

UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO
ODDELEK ZA FIZIKO
Fizika in geofizika, fizika kondenzirane snovi

Jaka Pišljar

Simulacije vodenja svetlobe skozi dvojno-zviti cilinder

Magistrsko delo

MENTOR\ICA: doc. dr., Miha Ravnik

Ljubljana, 2017

Zahvala

Na tem mestu zapišite, komu se zahvaljujete za pomoč pri nastanku magistrskega dela.

Izvleček

Kratek izvleček v slovenskem jeziku.

Ključne besede:

PACS:

Abstract

Kratek izvleček v angleškem jeziku.

Keywords:

PACS:

Kazalo

Seznam slik	11
Seznam tabel	13
1 Uvod	15
2 Teoretični uvod	17
2.1 Opis elektromagnetnega valovanja	17
2.2 Ravni valovi in tenzor dielektrične permitivnosti	18
2.3 Svetlobni snopi	20
2.3.1 Vektorski snopi svetlobe	22
2.4 Tekoči kristali	23
2.4.1 Nematiki	24
2.4.2 Prosta energija nematikov	25
2.4.3 Širjenje svetlobe v nematikih	29
2.4.4 Holesteriki in modre faze	30
3 Računska metoda	35
3.1 Metoda končnih diferenc v časovni domeni	36
3.1.1 Yeejev algoritem	37
3.1.2 Izvori valovanja in robni pogoji	40
3.1.3 Stabilnost	41
3.1.4 Naša implementacija	42
4 Rezultati	45
4.1 Lečenje na DTC nematskem profilu	45
4.1.1 Cilindrično lečenje	48
4.2 Vodenje svetlobe	48
4.2.1 Vodenje svetlobe v zakriviljenem profilu	48
4.3 Vodenje svetlobe v modrih fazah	49
5 Zaključek	51
Literatura	53
Dodatek A Dodatek 1	57
A.1 Izračun odvodov na naši mreži	57

Seznam slik

2.1	<i>a.) Površini konstantnega \mathbf{k} v primeru običajnega in neobičajnega lomnega količnika. b.) Elipsi v primeru, ko ima \mathbf{k} le x in z neničelni komponenti. Lomna količnika lastnih načinov sta določena s presečiščem vektorja \mathbf{k} z obema elipsama – n_o in $n(\theta)$, kjer je θ označeni kot med optično osjo ter vektorjem \mathbf{k}.</i>	19
2.2	<i>Intenzitetni profile Gaussovega snopa ter njegov vzdolžni profil z označenimi ključnimi parametri Gaussovih snopov kot so širina grla w_0, Rayleigheva razdalja z_R ter divergenca snopa Θ. S črtkanimi črtami je prikazana tudi zakrivljenost valovnih front.</i>	21
2.3	<i>Intenzitetni profila dveh Laguerre-Gaussovih snopov z ($p = 0, l = 1$) ter ($p = 2, l = 1$).</i>	22
2.4	<i>Vektorska snopa svetlobe z radialno in azimutalno polarizacijo in intenzitetnim profilom osnovnega Laguerre-Gaussovega snopa ($p = 0, \ell = 1$).</i>	22
2.5	<i>Nematska, smektična, holesterična ter stebričasta faza tekočih kristalov. Pri nematski fazji je prisoten zgolj orientacijski red molekul medtem ko pri ostalih fazah opazimo tudi prostorski red v eni (b.), c.) ali dveh dimenzijah (c.). Vir slike:[33]</i>	23
2.6	<i>Tipičen primer molekule, ki sestavlja snov z nematsko tekočekristalno fazo. Molekula ima podolgovato obliko z daljšo osjo dolgo $\approx 20\text{\AA}$ ter kraje dolgo $\approx 5\text{\AA}$.</i>	24
2.7	<i>a.) Prosta energija f_{NI} v odvisnosti od ureditvenega parametra S za tri različne temperature v okolini temperature faznega prehoda T_{NI}. b.) Nematski red S v odvisnosti od reducirane temperature τ v nematski fazji. Ko $\tau = 1$ pri temperaturi T_{NI} ima S nezvezzen skok. Vir slike:[32]</i>	27
2.8	<i>Tri osnovne deformacije v nematiku: pahljačasta deformacija, zvijanje in upogibanje direktorja.</i>	27
2.9	<i>Dvojno-zviti cilinder ter en sloj iz ptičje perspektive.</i>	31
2.10	<i>Možna tipa defektov določena z lokalno smerjo vrtenja direktorja v udeleženih cilindrih. Na levi je prikazan defekt z nabojem $s = 1/2$ na desni pa z $s = 1$. Vir slike:</i>	32
2.11	<i>Shematski prikaz osnovne celice tipov modrih faz BP I (FCC mreža) ter BP II (SC mreža). Z modro barvo so prikazani dvojno zviti cilindri z rdečo pa defektne linije. Vir slike:</i>	32
3.1	<i>a.) Prikaz zamknjenih polj v primeru enodimensionalnega EM vala. b.) Yeejeva mreža za metodo FDTD v treh dimenzijah. Vir slik: [18, 49]</i>	38

3.2	a.) Nadgradnja Yeejeve mreže, ki smo jo uporabljali v naši implementaciji metode FDTD. Slika prikazuje, da čeprav položaji točk ostajajo enaki, so za razliko od Yeejeve mreže tu vse komponente polj shranjene v vsaki točki. b.) Primer izračuna $\partial\mathbf{E}/\partial x$. Z rdečimi pikami so označeni položaji kjer je shranjen \mathbf{E} , s puščicami kjer so izračunani posamezni odvodi po x , z modro piko pa mesto kjer odvod zares potrebujemo in kjer je definiran \mathbf{H} . Vir slik: [18]	39
3.3	a.) Ovisnost napake v fazi v 3D k-prostoru, kjer opazimo, da numerična disperzija pripelje do močne anizotropije. Valovanje, ki se širi vzdolž ene izmed diagonalnih smeri bo na svoji poti pridobilo manjšo napako v fazi kot pa valovanje vzdolž ene izmed glavnih osi. b.) Ovisnost fazne napake od azimutalnega kota za tri različne vrednosti prostorske diskretizacije Δ . Uporabljena je logaritemska skala. Vir slik: [47]	42
4.1	a.) Elipsoid z dolžinama polosi n_e ter n_o , kjer $n_o < n_e$, ter valovni vektor \mathbf{k} svetlobe, ki predstavlja smer v kateri svetloba potuje, ter skušaj s polarizacijo določa lomni količnik. b.) Ovisnost lomnega količnika v preseku dvojno zvitega cilindra za negativno dvolomen nematik. Prikazana je tudi ena plast DTC profila.	46
4.2	Primerjava faznega zamika, ki ga povzroči običajna steklena leča v primerjavi z zamikom, ki ga na azimutalno polariziranem snopu, povzroči DTC profil debeline d	47
4.3	Simulacije lečenja svetlobe na DTC nematskem profilu debeilne $d = 7.5 \mu\text{m}$ za različne vstopne širine snopa w_0 . Prikazani so yz prerezi v sredini snopa, svetloba pa na vseh slikah potuje v desno, v smeri osi z	47
4.4	Profili širine treh snopov z različno vstopno širino vzdolž osi z . Položaja, kjer se končata DTC nematska profila debelin $d = 3.75 \mu\text{m}$ ter $d = 7.5 \mu\text{m}$ sta označena z zeleno in rdečo navpično črtkano črto.	48
4.5	Spreminjanje profila lomnega količnika vzdolž osnovne celice v z smeri. S črno črto na sredini, je označeno mesto, kjer smo združili dve osnovni celici BPII.	49

Seznam tabel

4.1 <i>Lastnosti celice, žarka ter nematskega profila uporabljene v osnovnih simulacijah lečenja na DTC nematskem profilu.</i>	47
--	----

Poglavlje 1

Uvod

Svetloba je pomembna. Sončna svetloba je energijski vir, ključen za razvoj življenja na Zemlji, dandanes pa se vse več naporov usmerja v razvoj materialov za učinkovito pretvarjanje svetlobe v električno energijo. Praktično v vseh znanstvenih panogah najdemo eksperimente ali eksperimentalne metode, ki izkoriščajo lastnosti svetlobe, dober primer je potrditev obstoja gravitacijskih valov, ki so jih zaznali s pomočjo 4 km dolgega interferometra[2]. Na kemijskem, biološkem ter medicinskim področju je ključen razvoj optične mikroskopije, ki omogoča opazovanje pod difrakcijsko limito [3] ter novih načinov slikanja, ki na primer omogočajo slikanje ultrahitrih procesov[4]. V industriji lasersko svetlobo že desetletja izkoriščajo za obdelavo materialov: poliranje, rezanje, varjenje *itn.* Verjetno najbolj razširjena uporaba svetlobe pa je za hitro *komunikacijo* po celi svetu prek optičnih vlaken[1].

Veliko raziskav na področju fotonike in optike je usmerjene tudi v materiale z zanimivimi ali neobičajnimi optičnimi lastnostmi, kot so (elektromagnetni) *metamateriali*. To so umetno pripravljeni materiali, ki jih v naravi ne najdemo, pri njihovem nastanku pa gre za krojenje periodičnih struktur iz običajnih materialov, na razdaljah običajno veliko krajših od valovne dolžine svetlobe. Največ zanimanja so bili deležni metamateriali z negativnim lomnim količnikom[5, 7] ter takšni, ki omogočajo maskiranje pred elekromagnetnimi valovi[8, 9].

Tehnološko čedalje bolj zanimiva stvar na področju fotonike pa so tudi *fotonska vezja*. Sestavlja jih serija optičnih vlaken prepletenih z optičnimi ter občasno tudi elektronskimi elementi s katerimi izvajamo logične operacije[10]. Zaradi potencialno hitrejšega pretoka informacij v in med vezji računalniški velikani kot sta IBM ter Intel veliko vlagata v raziskave teh vezij na osnovi silicija[11]. K razvoju teh vezij je pripomogel razvoj različnih optičnih elementov, ki jih sicer poznamo iz elektronskih vezij kot so fotonska stikala[12], logična vrata[13] ter optični tranzistorji[14].

Tekoči kristali so že desetletja osnova za delovanje zaslonov raznovrstnih elektronskih naprav, osnovanih na principu preurejanja tekočega kristala ob odzivu na zunanje električno polje, ki pomeni spremembo optičnih lastnosti prepuščene svetlobe[16]. V fiziki tekočih kristalov pa se zadnja leta pozornost vse bolj usmerja k uporabi tekočih kristalov v fotoniki in fotonskih vezjih[15]. Zanimivo področje so tekočekristalni laserji, ki temeljijo na osnovi periodičnosti tekočega kristala in obstoju vrzeli, prepovedanega pasu v kiralnih tekočih kristalih, ki preprečuje širjenje

Poglavlje 1. Uvod

svetlobe določenih valovnih dolžin[17].

Poglavlje 2

Teoretični uvod

2.1 Opis elektromagnetnega valovanja

Elektromagnetno valovanje opišemo s setom štirih Maxwellovih enačb, ki jih v snovi zapišemo kot

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_e \quad \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (2.1a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad \nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad (2.1b)$$

kjer sta \mathbf{E} in \mathbf{H} električno in magnetno polje svetlobe, \mathbf{D} in \mathbf{B} pa njuni gostoti. ρ_e in \mathbf{j} sta električni naboj in gostota električnega toka v snovi, in predstavljata izvora elektromagnetnih polj[20]. Ker nas bodo zanimali zgolj primeri ko v snovi ni izvorov bo $\rho_e = \mathbf{j} = 0$. Polji in njuni gostoti v snovi med seboj povezujeta *konstitutivni relaciji*, ki jih v *linearnih materialih* zapišemo kot

$$\mathbf{D} = \epsilon \epsilon_0 \mathbf{E} \quad \mathbf{B} = \frac{1}{\mu \mu_0} \mathbf{H}, \quad (2.2)$$

kjer sta ϵ_0 ter μ_0 *električna permitivnost* ter *magnetna permeabilnost* vakuuma, ϵ in μ pa permitivnost in permeabilnost snovi, parametra ki sta v splošnem krajevno, časovno, v disperzivnih materialih tudi frekvenčno odvisna, ter opisujeta odziv snovi na električno oziroma magnetno polje. Tipično je v tekočih kristalih odziv na magnetno polje zanemarljiv in $\mu = 1$. Kot pa bomo spoznali, je ključna lastnost, ki loči tekoče kristale od tekočin njihova *anizotropna faza*, kjer je dielektrična permitivnost (oziora kraje *dielektričnost*) ϵ ne le funkcija koordinat, pač pa je odvisna tudi od lokalne smeri \mathbf{E} : to je *tenzorska* količina, ki jo v splošnem opišemo s 3×3 matriko s šestimi neodvisnimi komponentami[20].

Skupaj s konstitutivnima relacijama so enačbe 2.1 medsebojno sklopljene, zato jih lahko še nekoliko preoblikujemo, če $\nabla \times$ pomnožimo z enačbo (2.1) ter upoštevamo vektorsko relacijo

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E}. \quad (2.3)$$

Ob prejšnjih predpostavkah brezizvornega $\rho_e = \mathbf{j} = 0$ in $\mu = 1$ dobimo

$$\nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E} = -\frac{\partial}{\partial t} \left(\nabla \times \frac{\mathbf{H}}{\mu_0} \right). \quad (2.4)$$

Poglavlje 2. Teoretični uvod

Sedaj na desni strani upoštevamo relacijo med \mathbf{D} in \mathbf{E} , na desni pa moramo biti previdni, saj je v nehomogenih snoveh $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{r})$ in torej iz enačbe 11a sledi

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \nabla \cdot (\varepsilon(\mathbf{r})\varepsilon_0 \mathbf{E}) = \varepsilon_0 (\nabla \varepsilon \cdot \mathbf{E} + \varepsilon \nabla \cdot \mathbf{E}) = 0, \quad (2.5)$$

kar da zvezo

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = -\left(\frac{1}{\varepsilon}\right) \nabla \varepsilon \cdot \mathbf{E}. \quad (2.6)$$

Sedaj lahko iz enačbe (13) dobimo enačbo, ki vsebuje zgolj \mathbf{E}

$$\nabla^2 \mathbf{E} + \nabla \left(\frac{1}{\varepsilon} \nabla \varepsilon \cdot \mathbf{E} \right) - \mu_0 \varepsilon_0 \varepsilon \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0. \quad (2.7)$$

Na tem mestu napravimo prvi približek, ko predpostavimo, da se funkcija $\varepsilon(\mathbf{r})$ spreminja počasi na razdaljah primerljivih z valovno dolžino svetlobe.¹ Takrat je drugi člen v enačbi (2.7) zanemarljiv v primerjavi s prvim in lahko zapišemo valovno enačbo

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \frac{1}{c^2(\mathbf{r})} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0, \quad (2.8)$$

kjer je $c(\mathbf{r}) = 1/\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0 \varepsilon} = c_0/n(\mathbf{r})$ lokalna *hitrost svetlobe* in $n(\mathbf{r}) = \sqrt{\varepsilon(\mathbf{r})}$ *lomni količnik* na mestu \mathbf{r} [19].

Zanimajo nas rešitve valovne enačbe za \mathbf{E} , ki imajo konstantno frekvenco ω in se širijo v določeni smeri. Takšne *monokromatske* elektromagnetne valove opisujeta naslednji krajevno-časovni odvisnosti svetlobnih polj

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}) e^{i\omega t} \quad (2.9)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{B}(\mathbf{r}) e^{i\omega t}, \quad (2.10)$$

kjer je $\omega = 2\pi\nu$ krožna frekvanca svetlobe [19].

2.2 Ravni valovi in tenzor dielektrične permitivnosti

Ena izmed najenostavnnejših rešitev valovne enačbe so ravni valovi. V tem primeru kompleksni vektor električnega polja $\mathbf{E}(\mathbf{r})$, ki nastopa v enačbi (2.9) zapišemo kot

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad (2.11)$$

kjer je \mathbf{E}_0 konstantni vektor amplitude električnega polja v ravnem valu, \mathbf{k} pa valovni vektor z amplitudo $k = |\mathbf{k}|$. Podobno velja za magnetno polje 2.10. V tem primeru velja $\nabla \times \mathbf{E} = i\mathbf{k} \times \mathbf{E}$ in $\partial \mathbf{E} / \partial t = -i\omega \mathbf{E}$. Če slednje uporabimo za zapis vektorske valovne enačbe za \mathbf{E} dobimo

$$\mathbf{k} \times (\mathbf{k} \times \mathbf{E}) = -\omega^2 \mu_0 \mathbf{D} \quad (2.12)$$

¹V nematskih profilih s katerimi imamo opravka, se, spremembe velikosti nekaj odstotkov $n(\mathbf{r}) = \sqrt{\varepsilon(\mathbf{r})}$ tipično zgodijo na razdaljah nekaj mikronov, tipična valovna dolžina svetlobe pa je $\lambda = 390\text{nm}$.

