj v tekočem kristalu ne ločimo med smerjo \mathbf{n} in $-\mathbf{n}$. Tudi če sami gradniki nimajo takšne simetrije, jo imajo njihove fluktuacije[15].

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



Slika 2.1 Shematski prikaz treh najpogostejših tekočokristalnih mezofaz: (a) nematik, (b) kiralni nematik ali holesterik in (c) smektik[14].



Slika 2.2 Levo: Gradniki imajo različne orientacije, preferenčno smer pa poda direktor. Desno: Strukturni formulir molekul 5CB (zgoraj) in 8CB (spodaj)[16]

Direktor \mathbf{n} podaja povprečno smer gradnikov, ne pa dejanske orientacije posameznih gradnikov, t.i. molekularnih direktorjev. 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[3]

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

kjer je ϑ kot med osjo gradnika in direktorjem, $\langle \rangle$ pa ansambelsko 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 količina, ki je v eni fazi tipično enaka nič, v drugi pa od nič različna. Zgoraj definirana stopnja reda S je tako primeren ureditveni parameter za opis prehoda med izotropno tekočino in tekočokristalno fazo[1].

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

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

kjer sta $\mathbf{e}^{(1)}$ in $\mathbf{e}^{(2)}$ enotska vektorja, pravokotna na \mathbf{n} in med seboj. Uvedli smo še biaksialnost P , ki je neničelna, če fluktuacije molekul niso simetrične na vrtenje okrog direktorja. V tem primeru imamo orientacijski red tudi vzdolž osi $e^{(1)}$, ki je pravokotna na direktor in jo imenujemo sekundarni direktor. Parameter P ima podoben pomen kot S in nam pove, kako dobro so gradniki urejeni glede na sekundarni direktor. 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

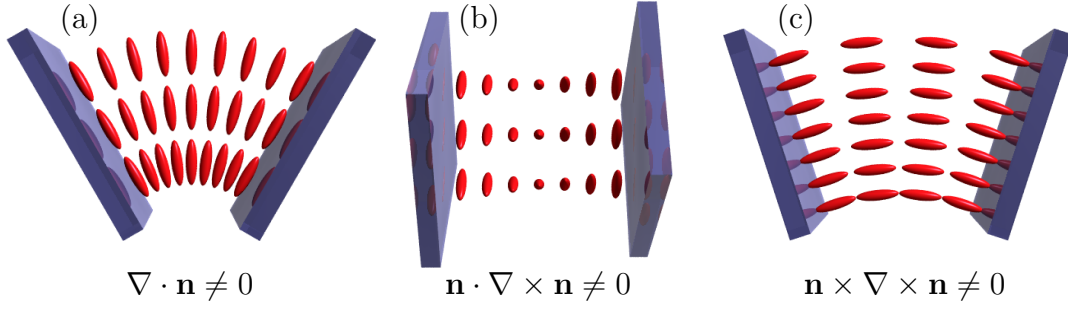
$$Q = \begin{pmatrix} S & & \\ & \frac{-S+P}{2} & \\ & & \frac{-S-P}{2} \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

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

2.3 Deformacije direktorja in prosta energija

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

Posamezni gradniki imajo največjo svobodo gibanja in s tem največjo entropijo, če je direktor in s tem tudi 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 2.3 so prikazani trije načini deformacije direktorja, s katerimi lahko lokalno opišemo



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

poljubno krajevno odvisnost. Ti trije načini so pahljača (*angl. splay*), zvoj (*angl. twist*) in upogib (*angl. bend*).

(TODO: Mapping med načini deformacije in odvodi direktorja)

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

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

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

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

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

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

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

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

kjer je elastična konstanta enaka $L = 2K/9S^2$ [18].

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

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

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

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

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

$$f_{EM} = -\frac{1}{2}\epsilon_0 \left(\bar{\epsilon} E_i E_i + \frac{2}{3}\epsilon_a^{\text{mol}} E_i Q_{ij} E_j \right), \quad (2.9)$$

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. Ta sklopitev izhaja iz polarizabilnosti molekul, ki je odvisna od njihove oblike. V snovi s pozitivno dielektrično anizotropijo je najugodnejša 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. Če na tekoči kristal svetimo, ureditev molekul ne more slediti hitremu spreminjanju optičnega električnega polja, ampak nanj efektivno deluje povprečen kvadrat polja.

2.4 Topološki defekti

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

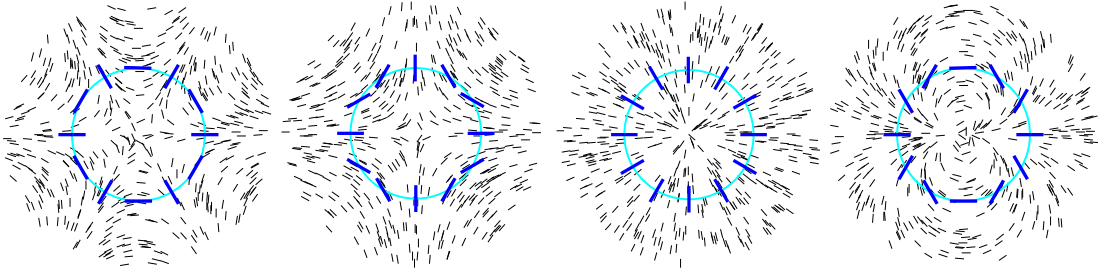
V treh dimenzijah lahko obstajajo točkasti in linijski defekti[1, 3]. V vlaknih nastopajo le linijski defekti, imenovani tudi disklinacije, zato se bomo posvetili zlasti tistim. Linijski defekti so lažji za razvrščanje, saj se lahko omejimo na ravnino, pravokotno na linijo, in problem prevedemo na dve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

Disklinacije v nematskem tekočem kristalu delimo glede na to, kako se smer direktorja spreminja v okolici disklinacije. Zanima nas zlasti, koliko obratov naredi direktorsko polje, če defekt obkrožimo po zaključeni zanki. V dveh dimenzijah lahko nematski direktor zapišemo kot $\mathbf{n} = (\cos \theta, \sin \theta, 0)$. Definiramo lahko ovojno število (*angl. winding number*) oz. moč defekta kot

$$s = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left(\frac{d\theta}{d\phi} \right) d\phi \quad (2.10)$$

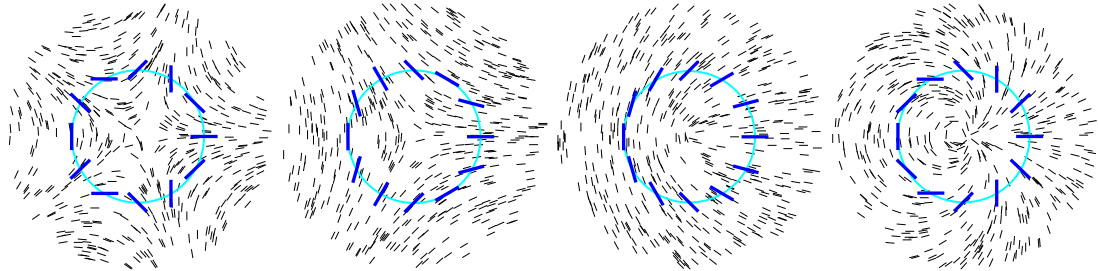
kjer kot θ opisuje smer direktorja, ϕ pa položaj na zanki (svetlo modra na slikah 2.4 in 2.5).

Direktorsko polje je zvezno povsod razen v jedru defekta, zato mora direktor pri $\phi = 0$ enak kot pri $\phi = 2\pi$, seveda ko upoštevamo se simetrijo $\mathbf{n} \leftrightarrow -\mathbf{n}$. Ta pogoj določa možne vrednosti za s . Za prava vektorska polja mora biti s celo število, saj mora biti kot θ na koncu enak kot na začetku. Primeri takšnih defektov so na sliki 2.4.



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

Nematski direktor pa ima dodatno simetrijo, zaradi katere lahko direktor pri obkroženju defekta naredi le pol obrata, ovojno število s pa je zato lahko tudi polcelo število. Primeri takšnih defektov so na sliki 2.5.



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

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

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

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

$$\frac{F_d}{l} = \frac{K}{2} \int_{r_{min}}^{r_{max}} \frac{s^2}{r^2} 2\pi r \, dr = K s^2 \pi \ln \frac{r_{max}}{r_{min}} \quad (2.11)$$

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

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

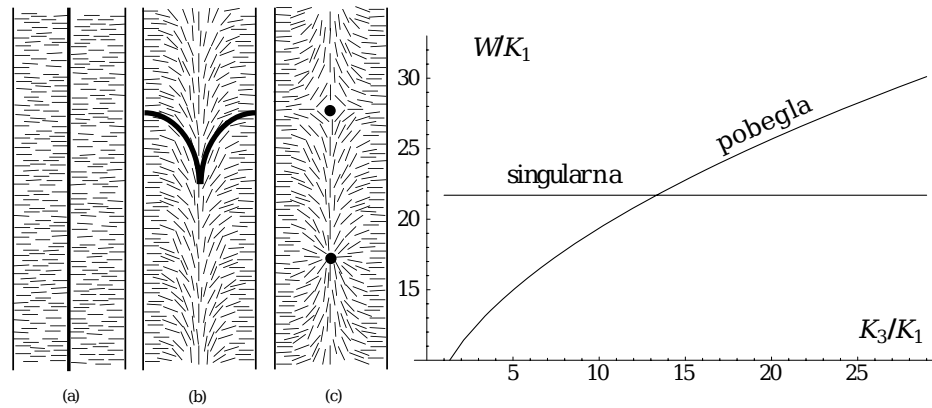
2.5 Direktor v cilindrični kapilari

V cilindrični geometriji s homeotropnimi robnimi pogoji ureditev z uniformnim direktorjem ni možna. Glede na razmerja med elastičnimi konstantami se tekoči kristal uredi v eno izmed konfiguracij na sliki 2.6. V profilu s singularno disklinacijo v osi kapilare 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[3], kar velja za večino nematskih tekočih kristalov. Z minimizacijo energije lahko izpeljemo ravnovesni radialni profil direktorja v cilindričnih koordinatah. V poenostavljenem primeru, ko sta elastični konstanti K_3 in K_1 enaki, je energijsko najugodnejše stanje

