

UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE VALENCIA

ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIEROS INDUSTRIALES

DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA APLICADA



Tesis Doctoral

**SIMULACIÓN DE DISPOSITIVOS ÓPTICOS DE CRISTAL LÍQUIDO.
ANÁLISIS DE LA PROPAGACIÓN LATERAL EN EL RÉGIMEN
LINEAL Y EN EL NO LINEAL.**

Autor: Ismael Orquín Serrano

Directores: Pedro Fernández de Córdoba Castellá
Albert Ferrando Cogollos
Francisco Román Villatoro Machuca

*A quien sin mirarme, me ve
y sin oirme, me escucha.*

Agradecimientos

Con la compleción de esta tesis cumpla con el reto personal que me planteé al iniciarla hace ya cinco años, después de presentar el Diploma de Estudios Avanzados. Ya entonces llevaba otros cuatro años en un entorno investigador, intentando decidir si ése era mi camino o no. En aquella etapa de incertidumbre elegí comenzar una carrera docente como profesor de secundaria, que afortunadamente dura hasta hoy, con más glorias que penas.

Me resulta algo vergonzoso recoger los halagos que a uno le llegan a través de la gente al concluir un proyecto de este tipo. Es más justo felicitarme por la suerte que he tenido de encontrarme en un entorno cuyo constante apoyo ha posibilitado, de una u otra manera, la consecución de mis objetivos. Es por esto que quiero rendir aquí homenaje a toda la gente cuyo amor incondicional, paciente y comprensivo ha fortalecido mi intención de seguir adelante.

Por encima de cualquier otra influencia mi familia ha supuesto, sin duda alguna, mi mayor apoyo. Todos, mi madre, Pilar, mi padre, Rafael, y mis tres hermanos, Ceci, Rafa y Juan, han contribuido, cada uno a su manera, a que la tesis que presento aquí sea lo que es. En todos ellos he visto un ejemplo a seguir cuyos valores me han ayudado a continuar adelante. Os quiero a todos. Mucho.

Quiero agradecerle también a Trini toda su apoyo. Me ha hecho llegar en muchas ocasiones el calor de la comprensión, escuchando pacientemente mis quejas por los problemas que tenía que afrontar. Sus consejos, su mano sobre la mía, las correcciones al texto que ha hecho, han resultado de gran ayuda.

Muchos amigos me han motivado con su ejemplo, como Miguel Ángel, Voya, Mario y Javi. Ellos han sido las personas que me escuchaban desde la experiencia de haber vivido ya dificultades similares, y quienes me sugerían soluciones y ofrecían su ayuda incondicional y sincera. Muchas gracias. También han estado pendientes de mi Quique, Mario, Salva y Mónica cuyo interés por mi trabajo y por mi persona se hacía tangible en cada una de nuestras conversaciones. Por último agradecerles a mis directores de tesis la oportunidad que me han brindado de poder desarrollar este trabajo.

Resumen

En esta tesis se estudia a fondo el modelo más realista posible que describe la propagación de luz, en los regímenes lineal y no lineal, paraxial, en celdas planares de cristales líquidos nemáticos. Se tratan los casos unidimensionales y bidimensionales, así como la evolución de campo óptico en estas estructuras de tamaños micrométricos. De esta forma se detallan aspectos como la influencia de la no linealidad no local en estos dispositivos, o el efecto de la anisotropía, tanto en el plano de evolución en el régimen unidimensional, como en el plano transversal del estudio bidimensional de dispositivos. Además se estudian regímenes de trabajo, inexplorados hasta ahora, de las ecuaciones que definen la posición del cristal líquido unidimensional, al hacer uso de condiciones de contorno asimétricas. Esta configuración permite la aparición de un régimen lineal fuertemente confinante, basado en la inducción de guías de variación gradual del índice de refracción. La condición de frontera define el número de guías inducidas para un mismo dispositivo. Se caracteriza el comportamiento de estos dispositivos en los regímenes lineal y no lineal.

Desde el punto de vista numérico, se emplea el método de diferencias finitas para resolver las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales involucradas. Los sistemas de ecuaciones no lineales a que nos conduce el método numérico se resuelven con técnicas iterativas estándar como el método Newton-Raphson. Se emplean técnicas numéricas avanzadas como el empleo de métodos de dirección alternada (o métodos semi-implícitos) para mejorar las prestaciones computacionales de nuestros códigos. Además introducimos una novedosa condición de contorno transparente que aplicamos con éxito a las ecuaciones de distribución de campo eléctrico bidimensional y la ecuación de distribución del ángulo de torsión del cristal líquido. Esto nos permite mejorar aún más los tiempos de cómputo en la simulación de dispositivos complejos.

Por último, en el terreno de las aplicaciones, empleamos los códigos desarrollados para simular la transferencia de energía entre los canales de un acoplador direccional óptico. También diseñamos un novedoso dispositivo electro-óptico que aprovecha la versatilidad de las celdas planares de cristal líquido para guiar luz en el régimen lineal, teniendo al voltaje aplicado a los electrodos como grado de libertad para controlar la trayectoria de la luz.

Resum

En esta tesi s'estudia a fons el model més realista possible que descriu la propagació de llum, en els règims lineal i no lineal, paraxial, en cel·les planares de cristalls líquids nemàtics. Es tracten els casos unidimensionals i bidimensionals, així com l'evolució de camp òptic en estes estructures de grandàries micromètriques. D'esta manera es detallen aspectes com la influència de la no linealitat no local en estos dispositius, o l'efecte de l'anisotropia, tant en el pla d'evolució en el règim unidimensional, com en el pla transversal de l'estudi bidimensional de dispositius. A més s'estudien règims de treball inexplorats fins ara, de les equacions que definixen la posició del cristall líquid unidimensional, al fer ús de condicions de contorn asimètriques. Esta configuració permet l'aparició d'un règim lineal fortament confinant, basat en la inducció de guies de variació gradual de l'índex de refracció. La condició de frontera definix el nombre de guies induïdes per a un mateix dispositiu. Es caracteritza el comportament d'estos dispositius en els règims lineal i no lineal.

Des del punt de vista numèric, s'empra el mètode de diferències finites per a resoldre les equacions diferencials en derivades parcials involucrades. Els sistemes d'equacions no lineals que ens conduïx el mètode numèric es resolen amb tècniques iteratives estàndard com el mètode Newton-Raphson. S'empren tècniques numèriques avançades com els mètodes de direcció alternada (o mètodes semi-implícits) i la implementació de tècniques MultiGrid per a millorar les prestacions computacionals dels nostres codis. A més introduïm una nova condició de contorn transparent que apliquem amb èxit a les equacions de distribució de camp elèctric bidimensional i a l'equació de distribució de l'angle de torsió del cristall líquid. Açò ens permet millorar encara més els temps de còmput en la simulació de dispositius complexos.

Finalment, en el terreny de les aplicacions, empren els codis desenvolupats per a simular la transferència d'energia entre els canals d'un acoblador direccional òptic. També dissenyem un nou dispositiu electro-òptic que aprofita la versatilitat de les cel·les planares de cristall líquid per a guiar llum en el règim lineal, tenint al voltatge aplicat als elèctrodes com a grau de llibertat per a controlar la trajectòria de la llum.

Abstract

In this thesis a quite realistic complex model for describing light behavior in paraxial linear and nonlinear regimes in nematic liquid crystal planar cells is studied. Both one and two dimensional models for the optical field are shown in these micrometric structures. Thus the influence of nonlocal nonlinearity and the effects of anisotropy are presented. Particularly it has been considered the case for XZ anisotropy for the one dimensional case (which means anisotropy in the plane of light propagation) and also the XY anisotropy which yields vectorial modes in the transverse plane. Besides, new regime due to non symmetric boundary conditions for the one dimensional orientation of the molecules is discovered. This new configuration exhibits a strong focusing linear regime since a deep graded index guide is induced by the molecular orientation at the boundary. Moreover the number of graded index guides inside the nematics can be tuned by the asymmetric boundary condition. Finally the behavior of light under linear and nonlinear regimes for this asymmetric setup is studied.

From the numerical point of view, a finite difference method is employed to solve all the partial differential equations involved. This numerical method yields systems of nonlinear equations which are solved with standard iterative techniques such as Newton-Raphson method. Advanced numerical techniques such as alternating direction implicit schemes or MultiGrid techniques are employed to improve the computational performance of our codes. Besides, we introduce a novel transparent boundary condition which is used successfully to solve the two dimensional electric field equation and the twist angle distribution of the nematic over the cell. This improves a bit more the computational cost needed to solve the complex optical devices we deal with.

Finally, with respect to applications, we use the codes developed in this thesis to simulate the energy transfer between the channels of an optical directional coupler. We also design a new electro-optic device which profits the versatile properties of nematic liquid crystal cells to guide light in the linear regime. The electric voltage applied to the cell is used as a degree of freedom that allows us to control the trajectory of light.

Índice general

1. Introducción	17
1.1. Cristales líquidos nemáticos	17
1.2. Estado del arte	20
1.3. Estructura y objetivos de la tesis	27
2. Modelos de cristales líquidos	29
2.1. Orientación molecular	29
2.1.1. Modelo 1D	34
2.1.2. Modelo 2D	35
2.2. Distribución del campo eléctrico	37
2.3. Propagación del campo óptico	38
2.3.1. Modelos 1+1D	39
2.3.2. Modelos 2D	41
2.3.3. Modelos 2+1D	42
3. Tratamiento numérico	43
3.1. Orientación molecular	43
3.1.1. Modelo 1D	44
3.1.2. Modelo 2D	45
3.2. Distribución campo eléctrico	46
3.2.1. Caso unidimensional	46
3.2.2. Caso bidimensional	47
3.3. Propagación campo óptico	48
3.3.1. Modelos 1+1D	49
3.3.2. Modelo 2D	50
3.3.3. Modelo 2+1D	52
3.4. Acoplamiento iterativo	53
3.4.1. Bucles iterativos acoplados	54
3.4.2. Número de problemas del acoplamiento completo	56
3.5. Frontera transparente	60
3.5.1. Condiciones de Hadley	60
3.5.2. Condición de contorno transparente para el modelo de Oseen-Frank. Aplicación a propagación de luz lateral en celdas de cristal líquido nemático planares	63
3.6. Métodos MultiGrid	66
4. Resultados	71
4.1. Problemas de contorno	71
4.1.1. Caso 1D	71
4.1.2. Caso 2D	74
4.2. Problemas de evolución	80
4.2.1. Evolución 1+1D en aproximación escalar y paraxial	81
4.2.2. Evolución 1+1D vectorial. Anisotropía en el plano XZ	90
4.2.3. Modos de propagación de una guía anisótropa inducida eléctricamente	90

4.3. Evolución 2+1D paraxial escalar	92
4.3.1. Acopladores direccionales ópticos	93
4.3.2. Osciladores transversales en el régimen lineal	93
5. Conclusiones y trabajo futuro	101
Bibliografía	103

Índice de figuras

1.1.	Orientación de los ejes y posición de una molécula de cristal líquido nemático, con sus respectivos índices de refracción.	18
2.1.	Sistema de referencia para la definición de las posiciones moleculares.	30
2.2.	Posibles deformaciones de un cristal líquido nemático. Dos flexiones (splay y bend) y una torsión (twist). Se han representado las vistas bidimensionales correspondientes a alzado (vista de frente), planta (vista desde arriba) y perfil izquierdo (vista de lado).	31
2.3.	Ejemplos de celdas de cristal líquido planar sobre las que se estudia la propagación lateral de luz. (a) Electrodo continuos. (b) Electrodo superior de anchura menor a la del electrodo inferior.	34
3.1.	Realimentación de las soluciones de cada ecuación diferencial.	54
3.2.	Diagrama de bloques del algoritmo de acoplo iteratio de la solución.	55
3.3.	Familia de curvas del logaritmo del error para las iteraciones internas del Newton Raphson para el problema de distribución de campo eléctrico bidimensional. Cada curva se corresponde con una iteración externa con el problema de orientación molecular.	56
3.4.	Familia de curvas del logaritmo del error para las iteraciones internas del Newton Raphson para el ángulo de cabeceo. Cada curva se corresponde con una iteración externa con el problema de orientación molecular. A la izquierda se muestra el caso para la primera iteración autoconsistente entre las funciones angulares y el campo eléctrico y a la derecha se muestra la iteración segunda.	57
3.5.	Familia de curvas del logaritmo del error para las iteraciones internas del Newton Raphson para el ángulo de torsión. Cada curva se corresponde con una iteración externa con el problema de orientación molecular. A la izquierda se muestra el caso para la primera iteración autoconsistente entre las funciones angulares y el campo eléctrico y a la derecha se muestra la iteración segunda.	57
3.6.	Familia de curvas del logaritmo del error para las iteraciones de la autoconsistencia entre las funciones angulares. Cada curva se corresponde con una iteración de la autoconsistencia del campo eléctrico externo E con la solución autoconsistente encontrada para las funciones angulares. A la izquierda se muestra el caso del ángulo de cabeceo y a la derecho el ángulo de torsión.	58
3.7.	Convergencia del campo eléctrico externo para sucesivos valores de las funciones angulares.	58
3.8.	Convergencia del campo óptico para sucesivos valores de las funciones angulares.	59
3.9.	Evolución del valor absoluto del ratio c_j	64
3.10.	Dominio numérico de los tres problemas a resolver. Las líneas azules continuas representan condición de contorno tipo Dirichlet, de anclado fuerte, mientras que las líneas rojas discontinuas representan condiciones de contorno transparentes.	65
3.11.	(a) Distribución del potencial eléctrico para $V = 1$ V, (b) Sección de V para $J = N_X/2$ y (c) Cociente c_y para $V(J = N_X/2, k)$	65

3.12. (a), (b) y (c) representan el potencial, el ángulo de cabeceo y el ángulo de torsión respectivamente para un valor de tensión aplicada de $V = 2$ V. (d), (e) y (f) muestran tres secciones diferentes de (a), (b) y (c) respectivamente. Los círculos azules, cuadrados rojos y triángulos verdes representan cortes de la representación tridimensional cuya vista zenital se observa en la columna de la izquierda. Los cortes son alrededor de $x = d$, $x = d/2$ y $x = 0$ respectivamente. Nótese que alguna curva pueden estar solapando otra curva o el eje horizontal.	67
3.13. Dispositivo de celda planar de cristal líquido nemático con una discontinuidad en el electrodo superior.	68
3.14. Dependencia del voltaje aplicado con el valor de pico de los ángulo de cabeceo $\theta(x, y)$ y torsión $\varphi(x, y)$. La gráfica está compuesta por las soluciones de 200 simulaciones, correspondientes a los voltajes comprendidos entre $V = 0.01$ V y $V = 2$ V.	69
3.15. Solución del problema eléctrico y de reorientación del dispositivo con electrodo discontinuo, resuelto con condiciones de contorno tipo Dirichlet en la dirección x (izquierda) y con frontera transparente en x para el ángulo de torsión (derecha). Los voltages son $V_1 = 1.5$ V y $V_2 = 0.7$ V. (a) Campo eléctrico, (b) ángulo de cabeceo y (c) ángulo de torsión. Gráfica (d) muestra las secciones de los ángulos de cabeceo y torsión en la posición $x = d/2$	70
4.1. Distribución del ángulo de cabeceo (izquierda) y campo eléctrico externo (derecha) para potenciales de $V = 0.0.1 - 4.5$ V.	72
4.2. Tilt en presencia únicamente de campo óptico (izquierda) y en conjunción con un potencial de $V = 1$ V para varias potencias ópticas.	72
4.3. Dependencia del ángulo de cabeceo con la excentricidad. Potencia óptica fija de 1.5 mW/ μ m y sin voltaje externo aplicado (izquierda) y misma potencia óptica con $V = 0.5$ V (derecha).	73
4.4. Dependencia del ángulo de cabeceo con la potencia óptica a excentricidad fija de $e = 33\%$. Diversas potencias ópticas con $V = 0$ V (izquierda) y $V = 0.5$ V (derecha).	74
4.5. Ángulo de cabeceo para tensiones de $V = 0$ V y $V = 1$ V (izquierda). Perfiles de índice de refracción efectivo que producen las orientaciones molecular mostradas a la izquierda (derecha).	74
4.6. Posición de equilibrio del ángulo de cabeceo con frontera desfasada 180° y 360° (izquierda). A la derecha se muestran los perfiles de índice de refracción efectivos en tales configuraciones.	75
4.7. Ángulo de cabeceo (izquierda). Perfiles de índice de refracción efectivo (derecha).	75
4.8. Distribuciones del ángulo de cabeceo (izquierda) y del campo eléctrico (derecha) para voltajes comprendidos entre $V = 0.1 - 2.8$ V. Para mayor claridad se muestran dos de las superficies completas, entendiendo que el resto respetan la simetría con respecto al plano de corte.	76
4.9. Ángulo de cabeceo para una potencia óptica de $P_{opt} = 50$ W/mm. Representación cenital (izquierda) y secciones medias (derecha).	77
4.10. Secciones medias en las direcciones x (izquierda) e y (derecha) para valores de la potencia óptica comprendidos entre $P_{opt} = 5 - 100$ W/mm.	77
4.11. Ángulo de cabeceo para una potencia óptica de $P_{opt} = 50$ W/mm. Representación cenital (izquierda) y secciones medias (derecha) y un potencial aplicado de $V = 1$ V.	78
4.12. Secciones medias en las direcciones x (izquierda) e y (derecha) para valores de la potencia óptica comprendidos entre $P_{opt} = 5 - 100$ W/mm y un valor de voltaje aplicado de $V = 1$ V.	78
4.13. Secciones medias en las direcciones x (izquierda) e y (derecha) para valores de la excentricidad comprendidos entre $\xi = 0 - 25\%$ de la anchura total de la celda con valores de potencia óptica de $P_{opt} = 20$ y voltaje aplicado $V = 0$ V.	79
4.14. Secciones medias en las direcciones x (izquierda) e y (derecha) para valores de la excentricidad comprendidos entre $\xi = 0 - 25\%$ de la anchura total de la celda con valores de potencia óptica de $P_{opt} = 20$ y voltaje aplicado $V = 0.5$ V.	79
4.15. Distribuciones de los ángulos de cabeceo para un potencial aplicado de $V = 1$ V y en ausencia de no linealidad óptica. Se han dibujado en azul las secciones por los planos definidos por $y = \text{constante}$ que pasan por los valores máximos en cada caso. En el caso del ángulo de torsión han querido dibujarse dos planos (para el máximo y el mínimo). En rojo se ha dibujado la sección definida por el plano medio $x = d/2$	80
4.16. Secciones de los ángulo de cabeceo y torsión por los planos que seccionan los valores máximos de cada ángulo, para valores de potencial aplicado de $V = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1, 1.2$ V.	81

4.17. Secciones de los ángulo de cabeceo y torsión por los planos que seccionan los valores máximos de cada ángulo, para valores de potencial aplicado de $V = 1$ V y potencias ópticas $P_{opt} = 10^{-5}, 5, 10, 15, 20, 25, 30$ W/mm..	82
4.18. Valores máximos de los ángulo de cabeceo (izquierda) y torsión (derecha). Mostramos los valores máximos frente a la anchura del electrodo superior, expresada ésta como porcentaje de la anchura total de la celda. Cada curva de la familia que se representa muestra los valores para una potencia distinta (medida en W/mm), tal y como muestra la leyenda.	83
4.19. Evolución de la anchura del haz para potencias ópticas $P_{opt} = 0.3, 0.4, 0.5$ W/mm.	83
4.20. Representaciones cenitales de la evolución del campo óptico en aproximación escalar paraxial para valores de potencias ópticas $P_{opt} = 0.3, 0.4$ y 0.5 mW/ μ m.	84
4.21. Ángulo de cabeceo e intensidad del campo óptico normalizados a la unidad.	85
4.22. Periodo de la oscilación transversal T frente a la amplitud del campo óptico a para el modelo A (izquierda) y para el modelo B (derecha).	86
4.23. Fuerza F ejercida por la frontera frente a posición inicial $\langle x \rangle$ para diferentes amplitudes del campo óptico, a . A la derecha, fuerza F frente a la amplitud del campo óptico a para diferentes posiciones iniciales del haz $\langle x \rangle$	86
4.24. Evolución del pico de amplitud del campo óptico a para $a = 0.1$ (izquierda) y $a = 0.5$ (derecha) usando el modelo A. Cada color representa un valor distinto de la posición inicial $\langle x \rangle$	87
4.25. Evolución del pico de amplitud del campo óptico a para $a = 0.1$ (izquierda) y $a = 0.5$ (derecha) usando el modelo B. Cada color representa un valor distinto de la posición inicial $\langle x \rangle$	87
4.26. Evolución de un haz gaussiano en el régimen lineal en la guía inducida por las condiciones de frontera asimétricas del ángulo de cabeceo. La primera figura representa la trayectoria de la intensidad de campo óptico. La figura central muestra la evolución del pico de amplitud del campo óptico. La última figura refleja el comportamiento oscilatorio del centro de masas de la energía.	89
4.27. A la izquierda se representa el ángulo de inclinación inducida por la anisotropía en el plano XZ en función del ángulo de cabeceo del cristal líquido. A la derecha se muestra la evolución de la intensidad del campo óptico, sufriendo reflexión al llegar a la frontera debido a la trayectoria inclinada inducida por la anisotropía.	90
4.28. Evolución del campo h_y en propagación vectorial, en ausencia de campo eléctrico externo y con potencias ópticas de $P_{opt} = 0.375, 0.5, 0.625$ y 0.75 WmW/ μ m.	91
4.29. Evolución del campo h_y aplicando una tensión de $V = 1$ V y unas potencias ópticas de $P_{opt} = 0.03, 0.11, 0.24$ mW/ μ m.	92
4.30. (a) Distribución de voltaje eléctrico en el seno del cristal líquido con aplicación de $V = 1$ V en el electrodo superior. (b) y (c) Distribución de las componentes x e y del campo eléctrico inducido por el voltaje externo, respectivamente. Nótese que la componente E_x es par, mientras que la E_y es impar, propiedad que se traslada a la distribución de los ángulos de cabeceo y de torsión respectivamente, pues son los causantes de tales deformaciones (gráficas (d) y (e) respectivamente). Los ángulos se muestran en grados.	95
4.31. Cada una de las filas se corresponde al triplete de modos de propagación H_z, E_x y E_y , leídos de izquierda a derecha. La primera fila se corresponde con el modo fundamental, la segunda con el primer modo excitado, la tercera con el segundo modo excitado y así hasta el quinto modo excitado. EN todos los casos estamos representando intensidades de campo.	96
4.32. Evolución de un haz en el régimen lineal, sin excitaciones eléctricas ni ópticas afectando a la orientación molecular.	97
4.33. Evolución de un haz en el régimen solitónico, sin excitación eléctrica externa.	97
4.34. Configuración del dispositivo de celda planar con dos electrodos discontinuos en la pared superior. La anchura de los electrodos se representa por $a = 15$ μ m, que es, a su vez, la distancia que separa los electrodos. Las tensiones aplicadas son de $V = 1$ V, en el electrodo de la izquierda y $V = 1.25$ V, en el de la derecha. La separación entre placas, d , es de 75 μ m.	97

4.35. (a) Distribución de tensión eléctrica en el seno del dispositivo. El electrodo de la izquierda, electrodo 1, tiene aplicado 1 V, mientras que el de la derecha, electrodo 2, tiene aplicado 1.25 V. (b) Índice de refracción producido por el dispositivo. Sólo se aprecia afectación del campo eléctrico externo, por lo que nos encontramos en el régimen lineal.	98
4.36. Trayectoria del flujo de energía del haz en la dirección transversal y . A la derecha aparece la intensidad del campo en $z = 0$ y en $z = 1$ mm.	98
4.37. Secciones al 80 %, 85 %, 90 %, 95 % y 100 % de la anchura total del electrodo en la coordenada x	98
4.38. (a) Distribución de potencial eléctrico. (b) Distribución del ángulo de cabeceo. (c) Distribución del ángulo de torsión. (d) Distribución del índice de refracción.	99
4.39. Trayectoria del haz en el régimen lineal (izquierda) y no lineal(derecha) bajo el efecto de la alternancia de tensión impuesta por el dispositivo electro-óptico.	99
4.40. Circuito de inversión de sentido de giro de la corriente gobernado por un fototransistor.	100

1

Introducción

En este capítulo introductorio nuestra intención es avanzar un conjunto de conceptos necesarios para entender el trabajo de esta tesis y que juegan un papel fundamental en los resultados que mostramos. No pretendemos elaborar un texto recopilatorio de la física de cristales líquidos ni de la óptica no lineal, pues esos conocimientos ya se exponen de manera magistral en numerosos libros [1, 2, 3]. Sin embargo nos basaremos en ellos, en parte, para desarrollar los contenidos que mostremos en este capítulo. Recordaremos el porqué son tan interesantes los cristales líquidos para la óptica, en particular en el régimen no lineal. Explicaremos los motivos por los que suceden los fenómenos más presentes en esta tesis como la ineludible doble refracción en un medio uniaxial. Los mecanismos ópticos no lineales que producen soluciones solitónicas no serán presentados, pues la no linealidad del modelo que empleamos aparece de manera efectiva por acoplo de varias ecuaciones diferenciales. Por tanto no es útil aludir a la obtención de los términos no lineales típicos que producen no linealidades ópticas, pues el origen es bien distinto. Tras esta sección introductoria al tema de los cristales líquidos, procederemos a exponer cuál es el estado del arte en el campo de la propagación lateral de luz en celdas planares de cristales líquidos nemáticos. Finalmente marcaremos la intencionalidad de esta tesis y avanzaremos su estructura como documento para guiar la lectura del mismo.

1.1. Cristales líquidos nemáticos

Los cristales líquidos son sustancias que presentan propiedades de sólidos y de líquidos al mismo tiempo [2]. Existen tres tipos de cristales líquidos: liotrópicos, poliméricos y termotrópicos. Esta clasificación se realiza atendiendo a cual es la variable o el fenómeno que hace aparecer la naturaleza líquido-cristalina en ciertas sustancias (principalmente moléculas complejas con anillos bencénicos). En los cristales líquidos liotrópicos es la concentración de un material en determinados disolventes, en los poliméricos es el grado de polimerización de determinadas estructuras aromáticas y en los termotrópicos es la temperatura. Estos últimos son los más estudiados por sus propiedades ópticas y podemos clasificarlos a su vez en tres subtipos: nemáticos, colestéricos y esmécticos. Se diferencian por las distintas ordenaciones posibles de sus moléculas, que en el caso de los nemáticos, suelen representarse por elipsoides de revolución capaces de interactuar entre sí debido a su carácter eléctrico dipolar. La fase nemática de los cristales líquidos se caracteriza por un orden orientacional de sus moléculas y por una movilidad traslacional muy semejante a la de un líquido. Las moléculas de cristal líquido nemático están orientadas en una dirección preferente, conocida como director \vec{n} . Los colestéricos suelen llamarse también nemáticos quirales y se diferencian de aquéllos en que suelen disponerse en una estructura helicoidal. Se obtienen añadiendo una molécula quiral ¹ a un cristal líquido nemático. Por último, los esmécticos, se diferencian de los nemáticos en que poseen un orden posicional, es decir, sus moléculas están ordenadas de acuerdo a algún patrón determinado, por ejemplo orientaciones preferentes por láminas. Por este motivo admiten una subclasificación muy rica atendiendo a las distintas disposiciones posicionales y orientacionales de las moléculas.

Ocurre que los cristales líquidos termotrópicos suelen disfrutar de un rango de temperaturas pequeño para el que se exhibe el comportamiento nemático, esto es, orden orientacional y movilidad traslacional. Dado que en determinadas aplicaciones nos interesa trabajar en este régimen, es interesante aumentar el rango de temperaturas en el que persiste la fase nemática antes de sufrir la transformación nemático-isotrópica con el

¹ Recibe el nombre de molécula quiral aquella cuya estructura espacial no coincide por superposición con su imagen especular.

aumento de temperatura, o la transformación nemático-cristalina con la bajada de temperatura. Para cumplir este objetivo suele trabajarse con mezclas de cristales líquidos cuyas propiedades son, muy aproximadamente, una ponderación de las propiedades de cada uno de los componentes. En particular pueden conseguirse rangos de temperatura de la fase nemática varios órdenes de magnitud mayores. El cristal líquido comercial E7 con el que trabajamos en esta tesis es una mixtura de cuatro sustancias que exhiben comportamiento de cristal líquido.

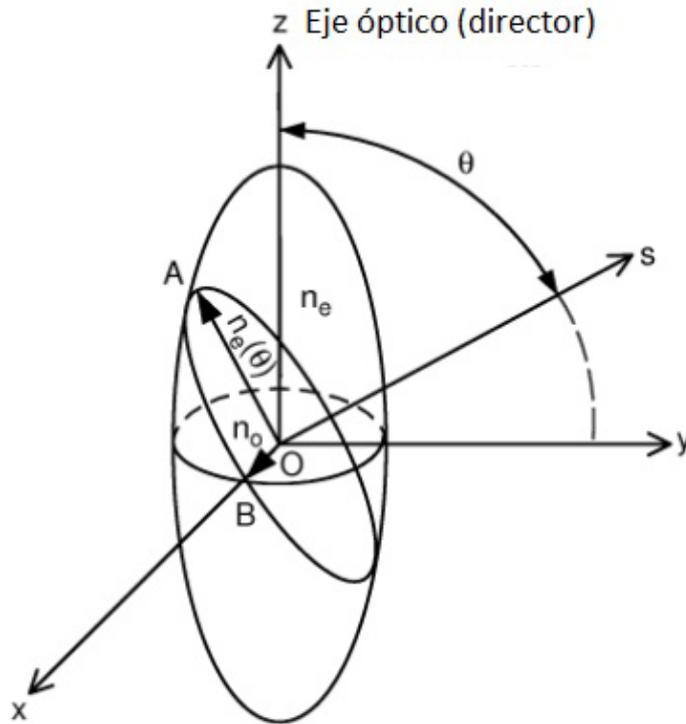


Figura 1.1: Orientación de los ejes y posición de una molécula de cristal líquido nemático, con sus respectivos índices de refracción.

En ocasiones se utilizan colorantes junto con el cristal líquido, lo cual tiene principalmente dos efectos sobre la propagación de luz en estos medios. El primero es la modificación de la absorción de energía por parte del medio en cierto espectro frecuencial, con el consiguiente aumento de temperatura local. Este efecto puede ser útil para variar los correspondientes índices de refracción del medio, que dependen de la temperatura. De hecho el índice extraordinario del E7 tiene una dependencia monótona decreciente con la temperatura. Además, puede ocurrir también la conocida como *guest-host effect* en inglés, o efecto huésped-anfitrión. Ocurre debido a la diferente absorción que presentan las moléculas de colorante, el huésped, en función de la polarización de la luz. Normalmente la absorción de estas moléculas es mucho mayor en la dirección paralela a su eje mayor (eje óptico) que a su eje menor. Al tener formas alargadas pueden ser orientadas por el anfitrión, el cristal líquido, con lo que la intensidad del campo transmitido puede modificarse. Aplicando un campo externo conseguimos reorientar el cristal líquido y éste a su vez reorienta a las moléculas de colorante, cuya absorción cambia, haciéndolo pues el conjunto.

Las moléculas de cristal líquido tienen forma elipsoidal y son ópticamente anisótropas, es decir, sus características ópticas, en particular el índice de refracción que experimentará un haz de luz, depende de la dirección de propagación a través de dicha molécula. En la figura 1.1 puede apreciarse la orientación de una molécula de cristal líquido nemático con respecto al sistemas de coordenadas que suele utilizarse para el análisis de dispositivos de celdas planares. El eje z suele utilizarse como eje de propagación y es utilizado como eje de simetría, a veces referido como eje del cristal o eje óptico. El haz de luz es una onda electromagnética transversal, por lo que su campo eléctrico yace en el plano transversal xy y, por tanto, su vector de polarización también. Los índices de refracción en las direcciones transversales no toman el mismo valor que el índice de refracción en el eje óptico. Este hecho se conoce como birrefringencia óptica. En el caso en

el que los dos índices transversales sean iguales se habla de medios uniaxiales, mientras que el caso de valores distintos en el plano transversal representa el caso de cristales biaxiales. Si, además, el valor del índice de refracción en el eje menor (o dirección transversal) es menor que en el eje mayor, se habla de medios uniaxiales positivos y de medios uniaxiales negativos en caso contrario. Nosotros estudiamos el caso de propagación lateral de luz en medios uniaxiales positivos. Es interesante hacer ver que, debido a la dependencia de la permitividad dieléctrica con el ángulo de la molécula en el plano XZ, los medios con birrefringencia positiva exhiben una no linealidad orientacional enfocante, mientras que en el caso de birrefringencia negativa la no linealidad es desenfocante. En la figura 1.1 puede verse como un campo óptico que se propaga en la dirección s afecta a la orientación molecular induciendo un giro θ (el ángulo de cabeceo) debido al alineamiento de las componentes transversales del campo eléctrico con el eje óptico de las moléculas de cristal líquido.