2.2. Ravni valovi in tenzor dielektrične permitivnosti

oziroma ob uporabi konstitutivne relacije $\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}$

$$\mathbf{k} \times (\mathbf{k} \times \mathbf{E}) + \omega^2 \mu_0 \varepsilon \mathbf{E} = 0. \quad (2.13)$$

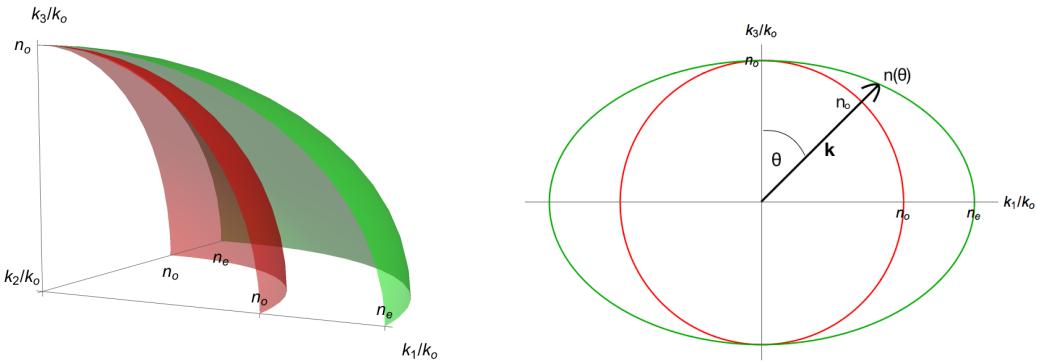
To je vektorska enačba za \mathbf{E} in se prevede na tri linearne enačbe, ki jih morajo zadostiti komponente $\mathbf{E} = (E_1, E_2, E_3)$, kar lahko v matrični obliki zapišemo kot

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{11}k_o^2 - k_2^2 - k_3^2 & k_1k_2 & k_1k_3 \\ k_2k_1 & \varepsilon_{22}k_o^2 - k_1^2 - k_3^2 & k_2k_3 \\ k_3k_1 & k_3k_2 & \varepsilon_{33}k_o^2 - k_1^2 - k_2^2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

Tu je $k_o = \omega/c_0$ in ε_{ii} diagonalne vrednosti ε_{ij} zapisanega v lastnem koordinatnem sistemu. Nadalje velja, da je lomni količnik $n_i = \sqrt{\varepsilon_{ii}}$. Če izračunamo determinanto gornje matrike dobimo rezultat, ki da $\omega = \omega(k_1, k_2, k_3)$ in predstavlja dve centrosimetrični površini v k -prostoru. Površini sta določeni z vrednostmi n_i in njuni presečišči določajo optične osi v materialu. To si oglejmo na primeru bolj enostavnega enoosnega kristala, kjer naj velja $n_1 = n_2 = n_o$ in $n_3 = n_e$. Tedaj pogoj za ničelno determinanto razпадa na

$$(k^2 - n_o^2 k_o^2) \left(\frac{k_1^2 + k_2^2}{n_e^2} + \frac{k_3^2}{n_o^2} - k_o^2 \right) = 0. \quad (2.15)$$

Enačba predstavlja dve površini: levi faktor predstavlja sfero z $k = n_o k_o$ desni pa elipsoid z dvema polosema n_o in n_e . Del površin in njuno presečišče, ki sedaj določa eno samo optično os (smer z), je prikazano na Sliki 2.1a. Če privzamemo, da \mathbf{k} vektor svetlobe leži v ravnini xz ter oklepa kot θ z optično osjo presečišče tega vektorja z obema krivuljama določa *lastne načine* oziroma dovoljene velikosti valovnega števila k v tem materialu: redni in izredni način[19]. To je prikazano na Sliki 2.1b.



Slika 2.1: **a.)** Površini konstantnega \mathbf{k} v primeru običajnega in neobičajnega lomnega količnika. **b.)** Elipsi v primeru, ko ima \mathbf{k} le x in z neničelni komponenti. Lomna količnika lastnih načinov sta določena s presečiščem vektorja \mathbf{k} z obema elipsama – n_o in $n(\theta)$, kjer je θ označeni kot med optično osjo ter vektorjem \mathbf{k} .

Iz Slike 2.1b vidimo, da ima redni način ne glede na kot θ valovno število $k = n_o k_o$ medtem ko ima izredni način $k = n(\theta) n_o$, kjer je

$$\frac{1}{n^2(\theta)} = \frac{\cos^2 \theta}{n_o^2} + \frac{\sin^2 \theta}{n_e^2}. \quad (2.16)$$

Vsak lastni način določa tudi njemu lastno polarizacijo! Iz konstrukcije namreč lahko sklepamo, da ima svetloba, ki se razširja vzdolž lastne osi z ne glede na kot polarizacije lomni količnik n_o . Če se svetloba širi v vzdolž osi x je polarizirana v ravnini yz . Tam ima lomni količnik n_o , če je polarizirana vzdolž osi y ali n_e , če je polarizirana v smeri optične osi: to sta lastni polarizaciji za redni in izredni način v tem primeru. V primeru, ko pa ima polarizacija poljubno smer v ravnini yz takšna polarizacija razпадa na polarizaciji lastnih načinov[19]. Ti dve se zaradi razlike v lomnih količnikih gibljeta z različnima hitrostma, zato sta po prepotovanju razdalji d lastni komponenti medsebojno fazno zamaknjeni za

$$\varphi = \varphi_o - \varphi_e = k_o(n_o - n_e)d. \quad (2.17)$$

Splošneje, v primeru, ko se svetloba giblje v poljubni smeri, ki oklepa kot θ z optično osjo poljubna polarizacija v ravnini pravokotni na to smer razпадa na lastni polarizaciji, ki občutita lomna količnika n_o in $n(\theta)$ in fazni zamik je

$$\varphi = \varphi_o - \varphi_e = k_o(n_o - n(\theta))d. \quad (2.18)$$

2.3 Svetlobni snopi

Zgoraj opisani ravni valovi, so zgolj matematična rešitev v kateri se valovne fronte raztezajo v neskončnost in se s časom ne spreminja. Tega v naravi ne opazimo, vendar pa koncept vseeno dobro služi pri opisu nekaterih lastnosti svetlobe, na primer dvolomnosti, kot smo pokazali v prejšnjem poglavju. Rešitve valovne enačbe, ki so za nas bolj zanimive pa so prostorsko omejene in s prepotovano razdaljo ali s časom spreminja svojo obliko. To so *svetlobni snopi*, ki jih ponavadi povezujemo z laserji. Osnovni snop, ki ga spoznamo pri študiju laserjev je *Gaussov snop*, ki ga matematično opišemo tako, da predpostavimo smiselen nastavek snopa svetlobe, ki se razširja vzdolž osi z ampak je prostorsko omejen v transverzalni ravnini xy v kateri leži tudi njegova polarizacija

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = E_0 \mathbf{e}_\perp U(\mathbf{r}) e^{ikz-i\omega t}, \quad (2.19)$$

kjer je E_0 konstantna amplituda, $U(\mathbf{r})$ pa amplitudna funkcija odvisna od vseh treh koordinat, \mathbf{e}_\perp pa enotski vektor v xy ravnini. Ob predpostavki, da se amplituda U spreminja počasi vzdolž koordinate z ² vstavimo nastavek v valovno enačbo za \mathbf{E} dobimo *skalarno* obosno Helmholtzevo enačbo za amplitudo $U(\mathbf{r})$

$$\nabla_T^2 U + 2ik \frac{\partial U}{\partial z} = 0. \quad (2.20)$$

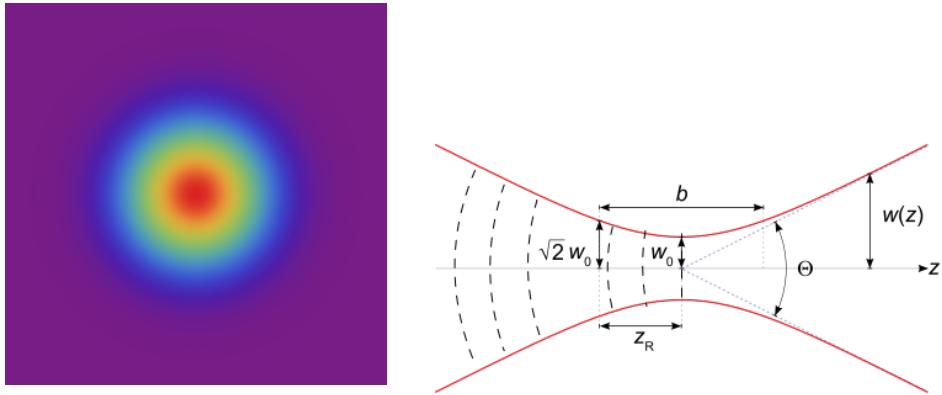
Osnovna rešitev te enačbe v kartezični geometriji je Gaussov snop, z amplitudo

$$U(\mathbf{r}) = \frac{w_0}{w(z)} \exp\left(-\frac{\rho^2}{w(z)^2}\right) \exp\left(-ik\frac{\rho^2}{2R(z)}\right) \exp(i\eta(z)), \quad (2.21)$$

kjer je w_0 polmer v grlu, najbolj ozkem delu snopa, $w(z)$ polmer snopa na koordinati z , z izhodiščem v grlu, $\rho^2 = x^2 + y^2$, $R(z)$ krivinski radij valovnih front na mestu z , $\eta(z) = \text{arctg}(z/z_0)$ pa t.i. Gouyeva faza, ki predstavlja od koordinate z

²V izpeljavi predpostavimo, da $\frac{\partial^2 U}{\partial z^2} \ll \frac{\partial U}{\partial z}$ in tako $\nabla^2 \rightarrow \nabla_T^2$.

odvisni dodatek k običajni fazi ikz ravnih valov.. Struktura rešitve 2.21 je produkt treh eksponentnih funkcij, ki po vrsti opisujejo Gaussovsko amplitudo žarka v transverzalni smeri, zakriviljenost valovnih front ter dodatni fazni zamik v Gaussovem snopu[19]. Intenzitetni profil Gaussovega snopa za nek z je prikazan na Sliki 2.2a njegov profil vzdolž osi z pa na Sliki 2.2b.



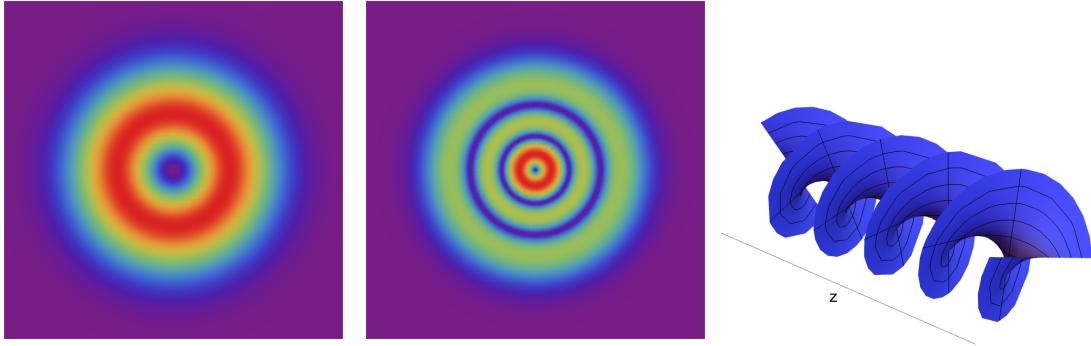
Slika 2.2: *Intenzitetni profile Gaussovega snopa ter njegov vzdolžni profil z označenimi ključnimi parametri Gaussovih snopov kot so širina grla w_0 , Rayleighova razdalja z_R ter divergenca snopa Θ . S črtkanimi črtami je prikazana tudi zakriviljenost valovnih front.*

Poleg Gaussovega snopa svetlobe, moramo omeniti še rešitve enačbe 2.20 v cilindrični geometriji, saj bodo pomembne v nadaljevanju. Ko za izračun uporabimo cilindrično verzijo ∇_T^2 dobimo t.i. *Laguerre-Gaussov snop*, rešitev za U odvisno od radija ρ , azimutalnega kota ϕ ter z

$$U(\rho, \phi, z) = \left(\frac{\rho}{w(z)} \right)^{|\ell|} \frac{w_0}{w(z)} L_p^\ell \left(2 \frac{\rho^2}{w(z)^2} \right) \exp \left(-\frac{\rho^2}{w(z)^2} - \text{i}k \frac{\rho^2}{2R(z)} - \text{i}\eta_{p\ell}(z) \right) \exp[-\text{i}\ell\phi]. \quad (2.22)$$

Tu so L_p^ℓ pridruženi Laguerrovi polinomi, $\eta_{p\ell} = (2p + \ell + 1) \arctg(z/z_0)$ pa poplošena Gouyeja faza. Izraz 2.22 je zapleten, zato omenimo le nekaj pomembnih lastnosti. Različni redi rešitev so opisani z različnima vrednostima ℓ in p . Vrednosti p določajo koliko ničel ima Laguerre-Gaussov polinom in zato tudi koliko intenzitetnih minimumv bo imel tak žarek. $\ell = p = 0$ pa vrne izraz ???. Ko $\ell \neq 0$ ima zaradi prvega faktorja intenzitetni profil takega žarka ničelno intenziteto pri $\rho = 0$. To je prikazano na Slikah 2.3a ter 2.3b, kjer sta prikazana dva intenzitetna profila Laguerre-Gaussovih snopov. Zadnji faktor v izrazu (2.22) je t.i. vrtinčna faza (*vortex phase*) $e^{i\ell\phi}$, ki pomeni, da se *faza* električnega polja linearno povečuje z azimutalnim kotom $\phi = \arctg(y/x)$, ℓ pa določa za kakšen večkratnik 2π se faza spremeni ob enem obratu. To pomeni, da se valovna fronta žarka spiralno suče okoli osi z , kar daje Laguerre-Gaussovim snopom vrtilno količino[19].

V gornjem nastavku 2.19 smo predpostavili *homogeno* polarizacijo, pravokotno na smer žarka, kar je enačbe prevedlo na skalarno obliko. Nas pa bodo zanimale drugačne rešitve, takšne kjer dovolimo, da se polarizacija spreminja s koordinatama x in y .



Slika 2.3: Intenzitetni profili dveh Laguerre-Gaussovih snopov z ($p = 0, l = 1$) ter ($p = 2, l = 1$).

2.3.1 Vektorski snopi svetlobe

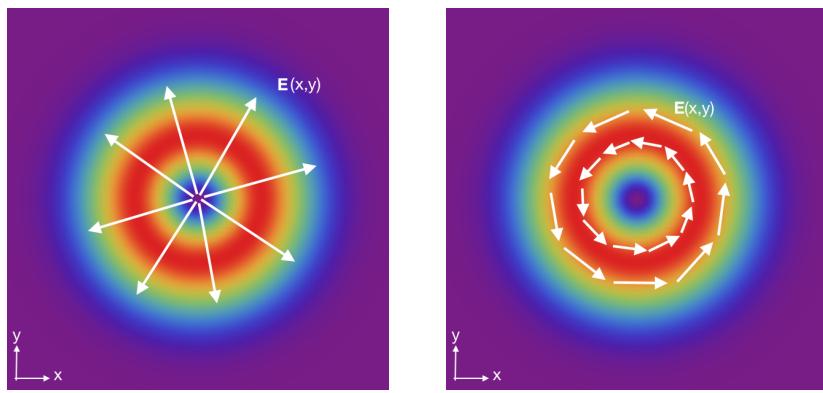
V cilindrični geometriji, lahko poskušamo najti rešitve *vektorske* valovne enačbe

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} - k^2 \mathbf{E} = 0 \quad (2.23)$$

z nastavkom *azimutalne* polarizacije

$$\mathbf{E}(\rho, z) = U(\rho, z) e^{i(kz - \omega t)} \mathbf{e}_\phi, \quad (2.24)$$

kjer ima polarizacija v vsaki točki (ρ, ϕ, z) azimutalno usmeritev $\mathbf{e}_\phi \perp \mathbf{e}_r$. V tem primeru, ima magnetno polje svetlobe \mathbf{H} v vsaki točki radialno smer. Obratna rešitev je t.i. *radialna polarizacija*, kjer električno polje povsod kaže radialno navzven v smeri \mathbf{e}_r . Že iz nastavka sledi, da v sredini takšnega snopa polarizacija nima definirane smeri zato ima tudi ta profil tam intenzitetno ničlo. Izkaže se, da je amplituda $U(\rho, \phi, z)$ takšnih žarkov enaka Laguerre-Gaussovi 2.22 z $\ell > 0$, a v osnovi brez dodanega vrtičnega faktorja[21]. Primera takšnih dveh rešitev sta prikazana na Sliki 2.4a ter 2.4b.