$$\mathbf{n} = (n_r, n_\phi, n_z) = (\cos \chi(r), 0, \sin \chi(r)) \quad (2.12)$$

$$\chi(r) = 2 \arctan \frac{R - r}{R + r} \quad (2.13)$$

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

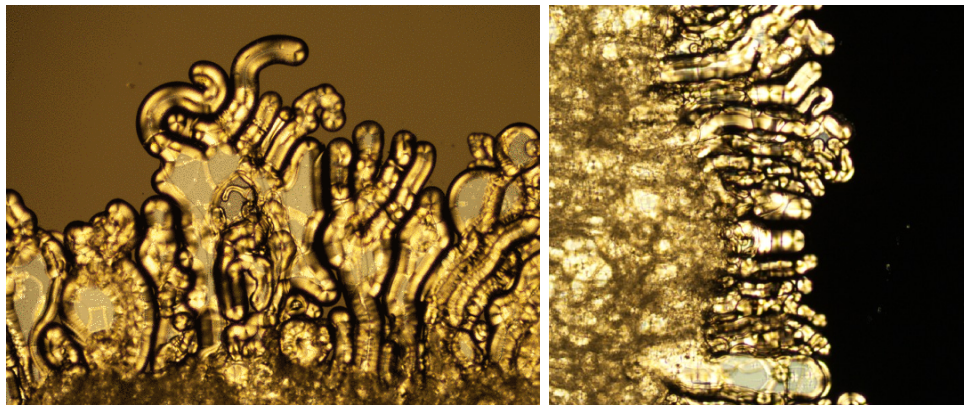


Slika 2.6 Levo: Prerezi kapilare s singularno (a) in nesingularno pobeglo defektno linijo (b). Različne smeri pobega povzročijo nastanek točkastih defektov (c). Desno: Energija singularne in pobegle konfiguracije v odvisnosti od razmerja med elastičnima konstantama K_1 in K_3 [3].

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

V večini nematikov so vse tri elastične konstante istega velikostnega reda, zato je stanje s pobegom v tretjo dimenzijo bolj ugodno. Veliko razmerje K_3/K_1 pa opazimo blizu faznega prehoda v smektično fazo.

Z uporabo 8CB, ki tvori tako nematsko kot tudi smektično fazo, je mogoče v laboratoriju sintetizirati vlakna z radialnim profilom direktorja[19]. (**TODO: Napisi, kako to naredijo**) Primer tvorbe takšnih vlaken je na sliki 2.7.



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

3

Elektromagnetno valovanje

3.1 Maxwelllove enačbe v optično anizotropnem mediju

Širjenje svetlobe po snovi opisujejo štiri Maxwelllove enačbe[12]

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

kjer sta \mathbf{E} in \mathbf{D} jakost in gostota električnega polja, \mathbf{H} in \mathbf{B} pa jakost in gostota magnetnega polja. Med njimi veljata konstitutivni zvezi $\mathbf{D} = \varepsilon \varepsilon_0 \mathbf{E}$ in $\mathbf{B} = \mu \mu_0 \mathbf{H}$. V enačbah nastopata izvora elektromagnetnih polj, in sicer gostota prostih nabojev ρ_f in gostota prostega toka \mathbf{J}_f .

V tekočih kristalih sta dielektričnost ε in permeabilnost μ anizotropna tenzorja. Običajno je pri optičnih frekvencah magnetna anizotropija mnogo šibkejša od električne, zato jo lahko zanemarimo in privzamemo $\mu = 1$.

Izvori in ponori valovanja znotraj vzorca so posledica neničelne električne prevodnosti materiala. Zaradi prevodnosti σ ob prisotnosti električnega polja v snovi teče tok, ki je enak $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$. Prostih nabojev tipčno v tekoekristalnih sistemih ni, zato je $\rho_f = 0$. Z upoštevanjem zgornjih predpostavk lahko Maxwelllove enačbe zapišemo v poenostavljeni obliki

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

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

3.2 Dvolomnost

Dvolomnost (*angl. birefringence*) je pojav, pri katerem je lomni količnik snovi odvisen od polarizacije svetlobe [4, 20]. Opazimo jo predvsem pri kristalih, kot sta kalcit in vodni led, pa tudi nekaterih vrstah plastike. Lahko je posledica same strukture snovi, na primer pri kristalih, oblike gradnikov kot pri tekočih kristalih, ali pa jo vsilimo z mehansko obremenitvijo.

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

$$D_i = \varepsilon_0 \varepsilon_{ij} E_j \quad (3.3)$$

Dielektrični tenzor ε_{ij} je linearna 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 je pa različna. Lastni smeri, ki ustreza različni lastni vrednosti, pravimo optična os. V takšni snovi je le ena privilegirana os, zato rečemo, da je snov optično enoosna. V lastnem sistemu lahko tenzor zapišemo kot

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\perp} & & \\ & \varepsilon_{\perp} & \\ & & \varepsilon_{\parallel} \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

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

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

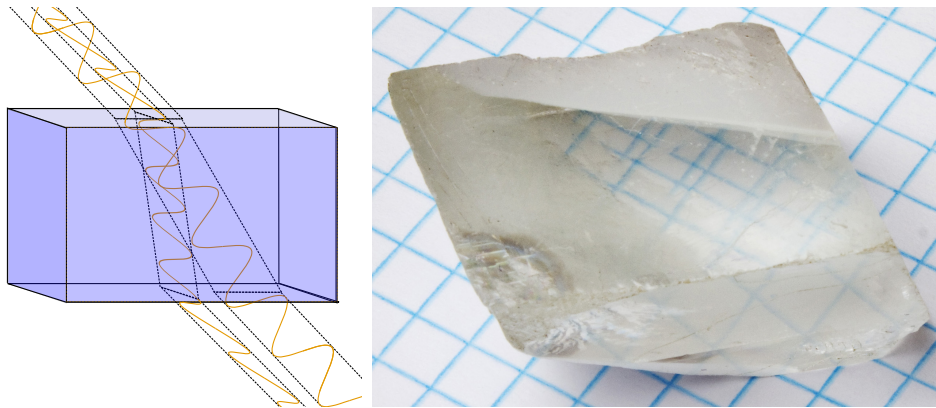
ki je lahko pozitivna ali negativna.

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

Hitrost svetlobe v takšni snovi je enaka

$$c = \sqrt{\frac{1}{\varepsilon_{\text{eff}} \varepsilon_0 \mu_0}} = \frac{c_0}{\sqrt{\varepsilon_{\text{eff}}}} = c_0 \sqrt{\frac{E_i E_i}{E_i \varepsilon_{ij} E_j}} \quad (3.6)$$

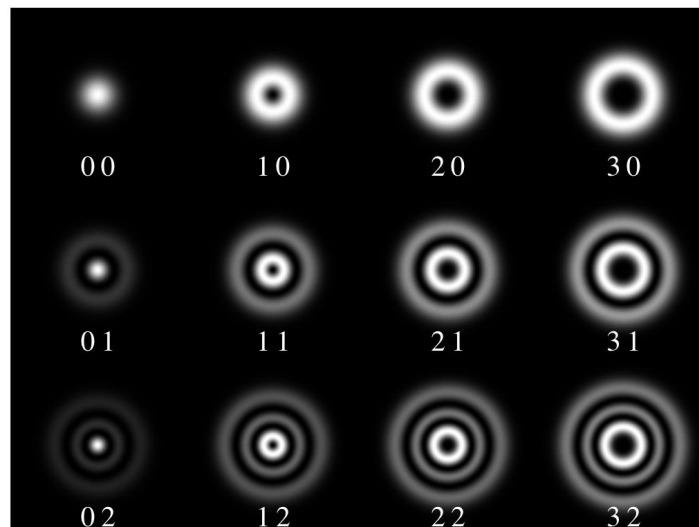
in je odvisna od smeri električnega polja.



Slika 3.1 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. [20]

3.3 Defekti v polarizaciji svetlobe

Električno in magnetno polje sta prava vektorja, zato imata lahko le defekte s celoštevilskim ovojnim številom. Defekt v elektromagnetnem polju je točka oz. območje, kjer polarizacija in faza valovanja nista definirani. Amplituda valovanja v takšni točki mora biti enaka nič, zato se defekti izrazijo kot temne pege. Primer so Laguerre-Gaussovi snopi, prikazani na sliki 3.2.



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

Kljub topološki podobnosti pa so defekti v polarizaciji svetlobe fizikalno zelo različni od defektov v ureditvi tekočega kristala. Deformacije elektromagnetnega polja ne no-

sijo elastične energije, ki bi jo ravnovesno stanje minimiziralo. S primernimi optičnimi elementi lahko skonstruiramo svetlobo z defekti v polarizaciji, kot je npr. simetrijska ravnina z obratom polarizacije, ki bi v tekočem kristalu razpadli zaradi previsoke energije.