Es necesario, llegados a este punto, describir como ocurre la propagación de un haz polarizado linealmente a través de un cristal líquido nemático que conforma un medio óptico birrefringente uniaxial positivo. Para ello partimos de las ecuaciones de Maxwell, en ausencia de fuentes y cargas,

$$\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \nabla \times \mathbf{H}, \quad (1.1)$$

$$\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E}, \quad (1.2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0, \quad (1.3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (1.4)$$

siendo

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} = \epsilon \mathbf{E}, \quad (1.5)$$

$$\mathbf{B} = \mu_0 (\mathbf{H} + \mathbf{M}) = \mu \mathbf{H}, \quad (1.6)$$

las ecuaciones constitutivas que marcan la relación entre los campos desplazamientos eléctrico \mathbf{D} y magnético \mathbf{B} con los campos eléctrico \mathbf{E} y magnético \mathbf{H} y sus correspondientes polarizaciones eléctrica \mathbf{P} y magnética \mathbf{M} . Consideramos una onda plana monocromática (de una frecuencia espacial) de frecuencia ω cuyos campos vienen dados por

$$\mathbf{E} \exp(i(kr - \omega t)), \quad (1.7)$$

$$\mathbf{H} \exp(i(kr - \omega t)), \quad (1.8)$$

siendo i la unidad imaginaria, $\sqrt{-1}$, k el vector de onda definido por $k = \omega/cn$ con n el índice de refracción del medio que se asume sin pérdidas, esto es, real y positivo. Sustituyendo 1.7 y 1.8 en las ecuaciones de Maxwell (1.1-1.4) se llega al sistema de ecuaciones

$$\mathbf{k} \times \mathbf{E} = \omega \mu \epsilon \mathbf{H}, \quad (1.9)$$

$$\mathbf{k} \times \mathbf{H} = -\omega \epsilon \mathbf{E} = -\omega \mathbf{D}. \quad (1.10)$$

Resolviendo este sistema de ecuaciones podemos expresar los campos uno en función del otro, por lo que puede obtenerse un sistema de ecuaciones desacoplado para cada uno de los campos,

$$\mathbf{k} \times (\mathbf{k} \times \mathbf{H}) + \omega^2 \mu \epsilon \mathbf{H} = 0, \quad (1.11)$$

$$\mathbf{k} \times (\mathbf{k} \times \mathbf{E}) + \omega^2 \mu \epsilon \mathbf{E} = 0. \quad (1.12)$$

Estas expresiones nos dicen que el vector de onda \mathbf{k} , y los campos eléctrico \mathbf{E} y magnético \mathbf{B} son ortogonales entre sí, pues su producto vectorial debe anularse. Desarrollando la ecuación vectorial 1.12 por componentes ($\mathbf{k} = k_x \mathbf{i} + k_y \mathbf{j} + k_z \mathbf{k}$, $\mathbf{E} = E_x \mathbf{i} + E_y \mathbf{j} + E_z \mathbf{k}$) y ϵ como el tensor dieléctrico con sus nueve componentes, podemos alcanzar la siguiente forma matricial

$$\begin{pmatrix} \omega^2 \mu \epsilon_{xx} - k_y^2 - k_z^2 & \omega^2 \mu \epsilon_{xy} k_x k_y & \omega^2 \mu \epsilon_{xz} k_x k_z \\ \omega^2 \mu \epsilon_{yx} k_y k_x & \omega^2 \mu \epsilon_{yy} \omega^2 \mu \epsilon_y - k_x^2 - k_z^2 & \omega^2 \mu \epsilon_{yz} k_y k_z \\ \omega^2 \mu \epsilon_{zx} k_z k_x & \omega^2 \mu \epsilon_{zy} k_z k_y & \omega^2 \mu \epsilon_{zz} \omega^2 \mu \epsilon_z - k_x^2 - k_y^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} = 0. \quad (1.13)$$

Para que este sistema de ecuaciones tenga solución distinta de la trivial, el determinante de la matriz de coeficientes debe anularse. De esta condición se deduce la siguiente condición para k_z (para el caso de campo eléctrico polarizado linealmente en la dirección x propagándose en la dirección z)

$$((k_0^2 \epsilon_{xx} - k_z^2)k_0^2 \epsilon_{zz} - k_0^4 \epsilon_{xz}^2)(k_0^2 \epsilon_{yy} - k_z^2) = 0, \quad (1.14)$$

que ofrece dos soluciones para k_z

$$k_z^2 = k_0^2 \epsilon_{yy}, \quad (1.15)$$

$$k_z^2 = k_0^2 \frac{\epsilon_{xx} \epsilon_{zz} - \epsilon_{xz}^2}{\epsilon_{zz}}, \quad (1.16)$$

donde la primera solución se corresponde a la onda ordinaria. Esta solución se corresponde con una onda polarizada linealmente en la dirección y que se ve afectada por un índice de refracción $\epsilon_{yy} = n_{\perp}^2$ constante. La segunda solución representa la onda extraordinaria, cuyo vector de onda queda definido, a través de la dependencia con el ángulo de cabeceo, como

$$k_z^2 = k_0^2 \frac{\epsilon_{\perp}(\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon)}{\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \cos^2 \theta}. \quad (1.17)$$

Este es el motivo por el que la onda extraordinaria sufre una desviación que depende de la orientación molecular y cuyo origen es precisamente la anisotropía del medio en el plano de propagación xz . Así pues, podemos decir que una onda con polarización arbitraria podrá expresarse como combinación lineal de otras dos, la ordinaria y la extraordinaria, que viajan a velocidades distintas con polarizaciones distintas. Como viajan a velocidades distintas la fase relativa entre ellas irá cambiando con la propagación y, por tanto, también lo hará el estado de polarización. Éste es el principio de funcionamiento de los retardadores o máscaras de fase que sirven para imprimir determinados estados de polarización en un haz.

1.2. Estado del arte

Los solitones ópticos espaciales son ondas de luz que se propagan en el espacio sin deformación gracias a efectos no lineales del medio de propagación. La difracción que produce el ensanchamiento espacial del haz de luz se ve compensada por un efecto de autoenfoco producido por un índice de refracción dependiente de la intensidad del campo óptico [1]. En el caso de que esta dependencia sea cuadrática (consecuencia de las componentes no lineales de la polarización) suele referirse a este efecto no lineal como efecto Kerr. Normalmente es necesaria una potencia óptica elevada para que se manifiesten estos efectos ópticos no lineales en medios de propagación estándar como el silicio, por ejemplo. Sin embargo, existe una diversidad de medios que exhibe este tipo de no linealidad óptica a bajas potencias, entre los que se cuentan determinados materiales calcogenuros, cristales fotorrefractivos y cristales líquidos. Es por esto que el estudio de la óptica no lineal en cristales líquidos ha acaparado un gran interés en las últimas décadas [4]. Los solitones ópticos tienen comportamiento tipo partícula, en tanto que se propagan sin deformación e interactúan entre sí como tales. Esta propiedad, que les confiere estabilidad durante la propagación, los hace candidatos ideales para participar en dispositivos todo ópticos de tratamiento de información.

Los cristales líquidos exhiben unas características ópticas no lineales varios órdenes de magnitud mayores que la sílice, comúnmente empleada como material para dispositivos de guiado de luz. Los primeros estudios sobre la capacidad de autoenfoco de luz en cristales líquidos aparecen en el año 1993 de la mano de Erez Braun [5, 6]. En sus trabajos Braun hacía propagar haces de luz en tubos cilíndricos de 1.5 mm de diámetro y ya observaba ondulación debido a la anisotropía del cristal y filamentación a altas potencias. Braun deriva un primer modelo simplificado que explica la ondulación como consecuencia de la birrefringencia del cristal uniaxial y aporta evidencias experimentales de estos comportamientos en soportes con diversas geometrías, cilíndrica, esférica y plana. Sus colegas MacLaughlin et al. describen el modelo matemático acoplado de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales que resuelve el problema, una ecuación elíptica de sine-Gordon para el problema de orientación molecular acoplada a una ecuación de Schrodinger para el campo óptico. Se apoyan en los estudios del ruso B. Ya. Zel'dovich y del húngaro István Jánossy sobre la no linealidad orientacional de los cristales líquidos [8, 15]. Al mismo tiempo, Iam Choon Khoo ya estaba estudiando la

no linealidad orientacional en cristales líquidos nemáticos [9, 10], en particular algunos efectos dinámicos de la reorientación molecular inducida por haces pulsados de luz así como efectos fotorrefractivos en cristales líquidos. A partir de entonces empiezan a publicarse muchos trabajos de propagación de luz en cristales líquidos nemáticos y es difícil desgranar una cronología exacta de los resultados. En el periodo 1995/2000 siguen publicándose trabajos de I. C. Khoo, Braun y sus colaboradores [11], al tiempo que aparecen grupos de investigación independientes que también comienzan a publicar en este tema [12, 13, 14].

Esta tesis estudia la solución al problema de propagación de luz, en los regímenes lineal y no lineal, de celdas planares en propagación lateral. Es por esto que nuestro trabajo orbita alrededor del trabajo de ciertos grupos de investigación que actualmente se encuentran en este tema. Principalmente el trabajo de Gaetano Assanto y sus colaboradores, si bien, el grupo *Liquid Crystals and Photonics Group* de la Universidad de Gante, en Bélgica, es una referencia constante a lo largo de nuestros estudios. Es imposible, y poco recomendable, aislar estos trabajos de investigación del resto, por lo que también aparecerán artículos de otros grupos de diferentes partes del mundo que también están desempeñando papeles destacados en la investigación de la óptica no lineal en cristales líquidos en los últimos años.

En la segunda mitad de la década de los 90, Gaetano Assanto publicó mucho (más de 50 artículos) en lo que se refiere a solitones en medios no lineales cuadráticos [18, 19, 20], así como simultones [21], soluciones estacionarias en medios periódicos en la variable de evolución. Varios de estos estudios tenían que ver con dispositivos de tratamiento todo óptico de información, como interruptores [17], buffers [23], diodos [22] o transistores [16]. Sin duda, todo este trabajo es aprovechable y resulta de gran utilidad para el entonces emergente campo de la óptica no lineal en cristales líquidos. El primer trabajo de Assanto en esta línea se publica en 2000 [24]. Desde entonces ha publicado más de 100 artículos en esta línea, lo cual, junto a las amplias colaboraciones de investigación de las que disfruta, son parte de los motivos por los que orbitamos alrededor de su trabajo.

Ya en aquel año se observó experimentalmente el autoconfinamiento de una onda solitaria en cristales líquidos nemáticos debido a la no linealidad orientacional existente en dicho medio [24]. Y no sólo eso, sino también el guiado de un haz copolarizado y de menor potencia, aunque de distinta frecuencia, por la guía inducida por otro haz. Aquellos estudios experimentales se complementaban con estudios numéricos que utilizaban modelos simplificados. En particular, no se resolvía el acoplamiento $E - \theta$ que ofrece la influencia del campo eléctrico externo sobre el ángulo de cabeceo. En su lugar se ofrecía una solución aproximada para el ángulo de cabeceo, limitando éste a variaciones pequeñas del valor inducido por el campo externo. El campo óptico en aproximación escalar paraxial exhibía la no linealidad orientacional gracias al término $\sin^2 \theta$ en la permitividad dieléctrica. Para conseguir un efecto no lineal importante con ángulos de cabeceo pequeños, se aplicaba un voltaje tal que nos llevara la distribución del ángulo de cabeceo a $\theta = \pi/4$ en el centro de la celda, donde se propagaba el haz, valor para el que la cantidad de energía eléctrica necesaria para reorientar el cristal era mínima. Se eludía así el umbral de Friedericksz, la cantidad mínima de energía para orientar el cristal [3].

En esas circunstancias se hablaba de solitones en cristales líquidos nemáticos (CLN) en tanto que, en aquel régimen de parámetros, se conseguía un haz estable que se propagaba sin apenas difracción, dado que recorría sin deformarse decenas de veces la longitud de difracción del haz. Sin embargo, es importante hacer ver que, aunque podíamos hablar de comportamiento *tipo solitónico*, no podía decirse que aquello que se calculaba era un solitón, dado que no había un balance exacto de las fuerzas que tendían a deformar el haz en ambas direcciones. Estos primeros solitones en CLN eran coherentes, pues había una ordenación de fase, en particular, estaban polarizados linealmente en la dirección perpendicular a las paredes confinantes del dispositivo. Esta dirección de polarización coincidía con la onda extraordinaria que aparece como consecuencia de la doble refracción en un cristal uniaxial. Así el índice de refracción de la onda extraordinaria dependía del ángulo de cabeceo del cristal líquido pero no lo hacía el índice ordinario quien permitía la difracción del haz en caso de canalizar luz en esa polarización. Sólo un año más tarde, en 2001, se habló por primera vez de solitones incoherentes en CLN [25]. Se hacía pasar un haz por un difusor giratorio con una distribución aleatoria de dispersores (*scatterers*) para luego atravesar un polarizador en la dirección x o y según interesara. Se trataba pues de luz parcialmente incoherente. El nivel de incoherencia del haz dependía del tamaño relativo del haz frente al centro del dispersor. Conforme se aumentaba el nivel de incoherencia del haz mayores eran las potencias necesarias para conseguir comportamientos *tipo solitónico*. En aquellos experimentos se llegaba incluso a guiar otro haz parcialmente incoherente a través de la guía inducida no linealmente por el

primero, también parcialmente incoherente. Aunque el año siguiente, 2002, se continuaría algo con el estudio experimental de solitones incoherentes en CLN [26], no sería hasta el 2005 cuando se hiciera un estudio analítico de las características de estos solitones incoherentes en estos medios [27]. A parte de estos estudios, y alguno más ese año [28], los solitones incoherentes no han sido mucho más estudiados y han caído en el olvido en el contexto de los CLN, salvo alguna publicación puntual [29]. No obstante, pueden relacionarse con otros estudios de solitones incoherentes en medios no locales [30, 31, 32].

Los solitones en cristales líquidos acaparan un interés especial debido al carácter no local de la no linealidad que los produce, la no linealidad orientacional. Los solitones no locales han venido atrayendo un interés creciente desde que en el año 1980 se publicara uno de los primeros estudios al respecto [33]. Uno de los trabajos clave para los solitones no locales es el artículo en *Science* de Snyder y Mitchell del año 1997 [34] en el que los bautizan con el nombre solitones accesibles por la sencillez del modelo que los describe, que guarda una estrecha relación con el del potencial oscilador armónico. Así se diferenciarían, a partir de entonces, los solitones en medios locales (solitón de Townes, tipo Kerr) de los solitones en medios no locales. Este artículo, junto con alguno más de los mismos autores [35], serviría de referente para los estudios de solitones no locales en CLN, que se harían eco de estos solitones accesibles. En [36] se describe una teoría unificadora para los solitones no locales, teniendo el nivel de no localidad como grado de libertad de las ecuaciones. Así, esta teoría explicaba el comportamiento de solitones no locales en los regímenes de baja y alta no localidad (*weakly and highly nonlocal regimes*, respectivamente). En [38] se prosigue con la exposición de solitones en CLN en régimen de paraxialidad escalar y pequeñas desviaciones angulares, aunque se apunta ya la necesidad de modelos no paraxiales para describir correctamente la evolución de ondas solitarias cuya amplitud sufre oscilaciones importantes en potencias altas, que no son bien descritas con la aproximación de envolvente suave. Utilizando un análisis variacional en el que podía cambiarse el grado de no localidad de manera arbitraria, se estudiaron en 2009 las propiedades de solitones gaussianos en medios no locales generados a través de una función respuesta de tipo gaussiano [37].

Los modelos de propagación óptica no paraxial son conocidos desde hace mucho, siendo [39] unos de los artículos más referenciados al respecto del origen de esta línea. Si bien muchos otros ahondan en el modelado de la no paraxialidad en medios no lineales locales tipo Kerr [40, 41, 42, 43, 44], incluso encontrando soluciones exactas a las ecuaciones de Maxwell en este régimen [45, 46]. Sin embargo, hay que esperar hasta 2010 y, sobre todo 2011, para ver publicados estudios que tengan en cuenta la no paraxialidad en el contexto de la no linealidad no local de los CLN [47, 49, 65]. La no paraxialidad en este contexto es necesaria por varios motivos, entre los que destacan la descripción más adecuada para las oscilaciones de envolvente no suaves y para los desplazamientos transversales de los solitones que cada vez intentan alcanzar ángulos mayores a través de diversos dispositivos. En definitiva, se trata de adecuar la descripción de la evolución del campo óptico a todas aquellas situaciones en las que no es cierta la aproximación de envolvente suave. Muchos de los estudios que ya hemos citado en este respecto, también tienen en cuenta el carácter vectorial inducido por la anisotropía del medio.

La propagación de campo óptico en CLN hace necesaria una descripción vectorial que tenga en cuenta tanto la anisotropía en el plano de evolución del haz (definido por una coordenada transversal y la coordenada de evolución) como la anisotropía en el plano transversal, pues muchos dispositivos de celdas planares de CLN inducen guías por aplicación de campos eléctricos externos con una clara anisotropía en las dos direcciones transversales (de estos dispositivos hablaremos un poco más adelante). El problema numérico que representa la resolución de las ecuaciones de Maxwell sin aproximaciones está resuelto desde hace muchos años, cuando Kane S. Yee publicó el método tridimensional para resolver problemas de contorno 3D para las seis componentes del campo electromagnético no paraxial por el método de diferencias finitas [56]. La anisotropía puede incluirse fácilmente en este método sin más que hacer las sustituciones pertinentes de las componentes del tensor dieléctrico. A partir de este trabajo, se han publicado muchos estudios que mejoran el trabajo de Yee en precisión [57], en tiempo de cómputo mediante algoritmos de paralelización [58] o modifican las propiedades de los esquemas en diferencias finitas [59].

En CLN la anisotropía en el plano de evolución tiene un efecto muy evidente sobre la evolución del haz, pues lo desvía una cantidad que depende del ángulo de cabeceo. El comportamiento de la no linealidad orientacional propicia la aparición de desviaciones del haz que son dependientes pues de la potencia óptica y en esa línea hay varias publicaciones que estudian esta relación [50, 51]. Debe decirse que, en general, los casos en los que se contempla el ángulo de inclinación inducida por la anisotropía en el plano de evolución, se hace

de una manera ad-hoc introduciendo un término adicional, y no por resolución de la ecuación de propagación para el campo vectorial [50, 52]. En ocasiones, no se contempla este efecto, al estudiar el movimiento del haz en un plano cuyo sistema de referencia se sitúa de manera tal que no existe desviación, tomando como dirección de evolución la definida por el vector de Poynting para la energía del campo óptico [53]. La descripción formal de las ecuaciones de propagación vectorial (1+1)D en el contexto de CLN se publicó por Beeckman en 2005 [60] aunque después, este mismo año, se han publicado también para no linealidades cúbicas en medios uniaxiales con no localidad generalizada por Alebrucci y Assanto [55]. También se han publicado métodos para calcular por elementos finitos los modos de propagación de guías anisótropas en el plano transversal en CLN [61, 62]. Nosotros avanzaremos en esta tesis algunos resultados en esta dirección ofreciendo los modos de propagación con anisotropía transversal de guías inducidas por campos externos o campos ópticos utilizando el método de diferencias finitas.

En cuanto a tipos de estructuras ópticas que se propagan en CLN, la variedad ha ido creciendo con el tiempo, al estudiar cada vez más tipos de soluciones en estos medios no lineales no locales. Tras los estudios de solitones en CLN o nematicones, se estudió la posibilidad de guiar haces de luz de baja potencia a través de las guías inducidas ópticamente por otro haz, en lo que vinieron a llamarse solitones vectoriales bicolor [63]. En este caso el adjetivo vectorial no hace referencia al tratamiento de cada uno de los campos ópticos sino al hecho de trabajar con más de un campo óptico en la propagación. Más tarde se estudiaría experimentalmente la posibilidad de lanzar, sobre la guía inducida ópticamente, luz que se acople a distintos modos de esta guía, de manera que se propaguen por ésta modos de orden superior [65]. También se han estudiado estructuras de dos nematicones a distintas frecuencias y con momento angular en CLN que, bajo determinadas condiciones de contorno, definen un estado estacionario estable en la que ambos giran entre sí [64]. Yendo más allá, se continúa en esta línea hasta encontrar estructuras de tres nematicones con momento angular, como cluster de nematicones, orbitando alrededor del centro de masas de la energía del conjunto [66]. En definitiva, el estudio de las ondas estacionarias espaciales en medios no lineales no locales, como los CLN, es un tema en constante desarrollo y promete resultados interesantes de cara a su posible empleo en el tratamiento todo óptico de la información en dispositivos micrométricos.

Más allá de los nematicones, en el contexto de la óptica no lineal no local, existen numerosos trabajos que exploran la posibilidad de nuevas estructuras ópticas singulares y las diferencias que presenta su propagación con respecto al caso local. La óptica no lineal en medios no locales es un campo en el que se ha publicado muchísimo en los últimos 10 años. Los resultados alcanzados en este terreno son de interés parcial para su posible aplicación a CLN. Y decimos parcial porque, si bien los CLN son un medio no lineal no local, susceptible pues de presentar todas y cada una de las estructuras ópticas que se analizan en estos trabajos, no es menos cierto que la no localidad que se utilizan en muchos de estos trabajos no tiene las mismas características que la no localidad de la no linealidad orientacional de los CLN. Por ejemplo, la no localidad introducida en las ecuaciones de propagación del campo óptico como un término *ad hoc*, a través de una función respuesta de tipo gaussiano, no es realista en términos de CLN. Además, en muchas ocasiones se manipula un parámetro que permite variar la no localidad del medio y que en un medio realista, si bien la no localidad depende de la geometría de los dispositivos, no sería tan fácil de cambiar. Por estos motivos, presentamos a continuación varios resultados que entendemos de interés para posible trabajo futuro en CLN.

La no localidad de algunos medios no lineales ha despertado un gran interés en parte por su capacidad para estabilizar soluciones que en el caso análogo local son inestables, como por ejemplo la supresión del colapso en medios locales no lineales de haces autoefocantes, entendido este colapso como una divergencia de potencia óptica provocada por el autoenfoco [67, 68]. La no linealidad no local térmica, por ejemplo, estabiliza solitones coherentes elípticos gracias a la forma de la no localidad como se comprobó experimentalmente en [69]. En aquel mismo trabajo se demuestra experimentalmente que esta no localidad es también capaz de estabilizar vórtices solitónicos en anillo (*vortex-ring solitons*) que presentan una inestabilidad acimutal que rompe el anillo en medios locales [70]. También los vórtices de carga arbitraria se demuestran estables en medios altamente no locales, simulados estos mediante función respuesta conveniente en [71] y utilizando la no linealidad orientacional de CLN en [72]. Incluso se han observado numéricamente la existencia de vórtices crecientes, esto es, superposición de dos vórtices concéntricos que difieren en una unidad su carga topológica [73]. En relación a estructuras complejas con momento angular, también se estabilizan estructuras dipolares de solitones (*dipole soliton*) en las que dos solitones (o más [74, 75]) con momento angular bien definido evolucionan de manera estable en su giro uno alrededor del otro en Medios Altamente No Locales

(MANL). Algo más tarde se rebautizarían este tipo de soluciones como acimutones, entendidos como vórtices cuya intensidad está modulada periódicamente en el ángulo acimutal y cuya fase varía no linealmente. Se observarían en medios no locales en 2006, comprobando que la no localidad una vez más estabiliza acimutones que en medios locales son inestables [76, 77].

Los solitones de Hermite-Gauss y de Laguerre-Gauss tienen un gran interés en el estudio de resonadores y guías de onda, de hecho, resultan ser la solución exacta del modelo para *strongly nonlocal nonlinear media*, o modelo Snyder-Mitchell (SM) [34], en coordenadas cartesianas y cilíndricas respectivamente. Además, se conoce desde el año 1966 que los polinomios de Laguerre y Hermite son soluciones lineales de la ecuación de ondas escalar para la envolvente de variación suave [78]. De hecho, al conformar cada una de las familias de polinomios una base del espacio de soluciones de cuadrado integrable en \mathbb{R}^2 , una función arbitraria bidimensional de cuadrado integrable podrá expresarse como combinación lineal de polinomios de Hermite (o de Laguerre). También se han propuesto unas soluciones intermedias dependientes de un parámetro libre cuyos extremos son los polinomios de Laguerre por un lado y los de Hermite por otro. Se les vino a llamar haces gaussianos generalizados [79]. Unas soluciones muy similares a estos haces gaussianos generalizados pero con una derivación distinta se publica en 2007, bautizadas como solitones de Ince-Gauss, una familias de soluciones exactas para el modelo SM y obtenidas a través de una transformación de coordenadas elípticas, cuya forma transversal viene definida por los polinomios de Ince. Variando el parámetro de elipticidad se reproducen las soluciones basadas en polinomios de Laguerre o de Hermite [80, 81]. Existen varias publicaciones que estudian las características de este tipo de soluciones en MANL, en particular su estabilidad, tanto en sus modos fundamentales [82] como en soluciones de orden superior [83]. El modelo SM de MANL también admite como soluciones los llamados solitones de Whittaker que son solitones bidimensionales cuya intensidad está modulada a través de las funciones de Whittaker [84]. Los solitones de Whittaker presentan diversas familias entre las que se cuentan solitones gaussianos, solitones tipo vórtice, solitones de media luna o solitones de collar (*necklace solitons*) por mencionar algunos. En [84] se demuestra numéricamente que no todos ellos son estables en propagación en medios no lineales no locales. Una última clase de soluciones exactas al modelo de SM lo constituyen los solitones gaussianos de función de variable compleja (*complex-variable-function-Gaussian solitons*). Estas soluciones son producto de una función analítica de variable compleja arbitraria y una función gaussiana. Se demuestran estables en evolución en el régimen de no localidad alta [85, 86]. Hasta aquí en lo que se refiere a tipología de soluciones de MANL en dos dimensiones. En los últimos años se ha comenzado a investigar las soluciones a este tipo de modelos en tres dimensiones espaciales y comienzan así a aparecer la tipología correspondiente a este caso, como son los solitones Kummer en MANL [87].

Al margen de la óptica espacial, normalmente no se habla de solitones temporales en CLN dado que la reorientación molecular necesaria para propiciar la aparición de estas soluciones tiene una escala de tiempo muy lenta (del orden de segundos para un dispositivos de unas 100 micras de espesor) entre otros motivos por la no localidad de origen elástico de la orientación molecular. Sin embargo, se ha propuesto recientemente un mecanismo mediante el cual sería posible observar solitones espacio-temporales en CLN, es decir, estructuras ópticas invariantes tanto en el espacio como en el tiempo, a veces referidas como *light bullets*. Para ello se haría necesario combinar dos fuentes de no linealidad independientes, una rápida y la otra lenta. En el caso de los CLN la no linealidad lenta no local que soportaría solitones espaciales sería la no linealidad orientacional, mientras que en el mismo medio, podría darse una no linealidad local de carácter instantáneo (o muy rápido) que permitiría la formación de solitones temporales [88]. Sin embargo esta línea todavía necesita madurar y no hay demasiados trabajos al respecto.

La inestabilidad modulacional (IM) es un efecto no lineal que ocurre en la propagación de paquetes de ondas con distintas componentes frecuenciales espaciales cuando son perturbados por una débil señal de ruido policromático. En un medio homogéneo lineal cada componente frecuencial viaja de manera independiente. No es así en un medio no lineal, en el que hay un acoplamiento energético de ciertas componentes frecuenciales y, por tanto, una redistribución de la energía entre ellas, que conduce a la filamentación del haz inicial. Aunque el mecanismo es conocido desde hace muchos años y fue comprobado experimentalmente en 1973 [89], es treinta años más tarde cuando se da cuenta del mismo en CLN [90]. Bajo la denominación de MANL ya se habían publicado algunos estudios al respecto [91, 92]. Resulta que la no linealidad orientacional y su particular no localidad tiene un efecto de promedio espacial que influye directamente sobre la IM y reduce de manera importante la cantidad de frecuencias a las que puede llegar el acoplo de energía. Tiene pues un efecto de filtrado en frecuencia, al tiempo que limita la potencia canalizada por el armónico más amplificado.

Este mecanismo ha sido sugerido como generador de multisolitones debido a la filamentación [93]. Un año más tarde se publicaría la aparición de la IM no sólo en haces de luz coherente sino también en haces de luz parcialmente coherente [94, 95]. Aunque en 2000 ya se publicara el efecto con luz incoherente, fue en medios locales [96]. En CLN se ha estudiado también la influencia de la IM sobre el ángulo de inclinación del haz debido a la anisotropía del medio en el plano de propagación [97]. Conforme crecen las potencias ópticas, el patrón multisolitónico formado por la IM interfiere espacialmente debido a la no localidad del medio hasta fusionar los solitones, con el consiguiente efecto no lineal sobre la orientación molecular, y la esperada modificación consecuente del ángulo de inclinación del haz.

Las celdas planares para propagación lateral de luz son los dispositivos experimentales más empleados en el estudio de la óptica no lineal en CLN. Son varios los motivos por los que este dispositivo está tan arraigado en los laboratorios: por un lado se trata de material barato y de sencilla manipulación y por otro estos dispositivos permiten elevados grados de control por parte del experimentador. El control del voltaje que se aplica a los electrodos aplicados al dispositivo influye directamente sobre las propiedades ópticas del medio y, por tanto, permite la influencia sobre el haz óptico muy fácilmente. Tal es así, que se han empleado distintas configuraciones de electrodos en celdas planares para propagación lateral de luz para conseguir comportamientos distintos. Así, los dispositivos de electrodos continuos en las dos paredes confinantes del dispositivo permitía orientar las moléculas de cristal líquido de manera que pequeñas potencias ópticas pudieran reorientar el cristal al disminuir el umbral de Friedericksz [24].

Pronto aparecerían estructuras más complejas de los electrodos transparentes de óxido de indio y estaño (ITO) empleados en estos dispositivos, en las que se utilizaban electrodos discontinuos en una de las paredes confinantes, en la que se dispone de mayor tensión eléctrica. Así aparecieron estudios de cristales fotónicos unidimensionales en cristales líquidos, entendidos como un conjunto de guías paralelas inducidas externamente a través del voltaje aplicado a la celda planar [98, 99]. En estos dispositivos se observaron experimentalmente distintos comportamientos del haz de luz en función del voltaje aplicado: difracción discreta a bajas potencias y formación de solitones discretos a altas potencias ópticas. Este comportamiento solitónico permitía *girar* la trayectoria de un haz lanzado oblicuamente con respecto al eje longitudinal de las guías. A bajas potencias el haz iba atravesando todas y cada una de las guías con las que se cruzaba, pero a partir de cierta potencia óptica, la suficiente como para formar un solitón, éste se guiaba por la guía inducida por él mismo, desacoplándose así del resto de guías y cambiando la dirección que hubiera seguido en el caso lineal [100]. Este mecanismo se entendía también como un interruptor todo óptico, pues la trayectoria del haz dependía de la potencia del mismo y producía dos resultados estables y diferentes separados por cierto umbral de potencia óptica. También se exploraron la dependencia de este tipo de dispositivos con el grado de no localidad, utilizando modelos genéricos que permitieran cambiar este parámetro [101, 102]. En estos cristales fotónicos unidimensionales también se ha observado el efecto túnel de Landau-Zener ([103]) inducido ópticamente. Es decir, un haz que abarca varias de las guías paralelas produce una modificación en el índice de refracción, generando un gradiente en la zona de afectación directa del mismo. Ese gradiente influye sobre el haz, provocando una transmisión de energía de modos que se encuentran en distintas bandas y, por tanto, con distintas características de propagación, como su dirección de propagación [104, 105]. En estas publicaciones se estudia el caso particular del efecto en CLN, si bien este efecto había sido ya estudiado anteriormente en cristales fotónicos de una y dos dimensiones [106, 107].

Comportamientos similares tipo interruptor fueron también estudiados y comprobados experimentalmente con un único canal inducido por un electrodo discontinuo. En este caso el principio de funcionamiento era distinto: se lanzaban sobre la guía inducida externamente dos modos con distinta constante de propagación y se diseñaba la longitud de la guía para que, por debajo de cierto voltaje, el desfase entre ambos a la salida del dispositivo fuera un múltiplo par de π . En este caso, los dos modos copolarizados eran indistinguibles a la entrada y a la salida del dispositivo. Como el voltaje aplicado afecta a la orientación molecular y ésta afecta al perfil de índice de refracción, al cambiar las propiedades ópticas del medio, cambiaba el desfase entre ambos. De manera que se podía aplicar un voltaje que produjera un desfase entre ambos modos que fuera múltiplo impar de π . Se apreciaba así un patrón distinto a la salida del dispositivo, pues los haces habrían entrado en él en fase y habrían salida desfasados π radianes [108, 109].

Los dispositivos de un único electrodo no sólo se han utilizado en este contexto, sino que han servido como banco de pruebas para guiado de solitones. En [110] se estudiaba numérica y experimentalmente el guiado de un haz solitónico a través de una guía inducida por un electrodo dispuesto con una inclinación de

hasta 10° respecto del eje medio longitudinal del dispositivo. En este caso, el haz se encontraba confinado en la guía inducida externamente, al verse reflejado en las interfases de valores distintos de índice de refracción en el seno del cristal líquido. Siguiendo esta filosofía, la de guiar solitones a través de la inducción de perfiles de índice de refracción convenientes en el seno del CLN, se han ideado otros dispositivos para hacer girar la trayectoria del nematicón. Assanto utilizó a partir de 2006 dispositivos compuestos de dos electrodos a tensiones distintas que establecían una interfase brusca entre ellos debido al distinto efecto que tenían las tensiones eléctricas sobre el ángulo de orientación del cristal y, por tanto, sobre el índice de refracción del medio [111, 112, 113]. Además las distintas afectaciones sobre el ángulo de orientación inducen mayor o menor anisotropía en la dirección de propagación y, por tanto, el haz sufre inclinaciones distintas al apreciar anisotropías distintas en el plano de evolución (distintos ángulos de *walk-off*). Una disposición experimental de dos electrodos distinta, pero con la misma idea se publicó en [114] con el objeto de mostrar como, una haz atrapado en la región situada entre los electrodos, podía escapar de esta región al aumentar su potencia gracias a la no linealidad orientacional. Un año más tarde se profundizaría en el estudio de este dispositivo y se publicaría un estudio teórico y experimental de cuál es el límite de potencia óptica para el cual ocurre el escape del solitón [115].

Cabe la posibilidad de afectar a la orientación molecular externamente a través de otro haz que incida perpendicularmente a las paredes confinantes, al estilo de lo que hace el campo eléctrico inducido por los electrodos. En 2006 se comprobó experimentalmente como podían construirse puertas lógicas desviando un haz solitónico que se propagaba por una mixtura de cristal líquido cuyas propiedades ópticas se veían alteradas por la incidencia de un haz perpendicular debido a la fotoisomerización, cambios moleculares entre isómeros² inducidos por una fuente de luz [116]. En [117] se estudió una posibilidad similar y se demostró experimentalmente como, en una celda planar de CLN dopado con un colorante, la distinta polarización del haz externo afectaba a la orientación molecular (tanto de la frontera como del seno del dispositivo) de tal manera que el solitón guiado en el seno del cristal líquido podía sufrir una reflexión total interna al encontrarse la interfase producida por el haz externo si éste estaba polarizado en una de las direcciones transversales o refractar en caso de que la polarización fuera en la dirección de propagación del haz interior. Solo un año más tarde, en 2009, y siguiendo una filosofía similar, aparecen unos nuevos dispositivos bautizados como válvulas de luz de cristal líquido (*liquid crystal light valves*). Estos dispositivos se basan en el empleo de una capa adicional en las celdas planares compuesta por un material fotoconductor que aumenta la no linealidad orientacional del medio cuando éste se ve iluminado por un haz perpendicular a las paredes confinantes de la celda (afectando en primer lugar a la capa fotoconductor) [118, 119]. La capa fotoconductor se muestra sensible a la frecuencia de la señal incidente externamente de manera que cuanto mayor es la frecuencia mayor es la afectación sobre la orientación molecular (y mayor, por tanto los ángulos de giro debido a la anisotropía en el plano de evolución, por ejemplo). En 2010 se continúa con el estudio de estos dispositivos y se demuestra experimentalmente como, haces externos de sección circular o elíptica que logren saturar la no linealidad orientacional del cristal líquido en su interacción frontal con el medio, son capaces de desviar un nematicón que se propague por el seno del cristal líquido como consecuencia de su interferencia con una interfase de índices de refracción distintos [120]. Este fundamento experimental es utilizado para diseñar dispositivos de tratamiento de información todo ópticos basados en la interacción de las señales (nematicones guiados por el seno del cristal líquido) con los haces perpendiculares, implementando así demultiplexores espaciales de 2 y 3 bits, por ejemplo [121]. Estos dispositivos desvían el nematicón de una manera determinada en función de la cantidad y forma de los haces perpendiculares de control, para conseguir que el nematicón alcance el puerto de salida conveniente en cada caso. Es un router todo óptico basado en desviar el haz lo conveniente en cada caso para llevar la señal a un puerto de salida o a otro. Con una filosofía idéntica a ésta se publica el mismo año 2010 dispositivos de puertas lógicas todo ópticas en válvulas de luz de cristal líquido [122]. En particular se implementan la NOR (puerta *o lógica* negada) y la XNOR (puerta *o lógica exclusiva* negada).

