

Комп'ютерне моделювання процесу утворення електрокерованих планарних світловодних структур.

Асп. Чабан О¹., асп. Баштик Ю¹. док. Вісьтак М².

¹Національний університет «Львівська політехніка»

²Львівський національний медичний університет імені Данила Галицького

Abstract. Modeled the process of creating electrically LED planar structures. A temporal study of the formation of a stable signal under different control voltages.

Keywords: light pipes, refractive index, dielectric constant.

Вступ. Планарні світловоди використовуються в оптичних колах обробки та передачі інформації як пасивні, активні та з'єднувальні елементи ланцюгів таких кіл. В сучасних умовах для їх виготовлення найчастіше використовують тверді речовини. У твердотільних планарних світловодних системах існує проблема створення активних та пасивних елементів на основі одного матеріалу. При застосуванні сере-довиць із різними оптичними властивостями спостерігаються значні втрати оптичного випромінювання на межах розділу різних матеріалів. Одним зі шляхів вирішення цієї проблеми є застосування рідкокристалічних (РК) матеріалів як активного середовища планарних світловодів, які характеризуються високою анізотропією показника заломлення, високою чутливістю до зовнішніх електричного та магнітного полів та широким діапазоном робочих температур.

Однак для їх створення необхідно докладно дослідити процеси оптичного випромінювання (в тому числі лазерного видимого діапазону) у світловодах з рідкокристалічною серцевиною, зокрема явища розсіювання світла та ефекти, що виникають під час проходження світла в неоднорідно орієнтованих ша-рах рідких кристалів. Тому моделювання розподілу поля директора в шарі нематичного рідкого кристалу (НРК) з початковою гомеотропною орієнтацією в зовнішньому електричному полі, дасть можливість досконало вивчити градієнтні світловоди з рідкокристалічною серцевиною.

Основна частина. Комп'ютерне моделювання молекулярних моделей шарів нематичного рідкого кристалу виконане за допомогою програми GBMOLDD [1]. Насамперед детально зупинимось на особливостях молекулярних моделей, із якими можна працювати GBMOLDD. Це моделі гібридного типу, в яких молекулярна структура може містити два типи частинок, LJ типу, які взаємодіють через потенціал Леннарда-Джоунса та GB типу, які взаємодіють через потенціал Гей-Берне, наприклад, біфеніл, азобензин тощо. Можливий розгляд і окремих незв'язаних частинок одного чи другого типу, наприклад, для опису низькомолекулярного розчинника, відповідно ізотропного чи анізотропного. Кількість різних типів топології, які одночасно можна використовувати під час моделювання необмежена, така особливість дає

зможу описувати розчини, суміші, молекули, тощо. Молекулярні моделі розглядаються на класично-механічному рівні та описуються за допомогою силових полів [2].

Молекулярні моделі розглядаються на класично-механічному рівні та описуються за допомогою силових полів [1]. Зв'язуючі взаємодії в молекулі мають такий вигляд.

$$E_m^{bon} = \sum_{i=1}^{n_b} \frac{1}{2} k_i^{(b)} (l_i - l_i^{(0)})^2 + \sum_{i=1}^{n_a} \frac{1}{2} k_i^{(a)} (Q_i - Q_i^{(0)})^2$$

де, n_b - кількість зв'язків, n_a - кутів, а n_z - додаткових кінцевих кутів у місцях приєднання мезогенів у молекулі m . l_i , θ_i , ζ_i - відповідно біжучі індекси цих величин, а $l_i^{(0)}$, $\theta_i^{(0)}$, $\zeta_i^{(0)}$ - їх рівноважні значення. Коефіцієнти пружності відповідних гармонічних сил - $k_i^{(b)}$, $k_i^{(a)}$ і $k_i^{(z)}$. ζ_i вимірюються як кут між довгою віссю мезогена та зв'язком між його центром та сусіднім LJ псевдоатомом.