3.4 Dielektrični tenzor v tekočem kristalu

Oblika in polarizabilnost molekul v tekočem kristalu vplivata na njegove optične lastnosti. Dielektrični tenzor v tekočem kristalu je odvisen od molekularne anizotropije ϵ_a^{mol} , direktorja in nematske stopnje reda S in je neposredno povezan z nematskim tenzorjem ureditvenega parametra Q_{ij} . Dielektrični tenzor pogosto zapišemo kot vsoto izotropnega in brezslednega dela[1, 18]

$$\epsilon_{ij} = \bar{\epsilon}\delta_{ij} + (\epsilon_a)_{ij} = \bar{\epsilon}\delta_{ij} + \frac{2}{3}\epsilon_a^{\text{mol}}Q_{ij} \quad (3.7)$$

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

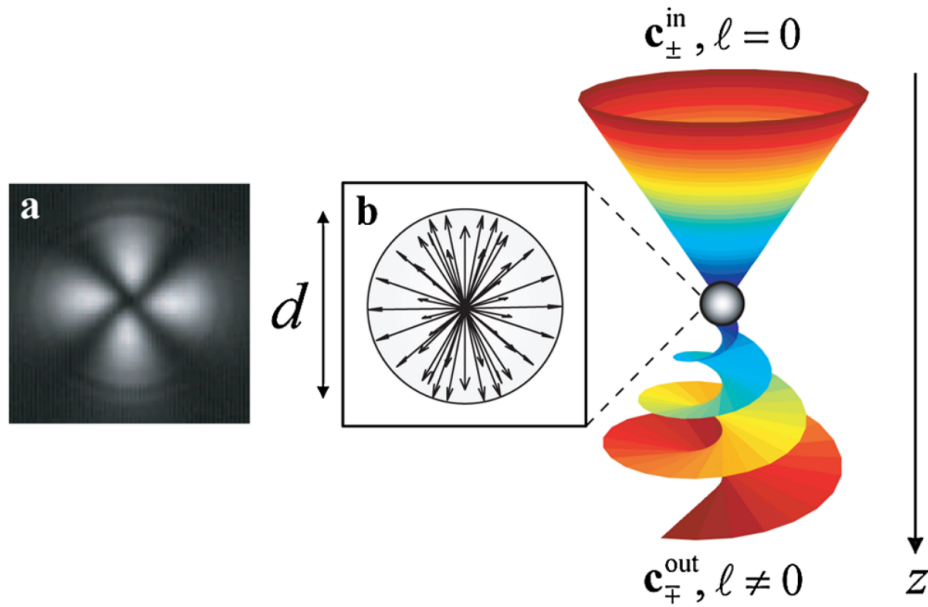
Če primerjamo enačbi (2.9) in (3.7) opazimo dvosmerno povezavo med ureditvijo tekočega kristala in elektromagnetnim poljem. Zaradi dielektrične sklopitve svetloba vpliva na ureditev tekočega kristala, zaradi optične anizotropije pa tekoči kristal vpliva na širjenje svetlobe po njem. Računsko orodje, 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 določeno z drugimi mehanizmi, tipično s površinskim pogoji.. Močno se razlikujeta tudi časovni skali obeh pojavov, saj je karakteristični čas relaksacije tekočega kristala velikostnega reda milisekunde, optična polja pa nihajo s periodo okrog femtosekunde. Zato lahko preučujemo tudi propagacijo svetlobe preden se tekoči kristal lahko preuredi.

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

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

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

Svetloba ob prehodu defekta v ureditvi tekočega kristala lahko pridobi fazno singularnost, torej območje, kjer faza valovanja ni definirana. Primer je krožno polarizirana svetloba, ki preide skozi tekočerkristalno kapljico s točkastim defektom v sredini, kot je prikazano na sliki 3.3. V tem primeru svetloba dobi neničelno vrtilno količino l , na sredini pa nastane temna pika[22].



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

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

4

Numerična metoda

Za izračun propagacije svetlobe skozi mocno optično anizotropne tekočerkristalne vzorce smo implementirali metodo končnih diferenc v časovni domeni (*angl. Finite-difference time-domain – FDTD*)[12]. Pri tej metodi časovno propagiramo električno in magnetno polje v vsaki točki po Maxwellovih enačbah.

Pri numeričnem reševanju potrebujemo le tisti dve Maxwellovi enačbi, ki vsebujeta časovne odvode polj. Prvi dve enačbi bosta s tem avtomatsko izpolnjeni (**TODO: REF**). Izvire 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 prepíšemo v brezdimenzijsko obliko ($c = \varepsilon_0 = \mu_0 = 1$), se glasita

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

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

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

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

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

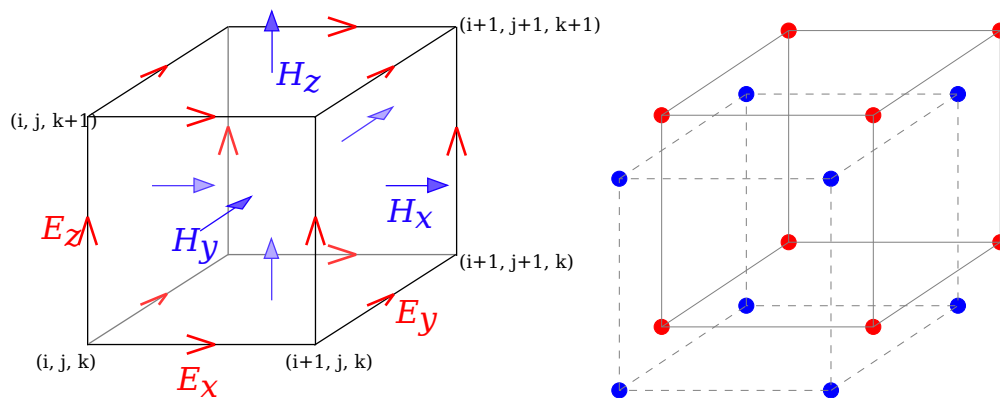
Zaradi simetrije Maxwellovih enačb bi na enak način kot dielektričnost ε lahko upoštevali tudi magnetno permeabilnost μ . Podobno bi lahko poleg električne prevodnosti σ upoštevali magnetne izgube σ^* .

4.1 Mreža

Pri diskretizaciji si lahko pomagamo z obliko obeh enačb. Za izračun časovnega odvoda vsakega izmed polj \mathbf{E} , \mathbf{B} potrebujemo le vrednosti drugega polja. Poleg tega obe enačbi povezujeta časovni odvod enega polja s krajevnim odvodom drugega. Zaradi obeh opisanih lastnosti lahko dvignemo red metode, in s tem izboljšamo natančnost, če vrednosti polj poznamo ob različnih časih in na različnih mestih[12].

Običajne implementacije metode FDTD gredo še korak dlje, tako da so tudi posamezne komponente električnega in magnetnega polja definirane na različnih točkah[24, 25]. Takšno mrežo je predlagal Yee in 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, vse krajevni odvode potrebujemo 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[18]. Ta omejitev močno zmanjša prednosti Yeejeve mreže, zato smo raje uporabili svojo. Odločili smo se za srednjo pot, kjer sta polji \mathbf{E} in \mathbf{B} definirani ob različnih časih in na različnih točkah mreže, vse tri komponente vsakega izmed polj pa so podane na istem mestu. Obe mreži prikazuje slika 4.1.

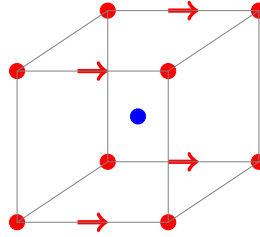


Slika 4.1 Levo: Yeejeva celica, pri kateri so komponente električnega polja znane na razpoloviščih robov konce, komponente magnetnega polja pa v središčih ploskev[25]. Desno: Celica, ki smo jo uporabili pri izračunih. Komponente električnega polja so znane v ogliščih kocke, komponente magnetnega polja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

Za račun potrebujemo še inverz dielektričnega tenzorja, ki pa se med propagacijo svetlobe ne spreminja, zato ga lahko izračunamo predhodno. Lahko neposredno predpišemo vse komponente tenzorja, bolj priročno pa je podati le direktor in stopnjo reda, iz katerih nato izračunamo dielektrični tenzor in njegov inverz. Pomembno je le, da je znan na istem mestu kot \mathbf{E} (rdeče točke na sliki 4.1).

4.2 Postopek reševanja

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



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

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

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

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

in zapišemo krajevne odvode vsake komponente elektromagnetnih polj

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

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

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

kjer je ϕ poljubna komponenta električnega ali magnetnega polja. Rotorje polj, ki nastopajo v Maxwellovih enačbah, izrazimo z odvodi

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

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

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

kjer je \mathbf{A} električno ali magnetno polje.

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

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

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

Iz zgornjih dveh enačb je razvidno, da lahko obe polji računamo izmenično. Če poznamo električno polje ob času $n\Delta t$ in magnetno polje ob času $(n+1/2)\Delta t$, lahko po enačbi izračunamo (4.11) izračunamo električno polje ob času $(n+1)\Delta t$, nato pa po enačbi (4.12) še magnetno polje ob času $(n+3/2)\Delta t$. Izmenično računanje lahko ponavljamo poljubno dolgo.

Pomembna lastnost obeh zgornjih enačb je, da med računanje enega izmed polj potrebujemo le vrednosti drugega polja, ne pa tudi istega polja na sosednjih mestih. Časovni odvodi istega polja na različnih mestih so med seboj popolnoma neodvisni. Vsak korak metode, torej računanje enega izmed polj, lahko razdelimo na veliko število

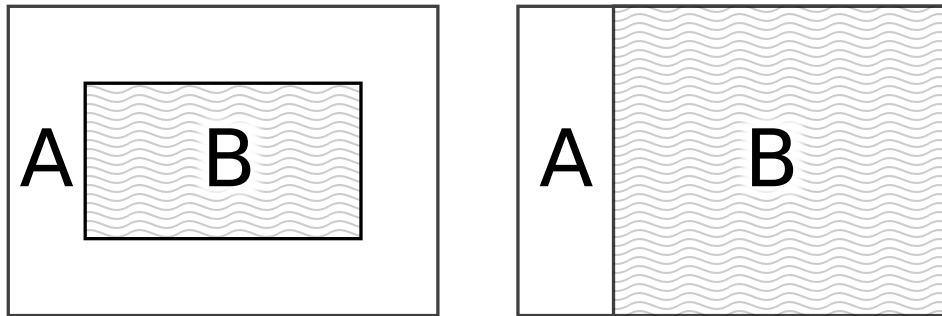
neodvisnih računskih enot. To omogoča paralelno izvajanje programa na računalnikih z več jedri, kot so računalniške gručice, pa tudi novejši osebni računalniki.