Slika 2.4: Vektorska snopa svetlobe z radialno in azimutalno polarizacijo in intenzitetnim profilom osnovnega Laguerre-Gaussovega snopa ($p = 0, \ell = 1$).

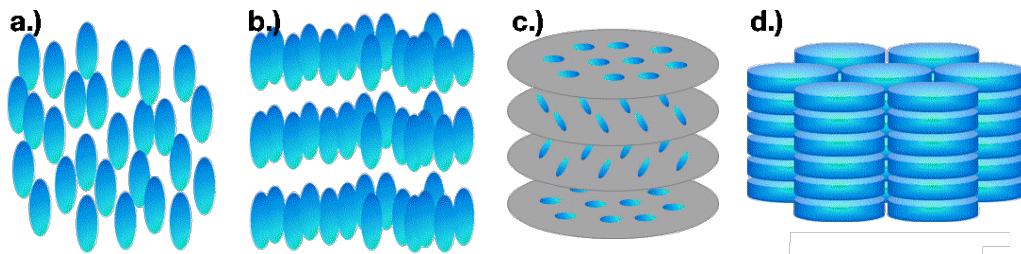
Opisane snope, kjer se smer polarizacije spreminja v odvisnosti od transverzalnih koordinat x in y , oziroma ρ ter ϕ imenujemo *vektorski snopi svetlobe*. Ena izmed zanimivih lastnosti radialno polariziranega snopa je, da ga je z lečo z veliko numerično

aperturo mogoče zbrati v precej manjši presek ($0.16\lambda^2$) pravilne oblike kot pri linearно polariziranih snopih ($0.26\lambda^2$), kjer se pri močnem fokusiranju žarek popači in trči ob teoretično limito. Ta lastnost je posledica dejstva, da se pri močnem fokusiranju pojavijo neničelne *longitudinalne* komponente električnega polja E_z , vzporedne z smerjo širjenja, ki pri linearno polariziranih snopih niso radialno simetrične pri radialno polariziranih vektorskih snopih pa so[22].

Zmožnost močnejšega fokusiranja vektorskih snopov je bila izkoriščena pri lovjenju delcev[22], laserskem rezanju[23] ter optični mikroskopiji[24]. Večinoma jih generirajo iz linearno polariziranih snopov s pomočjo stožičastih Brewsterjevih prizem[25], posebnih optičnih vlaken, ki dovoljujejo le nekaj lastnih načinov[26] ter v zadnjem času vse bolj s pomočjo tekoče kristalnih faznih modulatorjev[27]. Simulacije iz leta 2014 opravljene z metodo, ki jo bomo uporabili tudi v tem delu pa kažejo, da je mogoče vektorske snope svetlobe generirati tudi na nematskih defektnih linijah[28].

2.4 Tekoči kristali

Z imenom *tekoči kristali* poimenujemo snovi pri katerih v nekem temperaturnem območju obstaja vmesna faza med tekočino in trdno snovjo. Takšna faza ima nekatere lastnosti ki so značilne za tekočo fazo, kot je na primer ta, da tečejo in imajo viskoznost ter druge značilne za trdno snov na primer anizotropijo, orientacijsko urejenost molekul v primeru *nematikov* in *holesterikov* ali prostorski red dolgega dosegca v eni ozziroma dveh dimenzijah v primeru, *holesterikov*, *smektičov* in *steberičnih faz*. Shematska primerjava nekaterih tekočekristalnih faz je prikazana na Sliki 2.5.



Slika 2.5: *Nematska, smektična, holesterična ter steberičasta faza tekočih kristalov.* Pri nematski fazi je prisoten zgolj orientacijski red molekul medtem ko pri ostalih fazah opazimo tudi prostorski red v eni (b.), c.)) ali dveh dimenzijah (c.)). Vir slike:[33]

Glede na to na kakšen način pridobimo tekočekristalno fazo, ločimo *termotropne* in *liotropne* tekoče kristale. Pri prvih je ključen parameter s katerim določamo fazo snovi *temperatura* pri drugih pa *konzentracija* molekul, ki tvorijo tekoči kristal. V katero izmed teh dveh skupin nek tekoči kristal spada določa struktura osnovnih gradnikov – za termotropne tekoče kristale so značilne paličaste ali diskaste organske molekule tipičnih dimenzijs $300 \times 20\text{Å}$, medtem ko gre pri liotropnih za daljše paličaste molekule velikosti nekaj $10\mu\text{m}$ v substratu. V tem delu se bomo ukvarjali zgolj s termotropnimi nematiki, ki doživijo fazni prehod iz neurejene izotropne v delno urejeno nematsko fazo pri karakteristični temperaturi T_{NI} . Za lastnosti

termotropnih tekočih kristalov sta ključni kemijska struktura in oblika organskih molekul, ki jih sestavljajo[29].

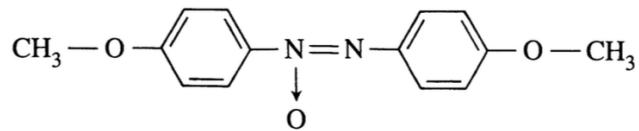
2.4.1 Nematiki

Nematsko fazo tekočega kristala od izotropne tekočine loči orientacijska urejenost molekul na razdaljah, ki so velike v primerjavi z dimenzijo molekul. Medtem ko so v izotropni fazi molekule usmerjene povsem naključno in neodvisno od drugih molekul, lahko v nematikih govorimo o preferirani (lokalni) usmeritvi molekul, ki jo imenujemo *direktor* matematično pa opišemo z enotskim vektorjem $\mathbf{n}(\mathbf{r})$, definiran kot ansambelsko povprečje orientacij posameznih molekul \mathbf{s} v izbranem volumnu. Zaradi simetrije v nematiku velja enakost $\mathbf{n} = -\mathbf{n}$. Nematski red v običajnih nematikih opišemo s t.i. *stopnjo urejenosti* S , ki je mera za termične fluktuacije smeri posameznih molekul \mathbf{s} od smeri direktorja \mathbf{n} in je definirana kot

$$S = \langle P_2(\mathbf{s} \cdot \mathbf{n}) \rangle = \langle P_2(\cos \vartheta) \rangle = \frac{1}{2} \langle 3 \cos^2 \vartheta - 1 \rangle, \quad (2.25)$$

kjer je ϑ kot med \mathbf{s} in \mathbf{n} , P_2 pa drugi Legendrov polinom. Tu moramo za ovrednotenje S uporabiti slednjega, saj najnižji, linearni, red pri povprečenju ne prispeva ničesar $\langle \cos \vartheta \rangle = 0$. Ker $\mathbf{n} = -\mathbf{n}$ lahko ϑ zavzame zgolj vrednosti med 0 in $\pi/2$ zato stopnja urejenosti S leži v intervalu $[-1/2, 1]$. V primeru, da so vse molekule popolnoma poravnane je $\mathbf{s} \parallel \mathbf{n}$ torej $\vartheta = 0$ in zato $S = 1$ čemur rečemo nematska faza. V izotropni fazi so molekule popolnoma naključno usmerjene in porazdelitev molekul po ϑ je uniformna, kar da $S = 0$. V primeru popolne orientacijske ureditve molekul v ravnini pravokotni na direktor je $\vartheta = \pi/2$ in $S = -1/2$.

Orientacijski red je posledica strukture in kemijske sestave nematskih molekul. Tipičen primer molekule, ki jo najdemo v nematikih je prikazan na Sliki 2.6. Kemijsko so to strukture dveh ali več obročastih molekul medsebojno povezane z močnimi vezmi, ter CH skupinami na koncuh. Takšne molekule pogosto primerjamo s trdimi paličicami, saj se težko upogibajo ter so v najbolj preprostih *enoosnih* nematikih invariantne na rotacije okoli dolge osi.



Slika 2.6: *Tipičen primer molekule, ki sestavlja snov z nematsko tekočekristalno fazo. Molekula ima podolgovato obliko z daljšo osjo dolgo $\approx 20\text{\AA}$ ter kraje dolgo $\approx 5\text{\AA}$.*

Tudi *dvolomnost* nematikov je posledica lastnosti molekul iz katerih so sestavljeni. Odziv molekul na električno polje je večji za polja vzporedna osi kot za pravokotna, oziroma $\epsilon_{||}^{mol} > \epsilon_{\perp}^{mol}$. Takšna razlika je posledica delokaliziranosti elektronov v aromatskih obročih, ki jim omogoča več svobode gibanja kot elektronom vezanim na atome in zaradi vezi med njima, je prehajanje elektronov med njima zelo enostavno. Slednje je vzrok za močno anizotropijo v odzivu na električna polja, saj je polarizabilnost molekul v tej smeri višja kot v pravokotnih smereh. Tako je tudi za časovno odvisna polja frekvenc okoli vidnega dela spektra, torej za dielektričnost

in posledično povzroči razliko med lomnima količnikoma običajno in neobičajno polarizirane svetlobe.

Razlike med izotropno in nematsko fazo najdemo v makroskopskih lastnostih takšnih snovi kot je na primer tenzor magnetne susceptibilnosti χ_{ij} ali pa tenzor dielektrične permitivnosti ε_{ij} . Slednji ima v enoosnem nematicu dve različni lastni vrednosti, ki jih bomo določili kasneje medtem ko so v izotropni fazi molekule orientacijsko neurejene, direktor ni definiran, zato je tudi ε tam izotropen tenzor z eno samo lastno vrednostjo. Nas bo zanimalo predvsem, kako lahko konstruiramo tenzor, s katerim lahko opišemo stopnjo urejenosti v nematicu in ga kasneje povežemo s tenzorjem dielektričnosti (ali kako drugo makroskopsko količino). Za ta namen konstruiramo *tenzor ureditvenega parametra* Q_{ij} , ki ga z S in $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ zapišemo kot

$$Q_{ij} = \frac{S}{2}(3n_i n_j - \delta_{ij}) + \frac{P}{2} \left(e_i^{(1)} e_j^{(1)} - e_i^{(2)} e_j^{(2)} \right). \quad (2.26)$$

Tenzor vsebuje tudi možen prispevek *biaksialnosti* P , ko molekule niso osno simetrične (imajo npr. ploščasto strukturo) ali pa zunanja vplivi, na primer električno polje ali robni pogoji na površini, porušijo osno simetrijo flktuacij v nematicu. V tem primeru je $\mathbf{e}^{(1)} \perp \mathbf{n}$ sekundarni direktor še ena smer v kateri pojavi urejanje molekul ter $\mathbf{e}^{(2)} = \mathbf{n} \times \mathbf{e}^{(1)}$. Biaksialnost P leži v intervalu $[-3/2, 3/2]$: $P = 0$ pomeni zopet enoosni nematic, $|P| = 3/2$ pa zgolj urejanje vzdolž sekundarnega direktorja. Tenzor Q_{ij} je realen, simetričen ter je brez sledi – $Q_{ii} = 0$ ³. Ima v splošnem 6 neodvisnih komponent vedno pa je moč najti osi koordinatnega sistema, oziroma lastne vektorje, v katerem je diagonalen in na njegovi diagonali ležijo lastne vrednosti

$$Q_{ij} = \begin{pmatrix} S & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}(S+P) & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2}(S-P) \end{pmatrix}. \quad (2.27)$$

Lastni vektorji pripadajoči lastnim vrednostim so direktor \mathbf{n} , sekundarni direktor $\mathbf{e}^{(1)}$ ter $\mathbf{e}^{(2)}$.

2.4.2 Prosta energija nematikov

Ravovesna stanja fizikalnih sistemov so stanja v katerih je prosta energija najnižja. Gostota proste energije nematikov f je v splošnem sestavljena iz različnih prispevkov

$$f = f_{NI} + f_E + f_S + \dots, \quad (2.28)$$

kjer f_{NI} opisuje prispevke k energiji zaradi orientacijske urejenosti v tekočem kristalu, f_E prispevke zaradi deformacij direktorja, kot je na primer zvijanje ali upogibanje direktorja, f_S pa morebitne prispevke zaradi robnih pogojev na stiku med nematikom in površino, kjer je smer direktorja vsiljena.

³Pri zapisu sledi tenzorja $\text{Tr } A = A_{ii}$ uporabimo Einsteinovo sumacijsko konvencijo pri kateri je privzeto seštevanje po ponovljenem indeksu.

Običajni pristop k opisu faznega prehoda med neurejeno izotropno in delno urejeno nematsko fazo je zapis dela proste energije, ki se nanaša na fazni prehod f_{NI} , s pomočjo zgoraj definiranega tenzorja ureditvenega parametra Q_{ij} . V Landauovi teoriji faznih prehodov prosto energijo sistema zapišemo kot razvoj po potencah *skalarne* ureditvenega parametra. V primeru nematikov imamo opravka s *tenzorjem* ureditvenega parametra zato iz njega tvorimo skalarne invariante t.j. količine, ki so v vseh koordinatnih sistemih v katerih lahko tenzor zapišemo enake. Osnovne invariante tenzorja Q_{ij} so matrične sledi njegovih potenc do tretjega reda

$$Q_{ii}, \quad Q_{ij}Q_{ij}, \quad Q_{ij}Q_{jk}Q_{ki}. \quad (2.29)$$

Da se pokazati, da je sled poljubne potence 3×3 tenzorja Q_{ij} moč zapisati zgolj kot linearne kombinacije sledi (2.29). Vemo, da je sam Q_{ij} brezsleden, zato nam ostaneta zgolj drugi in tretji red[32]. Gostoto proste energije f_{NI} lahko tedaj zapišemo kot potenčni razvoj do četrtega reda

$$f_{NI} = \frac{1}{2}A(T)Q_{ij}Q_{ij} + \frac{1}{3}BQ_{ij}Q_{jk}Q_{ki} + \frac{1}{4}(Q_{ij}Q_{ij})^2. \quad (2.30)$$

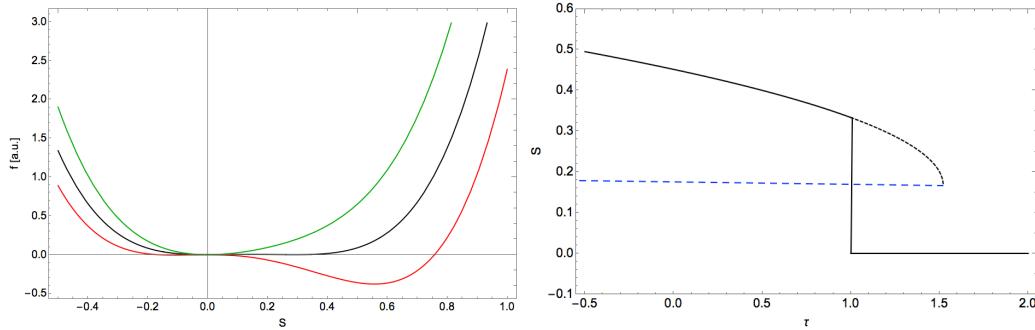
Koeficient $A(T) = a(T - T_{NI}^*)$ je snovni parameter, ki je temperaturno odvisen in vodi do faznega prehoda, $B < 0$ in $C > 0$ pa sta snovni konstanti. T_{NI}^* je podhladitvena (*supercooling*) temperatura, ki je blizu temperature faznega prehoda T_{NI} . Konstante so materialni parametri tipičnih vrednosti $a \sim 10^5 J/(m^3 K)$, $B \sim 10^6 J/(m^3)$ in $C \sim 10^6 J/m^3$ [34]. Prosta energija (2.30) vsebuje tudi lihi prispevek v tretjem redu, kar pomeni da je opisani fazni prehod *prvega reda* za katere je značilno, da pride pri temperaturi prehoda do nezveznega skoka v ureditvenem parametru. Vrednost f_{NI} najbolj določa prvi člen: če je A pozitiven je minimalna energija pri $Q = 0$, kar opisuje izotropno fazo. V nasprotnem primeru, ko je A negativen je Q , ki minimizira prosto energijo končen in določa nematsko fazo. Če v primeru enoosnega nematika ($P = 0$) vstavimo Q v diagonalizirani obliki (2.27) v enačbo (2.30) dobimo

$$f_{NI} = \frac{3}{4}A(T - T_{NI}^*)S^2 + \frac{1}{4}BS^3 + \frac{9}{16}CS^4. \quad (2.31)$$

V tem izrazu lažje interpretiramo pomen posameznih prispevkov: prvi člen vodi do faznega prehoda, drugi vsebuje dejstvo da S in $-S$ stanji nista ekvivalentni zadnji, pozitivni, člen pa zagotavlja, da je gostota proste energija omejena od spodaj. Vrednost S v ravnovesju pri neki temperaturi T najdemo tako, da minimiziramo ustrezno prosto energijo $F = \int f dV$ oziroma prek pogoja $\partial f_{NI}/\partial S = 0$. Dobimo ravnovesno vrednost $S_{rav}(T)$

$$S_{rav}(T) = \begin{cases} 0 & T > T_{NI} \\ \frac{1}{2} \left[-\frac{B}{3C} + \sqrt{\left(\frac{B}{3C}\right)^2 - \frac{8a(T-T_{NI}^*)}{3C}} \right] & T < T_{NI} \end{cases}$$

Slika 2.7a prikazuje prosto energijo kot funkcijo stopnje urejenosti S pri treh različnih temperaturah T^\dagger , ki ustreza izotropni fazi, T_{NI} , ki je temperatura faznega prehoda ter T^* , ki ustreza nematski fazi. Na Sliki 2.7b pa je prikazana še odvisnost S od reducirane temperature τ , ki doseže največjo možno vrednost ($\tau = 1$) pri T_{NI} : tam S nezvezno pada na 0[32]. Nezvezno razliko S_0 lahko izračunamo iz izraza (2.4.2) z izvrednotenjem pri $T = T_{NI}$.