Торсійні взаємодії враховуються у формі Рика-ерта-Беллеманса [2]

$$U_i^{tors1} = \sum_{n=1}^5 \frac{1}{2} C_i^{(n)} \cos^n \phi_i$$

або у формі обірваних рядів Фур'є

$$U_i^{tors1} = \frac{1}{2} \left[V_i^{(1)} (1 + \cos \phi_i) + V_i^{(2)} (1 - \cos 2\phi_i) + V_i^{(3)} (1 + \cos 3\phi_i) \right]$$

Усі інші пари взаємодіють за допомогою незв'язних потенціалів залежно від типу псевдоатомів. Пара LJ атомів взаємодіє через факторизований потенціал Леннарда-Джонса

$$U_{ij}^{LJ} = \left[\frac{A_i^{LJ} + A_j^{LJ}}{r_{ij}} \right]^{12} - \left[\frac{C_i^{LJ} + C_j^{LJ}}{r_{ij}} \right]^6$$

Аналогічно пара GB псевдоатомів взаємодіє через потенціал Гей-Берне.

Змішаний потенціал між LJ та GB частинками отримують із узагальненого потенціалу Гей-Берне [2]

$$U_{ij}^{LJGB} = \varepsilon_{ij}^{LJGB} \left[\left(\frac{r_{ij}^{LJGB}}{p_{ij}^{LJGB}} \right)^{12} - \left(\frac{r_{ij}^{LJGB}}{p_{ij}^{LJGB}} \right)^6 \right]$$

де i - псевдоатом LJ типу, а j - GB типу.

Отже, повний вираз для потенціальної енергії записується у вигляді.

$$E_{total} = \sum_{m=1}^{N_{mol}} E_m^{bom} + \sum_{i=1}^{N_{LJ}} \sum_{j \leq i}^{N_{LJ}} U_{ji}^{(LJ)} + \sum_{i=1}^{N_{LG}} \sum_{j \geq 1}^{N_{LG}} U_{ji}^{(LJ)} + \sum_{i=1}^{N_{LJ}} \sum_{j=1}^{N_{JB}} U_{ji}^{(LJGB)}$$

де N_{mol} , N_{LJ} і N_{GB} – сумарна кількість молекул, LJ та GB псевдо атомів комірки, що моделюється.

Вплив поверхні задається виразом

$$V = -f_{sl} \cdot (\vec{e} \cdot \vec{S})^2 \cdot e^{-\frac{Z}{l_d}},$$

де \vec{e} – вектор початкової орієнтації; \vec{S} – вектор повороту щодо нормалі; Z – товщина шару; l_d – параметр далекодії.

Програмний засіб GBMOLDD дає змогу отримувати розподіл напрямку директора в комірку, а відповідно і величину параметру порядку, яка пов'язана із значенням показника заломлення. Базовими входними даними для програми є:

n_x, n_y, n_z – кількість молекул, відповідно, по осі x, у та z;

$srf-fstr$ – величина сили зчеплення приповерхневих шарів;

T – температура моделювання;

$fld-str$ – величина поля, яка діє на молекули РК в одному з напрямків x, у або z;

Програмний засіб GBMOLDD дає змогу отримувати розподіл напрямку директора в комірку, а відповідно і величину параметру порядку, яка пов'язана із значенням показника заломлення.

На рис.1. представлено результати моделювання з використанням наведеної програми. Початкова гомеотропна текстура нематика, з якої починається моделювання, наведена на рис.1а. На рис.1б представлено розташування молекул в смектичній А-фазі де спостерігаємо пошарове розташування молекул, як у прилеглих областях так і в середній області. Параметр порядку для такої структури $S=0,82$.