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

4.3 Izvor valovanja

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

Poljubno vpadno valovanje lahko modeliramo z robnimi pogoji, če izkoristimo linearnost Maxwellovih enačb. Električno in magnetno polje lahko namreč razcepimo na vsoto vpadnega in sipanega valovanja[12]. Takšen razcep polja je možen le, če je širjenje vpadnega valovanja dobro znano. To velja za ravne valove, pa tudi za bolj zapletene primere kot so Laguerre-Gaussovi snopi. Mrežo zato razdelimo na dve območji, v notranjem območju računamo s skupnim poljem, v zunanjem pa polje razcepimo in shranjujemo le sipani del. Optično anizotropna snov mora biti v celoti v notranjem območju, izvor valovanja modeliramo na prehodu med območjema.



Slika 4.3 Delitev mreže na dve območji. V območju **A** računamo le z 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 notranem območju ne razlikuje močno od zunanega. 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 tekočerkristalnem valovodu, ki je mnogo daljši od valovne dolžine svetlobe. Takrat

je bolj učinkovito upoštevati izvor valovanja le na vpadni strani, na drugi strani pa postavimo plast, ki absorbira valovanje.

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

4.4 Robni pogoji

Če imamo na robu celice določeno vrednost električnega in magnetnega polja, se bo celotno valovanje odbilo in vrnilo v celico. Če so določeni odvodi polj, ali pa linearna kombinacija vrednosti in odvodov, se bo valovanje odbilo z določenim faznim zamikom. Tega si ne želimo, saj pri izvedbi eksperimentov običajno svetloba najprej preide skozi vzorec, nato pa jo zajamemo in preučimo. Odbita svetloba, ki bi se vrnila v vzorec, bi zmotila svetlobno polje in otežila opazovanje. Za modeliranje takšnega eksperimenta bi morali uporabiti zelo veliko prazno območje, v katerega bi se svetloba širila, kar pa močno upočasni delovanje metode. Širjenje v prazen prostor brez odboja pa lahko učinkoviteje simuliramo z uporabo absorbirajočega robnega pogoja (*angl. Absorbing boundary condition – ABC*). Obstaja več različnih implementacij absorbirajočih robnih pogojev, v zadnjem času se največ uporablja t.i. popolnoma ujemajoča plast (*angl. Perfectly-matched layer – PML*)[12, 26].

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 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 izotropnem mediju z dielektričnostjo ε in električno prevodnostjo σ zadošča Maxwellovi enačbi

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

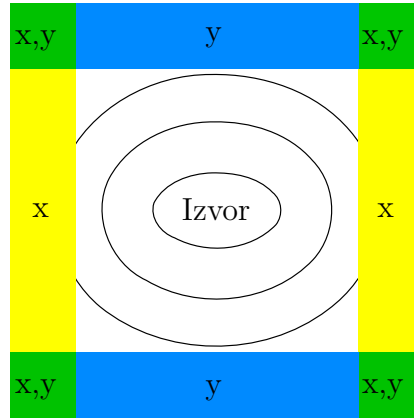
V plasti PML pa električno polje razdelimo na dva prispevka, $E_x = E_{xy} + E_{xz}$, ki zadoščata enačbam

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

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

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

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



Slika 4.4 Shema postavitve plasti PML okrog ombočja, v katerem opazujemo propagacijo svetlobe. V rumenih območjih je neničelna prevodnost σ_x , v modrih je neničelna le σ_y , v zelenih območjih pa sta prisotni obe. Takšna postavitve preprečuje odboj svetlobe pri poljubnem vpadnem kotu[12].

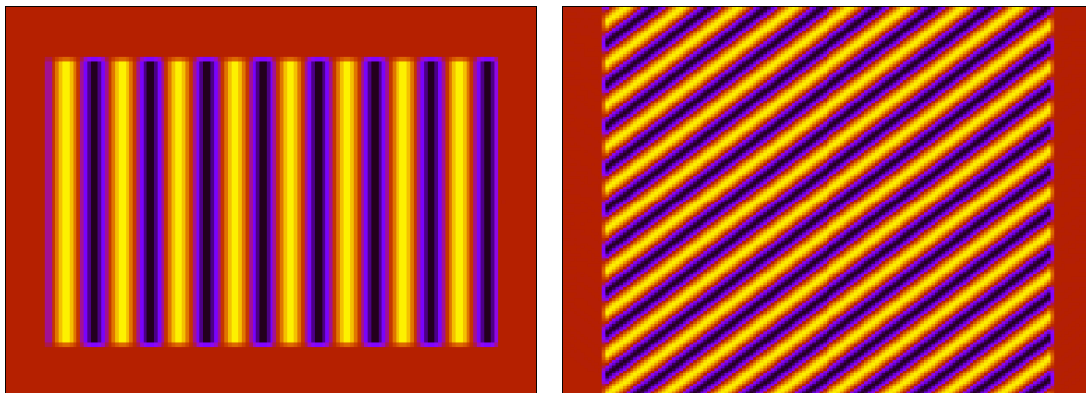
5

Primeri uporabe metode

5.1 Izotropen dielektrik

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

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



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

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

sni strani uspešno pobere celotno valovanje potrjuje natančnost računanja in ustrezno implementirane robne pogoje.

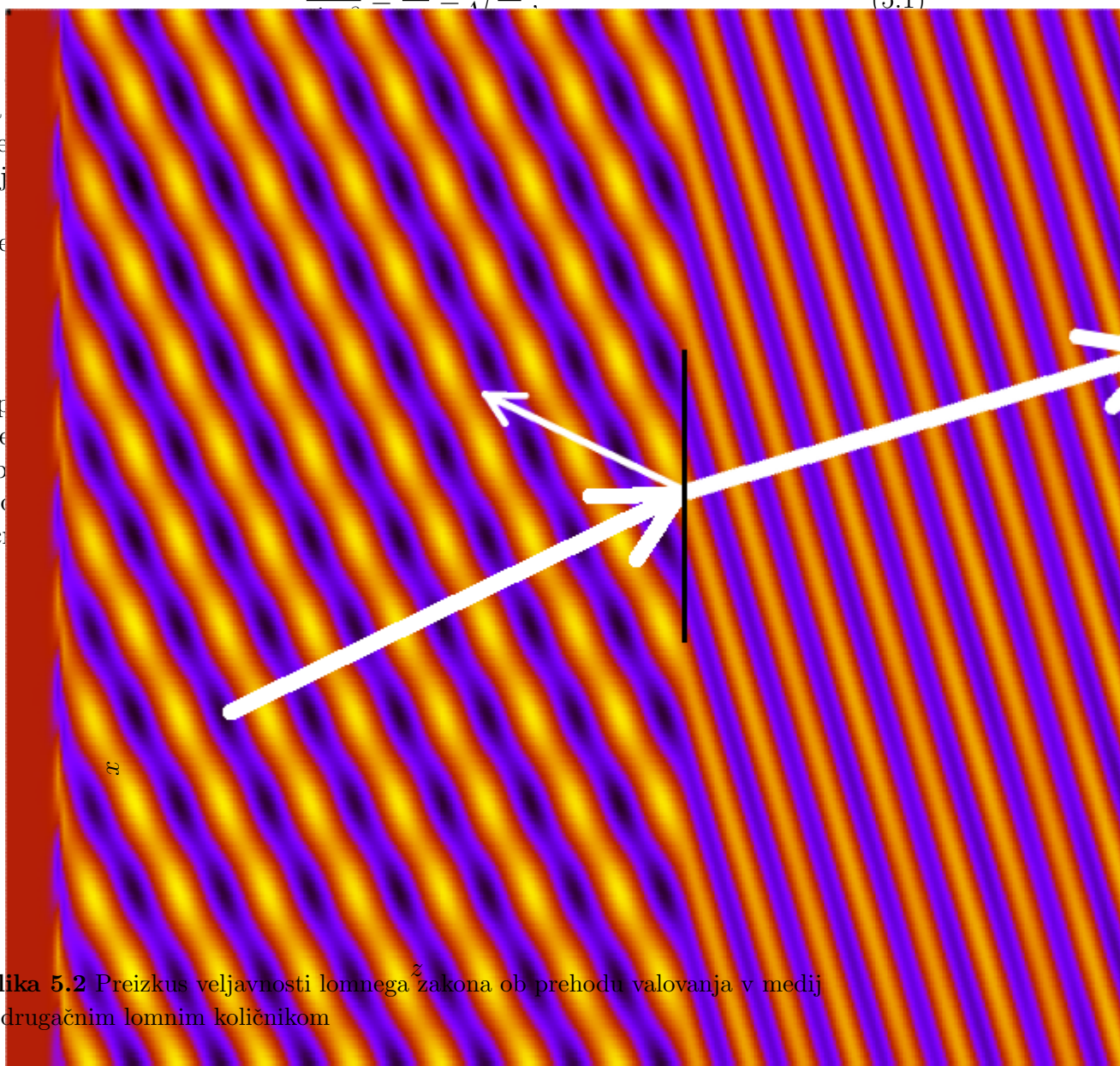
5.2 Lom in odboj

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

$$\frac{\sin \alpha}{\sin \beta} = \frac{n_2}{n_1} = \sqrt{\frac{\epsilon_2}{\epsilon_1}}, \quad (5.1)$$

kjer je
širjenja
Dele
larizacij
ravnini
Brewste

Če p
polja ne
zato up
šibko od
električ



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

Na sliki so jasno vidna štiri območja. Čisto na levi je rob z absorbirajočim robnim pogojem PML, ki absorbira odbito valovanje in preprečuje nadaljnji odboj. Naslednje je območje z dielektričnostjo 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 območjema, 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 potrdimo, če primerjamo kota vpadnega in lomljenega valovanja.