El diseño de puertas lógicas todo ópticas en CLN ya estaba en mente de los investigadores en el año 2002 cuando se publicó un estudio que caracterizaba experimentalmente la interacción entre nematicones [123]. Se observó en todos casos una interacción atractiva entre haces copolarizados paralelos independientemente del posible desfase relativo entre ellos. Un estudio más detallado, tanto experimental como numérico se publicó este mismo año, 2011, enfatizando la dependencia de la interacción con el grado de no linealidad, para no

²Recuérdese que los isómeros son moléculas con la misma fórmula química pero distinta forma estructural. Es decir, tienen el mismo número de átomos de cada elementos, pero la manera en la que se enlazan es distinta.

localidad fija. No se observaron diferencias significativas con los resultados anteriormente publicados [124]. La interacción de nematicones contra-propagantes ha sido también estudiada, encontrando diferencias en los tiempos de atracción de los haces y en las potencias necesarias para suscitar la atracción. Los haces contra-propagantes son algo más lentos que los co-propagantes, y las potencias necesarias algo mayores en nematicones contra-propagantes debido a la pérdida de potencia óptica inducida por la asimetría de los haces contra-propagantes [125]. Se observa además una región de inestabilidad en la interacción de haces contra-propagantes en el plano *distancia-de-separación/potencia-óptica* refiriéndose a una separación de los haces dependiente del tiempo (tras unirse) [126].

También se han diseñado dispositivos más sofisticados, por ejemplo, para hacer girar el vector director vueltas completas en el plano paralelo a las paredes confinantes del dispositivo. Para ello se empleó una malla de electrodos en disposición hexagonal tipo panal de abejas para que, al ir intercambiando los valores del voltaje aplicados a determinados alineamientos de electrodos, el vector director fuera girando al orientarse con las líneas de campo eléctrico aplicadas por el voltaje externo [127]. Aunque el dispositivo comparte similitudes con las celdas planares, sus aplicaciones se encuentran más bien en el terreno de la propagación frontal de luz, para modificar la polarización de un haz, por ejemplo. El funcionamiento experimental del dispositivo se publicó en [128]. En el año 2011 se publica un dispositivo basado en celda planar con una configuración de electrodos nada trivial, de forma alternante en las variables transversales, y que consigue ángulos de giro de los nematicones tan grandes como 70° [129].

1.3. Estructura y objetivos de la tesis

En esta tesis ahondamos en el estudio de los cristales líquidos nemáticos en celdas planares para propagación de luz lateral. En el capítulo 2 exponemos la derivación de las ecuaciones diferenciales que rigen cada uno de los procesos involucrados: la orientación molecular no lineal, la distribución del campo eléctrico externo y la propagación del campo óptico. En esta derivación se exponen claramente cuáles son las aproximaciones asumidas por el modelo. El capítulo 3 se dedica a la descripción del modelo numérico empleado para obtener una solución aproximada del modelo completo descrito con anterioridad. Todas las ecuaciones planteadas en el capítulo 2 son aproximadas numéricamente en el capítulo 3, donde se tratan aspectos numéricos de interés como un estudio detallado de la cantidad de problemas que se resuelven para alcanzar una solución autoconsistente del modelo completo. De esta manera se muestran detalles del coste computacional del modelo empleado. Para finalizar este capítulo detallamos la derivación y la implementación de la frontera transparente que es empleada, de manera pionera, en las ecuaciones que conforman el modelo completo. Este empleo de la frontera transparente consigue disminuir el coste computacional de las simulaciones en este campo y permite la exploración de nuevos regímenes de funcionamiento de los dispositivos de propagación lateral.

En el capítulo 4 se muestra el comportamiento de cada una de las ecuaciones diferenciales del modelo. Queremos poner de relevancia el hecho de que hemos perseguido la consecución de un modelo realista, relajando las aproximaciones estándar que uno encuentra en la bibliografía especializada que referenciamos a lo largo de todo nuestro trabajo. Aunque ya conocido, nosotros hemos llevado el modelo a regímenes de parámetros inexplorados para caracterizar el comportamiento óptico de la manera más completa posible. Así, caracterizamos en primer lugar el comportamiento de cada una de las ecuaciones por separado. Con respecto al problema de orientación molecular resolvemos las siguientes situaciones:

- Mostramos el comportamiento del problema orientacional unidimensional en los regímenes lineal y no lineal con la única aproximación de equiparar el valor de las constantes elásticas del cristal líquido al mismo valor.
- Extendemos el análisis al caso bidimensional, que exige la resolución de un sistema de dos ecuaciones diferenciales en derivadas parciales no lineales fuertemente acopladas.
- Definimos una nueva disposición del problema orientacional, utilizando unas condiciones de frontera asimétricas que reproducen soluciones totalmente nuevas. Se trata pues de un escenario totalmente nuevo en el campo de las guías de onda de variación gradual del perfil de índice de refracción. Los modos de propagación de la guía lineal, en ausencia de excitaciones externas y no linealidades ópticas

resulta explicarse con la ecuación de Mathieu, poco conocida en el contexto de la propagación de campo óptico en coordenadas cartesianas.

- Mostramos el régimen no lineal de la disposición asimétrica orientacional unidimensional en su dependencia con la potencia y con la anchura del haz.
- Extendemos el empleo de las condiciones de frontera transparentes a las ecuaciones que rigen los ángulos de cabeceo y torsión del cristal líquido, permitiéndonos la simulación de nuevos regímenes de funcionamiento de los dispositivos actuales, como las válvulas de luz de cristal líquido.

La ecuación que resuelve la distribución de campo eléctrico, tanto unidimensional como bidimensional, está fuertemente acoplada a la solución del problema de orientación molecular, por lo que se muestran los resultados del acoplo iterativo de los dos problemas para una diversidad de dispositivos de celdas planares con electrodos continuos y discontinuos en varias configuraciones. Además se emplea también la frontera transparente para esta ecuación, dejando libertad a las líneas de campo eléctrico en la frontera para que se cierren físicamente y no de manera artificial a través de artefactos numéricos.

En cuanto a la resolución del problema de propagación óptica, se presentan los siguientes resultados:

- propagación unidimensional en aproximación paraxial escalar, observando los tres regímenes posibles del campo óptico en función de la potencia: difracción, solitónico y pulsante (oscilación periódica de amplitud en la variable de evolución).
- propagación unidimensional en aproximación escalar vectorial, teniendo en cuenta la anisotropía en el plano de evolución.
- propagación bidimensional paraxial escalar mediante métodos de diferencias finitas, utilizando esquemas de dirección alternada para la optimización computacional del esquema numérico.
- cálculo de los modos anisótropos en el plano transversal de dispositivos típicos de celdas planares bajo excitaciones eléctricas externas.
- realizamos un estudio comparativo de la propagación unidimensional paraxial escalar en caso de iluminación excéntrica en celdas planares. Evidenciamos diferencias significativas frente a algunos modelos aproximados empleados comúnmente en la literatura. Estas diferencias se justifican por el carácter marcadamente no lineal de la propagación óptica en estas circunstancias.
- simulamos dispositivos todo-ópticos para el tratamiento de información como acopladores ópticos direccionales u osciladores transversales. Aunque estos dispositivos ya son conocidos, sirven de base para entender el funcionamiento de un dispositivo novedoso para tratamiento de información todo-óptica basado en la interacción opto-electrónica de dos guías inducidas paralelas que se sirven de circuitos electrónicos auxiliares en los que los fototransistores juegan un papel crucial.

Finalmente, en el capítulo de conclusiones y trabajo futuro, resumimos las principales aportaciones de esta tesis, al tiempo que proponemos un conjunto de trabajos que completan los estudios comenzados con esta tesis y que resultan de elevado interés tecnológico.

Modelado de dispositivos de cristales líquidos nemáticos

Las características duales de los cristales líquidos nemáticos en su comportamiento parte como sólido, debido a su orden orientacional, y en parte como líquido gracias a su facilidad traslacional, hacen que tanto la estática como la dinámica del problema posicional del cristal líquido sean problemas muy complejos de analizar. De hecho se emplean teorías más cercanas a los formalismos de sólidos y cristales para detallar sus características cristalinas y formalismos hidrodinámicos para describir sus propiedades como fluido. Nosotros estudiaremos en profundidad la teoría elástica del continuo de Frank-Oseen para estudiar la posición de equilibrio de las moléculas de cristal líquido frente a excitaciones eléctricas, esto es, la estática del problema. Se trata de una teoría más cercana a la física del estado sólido. Sin embargo queremos mencionar cual es el papel que desempeña la teoría hidrodinámica, aunque no trabajaremos con ella en esta tesis. Esta teoría se emplea para estudiar las características como fluido de los cristales líquidos nemáticos en situaciones dinámicas, donde existen flujos que influyen a su vez sobre el estado cristalino del medio. Así, es capaz de estudiar situaciones de flujo con orientación molecular fija (a través de un fuerte campo magnético) o de orientación libre. En este último caso deben aparecer viscosidades del medio, momentos de inercia de las moléculas, pares moleculares y aceleraciones angulares que, juntos, describen la dinámica del sistema.

El modelo dinámico es conocido como modelo dinámico de Ericksen-Leslie, quien en 1961 generalizó la teoría estática de Oseen-Frank proponiendo leyes de balances y conservación de momentos para estudiar la dinámica correspondiente. Leslie publicó su trabajo en 1966 y 1968 en dos artículos en los que expuso la teoría dinámica completa con éxito [130, 131]. Muchos artículos han estudiado el problema del flujo en cristales líquidos nemáticos [132, 133, 134, 135, 136, 137]. Algunos de ellos son numéricos y otros analizan el problema mediante soluciones semi analíticas o aproximaciones asintóticas. Un modelo por diferencias finitas tridimensional para las ecuaciones de Leslie en el caso de influencia de campo magnético fuerte (para mantener el orden orientacional) es descrito en el año 2010 por Pedro A. Cruz et al. [138].

El modelo estático de Oseen-Frank basado en la minimización de la energía libre del cristal es un problema numéricamente muy complejo. Tanto es así que detallaremos parte de la historia numérica asociada a este problema en el capítulo 3 cuando exponamos el modelo numérico empleado en esta tesis.

Este capítulo está destinado a la presentación del modelo empleado en esta tesis para resolver la propagación de campos ópticos en cristales líquidos. Se analizarán las características y limitaciones de este modelo al tiempo que se presentarán otros modelos existentes en la literatura. El modelo implicará la resolución de las ecuaciones diferenciales que describen la posición del vector director (que en el caso bidimensional supone un sistema de dos ecuaciones diferenciales en derivadas parciales no lineales acopladas), la resolución de la distribución del campo eléctrico externo inducido por el voltaje aplicado a los electrodos y la propagación del campo óptico en el seno del cristal líquido nemático.

2.1. Ecuaciones orientación molecular. Teoría elástica del continuo para cristales nemáticos

Las moléculas de Cristal Líquido Nemático (CLN) tienen, como hemos dicho, una apariencia elipsoidal y un momento eléctrico dipolar. Estas propiedades hacen que exista interacción eléctrica entre las moléculas

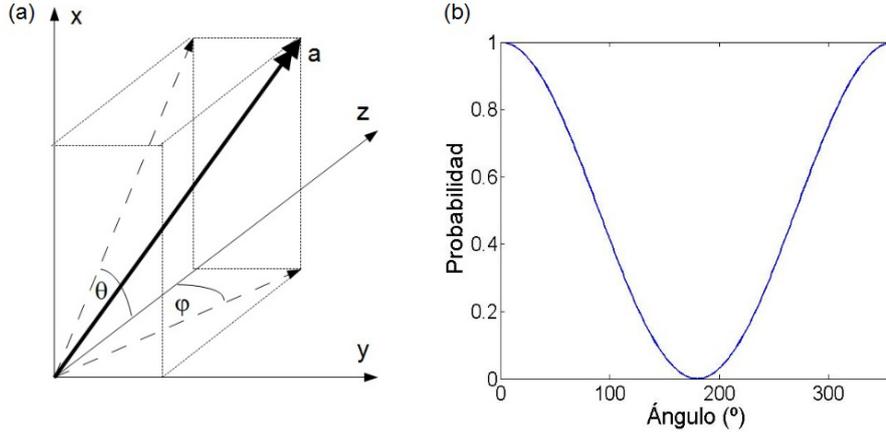


Figura 2.1: Sistema de referencia para la definición de las posiciones moleculares.

y por tanto, las posiciones de unas afectan a las de otras. La orientación de las moléculas viene dada por el vector director, un promedio macroscópico de las orientaciones moleculares. Los tamaños moleculares se sitúan en las decenas de angstroms de longitud (eje mayor) por unos pocos angstroms de anchura (eje menor). La distancia para la cual es apreciable una deformación mecánica del cristal líquido es siempre muchas veces mayor al tamaño molecular, típicamente del orden de $1 \mu m$, por lo que, para analizar las posiciones de las moléculas, se hace uso de un valor promedio de la orientación del eje mayor de las moléculas elipsoidales, el antemencionado vector director. De este modo se está obviando el carácter individual de las moléculas, haciendo un estudio promedio de su orientación. Para indicar el nivel de ordenación orientacional de la fase nemática se hace uso del llamado parámetro de orden S , de manera que se distingan claramente unas fases de otras en función de este parámetro. Así la fase nemática tendría un valor distinto de cero mientras que las fase isotrópica de altas temperaturas tomaría el valor nulo [3]. En la figura 2.1(a) puede verse la posición del eje mayor de una molécula (vector \vec{a}) sobre los ejes coordenados y se definen el ángulo de cabeceo θ como la inclinación respecto del eje z de la proyección ortogonal del vector \vec{a} sobre el plano xz y el ángulo de torsión φ dado por la inclinación respecto del eje z de la proyección ortogonal del vector \vec{a} sobre el plano yz . Siguiendo las directrices de [3], la función de probabilidad de encontrar las moléculas con un ángulo θ tiene la forma de la figura 2.1(b). El valor $P(\theta = 0)$ es la probabilidad de encontrar a las moléculas con un valor de ángulo de cabeceo $\theta = 0$, lo cual significa que están alineadas con el vector n (al igual que $P(\theta = \pi)$). Así quiere decirse que en ausencia de influencias externas lo más probable es que encontremos a las moléculas alineadas con el vector director, por definición de éste. Para evaluar cuantitativamente esta cantidad, deberíamos ponderar esta función de probabilidad con una función dependiente del ángulo θ , de manera que cuando θ fuera cero, estado totalmente alineado, tomara el valor máximo y cuando θ fuera una distribución arbitraria, estado desordenado, tomara el valor cero. Este parámetro mediría así el orden del sistema, le llamamos pues parámetro de orden, S . En primera instancia podría pensarse en la cantidad $S = \int P(\theta) \cos \theta d\theta$. En el dominio de definición de las funciones, $[0, \pi]$, la función $P(\theta)$ es una función de simetría par y $\cos \theta$ es una función de simetría impar. Por lo que el producto resulta una función de simetría impar, cuya integración en tal dominio resulta cero por motivos de simetría. Así pues la función de ponderación que dependa de θ no puede ser una función de simetría impar para los objetivos que pretendemos. Probando con una ponderación como $\cos^2 \theta$ se cumplen nuestras intenciones, de manera que la cantidad $S = \int P(\theta) \cos^2 \theta$ es máxima cuando $\theta = 0$. Para hacer esta cantidad mínima cuando el estado angular es arbitrario definimos el parámetro de orden como

$$S = \int P(\theta) a(b \cos^2 \theta - 1) d\theta \quad (2.1)$$

donde a es una constante arbitraria que fija cual es el valor máximo del parámetro de orden ($a = b - 1$ si queremos que $S_{max} = 1$), y $b = (\int_0^\pi \cos^2 \theta)^{-1}$ si queremos que $S_{min} = 0$. En la literatura se usa $b = 3$ y $a = 2$ que cumplen las dos condiciones anteriores. El parámetro de orden depende de la temperatura, $S(T)$, pues es ésta la que produce transiciones de fase en cristales líquidos nemáticos cambiando así el grado de ordenación del medio. Para describir la variación espacial del parámetro de orden suele escribirse en forma

tensorial

$$S_{\alpha\beta}(\vec{r}) = S(T) \left(n_{\alpha}(\vec{r})n_{\beta}(\vec{r}) - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta} \right), \quad (2.2)$$

con $\alpha = i, j, k$, $\beta = i, j, k$ (los vectores unitarios de las tres direcciones cartesianas) y siendo δ la función delta de Krönecker. Así, dentro del paréntesis estamos multiplicando las proyecciones del vector director sobre dos de los tres ejes. Este parámetro de orden, que aquí se define como promedios de la posición molecular en torno al vector director, puede ser utilizado también para describir anisotropías en las propiedades físicas tales como las susceptibilidades magnética, eléctrica u óptica.

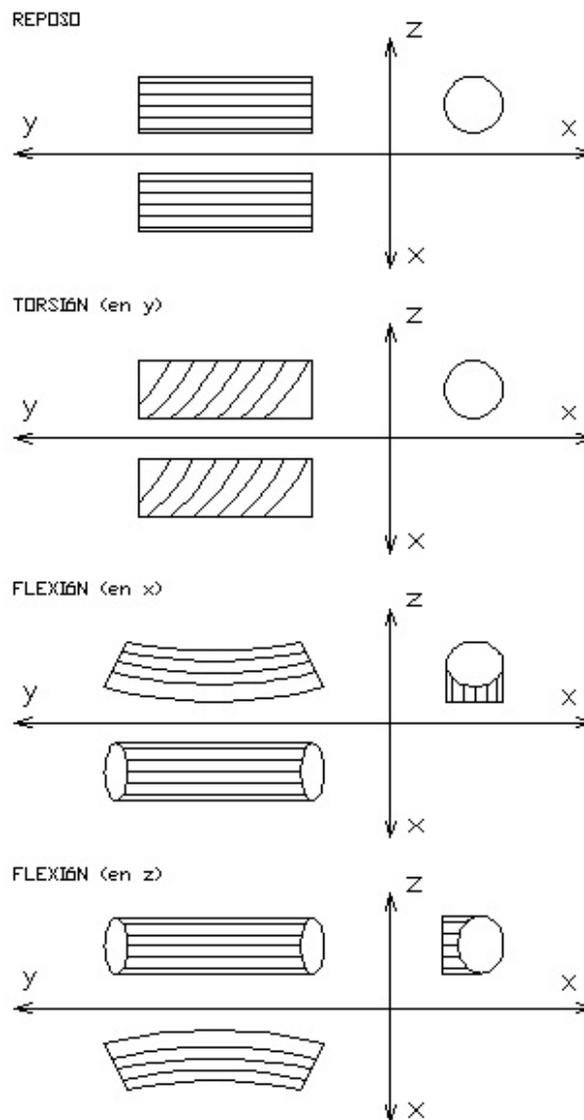


Figura 2.2: Posibles deformaciones de un cristal líquido nemático. Dos flexiones (splay y bend) y una torsión (twist). Se han representado las vistas bidimensionales correspondientes a alzado (vista de frente), planta (vista desde arriba) y perfil izquierdo (vista de lado).

Fue Carl Wilhelm Oseen quien primero enunció una teoría elástica para las deformaciones en cristales líquidos [139] en 1933. Sin embargo, fue Frederick Charles Frank quien reformuló la teoría elástica retocando la teoría de Oseen al anunciar la nulidad de algunos de los coeficientes presentados por aquél y la aparición de otros que no habían sido considerados [140]. De acuerdo con Frank, la energía de distorsión elástica del cristal es la suma de dos componentes: la energía libre elástica debida a las deformaciones y la energía de interacción con la superficie. En el caso de condiciones de frontera que fijen la posición molecular, esta energía de interacción es nula. G. Barbero publicó en la década de los 80 varios artículos al respecto de la energía de interacción en condiciones de anclaje débil [141, 142]. La energía de distorsión elástica puede calcularse,

según Frank, como

$$F_d = \frac{1}{2} (K_1(\nabla \cdot n)^2 + K_2(n \cdot \nabla \times n)^2 + K_3(n \times \nabla \times n)^2) \quad (2.3)$$

donde cada sumando representa la aportación a la energía de distorsión de cada tipo de deformación mecánica posible del cristal, indicando con la potencia al cuadrado de un vector el producto escalar del vector por sí mismo. En la figura 2.2 pueden verse como son cada una de las tres deformaciones posibles. Se trata de las deformaciones producidas por pares de fuerzas alineados con cada uno de los tres ejes coordenados, lo cual produce dos tipos de flexión (en los ejes x y z) y una torsión (en el eje y). Normalmente las tres constantes elásticas K_1 , K_2 y K_3 son del mismo orden de magnitud. Por ejemplo, para el MBBA ¹, estos valores son 5.8×10^{-7} , 3.4×10^{-7} , y 7×10^{-7} dinas, respectivamente. En el caso de tratarse del E7 sus valores son 12×10^{-12} , 9×10^{-12} , y 19.5×10^{-12} N, respectivamente ². Nótese que el valor de K_3 es siempre el mayor debido a su alineamiento con el eje mayor de la molécula, que es más difícil de deformar. La energía de distorsión elástica podemos reescribirla como

$$F_d = \frac{1}{2} (K_1 F_{Mx} + K_2 F_{My} + K_3 F_{Mz}). \quad (2.4)$$

Para desarrollar (2.4) tengamos en cuenta que $n = (n_x, n_y, n_z)$ y desarrollemos cada término, llamándoles

$$\begin{aligned} F_{Mx} &= (\nabla \cdot n)^2 = \left(\frac{\partial n_x}{\partial x} + \frac{\partial n_y}{\partial y} + \frac{\partial n_z}{\partial z} \right)^2, \\ F_{My} &= (n \cdot \nabla \times n)^2 = \left(\begin{pmatrix} n_x & n_y & n_z \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\partial n_z}{\partial y} - \frac{\partial n_y}{\partial z} \\ \frac{\partial n_x}{\partial z} - \frac{\partial n_z}{\partial x} \\ \frac{\partial n_y}{\partial x} - \frac{\partial n_x}{\partial y} \end{pmatrix} \right)^2, \\ F_{Mz} &= (n \times \nabla \times n)^2 = \left(\begin{pmatrix} n_y \left(\frac{\partial n_y}{\partial x} - \frac{\partial n_x}{\partial y} \right) - n_z \left(\frac{\partial n_x}{\partial z} - \frac{\partial n_z}{\partial x} \right) \\ n_z \left(\frac{\partial n_z}{\partial y} - \frac{\partial n_y}{\partial z} \right) - n_x \left(\frac{\partial n_y}{\partial x} - \frac{\partial n_x}{\partial y} \right) \\ n_x \left(\frac{\partial n_x}{\partial z} - \frac{\partial n_z}{\partial x} \right) - n_y \left(\frac{\partial n_z}{\partial y} - \frac{\partial n_y}{\partial z} \right) \end{pmatrix} \right)^2. \end{aligned}$$

La energía libre total del cristal no es sólo la componente debido a la distorsión elástica, sino que también existen componentes relacionadas con la energía eléctrica que interacciona con el cristal líquido, bien sea por fuentes externas de carácter eléctrico u óptico. Así pues, la energía total del cristal se calculará como

$$F_{tot} = F_d + F_s + F_o, \quad (2.5)$$

siendo F_d la componente de distorsión elástica, F_s la componente eléctrica debida a fuentes externas y F_o la componente debida a campos ópticos.

Los cristales líquidos son medios ópticos uniaxiales que presentan una birrefringencia $\Delta\epsilon = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$ elevada, siendo ϵ_{\parallel} la permitividad dieléctrica del cristal líquido a la frecuencia del campo eléctrico aplicado en la dirección paralela a la pared confinante (situada en un plano paralelo al yz , véase figura 2.3) y ϵ_{\perp} la permitividad dieléctrica en la dirección perpendicular. Esta birrefringencia puede ser positiva o negativa en función de con qué cristal líquido estemos trabajando.

En el caso más general, en el que tenemos un campo eléctrico (de cualquier fuente) con las tres componentes espaciales y una permitividad dieléctrica del cristal líquido dada por sus nueve componentes, el campo desplazamiento toma la forma

$$\vec{D} = \bar{\epsilon} \vec{E} = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{yx} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} & \epsilon_{zy} & \epsilon_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix}.$$

¹El nombre IUPAC para el MBBA es p-metoxibencilideno-p'-butilanilina.

²E7 es un cristal líquido formado por una mezcla de varios cianobifenilos con largas colas alifáticas muy utilizado en pantallas de cristal líquido.

En este caso, la expresión que indica cual es la energía eléctrica por unidad de volumen tanto del campo eléctrico como del óptico, se escribe como

$$\begin{aligned}
F_E &= - \int_0^E \vec{D} \cdot d\vec{E} = -\frac{1}{2} \vec{\epsilon} \vec{E}^* \vec{E} \\
&= -\frac{1}{2} (E_x (\epsilon_{xx} E_x^* + \epsilon_{yx} E_y^* + \epsilon_{zx} E_z^*) + E_y (\epsilon_{xy} E_x^* + \epsilon_{yy} E_y^* + \epsilon_{zy} E_z^*) \\
&\quad + E_z (\epsilon_{xz} E_x^* + \epsilon_{yz} E_y^* + \epsilon_{zz} E_z^*)). \tag{2.6}
\end{aligned}$$

Por lo tanto, la forma completa de la ecuación (2.5) en el caso más general en el que existe energía de distorsión elástica debido a las tres posibles deformaciones e interacción de las tres componentes de los campos eléctricos externos y ópticos, será

$$\begin{aligned}
F_{tot} &= \frac{1}{2} (K_1 (\nabla \cdot n)^2 + K_2 (n \cdot \nabla \times n)^2 + K_3 (n \times \nabla \times n)^2) \\
&\quad - \frac{1}{2} (E_{xs} (\epsilon_{xxs} E_{xs}^* + \epsilon_{yxs} E_{ys}^* + \epsilon_{zxs} E_{zs}^*) + E_{ys} (\epsilon_{xys} E_{xs}^* + \epsilon_{yys} E_{ys}^* + \epsilon_{zys} E_{zs}^*) \\
&\quad + E_{zs} (\epsilon_{xzs} E_{xs}^* + \epsilon_{yzs} E_{ys}^* + \epsilon_{zzs} E_{zs}^*)) - \frac{1}{2} (E_{xo} (\epsilon_{x xo} E_{xo}^* + \epsilon_{y xo} E_{yo}^* + \epsilon_{z xo} E_{zo}^*) \\
&\quad + E_{yo} (\epsilon_{x yo} E_{xo}^* + \epsilon_{y yo} E_{yo}^* + \epsilon_{z yo} E_{zo}^*) + E_{zo} (\epsilon_{x zo} E_{xo}^* + \epsilon_{y zo} E_{yo}^* + \epsilon_{z zo} E_{zo}^*)), \tag{2.7}
\end{aligned}$$

donde los subíndices s hacen referencia al campo eléctrico estático externo aplicado y los subíndices o hacen referencia al campo óptico propagante (las propiedades del medio cambian debido a la distinta frecuencia de los campos). Recuérdese que en la ecuación (2.7) tanto la posición del director n como todas las componentes de los tensores de permitividad dependen de los ángulos de cabeceo y torsión ($\theta(x, y, z)$ y $\varphi(x, y, z)$). Para encontrar la posición de mínima energía del cristal líquido y determinar así el equilibrio en cada caso, deben encontrarse las funciones $\theta(x, y, z)$ y $\varphi(x, y, z)$ que minimizan la ecuación (2.7). Para ello pueden seguirse distintas técnicas de optimización numérica tales como el método de gradiente conjugado o simulated annealing. En esta tesis se aplica la teoría de Euler-Lagrange a la ecuación (2.7) para encontrar una formulación en ecuaciones diferenciales en derivadas parciales cuya solución nos ofrezca las funciones buscadas. Así, formulamos una ecuación diferencial para cada una de las funciones buscadas como

$$\frac{\partial F_{tot}}{\partial \theta} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial F_{tot}}{\partial \theta_x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial F_{tot}}{\partial \theta_y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial F_{tot}}{\partial \theta_z} \right) = 0, \tag{2.8}$$

$$\frac{\partial F_{tot}}{\partial \varphi} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial F_{tot}}{\partial \varphi_x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial F_{tot}}{\partial \varphi_y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial F_{tot}}{\partial \varphi_z} \right) = 0. \tag{2.9}$$

El sistema formado por las ecuaciones (2.8) y (2.9) está fuertemente acoplado, pues la solución de (2.8) es necesaria para formular (2.9) y viceversa. Por tanto se sigue un método iterativo tras el cual se alcanza una solución autoconsistente del sistema de ecuaciones diferenciales (como se hace, por ejemplo, en [146] para resolver un sistema similar).

Aplicación a celdas planares

En esta tesis nos centramos en el estudio de la propagación lateral de luz en celdas planares de cristal líquido, como las que se aprecian en la figura 2.3. Se aplica un campo eléctrico externo a través de unos electrodos situados en las paredes confinantes del dispositivo. En ocasiones, estos electrodos pueden presentar discontinuidades. Normalmente el electrodo inferior se conecta al cero de potencial, y en el electrodo superior se aplica una tensión eléctrica positiva.

De acuerdo con esta configuración, las componentes del vector director n y del tensor de permitividades

dieléctricas $\bar{\epsilon}$ toman la forma

$$\begin{aligned} n &= (n_x \ n_y \ n_z) = (\sin \theta \ \cos \theta \sin \varphi \ \cos \theta \cos \varphi), \\ \bar{\epsilon} &= \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{yx} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} & \epsilon_{zy} & \epsilon_{zz} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \sin^2 \theta & \Delta\epsilon \sin \theta \cos \theta \sin \varphi & \Delta\epsilon \sin \theta \cos \theta \cos \varphi \\ \Delta\epsilon \sin \theta \cos \theta \sin \varphi & \epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \cos^2 \theta \sin^2 \varphi & \Delta\epsilon \cos^2 \theta \sin \varphi \cos \varphi \\ \Delta\epsilon \sin \theta \cos \theta \cos \varphi & \Delta\epsilon \cos^2 \theta \sin \varphi \cos \varphi & \epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \cos^2 \theta \cos^2 \varphi \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

2.1.1. Modelo 1D

El modelo unidimensional contempla la dirección transversal x y la dirección de propagación z , por lo tanto se trata de un modelo $1 + 1D$ ya que se resuelve un problema estático (el ángulo de cabeceo $\theta(x)$) para cada paso de propagación. El valor del ángulo de torsión $\varphi(x)$ es siempre nulo, dado que no se permiten movimientos moleculares fuera del plano de definición del problema. Aun así, se permiten dos de las tres deformaciones contempladas en la ecuación (2.4), ya que $F_{Mx} \neq 0$ y $F_{Mz} \neq 0$. Esto puede verse teniendo en cuenta que el vector director se sitúa en el plano xz , i.e. $n = (n_x, 0, n_z)$ y que despreciamos las variaciones con z de sus componentes. La ecuación (2.4) resulta en este caso

$$\begin{aligned} F_d &= \frac{1}{2} (K_1 F_{Mx} + K_3 F_{Mz}) = \frac{1}{2} \left(K_1 \left(\frac{\partial n_x}{\partial x} \right)^2 + K_3 \left(\begin{array}{c} -n_z \left(-\frac{\partial n_z}{\partial x} \right) \\ 0 \\ n_x \left(-\frac{\partial n_z}{\partial x} \right) \end{array} \right)^2 \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(K_1 \left(\cos \theta \frac{\partial \theta}{\partial x} \right)^2 + K_3 \left(\begin{array}{c} -\cos \theta \left(-\frac{\partial \cos \theta}{\partial x} \right) \\ 0 \\ \sin \theta \left(-\frac{\partial \cos \theta}{\partial x} \right) \end{array} \right)^2 \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(K_1 \cos^2 \theta \frac{\partial \theta^2}{\partial x} + K_3 \left(\cos^2 \theta \sin^2 \theta \frac{\partial \theta^2}{\partial x} + \sin^4 \theta \frac{\partial \theta^2}{\partial x} \right) \right). \end{aligned} \quad (2.11)$$

El campo eléctrico aplicado tiene únicamente componente x en este caso, por lo que el término de la energía libre asociado a la interacción con este campo eléctrico externo es la particularización de la ecuación (2.6)

$$F_s = -\frac{1}{2} \epsilon_{xxs} |E_{xs}|^2 = -\frac{1}{2} (\epsilon_{\perp s} + \Delta\epsilon_s \sin^2 \theta) |E_{xs}|^2. \quad (2.12)$$

Considerando la propagación de un campo óptico polarizado linealmente en la dirección x , la contribución a la energía libre del cristal por parte de la interacción con el campo óptico es la misma que en la ecuación

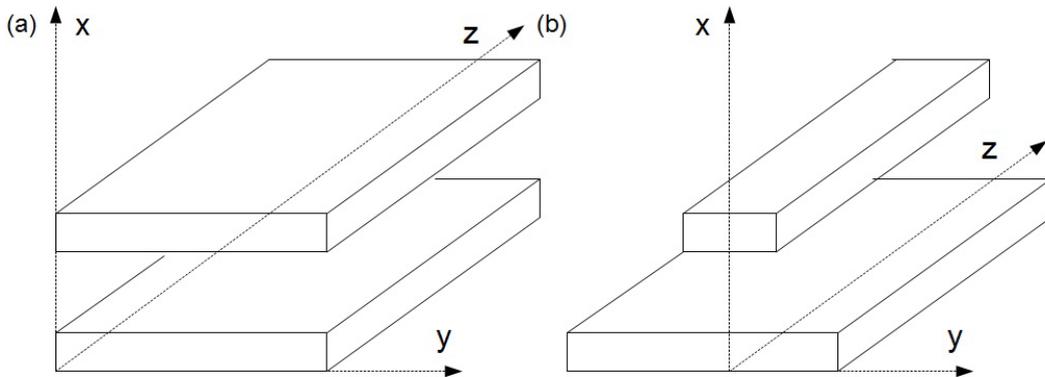


Figura 2.3: Ejemplos de celdas de cristal líquido planar sobre las que se estudia la propagación lateral de luz. (a) Electrodo continuo. (b) Electrodo superior de anchura menor a la del electrodo inferior.

(2.12), de manera que se tiene

$$F_o = -\frac{1}{2}\epsilon_{xxo}|E_{xo}|^2 = -\frac{1}{2}(\epsilon_{\perp o} + \Delta\epsilon_o \sin^2 \theta)|E_{xo}|^2. \quad (2.13)$$

La energía libre total del cristal líquido en este caso será pues

$$F_{tot} = \frac{1}{2} \left(K_1 \cos^2 \theta \frac{\partial \theta^2}{\partial x} + K_3 \left(\cos^2 \theta \sin^2 \theta \frac{\partial \theta^2}{\partial x} + \sin^4 \theta \frac{\partial \theta^2}{\partial x} \right) \right) - \frac{1}{2}(\epsilon_{\perp s} + \Delta\epsilon_s \sin^2 \theta)|E_{xs}|^2 - \frac{1}{2}(\epsilon_{\perp o} + \Delta\epsilon_o \sin^2 \theta)|E_{xo}|^2. \quad (2.14)$$

La ecuación diferencial que debe resolverse para calcular la distribución angular $\theta(x)$ se obtiene tras aplicar la teoría de Euler-Lagrange, calculando

$$\frac{\partial F_{tot}}{\partial \theta} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial F_{tot}}{\partial \theta_x} \right) = 0, \quad (2.15)$$

donde θ_x representa la derivada $\frac{\partial \theta}{\partial x}$. El resultado conduce a la ecuación diferencial

$$(K_1 \cos^2 \theta + K_3 \sin^2 \theta) \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + (K_3 - K_1) \left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right)^2 - \frac{1}{2} \sin(2\theta) (\Delta\epsilon_s |E_{xs}|^2 + \Delta\epsilon_o |E_{xo}|^2) = 0. \quad (2.16)$$

Considerando $K_1 = K_3 = K$, se obtiene

$$K \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} - \frac{1}{2} \sin(2\theta) (\Delta\epsilon_s |E_{xs}|^2 + \Delta\epsilon_o |E_{xo}|^2) = 0, \quad (2.17)$$

que es la ecuación que suele emplearse en estudios unidimensionales de cristales líquidos [148].