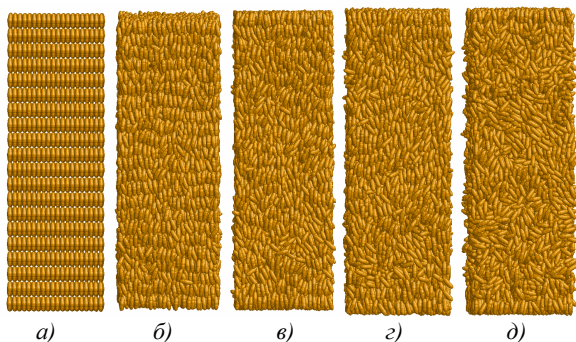


Рис.1. Змодельовані текстури: а) початкове розташування молекул об'єкта моделювання, б) текстура смектика при $S=0,82$, в) початкова текстура нематичної фази при $S=0,6$, г) початкова текстура нематичної фази при $S=0,6$, $S=0,7$ д) ізотропна фаза, $S=0,2$.

Моделльний РК складається з молекул сигароподібної форми зі співвідношенням довжини до ширини як 3:1 та від'ємною величиною діелектричної анізот-

ропії. Величина модельного боксу складала 20x20x20 молекул з початковою гомеотропною орієнтацією. Напрямок переорієнтації задавався початковим переднахилом текстури величиною 50[3].

Зі зростанням температури (рис.1в) проходить розупорядкування смектичної фази внаслідок виходу молекул із шарів. З подальшим збільшенням температури (рис.1г) молекули, які розташовані близько до обмежуючих поверхонь, зберігають гомеотропний стан, а з віддаленням від поверхні починається розупорядкування молекул, зумовлюючи перехід у нематичну фазу. Параметр порядку при цьому зменшується і дорівнює $S=0,6$. Після фазового переходу в ізотропну рідину (рис.1.д) відбувається повне розупорядкування в розташуванні молекул. Параметр порядку при цьому дорівнює $S=0,2$.

Розглянемо поведінку молекул нематичного РК з від'ємною діелектричною анізотропією при початковій гомеотропній орієнтації під дією електричного поля. На рис.3 показано процес зміни орієнтації молекул за певний проміжок часу після прикладання постійного електричного поля. Як видно з рисунків, процес переорієнтації молекул починається зі збурення початкової гомеотропної текстури. В результаті через певний проміжок часу відбувається переорієнтація більшості молекул РК в напрямку дії поля, внаслідок чого утворюється планарно орієнтований шар, однак у приповерхневих ділянках зберігаються гомеотропно орієнтовані шари. Таке розташування молекул у шарі нематичного рідкого кристала є аналогом градієнтного світловоду, адже враховуючи, що $\Delta n = n_{\parallel} - n_{\perp}$, величина Δn змінюється від мінімального значення (приповерхневі області) до максимального (центральні області).

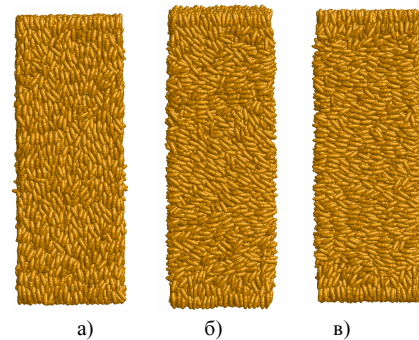


Рис.3. Змодельована текстура нематика при різних значеннях величини прикладеного модельного електричного поля: а) $f=0,3$, б) $f=0,9$ в) $f=1,1$.

Однак крім кінцевої картини деформації директора також було досліджено динаміку переорієнтації. Динаміка процесу оцінювалась шляхом визначення величини параметру порядку від моменту прикладання поля до його стабілізації. Як часовий еквівалент було обрано кількість ітерацій.