5.3 Uniformen dvolumni kristal

Modelirali smo dvolumni kristal, torej snov, kjer je dielektrični tenzor uniformen, ne pa tudi izotropen. Zanima nas prepustnost takšnega sistema, če za celico postavimo polarizator, ki je pravokoten na polarizacijo vpadne svetlobe.

Ta preizkus temelji na 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, intenziteta pa je odvisna od dvolumnosti in orientacije vmesne snovi. Na ta način se jasno vidijo defekti v tekočem kristalu.

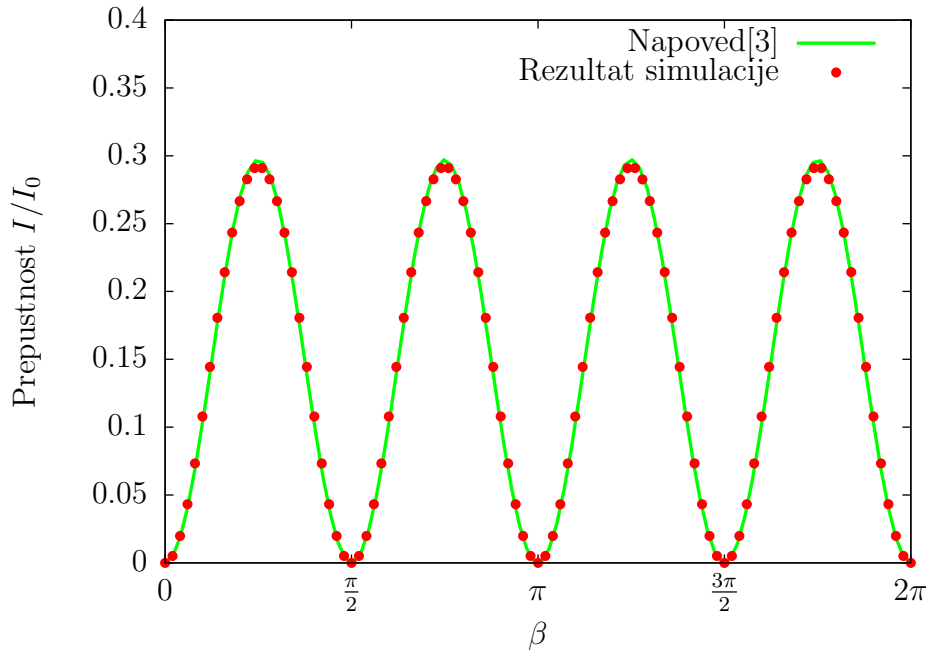
Svetloba se širi v smeri osi z , optična os pa oklepa kot θ z ravnino x - y in kot β s polarizacijo vpadne svetlobe. Če je direktor uniformen po celotni debelini vzorca, lahko intenziteto prepuščene svetlobe izpeljemo analitično[3]. Enaka je

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

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

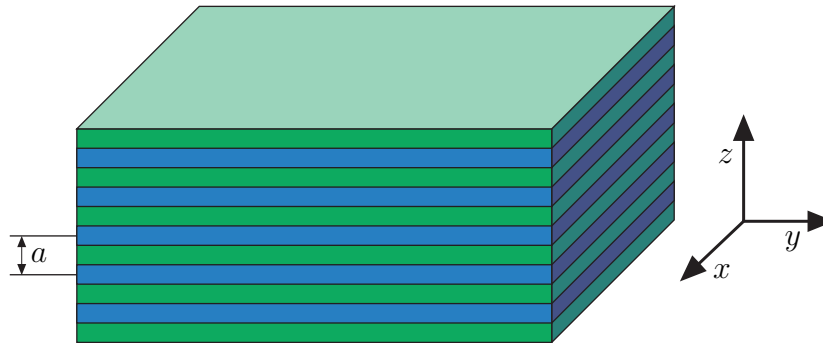
5.4 Eno-dimenzionalen fotonski kristal

V snoveh s periodično modulacijo lomnega količnika se svetloba določenih frekvenc ne more širiti[28, 29]; takšne materiale imenujemo tudi fotonski kristali. Temu pravimo pojav prepovedanega pasu (*angl. band gap*) in je soroden elektronski energijski reži pri molekulskih kristalih. Za prisotnost fotonskega prepovedanega pasu potrebujemo kristal oz. periodično strukturo, kjer je perioda primerljiva z valovno dolžino svetlobe. Fotonsko energijsko režo za vidno svetlobo lahko ustvarimo npr. v koloidnih kristalih z velikostjo osnovne celice okrog $1 \mu\text{m}$.



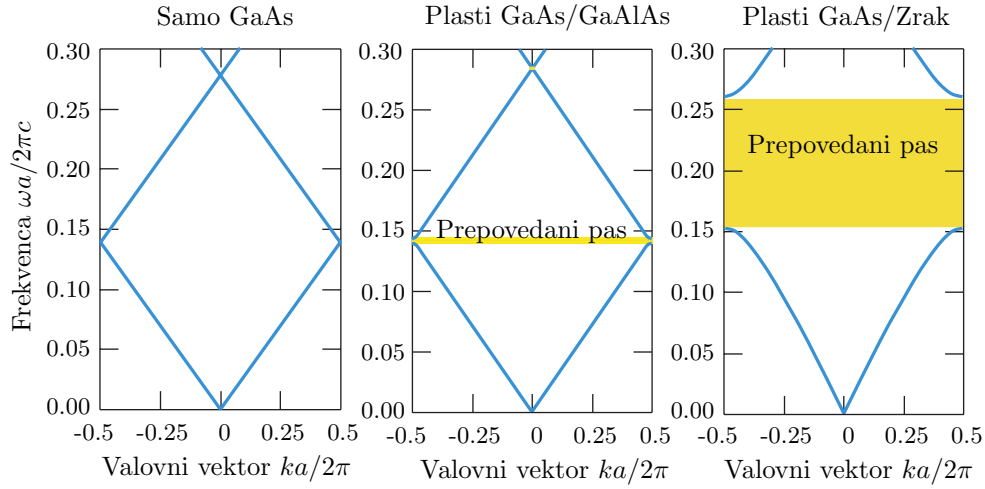
Slika 5.3 Odvisnost prepustnosti uniformnega dvolomnega kristala od kota β med optično osjo kristala in vpadnim polarizatorjem.

Širina in oblika prepovedanega pasu sta odvisni od razmerja lomnih količnikov oz. dielektričnega kontrasta, periode modulacije in velikosti kristala. Za preverjanje metode smo modelirali enodimenzionalen fotonski kristal, kjer se izmenjujejo plasti z debelino $a/2$ in z izotropno dielektričnostjo ε_1 in ε_2 . Takšna struktura je prikazana na sliki 5.4.



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

V literaturi določeni fotonski pasovi, torej odvisnosti frekvence ω od valovnega vektorja k , so prikazani na sliki 5.5[29]. 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.



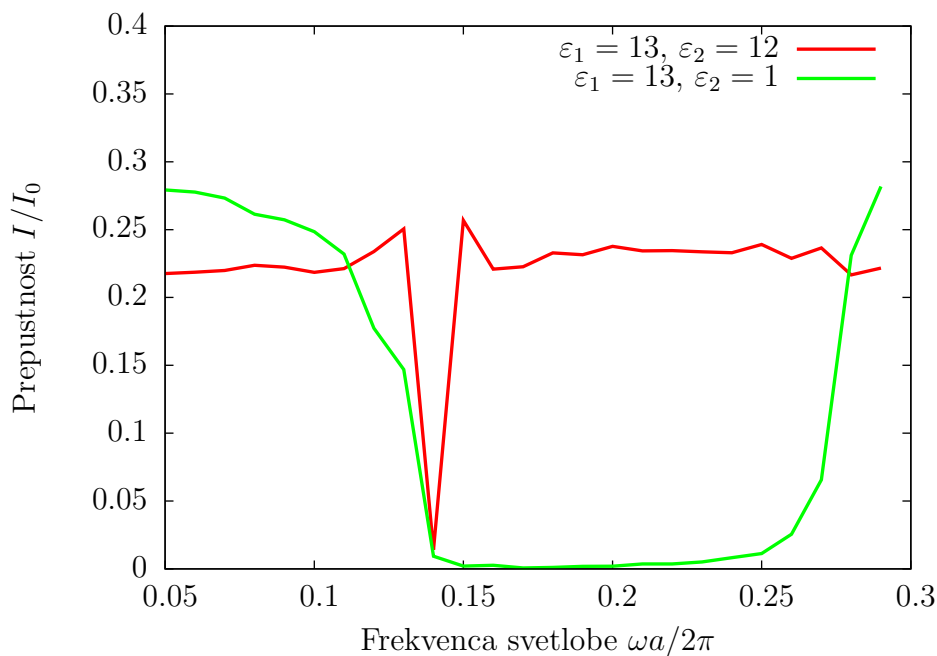
Slika 5.5 Pojav energijske reže v fotonem kristalu. Levo: celotna plast ima dielektričnost $\varepsilon = 13$. Sredina: Izmenjevanje plasti z dielektričnima konstantama 13 in 12. Desno: Izmenjevanje plasti z dielektričnima konstantama 13 in 1. [29]

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[29].