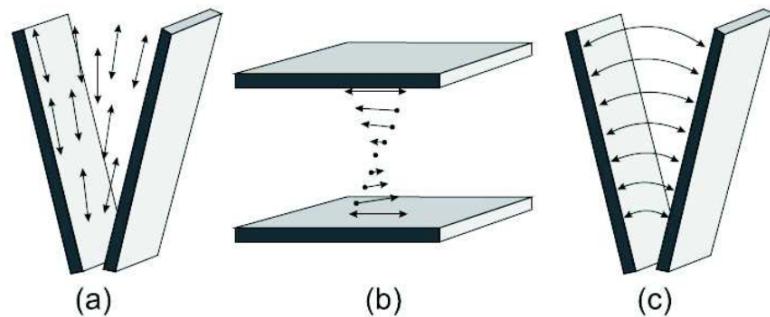


Slika 2.7: **a.)** Prosta energija f_{NI} v odvisnosti od ureditvenega parametra S za tri različne temperature v okolini temperature faznega prehoda T_{NI} . **b.)** Nematski red S v odvisnosti od reducirane temperature τ v nematski fazi. Ko $\tau = 1$ pri temperaturi T_{NI} ima S nezvezzen skok. Vir slike:[32]

Naslednji pomembni prispevek k prosti energiji f v enačbi (2.28) je prispevek zaradi prostorkega spremjanja direktorja v nematiku f_E – deformacij. Takšne variacije \mathbf{n} se dogajajo na razdaljah, ki so veliko večje ($\sim \mu\text{m}$) od velikosti posameznih molekul ($\sim \text{nm}$), zato je upravičen fenomenološki pristop z uporabo kontinuumsko teorije, podobno kot opisujemo deformacije v trdni snovi. V Frank-Oseenovi teoriji proste energije so osnovne tri deformacije značilne za nematike pahljačasta deformacija (*splay*), zvijanje (*twist*) ter upogibanje (*bend*). Prispevek k prosti energiji je nato kar vsota posameznih deformacijskih energij s pripisanimi elastičnimi konstantami k_i

$$f_{NE} = f_0 + k_1(\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + k_2(\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n} - q_0)^2 + k_3(\mathbf{n} \times \nabla \times \mathbf{n})^2. \quad (2.32)$$

V tej enačbi je $q_0 = 2\pi/p_0$ in p_0 razdalja v kateri se direktor v kiralnem tekočem kristalu, kot je na primer holesterična faza, (glej 2.5c) zavrti za polni kot 2π in $q_0 = 0$ v običajnem nematiku. Elastične konstante lahko določimo z eksperimentom. Opisane tri deformacije so prikazane na Sliki 2.8.



Slika 2.8: *Tri osnovne deformacije v nematiku: pahljačasta deformacija, zvijanje in upogibanje direktorja.*

Prispevek k prosti energiji zaradi deformacij je v tem kontekstu bolje zapisati s tenzorjem ureditvenega parametra Q_{ij} , ki je posredno povezan z \mathbf{n} – glej (2.26). Ker gre pri deformacijah direktorja za krajevne spremembe v Q_{ij} iščemo krajevne odvode količine, ki bo invariantna na spremembo koordinatnega sistema – tudi v

Poglavlje 2. Teoretični uvod

tem primeru je to sled potenc Q_{ij} .

$$f_E = \frac{1}{2} L_1 \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k} \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k} + \frac{1}{2} L_2 \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_j} \frac{\partial Q_{ik}}{\partial x_k} + \frac{1}{2} L_3 Q_{ij} \frac{\partial Q_{kl}}{\partial x_i} \frac{\partial Q_{kl}}{\partial x_j} \quad (2.33)$$

Konstante L_i je s primerjavo z izrazom (2.32) moč izraziti s konstantami k_i , ki so direktno povezane s posameznim tipom deformacije in so zato na nek način bolj naravne. Še bolj ključno pa je, da so k_i pogosto primerljive velikosti in v tem primeru v izrazu (2.33) znatno prispeva zgolj prvi člen z L_1 , ki opisuje vse tri osnovne deformacije. Gostoto elastične energije v približku ene konstante za nematik tako zapišemo kot

$$f_E = \frac{1}{2} L \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k} \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k}. \quad (2.34)$$

Ker Q_{ij} vsebuje tako \mathbf{n} kot S takšen elastičen člen opisuje tako deformacije direktorja kot tudi stopnje reda, kar je ključno za opis defektov, kjer pade S na nič in direktor postane nedefiniran.

Omeniti moramo tudi, kako se spremeni opis v kiralni fazi, saj bo to v nadaljevanju pomembno. Zaradi zvijanja direktorja dodamo enačbi (2.34) še en člen povezan z zgoraj omenjenim q_0 . Celotno gostoto energije kiralne faze nato napišemo kot

$$f_E^{chiral} = \frac{1}{2} L \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k} \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k} + 2q_0 L \epsilon_{ikl} Q_{ij} \frac{\partial Q_{ij}}{\partial x_k}, \quad (2.35)$$

kjer je ϵ_{ikl} popolnoma antisimetričen tenzor določen s permutacijo indeksov. Ta zaradi simetrije nastopa zgolj v kiralnih nematikih, saj ti, kot pove že njihovo ime, niso invariantni na zrcaljenje prostora.

Kadar imamo nematik v stiku z neko površino se lahko zgodi t.i. *površinsko sidranje*. To je pojav, ko ima del nematika, ki je v stiku s površino, zaradi njenih strukturnih ali kemijskih lastnosti, tam vsiljeno smer direktorja zato je energijsko bolj ugodno, če direktorsko polje tam drugačno kot daleč proč od površine. To se zgodi zaradi površinskega prispevka f_S k gostoti proste energije, ki ga pogosto opišemo s t.i. Ramini-Papoular modelom. V tem modelu opisujemo deformacije, različne od želene površinske deformacije opisane s tenzorjem Q_0 s prispevkom k prosti energiji

$$f_S = \frac{W}{2} (Q - Q_0)^2, \quad (2.36)$$

kjer je W konstanta, ki opisuje kako močen je ta površinski efekt.

Zadnji in morda najpomembnejši prispevek k prosti energiji, ki ga bomo omenili je prispevek zaradi interakcije z električnim oziroma magnetnim poljem v katerega postavimo nematik. Molekule v nematiku navadno nimajo znatnega električnega dipolnega momenta. Energijo nematika v zunanjem električnem polju \mathbf{E} zato zapišemo v komponentnem zapisu kot

$$f_E = -\frac{1}{2} \varepsilon_{ij} E_i E_j. \quad (2.37)$$

V nematikih velja, da je zveza med tenzorjem dielektrične permitivnosti ε_{ij} ter tenzorjem ureditvenega parametra Q_{ij} enaka

$$\varepsilon_{ij} = \bar{\varepsilon} + \frac{2}{3} \varepsilon_a^{mol} Q_{ij}, \quad (2.38)$$

kjer je $\bar{\varepsilon}$ izotropni del ε_a^{mol} pa anizotropni del molekulske električne permitivnosti.⁴ Če izraz (2.38) vstavimo v (2.37) dobimo

$$f_E = -\frac{1}{2}\bar{\varepsilon}E^2 - \frac{1}{3}\varepsilon_a^{mol}Q_{ij}E_iE_j. \quad (2.39)$$

Električno polje poskuša molekule poravnati s samim seboj ali pa pravokotno nanj odvisno od vrednosti anizotropije nematika ε_a^{mol} . Če $\varepsilon_a^{mol} < 0$ se bodo molekule skušale poravnati pravokotno na smer polja in s tem material postane dvoosen[32]. Tipično molekula v nematiku potrebuje nekaj milisekund, da se odzove na zunanje električno polje. To pomeni, da nematik ne mora slediti na primer frekvenčno odvisnemu polju vidne svetlobe pač pa se tam poravna z efektivnim električnim poljem, ki ga opišemo z intenzitetnim tenzorjem svetlobe

$$I_{ij} = \frac{1}{2}\langle E_iE_j \rangle. \quad (2.40)$$

Energijo dielektrične interakcije nematika s svetlogo nato zapišemo

$$f_D = -\frac{2}{3}\varepsilon_a^{mol}I_{ij}Q_{ij}. \quad (2.41)$$

Takšen člen v prosti energiji omogoča opisovanje in modeliranje primerov, ko z visoko intenzitetnimi žarki preurejamo direktor v nematiku in ustvarimo defekte[18, 28].

Defekti

S pojmom defekti označujemo območja v nematikih, kjer je direktorsko polje $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ nevezno. Direktorja tam ne moremo definirati, skalarni parameter reda S pa (zvezno) pade na nič, kot v izotropnih materialih. Defekti se v nematikih pojavijo zaradi različnih razlogov na primer površin ali pa zunanjih polj, ki vsiljujejo smer direktorja. V 3D strukturah se defekti lahko pojavijo v obliki posameznih točk ali pa defektnih linij (*disclinations*). Ker se v okolini takšnih struktur tako S kot \mathbf{n} spreminja hitreje, kot v preostalem nematiku, takšna območja stanejo veliko proste energije[35].

Matematična lastnost, ki jo pripisemo defektom je t.i. *ovojno število* (*winding number*) s , ki pove, koliko obratov naredi direktor na zanki okoli defekta. Ker sta obe usmeritvi direktorja $\mathbf{n} = -\mathbf{n}$ enakovredni so v nematikih možna le celoštevilска in polcela ovojna števila[35]. Za različne vrste defektov je tipično tudi obnašanje optične osi okoli njih, v središču defekta, kjer je direktor nedefiniran, pa material postane lokalno izotropen.

2.4.3 Širjenje svetlobe v nematikih

Tenzor dielektričnosti ε_{ij} je v nematikih direktno povezan z tenzorjem ureditvenega parametra Q_{ij} prek enačbe (2.38). Drugi člen v tej enačbi predstavlja anizotropni del tenzorja, prisoten zgolj v nematski fazi, ko $Q_{ij} \neq 0$. Ker je anizotropni del tenzorja ε_{ij} sorazmeren Q_{ij} si tenzorja delita enake lastne osi. V primeru enosnega nematika to pomeni, da sta zanj značilni dve lastni vrednosti ε in pripadajoče lastne

⁴V makroskopskem nematiku velja, da je $\varepsilon_a = S\varepsilon_a^{mol}$, vendar je S že vključen v Q_{ij} .

osi: $\varepsilon_{||}$, ki jo občuti svetloba polarizirana vzdolž direktorja \mathbf{n} ter ε_{\perp} za svetlobo polarizirano v pravokotni ravnini, ki jo določa direktor. Ker velja, da je lomni količnik $n_i = \sqrt{\varepsilon_{ii}}$ sledi, da ločimo v nematikih tudi dva različna lomna količnika in sicer rednega $n_o = \sqrt{\varepsilon_{\perp}}$ ter izrednega $n_e = \sqrt{\varepsilon_{||}}$. Večina nematikov je pozitivno dvolomna, torej razlika med rednim in izrednim lomnim količnikom $\Delta n = n_o - n_e > 0$ obstajajo pa tudi primeri negativne dvolomnosti $\Delta n < 0$ in ti bodo za nas bolj zanimivi.

Z defekti v nematikih lahko vplivamo na polarizacijski in fazni profil svetlobnega snopa. Defektnejša linija z ovojnim številom s lahko linearno polariziraci snop svetlobe spremeni v snop svetlobe z vektorsko polarizacijo, na kateri je odtisnjen defekt z močjo $2s$, kar lahko pokažemo z Jonesovim formalizmom[36] še več pa nam pove modeliranje z FDTD metodo. Z njo namreč lahko napovemo tudi kako pride do intenzitetne ničle v sredini snopa pri takih pretvorbah[28]. Možen je tudi obratni proces, ko močni žarki preurejajo nematik[18]. Nadalje, lahko svetlobni nosi tako spinsko vrtilno količino, ki se kaže kot krožna polarizacija svetlobe, kot tudi orbitalno vrtilno količino (OAM), če ima fazno nezveznost v središču. Nekateri nematski defekti omogočajo pretvorbo enega tipa vrtilne količine v drugo in s tem pripraven način za tvorbo žarkov z vrtinčno fazo[37].

2.4.4 Holesteriki in modre faze

Nematike, ki jih sestavljajo *kiralne* molekule, torej takšne ki niso invariantne na obrat prostora, imenujemo *holesteriki* oziroma kiralni nematiki. V nekaterih kiralnih nematikih na prehodu v izotropno fazo opazimo t. i. *helično fazo (helical phase)*, ki jo, nekoliko nehvaležno, prav tako pogosto imenujemo holesterična faza. Ta faza je prikazana na Sliki 2.5c. Zanjo je značilno nehomogeno direktorsko polje $\mathbf{n}(\mathbf{r})$: direktor je povsod pravokoten na os $\hat{\mathbf{a}}$ in homogen v vseh nanjo pravokotnih ravninah, a ko se premikamo vzdolž osi $\hat{\mathbf{a}}$, se direktor zvija okrog nje in se tipično zavrti za polni kot v nekaj desetinkah mikrometra. Takšno zvijanje direktorja lahko matematično opišemo, če poravnavmo os $\hat{\mathbf{a}}$ s koordinatno osjo z , saj je potem

$$\mathbf{n}(\mathbf{r}) = \hat{\mathbf{e}}_x \cos(q_0 z) + \hat{\mathbf{e}}_y \sin(q_0 z), \quad (2.42)$$

kjer je $q_0 = 2\pi/p_0$ vijačnost, že omenjena količina, ki opisuje kako hitro se vzdolž z direktor zvija – q_0 je mera za *kiralnost* nematika[38].

Vendar pa opisana faza ni edina, ki jo opazimo v kiralnih nematikih. V kiralnih nematikih z visoko kiralnostjo q_0 se v sorazmerno ozkem temperaturnem območju pojavi t.i. modra faza – BP (*blue phase*). Kljub temu, da so modre faze sorazmerno neznačilne za tekoče kristale so v resnici eno izmed prvih odkritij na tem področju, saj jih je že leta 1888 odkril Reinitzer, ki je ohljal holesterol benzoat. Pri neki temperaturi je opazil, da je substanca odsevala modro barvo, a je pojav hitro izginil. Kasneje so po tem pojavu fazo tudi poimenovali.