На рис.4. зображено залежність параметру порядку від кількості ітерацій (часу) при різних величині прикладеного поля. На всіх отриманих залежностях спостерігається початкове зменшення параметру порядку, викликане розупорядкуванням гомеотропної текстури викликане прикладенням поля, з подальшим його зростанням аж до повної стабі-

лізації при утворення переорієнтованого планарного шару. Тривалість процесу стабілізації структури є мінімальною при значеннях прикладеного поля 0.7-0.9. При менших значеннях поля, незважаючи на мінімальне падіння параметра порядку, час переорієнтації збільшується в наслідок повільної переорієнтації молекул під дією слабого поля. При більших значеннях поля ($f > 0.9$) швидкий процес переорієнтації компенсується суттєво більшим розвпорядкуванням початкової текстури, що в результаті приводить до збільшення часу утворення стабільної текстури.

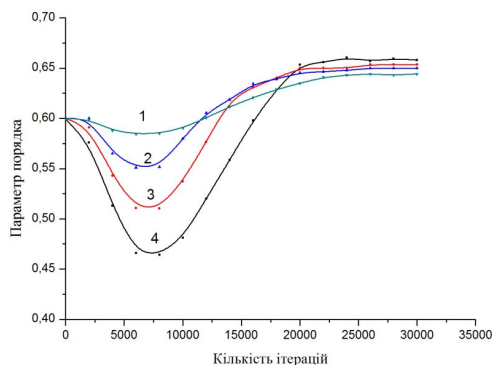


Рис.4. Залежність параметра порядку від кількості ітерацій (часу) при різній величині прикладеного поля: 1-0,3; 2-0,7; 3-0,9; 4-1,1.

Експеримент. Об'єктом коноскопічних досліджень був РК матеріал МББА. Дослідження проводились у комірці типу сандвіч з товщиною шару РК 50 мкм, початкова гомеотропна орієнтація задавалась за допомогою нанесення полімерного орієнтуючого шару PI 2555, а також введенням в РК матеріал лецитину. Як джерело випромінювання нами був використаний HeNe лазер з довжиною хвилі випромінювання $\lambda = 0,63$ мкм. Особливістю використовуваного РК матеріалу є додатна анізотропія показника заломлення в поєднанні з від'ємною анізотропією діелектричної проникності.

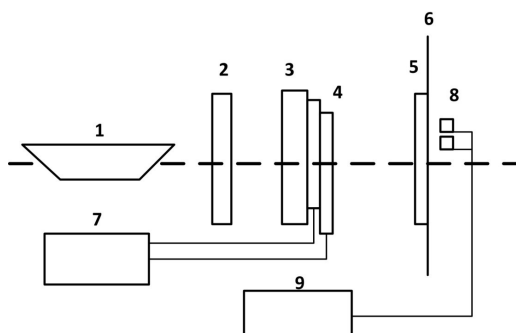


Рис.5. Блок-схема реєстрації коноскопічних картин: 1 – лазер, 2- поляризатор, 3 – розсіювальна пластина, 4 - РК комірка, 5 – аналізатор, 6 – екран, 7 - блок живлення, 8 – система фотодіодів, 9 ПК

Такі параметри нематичного РК призводять до того, що прикладення зовнішнього електричного поля за початкової планарної орієнтації зумовлює переорієнтацію довгих осей молекули РК в напрямку, паралельному до підкладок, що призводить до утворення планарної текстури. Дослідження динамічних характеристик проводились методом реєстрації зміни

коноскопічних картин. [4]. Блок-схема експерименту показана на рис.5.

На рис.6. наведені експериментальні результати дослідження часових характеристик процесу утворення світловодної текстури в шарі нематика.

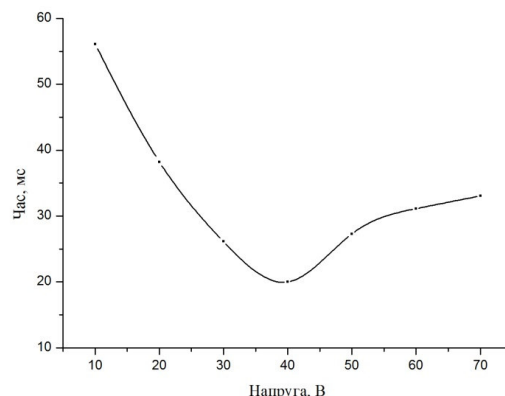


Рис.6. Залежність часу утворення стабільної світловодної структури від величини прикладеної напруги.