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

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

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



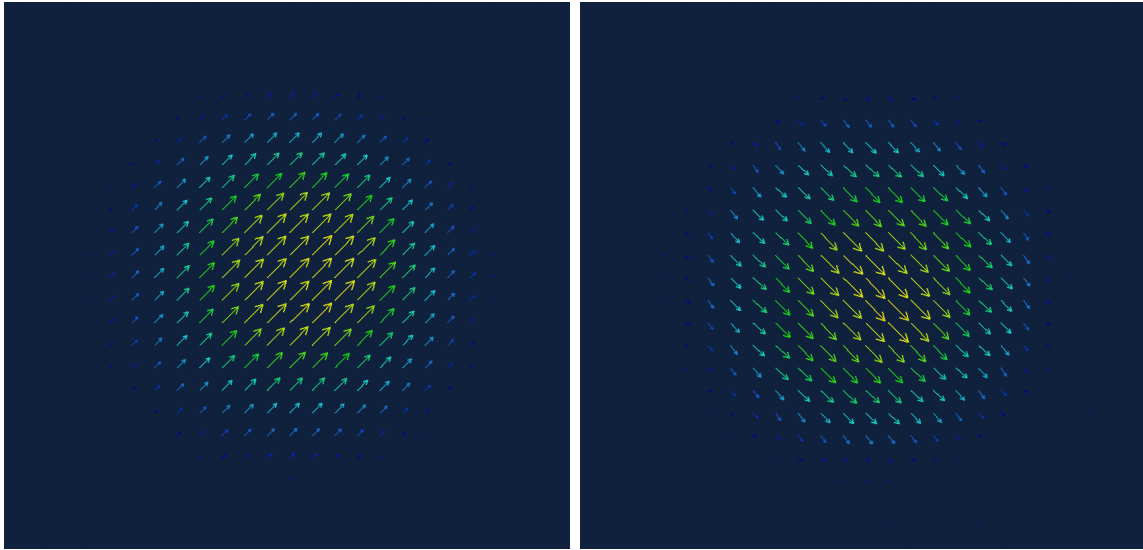
Slika 5.6 Rezultati preizkusa s periodično modulacijo lomnega količnika

5.5 Dvolomno vlakno

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

Simulirani laserski pulz je trajal le nekaj valovnih dolžin svetlobe. Na ta način sta se obe komponenti znotraj vlakna jasno ločili in smo ju lahko primerjali. Ker se sunek hitro razcepi, je takšen postopek primeren za iskanje lastnih načinov širjenja po valovodih[12].

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



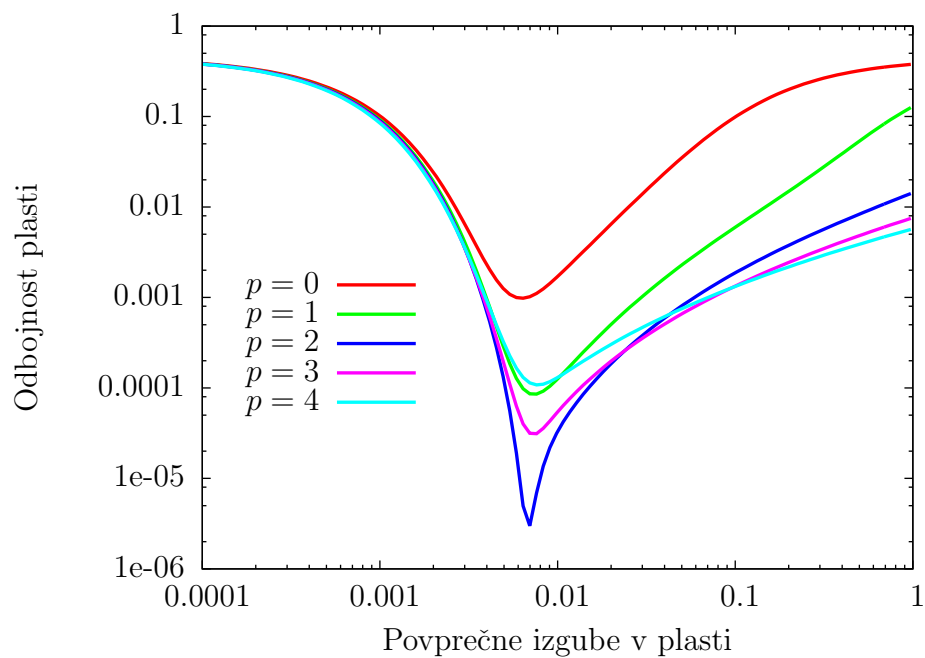
Slika 5.7 Lastna načina širjenja svetlobe skozi vlakno z uniformnim profilom direktorja. Vpadna svetloba je polarizirana vodoravno, optična os pa z vodoravnico oklepa kot 45° .

5.6 Robni pogoji

Za preprečevanje odboja na stranskih ploskvah smo uporabili absorbirajoče robne pogoje. Plast PML nam omogoča, da imamo material s poljubno velikimi izgubami, pa vseeno ne dobimo odboja na meji, vse dokler so električne in magnetne izgube v primerjem 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 omlimo, če se izognemo ostrim mejam in izgube zvezno naraščajo od notranjosti proti robu. V literaturi[12] priporočajo potenčno naraščanje izgub, $\sigma \propto (d - d_0)^p$, kjer je d oddaljenost od zunanjega roba, d_0 pa debelina plasti.

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

V primeru, da v plasti ni izgub, je njena odbojnost enaka 1, saj gre celotno valovanje skozi plast in se odbije na zunanji meji. Če izgube malo povečamo, odbojnost v vseh primerih strmo 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 lahko izgube še povečamo in s tem dosežemo nižjo odbojnost plasti. V zgornjem primeru se za najboljši profil izkaže kvadratno naraščanje absorpcije, zato smo za vse nadaljnje račune uporabili takšno plast. Z debelino robne plasti 16 enot in s primerno izbiro za prevodnost σ v robnem pasu lahko dosežemo,



Slika 5.8 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 ($p = 2$).

da je odbito valovanje za 5 velikostnih redov šibkejše od vpadnega. Pri uporabljeni ločljivosti metode je debelina plasti med eno in dvema valovnima dolžinama svetlobe.

6

Širjenje laserskega sunka

6.1 Radialni profil direktorja

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

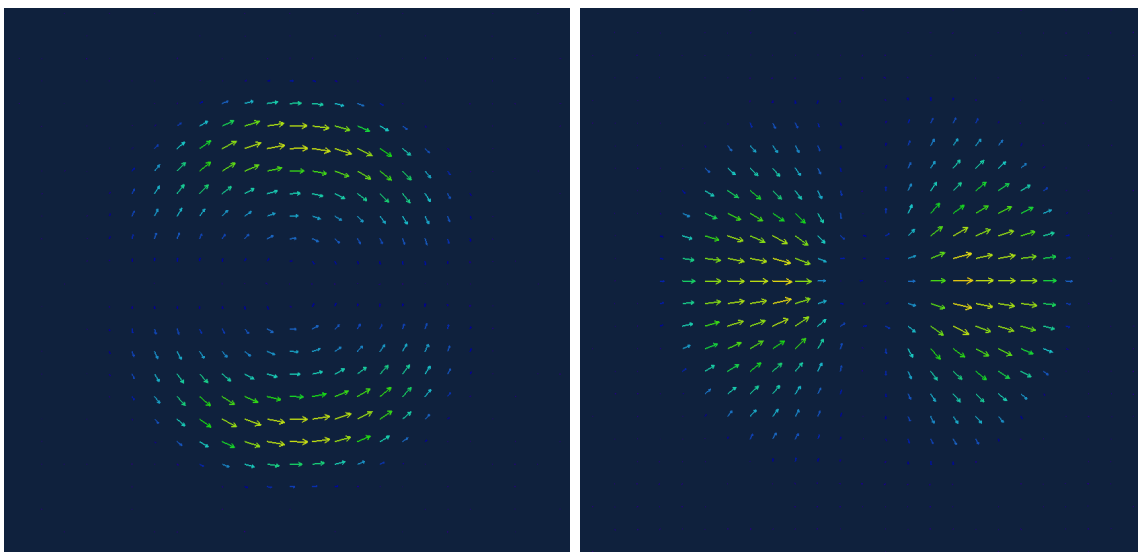
Valovna dolžina svetlobe	480 nm
Premer vlakna	3 μm
Enota diskretizacije	40 nm
Redni lomni količnik v vlaknu	1,52
Izredni lomni količnik v vlaknu	1,68
Lomni količni okoliške snovi	1,33
Širina grla laserskega sunka	3 μm
Trajanje sunka	40 fs

Tabela 6.1 Parametri materiala in laserskega sunka, uporabljeni pri izračunih

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

S slike takoj opazimo podobnost med polarizacijo svetlobe, zlasti pri počasnejšem nihajnem načinu (slika 6.1 desno), in direktorskim poljem. Če na polarizacijo gledamo kot na vektor z direktorsko simetrijo, lahko z enačbo (2.10) obema načinoma priredimo ovojno število $+1$. Dodatno pa imata oba načina še defektno ravnino, kjer se polarizacija svetlobe obrne, intenziteta svetlobe pa je enaka 0. V enem izmed načinov je ta ravnina navpična, v drugem pa vodoravna. Če polarizacijo svetlobe na eni strani te ravnine obrnemo, dobimo pravi linijski defekt moči $+1$.