Da modre faze odbijajo različne frekvence svetlobe je posledica njihove periodične strukture, na kateri pride do Braggovega sipanja. Gre namreč za urejeno mrežo *linijskih defektov*, ki nastanejo kot posledica lokalnega urejanja kiralnih molekul v t.i. *dvojno-zvite cilindre* – DTC (*double-twist cylinder*). To so cilindrične strukture v katerih se zasuk direktorja glede na os cilindra linearno povečuje z oddaljenostjo od osi. Če kot med osjo cilindra in direktorjem opišemo s kotom $\chi(r)$ razdaljo med

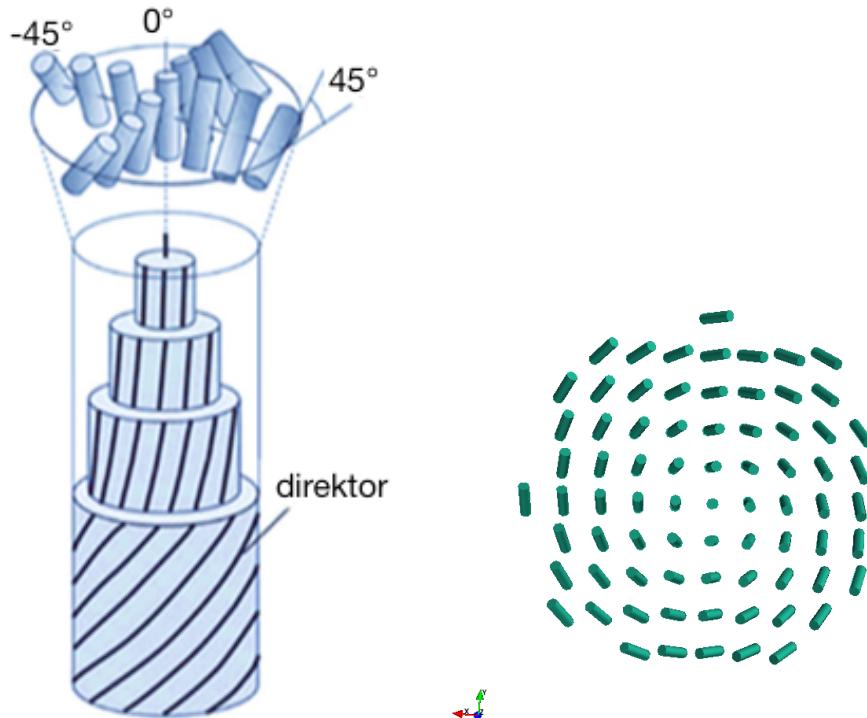
njima pa označimo z r velja

$$\chi(r) = \frac{\pi}{4} \frac{r}{R} = q_0 r, \quad (2.43)$$

kjer smo s q_0 zopet označili vijačnost, ki sedaj opisuje zvijanje v radialni smeri. Na osi cilindra z radijem R je direktor poravnан z osjo, potem pa se v vseh azimutalnih smereh ϕ linearno z r zavrti do kota $\pi/4$. Matematično lahko DTC strukturo opišemo z vektorskim poljem v cilindričnih koordinatah kot

$$\mathbf{n}(r, \varphi, z) = \mathbf{e}_z \cos(q_0 r) - \mathbf{e}_\varphi \sin(q_0 r). \quad (2.44)$$

Opisana struktura je prikazana na Slikah 2.9a ter 2.9b, kjer je prikazan pogled na en sloj DTC od zgoraj.



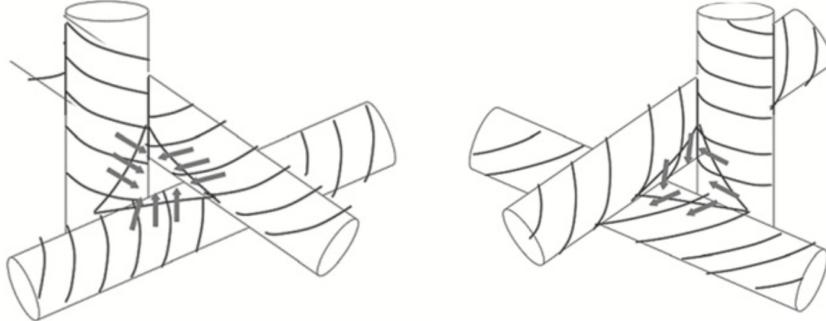
Slika 2.9: Dvojno-zviti cilinder ter en sloj iz ptičje perspektive.

Fazni prehod v modre faze lahko matematično opišemo z običajnim Landauovim prispevkom k prosti energiji (2.30) ter z opisanim elastičnim prispevkom v kiralnih nematikih (2.35). Ta dva prispevka združeno vodita do modrih faz, ki za primerne vrednosti parametrov minimizirajo prosto energijo. Iz gornjih enačb lahko v limiti visoke kiralnosti $q_0 \rightarrow \infty$ dobimo analitični tenzor ureditvenega parametra v modrih fazah [38]. Eksperimentalno je sicer kiralnost q_0 v modrih fazah nizka in sicer med vrednostima 0.01 ter 0.5 [38].

Takšne strukture so v nematikih energijsko stabilne le za kratke razdalje glede na velikost celotne strukture: tipične vrednosti R v modrih fazah so $\sim 100\text{nm}$. V modrih fazah se DTC naložijo v višje urejene strukture, na mestih kjer se cilindri

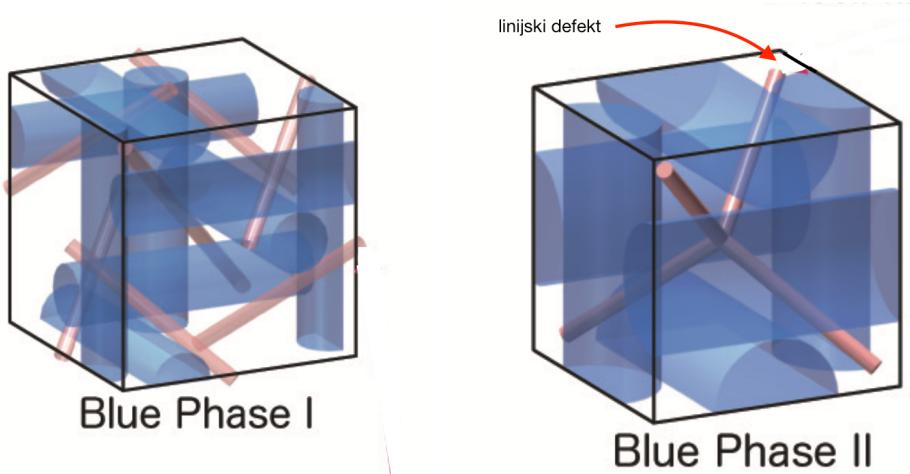
Poglavlje 2. Teoretični uvod

srečajo pa nastanejo defekti, kar je prikazano na Slikah 2.10a ter 2.10b. Prikazana dva različna možna defekta: tip defekta določa *sučnost* t.j. smer v kateri se direktor vrti okoli osi na mestu srečanja. Tako dobimo defekta z različno močjo, v prvem primeru gre za $s = 1/2$ v drugem pa za $s = 1$.



Slika 2.10: *Možna tipa defektov določena z lokalno smerjo vrtenja direktorja v udeleženih cilindrih. Na levi je prikazan defekt z nabojem $s = 1/2$ na desni pa z $s = 1$.*
Vir slike:

Glede na strukturo naloženih cilindrov poznamo ločimo tri tipe modrih faz poimenovanih BP I, BP II ter BP III. BP III je amorfna faza kjer so cilindri neurejeni. V BP I in BP II tvorijo mesta, kjer se cilindri srečujejo bodisi telesno centrirano (BCC) ali preprosto kubično (SC) mrežo, z velikostjo osnovne celice nekaj sto nanometrov. Takšne razdalje pa so razlog, da pride do konstruktivne interference valovanja za valovne dolžine v območju vidne svetlobe. Na Slikah 2.11a ter 2.11b sta prikazani strukturi BP I ter BP 2, kjer so z modro barvo prikazani dvojno-zviti cilindri, z rdečimi črtami pa so označeni linijski defekti, ki se prepletajo med njimi.



Slika 2.11: *Shematski prikaz osnovne celice tipov modrih faz BP I (FCC mreža) ter BP II (SC mreža). Z modro barvo so prikazani dvojno zviti cilindri z rdečo pa defektne linije.*
Vir slike:

Ker mrežo tvorijo defekti takšna struktura ni zelo stabilna, kar je tudi razlog za

običajno relativno ozko temperaturno območje (reda 1K), kjer take faze sploh obstajajo. To nekoliko otežuje njihovo potencialno uporabo, zato se v zadnjih letih veliko truda vlagajo v razvoj modrih faz, ki so stabilne v širšem temperaturnem območju. Leta 2005 so odkrili prvi tekoči kristal, v katerem modri fazi BP I ter BP II obstajata v temperaturnem območju od 16° do 50° C[40]. Poleg odkrivanja novih materialov je možno modre faze tudi *stabilizirati* z dodatkom polimerov ali koloidov[39, 41, 42]. Ena izmed lastnosti modrih faz, ki jih dela zanimive, je hiter odzivni čas na zunanje električno polje, reda 10-100 mikrosekund, kar je nekajkrat hitreje od običajnih nematikov. To obeta razvoj novih tipov tekočekristalnih zaslonov od katerih si obetamo hitrejši čas osveževanja (*refresh rate*) ter boljšo ločljivost[43].

Poglavlje 3

Računska metoda

Obstaja več različnih numeričnih metod s katerimi lahko opisujemo elektromagnethno valovanje. Izbira metode je odvisna od več faktorjev: tipične dimenzije objektov v simulaciji, relevantnih časovnih dimenzijs, frekvence oziroma valovne dolžine svetlobe, *itn.* Pomembno je tudi, katere lastnosti svetlobe nas pri določenem problemu sploh zanimajo.

V fiziki tekočih kristalov nas pogosto zanima le polarizacija svetlobe in kako se ta spreminja vzdolž poti žarkov. Za opis takšnih problemov je najbolj preprosta metoda, *metoda Jonesovih matrik*. Ta predpostavlja širjenje svetlobe vzdolž ene smeri, osi z , konstantno frekvenco svetlobe, ter optični polji \mathbf{E} in \mathbf{H} , ki sta vedno pravokotni na smer širjenja svetlobe. Polarizacijo svetlobe na mestu z potem opišemo zgolj s tremi vrednostmi, $E_x(z)$, $E_y(z)$ ter faznim zamikom ϕ med njima kar simbolično zapišemo z vektorjem, nato pa pot svetlobe skozi različne optične elemente, ki spremenijo polarizacijo oopišemo z matrikami velikosti 2×2 [48]. Jonesov formalizem odpove, ko gre za opis delno polarizirane ali nepolarizirane svetlobe. Takrat lahko posežemo po splošnejši *Muellerjevi metodi* v kateri splošno stanje polarizacije svetlobe je moč opisati z 4-komponentnimi *Stokesovimi vektorji*, optične elemente pa z 4×4 matrikami[52]. Če se pa vselej zanimamo zgolj za popolnoma polarizirano svetobo je generalizacija Jonesove metode *Berremanova metoda*, ki poleg komponent električnega polja uporablja tudi komponente magnetnega. S takšno metodo lahko računamo tudi tok svetlobe prek meje dveh medijev, na način, ki upošteva robne pogoje za električno in magnetno polje. Na nobeno izmed opisanih metod pa se ne moramo upreti, kadar nas poleg polarizacije zanima tudi, kakšen vpliv imajo na širjenje snopa uklon ali kateri drugi valovni pojavi.

Zelo pomembno področje, pri katerem se numerične metode veliko uporablja so optični vodniki. Za računanje lastnih načinov razširjanja svetlobe skozi optična vlakna ali druge podobne strukture, se pogosto uporablja metoda VBP (*vector beam propagation method*). Predpostavka, na kateri metoda gradi, je da imamo eno samo smer razširjanja svetlobe, vzdolž katere se amplituda ne spreminja znatno na razdaljah primerljivih z valovno dolžino svetlobe (*slowly varying amplitude*). Metoda uporablja diskretno prostorsko mrežo, ki jo na enem koncu napolnemo z vsemi šestimi komponentami elektromagnetnih polj (\mathbf{E} in \mathbf{H}). Polja nato propagiramo po mreži z reševanjem *valovne enačbe* na vsakem koraku. Metoda je pogosto uporabljena v kombinaciji z metodo končnih elementov (*finite-elements method*), ki omogoča boljšo diskretizacijo prostora in modeliranje kompleksnejših regij v prostoru[46].

Metoda končnih diferenc v časovni domeni oziroma FDTD (*finite-difference time-domain method*) je gotovo najbolj splošna od predstavljenih metod in najbolj široko uporabljena metoda za reševanje Maxwellovih enačb. Je popolnoma eksplicitna in sorazmerno preprosto razumljiva. Ker za računanje na vsakem koraku uporablja vse komponente polj v vseh točkah diskretne mreže računalniki hitro trčijo ob pomanjkanju spomina vendar ji ta ista lastnost omogoča modeliranje elektromagnetnega valovanja v praktično vseh medijih, kot so disperzivni (frekvenčno odvisen lomni količnik), anizotropni, kiralni ali nelinearni[47].

Metoda FDTD ni več nova, njeni začetki namreč segajo že v leto 1969. Pa vendar njena raba iz leta v leto narašča, o čemer priča tudi vedno večje število podjetij (npr. Lumerical, Remcom, Optiwave,...) s svojo programsko opremo za modeliranje svetlobe s pomočjo te metode[47]. Večina programov je naravnana precej ciljno, torej namenjena zgolj reševanju enačb v določenem primeru na primer računanju lastnih načinov v valovnem vodniku ali sipanju svetlobe. Tako ne omogočajo modeliranja toka svetlobe skozi nehomogene anizotropne materiale kot so lahko tekoči kristali.

3.1 Metoda končnih diferenc v časovni domeni

Za popoln opis elektromagnetnega polja potrebujemo dve vektorski polji: električno polje \mathbf{E} ter magnetno polje \mathbf{H} , ter njuma ustrezeni gostoti polj \mathbf{D} in \mathbf{B} . Polja so medsebojno povezana s konstitutivnimi relacijami (2.2). Pri metodi FDTD gre v preprostem primeru, ko v prostoru ni izvorov električnih in magnetnih polj ter absorpcije, za reševanje časovno in prostorsko diskretiziranih Maxwellovih enačb (2.1), ki vsebujejo rotor $\nabla \times$

$$\epsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \nabla \times \mathbf{H}, \quad \mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E}. \quad (3.1)$$

Ti dve enačbi narekujeta *časovni razvoj* obej polj. Drugi dve Maxwellovi enačbi, oziroma Gaussova zakona za obe gostoti polj, sta nujna posledica (3.1), a moramo pri diskretizaciji paziti, da izberemo mrežo na kateri bosta implicitno upoštevani. FDTD metoda je drugačna, saj namesto valovne enačbe (??) za \mathbf{E} ali \mathbf{H} rešuje sklopljeni enačbi za obe polji.

Metoda FDTD temelji na diskretizaciji časovnih in prostorskih odvodov v obliki *končnih diferenc* v simetrični obliki[51]. Če zapišemo Taylorjev razvoj skalarne funkcije ene spremenljivke $f(x)$ okoli točk $x_0 \pm \delta/2$

$$f\left(x_0 + \frac{\delta}{2}\right) = f(x_0) + \frac{\delta}{2}f'(x_0) + \frac{1}{2!}\left(\frac{\delta}{2}\right)^2 f''(x_0) + \frac{1}{3!}\left(\frac{\delta}{3}\right)^3 f'''(x_0) + \dots \quad (3.2)$$

$$f\left(x_0 - \frac{\delta}{2}\right) = f(x_0) - \frac{\delta}{2}f'(x_0) + \frac{1}{2!}\left(\frac{\delta}{2}\right)^2 f''(x_0) - \frac{1}{3!}\left(\frac{\delta}{3}\right)^3 f'''(x_0) + \dots \quad (3.3)$$

Ko odštejemo eno enačbo od druge in vse skupaj delimo z δ dobimo

$$\frac{f\left(x_0 + \frac{\delta}{2}\right) - f\left(x_0 - \frac{\delta}{2}\right)}{\delta} = f'(x_0) + \frac{1}{3!} \frac{\delta^2}{4} f'''(x_0) + \dots, \quad (3.4)$$

oziroma končna diferenca na levi strani enačbe, je enaka prvemu odvodu funkcije v točki x_0 , ki mu prištejemo še člene, ki so višjega reda v δ . Če je δ dovolj majhen lahko v linearinem približku vse višje člene zanemarimo in prve odvode nadomestimo z

$$\frac{df}{dx} \Big|_{x=x_0} \approx \frac{f(x_0 + \frac{\delta}{2}) - f(x_0 - \frac{\delta}{2})}{\delta} \quad (3.5)$$

Iz enacbe (3.5) vidimo, da za izračun odvoda funkcije f v točki x_0 ne potrebujemo vrednosti funkcije v tej točki, pač pa zgolj vrednosti na sosednjih točkah $x_0 + \delta/2$ ter $x_0 - \delta/2$. Ker smo zanemarili vse člene z drugo ali višjo potenco δ , pravimo, da ima ta približek natančnost drugega reda, obstajajo pa tudi približki višjih redov, ki za izračun potrebujejo več točk. Približek drugega reda (3.5) je uporabljen tudi v naši implementaciji metode FDTD[18].