Отримана експериментальна залежність має яскраво виражений мінімум при значенні керуючої напруги 40В. Для пояснення цього факту проведемо аналіз коноскопічних картин, отриманих протягом експерименту.

На рис.7 та 8 наведені експериментальні коноскопічні картини, отримані для НРК МББА в зовнішньому електричному полі за початкової гомеотропної орієнтації для значень керуючої напруги 35 та 55В відповідно. На першій світлинці зображена експериментальна коноскопічна картина, яка відповідає початковій гомеотропній орієнтації шару РК. Такий висновок можна робити в зв'язку з наявністю на інтерференційній картині в центрі поля огляду характерного темного хреста, утвореного ізогірами, навколо якого розташовані ізохромні кільця.

Переорієнтація довгих осей молекул у центральній ділянці шару РК (для малих значень керуючої напруги) призводить до зміни інтерференційної картини, а саме, до зміщення хреста з центру поля огляду в напрямку переорієнтації довгих осей молекул нематика.

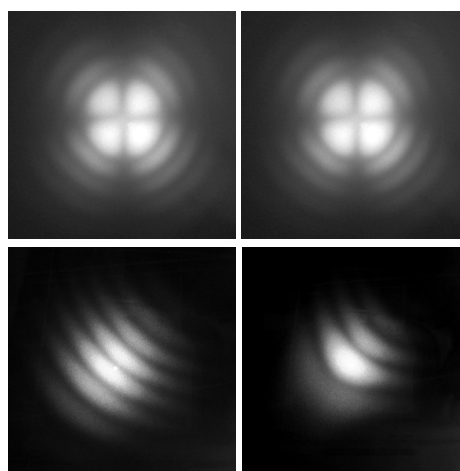


Рис.7. Послідовність зміни коноскопічної картини при прикладенні напруги ($U=35В$).

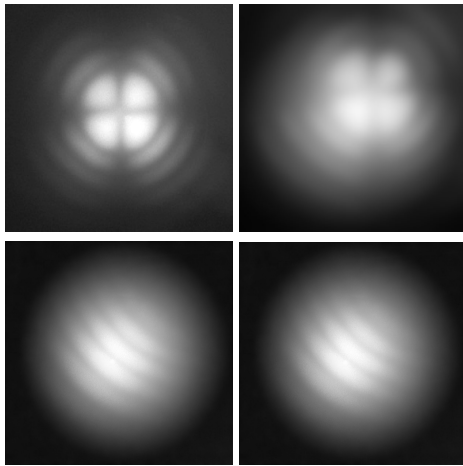


Рис.8. Послідовність зміни коноскопічної картини при прикладенні напруги ($U=55\text{В}$).

Подальше розширення планарно орієнтованої зони в об'ємі РК супроводжується збільшенням відстані між ізохромними дугами коноскопічної картини та їх деформацією. Наступним етапом зміни картини є утворення ізохром гіперболічного виду з подальшим утворенням коноскопічної картини, характерної для планарної орієнтації нематика. Однак відсутність симетрії кінцевої коноскопічної картини щодо осі поширення випромінювання свідчить про наявність у зразку тонких приповерхневих гомеотропно орієнтованих шарів[5,6].

Загалом послідовності коноскопічних картин в обох випадках є подібними. Однак при величині керуючої напруги 55 В спостерігається суттєве зменшення контрасту коноскопічної картини, що свідчить про втрату досконалості текстури нематика викликане розвпорядкування молекул під дією поля. Сильне розвпорядкування в процесі переорієнтації на нашу думку є причиною зростання часів утворення світло-водної текстури в шарі нематика. Проведений експеримент доволі точно збігається з попереднім комп'ютерним моделюванням.