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



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

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

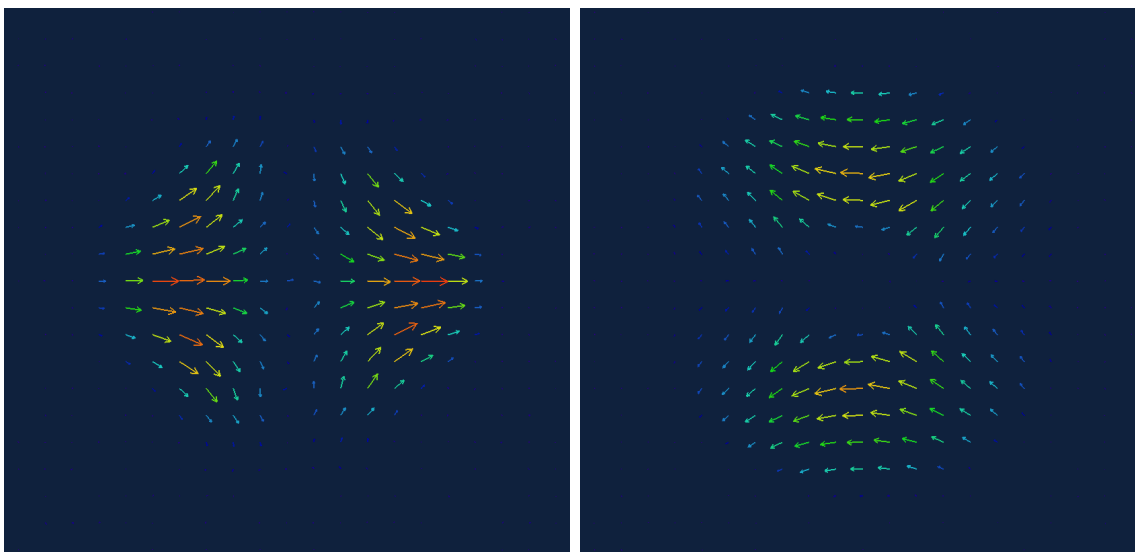
6.2 Hiperbolični profil direktorja

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

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

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

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



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

6.3 Defekti s polovično močjo

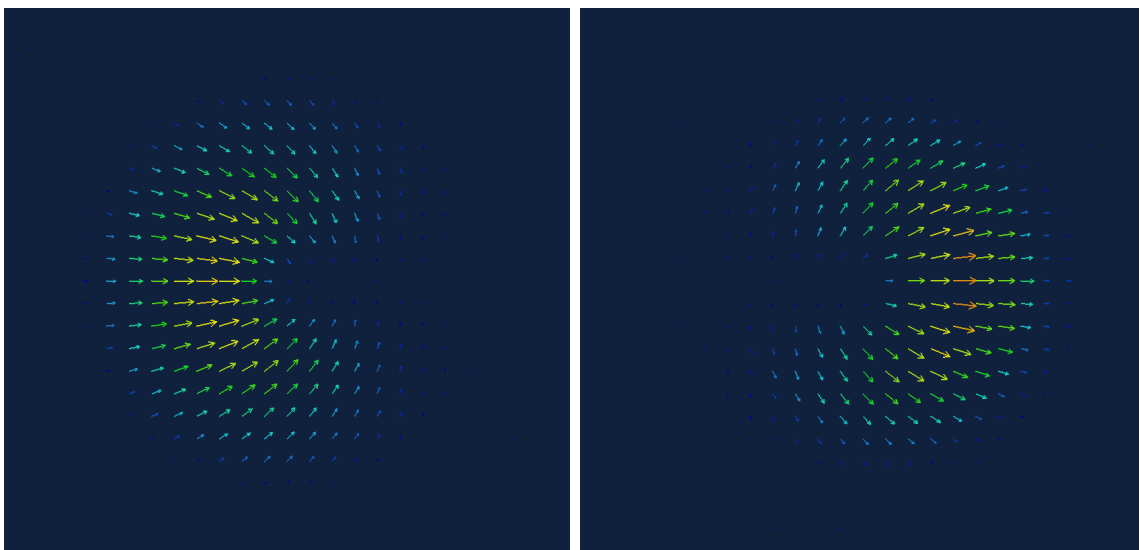
Videli smo, da radialni in hiperbolični profil direktorja znotraj tekočerkristalnega vlakna vsili svojo simetrijo svetlobi. Na mestih, kjer ta simetrija ni kompatibilna s polarizacijo vpadne svetlobe, svetlobe ni. V obeh primerih bi lahko z obratom polarizacije na delu vlakna dosegli, da polarizacija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

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

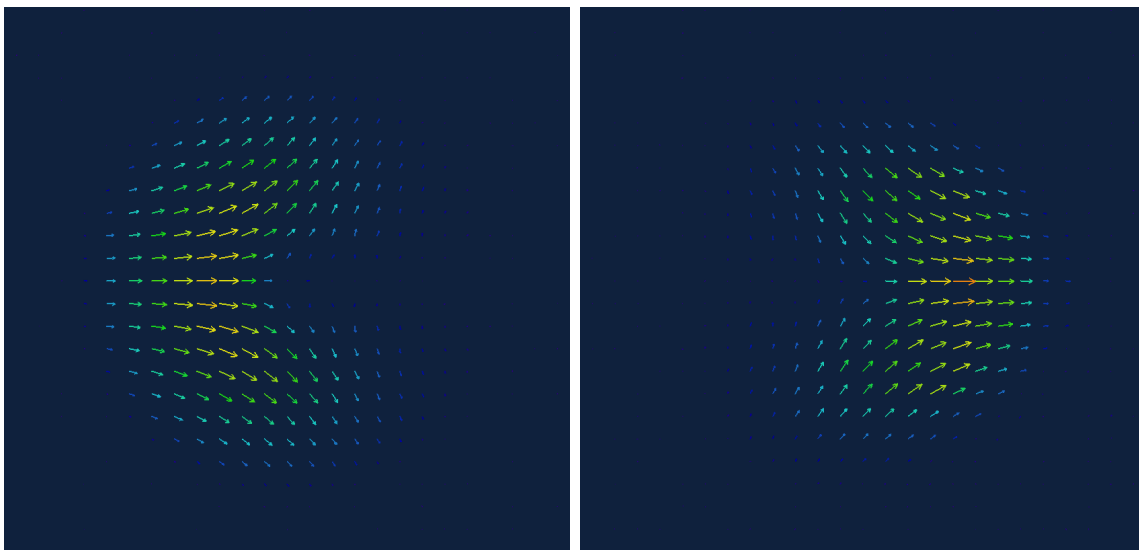
V nasprotju z radialnim in hiperboličnim profilom pri propagaciji svetlobe skozi defekte z necelo močjo ne opazimo ravnin brez svetlobe. Znotraj vsakega lastnega načina je le eno intenzitetno območje. Simetrijski ravnini, opaženi pri celoštevilskih defekti, nista kompatibilni s simetrijo defekta s polcelim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

6.4 Splošne zakonitosti

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



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



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

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

V zgorjih opažanjih lahko najdemo podobnosti in izpeljemo splošne zakonitosti.

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

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

7

Stalna laserska svetloba

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

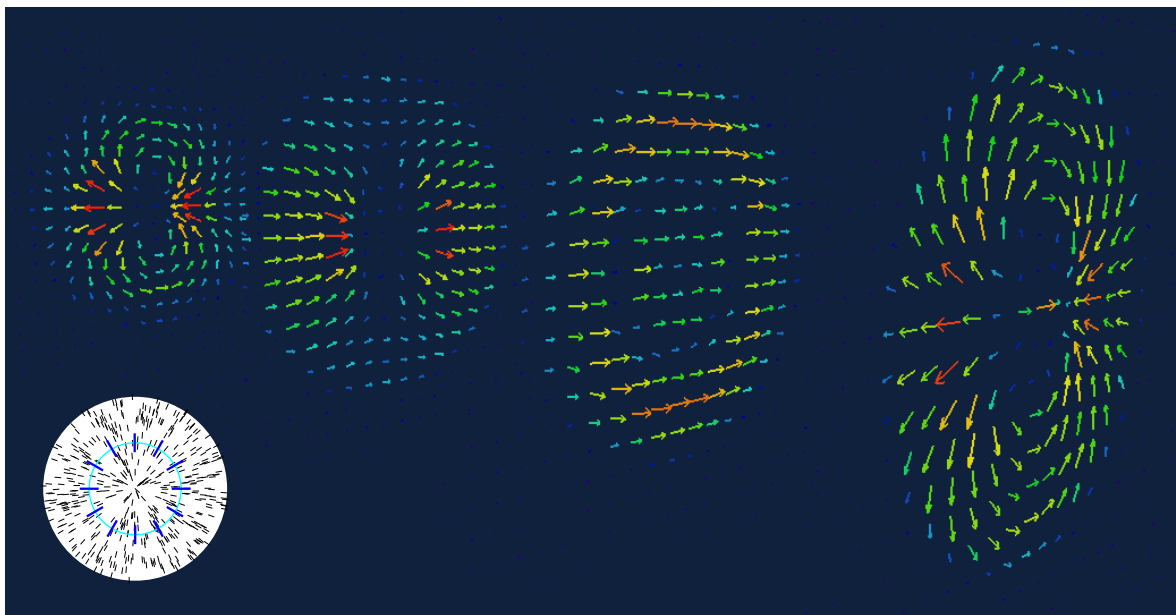
7.1 Radialni profil direktorja

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

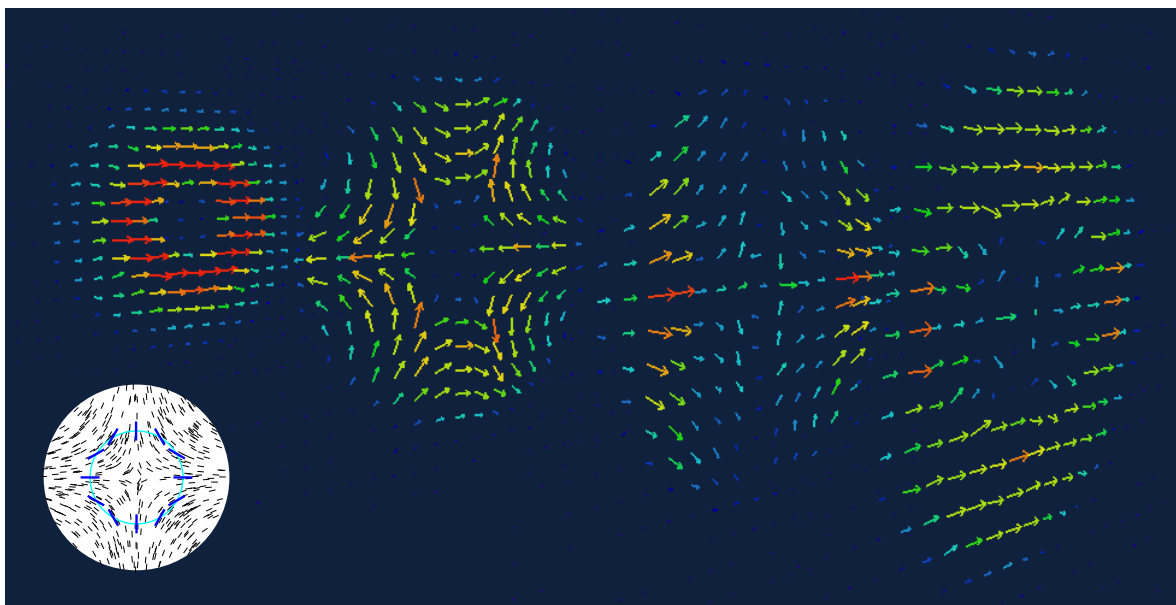
Na sliki je dobro vidno izmenjevanje konfiguracij električnega polja z ovojnima številoma $s = 0$ in $s = +2$. Zaradi razlike v hitrosti propagacije se na nekaterih mestih v vlaknu oba valovna načina z ovojnim številom $+1$ seštejeta, na drugih pa odštejeta. Rezultati nakazujejo, da se podobno zgodi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