3.1.1 Yeejev algoritmom

Osnova večine implementacij metode FDTD je Yeejeva diskretacijska mreža. Prostor razdelimo v kubično mrežo tako, da sta polji \mathbf{E} in \mathbf{H} na njej spravljeni na različnih mestih in ob različnih časih. To je najlaže razložiti na enodimenzionalnem primeru: imejmo enodimenzionalno elektromagnetno valovanje potupoče v smeri x in polarizirano v z smeri. Polji tedaj zapišemo $\mathbf{E} = (0, 0, E_z(x))$ in $\mathbf{H} = (0, H_y(x), 0)$ enačbi (3.1) pa

$$\varepsilon \frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{\partial H_y}{\partial x}, \quad \frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{\partial E_z}{\partial x}. \quad (3.6)$$

Enačbi sedaj diskretiziramo, tako da vpeljemo diskretna prostorski m ter časovni indeks q z ustreznima korakoma Δ_x ter Δ_t . Polje $E_z(x, t)$ tako pišemo

$$E_z(x, t) = E_z(m\Delta_x, q\Delta_t) = E_z^q[m], \quad (3.7)$$

analogno pa velja za $H_y(x, t) \rightarrow H_y^q[m]$. Ker sta enačbi (3.6) sklopljeni ju je možno hkrati diskretizirati zgolj z uporabo posebne mreže, kot je tista prikazana na Sliki 3.1a. Na njej sta polji E_z in H_y shranjeni na mestih medsebojno zamknjenih za pol koraka tako v času kot v prostoru. S črtkano črto je na sliki označena meja med preteklostjo in prihodnostjo torej med že izračunanimi polji ter tistimi, ki jih še moramo izračunati. Ideja algoritma je, da mejo korak za korakom premikamo v prihodnost. Takšna razporeditev nam omogoča, da zapišemo enačbi (3.6) v diskretni obliki okoli označene točke

$$\frac{H_y^{q+1/2}[m + 1/2] - H_y^{q-1/2}[m]}{\Delta_t} = \frac{E_z^q[m + 1] - E_z^q[m]}{\Delta_x}. \quad (3.8)$$

Kot vidimo, so vse količine razen ene v tej enačbi že znane (pod črtkano črto), zato lahko neznano količino izrazimo

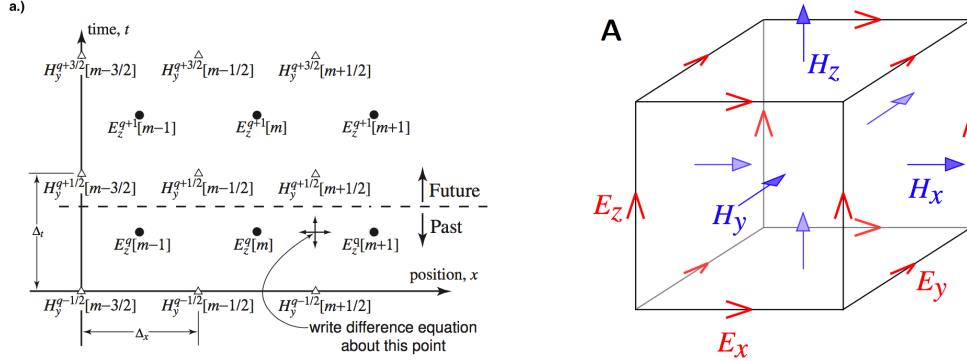
$$H_y^{q+1/2}[m + 1/2] = H_y^{q-1/2}[m] + \frac{\Delta_t}{\Delta_x} (E_z^q[m + 1] - E_z^q[m]). \quad (3.9)$$

Temu pravimo *posodobitvena enačba* za magnetno polje v 1D primeru. Po izračunu magnetnega polja ob $q + 1/2$ uporabimo še analogno enačbo za električno polje ob času $q + 1$ v kateri nastopa ravnokar izračunano magnetno polje

$$E_z^{q+1}[m] = E_z^q[m] + \frac{\Delta_t}{\varepsilon \Delta_x} (H_y^{q+1/2}[m + 1/2] - H_y^{q+1/2}[m - 1/2]). \quad (3.10)$$

Iteracije med obema posodobitvenima enačbama ponavljamo do želenega časa t_0 .

Če povzamemo, sta obe posodobitveni enačbi (3.9) ter (3.10), da je računano polje v prihodnosti odvisno od istega polja v prejšnji točki v času z dodatkom člena, ki vsebuje vrednosti drugega polja v sosednjih točkah. Po vsaki uporabi se črtkana črta na Sliki 3.1a premakne za pol časovnega koraka navzgor.



Slika 3.1: a.) Prikaz zamknjenih polj v primeru enodimenzionalnega EM vala. b.) Yeejeva mreža za metodo FDTD v treh dimenzijah. Vir slik: [18, 49]

V treh dimenzijah razdelimo prostor na majhne kubične celice s stranico Δ_x , vsaka z indeksom (i, j, k) . V vsaki izmed celic spravimo vseh šest komponent polja, na način prikazan na Sliki 3.1b. Na njej je prikazana *ena sama* celica v Yeejevi mreži ob nekem časovnem trenutku q . Položaji v mreži, kjer so spravljene komponente magnetnega polja so ponovno za pol krajevnega in časovnega koraka zamaknjene glede na komponente električnega polja. Časovna zamaknjost na tej sliki ni prikazana.

Z razporeditvijo komponent na ta način, dobimo diskretizacijo Maxwellovih enačb (3.1), ki jih v homogenem anizotropnem materialu, kjer ima tenzor dielektričnosti zgolj diagonalne komponente, lahko razpišemo

$$\varepsilon_{xx} \frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z}, \quad \mu \frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} \quad (3.11)$$

$$\varepsilon_{yy} \frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x}, \quad \mu \frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} \quad (3.12)$$

$$\varepsilon_{zz} \frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y}, \quad \mu \frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x}. \quad (3.13)$$

Za ponazoritev vzemimo odvoda $\partial E_y / \partial z$ ter $\partial E_z / \partial y$, ki sta ob uporabi končnih differenc znana točno na mestu H_y , vendar samo ob časih $t_0 - \Delta_t/2$ ter $t_0 + \Delta_t/2$, kar pa je točno tisto kar potrebujemo za izračun $\partial H_y / \partial t$ ob času t_0 . Enako velja za vseh šest zapisanih enačb. Uporaba take sheme torej omogoča, da ohranimo simetričnost diferenčne sheme, kar pomeni večjo stabilnost metode[18]. Prav tako je moč pokazati, da sta v taki mreži implicitno upoštevani tudi preostali dve Maxwellovi enačbi[44].

Anizotropni materiali

Nehomogeno odvisnost dielektričnosti je mogoče vključiti v metodo prek diskretizacije $\varepsilon(\mathbf{r}) \rightarrow \varepsilon_{ijk}$. To je preprosto, kadar gre za izotropne materiale ali pa takšne anizotropne materiale, kjer se optična os ne spreminja in je tenzor diagonalen. Kot pa smo omenili pri poglavju o nematikih optično os anizotropije določa direktor, ki pa je pogosto močno krajevno odvisen – spomnimo se na defekte. V takšnem primeru je tenzor ε nediagonalen in krajevno odvisen zato diskretizacija Maxwellovih enačb na Yeejevi mreži ni več mogoča. Če namreč v enačbe za časovni razvoj električnega polja (3.13) dodamo izvendiagonalne komponente ε dobimo

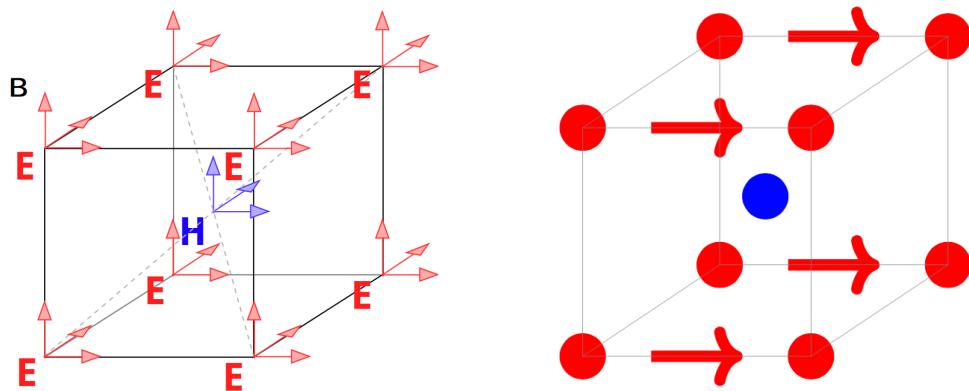
$$\varepsilon_{xx} \frac{\partial E_x}{\partial t} + \varepsilon_{xy} \frac{\partial E_y}{\partial t} + \varepsilon_{xz} \frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z}, \quad (3.14)$$

$$\varepsilon_{yx} \frac{\partial E_x}{\partial t} + \varepsilon_{yy} \frac{\partial E_y}{\partial t} + \varepsilon_{yz} \frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_y}{\partial x}, \quad (3.15)$$

$$\varepsilon_{zx} \frac{\partial E_x}{\partial t} + \varepsilon_{zy} \frac{\partial E_y}{\partial t} + \varepsilon_{zz} \frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y}. \quad (3.16)$$

Da dobimo celoten odvod polja $\partial \mathbf{E}/\partial t$ moramo za razliko od prej sedaj rešiti *system* linearnih enačb. Poleg tega izgubimo prej opisane lastnosti Yeejeve mreže, saj za izračun katerekoli komponente \mathbf{E} potrebujemo vse komponente \mathbf{H} . Zaradi tega mreža izgubi simetričnost diferenčne sheme in izgubi stabilnost[53].

Če želimo ohraniti simetričnost ter smo pripravljeni žrtvovati nekaj več računskega časa, je moč metodo implementirati na mreži, ki to omogoča. Mesta, kjer so polja spravljena na naši mreži so prikazana na Sliki 3.2a, kjer je ključno opaziti, da so sedaj v vsaki točki mreže spravljene *vse* tri komponente posameznega polja!



Slika 3.2: **a.)** Nadgradnjena Yeejeva mreža, ki smo jo uporabljali v naši implementaciji metode FDTD. Slika prikazuje, da čeprav položaji točk ostajajo enaki, so za razliko od Yeejeve mreže tu vse komponente polj shranjene v vsaki točki. **b.)** Primer izračuna $\partial \mathbf{E}/\partial x$. Z rdečimi pikami so označeni položaji kjer je shranjen \mathbf{E} , s puščicami kjer so izračunani posamezni odvodi po x , z modro piko pa mesto kjer odvod zares potrebujemo in kjer je definiran \mathbf{H} . Vir slik: [18]

Ker imamo sedaj vse komponente polja v vseh točkah, je potrebno prilagoditi računanje krajevnih odvodov. Slika 3.2b s puščicami prikazuje mesta, kjer je izračunan odvod $\partial \mathbf{E}/\partial x$. Mesto, kjer ta odvod potrebujemo, je označeno z modro piko,

kjer je definirano magnetno polje \mathbf{H} . V vsakem koraku, tako za $\partial\mathbf{E}/\partial x$ vzamemo povprečje odvodov označenih s puščicami. Podrobno je postopek izračuna odvodov v naši implementaciji razložen v Dodatku ...

3.1.2 Izvori valovanja in robni pogoji

V splošnem, Maxwellove enačbe vsebujejo izvore elektromagnetnih polj. Vendar za primere modeliranja toka svetlobe skozi materiale le redko potrebujemo izvore valovanja znotraj simulacijske celice. Ponavadi nas bolj zanimajo primeri v katerih svetloba (svetlobni snop, svetlobni pulz, ...) vpada na simulacijsko celico od zunaj. Podobno pa, ko vpadna svetloba prepotuje našo celico, želimo, da se vanjo ne vrne v obliki odboja. Oboje je v simulaciji moč doseči z izrabo posebnih robnih pogojev ter uvedbo dodatnih plasti okoli celice.

Izvor valovanja v simulacijo vpeljemo tako, da okoli celice dodamo namišljeno *mejno plast* (*boundary layer*) veliko manjše debelne kot je velikost celice. Med simulacijo v vsaki iteraciji na meji med plastjo in celico prištejemo ali odštejemo ustrezno električno ali magnetno polje želenega izvora, ko računamo končne diference med točko v celici in točko v mejni plasti.

Absorpcijo svetlobe, ko svetloba prepotuje simulacijsko celico, lahko prav tako zagotovimo z vpeljavo še ene plasti v kateri velja Beer-Lambertov absorpcijski zakon[54]. Žal pa je takšna absorpcija za metodo FDTD prepočasna, saj mora svetloba prepotovati vsaj nekaj valovnih dolžin preden se popolnoma absorbira, kar močno poveča simulacijsko celico. Poleg tega moramo, če se želimo izogniti odbojem na meji med materialoma, absorpcijski koeficient počasi večati, kar bi še dodatno povečalo celico in s tem podaljšalo računski čas. Rešitev tega problema, je pred dobrima dvema desetletjema ponudil Berenger[50]. Ideja predvideva vpeljavo t.i. sloja s popolnim ujemanjem – PML (*perfectly matched layer*). Električna (σ) ter (nefizikalna) magnetna (σ_m) prevodnost v njem prispevata člena $\sigma\mathbf{E}$ ter $\sigma_m\mathbf{H}$ enačbama (3.1). Če se za trenutek vrnemo na enodimensionalni problem in zapišemo enačbe prepuščenega in odbitega valovanja vpadlega na mejo med simulacijsko celico ($\sigma = \sigma_m = 0$) ter absorptivno plastjo (σ, σ_m) dobimo izraza za *prepustnost* T ter *odbojnost* R takšne meje

$$T = \frac{2\eta_2}{\eta_1 + \eta_2} \quad \Gamma = \frac{\eta_2 - \eta_1}{\eta_2 + \eta_1}, \quad (3.17)$$

kjer je η_i določen z lastnostmi obeh materialov

$$\eta_i = \frac{\mu_i \left(1 - i\frac{\sigma_{mi}}{\omega\mu_i}\right)}{\varepsilon_i \left(1 - i\frac{\sigma_i}{\omega\varepsilon_i}\right)}. \quad (3.18)$$

Vidimo, da obstaja pogoj $\eta_1 = \eta_2$, ko $\Gamma = 0$ in ne pride do odboja! Pri simulacijah v eni dimenziji, se odbojem od mejne plasti izognemo tako, da pravilno izberemo μ_2 ter ε_2 skupaj z ustreznima σ ter σ_m . Žal pa je tako ujemanje mogoče zgolj v eni dimenziji, ko je valovni vektor svetlobe vedno pravokoten na mejo med sredstvoma. V treh dimenzijah pa so na primer v primeru svetlobnih snopov, prisotni tudi ostali vpadni koti. V primeru poljubnega vpadnega kota lahko vsako komponento polja

zapišemo kot skalarno vsoto dveh podkomponent, pripadajočih smeri širjenja. Na primer v dvodimenzionalnem primeru je lahko $\mathbf{k} = (k_x, k_y, 0)$, $\mathbf{E} = (E_x, E_y, 0)$ ter $\mathbf{H} = (0, 0, H_z)$. Sedaj razdelimo (*split*) komponento H_z

$$H_z = H_{zx} + H_{zy}, \quad (3.19)$$

kjer H_{zx} pripada komponenti valovanja, ki se širi s k_x , H_{zy} pa tisti s k_y . Če sedaj vsaki komponenti pripisemo drugačen σ_x oziroma σ_y (σ_{mx} , σ_{my}) in to upoštevamo v sedaj štirih enačbah lahko zagotovimo ujemanje plasti za vse vpadne kote. Transverzalna komponenta valovanja se namreč po vpodu propagira po mejni plasti, dokler ne doseže mejne plasti na katero vpade pravokotno in se absorbira takrat. Na ta način ustvarimo plast s katero lahko absorbiramo vso vpadlo svetlobo. V praksi zaradi diskretizacije prostora še zmeraj pride do odbojev. Teh je manj, če postavimo $\sigma = \sigma(x) \propto x^2$, torej da počasi vključujemo prevodnost materiala.