Порівнюючи експериментальні та теоретичні коноскопічні картини, можна зробити висновок, що прикладення зовнішнього електричного поля до рідкокристалічної комірки з початковою гомеотропною орієнтацією та за від'ємної анізотропії діелектричної проникності призводить до утворення в центрі дослідної комірки стабільної ділянки з планарною орієнтацією рідкого кристала. В діапазоні досліджених напруг зовнішнє електричне поле не призводить до повної переорієнтації шару РК, тобто за максимального значення напруги ($U=50\text{В}$) спостерігається наявність в об'ємі РК комірки стабільних гомеотропно орієнтованих приповерхневих шарів. Виходячи з вищевикладеного, можна стверджувати, що в стандартній сандвіч-комірці з гомеотропною початковою орієнтацією в шарі РК з від'ємною діелектричною анізотропією та додатною анізотропією показника заломлення під дією електричного поля утворюється текстура, оптичні властивості якої задовольняють умови планарного світловоду. Водночас розміри серцевини такого планарного світловоду

можна змінювати в широких межах, змінюючи керуючу напругу.

Розкид розрахункових значень положення директора в шарі пояснюється малою шириною модельного шару РК. Такий розкид можна усунути шляхом збільшення лінійних розмірів об'єкта моделювання, однак це приводить до різкого збільшення кількості та часу обчислень. Отриманий розподіл дозволяє визначити розподіл показника заломлення в шарі РК.

Висновок. Дослідження динамічних характеристик процесу переорієнтації структур нематичного РК в зовнішньому електричному полі показало наявність мінімуму часу включення (утворення світловодної структури) в залежності від величини прикладеної напруги. Виявлене зростання часу включення при високих (більше 50В) значеннях напруги можна пояснити тимчасовою розвпорядкованістю зразка під дією електричного поля викликану втратою трансляційної впорядкованості нематичного шару, яка задається лише напрямком переднахилу початкової орієнтації. Це дало змогу розробити двостадійний метод керування планарними світловодними структурами, який полягає в прикладенні до РК структури в початковий момент часу електричного імпульсу напругою 40В та тривалістю до 20 мс з подальшою зміною величини напруги до значення яке відповідає необхідному розподілу профіля показника заломлення. Такий метод дозволяє максимально зменшити час ввімкнення режиму планарного світловода при збереженні трансляційної впорядкованості шару нематичного РК.

[1]. Ilnytskyi J. A domain decomposition molecular dynamics program for the simulation of flexible molecules of spherically-symmetrical and nonspherical sites. II. Extension to NVT and NPT ensembles / J. Ilnytskyi, M. Wilson // *Computer Physics Communications*.–2002.–V.148. – P. 43 – 58.

[2]. Israelachvili J. Intermolecular and surface forces / J. Israelachvili. – San Diego: Academic Press, 1992. – 440 p.

[3]. Z. Mykytyuk, Y. Ilnytskyi, A. Fechan, O. Sushynskyi, (V.Kotsun), (T. Prystay**) / *Computer simulation of the influence of electric field on forming of the gradient light guide in the layer of nematic liquid crystal* // *Proceedings of the XIIth International Conference TCSET'2014*. – February 25-March 1. Lviv-Slavske, Ukraine, 2014. – PP. 343 – 346.

[4]. Z. Hotra. Method for Determining of Threshold Voltages of Cholesteric-Nematic Transition / Z. Hotra, Z. Mykytyuk, A. Fechan, O. Sushynsky, O. Yasyynska, V. Kotsun** // *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, Volume 535. – 2011. – P. 225 – 232.

[5]. Ilnytskyi J. A domain decomposition molecular dynamics program for the simulation of flexible molecules of spherically-symmetrical and nonspherical sites. II. Extension to NVT and NPT ensembles / J. Ilnytskyi, M. Wilson // *Computer Physics Communications*. – 2002. – V. 148. – P. 43 – 58.

[6]. Leach A. *Molecular modeling: principles and applications* / A. Leach. – Harlow: Pearson, 2001. – 784 p.