7.2 Hiperbolični profil direktorja

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



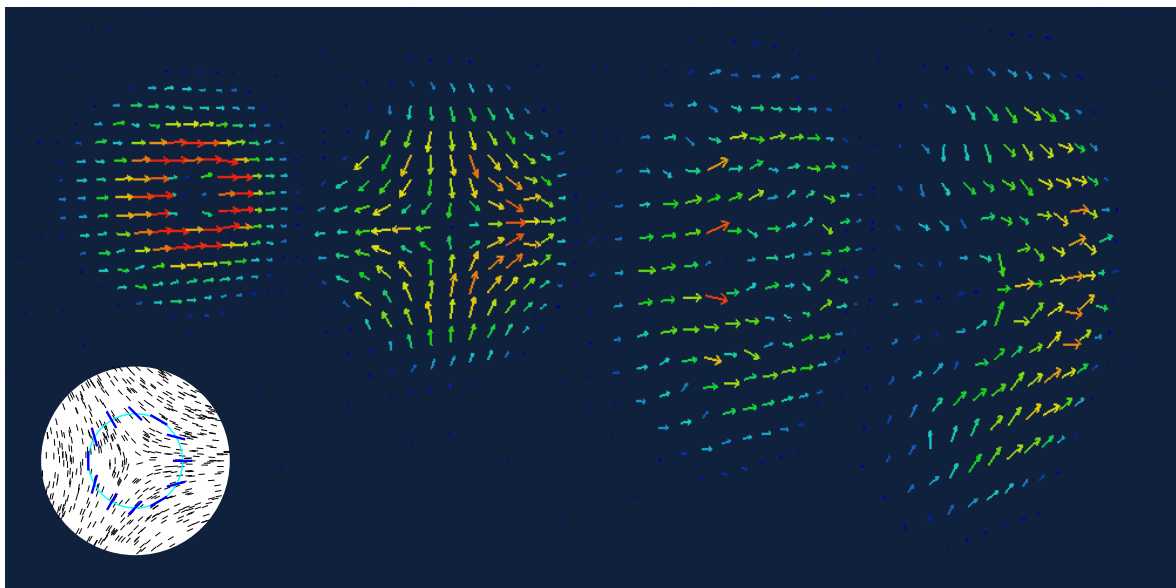
Slika 7.1 Posnetki električnega polja na različnih mestih znotraj vlakna z radialnim direktorskim profilom ob stalni osvetlitvi. Vidno je izmenjevanje konfiguracij z ovojnima številoma $s = 0$ in $s = +2$.



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

7.3 Defekti z necelo močjo

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



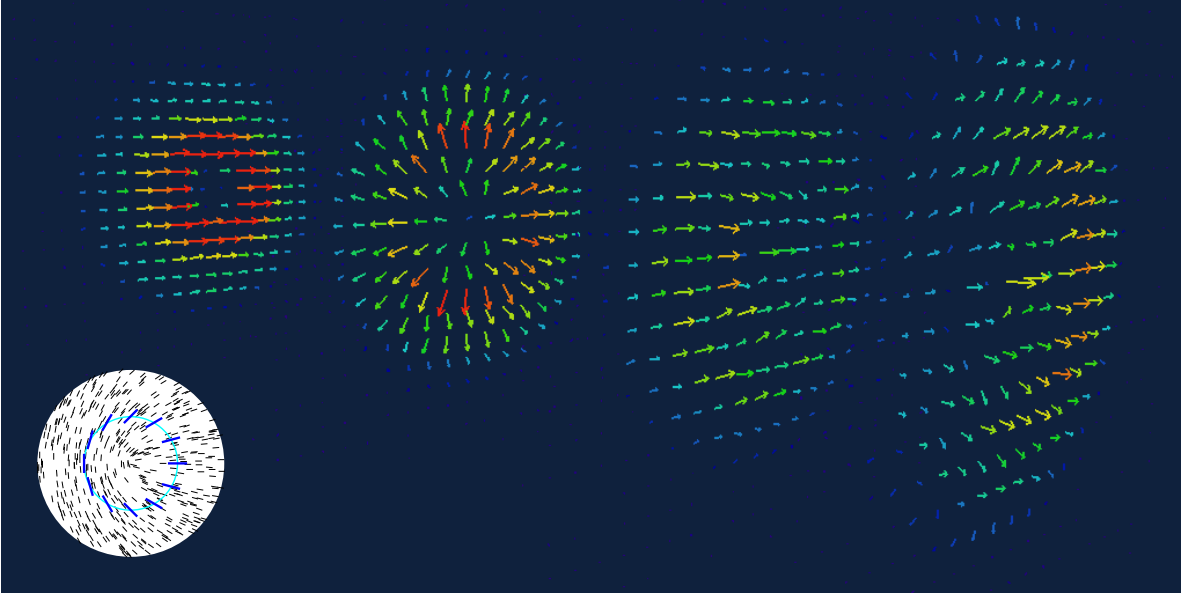
Slika 7.3 Posnetki električnega polja na različnih mestih znotraj vlakna z direktorskim profilom z defektom moči $-1/2$ ob stalni osvetlitvi. Vidno je izmenjevanje konfiguracij z ovojniloma številoma $s = 0$ in $s = -1$.

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

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

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

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



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

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

7.4 Radialno polarizirana svetloba

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

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

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

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

in valovne dolžine svetlobe lahko izračunamo optimalno dolžino vlakna kot

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

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

8

Zaključek

9

Literatura

- [1] P. G. de Gennes in J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals, Second Edition*. Oxford University Press (1995).
- [2] P. Yeh in C. Gu, *Optics of Liquid Crystal Displays*. Wiley (2010).
- [3] D. Kleman in O. D. Lavrentovich, *Soft Matter Physics: An Introduction*. Springer (2003).
- [4] L. D. Landau in E. M. Lifšic, *Electrodynamics of Continuous Media*. Butterworth-Heinemann (1984).
- [5] John Hiatt, Reliability Physics Symposium, 1981. 19th Annual, 130–133 (1981).
- [6] M. Humar in I. Mušević, Opt. Express **18**, 26995–27003 (2010).
- [7] H. Coles in S. Morris, Nat. Photonics **4**, 676–685 (2010).
- [8] M. Stalder in M. Schadt, Opt. Lett. **21**, 1948–1950 (1996).
- [9] S.-W. Shih-Wei Ko, C.-L. Ting, A. Y.-G. Fuh in T.-H. Lin, Opt. Express **18**, 3601–3607 (2010).
- [10] D. W. Berreman, J. Opt. Soc. Am. **62**, 502–510 (1972).
- [11] S Stallinga, J. Appl. Phys. **85**, 3023 (1999).
- [12] A. Taflove in S. C. Hagness, *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*. Artech House (2005).
- [13] D. K. Hwang in A. D. Rey, Applied Optics **44**, 4513–4522 (2005).
- [14] http://barrett-group.mcgill.ca/tutorials/liquid_crystal/LC02.htm (Našpletu; dostopano 7. 8. 2013).
- [15] N. D. Mermin, Rev. Mod. Phys **51**, 591–648 (1979).

- [16] https://en.wikipedia.org/wiki/Liquid_crystal (Na spletu; dostopano 19. 11. 2012).
- [17] Simon Čopar, *Topologija in geometrija defektov v ograjenem nematiku*, (2012).
- [18] M. Ravnik in S. Žumer, *Liq. Cryst.* **36**, 1201–1214 (2009).
- [19] K. Peddireddy, P. Kumar, S. Thutupalli, S. Herminghaus in C. Bahr, *Langmuir* **28**, 12426–12431 (2012).
- [20] <https://en.wikipedia.org/wiki/Birefringence> (Na spletu; dostopano 1. 8. 2013).
- [21] https://en.wikipedia.org/wiki/Gaussian_beam (Na spletu; dostopano 29. 7. 2013).
- [22] E. Brasselet, N. Murazawa, H. Misawa in S. Juodkasis, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 103903 (2009).
- [23] Etienne Brasselet, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 087801 (2012).
- [24] K. Yee, *IEEE T. Antenn. Propag.* **14**, 302–307 (1966).
- [25] http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/Yee_lattices (Na spletu; dostopano 27. 4. 2013).
- [26] J.-P. Berenger, *J. Comput. Phys.* **114**, 185–200 (1994).
- [27] E. Hecht, *Optics*. Addison-Wesley Longman (2002).
- [28] L. Novotny in B. Hecht, *Principles of Nano-Optics*. Cambridge University Press (2006).
- [29] J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, J. N. Winn in R. D. Meade, *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light (Second Edition)*. Princeton University Press (2011).
- [30] N. Engheta in R.W. Ziolkowski, *Metamaterials: Physics and Engineering Explorations*. Wiley (2006).
- [31] Q Zhan, *Opt. Express* **12**, 3377–3382 (2004).
- [32] R. Dorn, S. Quabis in G. Leuchs, *Phys. Rev. Lett.* **91** (2003).