3.1.3 Stabilnost

Diskretizacija prostora povzroči *numerično disperzijo* valovanja. Običajna disperzijska relacija, za valovanje s frekvenco ω , hitrostjo c in valovnim vektorjem \mathbf{k} je

$$\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2. \quad (3.20)$$

Ob diskretizaciji mreže, pa se ta relacija spremeni. Kot je moč pokazati velja,

$$\left[\frac{1}{c\Delta_t} \sin\left(\frac{\omega\Delta_t}{2}\right)\right]^2 = \left[\frac{1}{\Delta_x} \sin\left(\frac{k_x\Delta_x}{2}\right)\right]^2 + \left[\frac{1}{\Delta_y} \sin\left(\frac{k_y\Delta_y}{2}\right)\right]^2 + \left[\frac{1}{\Delta_z} \sin\left(\frac{k_z\Delta_z}{2}\right)\right]^2. \quad (3.21)$$

Ta relacija preide nazaj v (3.20), ko $\Delta_i \rightarrow 0$. Napako v fazi ϕ_{error} , ki jo pridobi propagirana svetloba na svoji poti dolžine d zaradi diskretizacije definiramo kot

$$\phi_{napaka} = (\tilde{k} - k)d. \quad (3.22)$$

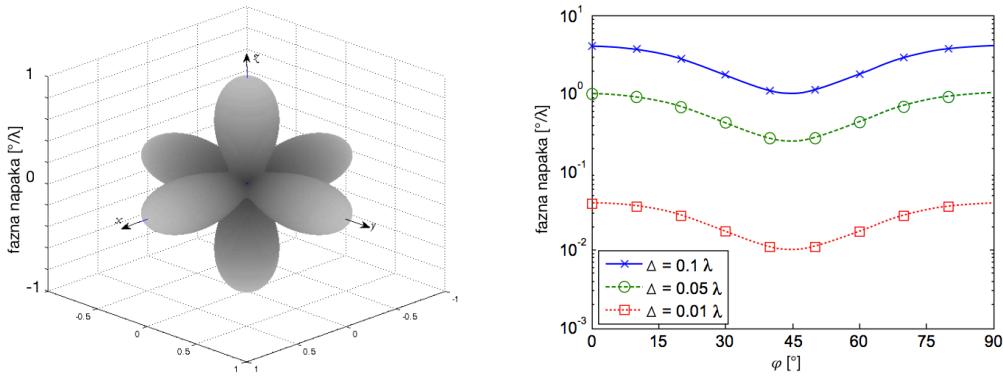
Tu je \tilde{k} valovno število v diskretnem primeru za katerega velja numerična disperzijska relacija (3.21), k pa valovno število v zveznem primeru. Enačba (3.21) pravzaprav pomeni močno anizotropijo torej odvisnost fazne napake od smeri propagacije (vektorja $\tilde{\mathbf{k}}$). Amplituda fazne napake je določena z velikostjo krajevnih korakov Δ_i . Slika 3.3a prikazuje fazno napako pridobljeno s prepotovano valovno dolžino λ pri diskretizaciji mreže $\Delta = \Delta_x = \Delta_y = \Delta_z = \lambda/20$. Na Sliki 3.3b pa je prikazana zgolj odvisnost fazne napake pri $z = 0$ za azimutalni kot φ v tej ravnini pri treh različnih vrednostih diskretizacije prostora Δ . Napaka je prikazana v logaritemski skali in jasno prikaže kako hitro se z diskretizacijo zmanjša.

Metoda FDTD ni stabilna za poljubno izbiro časovnega ter prostorskega koraka. Enačbo (3.21) lahko predelamo tako, da dobimo stabilne vrednosti razmerja $\Delta/(c\Delta_t)$. Če enačbo (3.21) rešimo za ω dobimo

$$\omega = \frac{2}{\Delta_t} \arcsin(\xi), \quad (3.23)$$

kjer smo s ξ označili

$$\xi = c\Delta_t \sqrt{\left[\frac{1}{\Delta_x} \sin\left(\frac{k_x\Delta_x}{2}\right)\right]^2 + \left[\frac{1}{\Delta_y} \sin\left(\frac{k_y\Delta_y}{2}\right)\right]^2 + \left[\frac{1}{\Delta_z} \sin\left(\frac{k_z\Delta_z}{2}\right)\right]^2}. \quad (3.24)$$



Slika 3.3: **a.)** Ovisnost napake v fazi v 3D k-prostoru, kjer opazimo, da numerična disperzija pripelje do močne anizotropije. Valovanje, ki se širi vzdolž ene izmed diagonalnih smeri bo na svoji poti pridobilo manjšo napako v fazi kot pa valovanje vzdolž ene izmed glavnih osi. **b.)** Ovisnost fazne napake od azimutalnega kota za tri različne vrednosti prostorske diskretizacije Δ . Uporabljena je logaritemsko skala.

Vir slik: [47]

Vrednost ξ je omejena navzgor in sicer je največja, ko $k_i \Delta_i / 2 = \pm\pi$, kar nam v primeru $\Delta_x = \Delta_y = \Delta_z = \Delta$ da

$$\xi = \frac{c\Delta_t}{\Delta} \sqrt{3}. \quad (3.25)$$

Ker $\omega \propto \arcsin(\xi)$ in je vrednost funkcije $\arcsin(x)$ za $x > 1$ *imaginarno število* je pogoj za stabilnost $\xi < 1$. To za vrednosti Δ_t v tem preprostem primeru pomeni

$$c\Delta_t < \frac{\Delta}{\sqrt{3}}. \quad (3.26)$$

Če je časovni korak ali krajevni korak prevelik, je $1 < \xi < \xi_{max}$, ko postaneta ω ter k imaginarna kar povzroči eksponentno rast ali pojemanje valovanja v simulaciji.

3.1.4 Naša implementacija

Koda za našo implementacijo metode FDTD je napisana deloma v Pythonu, deloma pa v OpenCL in C++ programskem jeziku. OpenCL (*Open Computing Language*) je orodje za pisanje kode, ki lahko teče na grafičnih (GPU) ali na procesnih enotah (CPU). Ker v vsakem časovnem koraku posodobimo vse komponente elektromagnetičnih polj na celotni mreži je za učinkovitejšo implementacijo metode FDTD moč uporabiti *vzporedno računanje*. Vzporedno računanje je zaradi večjega števila procesnih jeder veliko hitrejše na grafičnih enotah: pri večjih simulacijah, ki smo jih še lahko poganjali na njih je program tekel vsaj 5-krat hitreje. Problem nastane, ko želimo simulirati zares velike celice, saj imajo grafične enote manj spomina kot procesne enote. Zaradi tega je bilo pomembno, da imamo kodo, ki lahko teče v enem ali drugem okolju.

V našem primeru smo simulacije najpogosteje poganjali na grafičnih enpotah NVIDIA Titan X, vsaka z 3072 jedri ter 6GB delovnega spomina, kar nam je omogočalo simulacije v celicah velikosti do 50 milijonov točk. Primer celica velikosti

3.1. Metoda končnih diferenc v časovni domeni

$200 \times 200 \times 1300$ z resolucijo $20\text{nm}/\text{piko}$ pomeni prostor velikosti $4\mu\text{m} \times 4\mu\text{m} \times 28\mu\text{m}$.

Pred začetkom simulacije nastavimo vse potrebne parametre

- lastnosti celice: velikost v številu pik, resolucija (nm/piko), ...
- dolžina simulacije: število časovnih korakov
- lastnosti vira: valovna dolžina, red Laguerre-Gaussovega snopa, širina snopa, položaj grla, polarizacija, faza, ...
- lastnosti snovi: direktorsko polje, izredni in redni lomni količnik, ...

Rezultat simulacije sta seveda polji **E** in **H** v celotni mreži po vseh pretečenih korakih. Iz njih lahko nadalje izračunamo reprezentativne količine kot je električno polje oziroma intenziteta svetlobe v vseh točkah celice.

Poglavlje 4

Rezultati

Osnovni namen tega magistrskega dela je pokazati, da se lahko nematski profil dvojno zvitega cilindra v posebnem primeru, ko nanj vpada azimutalno polarizirana svetloba, obnaša kot leča ali pa kot valovni vodnik. V nadaljevanju bomo predstavili rezultate numeričnih simulacij, opravljenih z metodo FDTD, ki to potrjujejo.

To ni prvi primer nematskega profila za katerega je bilo pokazano, da vodi do lečenja in vodenja svetlobe. Podobno se zgodi za radialno polariziran snop, ki vpade na pobegli (*escaped*) nematski profil[18, 55].

4.1 Lečenje na DTC nematskem profilu

Vzemimo nematski profil, ki ga opisuje direktor definiran z (2.44). Nematske molekule naj bodo anizotropne z razliko lomnih količnikov $\Delta n = n_o - n_e < 0$. Optična os takega profila, torej smer vzdolž katere polarizirana svetloba občuti izredni lomni količnik n_e , se enakomerno spreminja v radialni smeri – v sredini profila ($r = 0$) je optična os vzporedna osi cilindra, ob večanju r pa se ne glede na smer oddaljevanja optična os enakomerno suka okoli radialne smeri. Običajno se direktor oziroma optična os v takem profilu zasuka za kot $\pi/4$, lahko pa si zamislimo tudi takšnega, kjer se zasuka za kot $\pi/2$. Ne glede kot zasuka, pa se simetrija takšnega profila ujema z azimutalno polariziranim snopom svetlobe, prikazanim na Sliki 2.4b. V azimutalno polariziranem snopu polarizacija v vsaki točki preseka kaže pravokotno na radialno os, podobno kot ima direktor DTC profila v vsaki točki preseka komponento direktorja prav tako usmerjeno v azimutalni smeri! V vsaki točki preseka je torej kot med optično osjo ter valovnim vektorjem \mathbf{k} enak θ polarizacija pa je vselej izredna zato je po enačbi (2.16) lomni količnik določen z $n(\theta)$ kot

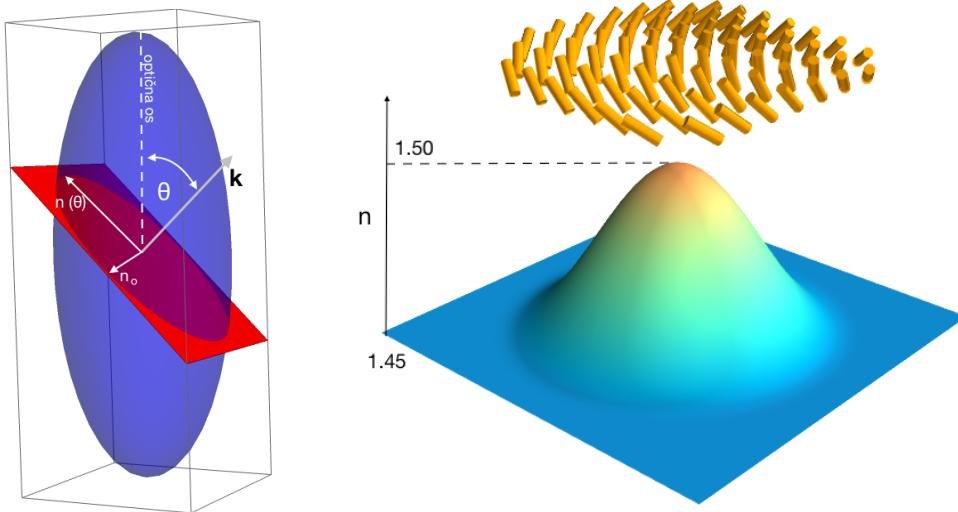
$$n(\theta) = \frac{n_o n_e}{n_e^2 \sin^2 \theta + n_o^2 \cos^2 \theta}. \quad (4.1)$$

To je prikazano na Sliki 4.1a, kjer je označena optična os, \mathbf{k} vektor svetlobe ter lastna lomna količnika. Azimutalna polarizacija ima v DTC nematskem profilu vedno komponento vzdolž optične osi zato občuti lomni količnik $n(\theta)$. V DTC profilu se kot θ linearno spreminja z r kot

$$\theta(r) = \frac{\pi}{2} \left(1 - q_0 \frac{r}{R}\right), \quad (4.2)$$

Poglavlje 4. Rezultati

kjer je R radij nematskega profila, q_0 pa kiralnost, ki določa za kolikšen kot se direktor zasuka do $r = R$. Če imamo opisani profil v nematicu z negativno dvolomnostjo ko je $\Delta n < 0$ oziroma $n_e < n_o$ ima lomni količnik (4.1) obliko prikazano na Sliki 4.1b. V prikazanem primeru je $n_e = 1.50$, $n_o = 1.45$ ter $\Delta n = -0.05$.



Slika 4.1: **a.)** Elipsoid z dolžinama polosi n_e ter n_o , kjer $n_o < n_e$, ter valovni vektor \mathbf{k} svetlobe, ki predstavlja smer v kateri svetloba potuje, ter skupaj s polarizacijo določa lomni količnik. **b.)** Odvisnost lomnega količnika v preseku dvojno zvitega cilindra za negativno dvolomen nematik. Prikazana je tudi ena plast DTC profila.

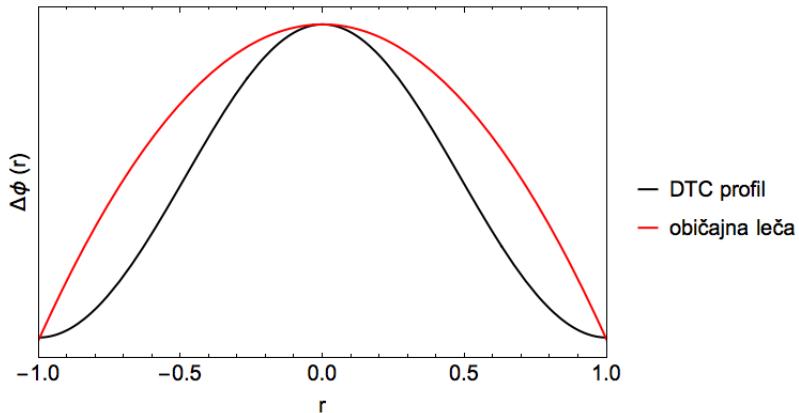
Faza, ki jo pridobi svetloba, ki se giblje skozi plast snovi debeline d z lomnim količnikom n je enaka $\phi = nd$. Prikazani profil lomnega količnika povzroči, da azimutalno polariziran snop doživi večji fazni zamik v centru DTC profila kot na robovih, kjer je lomni količnik manjši! To je čisto analogno situaciji ob vpodu svetlobe na običajno zbiralno lečo. Zbiralna steklena leča s konstantnim lomnim količnikom $n_{stekla} = 1.458$ je oblikovana tako, da je debelejša na sredini in tanjša ob robovih, kar pomeni, da bo fazni zamik ob osi leče kot proč od nje. Enačba, ki opisuje fazni zamik v bikonveksnih lečah v približku tanke leče je

$$\Delta\phi = \frac{2\pi}{\lambda} \frac{r^2}{2f}, \quad (4.3)$$

kjer je f goriščna razdalja leče (določena s krivinskim radijema obeh površin), r razdalja od osi leče, λ pa valovna dolžina vpadne svetlobe. Fazna zamika v obeh primerih lahko primerjamo, kar je prikazano na Sliki ?? za primer $d = 15 \mu\text{m}$ ter $f = 20 \mu\text{m}$.

Začetne numerične simulacije lečenja z metodo FDTD so bile opravljene z lastnostmi simulacijske celice in parametri žarka ter nematskega profila predstavljenimi v Tabeli 4.1.

Celica je oblike poldogovatega kvadra in daljše stranice ustrezajo smeri osi cilindra ter smeri propagacije svetlobe. Parameter, ki se je spremenjal v teh začetnih simulacijah je bila vstopna širina žarka w_0 . Vstopni žarek je imel v vseh primerih Laguerre-Gaussov amplitudni profil (enačba 2.22), reda ($p = 0$, $\ell = 1$) in tak, da

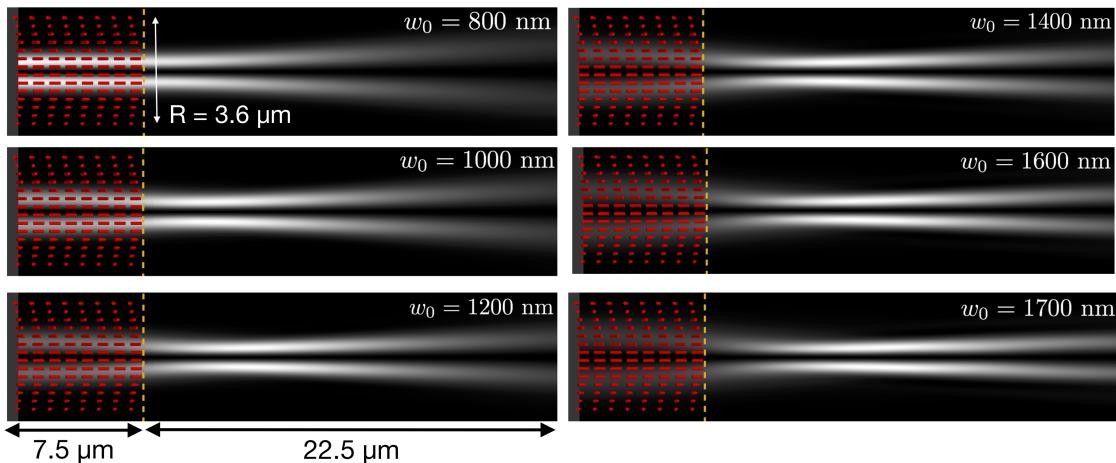


Slika 4.2: Primerjava faznega zamika, ki ga povzroči običajna steklena leča v primerjavi z zamikom, ki ga na azimutalno polariziranem snopu, povzroči DTC profil debeline d .