2.1.2. Modelo 2D

Los modelos bidimensionales para las distribuciones angulares $\theta(x, y)$ y $\varphi(x, y)$ que desprecian sus variaciones en z , pueden presentar formas distintas dependiendo de la cantidad de componentes de los campos eléctricos que aparecen. Las componentes del campo eléctrico externo dependerán de la geometría de los electrodos y de si se aplica un voltaje homogéneo en todo el electrodo. Nos estamos refiriendo a dispositivos de celdas planares del tipo que se presentan en la figura 2.3.

Suponiendo voltaje homogéneo en todo el electrodo (no hay cambios en la variable de evolución z , ni discontinuidades en esa variable), el campo eléctrico externo sólo puede tener componente x en el caso de electrodos homogéneos en y . Si hay discontinuidades del electrodo en la dirección transversal y aparecen entonces componentes y del campo externo aplicado.

En cuanto a los campos ópticos, las componentes que aparezcan dependerán del estado de polarización inicial de la luz (a la entrada del dispositivo) y posteriormente de su interacción con el cristal líquido, pues éste es capaz de alterar su polarización.

Al considerar el problema estático en las dos direcciones transversales del dispositivo x e y , se complican algo más las expresiones. De hecho aparecen todas las componentes del vector director y únicamente despreciaremos las variaciones en la coordenada de propagación z para poder calcular las distribuciones angulares $\theta(x, y)$ y $\varphi(x, y)$ para cada valor de z .

Planteamos aquí las ecuaciones para el caso de electrodos con discontinuidades en y y polarización circular en xy . En este caso tenemos componentes $E_{xs}(x, y)$, $E_{ys}(x, y)$, $E_{xo}(x, y)$ y $E_{yo}(x, y)$ únicamente. Este es el caso más genérico que vamos a considerar, pues la presencia de componente z del campo externo implica una de dos cosas: o se utilizan electrodos en las caras de entrada y salida (planos $z = 0$ y $z = z_{final}$) o se emplean electrodos discontinuos en la variable de evolución, cosa que no se va a contemplar en esta tesis. No se van a considerar en ningún caso las variaciones de las magnitudes en z (salvo el caso del campo óptico propagante), lo que permite resolver el problema estáticamente para cada sección $z = cte$ en la coordenada de evolución. A partir de las ecuaciones obtenidas se podrán conseguir otras que se aplican a casos más sencillos, simplemente anulando ciertos campos.

De este modo, la ecuación (2.4) resulta

$$F_d = \frac{1}{2}(K_1 F_{Mx} + K_2 F_{My} + K_3 F_{Mz}) = \frac{1}{2} \left(K_1 \left(\frac{\partial n_x}{\partial x} + \frac{\partial n_y}{\partial y} + \frac{\partial n_z}{\partial z} \right)^2 \right. \\ \left. + K_2 \left(\begin{pmatrix} n_x & n_y & n_z \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\partial n_z}{\partial y} \\ -\frac{\partial n_z}{\partial x} \\ \frac{\partial n_y}{\partial x} - \frac{\partial n_x}{\partial y} \end{pmatrix} \right)^2 + K_3 \left(\begin{pmatrix} n_y \left(\frac{\partial n_y}{\partial x} - \frac{\partial n_x}{\partial y} \right) - n_z \left(-\frac{\partial n_z}{\partial x} \right) \\ n_z \left(\frac{\partial n_z}{\partial y} \right) - n_x \left(\frac{\partial n_y}{\partial x} - \frac{\partial n_x}{\partial y} \right) \\ n_x \left(-\frac{\partial n_z}{\partial x} \right) - n_y \left(\frac{\partial n_z}{\partial y} \right) \end{pmatrix} \right)^2 \right),$$

que, tras las convenientes sustituciones, ofrece

$$F_d = \frac{1}{2} \left[K_1 \left(\sin \theta \sin \varphi \frac{\partial \theta}{\partial y} - \cos \theta \left(\cos \varphi \frac{\partial \varphi}{\partial y} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) \right)^2 \right. \\ \left. + K_2 \left(\cos \varphi \frac{\partial \theta}{\partial y} + \cos \theta \left(\sin \theta \sin \varphi \frac{\partial \varphi}{\partial y} - \cos \theta \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \right)^2 \right. \\ \left. + K_3 \left(\cos^2 \theta \sin^2 \theta \left(\frac{\partial \theta}{\partial y} \right)^2 + \sin 2\theta \sin \varphi \frac{\partial \theta}{\partial y} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \sin^2 \theta \left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right)^2 + \frac{1}{4} \left(2 \cos^2 \theta \sin \varphi \frac{\partial \varphi}{\partial y} + \sin 2\theta \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 \right) \right]. \quad (2.18)$$

La aproximación de una constante ($K_1 = K_2 = K_3 = K$) simplifica esta expresión a

$$F_d = \frac{K}{2} \left[\left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \theta}{\partial y} \right)^2 + \left(2 \cos^2 \theta \cos \varphi \frac{\partial \varphi}{\partial y} - 2 \cos^2 \theta \cos \varphi \right) \frac{\partial \theta}{\partial x} + \cos^2 \theta \left(\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)^2 \right) \right]. \quad (2.19)$$

La contribución a la energía libre del campo eléctrico externo aplicado en el caso bidimensional más general, aquel en el que uno de los electrodos presenta discontinuidades (ver figura 2.3), tiene la forma

$$F_s = -\frac{1}{2} (E_{xs} (\epsilon_{xxs} E_{xs}^* + \epsilon_{yxs} E_{ys}^*) + E_{ys} (\epsilon_{xys} E_{xs}^* + \epsilon_{yys} E_{ys}^*)) \\ = -\frac{1}{2} (\epsilon_{\perp s} (|E_{xs}|^2 + |E_{ys}|^2) + \Delta \epsilon_s (\sin \theta E_{xs} + \cos \theta \sin \varphi E_{ys})^2). \quad (2.20)$$

De manera análoga se procede con la contribución del campo óptico, también con dos componentes en el plano transversal xy , obteniendo

$$F_o = -\frac{1}{2} (E_{xo} (\epsilon_{xox} E_{xo}^* + \epsilon_{yox} E_{yo}^*) + E_{yo} (\epsilon_{xyo} E_{xo}^* + \epsilon_{yyo} E_{yo}^*)) \\ = -\frac{1}{2} (\epsilon_{\perp o} (|E_{xo}|^2 + |E_{yo}|^2) + \Delta \epsilon_o (\sin \theta E_{xo}^* + \cos \theta \sin \varphi E_{yo}^*) (\sin \theta E_{xo} + \cos \theta \sin \varphi E_{yo})). \quad (2.21)$$

La energía libre total del cristal líquido en este caso es la suma de las tres componentes dadas por las ecuaciones (2.19), (2.20) y (2.21). Aplicando una vez más la teoría de Euler–Lagrange, a través de

$$\frac{\partial F_{tot}}{\partial \theta} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial F_{tot}}{\partial \theta_x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial F_{tot}}{\partial \theta_y} \right) = 0, \\ \frac{\partial F_{tot}}{\partial \varphi} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial F_{tot}}{\partial \varphi_x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial F_{tot}}{\partial \varphi_y} \right) = 0,$$

se obtiene

$$-K \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} \right) + \sin(2\theta) \left[-\frac{K}{2} \left(\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)^2 \right) \right. \\ \left. + \epsilon_o \left(-\frac{1}{2} (\Delta \epsilon^s |E_x^s|^2 + \Delta \epsilon^o |E_x^o|^2) + \frac{\Delta \epsilon^s}{4} |E_y^s|^2 (1 - \cos(2\varphi)) + \frac{1}{2} \Delta \epsilon^o \sin^2 \varphi |E_y^o|^2 \right) \right] \\ - \frac{1}{2} \epsilon_o \cos(2\theta) \sin \varphi (\Delta \epsilon^o (E_y^{o*} E_x^o + E_x^{o*} E_y^o) + 2 \Delta \epsilon^s E_x^s E_y^s) = 0, \quad (2.22)$$

para la ecuación del ángulo de cabeceo $\theta(x, y)$ y

$$\begin{aligned} K \cos \theta & \left[\cos \theta \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \right) - 2 \sin \theta \left(\frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{\partial \theta}{\partial y} \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) \right] \\ & + \frac{1}{2} \epsilon_0 \cos^2 \theta \sin(2\varphi) (\Delta \epsilon^o |E_y^o|^2 + \Delta \epsilon^s |E_y^s|^2) \\ & + \frac{1}{4} \epsilon_0 \cos \varphi \sin(2\theta) (\Delta \epsilon^o (E_y^{o*} E_x^o + E_x^{o*} E_y^o) + 2\Delta \epsilon^s E_x^s E_y^s) = 0, \end{aligned} \quad (2.23)$$

para la ecuación que resuelve el ángulo de torsión $\varphi(x, y)$. Estas ecuaciones se han planteado explícitamente y resuelto en pocos artículos en el contexto de óptica no lineal en CLN. Uno de ellos es [149], si bien se resuelve el problema en un sistema con ejes de referencia distintos .

2.2. Ecuaciones de distribución del campo eléctrico

Planteamos aquí cuales deben ser las ecuaciones a resolver para encontrar la distribución del campo eléctrico en el seno del cristal líquido tras aplicar un voltaje externo a los electrodos del dispositivo. Estas ecuaciones se pueden derivar de dos maneras distintas. Una es aplicando el teorema de Euler–Lagrange a la densidad de energía del cristal líquido, sustituyendo en la expresión de la energía $E_{xs} = -\frac{\partial V}{\partial x}$. De esta manera, aplicando

$$\frac{\partial F_{tot}}{\partial V} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial F_{tot}}{\partial V_x} \right) = 0,$$

pueden obtenerse las ecuaciones en una y dos dimensiones. La segunda manera es partir de las ecuaciones de Maxwell, que es lo que se presenta de aquí en adelante.

Caso unidimensional en la coordenada transversal x

Las ecuaciones de Maxwell permiten calcular la distribución de la componente $E_{xs}(x)$ en el seno del cristal líquido. Resulta de plantear

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon_{xx} \frac{\partial V}{\partial x} \right) = 0, \quad (2.24)$$

lo que produce la ecuación diferencial

$$(\epsilon_{\perp s} + \Delta \epsilon_s \sin^2 \theta) \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \Delta \epsilon_s \sin 2\theta \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial V}{\partial x} = 0. \quad (2.25)$$

Una vez resuelta la componente x del potencial eléctrico, se calcula el campo eléctrico a través de la derivada del potencial (cambiada de signo). Sin embargo, no se suele calcular así el campo eléctrico en el caso unidimensional ya que existe una manera más sencilla de calcular lo mismo. Se trata de plantear

$$E_{xs} = -\frac{\partial V}{\partial x} \Rightarrow \frac{D_{xs}}{\epsilon_{xss}} = -\frac{\partial V}{\partial x},$$

donde integrando se obtiene

$$D_{xs} \int_0^d \frac{dx}{\epsilon_{xss}} = -V_0 \Rightarrow D_{xs} \int_0^d \frac{dx}{\epsilon_{\perp s} + \Delta \epsilon_s \sin^2 \theta} = -V_0, \quad (2.26)$$

lo que permite calcular la constante D_{xs} a través de una integración numérica, para luego obtener el campo eléctrico E_{xs} , lo cual suele ser más rápido.

Si uno opta por resolver numéricamente la ecuación (2.25), debe acoplarla a la ecuación diferencial para el ángulo de cabeceo, (2.17), lo cual supone una dificultad adicional, pues el error en la resolución de este sistema es importante dado que la solución de una de ellas determina cual es la ecuación para la otra y viceversa. De manera que cuando utilizamos una de las soluciones aproximadas, definimos la otra ecuación como aproximada también, arrastrando el error en el primer cálculo de la función. Es por esto que éste no es un sistema muy recomendable. De hecho, nuestros experimentos numéricos demuestran que si uno comienza resolviendo la ecuación angular, el método Newton–Raphson aplicado al campo eléctrico no converge a error arbitrario.

Caso bidimensional. Ángulos de cabeceo y torsión $\theta(x, y)$, $\varphi(x, y)$

En la situación más general bidimensional, como la que se da en la figura 2.3, debemos resolver las componentes transversales del campo eléctrico E_{xs} y E_{ys} . Recuérdese que se pretende solucionar un problema únicamente 2D y utilizar este modelo en cada sección z de la evolución, por eso no se contemplan componentes del campo eléctrico en z suponiendo los electrodos homogéneos en esa dirección. Nuestro punto de partida son las ecuaciones de Maxwell

$$\left. \begin{array}{l} \nabla D = 0 \\ D = \epsilon E \\ E = -\nabla V \end{array} \right\} \rightarrow \nabla (\bar{\epsilon} \nabla V) = 0,$$

es decir

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon_{xx} \frac{\partial V}{\partial x} + \epsilon_{xy} \frac{\partial V}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\epsilon_{yx} \frac{\partial V}{\partial x} + \epsilon_{yy} \frac{\partial V}{\partial y} \right) = 0.$$

Utilizando el valor de las permitividades dieléctricas se tiene

$$\begin{aligned} (\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \sin^2 \theta) \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + (\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \cos^2 \theta \sin^2 \varphi) \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + \Delta\epsilon \sin(2\theta) \sin \varphi \frac{\partial^2 V}{\partial x \partial y} \\ + \Delta\epsilon \frac{\partial V}{\partial x} \left(\cos(2\theta) \sin \varphi \frac{\partial \theta}{\partial y} + \cos \theta \sin \theta \left(\cos \varphi \frac{\partial \varphi}{\partial y} + 2 \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) \right) \\ + \Delta\epsilon \frac{\partial V}{\partial y} \left((\cos^2 \theta \sin \varphi - \sin^2 \theta \sin \varphi) \frac{\partial \theta}{\partial x} - \sin(2\theta) \sin^2 \varphi \frac{\partial \theta}{\partial y} \right. \\ \left. + \cos \theta \cos(\varphi) \sin \theta \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \cos^2 \theta \sin(2\varphi) \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) = 0, \end{aligned} \quad (2.27)$$

que nos permite resolver la distribución del potencial $V(x, y)$ teniendo en cuenta la información de las distribuciones angulares $\theta(x, y)$ y $\varphi(x, y)$. A partir de esta información calculamos las componentes del campo eléctrico como las derivadas del campo con respecto a la variable correspondiente.

Cálculo del ángulo de cabeceo, $\theta(x, y)$ sin contemplar torsión posible

En el caso en el que el electrodo superior es homogéneo, como en la figura 2.3(a), no existe componente y del campo eléctrico y, por tanto, el ángulo de torsión $\varphi(x, y)$ es cero en todo el dominio (también son nulas sus derivadas), pues la componente x del campo empuja a la molécula a cabecear, cambiando el ángulo $\theta(x, y)$ pero no a girar. Por tanto, la ecuación en este caso resulta ³

$$(\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \sin^2 \theta) \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \epsilon_{\perp} \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + \Delta\epsilon \sin 2\theta \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial V}{\partial x} = 0. \quad (2.28)$$

2.3. Propagación del campo óptico

A lo largo de esta tesis se analizan situaciones muy distintas en las que se realizan las aproximaciones convenientes para obtener resultados válidos de la manera más sencilla. En esta sección pretendemos mostrar cuales son las expresiones finales de las ecuaciones de propagación del campo óptico que deben utilizarse en cada caso, explicando claramente qué aproximaciones se han hecho en cada caso, determinando así el rango de validez de la ecuación correspondiente.

La manera de presentar cada una de las ecuaciones será la siguiente. Partiremos de las ecuaciones de Maxwell, desde el punto más general posible, para ir haciendo posteriormente las simplificaciones oportunas. Así, en el camino que nos conduzca hasta la más sencilla de las ecuaciones, habremos presentado el resto de casos más complicados.

³Utilizamos aquí la identidad trigonométrica $2 \sin \theta \cos \theta = \sin 2\theta$.

2.3.1. Modelos 1+1D

En este caso, consideramos la propagación de un campo óptico en el dispositivo de la figura 2.3(a), considerando una variable transversal (x) y la variable de evolución z , por lo que se trata de un modelo 1+1D. La situación más genérica posible en este caso es considerar la anisotropía del cristal líquido en el plano xz en el que definimos este problema.

Ecuación para la envolvente del campo en aproximación paraxial considerando anisotropía en XZ

Reproducimos aquí el método publicado en [150, 151] para describir la propagación vectorial unidimensional paraxial en el contexto de celdas planares de cristal líquido. Partimos de las ecuaciones de Maxwell

$$\begin{aligned}\nabla \times \vec{E} &= -j\omega\mu_0\vec{H}, \\ \nabla \times \vec{H} &= j\omega\epsilon_0\bar{\epsilon}\vec{E}.\end{aligned}$$

que, desarrolladas, adoptan la forma de un sistema de seis ecuaciones diferenciales acopladas para encontrar las tres componentes espaciales de cada campo, el eléctrico \vec{E} y el magnético \vec{H} . Se tiene pues

$$\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} = -j\omega\mu_0 H_x, \quad (2.29)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} = -j\omega\mu_0 H_y, \quad (2.30)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} = -j\omega\mu_0 H_z, \quad (2.31)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} = j\omega\epsilon_0(\epsilon_{xx}E_x + \epsilon_{xy}E_y + \epsilon_{xz}E_z), \quad (2.32)$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} = j\omega\epsilon_0(\epsilon_{yx}E_x + \epsilon_{yy}E_y + \epsilon_{yz}E_z), \quad (2.33)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} = j\omega\epsilon_0(\epsilon_{zx}E_x + \epsilon_{zy}E_y + \epsilon_{zz}E_z). \quad (2.34)$$

Considerando la anisotropía en el plano XZ , el tensor de permitividad (2.10) puede expresarse como

$$\bar{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \sin^2 \theta & 0 & \Delta\epsilon \sin \theta \cos \theta \cos \varphi \\ 0 & \epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \cos^2 \theta \sin^2 \varphi & 0 \\ \Delta\epsilon \sin \theta \cos \theta \cos \varphi & 0 & \epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \cos^2 \theta \cos^2 \varphi \end{pmatrix}. \quad (2.35)$$

Al reducir el problema al caso unidimensional (sólo se contempla la dirección x normal a las placas y la dirección z de propagación de la luz), se eliminan las dependencias de las magnitudes con la dirección y , de manera que las ecuaciones quedan, considerando la anisotropía en el plano XZ ,

$$-\frac{\partial E_y}{\partial z} = -j\omega\mu_0 H_x, \quad (2.36)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} = -j\omega\mu_0 H_y, \quad (2.37)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} = -j\omega\mu_0 H_z, \quad (2.38)$$

$$-\frac{\partial H_y}{\partial z} = j\omega\epsilon_0(\epsilon_{xx}E_x + \epsilon_{xz}E_z), \quad (2.39)$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} = j\omega\epsilon_0\epsilon_{yy}E_y, \quad (2.40)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial x} = j\omega\epsilon_0(\epsilon_{zx}E_x + \epsilon_{zz}E_z). \quad (2.41)$$

Como vemos, al considerar únicamente la anisotropía en el plano XZ , las ecuaciones se desacoplan y resultan dos sistemas independientes de tres ecuaciones con tres incógnitas, las del modo transversal eléctrico

(TE) y las del modo transversal magnético (TM). Además, eliminamos la dependencia con la variable y , dado que estamos analizando ahora el problema 1+1D. Se decide resolver uno de los dos sistemas de tres ecuaciones, por ejemplo el que se corresponde con el modo TE que involucra $E_x(x, z)$, $E_z(x, z)$ y $H_y(x, z)$. Por tanto deben resolverse las ecuaciones (2.37), (2.39) y (2.41). Para ello resolvemos primero las ecuaciones (2.39) y (2.41) para obtener las dependencias de los campos E_x y E_z con el campo H_y . Son

$$E_x(x, z) = -\frac{i(\epsilon_{xz}H_{y_x} + \epsilon_{zz}H_{y_z})}{\omega\epsilon_0(\epsilon_{xz}\epsilon_{zx} - \epsilon_{xx}\epsilon_{zz})}, \quad (2.42)$$

$$E_z(x, z) = \frac{i(\epsilon_{xx}H_{y_x} + \epsilon_{zx}H_{y_z})}{\omega\epsilon_0(\epsilon_{xz}\epsilon_{zx} - \epsilon_{xx}\epsilon_{zz})}, \quad (2.43)$$

donde empleamos la notación $H_{y_x} = \frac{\partial H_y}{\partial x}$ representando así las derivadas parciales con un subíndice.

Sustituyendo estas dependencias en la ecuación (2.37), se obtiene una ecuación resoluble para el campo $H_y(x, z)$. Sin embargo, buscamos soluciones que puedan factorizarse del modo $H_y(x, z) = h_y(x, z) \exp(-ikz)$ de manera que tenemos una envolvente que varía suavemente en z y un factor que se lleva la dependencia con z de frecuencia más alta, k . Buscando soluciones de este tipo resulta una ecuación para la envolvente $h_y(x, z)$. Sobre esta ecuación hacemos tres consideraciones:

- Despreciamos la derivada primera con z del ángulo de cabeceo $\frac{\partial\theta(x, z)}{\partial z} \simeq 0$, entendiendo que este ángulo tiene una variación suave en z .
- Dado que hemos factorizado la función $H_y(x, z)$ en una envolvente de variación suave en z y una exponencial rápida, de la ecuación para la envolvente $h_y(x, z)$ podemos suponer $\frac{\partial^2 h_y}{\partial z^2} \simeq 0$, que es la conocida aproximación de envolvente suave o *Slowly Varying Envelope Approximation*, SVEA.
- Hacemos $\varphi = 0$, puesto que este ángulo no puede tomar valores distintos de cero en el plano xz , por definición.

De este modo la ecuación que se obtiene finalmente para la envolvente es

$$\begin{aligned} & 2i\Delta\epsilon \sin(2\theta) \frac{\partial^2 h_y(x, z)}{\partial x \partial z} + \left(2k(2\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon) + 2\Delta\epsilon \cos(2\theta) \left(k + i \frac{\partial\theta}{\partial x} \right) \right) \frac{\partial h_y(x, z)}{\partial z} \\ & = \left(ik^2(2\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon) + ik\Delta\epsilon \cos(2\theta) \left(k + 2i \frac{\partial\theta}{\partial x} \right) - 2i\omega\omega\epsilon_0\mu_0\epsilon_{\perp}(\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon) \right) h_y(x, z) \\ & - 2\Delta\epsilon \sin(2\theta) \left(k + i \frac{\partial\theta}{\partial x} \right) \frac{\partial h_y(x, z)}{\partial x} + (i\Delta\epsilon \cos(2\theta) - i(2\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon)) \frac{\partial^2 h_y(x, z)}{\partial x^2}. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Este procedimiento nos permite calcular la propagación vectorial unidimensional con una sola ecuación.

Aproximación paraxial y escalar, medio isótropo

A este caso se llega de igual modo que en el apartado anterior sin más que considerar que el tensor dieléctrico se reduce únicamente a la componente ϵ_{xx} o, lo que es lo mismo, considerando en la ecuación (2.44) que $\Delta\epsilon = 0$. La ecuación resultante queda, después de ordenar los términos, como

$$2ik \frac{\partial A(x, z)}{\partial z} = \frac{\partial^2 A(x, z)}{\partial x^2} + (\omega^2 \mu_0 \epsilon_0 \epsilon_{\perp} + k^2) A(x, z), \quad (2.45)$$

llamando $A(x, z)$ a la envolvente del campo óptico en aproximación paraxial escalar.

En el contexto de cristales líquidos suele usarse la forma

$$2ik_0 n_0 \frac{\partial A(x, z)}{\partial z} = \frac{\partial^2 A(x, z)}{\partial x^2} + k_0^2 (\epsilon - n_0^2) A(x, z), \quad (2.46)$$

donde el término que acompaña a la función de envolvente es sustituido por la dependencia del perfil de índice con la posición del director [115, 152, 153].

2.3.2. Modelos 2D

Estrictamente, los modelos presentados en la subsección 2.3.1 ya son modelos bidimensionales, pues tienen en cuenta dos coordenadas espaciales: la coordenada transversal x y la coordenada de evolución z . Sin embargo, se trata de un problema de evolución o problema de valor inicial. Esto es, se toma un determinado perfil inicial para la envolvente del campo óptico que se quiere evolucionar y se resuelve su propagación en z . Así se tiene una coordenada espacial transversal y una coordenada de evolución (que, en este caso, es también espacial). Por eso, aún siendo bidimensionales, hacemos la distinción en su nombre, llamándoles modelos $1 + 1D$.

El modelo $2D$ que se presenta aquí es un problema de contorno en el que se resuelve la distribución del campo óptico para dos coordenadas espaciales transversales, en particular, las coordenadas x e y en el dispositivo de la figura 2.3(b). En este dispositivo, el campo eléctrico aplicado por los electrodos induce una guía de ondas en el cristal líquido nemático al afectar a la orientación molecular. De hecho, puede hablarse en este caso de una guía de ondas de variación gradual del índice de refracción. Puede entenderse entonces que el cristal líquido es un medio de guiado anisótropo, en tanto que sus propiedades ópticas difieren en cada punto (x, y) .

Siguiendo un procedimiento análogo al presentado en 2.3.1, pueden encontrarse las ecuaciones que resuelven los modos de semejante guía de ondas anisótropa.

Una vez más el punto de partida son las ecuaciones de Maxwell (2.34). Dejando aparte la coordenada z , resolviendo para x e y y considerando esta vez la anisotropía en el plano xy , el tensor de permitividad (2.10) toma la forma

$$\bar{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \sin^2 \theta & \Delta\epsilon \sin \theta \cos \theta \sin \varphi & 0 \\ \Delta\epsilon \sin \theta \cos \theta \sin \varphi & \epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \cos^2 \theta \sin^2 \varphi & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \cos^2 \theta \cos^2 \varphi \end{pmatrix}. \quad (2.47)$$

Las ecuaciones de Maxwell resultan entonces

$$\frac{\partial E_z}{\partial y} = -j\omega\mu_0 H_x, \quad (2.48)$$

$$-\frac{\partial E_z}{\partial x} = -j\omega\mu_0 H_y, \quad (2.49)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} = -j\omega\mu_0 H_z, \quad (2.50)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial y} = j\omega\epsilon_0(\epsilon_{xx}E_x + \epsilon_{xy}E_y), \quad (2.51)$$

$$-\frac{\partial H_z}{\partial x} = j\omega\epsilon_0(\epsilon_{yx}E_x + \epsilon_{yy}E_y), \quad (2.52)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} = j\omega\epsilon_0\epsilon_{zz}E_z. \quad (2.53)$$

Como ya ocurriera en 2.3.1, el sistema de seis ecuaciones vuelve a desacoplarse resultando en dos sistemas de tres ecuaciones con tres incógnitas. Uno para el modo TE (E_x , E_y , H_z y otro para el modo TM (H_x , H_y , H_z). Planteamos uno de los dos, por ejemplo el modo TE (ecuaciones (2.50), (2.51) y (2.52)). Para ello resolvemos primero las ecuaciones (2.51) y (2.52) para obtener las dependencias de los campos E_x y E_y con el campo H_z . Son

$$E_x(x, z) = -\frac{i(\epsilon_{xy}H_{zx} + \epsilon_{yy}H_{zy})}{\omega\epsilon_0(\epsilon_{xy}\epsilon_{yx} - \epsilon_{xx}\epsilon_{yy})}, \quad (2.54)$$

$$E_y(x, z) = -\frac{i(\epsilon_{xx}H_{zx} + \epsilon_{yx}H_{zy})}{\omega\epsilon_0(\epsilon_{xy}\epsilon_{yx} - \epsilon_{xx}\epsilon_{yy})}. \quad (2.55)$$

Sustituyendo estas dependencias en la ecuación (2.50), se obtiene una ecuación resoluble para el campo $H_z(x, y)$. En este caso no contemplamos aproximaciones y estamos resolviendo el campo en el dominio xy .

La ecuación que se obtiene finalmente para el campo $H_z(x, y)$ es

$$\begin{aligned}
& 4 \left[4\epsilon_{\perp}^2 + (5 - 3 \cos(2\theta) - 2 \cos^2 \theta \cos(2\varphi)) \epsilon_{\perp} \Delta\epsilon + \Delta\epsilon^2 (4 \sin^4 \theta + \sin^2(2\theta) \sin^2 \varphi) \right] \frac{\partial^2 H_z(x, y)}{\partial x^2} \\
& + 4 \left[4\epsilon_{\perp}^2 - 4\epsilon_{\perp} \Delta\epsilon (-1 + \cos^2 \theta \cos(2\varphi)) + \Delta\epsilon^2 \sin^2 \varphi (\sin^2(2\theta) + 4 \cos^4 \theta \sin^2 \varphi) \right] \frac{\partial^2 H_z(x, y)}{\partial y^2} \\
& + 16\Delta\epsilon \sin \varphi \left[\epsilon_{\perp} \sin(2\theta) + 2\Delta\epsilon \cos \theta \sin \theta (\sin^2 \theta + \cos^2 \theta \sin^2 \varphi) \right] \frac{\partial^2 H_z(x, y)}{\partial x \partial y} \\
& + 2\Delta\epsilon \left[4\epsilon_{\perp} \left[2 \cos(2\theta) \sin \varphi \frac{\partial \theta}{\partial y} + \sin(2\theta) \left(\cos \varphi \frac{\partial \varphi}{\partial y} + 2 \sin^2 \varphi \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) - 2 \cos^2 \theta \sin 2\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right] \right. \\
& - \Delta\epsilon \left[\left[(1 - 7 \cos(2\theta)) \sin \varphi + 2 \cos^2 \theta \sin(3\varphi) \right] \frac{\partial \theta}{\partial y} + 8 \cos \theta \cos \varphi \sin \theta (-\sin^2 \theta + \cos^2 \theta \sin^2 \varphi) \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right. \\
& \left. \left. + 2 \sin(2\theta) \left[-4 \sin^2 \varphi \frac{\partial \theta}{\partial x} + \sin(2\theta) \sin(2\varphi) \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right] \right] \right] \frac{\partial H_z(x, y)}{\partial x} \\
& + 2\Delta\epsilon \left[\epsilon_{\perp} \left[8 \cos(2\theta) \sin \varphi \frac{\partial \theta}{\partial x} + 4 \sin(2\theta) \left(-2 \frac{\partial \theta}{\partial y} + \cos \varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \right] \right. \\
& \left. + \frac{1}{2} \Delta\epsilon \left[-16 \sin(2\theta) \sin^2 \varphi \frac{\partial \theta}{\partial y} + 4 \sin^2(2\theta) \sin(2\varphi) \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right. \right. \\
& \left. \left. + 2(-1 + 3 \cos(2\theta) - 2 \cos^2 \theta \cos(2\varphi)) \left(2 \sin \varphi \frac{\partial \theta}{\partial x} - \cos \varphi \sin(2\theta) \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \right] \right] \frac{\partial H_z(x, y)}{\partial y} \\
& + 16\omega^2 \mu_0 \epsilon_0 \epsilon_{\perp} (\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon (\sin^2 \theta + \cos^2 \theta \sin^2 \varphi))^2 H_z(x, y) = 0. \tag{2.56}
\end{aligned}$$

Un procedimiento análogo conduce a la ecuación correspondiente para el campo $E_z(x, y)$. Una vez conocidos estos dos campos, pueden encontrarse la forma de los otros cuatro campos en base a las relaciones que los vinculan en las ecuaciones de Maxwell.

2.3.3. Modelos 2+1D

La deducción de la ecuación para el método de propagación bidimensional lineal isótropo paraxial es la misma que en la subsección 2.3.1. Por tanto, la ecuación es la ampliación bidimensional de la ecuación (2.46), es decir

$$2ik_0 n_0 \frac{\partial A(x, y, z)}{\partial z} = \frac{\partial^2 A(x, y, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 A(x, y, z)}{\partial y^2} + k_0^2 (\epsilon - n_0^2) A(x, y, z). \tag{2.57}$$

3

Tratamiento numérico de los modelos de cristales líquidos

El modelo expuesto en el capítulo 2 se compone de varias ecuaciones diferenciales en derivadas parciales fuertemente acopladas. Alguna de las ecuaciones diferenciales a resolver es lineal y tiene solución analítica. El problema no es, pues, resolver cada una de las ecuaciones independientemente, sino hacerlo cuando se acoplan fuertemente, lo cual hace aparecer una no linealidad efectiva inherente al fuerte acoplo de las ecuaciones. Se hace necesario pues, la aproximación numérica de las ecuaciones diferenciales para encontrar una solución aproximada al problema acoplado.

El método numérico empleado para aproximar las ecuaciones diferenciales es el Método de Diferencias Finitas (MDF) [154]. Su facilidad de implementación, así como la de los análisis de estabilidad sugieren la idoneidad del método. Además, el empleo de fronteras transparentes en ecuaciones en diferencias finitas se ha estudiado ampliamente [155]-[159] y es fundamental en el desarrollo de este trabajo de tesis.

En este capítulo expondremos las aproximaciones en diferencias para cada una de las ecuaciones diferenciales, mostraremos las características del proceso iterativo implementado para alcanzar la solución auto-consistente al problema y detallaremos el origen, la forma y la implementación de la frontera transparente empleada. Por último analizaremos brevemente el coste computacional asociado a la resolución del problema completo ofreciendo datos sobre la cantidad de problemas numéricos a resolver para alcanzar la solución final del modelo totalmente acoplado.

3.1. Aproximación a las ecuaciones de orientación molecular

El modelo de orientación molecular expuesto en la sección 2.1 presenta ecuaciones diferenciales no lineales debido al término trigonométrico que incluye. Se trata además de problemas de contorno, ya que se pretende resolver la distribución del ángulo de cabeceo y/o torsión en las coordenadas espaciales transversales dado el conocimiento de la función en la frontera. La solución a dichos problemas requerirá en primer lugar la aproximación mediante el MDF de las ecuaciones diferenciales pertinentes. Así se obtiene una ecuación en diferencias válida para cada nodo de nuestro dominio discreto aproximado. El sistema de ecuaciones resultante puede resolverse mediante métodos iterativos, como el de Newton–Raphson.

Sin embargo el empleo de las ecuaciones de Euler–Lagrange que minimizan la expresión de la energía libre no es, ni mucho menos, el único método empleado para la resolución numérica del problema de Oseen–Frank. De hecho, se ha estudiado mucho este problema desde el punto de vista numérico desde mediados de los 80. Existen varios estudios muy completos que recogen muy bien esta situación [160, 161, 162, 163, 164]. Hay alguna consideración general que merece la pena mencionar aquí para entender la complejidad del cálculo. En particular, el problema de la minimización de la energía libre del cristal depende críticamente del valor relativo entre las tres constantes elásticas, hasta tal punto que determinados tripletes hacen aparecer soluciones singulares y otros no. Por tanto la simplificación comúnmente empleada a efectos numéricos de equiparar el valor de las tres constantes es un caso particular que puede afectar al espacio de soluciones del problema original, sabiendo que el conjunto de funciones que minimizan la expresión de la energía libre es infinito [164]. Normalmente en estos trabajos se trata de encontrar una función $n(x, y, z)$ tal que minimiza la energía libre del cristal, siendo n el vector director unitario. Se toman condiciones de contorno tipo Dirichlet y

se encuentran soluciones con discontinuidades puntuales, bien porque no existen soluciones que no las tengan, para dicho problema, bien porque estas soluciones tienen menor energía que otras posibles configuraciones [163].

Nosotros no resolvemos exactamente la misma expresión funcional, ya que para nosotros el vector director tiene una dependencia definida con las funciones angulares que definen su posición, el ángulo de cabeceo $\theta(x, y, z)$ y el ángulo de torsión $\varphi(x, y, z)$. Así, para la expresión general de la energía libre, las variables se corresponden con estas dos funciones angulares y se nos ofrecen dos ecuaciones de Euler-Lagrange para alcanzar la solución a cada una de ellas.

En cuanto a la manera de optimizar los cálculos de los métodos iterativos tipo Newton-Raphson, hay algún trabajo que resume las posibilidades al respecto [165]. Se trata de resolver los sistemas lineales de ecuaciones que aparecen en el método de manera aproximada y no de manera directa. Dentro de los métodos para la resolución aproximada de un sistema de ecuaciones lineales se encuentra los métodos de Jacobi, Gauss-Seidel, sistemas de sobrerrelajación o sistemas SOR, gradiente conjugado preconditionado y *multigrid*. La conclusión de este estudio es que la técnica *multigrid* supera en mucho la rapidez de convergencia y reduce drásticamente el coste computacional de cualquier otra técnica. Por este motivo se estudia tal posibilidad en nuestros códigos y se trata su problemática en una subsección especial de este mismo capítulo.

Expuesta ya nuestra intencionalidad, pasamos a explicar las aproximaciones numéricas a cada una de las ecuaciones diferenciales que debemos resolver. En todo caso nuestro dominio estará definido por los rangos $x \in [0, d]$ siendo d el espesor de la celda, $y \in [-L/2, L/2]$, con L la anchura de la celda en la dirección y . Tomaremos N nodos en la dirección x y M en la dirección y (definiendo una malla de $N - 1$ intervalos en x y $M - 1$ en y). Tras cada discretización detallamos los rangos de validez de los subíndices de discretización.

3.1.1. Modelo 1D

La aproximación a la ecuación (2.17) usando el MDF emplea operadores en diferencias que aproximan a segundo orden la derivada segunda espacial. La ecuación en diferencias resulta

$$\frac{K}{\Delta x^2}(\theta_{j-1} - 2\theta_j + \theta_{j+1}) - \frac{1}{2} \sin(2\theta_j) (\Delta\epsilon_s |E_{xs_j}|^2 + \Delta\epsilon_o |E_{xo_j}|^2) = 0, \quad (3.1)$$

para $2 \leq j \leq (N - 1)$, siendo θ_j el valor de la función del ángulo de cabeceo $\theta(x)$ en el nodo $j\Delta x$ del dominio discreto, los campos eléctricos externo y óptico E_{xs_j} y E_{xo_j} en el nodo $j\Delta x$, respectivamente. Las condiciones de contorno son de tipo Dirichlet, de manera que los valores de la frontera están fijados en un valor muy pequeño, el valor del precabeceo $\theta_0 = 2^\circ$, que se consigue a través de una técnica de frotado de las superficies confinantes del cristal líquido. Así pues, tenemos en el contorno $\theta_1 = \theta_0$ y $\theta_N = \theta_0$ y en los nodos interiores un sistema de $N - 2$ ecuaciones con $N - 2$ incógnitas. Este sistema de ecuaciones no lineal puede resolverse mediante técnicas iterativas como el método Newton-Raphson, que establece

$$J_{F_n}(\theta_{n+1} - \theta_n) = -F_n, \quad (3.2)$$

siendo $F_n = (F_{2n}, F_{3n}, \dots, F_{(N-2)n}, F_{(N-1)n})$ el iterado enésimo del funcional $F = (F_2, F_3, \dots, F_{N-1})$, que se corresponde con la ecuación (3.1) para cada j . Para obtener la matriz jacobiana se hace necesario calcular las derivadas parciales del funcional F_n con respecto a cada una de las incógnitas θ_j . Se obtiene una matriz tridiagonal ya que sólo se nos hace necesario calcular las derivadas parciales con respecto a las posiciones θ_{j-1} , θ_j y θ_{j+1} . Así, tenemos que

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_n}{\partial \theta_{j-1}} &= \frac{K}{\Delta x^2}, \\ \frac{\partial F_n}{\partial \theta_{j+1}} &= \frac{\partial F_j}{\partial \theta_{j-1}}, \\ \frac{\partial F_n}{\partial \theta_j} &= -2 \frac{K}{\Delta x^2} - \cos(2\theta_j) (\Delta\epsilon_s |E_{xs_j}|^2 + \Delta\epsilon_o |E_{xo_j}|^2). \end{aligned}$$

El método itera sucesivamente hasta conseguir un valor de θ_{n+1} arbitrariamente cerca del valor θ_n , lo cual significará que nos encontramos arbitrariamente cerca de la solución, en caso de convergencia a la misma. La

forma matricial de la ecuación (3.2) es

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial F_2}{\partial \theta_2} & \frac{\partial F_2}{\partial \theta_3} & \cdots & \frac{\partial F_2}{\partial \theta_{N-1}} \\ \frac{\partial F_3}{\partial \theta_2} & \frac{\partial F_3}{\partial \theta_3} & \cdots & \frac{\partial F_3}{\partial \theta_{N-1}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial F_{N-1}}{\partial \theta_2} & \frac{\partial F_{N-1}}{\partial \theta_3} & \cdots & \frac{\partial F_{N-1}}{\partial \theta_{N-1}} \end{pmatrix}_n \begin{pmatrix} \Delta \theta_2 \\ \Delta \theta_3 \\ \vdots \\ \Delta \theta_{N-1} \end{pmatrix}_n = - \begin{pmatrix} F_2 \\ F_3 \\ \vdots \\ F_{N-1} \end{pmatrix}_n$$

3.1.2. Modelo 2D

En el supuesto más general del problema de orientación bidimensional, consideramos la existencia de campos eléctricos externos y ópticos en las dos direcciones transversales x e y de manera que debemos contemplar también las posibles variaciones angulares para el cabeceo y la torsión de las moléculas, $\theta(x, y)$ y $\varphi(x, y)$ respectivamente, tal y como se hace en la subsección 2.1.2. Resolvemos entonces por separado las ecuaciones correspondientes a cada uno de los ángulos de posición de las moléculas. Estas dos ecuaciones están fuertemente acopladas dado que la información del ángulo de torsión $\varphi(x, y)$ es necesaria para definir la ecuación para el ángulo de cabeceo (2.22) y viceversa. Usamos aquí un sistema iterativo presentado en [146] para acoplar este sistema de ecuaciones.

La ecuación (2.22), que resuelve el ángulo de cabeceo $\theta(x, y)$, se aproxima por el método de las diferencias finitas, usando aproximaciones centradas (que cometen error de segundo orden) a los operadores diferenciales que aparecen. El esquema en diferencias resulta

$$\begin{aligned} & -K \left(\frac{1}{\Delta x^2} (\theta_{j-1,k} - 2\theta_{j,k} + \theta_{j+1,k}) + \frac{1}{\Delta y^2} (\theta_{j,k-1} - 2\theta_{j,k} + \theta_{j,k+1}) \right) \\ & + \sin(2\theta_{j,k}) \left[-\frac{K}{2} \left(\left(\frac{\varphi_{j+1,k} - \varphi_{j-1,k}}{2\Delta x} \right)^2 + \left(\frac{\varphi_{j,k+1} - \varphi_{j,k-1}}{2\Delta y} \right)^2 \right) \right. \\ & + \epsilon_0 \left(-\frac{1}{2} \left(\Delta \epsilon^s |E_{x_j,k}^s|^2 + \Delta \epsilon^o |E_{x_j,k}^o|^2 \right) + \frac{\Delta \epsilon^s}{4} |E_{y_j,k}^s|^2 (1 - \cos(2\varphi_{j,k})) + \frac{1}{2} \Delta \epsilon^o \sin^2 \varphi_{j,k} |E_{y_j,k}^o|^2 \right) \left. \right] \\ & - \frac{1}{2} \epsilon_0 \cos(2\theta_{j,k}) \sin \varphi_{j,k} \left(\Delta \epsilon^o (E_{y_j,k}^{o*} E_{x_j,k}^o + E_{x_j,k}^{o*} E_{y_j,k}^o) + 2\Delta \epsilon^s E_{x_j,k}^s E_{y_j,k}^s \right) = 0, \end{aligned} \quad (3.3)$$

para $2 \leq j \leq N-1$ y $2 \leq k \leq M-1$. Las condiciones de contorno en la dirección x , confinante del cristal líquido, son de tipo Dirichlet, ya que experimentalmente suele fijarse el valor del ángulo de cabeceo en las superficies confinantes del cristal,

$$\theta_{1,k} = \theta_0, \quad \theta_{N,k} = \theta_0, \quad \forall k.$$

Las condiciones de contorno en la otra dirección transversal, y , admite una variedad mayor de posibilidades atendiendo al interés particular. Pueden emplearse condiciones periódicas para simular medios infinitos en esta dirección transversal para el caso de electrodo continuo. Si el electrodo fuera discontinuo, la introducción de condiciones periódicas produciría un medio infinito periódico con lo que pueden simularse situaciones de gratings y difracción discreta, por ejemplo. En este caso se tendría

$$\theta_{j,1} = \theta_{j,N-1}, \quad \theta_{j,N} = \theta_{j,2}, \quad \forall j.$$

También pueden emplearse condiciones de frontera transparente en la dirección y , lo que permite simular la finitud en esta dirección de un dispositivo de celda planar. La aplicación de este tipo de condiciones de contorno será tratada más ampliamente en un capítulo específico de esta tesis más adelante.

En cuanto a la resolución de los nodos interiores, el método Newton-Raphson multidimensional aplicado a las $(N-2)(M-2)$ ecuaciones que aparecen al evaluar la expresión (3.3) para cada valor de los subíndices espaciales, hace intervenir el jacobiano del sistema de ecuaciones, con lo que interesa calcular las derivadas parciales de cada una de las ecuaciones del sistema (que llamaremos $F_{j,k}$) con respecto a $\theta_{j,k}$, $\theta_{j-1,k}$, $\theta_{j+1,k}$,

$\theta_{j,k-1}$ y $\theta_{j,k+1}$, resultando así en una matriz de cinco diagonales:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_{j,k}}{\partial \theta_{j-1,k}} &= -\frac{K}{\Delta x^2} = \frac{\partial F_{j,k}}{\partial \theta_{j+1,k}}, & \frac{\partial F_{j,k}}{\partial \theta_{j,k-1}} &= -\frac{K}{\Delta y^2} = \frac{\partial F_{j,k}}{\partial \theta_{j,k+1}}, \\ \frac{\partial F_{j,k}}{\partial \theta_{j,k}} &= 2K \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} \right) + 2 \cos(2\theta_{j,k}) \left[-K \left(\left(\frac{\varphi_{j+1,k} - \varphi_{j-1,k}}{2\Delta x} \right)^2 + \left(\frac{\varphi_{j,k+1} - \varphi_{j,k-1}}{2\Delta y} \right)^2 \right) \right. \\ &+ \epsilon_0 \left(-\frac{1}{2} \left(\Delta \epsilon^s |E_{x_{j,k}}^s|^2 + \Delta \epsilon^o |E_{x_{j,k}}^o|^2 \right) + \frac{\Delta \epsilon^s}{4} |E_{y_{j,k}}^s|^2 (1 - \cos(2\varphi_{j,k})) + \frac{1}{2} \Delta \epsilon^o \sin^2 \varphi_{j,k} |E_{y_{j,k}}^o|^2 \right) \\ &\left. + \sin(2\theta_{j,k}) \epsilon_0 \sin \varphi_{j,k} \left(\Delta \epsilon^o (E_{x_{j,k}}^{o*} E_{x_{j,k}}^o + E_{x_{j,k}}^{o*} E_{y_{j,k}}^o) + 2\Delta \epsilon^s E_{x_{j,k}}^s E_{y_{j,k}}^s \right) \right]. \end{aligned}$$

La ecuación en diferencias correspondiente a la discretización de la ecuación (2.23) que resuelve el ángulo de torsión $\varphi(x, y)$, utilizando una vez más aproximaciones de segundo orden, es

$$\begin{aligned} K \cos \theta_{j,k} &\left[\cos \theta_{j,k} \left(\frac{1}{\Delta x^2} (\varphi_{j-1,k} - 2\varphi_{j,k} + \varphi_{j+1,k}) + \frac{1}{\Delta y^2} (\varphi_{j,k-1} - 2\varphi_{j,k} + \varphi_{j,k+1}) \right) \right. \\ &- 2 \sin \theta_{j,k} \left(\frac{1}{4\Delta x^2} (\theta_{j+1,k} - \theta_{j-1,k}) (\varphi_{j+1,k} - \varphi_{j-1,k}) + \frac{1}{4\Delta y^2} (\theta_{j,k+1} - \theta_{j,k-1}) (\varphi_{j,k+1} - \varphi_{j,k-1}) \right) \\ &+ \frac{1}{2} \epsilon_0 \cos^2 \theta_{j,k} \sin(2\varphi_{j,k}) \left(\Delta \epsilon^o |E_{y_{j,k}}^o|^2 + \Delta \epsilon^s |E_{y_{j,k}}^s|^2 \right) \\ &\left. + \frac{1}{4} \epsilon_0 \cos \varphi_{j,k} \sin(2\theta_{j,k}) \left(\Delta \epsilon^o (E_{y_{j,k}}^{o*} E_{x_{j,k}}^o + E_{x_{j,k}}^{o*} E_{y_{j,k}}^o) + 2\Delta \epsilon^s E_{x_{j,k}}^s E_{y_{j,k}}^s \right) \right] = 0. \end{aligned} \quad (3.4)$$

En este caso los términos que aparecen en la matriz jacobiana para el método Newton-Raphson son

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_{j,k}}{\partial \varphi_{j,k}} &= \cos^2 \theta_{j,k} \left[-2K \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} \right) + \epsilon_0 \cos(\varphi_{j,k}) \left(\Delta \epsilon^o |E_{y_{j,k}}^o|^2 + \Delta \epsilon^s |E_{y_{j,k}}^s|^2 \right) \right], \\ \frac{\partial F_{j,k}}{\partial \varphi_{j-1,k}} &= \frac{K \cos^2 \theta_{j,k}}{\Delta x^2} + \frac{K \cos \theta_{j,k} \sin \theta_{j,k}}{\Delta x^2} (\theta_{j+1,k} - \theta_{j-1,k}), \\ \frac{\partial F_{j,k}}{\partial \varphi_{j+1,k}} &= \frac{K \cos^2 \theta_{j,k}}{\Delta x^2} - \frac{K \cos \theta_{j,k} \sin \theta_{j,k}}{\Delta x^2} (\theta_{j+1,k} - \theta_{j-1,k}), \\ \frac{\partial F_{j,k}}{\partial \varphi_{j,k-1}} &= \frac{K \cos^2 \theta_{j,k}}{\Delta y^2} + \frac{K \cos \theta_{j,k} \sin \theta_{j,k}}{\Delta y^2} (\theta_{j,k+1} - \theta_{j,k-1}), \\ \frac{\partial F_{j,k}}{\partial \varphi_{j,k+1}} &= \frac{K \cos^2 \theta_{j,k}}{\Delta y^2} - \frac{K \cos \theta_{j,k} \sin \theta_{j,k}}{\Delta y^2} (\theta_{j,k+1} - \theta_{j,k-1}). \end{aligned}$$

3.2. Aproximación a las ecuaciones de campo eléctrico externo

Se emplea, en todos los casos, el método de diferencias finitas con operadores en diferencias de segundo orden.

3.2.1. Caso unidimensional

Recuérdese que, en este caso, puede obtenerse el campo eléctrico externo a través de una integral numérica o calcularse en primer lugar el campo potencial $V(x)$ con la ecuación diferencial que ofrece el método de Euler-Lagrange para luego obtener el campo eléctrico a partir de éste.

Obtención del campo mediante integral numérica

Nos referimos aquí al cálculo aproximado de la integral (2.26). Es decir,

$$D_{xs} \int_0^d \frac{dx}{\epsilon_{xss}} = -V_0 \Rightarrow D_{xs} \sum_{j=1}^{j=N-1} \frac{\Delta x}{\epsilon_{\perp s} + \Delta \epsilon_s \sin^2 \theta_j} = -V_0. \quad (3.5)$$

Con el valor de D_{xs} puede calcularse el campo eléctrico discreto como $E_{xsj} = \frac{D_{xs}}{\epsilon_{\perp s} + \Delta \epsilon_s \sin^2 \theta_j}$.

Obtención del campo mediante resolución de ecuación diferencial

La ecuación (2.25) puede aproximarse como

$$\frac{(\epsilon_{\perp s} + \Delta\epsilon_s \sin^2 \theta_j)}{\Delta x^2} (V_{j-1} - 2V_j + V_{j+1}) + \frac{\Delta\epsilon_s \sin 2\theta_j}{4\Delta x^2} (\theta_{j+1} - \theta_{j-1})(V_{j+1} - V_{j-1}) = 0, \quad (3.6)$$

para $2 \leq j \leq N-1$. Las condiciones de contorno quedan definidas por el potencial aplicado en los electrodos situados en las superficies confinantes, $V_1 = 0$ V y $V_N = V_0$ V, se trata pues de condiciones de contorno tipo Dirichlet. Puede verse que la ecuación es lineal en V .

3.2.2. Caso bidimensional

La ecuación más general (2.27), se aproxima a segundo orden con la ecuación en diferencias

$$\begin{aligned} & a_{1,j,k} (V_{j-1,k} - 2V_{j,k} + V_{j+1,k}) + a_{2,j,k} (V_{j,k-1} - 2V_{j,k} + V_{j,k+1}) \\ & + a_{3,j,k} (V_{j+1,k+1} - V_{j-1,k+1} - V_{j+1,k-1} + V_{j-1,k-1}) + a_{4,j,k} (V_{j+1,k} - V_{j-1,k}) \\ & + a_{5,j,k} (V_{j,k+1} - V_{j,k-1}) = 0, \end{aligned} \quad (3.7)$$

con

$$\begin{aligned} a_{1,j,k} &= \frac{1}{\Delta x^2} (\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \sin^2 \theta_{j,k}), \\ a_{2,j,k} &= \frac{1}{\Delta y^2} (\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \cos^2 \theta_{j,k} \sin^2 \varphi_{j,k}), \\ a_{3,j,k} &= \frac{1}{4\Delta x \Delta y} \Delta\epsilon \sin(2\theta_{j,k}) \sin \varphi_{j,k}, \\ a_{4,j,k} &= \frac{1}{2\Delta x} \left(\Delta\epsilon \left(\cos(2\theta_{j,k}) \sin \varphi_{j,k} \frac{1}{2\Delta y} (\theta_{j,k+1} - \theta_{j,k-1}) \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + \cos \theta_{j,k} \sin \theta_{j,k} \left(\cos \varphi \frac{1}{2\Delta y} (\varphi_{j,k+1} - \varphi_{j,k-1}) + \frac{2}{\Delta x} (\theta_{j+1,k} - \theta_{j-1,k}) \right) \right) \right), \\ a_{5,j,k} &= \frac{1}{2\Delta y} \left(\Delta\epsilon \left((\cos^2 \theta_{j,k} \sin \varphi_{j,k} - \sin^2 \theta_{j,k} \sin \varphi_{j,k}) \frac{1}{2\Delta x} (\theta_{j+1,k} - \theta_{j-1,k}) \right. \right. \\ & \quad \left. \left. - \sin(2\theta_{j,k}) \sin^2 \varphi_{j,k} \frac{1}{2\Delta y} (\theta_{j,k+1} - \theta_{j,k-1}) + \cos \theta_{j,k} \cos \varphi_{j,k} \sin \theta_{j,k} \frac{1}{2\Delta x} (\varphi_{j+1,k} - \varphi_{j-1,k}) \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + \cos^2 \theta_{j,k} \sin(2\varphi_{j,k}) \frac{1}{2\Delta y} (\varphi_{j,k+1} - \varphi_{j,k-1}) \right) \right), \end{aligned}$$

con $2 \leq j \leq N-1$ y $2 \leq k \leq M-1$. Puede verse que, mientras que las aproximaciones $a_{1,j,k}$, $a_{2,j,k}$ y $a_{3,j,k}$ son puntuales, las demás, $a_{4,j,k}$ y $a_{5,j,k}$, implican el cálculo aproximado de derivadas sobre las funciones angulares. Reescribiendo (3.7) de manera más conveniente, se tiene

$$\begin{aligned} & A_{NW_{j,k}} V_{j-1,k-1} + A_{N_{j,k}} V_{j,k-1} + A_{NE_{j,k}} V_{j+1,k-1} \\ & + A_{W_{j,k}} V_{j-1,k} + A_{P_{j,k}} V_{j,k} + A_{E_{j,k}} V_{j+1,k} \\ & + A_{SW_{j,k}} V_{j-1,k+1} + A_{S_{j,k}} V_{j,k+1} + A_{SE_{j,k}} V_{j+1,k+1} = 0, \end{aligned} \quad (3.8)$$

con $A_{NW_{j,k}} = a_{3,j,k}$, $A_{N_{j,k}} = a_{2,j,k} - a_{5,j,k}$, $A_{NE_{j,k}} = -a_{3,j,k}$, $A_{W_{j,k}} = a_{1,j,k} - a_{4,j,k}$, $A_{P_{j,k}} = -2a_{1,j,k} - 2a_{2,j,k}$, $A_{E_{j,k}} = a_{1,j,k} + a_{4,j,k}$, $A_{SW_{j,k}} = -a_{3,j,k}$, $A_{S_{j,k}} = a_{2,j,k} + a_{5,j,k}$, $A_{SE_{j,k}} = a_{3,j,k}$. De esta manera se ve claramente que el esquema en diferencias aquí presentado utiliza una molécula de nueve puntos, por lo que la matriz del jacobiano correspondiente al método Newton-Raphson que se emplea para resolver este problema de acuerdo con (3.2), tendrá nueve diagonales, cuyos valores serán precisamente los coeficientes $A_{NW_{j,k}}$, $A_{N_{j,k}}$, $A_{NE_{j,k}}$, $A_{W_{j,k}}$, $A_{P_{j,k}}$, $A_{E_{j,k}}$, $A_{SW_{j,k}}$, $A_{S_{j,k}}$, $A_{SE_{j,k}}$, pues éstos resultan ser las derivadas parciales del funcional con respecto a cada una de las variables tal y como se aprecia en la ecuación (3.8).

El tratamiento del contorno en este problema admite varias versiones dependiendo del dispositivo en cuestión que se pretenda simular. Vamos a separar pues dos casos distintos, el caso en el que se simula una celda planar con electrodos continuos en las superficies confinantes y el caso en el que se emplean electrodos discontinuos en una de las superficies confinantes para inducir guías de onda.

Celdas planares con electrodos continuos

La figura 2.3(a) refleja esta situación. Puede verse que la continuidad de los electrodos superior e inferior impone el empleo de una condición de frontera tipo Dirichlet en $x = 0$ y en $x = d$, que vendrá dada por la tensión aplicada a cada electrodo, $V_{1,k} = 0$ y $V_{N,k} = V_0, \forall k$, siendo V_0 el valor de tensión aplicado al electrodo superior.

En la otra dirección transversal, y , pueden emplearse condiciones de contorno periódicas si se pretende simular un dispositivo de anchura infinita. En este caso $V_{j,1} = V_{j,N-1}$ y $V_{j,N} = V_{j,2} \forall j$. Sin embargo pueden emplearse también condiciones de frontera transparente si se pretende simular la finitud en esa dirección del dispositivo en cuestión. En la sección 3.5 se detalla la forma en la que incorporar estas condiciones de contorno.

Celdas planares con electrodos discontinuos

Esta disposición admite distintas configuraciones, dependiendo de cuántas discontinuidades tienen los electrodos (normalmente representando voltajes distintos tras cada una de las discontinuidades). Un ejemplo está representado en la figura 2.3(b). Otra posibilidad sería la complementaria de la figura 3.13, en la que el electrodo superior se sitúa donde está el hueco y el resto de zona de contacto con la superficie confinante superior no dispone de electrodo. Obviamente hay muchísimas más posibilidades. En cualquier caso, la diferencia de tratamiento del contorno estribará siempre en lo que ocurre en la superficie del electrodo discontinuo $x = d$. Una manera de representar genéricamente la condición de contorno en $x = d$ en estos casos es escribir

$$\begin{aligned} V_{j,k} &= V_0, & j &= N, & k &\in \text{electrodo}, \\ V_{j,k} &= c_{N-1,k} V_{j-1,k}, & j &= N, & k &\ni \text{electrodo}, \end{aligned}$$

siendo esta última la condición de contorno transparente que será tratada más ampliamente en la sección 3.5. Para el contorno en $x = 0$ tenemos una condición tipo Dirichlet ya que ahí se sitúa la referencia de potencial $V_{1,k} = 0, \forall k$.

La condición de contorno en la dirección transversal y tiene el mismo tratamiento que en el caso anterior de electrodos continuos, bien se utilizan periódicas, bien condiciones transparentes.

3.3. Aproximación a las ecuaciones de propagación del campo óptico

En todos los casos se utiliza el MDF con aproximaciones centradas a los operadores diferenciales, cometiendo errores de segundo orden. En este apartado se aproximan tanto ecuaciones de evolución, i.e. problemas de valor inicial (PVI), como ecuaciones elípticas o de campo. En el primer caso, conocida una semilla para el campo óptico, estamos interesados en conocer como evoluciona sometida a la ecuación de propagación correspondiente. En el segundo caso, trabajamos con BVP que definen las propiedades ópticas del medio de propagación en cada sección transversal de la evolución del campo óptico, o los modos de propagación del mismo. Al emplear diferencias centradas tanto de las variables transversales como en la variable de evolución, la discretización de PVI conduce a la obtención de esquemas implícitos que producen sistemas de ecuaciones lineales.

3.3.1. Modelos 1+1D

Propagación con anisotropía en el plano XZ

La aproximación por diferencias centradas de la ecuación (2.44), conduce al esquema

$$\begin{aligned}
& 2i\Delta\epsilon \sin(2\theta_j^n) \frac{1}{2\Delta x \Delta z} (h_{y_{j+1}}^{n+1} - h_{y_{j-1}}^{n+1} - h_{y_{j+1}}^n + h_{y_{j-1}}^n) \\
& + \left(2k(2\epsilon_\perp + \Delta\epsilon) + 2\Delta\epsilon \cos(2\theta_j^n) \left(k + \frac{i}{2\Delta x} (\theta_{j+1} - \theta_{j-1}) \right) \right) \frac{1}{\Delta z} (h_{y_j}^{n+1} - h_{y_j}^n) \\
& = \left(ik^2(2\epsilon_\perp + \Delta\epsilon) + ik\Delta\epsilon \cos(2\theta_j) \left(k + \frac{2i}{2\Delta x} (\theta_{j+1} - \theta_{j-1}) \right) - 2i\omega\omega_0\mu_0\epsilon_\perp(\epsilon_\perp + \Delta\epsilon) \right) \frac{1}{2} (h_{y_j}^{n+1} + h_{y_j}^n) \\
& - 2\Delta\epsilon \sin(2\theta_j) \left(k + \frac{i}{2\Delta x} (\theta_{j+1} - \theta_{j-1}) \right) \frac{1}{2} \left(\frac{h_{y_{j+1}}^{n+1} - h_{y_{j-1}}^{n+1}}{2\Delta x} + \frac{h_{y_{j+1}}^n - h_{y_{j-1}}^n}{2\Delta x} \right) \\
& + (i\Delta\epsilon \cos(2\theta_j) - i(2\epsilon_\perp + \Delta\epsilon)) \frac{1}{2\Delta x^2} \left(h_{y_{j+1}}^{n+1} - 2h_{y_j}^{n+1} + h_{y_{j-1}}^{n+1} + h_{y_{j+1}}^n - 2h_{y_j}^n + h_{y_{j-1}}^n \right).
\end{aligned}$$

Este sistema de ecuaciones tiene una matriz de coeficientes tridiagonal, que queda más claro si reescribimos su miembro izquierdo de la forma

$$\begin{aligned}
& \left[\frac{\Delta\epsilon \sin(2\theta_j^n)}{\Delta x \Delta z} + \frac{1}{4\Delta x} \left(\frac{\Delta\epsilon \sin(2\theta_j^n)}{\Delta x} (\theta_{j+1}^n - \theta_{j-1}^n) - 2ik\Delta\epsilon \sin(2\theta_j^n) \right) \right. \\
& \left. - \frac{1}{2\Delta x^2} (2\epsilon_\perp + \Delta\epsilon(1 - \cos(2\theta_j^n))) \right] h_{y_{j-1}}^{n+1} \\
& + \left[\frac{1}{\Delta z} \left(4ik\epsilon_\perp + 2\Delta\epsilon \left(2ik \cos^2(\theta_j^n) - \frac{\cos(2\theta_j^n)}{2\Delta x} (\theta_{j+1}^n - \theta_{j-1}^n) \right) \right) \right. \\
& \left. - \epsilon_\perp \omega\omega_0\mu_0(\epsilon_\perp + \Delta\epsilon) \left(-1 + 2k\epsilon_\perp + \Delta\epsilon \left(k + \cos(2\theta_j^n) + i \frac{\cos(2\theta_j^n)}{\Delta x} (\theta_{j+1}^n - \theta_{j-1}^n) \right) \right) \right. \\
& \left. + \frac{1}{\Delta x^2} (2\epsilon_\perp + \Delta\epsilon(1 - \cos(2\theta_j^n))) \right] h_{y_j}^{n+1} \\
& + \left[-\frac{\Delta\epsilon \sin(2\theta_j^n)}{\Delta x \Delta z} - \frac{1}{4\Delta x} \left(\frac{\Delta\epsilon \sin(2\theta_j^n)}{\Delta x} (\theta_{j+1}^n - \theta_{j-1}^n) - 2ik\Delta\epsilon \sin(2\theta_j^n) \right) \right. \\
& \left. - \frac{1}{2\Delta x^2} (2\epsilon_\perp + \Delta\epsilon(1 - \cos(2\theta_j^n))) \right] h_{y_{j+1}}^{n+1},
\end{aligned}$$

y de igual forma su miembro derecho, donde aparecen los valores de la función en el paso $n\Delta z$ conocido, se escribe

$$\begin{aligned}
& \left[\frac{\Delta\epsilon \sin(2\theta_j^n)}{\Delta x \Delta z} - \frac{1}{4\Delta x} \left(\frac{\Delta\epsilon \sin(2\theta_j^n)}{\Delta x} (\theta_{j+1}^n - \theta_{j-1}^n) - 2ik\Delta\epsilon \sin(2\theta_j^n) \right) \right. \\
& \left. + \frac{1}{2\Delta x^2} (2\epsilon_\perp + \Delta\epsilon(1 - \cos(2\theta_j^n))) \right] h_{y_{j-1}}^n \\
& + \left[\frac{1}{\Delta z} \left(4ik\epsilon_\perp + 2\Delta\epsilon \left(2ik \cos^2(\theta_j^n) - \frac{\cos(2\theta_j^n)}{2\Delta x} (\theta_{j+1}^n - \theta_{j-1}^n) \right) \right) \right. \\
& \left. + \epsilon_\perp \omega\omega_0\mu_0(\epsilon_\perp + \Delta\epsilon) \left(-1 + 2k\epsilon_\perp + \Delta\epsilon \left(k + \cos(2\theta_j^n) + i \frac{\cos(2\theta_j^n)}{\Delta x} (\theta_{j+1}^n - \theta_{j-1}^n) \right) \right) \right. \\
& \left. - \frac{1}{\Delta x^2} (2\epsilon_\perp + \Delta\epsilon(1 - \cos(2\theta_j^n))) \right] h_{y_j}^n \\
& + \left[-\frac{\Delta\epsilon \sin(2\theta_j^n)}{\Delta x \Delta z} + \frac{1}{4\Delta x} \left(\frac{\Delta\epsilon \sin(2\theta_j^n)}{\Delta x} (\theta_{j+1}^n - \theta_{j-1}^n) - 2ik\Delta\epsilon \sin(2\theta_j^n) \right) \right. \\
& \left. - \frac{1}{2\Delta x^2} (2\epsilon_\perp + \Delta\epsilon(1 - \cos(2\theta_j^n))) \right] h_{y_{j+1}}^n,
\end{aligned}$$

válido para $2 \leq j \leq N-1$ y $n \geq 1$, con la condición inicial conocida $h_{y_j}^1, \forall j$. Las condiciones de contorno son, en todo caso, de tipo Dirichlet, dado que el régimen de paraxialidad en que se trata la propagación óptica impone la reflexión total interna en la interacción del campo óptico con la frontera. Así pues se tiene que $h_{y_1}^n = h_{y_N}^n = 0, \forall n$.

Una vez calculada la envolvente del campo h_y , puede obtenerse el campo total $H_y(x, z) = h_y(x, z) \exp(-ikz)$ y con éste calcular los campos totales $E_x(x, z)$ y $E_z(x, z)$ haciendo uso de las ecuaciones (2.42) y (2.43). La aproximación numérica de estas ecuaciones, detallando la forma de las distintas componentes del tensor dieléctrico, resulta

$$E_{x_{j,k}} = -\frac{i}{\epsilon_{\perp} \omega_0 (\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon)} \left((\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \cos^2 \theta) \frac{H_{y_{j,k+1}} - H_{y_{j,k-1}}}{2\Delta z} + \sin \theta \frac{H_{y_{j+1,k}} - H_{y_{j-1,k}}}{2\Delta x} \right),$$

$$E_{z_{j,k}} = \frac{i}{\epsilon_{\perp} \omega_0 (\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon)} \left(\Delta\epsilon \sin \theta \cos \theta \frac{H_{y_{j,k+1}} - H_{y_{j,k-1}}}{2\Delta z} + (\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \sin^2 \theta) \frac{H_{y_{j+1,k}} - H_{y_{j-1,k}}}{2\Delta x} \right),$$

para $2 \leq j \leq N-1$ y $2 \leq k \leq M-1$.

Propagación paraxial escalar de la envolvente del campo óptico

En este caso el empleo de aproximaciones centradas a los operadores diferenciales en la ecuación (2.46) conduce al esquema más utilizado en la aproximación de la ecuación de Schrödinger, el esquema de Crank-Nicolson. Se emplean aproximaciones centradas en el nodo $j\Delta x, (n+1/2)\Delta z$. La aproximación de la derivada segunda espacial en el nodo $(n+1/2)\Delta z$ obliga a tomar el promedio de las aproximaciones centradas en $n\Delta z$ y $(n+1)\Delta z$, de modo similar a lo que ocurre al representar el nodo $A_j^{n+1/2}$ a través del promedio de los valores en los nodos adyacentes A_j^n y A_j^{n+1} . Se trata de un esquema implícito incondicionalmente estable y tiene la forma

$$2ik_0 n_0 \frac{A_j^{n+1} - A_j^n}{\Delta z} = \frac{1}{2} \left(\frac{A_{j+1}^{n+1} - 2A_j^{n+1} + A_{j-1}^{n+1}}{\Delta x^2} + \frac{A_{j+1}^n - 2A_j^n + A_{j-1}^n}{\Delta x^2} \right) + k_0^2 (\epsilon_j - n_0^2) \frac{1}{2} (A_j^{n+1} + A_j^n), \quad (3.9)$$

o también, tras reagrupar a cada lado del igual valores conocidos de incógnitas,

$$A_{j+1}^{n+1} + \left(-2 - 4ik_0 n_0 \frac{\Delta x^2}{\Delta z} + k_0^2 \Delta x^2 (\epsilon_j - n_0^2) \right) A_j^{n+1} + A_{j-1}^{n+1} = -A_{j+1}^n + \left(2 - 4ik_0 n_0 \frac{\Delta x^2}{\Delta z} - k_0^2 \Delta x^2 (\epsilon_j - n_0^2) \right) A_j^n - A_{j-1}^n.$$

La forma matricial resultaría

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & \alpha_2 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \alpha_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \alpha_{N-1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_1^{n+1} \\ A_2^{n+1} \\ A_3^{n+1} \\ \vdots \\ A_{N-1}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta_1 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & \beta_2 & -1 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & \beta_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \beta_{N-1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_1^n \\ A_2^n \\ A_3^n \\ \vdots \\ A_{N-1}^n \end{pmatrix},$$

siendo $\alpha_j = -2 - 4ik_0 n_0 \frac{\Delta x^2}{\Delta z} + k_0^2 \Delta x^2 (\epsilon_j - n_0^2)$ y $\beta_j = 2 - 4ik_0 n_0 \frac{\Delta x^2}{\Delta z} - k_0^2 \Delta x^2 (\epsilon_j - n_0^2)$. La condición inicial impondría un valor conocido para $A_j^1 \forall j$ y las condiciones de contorno tipo Dirichlet establecen $A_1^n = 0$ y $A_N^n = 0, \forall n$.