Tabela 4.1: Lastnosti celice, žarka ter nematskega profila uporabljeni v osnovnih simulacijah lečenja na DTC nematskem profilu.

velikost celice	$240 \times 240 \times 1000$	kiralnost, q_0	1.0
resolucija	30 nm/vox	n_o, n_e	1.45, 1.50
debelina DTC	250 vox	vpadna polarizacija	azimutalna
radij DTC	110 vox	valovna dolžina, λ	400 nm

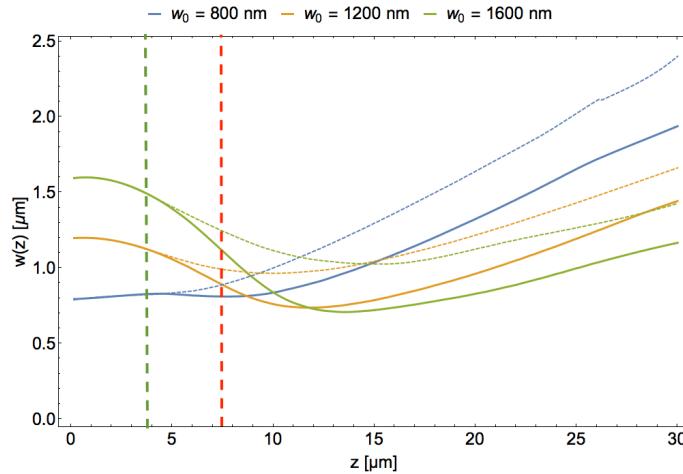
je imel grlo na mestu vstopa v simulacijsko celico torej tudi na mestu, kjer se je začel nematski DTC profil. Kako močan je fazni zamik določa debelina profila d ter dvolomnost molekul Δn . Po propagaciji skozi DTC profil preide svetloba v območje, kjer je definiran uniformen nematski profil z usmerjenostjo v smeri osi z . Rezultati opisanih simulacij so prikazani na Sliki 4.3.



Slika 4.3: Simulacije lečenja svetlobe na DTC nematskem profilu debeline $d = 7.5 \mu m$ za različne vstopne širine snopa w_0 . Prikazani so yz prerezni sredini snopa, svetloba pa na vseh slikah potuje v desno, v smeri osi z .

Poglavlje 4. Rezultati

Vidimo, da postaja lečenje vse močnejše s širino vpadnega snopa, kajti ta vse bolj vpada na območje DTC profila kjer se n najbolj hitro spreminja zato različni deli žarka pridobijo večjo medsebojno fazno razliko. Zanimivo si je ogledati tudi kakšna je širina žarkov vzdolž osi z za različne vstopne širine, kar iz zgornje slike ne opazimo zlahka. Iz takšnih profilov lahko izloščimo tudi položaj in širino grla snopa po prehodu skozi DTC lečo. Za tri različne vstopne širine w_0 , je to prikazano na Sliki ?? za dve različni debelini leč d .



Slika 4.4: Profili širine treh snopov z različno vstopno širino vzdolž osi z . Položaja, kjer se končata DTC nematska profila debelin $d = 3.75 \mu\text{m}$ ter $d = 7.5 \mu\text{m}$ sta označena z zeleno in rdečo navpično črtkano črto.

Opazimo, da se lečenje prične že znotraj nematskega profila za večje vstopne širine pa se grlo snopa oddaljuje od leče in postaja ožje.

Radialno polariziran snop še na gornjo sliko!

4.1.1 Cilindrično lečenje

Spremembe polarizacije, simulacije 14.3!

4.2 Vodenje svetlobe

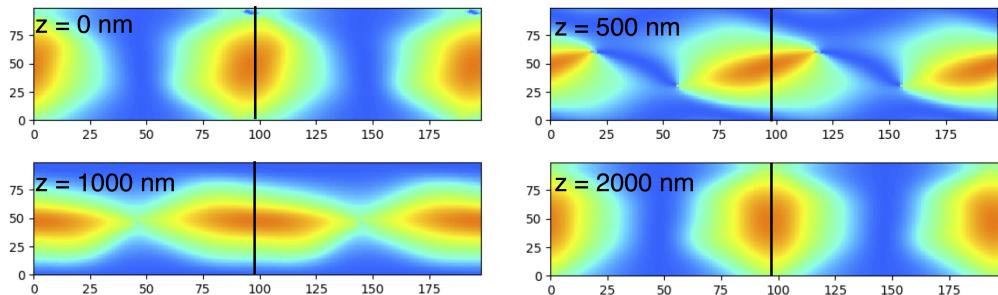
Opisano lečenje na DTC nematskem profilu je moč razširiti na vodenje svetlobe, ki ga poznamo v optičnih vlaknih. Še več, ker radialno polarizirana svetloba ne občuti spremenjanja lomnega količnika je ni moč voditi po DTC proflu, kar pomeni, da lahko takšen profil deluje kot polarizacijsko občutljivi valovni vodnik, ki deluje le za pravilno izbrano vstopno polarizacijo.

4.2.1 Vodenje svetlobe v zakriviljenem profilu

Zanimalo nas je tudi, če je mogoče tak profil zakriviti, vsaj v eni dimenziji in kakšne posledice ima to za izgube v valovnem vodniku. Takšen profil smo modelirali kot del krožnice s krivinskim radijem R_k . Direktor v središču zakriviljenega dvojno-zvitrega cilindra seveda sledi zakriviljenosti osi.

4.3 Vodenje svetlobe v modrih fazah

Kot omenjeno v poglavju o modrih fazah, so dvojno-zviti cilindri gradniki v modrih fazah naloženi v pravilno preprosto kubično ali ploskovno centrirano kubično rešetko. Osnovni celici modrih faz tipa 1 in 2 (BP_1 in BP_2) sta prikazana na Slikah 2.11a ter 2.11b. Iz numeričnih izračunov tenzorja ureditvenega parametra osnovnih celic v modrih fazah, opravljenih z metodo opisano v [34, 42], smo lahko prišli do direktorskega profila v eni osnovni celici. Za prikaz smo vzeli osnovno celico BP_2 in sestavili več takšnih celic skupaj tako, da smo sestavili daljši dvojno-zviti cilinder, ki je sedaj del modrih faz. Tak direktorski profil ni več čisti DTC profil, ki smo ga opisovali do sedaj, saj se periodično srečuje z ostalimi cilindri, kar povzroči lokalno spremenjanje direktorja na robu. To ima posledice za lomni količnik za azimutalno polarizirano vpadno svetlobo, za katero se sedaj vzdolž osi z poravnane z osjo sestavljenega cilindra, ta vzdolž osi z spreminja, kot je prikazano na Sliki ??.



Slika 4.5: *Spreminjanje profila lomnega količnika vzdolž osnovne celice v z smeri. S črno črto na sredini, je označeno mesto, kjer smo združili dve osnovni celici BP_2 .*

Poglavlje 4. Rezultati

Poglavlje 5

Zaključek

Literatura

- [1] A. E. Willner, R. L. Byer, *et. al.*, *Optics and Photonics: Key Enabling Technologies*, Proce. of the IEEE, **(100)**, 1604-1634, 2012.
- [2] B. P. Abbott *et. al.*, *Observation of Gravitational Waves from a Binary Black Hole Merger*, Phys. Rev. Lett., **116**, 2016.
- [3] T. A. Klar, S. W. Hell, *Subdiffraction resolution in far-field fluorescence microscopy*, Opt. Lett., **(24)**, 954-956, 1999.
- [4] H. Mikami, L. Gao, K. Goda, *Ultrafast optical imaging technology: principles and applications of emerging methods*, Nanophotonics, **(5)**, 497-509, 2016.
- [5] C. M. Soukolis, M. Wegener, *Past achievements and future challenges of three-dimensional photonic metamaterials*, Nat. Phot., **(5)**, 523-530, 2011.
- [6] S. Jahani, Z. Jacob, *All-dielectric metamaterials*, Nat. Nanotech., **(11)**, 23-36, 2016.
- [7] R. A. Shelby, D. R. Smith, S. Schultz, *Experimental verification of a negative index of refraction*, Science, **(292)**, 77-79, 2001.
- [8] J. B. Pendry, D. Schurig, D. R. Smith, *Controlling electromagnetic fields*, Science, **(312)**, 1780-1782, 2006.
- [9] T. Ergin, N. Stenger, P. Brenner, J. B. Pendry, M. Wegener *Three-dimensional invisibility cloak at optical wavelengths*, Science, **(328)**, 337-339, 2010.
- [10] *Silicon Photonics* [focus issue], Nat. Phot., **(4)**, 491-578, 2011.
- [11] <http://www.intel.com/content/www/us/en/architecture-and-technology/silicon-photonics/silicon-photonics-overview.html>, dostopano: 24. 5. 2017.
- [12] R. Bose, D. Sridharan, H. Kim, G. S. Solomon, E. Waks, *Low-photon number optical switching with a single quantum dot coupled to a photonic crystal cavity*, Phys. Rev. Lett., **(108)**, 227402, 2012.
- [13] T. Espinosa-Ortega, T. C. H. Liew, *Complete architecture of integrated photonic circuits based on and not and not logic gates of exciton polaritons in semiconductor microcavities*, Phys. Rev. B, **(87)**, 195305, 2013.
- [14] W. Chen, K. M. Beck, R. Bücker, M. Gullans, M. D. Lukin, H. Tanji-Suzuku, V. Vuletić, *All-optical switch and transistor gated by one stored photon*, Science, 768-770, 2013.

Literatura

- [15] I. Muševič, *Liquid-crystal micro-photonics*, Liq. Crys. Rev., (4), 1-34, 2016.
- [16] P. Yeh, C. Gu, *Optics of liquid crystal displays*, Wiley, 2010.
- [17] H. Coles, S. Morris, *Liquid-crystal lasers*, Nat. Phot., (4), 676-685, 2010.
- [18] M. Čančula. *Mutually coupled flow of light and liquid crystal ordering* (doktorska disertacija), FMF, Ljubljana, 2017.
- [19] B. E. A. Saleh, M. C. Teich. *Fundamentals of photonics*, Wiley, New Jersey (NJ), 2007.
- [20] R. Podgornik, A. Vilfan, *Elektromagnetno polje*, DMFA, Ljubljana, 2012.
- [21] Q. Zhan, *Cylindrical vector beams: from mathematical concepts to applications*, Adv. Opt. Photonics, **1**, 1-57 (2009).
- [22] R. Dorn, S. Quabis, G. Leuchs, *Sharper focus for a radially polarized light beam*, Phy. Rev. Lett., **91**, 23, 2003.
- [23] V. G. Niziev, A. V. Nesterov, *Influence of beam polarization on laser cutting efficiency*, Jour. of Physics D, **(32)**, 13, 1999.
- [24] K. S. Youngworth, T. G. Brown, *Focusing of high numerical aperture cylindrical-vector beams*, Opt. Express, **(7)**, 77-87, 2000.
- [25] Y. Kozawa, S. Sato, *Generation of radially polarized laser beam by use of a conical Brewster prism*, Opt. Letters, **(30)**, 3063-3065, 2005.
- [26] G. Volpe, D. Petrov, *Generation of cylindrical vector beams with few-mode fibers excited by Laguerre-Gaussian beams*, Opt. Comm., **(237)**, 89-95, 2004.
- [27] S. Ko, C. Ting, A. Fuh, T. Lin, *Polarization converters based on axially symmetric twisted nematic liquid crystal*, Opt. Express, **(18)**, 3601-3607, 2010.
- [28] M. Čančula, M. Ravnik, S. Žumer, *Generation of vector beams with liquid crystal disclinations lines*, Phy. Rev. E, **(90)**, 2, 2014.
- [29] P. G. de Gennes, J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals*, Clarendon Press, Oxford, 1993.
- [30] P. J. Collings, M. Hird, *Introduction to Liquid Crystals: Chemistry and Physics*, Taylor&Francis, 1997.
- [31] S. Chandrasekhar *Liquid Crystals*, Cambridge University Press, 1992.
- [32] E. F. Gramsbergen, L. loNGA, W. H. de Jeu, *Landau theory of the nematic-isotropic phase transition* Phy. Rep., **135**, 195-257, 1986.
- [33] TCI America, *Liquid crystal (LC) materials*, http://www.tcichemicals.com/eshop/en/us/category_index/12775/, dostop: 2. 5. 2017.
- [34] M. Ravnik, S. Žumer, *Landau-de Gennes modelling of nematic liquid crystal colloids*, Liq. Crys., **36**, 1201-1214.

- [35] D. Kleman, O. D. Lavrenovitch, *Soft Matter Physics: An Introduction*, Springer, New York, 2003.
- [36] F. Cardano, E. Karimi, S. Slussarenko, L. Marucci, C. de Lisio, E. Santamato, *Polarization pattern of vector vortex beams generated by q-plates with different topological charges*, Appl. Optics, **(51)**, C1-C6, 2012.
- [37] L. Marrucci, C. Manzo, D. Paparo, *Optical spin-to-orbital angular momentum conversion in inhomogeneous anisotropic media*, Phys. Rev. Lett., **(96)**, 16, 2006.
- [38] D. C. Wright, N. D. Mermin, *Crystalline liquids: the blue phases*, Rev. Mod. Phys., **61**, 385-432, 1989.
- [39] H. Kikuchi, M. Yokota, Y. Hisakado, H. Yang, T. Kajiyama, *Polymer-stabilized liquid crystal blue phases*, Nat. Mater., **(1)**, 64-68, 2002.
- [40] H. J. Coles, M. N. Pivnenko, *Liquid crystal ‘blue phases’ with a wide temperature range*, Nature, **(436)**, 997-1000, 2005.
- [41] M. Ravnik, J. Fukuda, *Templated blue phases*, Soft Matter, **(11)**, 8417, 2015.
- [42] M. Ravnik, G. P. Alexander, J. M. Yeomans, S. Žumer, *Three-dimensional colloidal crystals in liquid crystalline blue phases*, PNAS, **(108)**, 5188-5192, 2011.
- [43] H. Kikuchi, H. Higuchi, Y. Haseba, T. Iwata, *Fast electro-optical switching in polymer-stabilized liquid crystalline blue phases for display application*, SID07 Digest, **(38)**, 1737-1740, 2007.
- [44] A. Taflove, S. C. Hagness, *Computational electrodynamics. The Finite Difference Time Domain Method*, Artech House, Norwood (MA), 2005.
- [45] A. Taflove, A. Oskooi, S. G. Johnson, *Advances in FDTD computational electrodynamics: photonics and nanotechnology*, Artech house, Norwood(MA), 2013.
- [46] G. L. Pedrola *Beam propagation method for design of optical waveguide devices*, Wiley, 2016.
- [47] S. D. Gedney, *Introduction to the finite-difference time-domain method for electromagnetics* Morgan&Claypool, 2011.
- [48] R. C. Jones, *A new calculus for the treatment of optical systems*, J. Opt. Soc. Am., **31**, 488-493 (1941).
- [49] A. V. Lavrinenko, J. Lægsgaard, N. Gregersen, F. Schmidt, T. Søndergaard. *Numerical Methods in photonics*, CRC Press, 2015.
- [50] J. P. Berenger, *A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves*, J. Comput. Phys., **114**, 185-200, 1994.
- [51] J. B. Schneider, *Understanding the Finite-Difference Time-Domain Method*, not published, available at: <http://www.eecs.wsu.edu/~schneidj/ufdtd/ufdtd.pdf>, 2016.

Literatura

- [52] S. Stallinga, *Berreman 4 × 4 matrix method for reflective liquid crystal displays*, J. Appl. Phys., **85**, 3023-3031 (1998).
- [53] G. R. Werner, J. R. Cary, *A stable FDTD algorithm for non-diagonal anisotropic dielectrics*, J. Comput. Phys, **226**, 1085-1101, 2007.
- [54] Wikipedia, *Beer-Lambert law*, https://en.wikipedia.org/wiki/Beer-Lambert_law, 20.4.2017.
- [55] M. Čančula, M. Ravnik, I. Muševič, S. Žumer, *Liquid microlenses and waveguides from bulk nematic birefringent profiles*, Opt. Express, **(24)**, 22177-22188, 2016.

Dodatek A

Dodatek 1

A.1 Izračun odvodov na naši mreži

Dodatek A. Dodatek 1