3.3.2. Modelo 2D

La discretización de la ecuación (2.56) utilizando aproximaciones centradas resulta

$$a_{1,j,k} (H_{z_{j-1,k}} - 2H_{z_{j,k}} + H_{z_{j+1,k}}) + a_{2,j,k} (H_{z_{j,k-1}} - 2H_{z_{j,k}} + H_{z_{j,k+1}}) + a_{3,j,k} (H_{z_{j+1,k+1}} - H_{z_{j-1,k+1}} - H_{z_{j+1,k-1}} + H_{z_{j-1,k-1}}) + a_{4,j,k} (H_{z_{j+1,k}} - H_{z_{j-1,k}}) + a_{5,j,k} (H_{z_{j,k+1}} - H_{z_{j,k-1}}) + a_{6,j,k} H_{z_{j,k}} = 0, \quad (3.10)$$

con

$$\begin{aligned}
a_{1j,k} &= \frac{4}{\Delta x^2} [4\epsilon_{\perp}^2 + (5 - 3 \cos(2\theta_{j,k}) - 2 \cos^2 \theta_{j,k} \cos(2\varphi_{j,k}))\epsilon_{\perp} \Delta\epsilon \\
&\quad + \Delta\epsilon^2 (4 \sin^4 \theta_{j,k} + \sin^2(2\theta_{j,k}) \sin^2 \varphi_{j,k})], \\
a_{2j,k} &= \frac{4}{\Delta y^2} [4\epsilon_{\perp}^2 - 4\epsilon_{\perp} \Delta\epsilon (-1 + \cos^2 \theta_{j,k} \cos(2\varphi_{j,k})) + \Delta\epsilon^2 \sin^2 \varphi_{j,k} (\sin^2(2\theta_{j,k}) \\
&\quad + 4 \cos^4 \theta_{j,k} \sin^2 \varphi_{j,k})], \\
a_{3j,k} &= \frac{1}{4\Delta x \Delta y} 16\Delta\epsilon \sin \varphi_{j,k} [\epsilon_{\perp} \sin(2\theta_{j,k}) + 2\Delta\epsilon \cos \theta_{j,k} \sin \theta_{j,k} (\sin^2 \theta_{j,k} \\
&\quad + \cos^2 \theta_{j,k} \sin^2 \varphi_{j,k})], \\
a_{4j,k} &= \frac{1}{2\Delta x} 2\Delta\epsilon \left[4\epsilon_{\perp} \left[2 \cos(2\theta_{j,k}) \sin \varphi_{j,k} \frac{\theta_{j,k+1} - \theta_{j,k-1}}{2\Delta y} \right. \right. \\
&\quad + \sin(2\theta_{j,k}) \left(\cos \varphi_{j,k} \frac{\varphi_{j,k+1} - \varphi_{j,k-1}}{2\Delta y} + 2 \sin^2 \varphi_{j,k} \frac{\theta_{j+1,k} - \theta_{j-1,k}}{2\Delta x} \right) \\
&\quad \left. \left. - 2 \cos^2 \theta_{j,k} \sin 2\varphi_{j,k} \frac{\varphi_{j+1,k} - \varphi_{j-1,k}}{2\Delta x} \right] \right. \\
&\quad \left. - \Delta\epsilon \left[[(1 - 7 \cos(2\theta_{j,k})) \sin \varphi_{j,k} + 2 \cos^2 \theta_{j,k} \sin(3\varphi_{j,k})] \frac{\theta_{j,k+1} - \theta_{j,k-1}}{2\Delta y} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + 8 \cos \theta_{j,k} \cos \varphi_{j,k} \sin \theta_{j,k} (-\sin^2 \theta_{j,k} + \cos^2 \theta_{j,k} \sin^2 \varphi_{j,k}) \frac{\varphi_{j,k+1} - \varphi_{j,k-1}}{2\Delta y} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + 2 \sin(2\theta_{j,k}) \left[-4 \sin^2 \varphi_{j,k} \frac{\theta_{j+1,k} - \theta_{j-1,k}}{2\Delta x} + \sin(2\theta_{j,k}) \sin(2\varphi_{j,k}) \frac{\varphi_{j+1,k} - \varphi_{j-1,k}}{2\Delta x} \right] \right] \right], \\
a_{5j,k} &= \frac{1}{2\Delta y} 2\Delta\epsilon \left[\epsilon_{\perp} \left[8 \cos(2\theta_{j,k}) \sin \varphi_{j,k} \frac{\theta_{j+1,k} - \theta_{j-1,k}}{2\Delta x} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + 4 \sin(2\theta_{j,k}) \left(-2 \frac{\theta_{j,k+1} - \theta_{j,k-1}}{2\Delta y} + \cos \varphi_{j,k} \frac{\varphi_{j+1,k} - \varphi_{j-1,k}}{2\Delta x} \right) \right] \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \Delta\epsilon \left[-16 \sin(2\theta_{j,k}) \sin^2 \varphi_{j,k} \frac{\theta_{j,k+1} - \theta_{j,k-1}}{2\Delta y} + 4 \sin^2(2\theta_{j,k}) \sin(2\varphi_{j,k}) \frac{\varphi_{j,k+1} - \varphi_{j,k-1}}{2\Delta y} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + 2(-1 + 3 \cos(2\theta_{j,k}) - 2 \cos^2 \theta_{j,k} \cos(2\varphi_{j,k})) \left(2 \sin \varphi_{j,k} \frac{\theta_{j+1,k} - \theta_{j-1,k}}{2\Delta x} \right. \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \left. - \cos \varphi_{j,k} \sin(2\theta_{j,k}) \frac{\varphi_{j+1,k} - \varphi_{j-1,k}}{2\Delta x} \right) \right] \right], \\
a_{6j,k} &= 16\omega^2 \mu_0 \epsilon_0 \epsilon_{\perp} (\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon (\sin^2 \theta_{j,k} + \cos^2 \theta_{j,k} \sin^2 \varphi_{j,k}))^2,
\end{aligned}$$

y $2 \leq j \leq N - 1$, $2 \leq k \leq M - 1$. Es importante recordar en esta implementación que las condiciones de contorno deberán implementarse sobre la función $H_{z_{j,k}}$ pero también sobre las funciones $\theta_{j,k}$ y $\varphi_{j,k}$ que aparecen, junto con sus derivadas, en los coeficientes de esta ecuación en diferencias. Para los campos ópticos se tendrán condiciones tipo Dirichlet en todas las fronteras (igualando a cero los campos) mientras que para las distribuciones angulares se tendrán las condiciones de contorno que correspondan y que se han explicado con anterioridad en las subsecciones correspondientes.

Teniendo la solución para el campo $H_{z_{j,k}}$, pueden calcularse los campos totales $E_x(x, z)$ y $E_y(x, z)$ haciendo uso de las ecuaciones (2.54) y (2.55). La aproximación numérica de estas ecuaciones, detallando la forma de las distintas componentes del tensor dieléctrico, resulta

$$\begin{aligned}
E_{x_{j,k}} &= \frac{i \left((\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \cos^2 \theta_{j,k} \sin^2 \varphi_{j,k}) \frac{H_{z_{j,k+1}} - H_{z_{j,k-1}}}{2\Delta y} + \Delta\epsilon \cos \theta_{j,k} \sin \theta_{j,k} \sin \varphi_{j,k} \frac{H_{z_{j+1,k}} - H_{z_{j-1,k}}}{2\Delta x} \right)}{\omega \epsilon_0 [\Delta\epsilon^2 \cos^2 \theta_{j,k} \sin^2 \theta_{j,k} \sin^2 \varphi_{j,k} - (\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \sin^2 \theta_{j,k})(\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \cos^2 \theta_{j,k} \sin^2 \varphi_{j,k})]}, \\
E_{y_{j,k}} &= -\frac{i \left(\Delta\epsilon \cos \theta_{j,k} \sin \theta_{j,k} \sin \varphi_{j,k} \frac{H_{z_{j,k+1}} - H_{z_{j,k-1}}}{2\Delta y} + (\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \sin^2 \theta_{j,k}) \frac{H_{z_{j+1,k}} - H_{z_{j-1,k}}}{2\Delta x} \right)}{\omega \epsilon_0 [\Delta\epsilon^2 \cos^2 \theta_{j,k} \sin^2 \theta_{j,k} \sin^2 \varphi_{j,k} - (\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \sin^2 \theta_{j,k})(\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \cos^2 \theta_{j,k} \sin^2 \varphi_{j,k})]},
\end{aligned}$$

para $2 \leq j \leq N - 1$ y $2 \leq k \leq M - 1$.

3.3.3. Modelo 2+1D

La manera más natural de aproximar la ecuación (2.57) es aplicar la misma discretización que en la ecuación (2.46), con un esquema Crank-Nicolson que aproxima a segundo orden la ecuación diferencial en el nodo $j\Delta x, k\Delta y, (n+1/2)\Delta z$. Este esquema resulta

$$\begin{aligned}
2ik_0n_0 \frac{A_{j,k}^{n+1} - A_{j,k}^n}{\Delta z} &= \frac{1}{2} \left(\frac{A_{j+1,k}^{n+1} - 2A_{j,k}^{n+1} + A_{j-1,k}^{n+1}}{\Delta x^2} + \frac{A_{j+1,k}^n - 2A_{j,k}^n + A_{j-1,k}^n}{\Delta x^2} \right. \\
&\quad \left. + \frac{A_{j,k+1}^{n+1} - 2A_{j,k}^{n+1} + A_{j,k-1}^{n+1}}{\Delta y^2} + \frac{A_{j,k+1}^n - 2A_{j,k}^n + A_{j,k-1}^n}{\Delta y^2} \right) \\
&\quad + k_0^2 (\epsilon_{j,k} - n_0^2) \frac{1}{2} (A_{j,k}^{n+1} + A_{j,k}^n),
\end{aligned} \tag{3.11}$$

o, también,

$$\begin{aligned}
a_W A_{j-1,k}^{n+1} + a_N A_{j,k-1}^{n+1} + a_P A_{j,k}^{n+1} + a_E A_{j+1,k}^{n+1} + a_S A_{j,k+1}^{n+1} \\
= b_W A_{j-1,k}^n + b_N A_{j,k-1}^n + b_P A_{j,k}^n + b_E A_{j+1,k}^n + b_S A_{j,k+1}^n,
\end{aligned}$$

con los coeficientes

$$\begin{aligned}
a_W &= 1, & a_E &= 1, & b_W &= 1, & b_E &= 1, \\
a_N &= 1, & a_S &= 1, & b_N &= 1, & b_S &= 1, \\
a_P &= 4ik_0n_0 \frac{\Delta x^2 \Delta y^2}{\Delta z} + 4 - \Delta x^2 \Delta y^2 k_0^2 (\epsilon_{j,k} - n_0^2), \\
b_P &= 4ik_0n_0 \frac{\Delta x^2 \Delta y^2}{\Delta z} - 4 + \Delta x^2 \Delta y^2 k_0^2 (\epsilon_{j,k} - n_0^2).
\end{aligned}$$

La condición inicial vendrá dada por $A_{j,k}^1$, conocida, mientras que las condiciones de contorno serán de tipo Dirichlet, anulándose el valor de la envolvente en las fronteras, entendiéndose que el régimen paraxial impone una reflexión total interna en las fronteras, teniendo allí una interfase cualquiera, bien sea con el aire o con otro dieléctrico confinante del cristal líquido.

Sin embargo, este esquema es algo costoso computacionalmente, pues al tratarse de un problema bidimensional los tamaños de matriz que se manejan son del orden del cuadrado de las que se manejan en el caso unidimensional. Además las matrices de coeficientes que se forman tienen cinco diagonales no nulas, la discretización propia del operador laplaciano bidimensional. Esto hace que su inversión, de cara a la resolución del sistema de ecuaciones sea mucho más costosa que en el caso en el que fueran tridiagonales. Sería deseable conseguir un esquema bidimensional con estas propiedades de error y estabilidad que utilizara matrices tridiagonales. Esto puede conseguirse mediante una aproximación particular. Las diagonales que no deseamos provienen del operador en diferencias para la derivada segunda en una de las dos variables espaciales. Dependiendo del orden de las incógnitas se podrá situar δ_x^2 o δ_y^2 en la tridiagonal principal, pero siempre tendremos otras dos diagonales para la otra variable. Este problema se soluciona si aproximamos uno de esos dos operadores en diferencias para la derivada segunda en el instante $(n+1)\Delta t$, desconocido, y el otro en el instante $n\Delta t$, conocido. De esta manera hacemos aproximación implícita a una de las variables espaciales y explícita a la otra. Esta filosofía conduce a esquemas en diferencias finitas llamados semimplícitos o esquemas implícitos de dirección alternada (ADI).

El esquema en diferencias finitas de Peaceman-Rachford plantea un método de resolución en dos pasos, tal como se expone en [147]¹, por lo que en ocasiones se conocen estos, como esquemas de paso dividido. Primero plantea la ecuación en diferencias correspondiente a la aproximación de la ecuación diferencial alrededor del

¹Tomamos de esta referencia la notación para los operadores en diferencias que usamos a continuación:

- δ_p^2 representa el operador en diferencias centradas de segundo orden utilizado para discretizar la derivada segunda en la variable p , y aplicado en el nodo j viene dado por $A_{j-1} - 2A_j + A_{j+1}$.
- δ_p^+ representa el operador en diferencias lateral posterior de primer orden para discretizar la derivada primera en la variable p y aplicado en el nodo j se expresa como $A_{j+1} - A_j$.

punto $(j\Delta x, k\Delta y, n\Delta z)$ con pasos Δx , Δy y $\frac{\Delta z}{2}$. Utiliza aproximación lateral posterior para la derivada primera en z y aproximaciones centradas para las derivadas espaciales transversales, tomando δ_x^2 en el paso $n + 1/2$ (aproximación implícita) y δ_y^2 en el instante n . Partiendo de la ecuación (2.57), y realizando las aproximaciones mencionadas tenemos

$$\frac{2ik_0n_0}{\Delta z/2}\delta_z^+ A_{j,k}^n = \frac{\delta_x^2}{\Delta x^2} A_{j,k}^{n+1/2} + \frac{\delta_y^2}{\Delta y^2} A_{j,k}^n + \frac{k_0^2(\epsilon_{j,k} - n_0^2)}{2}(A_{j,k}^{n+1/2} + A_{j,k}^n),$$

o también

$$\left(1 - \alpha_x \delta_x^2 - \frac{\beta_{j,k}}{2}\right) A_{j,k}^{n+1/2} = \left(1 + \alpha_y \delta_y^2 + \frac{\beta_{j,k}}{2}\right) A_{j,k}^n, \quad (3.12)$$

con $\alpha_x = \frac{\Delta z}{4ik_0n_0\Delta x^2}$, $\alpha_y = \frac{\Delta z}{4ik_0n_0\Delta y^2}$ y $\beta_{j,k} = \frac{\Delta z k_0^2(\epsilon_{j,k} - n_0^2)}{4ik_0n_0}$. Ahora, empleando las mismas aproximaciones pero esta vez alrededor del punto $(j\Delta x, k\Delta y, (n + 1/2)\Delta z)$, tomando δ_x^2 en el paso $(n + 1/2)\Delta z$ (explícita) y δ_y^2 en $n\Delta z$ (implícita), se tiene

$$\left(1 - \alpha_y \delta_y^2 - \frac{\beta_{j,k}}{2}\right) A_{j,k}^{n+1} = \left(1 + \alpha_x \delta_x^2 + \frac{\beta_{j,k}}{2}\right) A_{j,k}^{n+1/2}. \quad (3.13)$$

Las ecuaciones (3.12) y (3.13) constituyen el esquema de Peaceman-Rachford bidimensional que, como puede verse, se resuelve en dos pasos, cada uno de los cuales implica la resolución de un sistema de $(N - 2)(M - 2)$ ecuaciones lineales tridiagonal. Cada uno de estos sistemas se puede subdividir en la resolución de $(M - 2)$ sistemas de $(N - 2)$ ecuaciones lineales con matrices tridiagonales. Esto supone la resolución de un sistema de ecuaciones para cada valor de k , con lo cual se mejora la velocidad de cálculo al reducir el tamaño de las matrices tridiagonales de nuestro sistema un orden de magnitud. A cambio deben resolverse muchos más sistemas de ecuaciones tridiagonales, pese a lo que sigue siendo rentable en términos computacionales. Desarrollando las ecuaciones en diferencias (3.12) y (3.13), se tiene

$$\begin{aligned} -\alpha_x A_{j-1,k}^{n+1/2} + (1 + 2\alpha_x - \beta_{j,k}/2) A_{j,k}^{n+1/2} - \alpha_x A_{j,k}^{n+1/2} \\ = \alpha_y A_{j-1,k}^n + (1 - 2\alpha_y + \beta_{j,k}/2) A_{j,k}^n + \alpha_y A_{j,k}^n, \end{aligned} \quad (3.14)$$

$$\begin{aligned} -\alpha_y A_{j-1,k}^{n+1} + (1 + 2\alpha_y - \beta_{j,k}/2) A_{j,k}^{n+1} - \alpha_y A_{j,k}^{n+1} \\ = \alpha_x A_{j-1,k}^{n+1/2} + (1 - 2\alpha_x + \beta_{j,k}/2) A_{j,k}^{n+1/2} + \alpha_x A_{j,k}^{n+1/2}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Esta última ecuación, aunque conduce a un sistema de ecuaciones tridiagonal, requiere de un reordenamiento de los valores del vector incógnita $A_{j,k}^{n+1}$, ya que, con el ordenamiento que se mantenía hasta el momento, se tenían los valores consecutivos en el índice j y no en el índice k , con lo que esta matriz tridiagonal tendría la supradiagonal y la subdiagonal distantes a $(N - 2)$ columnas a la izquierda y a la derecha. Para conseguir obtener la tridiagonal principal, se hace un reordenamiento en el que los valores consecutivos del vector de incógnitas se corresponden a subíndices k consecutivos.

3.4. Acoplamiento numérico iterativo de las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales no lineales

Como ya se ha presentado en el capítulo 2, la propagación del campo electromagnético en un cristal líquido es no lineal debido al acoplo efectivo de la dinámica orientacional de las moléculas de cristal líquido con la propagación del campo. Esto se debe a que los campos eléctricos, bien sean de origen externo (a través de electrodos) bien sean campos ópticos que se propagan por el medio, modifican la posición molecular del cristal líquido nemático, dado el carácter polar de sus moléculas. De esta manera se modifican las propiedades ópticas del medio de propagación, lo cual influye a su vez sobre el propio campo óptico propagante que, al mismo tiempo, afectará de nuevo a la posición molecular. Una tabla resumen de esta interacción de las soluciones puede apreciarse en la figura 3.1. Esta realimentación hace aparecer una no linealidad efectiva cuando se acoplan las ecuaciones de orientación y propagación. Nótese que, originalmente, la ecuación de propagación del campo electromagnético es lineal.

Ecuación	Entrada	Salida
Orientación Director	Es, Eo	θ
Campo Eléctrico	θ	Es
Campo Óptico	θ, Es	Eo

Figura 3.1: Realimentación de las soluciones de cada ecuación diferencial.

3.4.1. Bucles iterativos acoplados

Existen varias maneras de realizar este acoplo. La directa es solucionar el sistema de ecuaciones acoplado directamente, a través de un método iterativo que contemple todas las ecuaciones involucradas. La complejidad de este tipo de problemas en el que existen diferentes ecuaciones diferenciales acopladas tratando de converger a la vez es la elección correcta de la semilla, que determinará críticamente la convergencia del método iterativo. Además, para un tamaño de paso dado, el problema se hace computacionalmente más complejo al intentar resolverlo conjuntamente. Es por estos motivos por lo que se decide en esta tesis resolver cada una de las ecuaciones diferenciales por separado y realimentar las soluciones en un método iterativo hasta alcanzar convergencia de la solución. Este método ha sido empleado con éxito en otros trabajos [146], lo cual nos motiva a emplearlo en este contexto.

Esquema iterativo de acoplo

En la figura 3.2 puede apreciarse el esquema iterativo que conduce a la obtención de una solución autoconsistente para los campos eléctrico y óptico y las distribuciones angulares del cabeceo y la torsión. Se parte de una semilla para cada una de las funciones que se pretende obtener. Con la semilla del ángulo de cabeceo se resuelve de manera iterativa, por método tipo Newton-Raphson (NR) la ecuación correspondiente ((3.1) para el caso unidimensional o (3.3) para el caso bidimensional). Para transmitir una idea del coste computacional que tiene este método de acoplo iterativo, vamos a dar valores genéricos al número de iteraciones de cada código. Más tarde, en la subsección 3.4.2 matizaremos más datos del número de iteraciones y coste computacional exacto. Suponemos pues que el número de iteraciones del NR para el código del ángulo de cabeceo es N . Con la solución del ángulo de cabeceo que acaba de obtenerse y la semilla del ángulo de torsión que se había supuesto inicialmente, resolvemos iterativamente el NR del ángulo de torsión (ecuación (3.4)) iterando, pongamos, L veces. Una vez tenemos la solución para el ángulo de torsión debemos utilizarla para volver a calcular el ángulo de cabeceo, pues modifica aquella ecuación diferencial. Eso implica volver a calcular el NR del ángulo de cabeceo y el de torsión. Así se establece un bucle iterativo entre los ángulos de cabeceo y torsión que termina cuando tanto el uno como el otro apenas experimentan cambios tras ser realimentados de este modo.

Supongamos que hemos iterado el bucle completo K veces. Tenemos pues una solución autoconsistente del problema de orientación del director tras resolver $K \cdot L \cdot N$ problemas. Por supuesto éste es un valor de la cota superior sobre los problemas resueltos, ya que es de esperar que conforme el bucle iterativo converja tanto el número de iteraciones del ángulo de cabeceo N como las del ángulo de torsión L vayan disminuyendo. Con la solución para $\theta(x, y)$ y $\varphi(x, y)$ nos calculamos la distribución del campo eléctrico bidimensional (con la ecuación (3.10) en el caso bidimensional o (3.5)² en el caso unidimensional). Como este campo eléctrico afecta a las ecuaciones diferenciales del problema orientacional, se hace necesario volver a calcular todo el bucle otra vez, esto es, resolver otros $K \cdot L \cdot N$ problemas (como máximo). Así se forma un segundo bucle que contiene al primero y que tiene por objeto alcanzar la solución autoconsistente del campo eléctrico con el problema de orientación molecular. Suponiendo que este bucle itere M veces, habremos resuelto $M \cdot K \cdot L \cdot N$ problemas. Hasta aquí se ha resuelto el problema estático de obtención de la solución autoconsistente del campo eléctrico y el problema orientacional; ahora debemos utilizar esa información sobre las propiedades ópticas del medio para propagar el campo óptico. Para esto utilizamos toda esta información para resolver un paso de la ecuación de propagación del campo óptico (ecuación (3.9) para el caso unidimensional y ecuación (3.11) para el caso bidimensional, siempre en condiciones de paraxialidad y escalaridad).

²Nótese que en el caso unidimensional la obtención del campo eléctrico externo no se realiza mediante un método iterativo sino mediante una integral numérica con mucho menor coste computacional.

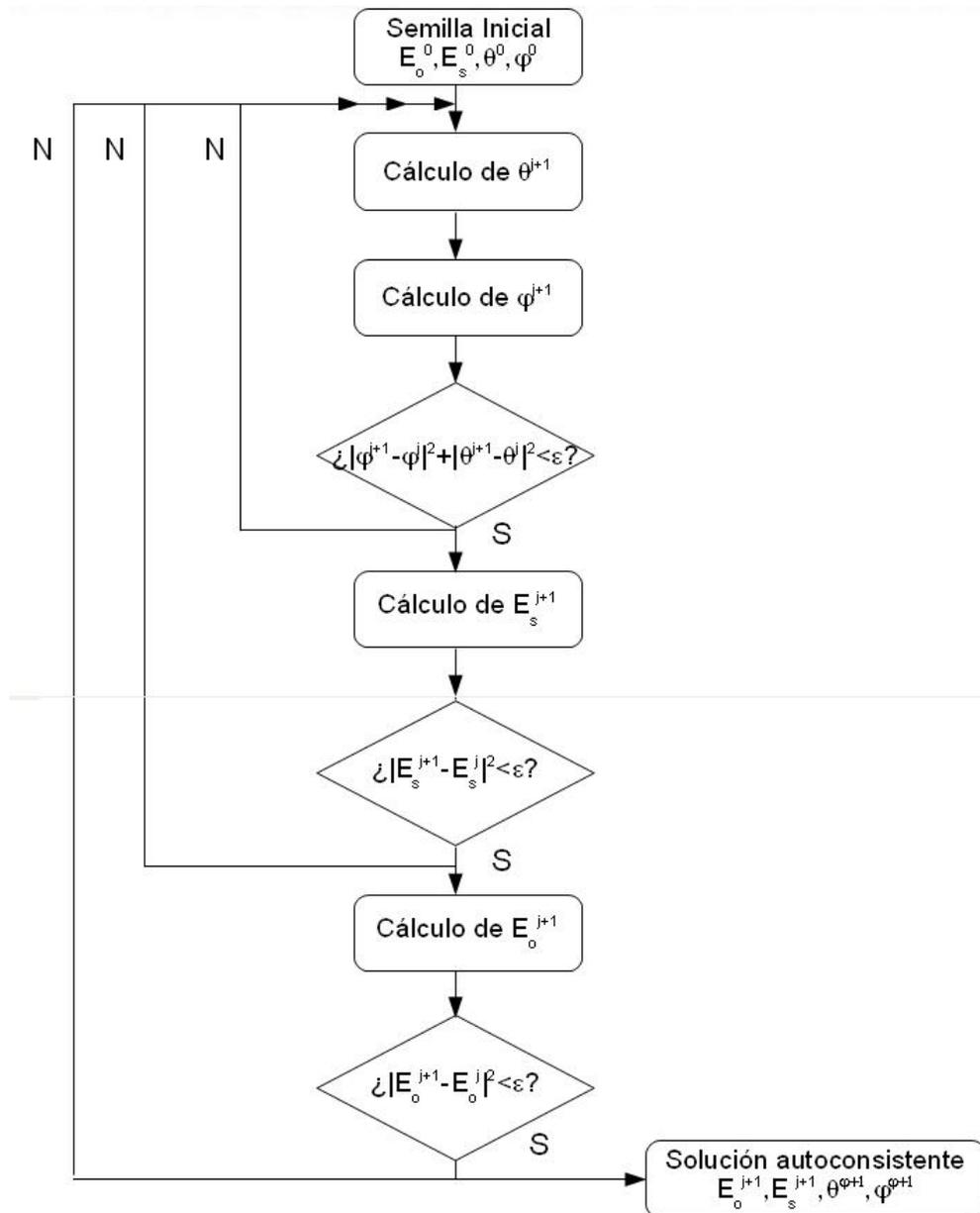


Figura 3.2: Diagrama de bloques del algoritmo de acoplo iteratio de la solución.

Llegados a este punto ocurre que el campo óptico vuelve a modificar todo lo calculado anteriormente. Con lo que es necesario recalcularlo todo de nuevo. Así se forma un tercer bucle que contiene a su vez los otros dos y que nos permite obtener la solución autoconsistente de todos los campos y todos los ángulos para un paso de propagación. Es decir, que suponiendo que este tercer bucle se realice P veces, el número de problemas resueltos será $P \cdot M \cdot K \cdot L \cdot N$ por cada paso de propagación. Si, además, estamos interesados en resolver unos 10^5 pasos de propagación, que es una cantidad usual en problemas de propagación, el número total de problemas bidimensionales a resolver numéricamente serían aproximadamente $10^5 P \cdot M \cdot K \cdot L \cdot N$, como mucho. Es necesario hacer notar que, montado de esta manera el bucle iterativo conjunto, se está utilizando la información de propiedades del medio en el paso $n\Delta z$ para obtener el campo en el paso siguiente $(n+1)\Delta z$, no teniendo en cuenta entonces el valor real de las propiedades del medio en ese paso. Lo que se hace para resolver este problema es realimentar todo el problema estático de cálculo autoconsistente del campo eléctrico y problema orientacional con el campo óptico en el nodo $(n+1/2)\Delta z$, obtenido como promedio de los campos ópticos en los nodos $n\Delta z$ y $(n+1)\Delta z$, tal y como se hace en [148].

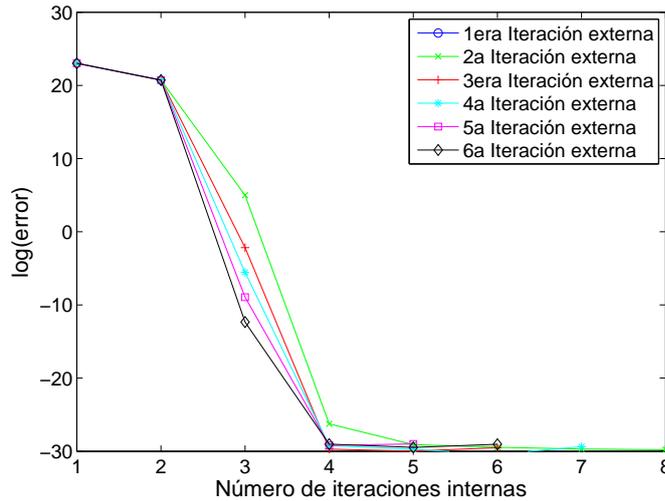


Figura 3.3: Familia de curvas del logaritmo del error para las iteraciones internas del Newton Raphson para el problema de distribución de campo eléctrico bidimensional. Cada curva se corresponde con una iteración externa con el problema de orientación molecular.

3.4.2. Número de problemas del acoplamiento completo

Los cálculos realizados en esta subsección se han llevado a cabo con un Pentium Corei7 965, con 8 núcleos, a 3.06 GHz cada uno y 12 GB de memoria RAM, bajo sistema operativo Windows 7 y versión de Matlab 2009b, sin compilar.

En esta subsección queremos presentar una idea cuantitativa de la cantidad de problemas que es necesario resolver para alcanzar una solución autoconsistente de la propagación de campo óptico en el caso más general de los que planteamos y cuya solución iterativa se alcanza tal y como se ha explicado en la subsección 3.4.1. En primer lugar estudiamos cómo converge a la solución cada uno de los problemas y qué criterios de parada consideramos oportunos en cada caso. Después presentamos la convergencia de los acoplos físicos, esto es, los bucles iterativos que buscan autoconsistencia de dos o más soluciones. Finalmente se proporciona un estudio cuantitativo del coste computacional necesario para resolver el problema no lineal totalmente acoplado.

Modelo 2+1D. Cabeceo y torsión

Para hacer este estudio numérico elegimos un problema suficientemente complejo como para ser representativo del funcionamiento completo de los esquemas iterativos acoplados necesarios para alcanzar la solución autoconsistente que buscamos. Resolvemos pues la propagación no lineal de un campo óptico en propagación lateral sobre un dispositivo como el de la figura 2.3(b) considerando la afectación de los ángulos de cabeceo y torsión que, juntos, definen la posición del director. Para ello utilizaremos los siguientes parámetros definitorios de las fronteras correspondientes: $V_0 = 1$ V, $\theta_0 = 2^\circ$. En las fronteras de los tres problemas en la dirección y se implementan condiciones periódicas. En cuanto a la frontera en la dirección x , los dos problemas angulares utilizan condiciones tipo Dirichlet. Se utiliza la norma de frobenius para evaluar la magnitud de los errores de convergencia de los métodos iterativos, estableciendo en todos los casos una tolerancia de la precisión de máquina (2.22×10^{-16}). El uso de la frontera transparente en los códigos para resolver el ángulo de torsión tiene una fuerte implicación sobre el error final alcanzado por el método, que se sitúa en el entorno de 10^{-5} , dado que se heredan los errores de la interpolación empleada para el cálculo de la frontera.

La ecuación (2.27) se resuelve mediante un método Newton-Raphson (NR) que, en el caso de conocer el jacobiano del funcional definitorio del problema de manera analítica, tiene convergencia cuadrática asegurada [196]. Nosotros no conocemos la expresión analítica del jacobiano, por lo que éste está aproximado por diferencias finitas como se explica en la sección 3.2. Este problema resulta converger muy rápidamente a la solución a precisión de máquina. De hecho bastan unas pocas iteraciones para alcanzar la solución a precisión de máquina ($\epsilon = 2.2204 \times 10^{-16}$) como puede verse en la figura 3.3. En la misma gráfica se muestran una

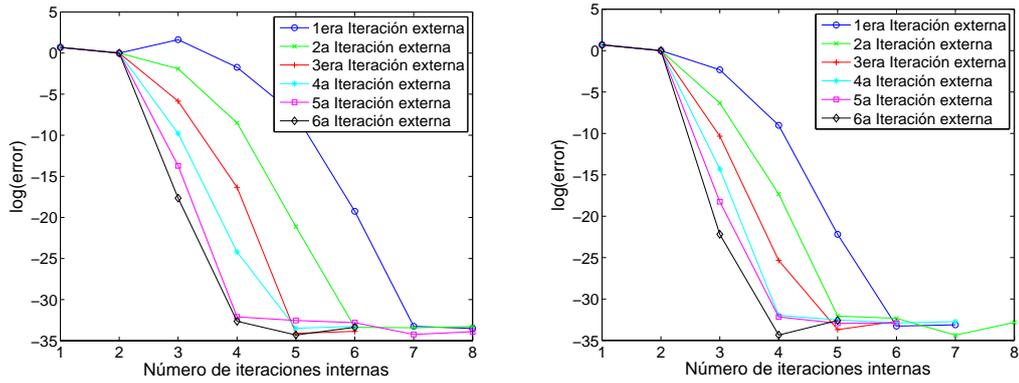


Figura 3.4: Familia de curvas del logaritmo del error para las iteraciones internas del Newton Raphson para el ángulo de cabeceo. Cada curva se corresponde con una iteración externa con el problema de orientación molecular. A la izquierda se muestra el caso para la primera iteración autoconsistente entre las funciones angulares y el campo eléctrico y a la derecha se muestra la iteración segunda.

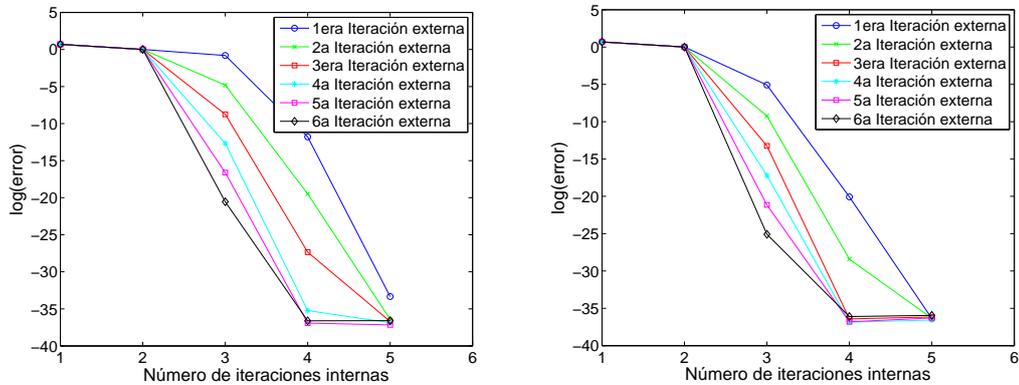


Figura 3.5: Familia de curvas del logaritmo del error para las iteraciones internas del Newton Raphson para el ángulo de torsión. Cada curva se corresponde con una iteración externa con el problema de orientación molecular. A la izquierda se muestra el caso para la primera iteración autoconsistente entre las funciones angulares y el campo eléctrico y a la derecha se muestra la iteración segunda.

familia de curvas, donde cada curva se corresponde con las iteraciones del NR para sucesivas iteraciones del bucle autoconsistente con el problema angular. Se ha utilizado como semilla una distribución constante de valor V_0 para la primera iteración del bucle de autoconsistencia. Para el resto de iteraciones del bucle de autoconsistencia se utiliza el valor de la solución en la iteración anterior. La convergencia, que en este caso es muy rápida, no muestra mejoría significativa por cambios de la semilla inicial, pese a haber probado con superficies lineales desde $V = 0$ V en $x = 0$ hasta $V_0 = 1$ V en $x = d$, entre otras posibles semillas.

El bucle iterativo del NR de la ecuación (2.22) converge a precisión de máquina rápidamente, como puede verse en la figura 3.4 donde se muestra el logaritmo del error donde es más fácil apreciar la velocidad de convergencia. El error final alcanzado es de 5.76×10^{-15} . Se muestran las dos únicas iteraciones del bucle autoconsistente $E - \theta - \varphi$.

La ecuación (2.23) se resuelve también con un NR que se comporta de una manera muy similar al problema del ángulo de cabeceo. Se pone un límite mínimo de iteraciones para no parar los bucles si el error sube en las primeras iteraciones, cosa que es normal. De la misma manera que para el ángulo de cabeceo, mostramos en la figura 3.5 una familia de curvas que representa la evolución del logaritmo del error en cada una de las iteraciones autoconsistentes de las dos ecuaciones diferenciales. El error final promedio es de 1.45×10^{-16} .

Hasta aquí hemos mostrado en todo momento como se comportan las iteraciones de los métodos NR para cada una de las ecuaciones en distintos bucles de acoplo autoconsistente con otras funciones. En general, se aprecia una convergencia muy rápida. Nótese que sólo se han mostrado dos iteraciones autoconsistentes del problema de orientación con el problema eléctrico, pues este problema converge así de rápido. También

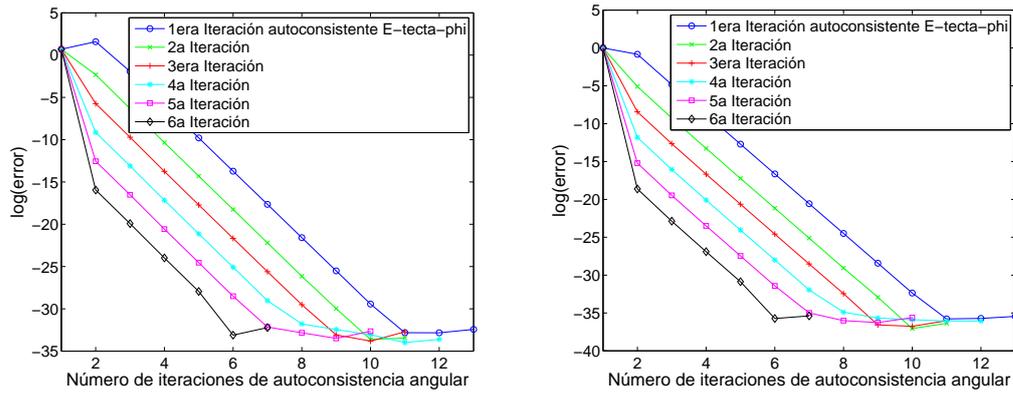


Figura 3.6: Familia de curvas del logaritmo del error para las iteraciones de la autoconsistencia entre las funciones angulares. Cada curva se corresponde con una iteración de la autoconsistencia del campo eléctrico externo E con la solución autoconsistente encontrada para las funciones angulares. A la izquierda se muestra el caso del ángulo de cabeceo y a la derecha el ángulo de torsión.

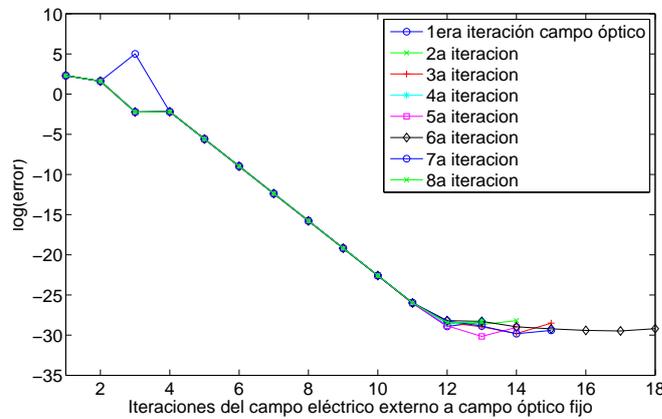


Figura 3.7: Convergencia del campo eléctrico externo para sucesivos valores de las funciones angulares.

se han mostrado seis iteraciones para las iteraciones autoconsistentes de cada problema. Hay más de seis, pero no se muestran todas para facilitar la lectura de las curvas, dado que no añaden información adicional, pues prácticamente solapan sobre las curvas anteriores. Más adelante daremos una tabla con la cantidad de iteraciones exacta de cada problema.

Ahora vamos a mostrar como se comportan los errores de los acoplamientos de autoconsistencia. Es decir, como se comporta la convergencia del ángulo de cabeceo, por ejemplo, cuando se va actualizando su ecuación diferencial con los nuevos valores del ángulo de torsión (que le afectan directamente). Y viceversa con el ángulo de torsión.

La figura 3.6 muestra como evoluciona el error de cada uno de los ángulos a través de las iteraciones autoconsistentes del problema de orientación. Otra vez se muestran sólo seis iteraciones para facilitar la lectura de las gráficas. Puede verse como en ambos casos las soluciones convergen muy rápidamente y de manera muy similar. El criterio de parada para el bucle de autoconsistencia de las dos funciones angulares es que la suma de las normas frobenius de los dos errores (de cada una de las funciones angulares) sea menor que la precisión de máquina. Del mismo modo que alcanzamos una solución autoconsistente de las funciones angulares, alcanzamos también una solución autoconsistente para los problemas *campo eléctrico/funciones angulares*. La convergencia de esta iteración autoconsistente se muestra en la figura 3.7 para la primera iteración de campo óptico. Tenemos una familia de curvas que representan las sucesivas iteraciones del campo eléctrico con las funciones angulares. Sin embargo puede apreciarse que prácticamente la totalidad de las curvas solapan entre sí, salvo las últimas iteraciones en las que el error se encuentra ya tan próximo de la precisión de máquina que ocurren pequeñas desviaciones del error no significativas.

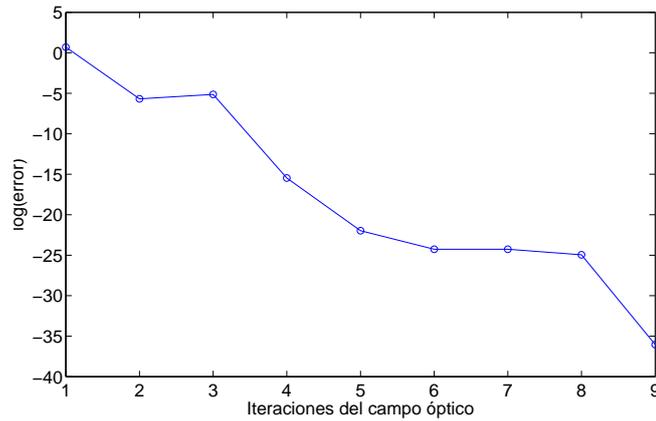


Figura 3.8: Convergencia del campo óptico para sucesivos valores de las funciones angulares.

Por último, existe también un acoplo autoconsistente entre el campo óptico y el resto de funciones que ya han convergido a una solución auto consistente entre ellas. En este caso mostramos en la figura 3.8 una sola curva que se corresponde al error del campo óptico en las sucesivas iteraciones con el problema estático que ya hemos descrito.

Hasta aquí hemos visto en qué manera converge cada uno de los problemas y a qué precisión. Llegados a este punto se hace obvia la validez del acoplamiento en cuanto a la obtención de una solución autoconsistente del problema. Investigado ya cualitativamente queremos ofrecer los datos sobre cantidad de problemas a resolver en este acoplamiento. Para ello mostramos en varias tablas la cantidad de problemas que se están resolviendo para ofrecer una visión cuantitativa del coste computacional del problema completo.

Iter.	1 ^a	2 ^a	3 ^a	4 ^a	5 ^a	6 ^a	7 ^a	8 ^a	9 ^a	10 ^a	11 ^a
1 ^a	9	9	7	6	6	5	6	8	5	5	5
2 ^a	7	6	6	7	5	5	5	5	6	5	5
3 ^a	6	6	10	5	7	5	5	7	5	6	6
4 ^a	8	5	8	6	5	6	6	8	7	5	7
5 ^a	8	7	5	5	9	5	5	5	6	6	5
6 ^a	6	5	5	5	6	5	6	7		5	
7 ^a	6	5	8	5	5	6	6			5	
8 ^a	5	5	6	5		5	5			5	
9 ^a	6	7	5			5				6	
10 ^a	5	6	6			5					
11 ^a	5	5									
12 ^a	5										

Número de iteraciones del NR para el ángulo de cabeceo en cada una de las iteraciones del bucle angular ($\theta - \varphi$), en las filas, y del bucle de autoconsistencia del problema angular con el campo eléctrico, en columnas.

Iter.	1 ^a	2 ^a	3 ^a	4 ^a	5 ^a	6 ^a	7 ^a	8 ^a	9 ^a	10 ^a	11 ^a
1 ^a	6	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
2 ^a	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
3 ^a	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
4 ^a	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	6
5 ^a	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
6 ^a	5	5	5	5	5	5	5	5	5		
7 ^a	5	5	5	5	5	5	5	5			
8 ^a	5	5	5	5		5	5	5			
9 ^a	5	5	5			5	5				
10 ^a	5	5	5			5					
11 ^a	5	5									
12 ^a	5										

3.5. Frontera transparente

La resolución numérica de una ecuación diferencial en derivadas parciales por diferencias finitas implica necesariamente la definición de un dominio discreto sobre el que se define la función solución y la ecuación en cuestión. Este dominio discreto es, naturalmente, finito, ya que nuestra pretensión es resolver el valor de la función en todos y cada uno de los puntos del dominio. Esta finitud del dominio nos obliga a definir el comportamiento de la solución en la frontera. Ocurre que la frontera finita es un lastre derivado del uso de la herramienta numérica, ya que en el problema original (la ecuación diferencial) no existía tal frontera al estar definido sobre un dominio infinito (todo \mathfrak{R} , por ejemplo). Por tanto el comportamiento en la frontera de la solución debe adecuarse a la realidad física, y ésta, en muchos casos, no consiste más que en continuar la propia dinámica de la solución más allá de este dominio finito, sin ningún tipo de interacción de la solución con la frontera. Por tanto, sería deseable poder simular una frontera que no afectara a la dinámica de la solución en absoluto, una frontera transparente, que permitiera que la solución la atravesara sin ninguna otra consecuencia. Éste es el objetivo de las llamadas genéricamente, condiciones de contorno absorbentes o, en ocasiones, condiciones de contorno transparentes, cuando la aproximación a la solución en el dominio finito es exacta. Por ejemplo, pueden encontrarse algunas condiciones de contorno transparentes para la ecuación de ondas en [166, 167, 168, 169]. Ejemplos para otros problemas de evolución están expuestos en [170]. En esta sección exponemos la derivación de la condición de Hadley en la que nos basamos, tal y como el autor la presenta en sus artículos.

Se ha realizado una gran cantidad de esfuerzo a resolver este problema bajo diferentes puntos de vista y en diferentes campos. Cuando una onda llega a la frontera numérica, en la que nosotros hemos impuesto el valor de la función (condiciones de Dirichlet), la onda interacciona con ella generando una onda reflejada que regresa al interior del dominio numérico, lo cual es un efecto indeseado.

Puede emplearse un dominio computacional extendido artificialmente y aplicar una función de penalización en la parte artificial del dominio para hacer decrecer la amplitud de la función en esa zona [171]. Aunque este planteamiento puede dar buenos resultados, tiene un elevado coste computacional debido a la extensión artificial del dominio, sobre todo para dimensiones superiores (2 y 3). Una aproximación similar fue desarrollada por Neuhauser y Baer [172] empleando una pequeña zona de potencial imaginaria en la zona fronteriza del dominio. Otra manera de eliminar este rebote es situar una pared *absorbente* consistente (para la ecuación que tratamos) en una zona del espacio en la que se define un potencial $V(x)$ imaginario, actuando éste como un sumidero de materia, haciendo desaparecer así la función antes de que llegue a interactuar con la frontera numérica (ver [173]) aunque también genera reflexiones. Existen numerosos estudios sobre cuáles deben ser los parámetros óptimos de esta pared absorbente para conseguir factores de reflexión y transmisión adecuados.

3.5.1. Condición transparente de Hadley

En este subapartado se explica la idea que subyace bajo la definición de las condiciones absorbentes que Ronald Hadley presenta en [187, 188]. Se va a presentar tal y como se presenta en [187] describiendo primero

la expresión del flujo a través del contorno tanto en el problema continuo como en el discreto para justificar la relevancia del parámetro que se emplea en la condición de contorno transparente.

Planteamiento físico

Partimos aquí del principio de continuidad que describe cuál es el flujo de materia a través de la frontera. En física cuántica, el módulo cuadrado de la función de onda representa la probabilidad de encontrar la partícula en un punto del espacio en un instante de tiempo. Si calculamos la función ρ como

$$\rho = \int_a^b |\Psi(x, t)|^2 dx = \int_a^b \Psi^*(x, t) \cdot \Psi(x, t) dx, \quad (3.16)$$

tenemos la probabilidad de tener materia a lo largo de nuestro dominio espacial. En un pozo infinito en el que la materia queda confinada en su interior, esta cantidad debe ser constante. Sin embargo, si nuestro objetivo es implementar una frontera transparente la función no estará confinada y existirá un flujo saliente de materia desde el interior al exterior. Para ver como queda definido este flujo de materia a través de la frontera, calculemos la derivada temporal de 3.16,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \int_a^b \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \cdot \Psi + \Psi^* \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) dx. \quad (3.17)$$

Para calcular esta expresión utilicemos las dos variantes de la ecuación de Schrödinger (aplicando la ecuación diferencial a la función incógnita y a su conjugada, como se hace en [197]) para sustituirlo y obtener

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \int_a^b \left(\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + V(x) \Psi^* \right] \cdot \Psi - \Psi^* \cdot \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x) \Psi \right] \right) dx.$$

Los términos del potencial se anulan y tenemos

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \int_a^b \left(\Psi^* \cdot \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \Psi \cdot \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \right) dx.$$

Pero el integrando del segundo miembro se puede convertir en una diferencial exacta

$$\left(\Psi^* \cdot \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \Psi \cdot \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \cdot \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right),$$

de forma que la integral se puede calcular inmediatamente

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \cdot \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) \Big|_a^b = F_b - F_a,$$

donde F_b representa el flujo de energía saliente por la frontera derecha y F_a el flujo entrante a través de la frontera izquierda. Como el tratamiento de cada una de las fronteras es idéntico, centrémosnos en la frontera derecha, por ejemplo.

La idea principal de las condiciones absorbentes de Hadley radica en la siguiente asunción: la solución en las cercanías de la frontera obedece la relación $\Psi = \Psi_0 \exp(ik_x x)$ donde Ψ_0 y k_x son constantes complejas siendo k_x desconocida. Bajo esta hipótesis, el flujo de energía saliente se convierte en

$$\begin{aligned} F_b &= \frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* ik_x \Psi - \Psi(-ik_x) \Psi^*) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} (ik_x (|\Psi(b)|^2 + |\Psi(b)|^2)), \\ F_b &= \frac{\hbar}{m} \text{Real}(k_x) |\Psi(b)|^2. \end{aligned}$$

De este modo, en tanto que la parte real de k_x sea positiva, la contribución al cambio global de energía a través de esta frontera será siempre negativo, esto es, energía que sale de nuestro dominio numérico. Esta propiedad de la ecuación diferencial de propagación se debe incorporar al modelo numérico. Puede verse que la cantidad de energía saliente depende claramente de la cantidad k_x . Si esta cantidad se elige adecuadamente se puede conseguir minimizar el coeficiente de reflexión. Según Hadley [187] la parte real de k_x describe variaciones en la fase cerca de la frontera, mientras que la parte imaginaria describe derivadas de la amplitud del campo. A lo largo de la evolución ambas cantidades cambiarán, por lo que la elección del k_x óptimo pasará necesariamente por irlo adaptando a los nuevos valores de la función en cada paso.

Ecuación de conservación en diferencias

Para chequear que podemos imponer en la frontera la anterior condición debemos comprobar que también se cumple para el planteamiento discreto. Para ello, derivamos la ecuación de conservación en diferencias. Partiendo del esquema Crank-Nicolson para la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para una partícula libre, agrupamos los coeficientes de manera que tengamos la unidad para los términos a la izquierda del igual y tenemos

$$\Psi_j^{n+1} - \Psi_j^{n+1} = \frac{i\hbar\Delta t}{4\Delta x^2} \left(\Psi_{j-1}^{n+1} - 2\Psi_j^{n+1} + \Psi_{j+1}^{n+1} + \Psi_{j-1}^n - 2\Psi_j^n + \Psi_{j+1}^n \right). \quad (3.18)$$

Multiplicando 3.18 por $\frac{1}{2}(\Psi_j^{n+1*} + \Psi_j^{n*})$, su compleja conjugada por $\frac{1}{2}(\Psi_j^{n+1} + \Psi_j^n)$ y sumando los resultados se obtiene la ecuación de conservación en diferencias

$$\begin{aligned} |\Psi_j^{n+1}|^2 - |\Psi_j^n|^2 = & \frac{\alpha\Delta t}{1+4\alpha\Delta t} \left[(\Psi_j^{n*} + \Psi_j^{n+1*}) \cdot (\Psi_{j-1}^{n+1} + \Psi_{j+1}^{n+1}) + \right. \\ & \left. + (\Psi_j^{n*} + \Psi_j^{n+1*}) \cdot (\Psi_{j-1}^n + \Psi_{j+1}^n) + \text{complejo conjugado} \right], \end{aligned} \quad (3.19)$$

donde se ha empleado el coeficiente $\alpha = \frac{i\hbar}{8\Delta x^2}$. Identificando el flujo de energía como se hace en [189],

$$F_{j+1} \equiv -\frac{\alpha}{1+4\alpha} \left[(\Psi_j^{n*} + \Psi_j^{n+1*}) \cdot (\Psi_{j-1}^{n+1} + \Psi_{j+1}^{n+1}) + (\Psi_j^{n*} + \Psi_j^{n+1*}) \cdot (\Psi_{j-1}^n + \Psi_{j+1}^n) \right]. \quad (3.20)$$

Podemos escribir 3.19 de forma más concisa como

$$|\Psi_j^{n+1}|^2 - |\Psi_j^n|^2 = \Delta t(F_j - F_{j+1}). \quad (3.21)$$

Las ecuaciones 3.20 y 3.21 demuestran que el flujo energético que sale de un nodo entra en el adyacente. Sumando 3.21 para todos los nodos interiores, obtenemos (debido a las múltiples cancelaciones) la ecuación del cambio neto en la energía a lo largo de la propagación

$$\sum_{j=1}^{j=nx-1} \left(|\Psi_j^{n+1}|^2 - |\Psi_j^n|^2 \right) = \Delta t(F_1 - F_{nx}). \quad (3.22)$$

Podemos ver que 3.22 es la versión discreta de 3.17 donde la energía total sólo cambia si alguno de los flujos energéticos a través de las fronteras es distinto de cero.

Cálculo adaptativo de k_x . Implementación en el esquema en diferencias

Ya hemos visto pues que en la versión discreta sigue siendo cierto que el flujo F_b también depende de k_x , en la forma comentada anteriormente. De manera que asumiendo la dependencia funcional de la solución en forma exponencial en las cercanías de la frontera de nuestro dominio numérico,

$$\frac{\Psi_{nx+1}^n}{\Psi_{nx}^n} = \frac{\Psi_{nx}^n}{\Psi_{nx-1}^n} = \exp(ik_x\Delta x),$$

donde hemos calculado la k_x del cociente entre los nodos nx y $nx-1$,

$$k_x = \frac{1}{i\Delta x} \ln \left(\frac{\Psi_{nx}}{\Psi_{nx-1}} \right),$$

y la hemos impuesto para conocer el valor de la solución en el nodo de la frontera $nx+1$ (teniendo nx intervalos). Una vez asegurados de que la parte real de k_x es positiva para asegurar flujo energético saliente de la frontera derecha, utilizamos ese valor para calcular el valor en el instante que estamos resolviendo

$$\Psi_{nx+1}^{n+1} = \Psi_{nx}^{n+1} \exp(ik_x\Delta x).$$

De una manera más sencilla aunque algo menos física, podríamos plantear el mismo algoritmo pero esta vez con un parámetro c más general que incluyera dentro el valor de k , de manera que,

$$\frac{\Psi_3^n}{\Psi_2^n} = \frac{\Psi_2^n}{\Psi_1^n} = c_{izq}, \quad \frac{\Psi_{nx+1}^n}{\Psi_{nx}^n} = \frac{\Psi_{nx}^n}{\Psi_{nx-1}^n} = c_{der},$$

suponiendo este parámetro el cociente de dos valores consecutivos de la función. Así, el método consiste en imponer esta condición en la ecuación en diferencias. Esto supone un cambio para las ecuaciones de la frontera. Retomemos ahora la forma del esquema Crank-Nicolson, tras una reagrupación de términos conveniente

$$\begin{aligned} & \Psi_{j-1}^{n+1} + \left(\frac{2i\Delta x^2}{\Delta t} - 2 - \Delta x^2 V_j \right) \Psi_j^{n+1} + \Psi_{j+1}^{n+1} \\ &= -\Psi_{j-1}^n + \left(\frac{2i\Delta x^2}{\Delta t} + 2 + \Delta x^2 V_j \right) \Psi_j^n + \Psi_{j+1}^n. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Hagamos la agrupación $\alpha_j = \frac{2i\Delta x^2}{\Delta t} - 2 - \Delta x^2 V_j$ y $\beta = \frac{2i\Delta x^2}{\Delta t} + 2 + \Delta x^2 V_j$. Considerando las equivalencias $\Psi_0 = c_{izq}\Psi_1$ y $\Psi_{nx+1} = \frac{\Psi_{nx}}{c_{der}}$, se tiene

$$(\alpha + c_{izq})\Psi_1^{n+1} + \Psi_2^{n+1} = (\beta - c_{izq})\Psi_1^n + \Psi_2^n, \quad (3.24)$$

$$\left(\alpha + \frac{1}{c_{der}} \right) \Psi_{nx-1}^{n+1} + \Psi_{nx-2}^{n+1} = \left(\beta - \frac{1}{c_{der}} \right) \Psi_{nx-1}^n - \Psi_{nx-2}^n, \quad (3.25)$$

para las fronteras izquierda y derecha respectivamente. De este modo, el cálculo de la solución en cada instante de tiempo pasa por la resolución de un sistema de $nx - 1$ ecuaciones lineal, donde la primera y la última vienen dadas por 3.24 y 3.25, y las $nx - 1$ ecuaciones correspondientes a los nodos interiores son de la forma 3.23.

Propuesta de mejora

En nuestras simulaciones, el paquete inicial es una campana gaussiana de la forma:

$$\Psi(j\Delta x, 0) = \frac{1}{\sqrt{\sigma\sqrt{2\pi}}} \exp(ikx_j) \exp\left(-\frac{(x_j - x_0)^2}{4\sigma^2}\right) \quad (3.26)$$

Calculando para todo valor del subíndice espacial j los cocientes $c_j = \frac{\Psi_j}{\Psi_{j+1}}$, tenemos una evolución espacial que se muestra en la figura 3.9. De todos estos valores, nosotros empleamos los dos valores extremos, permitiéndonos predecir el valor en la frontera. Ahora bien, viendo la gráfica de la izquierda de la misma figura, vemos que los valores extremos para los cocientes, según Hadley, son del mismo valor que los cocientes adyacentes. De esta manera se ha roto la dependencia espacial de los cocientes (que, en definitiva, es una dependencia espacial de la propia función) en la frontera. Lo normal es que se permita la continuidad de esta dependencia espacial, por lo que nosotros empleamos una extrapolación de los valores de los cocientes para predecir un valor más acertado para el valor del cociente en las fronteras, c_0 y c_{nx} . Esta extrapolación puede apreciarse en la gráfica de la derecha en la figura 3.9.

Procediendo de este modo se consigue un menor valor del coeficiente de reflexión, tal y como han demostrado nuestros experimentos numéricos.

3.5.2. Condición de contorno transparente para el modelo de Oseen-Frank. Aplicación a propagación de luz lateral en celdas de cristal líquido nemático planares

Las celdas de cristal líquido nemático (CLN) para propagación lateral de luz están atrayendo gran atención en los últimos años debido, entre otras razones, a su capacidad para formar guías de onda inducidas reconfigurables. Pueden formarse haciendo uso de un campo eléctrico externo aplicado a unos electrodos pegados a las superficies confinantes del cristal líquido [24] o a través del propio campo óptico propagante, en cuyo caso suele referirse como guías autoinducidas por el haz [190]. Estas guías inducidas por solitones

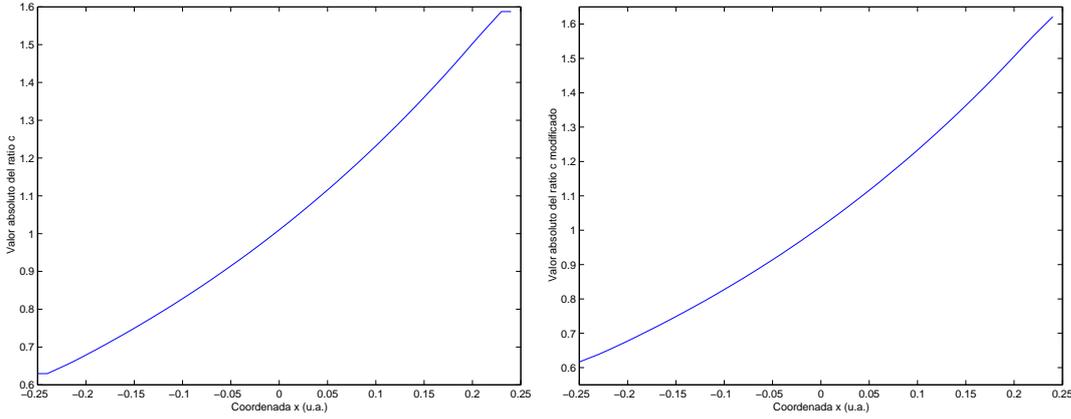


Figura 3.9: Evolución del valor absoluto del ratio c_j .

pueden usarse para implementar dispositivos todo ópticos que se comporten como interruptores o como puertas lógicas [191]. En las celdas planares pueden obtenerse conjuntos de guías de ondas por inducción eléctrica externa, reconfigurables, en los que también pueden aparecer comportamientos de conmutación (*switching*) óptica [108] así como breathers vectoriales [192]. Los dispositivos con electrodos discontinuos permiten inducir guías de perfil gradual de índice de refracción externamente [193]. Al emplearse electrodos con distintos voltajes, pueden afectarse las trayectorias de los solitones en el CLN y conseguir así direccionado de solitones [194, 195].

La simulación sin aproximaciones de la propagación de un haz de luz en una celda de cristal líquido nemático es un problema muy complejo e implica necesariamente un código de evolución óptico anisótropo $2D + 1$ que tenga en cuenta la anisotropía transversal de las propiedades ópticas del cristal líquido al verse afectado por los campos eléctricos. Además, en el caso en que existan varias componentes transversales del campo eléctrico en el seno del cristal líquido (como ocurre con dispositivos de electrodos discontinuos bajo tensión eléctrica), aparecen efectos vectoriales que no son despreciables, ya que el cristal líquido se deforma de tal manera que afecta a la polarización de la luz, haciendo aparecer otras componentes transversales del haz. Además, esto provoca una transferencia de energía óptica a otras componentes que no son guiadas, perdiéndose energía en la componente solitónica, que es la interesante para manipular luz en estos dispositivos. Para evitar estos problemas suelen hacerse ciertas aproximaciones y moverse en determinado régimen de parámetros del dispositivo para conseguir buenas aproximaciones a los datos experimentales. Una de estas aproximaciones es considerar únicamente movimiento de cabeceo de las moléculas de cristal líquido, obviando la posible torsión que puedan inducir otras componentes del campo eléctrico. En dispositivos de electrodo discontinuo como el de la figura 2.3(b), esto no es cierto, si bien, en un régimen de voltajes pequeños en el que la luz se mueva lejos de la frontera del electrodo, esta aproximación ofrece resultados satisfactorios.

Con respecto a las condiciones de contorno para el problema orientacional, suelen usarse condiciones tipo Dirichlet que fijan el valor de las funciones angulares en la frontera confinante (dirección x de la figura 2.3(b)). Este tratamiento es exacto en todos aquellos casos en los que el tratamiento experimental de las superficies confinantes es tal que fijan la posición molecular del cristal líquido a través de diversas técnicas de tratamiento superficial. Sin embargo, también es posible experimentalmente dejar cierta libertad de movimiento a las moléculas de cristal líquido, principalmente al movimiento paralelo al plano de la superficie que es el ángulo de torsión (permitir el ángulo de cabeceo en la superficie confinante no es posible, salvo para valores muy pequeños). Es en este régimen en el que queremos mostrar, en esta misma subsección, el comportamiento de la frontera transparente presentada en este capítulo, aplicada en esta ocasión a un código no óptico. Esta situación nos permitirá reducir el tiempo de computación en códigos que simulan celdas planares con electrodos discontinuos dado que deja de ser necesario la ampliación artificial del dominio numérico para permitir este movimiento lejos de la frontera [148].

Dispositivo con un único electrodo

El modelo físico y numérico que rige el comportamiento del dispositivo de la figura 2.3(b) ha sido ya presentado en esta tesis. Las ecuaciones (2.22) y (2.23) definen el problema orientacional en nuestro dispo-

sitivo, cuya aproximación numérica se expuso ya en las ecuaciones (3.3) y (3.4). La ecuación (2.27) rige la distribución del campo eléctrico en el seno del cristal líquido; su aproximación viene dada por la ecuación en diferencias (3.10). Estas tres ecuaciones son resueltas mediante un bucle iterativo para alcanzar una solución autoconsistente para el ángulo de cabeceo $\theta(x, y)$, el ángulo de torsión $\varphi(x, y)$ y la distribución del campo eléctrico $E_s(x, y)$, tal y como se explicó en la sección 3.4.

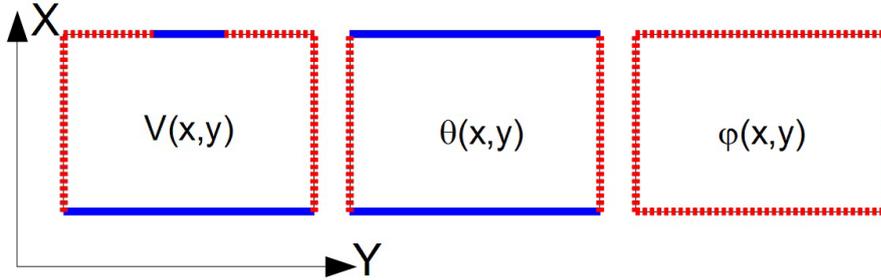


Figura 3.10: Dominio numérico de los tres problemas a resolver. Las líneas azules continuas representan condición de contorno tipo Dirichlet, de anclado fuerte, mientras que las líneas rojas discontinuas representan condiciones de contorno transparentes.

Las tres ecuaciones en diferencias tienen condiciones de contorno distintas como puede verse en la figura 3.10. Con respecto a las fronteras en la dirección transversal y , en los tres casos es frontera transparente, simulando así un dispositivo de anchura finita, pues éste no se extiende en esta dirección como ocurriría por ejemplo con las condiciones periódicas. La diferencia aparece pues en el tratamiento de la condición de contorno en la dirección x . En el cálculo del potencial eléctrico se hace necesario fijar el valor del potencial en aquella zona en la que existe electrodo aplicando tal potencial. Sin embargo, el potencial en la zona del contorno que no tiene electrodo no está definido externamente sino que será el que permita la distribución de campo eléctrico en el seno del cristal líquido, por eso se usa en esa zona frontera transparente. En cuanto al ángulo de cabeceo, fijamos su valor en las superficies confinantes ubicadas en la frontera de la dirección x , pues ya se ha comentado la imposibilidad de permitir este movimiento en la zona cercana a las superficies confinantes. Por último, el ángulo de torsión tiene implementado también frontera transparente en la dirección x , dado que es posible permitir el movimiento paralelo a la superficie de las moléculas de cristal líquido. Se trata de una situación de anclado suave del ángulo de torsión.

Aunque se ha explicado ya como se obtiene la frontera transparente en el caso óptico, presentamos aquí el ejemplo de como se aplica para este problema no óptico. Consideramos, por ejemplo, la distribución de potencial eléctrico en el dispositivo de la figura 2.3(b), para el caso en el que se aplica $V_0 = 1$ V en el electrodo superior, estando el inferior conectado a masa ($V = 0$ V). En la figura 3.11 puede verse, sobre la distribución del potencial eléctrico en el electrodo, qué forma tiene el cociente $c_{yJ,k} = \frac{V_{J,k}}{V_{J,k+1}}$ para un valor de $j = J$ fijo (en este caso $J = N_X/2$) que se utiliza para extrapolar el comportamiento de la función hasta la frontera en la dirección y . Para poder extrapolar el valor de la función en la frontera, necesitamos conocer los cocientes

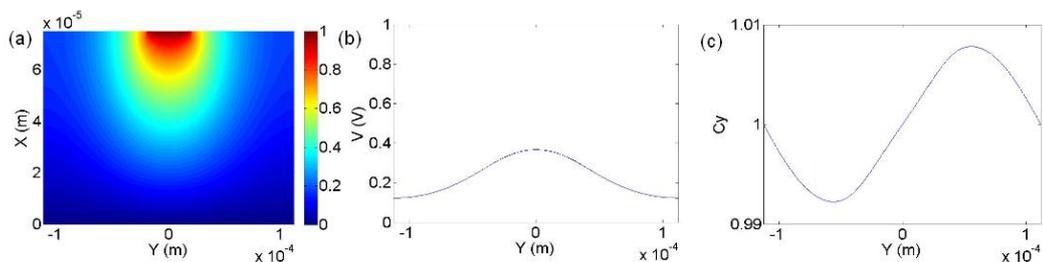


Figura 3.11: (a) Distribución del potencial eléctrico para $V = 1$ V, (b) Sección de V para $J = N_X/2$ y (c) Cociente c_y para $V(J = N_X/2, k)$.

$c_{yJ,1}$ y $c_{yJ,N-1}$, ya que, entonces, puede calcularse la frontera como $V_{J,1} = V_{J,2}c_{yJ,1}$ y $V_{J,M} = \frac{V_{J,M-1}}{c_{yJ,M-1}}$. Para conocer estos dos valores extremos de los cocientes c_y necesitamos extrapolar su valor. Esta extrapolación puede ser de cualquier orden aunque la lineal y la cuadrática son las recomendadas para los tamaños de paso

que se manejan en estos problemas. De hecho, la lineal es más que suficiente siempre que el comportamiento de la función solución no sea abrupto. Las dos posibilidades de extrapolación serían, pues,

$$\begin{aligned}c_{yJ,1} &= 2c_{yJ,2} - c_{yJ,3}, \\c_{yJ,M-1} &= 2c_{yJ,M-2} - c_{yJ,M-3},\end{aligned}$$

como extrapolación lineal y

$$\begin{aligned}c_{yJ,1} &= 3c_{yJ,2} - 3c_{yJ,3} + c_{yJ,4}, \\c_{yJ,M-1} &= 3c_{yJ,M-2} - 3c_{yJ,M-3} + c_{yJ,M-4},\end{aligned}$$

como extrapolación cuadrática.

En la figura 3.12 puede verse la solución autoconsistente del problema de distribución angular y de campo eléctrico para una tensión aplicada de $V = 2$ V. Se aprecia como el funcionamiento de la frontera transparente no afecta en absoluto a la solución en el dominio numérico interior. Puede verse que los valores del ángulo de cabeceo son superiores a los del ángulo de torsión, coincidiendo las zonas de pico de ángulo de cabeceo con las zonas de mínimo de ángulo de torsión.

En la figura 3.14 se aprecia la distinta sensibilidad de los ángulos de cabeceo y torsión al potencial eléctrico aplicado al electrodo. Se aprecia como existe un potencial por debajo del cual apenas ocurren cambios, lo que se corresponde con el umbral de Friedericksz, la energía mínima necesaria para iniciar la orientación molecular. Superado ya ese umbral es el ángulo de cabeceo el que muestra una mayor sensibilidad al potencial eléctrico, pues se sitúa en todo momento por encima del ángulo de torsión.

Dispositivo con dos electrodos

Para demostrar la funcionalidad de este código acoplado con frontera transparente, se aplica también a otro dispositivo de interés, del que se han publicado trabajos destinados a direccionar la trayectoria de un solitón en cristales líquidos. El dispositivo se muestra en la figura 3.13. Cada uno de los electrodos aplica una tensión distinta, con lo que el efecto sobre la orientación molecular en la zona de cristal líquido por debajo de cada electrodo es distinta, generando una zona de transición de las propiedades ópticas en el espacio que separa los electrodos. Dependiendo de cual sea el valor de cada una de las tensiones puede lograrse desviar un haz solitónico en una u otra dirección según convenga. Este dispositivo ha sido estudiado por G. Assanto de manera experimental. Muestra también en [194] algunas simulaciones del problema de orientación molecular para este dispositivo en las que emplea únicamente condiciones de contorno de anclado fuerte. Reproducimos en la figura 3.15 sus simulaciones, además de resolver el mismo problema en una situación de anclado suave para el ángulo de torsión. Así pueden apreciarse las diferencias entre solucionar el problema con o sin condiciones de contorno transparentes.

Hemos comentado con anterioridad que es posible utilizar extrapolaciones lineales y cuadráticas en el cálculo de los cocientes que acaban proporcionando el valor de la función en la frontera. En los problemas resueltos en la subsección anterior la forma de las soluciones no es abrupta en las fronteras de la dirección transversal y . Sin embargo sí lo es en las fronteras en la dirección x , y más para el ángulo de torsión. Es un claro ejemplo en el que una mejora en la precisión de la extrapolación refleja comportamientos distintos sobre la forma de la solución. En cualquier caso, no damos demasiada importancia a esta mejora porque nos introduce en un régimen peligroso, el de comportamientos abruptos en la frontera, en el que los propios métodos iterativos que se emplean pueden comenzar a fallar, pues la propia mejora de la solución conduciría a comportamientos todavía más abruptos (los que son en realidad) que podrían conducirnos a zonas de no convergencia de los métodos iterativos.

3.6. Métodos MultiGrid para acelerar el cálculo de los métodos iterativos

Se ha visto en la sección 3.4 que la mayor parte del tiempo de cómputo se emplea en resolver sistemas de ecuaciones que tienen igual número de ecuaciones que de nodos existentes en el dominio discreto (ya sea éste unidimensional o bidimensional). Para mostrar algunos números y apreciar el orden de magnitud del problema computacionalmente hablando, un problema unidimensional con 200 nodos resuelve sistemas con

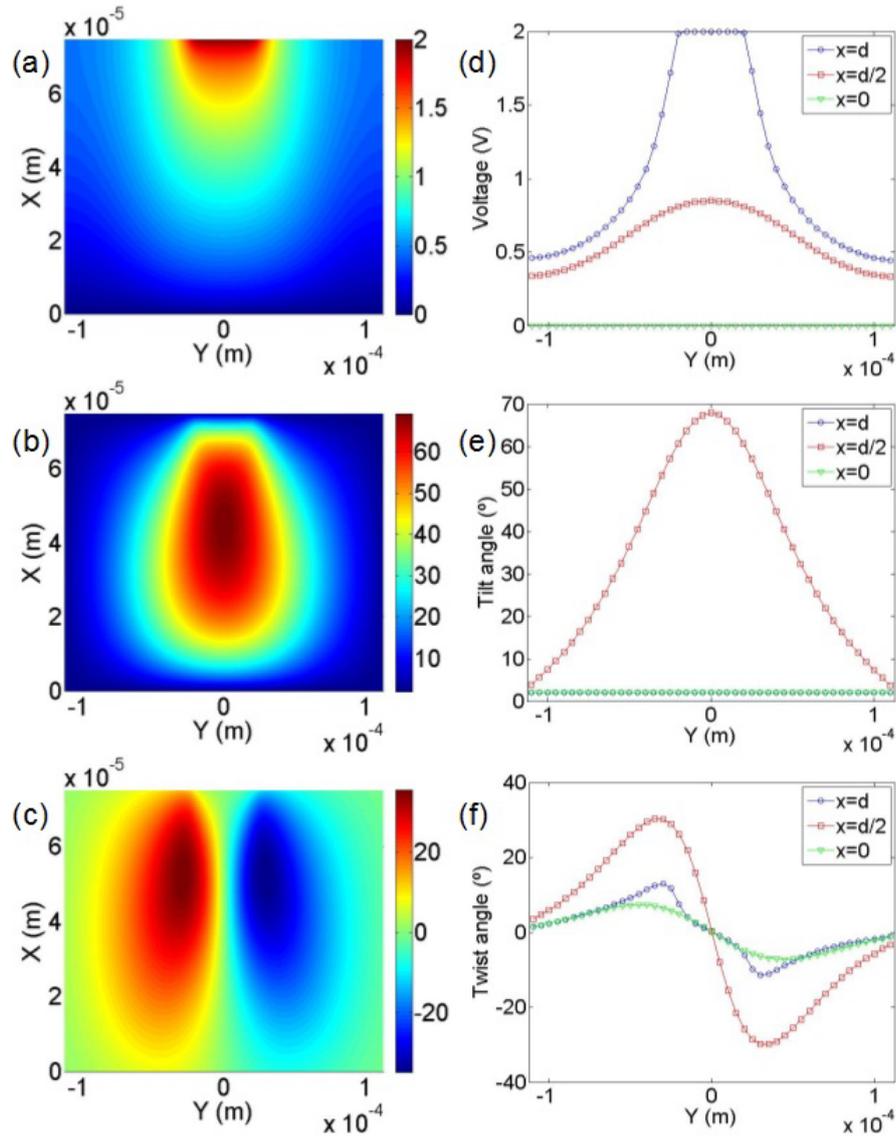


Figura 3.12: (a), (b) y (c) representan el potencial, el ángulo de cabeceo y el ángulo de torsión respectivamente para un valor de tensión aplicada de $V = 2$ V. (d), (e) y (f) muestran tres secciones diferentes de (a), (b) y (c) respectivamente. Los círculos azules, cuadrados rojos y triángulos verdes representan cortes de la representación tridimensional cuya vista zenital se observa en la columna de la izquierda. Los cortes son alrededor de $x = d$, $x = d/2$ y $x = 0$ respectivamente. Nótese que alguna curva pueden estar solapando otra curva o el eje horizontal.

matrices de 200×200 elementos. En el caso bidimensional, admitiendo también 200 nodos por dirección las matrices crecen de una manera importante hasta los 4000×4000 nodos. En todos los problemas de esta tesis, estas matrices de coeficientes son matrices muy dispersas, de manera que el coste computacional no es demasiado grande. El problema viene de tener que resolver miles sistemas de ecuaciones para resolver un paso de propagación del campo óptico, como dijimos en la subsección 3.4.

Sería deseable pues acelerar la resolución de estos sistemas de ecuaciones asociados a problemas de valores de contorno. Las técnicas MultiGrid permiten hacer esto [196]. Presentamos aquí en qué consiste la técnica MultiGrid en casos de dos grids o mallas discretas (aludiendo a la discretización del dominio continuo), si bien hay muchos otros tipos de métodos MultiGrid que escapan de la intención de este trabajo.

El objetivo es resolver una ecuación de la forma

$$Lu = f, \quad (3.27)$$

donde L es un operador elíptico y f el término fuente que, en los casos de Problemas de Valores de Contorno (PVC) que se plantean en esta tesis, es siempre nulo. Mediante el MDF se obtiene una ecuación discretizada

de la ecuación (3.27),

$$L_h u_h = 0, \quad (3.28)$$

donde u_h denota la solución exacta al problema. Supóngase que \tilde{u}_h es la solución aproximada a (3.28), entonces, el error (o corrección) vendrá dado por

$$e_h = u_h - \tilde{u}_h, \quad (3.29)$$

y el residuo o defecto será

$$d_h = L_h \tilde{u}_h. \quad (3.30)$$

El método consiste en:

- resolver (3.28) usando un tamaño de paso h ,
- calcular el residuo d_h mediante (3.30),
- restringir este residuo fino d_h mediante un operador restricción \mathcal{R} , tal que se obtenga el residuo en una malla menos fina, digamos a tamaño de paso doble, por ejemplo, $H = 2h$, de manera que se cumpla $d_H = \mathcal{R}d_h$.
- resolver el problema $L_H e_H = -d_H$
- interpolar el error calculado e_H mediante un operador de prolongación \mathcal{P} , tal que $e_h = \mathcal{P}e_H$
- calcular la nueva solución $u_h^{nueva} = u_h + e_h$

Los operadores restricción \mathcal{R} y prolongación \mathcal{P} admiten diversas formas. De hecho, el operador restricción \mathcal{R} es tan simple como tomar únicamente el valor de la función en los nodos de la malla menos fina. Sin embargo, puede demostrarse que esta elección da problemas y se aconseja que el operador de restricción \mathcal{R} sea el adjunto del operador de prolongación \mathcal{P} . Así pues, se define el operador prolongación \mathcal{P} en primer lugar como una interpolación bilineal definida por

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} 1/4 & 1/2 & 1/4 \\ 1/2 & 1 & 1/2 \\ 1/4 & 1/2 & 1/4 \end{pmatrix}, \quad (3.31)$$

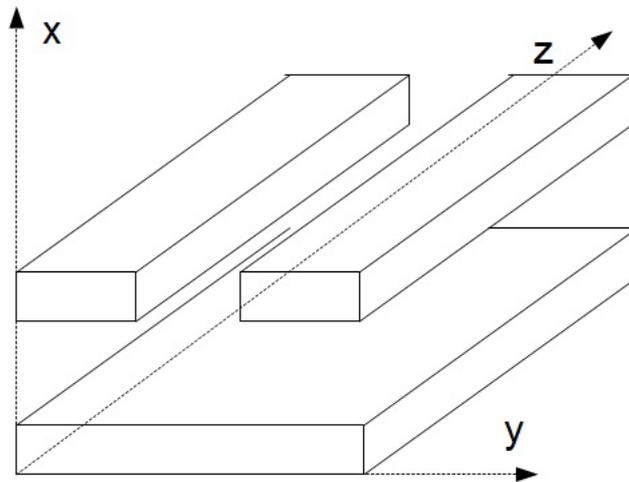


Figura 3.13: Dispositivo de celda planar de cristal líquido nemático con una discontinuidad en el electrodo superior.

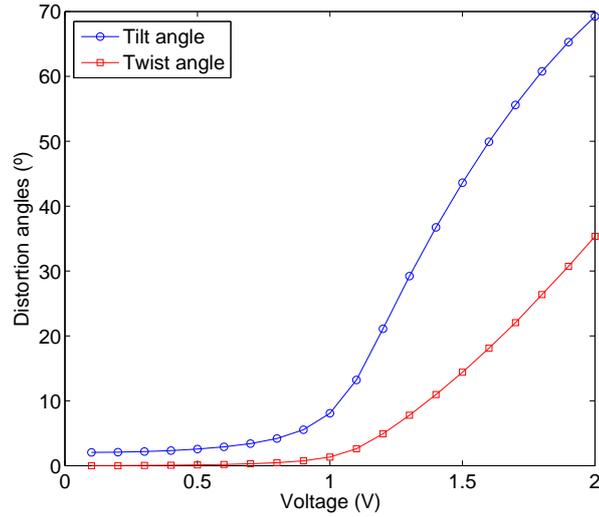


Figura 3.14: Dependencia del voltaje aplicado con el valor de pico de los ángulo de cabeceo $\theta(x, y)$ y torsión $\varphi(x, y)$. La gráfica está compuesta por las soluciones de 200 simulaciones, correspondientes a los voltajes comprendidos entre $V = 0.01$ V y $V = 2$ V.

y el operador restricción \mathcal{R} como el adjunto de \mathcal{P}

$$\mathcal{P}^\dagger = \mathcal{R} = \begin{pmatrix} 1/16 & 1/8 & 1/16 \\ 1/8 & 1/4 & 1/8 \\ 1/16 & 1/8 & 1/16 \end{pmatrix}. \quad (3.32)$$

De este modo puede pasarse del dominio fino al dominio grueso por aplicación de los operadores restricción y prolongación.

Este método no obstante genera un problema muy importante en los problemas que se resuelven en esta tesis, en los que la información de la frontera es fundamental. Ocurre que el operador restricción borra la información de la frontera, de manera que la frontera transparente se desvirtúa completamente, pues ya no es una buena aproximación a la frontera tras pasar la información por el operador prolongación. Es cierto que los tiempos de cálculo mejoran algún orden de magnitud, pero tiene un problema crítico con todos aquellos códigos que necesiten de la frontera transparente.

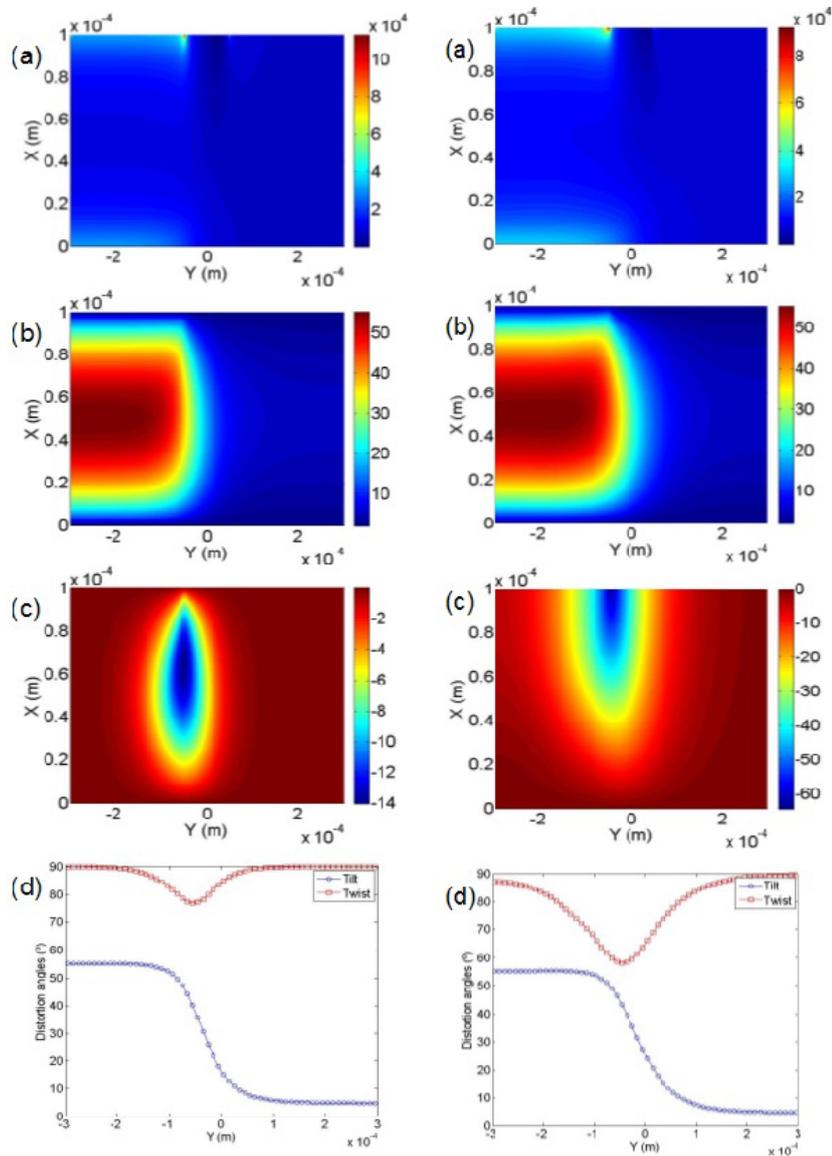


Figura 3.15: Solución del problema eléctrico y de reorientación del dispositivo con electrodo discontinuo, resuelto con condiciones de contorno tipo Dirichlet en la dirección x (izquierda) y con frontera transparente en x para el ángulo de torsión (derecha). Los voltajes son $V_1 = 1.5$ V y $V_2 = 0.7$ V. (a) Campo eléctrico, (b) ángulo de cabeceo y (c) ángulo de torsión. Gráfica (d) muestra las secciones de los ángulos de cabeceo y torsión en la posición $x = d/2$.

4

Resultados

En este capítulo se pretende exponer el resultado de las simulaciones a que ha dado lugar este trabajo de tesis con todas y cada una de las ecuaciones planteadas en capítulos anteriores. Estos resultados ayudarán a visualizar la física del problema y ampliarán el conocimiento que existe hoy en día sobre cristales líquidos, llegando a sugerir nuevos regímenes de funcionamiento de modelos ya conocidos. Mostramos, por una parte, el comportamiento ante los campos eléctricos de un cristal líquido nemático, algo sobradamente estudiado [2, 3], por lo que no se hará más que reproducir información ya presente en otros textos [148]. Por otra parte, en algunos casos, las simulaciones también permitirán explorar aplicaciones de celdas planares de cristales líquidos para propagación lateral de luz. Este capítulo puede estructurarse en tres partes principales: la sección 4.1 habla de resultados de la parte estática del modelo completo, aquella que se encarga de alcanzar una solución autoconsistente de los problemas de orientación molecular y distribución del campo eléctrico externo. La sección 4.2, expone resultados del acoplamiento del campo óptico al problema estático anterior y su propagación en determinados regímenes unidimensionales, incluyendo configuraciones novedosas conducentes a la aparición de nuevos fenómenos. Por último, la sección 4.3 expone los resultados obtenidos mediante simulación 2D+1 paraxial y escalar. En este régimen se exploran dispositivos implementables en celdas planares para propagación lateral como acopladores ópticos. Además se sugieren nuevos dispositivos electro-ópticos capaces de afectar a la trayectoria del haz con varios grados de libertad.

4.1. Problemas de contorno

Los problemas estáticos que definen las propiedades ópticas del cristal líquido en determinada sección transversal (x, y) constituyen problemas de valores de contorno. Como se ha explicado en las secciones 3.1 y 3.2, estos problemas se resuelven haciendo uso de métodos iterativos tipo Newton-Raphson, tanto en una como en dos dimensiones. En cuanto a las propiedades del cristal líquido E7 sobre el que realizamos todos los estudios, sus valores son los siguientes: la constante elástica $K = 12 \times 10^{-12}$ N (consideramos en las simulaciones la aproximación de una constante), las constantes dieléctricas en las dos direcciones transversales $\epsilon_{\parallel} = 19.6$ (en la dirección paralela a la superficie) y $\epsilon_{\perp} = 5.1$ (en la dirección perpendicular) y los índices de refracción en las dos direcciones $n_{\parallel} = 1.6954$ y $n_{\perp} = 1.5038$. Las propiedades ópticas para las superficies confinantes de la celda planar son las del plástico comercial BK7, $\epsilon = 5.1$ y $n = 1.516$, si bien no se hace uso de estos datos, dado que el plástico confinante no pertenece al dominio de solución del problema.

4.1.1. Caso 1D

Resolvemos aquí las ecuaciones (3.1), (3.5) y (3.9) acopladas para estudiar el efecto del campo eléctrico (ya sea externo u óptico) sobre la orientación del ángulo de cabeceo $\theta(x)$ del cristal líquido nemático.

En primer lugar queremos ver cual es el efecto del campo eléctrico externo aplicado en los electrodos sobre el cristal líquido. Para ello aplicamos un voltaje eléctrico junto con un campo óptico de una potencia despreciable para asegurarnos de que no influye en la orientación molecular. Puede verse en la figura 4.1 una representación tridimensional que muestra la dependencia de la distribución del ángulo de cabeceo en la variable x con el voltaje aplicado. Se ve claramente como por debajo de cierto valor del voltaje (alrededor de $V = 1$ V) apenas ocurre nada. Este umbral se corresponde con el umbral de Friedericksz para el voltaje.

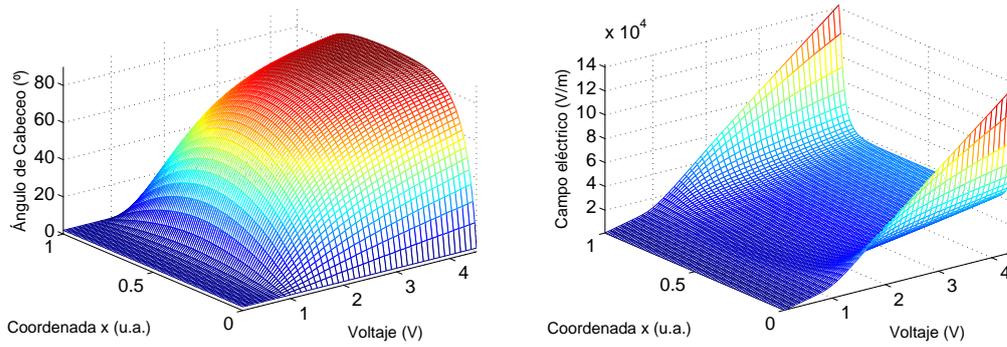


Figura 4.1: Distribución del ángulo de cabeceo (izquierda) y campo eléctrico externo (derecha) para potenciales de $V = 0.0.1 - 4.5$ V.

También puede verse, en el otro extremo de valores grandes de voltaje, que el ángulo de cabeceo se satura al llegar a $\theta(x) = 90^\circ$, lo que quiere decir que la molécula de cristal líquido ya está alineada perfectamente con el campo eléctrico producido por el voltaje y que tiene sólo componente x . La figura 4.1 muestra también el valor del campo eléctrico en el seno del cristal líquido. Puede verse que el campo eléctrico es aproximadamente constante (o de variación suave) en el centro de la celda y que varía bruscamente cerca de la frontera, tanto más cuanto más elevado es el valor del voltaje.

Manteniendo el potencial eléctrico a 0 voltios y haciendo uso de iluminación a diversas potencias, se puede ver el efecto de reorientación del cristal debido al campo eléctrico óptico como muestra la figura 4.2. Vuelve a apreciarse el mínimo de energía por debajo del cual apenas existe reorientación molecular y en esta ocasión, puede verse que el ángulo de cabeceo bajo la única influencia del campo óptico tiene un perfil cuasi triangular, empujado a valores de $\theta(x) = 90^\circ$ por la intensidad del haz polarizado linealmente en la dirección x . Donde la intensidad de la luz es despreciable, el ángulo de cabeceo es lineal, como corresponde a la solución de la ecuación de Poisson sin excitaciones externas (como se puede ver mediante la solución analítica del problema mediante el método de las funciones de Green en el caso de una excitación puntual tipo delta de Dirac). En la combinación de ambas excitaciones eléctricas, la proveniente del campo eléctrico

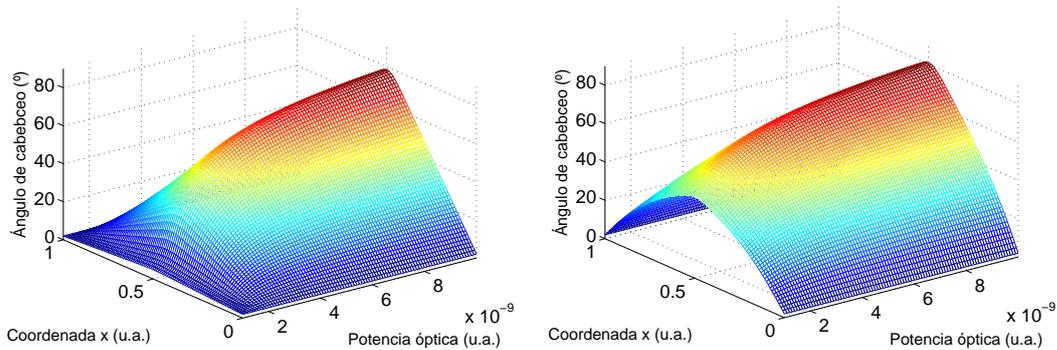


Figura 4.2: Tilt en presencia únicamente de campo óptico (izquierda) y en conjunción con un potencial de $V = 1$ V para varias potencias ópticas.

externo aplicado por el electrodo y la correspondiente al haz de luz presente en el cristal líquido, el ángulo de cabeceo reacciona a ambas de una manera no lineal, pues el acoplo total de las ecuaciones hace aparecer la no linealidad efectiva sobre el ángulo de cabeceo. Puede verse su efecto conjunto en la figura 4.2. De hecho, se fija el valor de tensión en $V = 1$ V y se va aumentando paulatinamente el valor de la potencia óptica. Para bajas potencias ópticas predomina el perfil del ángulo de cabeceo más suavizado, propio de la influencia predominante del campo eléctrico externo. Al ir creciendo la potencia óptica, el perfil se va acercando más al triangular característico de la predominancia de la influencia del haz de luz sobre el ángulo de cabeceo.

El cristal líquido se comporta como una membrana elástica que es deformada por la acción de una fuerza. El campo eléctrico externo se comporta como una fuerza uniformemente distribuida sobre la membrana, lo

que produce una deformación en toda la membrana, mientras que la intensidad óptica se comporta como una fuerza puntual, tanto más cuanto más localizado está el haz. Esta fuerza cuasi puntual deforma la membrana de manera local, donde actúa el campo óptico, de ahí el perfil pseudo triangular del ángulo de cabeceo en este caso. Es interesante estudiar la resistencia a la deformación de la membrana conforme la fuerza puntual se acerca a la frontera. Para la misma intensidad óptica es de esperar que la deformación máxima alcanzada sea menor, pues la cercanía de la frontera, donde la deformación es nula, hace aumentar la cantidad de energía necesaria para producir la misma deformación que en el centro de la celda. En la figura 4.3 puede verse como el pico máximo de ángulo de cabeceo va disminuyendo conforme el haz de luz se acerca a la frontera, como era de esperar. La introducción de un campo eléctrico externo tiene dos efectos: la curvatura de la distribución espacial del ángulo de cabeceo y el aumento del valor de pico, dado que existe mayor cantidad de energía eléctrica disponible para afectar a la reorientación molecular. Cuando la excentricidad del haz permanece constante y, por tanto, la resistencia del cristal a orientarse (figura 4.4), se ve que los máximos del ángulo de cabeceo no son comparables al caso en el que no hay excentricidad, dado que cuesta más mover las moléculas por la cercanía de la frontera, pero sí se observa un patrón similar al de la figura 4.2.

No debe olvidarse que el problema de orientación molecular se calcula por su afectación sobre las propiedades ópticas del cristal líquido. De hecho, el perfil de índice de refracción depende del ángulo de cabeceo de la forma $\epsilon = \epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \sin^2 \theta$. En la figura 4.5 puede verse como dos perfiles distintos del ángulo de cabeceo, que sólo se diferencian en el potencial aplicado (en uno el voltaje es nulo y en el otro es $V = 1$ V), producen guías de variación suave del perfil de índice de refracción efectivo que se parecen mucho. Cualitativamente no habrá diferencias significativas entre la propagación de un haz en una y otra guía, si bien, el caso en el que el potencial es distinto de cero ofrece una mayor capacidad de confinamiento del haz (por cuanto el índice de refracción alcanza un valor mayor), a la vez que ofrece un canal ligeramente más ancho. Sin embargo ocurre una cosa muy distinta cuando uno se plantea cambiar las condiciones de contorno del problema de orientación y, manteniéndolas en un valor fijo en las fronteras, se utilizan valores distintos en una y otra frontera. En particular desfasadas 180° o, en general un múltiplo entero de 180° . La solución a la ecuación del ángulo de cabeceo unidimensional (2.17) sin ningún tipo de excitación eléctrica ofrece la posición de equilibrio. La solución analítica de la ecuación de Laplace homogénea es una recta que conecta los valores de la función en el contorno. El perfil efectivo de índice de refracción para este tipo de soluciones tiene una propiedad muy interesante, y es que presenta la mayor birrefringencia posible del medio, dado que el ángulo de cabeceo muestra en la posición de equilibrio el mayor salto posible entre sus valores máximo y mínimo, pasando desde el valor de pretilt (que suele ser un valor pequeño, típicamente $\theta_0 = 2^\circ$), hasta 90° , valor que se alcanza de manera natural en esta configuración en el centro de la celda planar. Por lo tanto, puede inferirse de esta información que cualquiera que sea el efecto de la introducción de energía eléctrica en el sistema, no aportará mayor capacidad de confinamiento del haz. La figura 4.6 muestra como afecta el hecho de que la frontera derecha tenga fijo el valor del ángulo de cabeceo en $N \cdot 180^\circ$ con $N = 1$ y $N = 2$. Aunque sólo se muestran dos casos, es fácil ver que N va a ser el número de guías inducidas de manera natural por la posición del cristal líquido. Esto permite el diseño de nuevos dispositivos que presenten periodicidad en esa dirección sin más que cambiando el valor de la frontera del ángulo de cabeceo. Puesto que el valor del

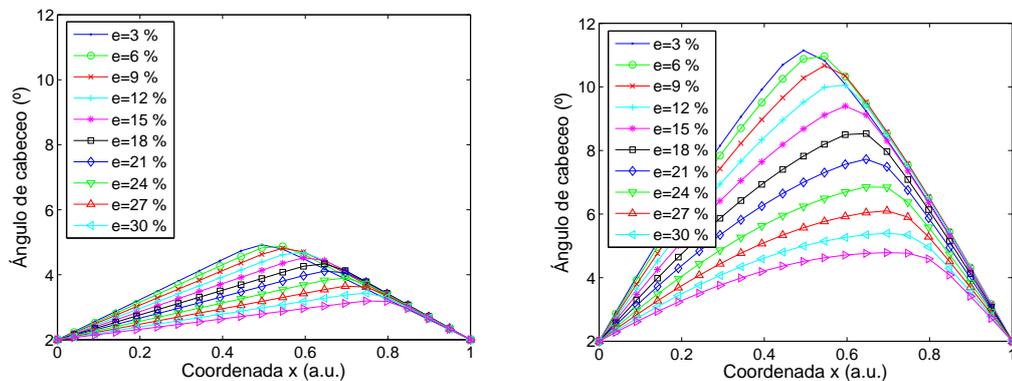


Figura 4.3: Dependencia del ángulo de cabeceo con la excentricidad. Potencia óptica fija de $1.5 \text{ mW}/\mu\text{m}^2$ y sin voltaje externo aplicado (izquierda) y misma potencia óptica con $V = 0.5$ V (derecha).

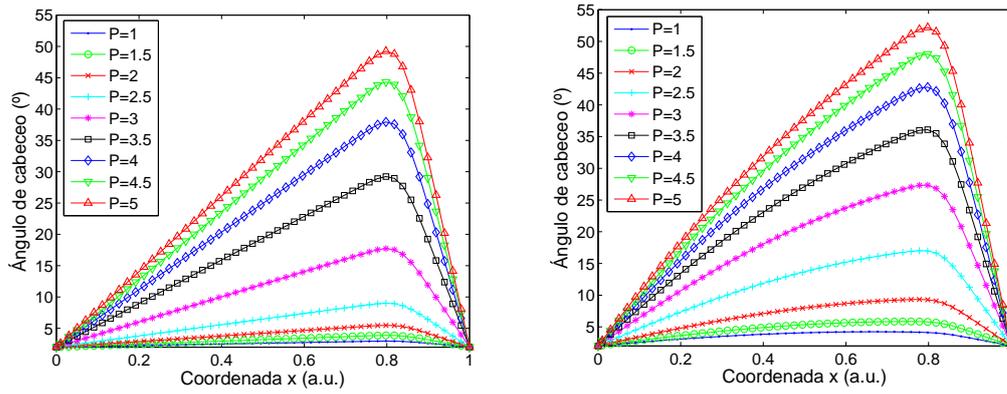


Figura 4.4: Dependencia del ángulo de cabeceo con la potencia óptica a excentricidad fija de $e = 33\%$. Diversas potencias ópticas con $V = 0$ V (izquierda) y $V = 0.5$ V (derecha).

ángulo de cabeceo en el centro de la celda ya es máximo en su situación de reposo, la potencia óptica lanzada en el centro no va a modificar el valor del ángulo de cabeceo, pues pretendería alinearlos con la dirección x pero ya lo está. Por tanto, la potencia óptica cambiará el valor del ángulo de cabeceo en lugares que no sean el centro y siempre para empujar a valores mayores de los que ya se tienen en la disposición de reposo. Lanzando luz desde el centro, se debe enviar suficiente potencia óptica como para que sature el ángulo de cabeceo en las inmediaciones del valor de pico y lograr así cambiar la distribución del ángulo de cabeceo. En la figura 4.7 puede verse, a la izquierda, como la potencia óptica no cambia demasiado el valor del ángulo de cabeceo por lo que se acaba de comentar. No ocurre así con el voltaje aplicado, que, al afectar de manera natural a todo el ancho de la celda, es capaz de orientar las moléculas de cristal líquido en toda la anchura de la celda, siempre que la energía sea suficientemente alta como para saturar el ángulo de cabeceo (voltajes a partir de $V = 1.5$ V). Puede verse también que los perfiles de índice de refracción apenas se ven afectados por la influencia de la potencia óptica, al menos, en el régimen de potencias en el que, con la configuración del ángulo de cabeceo simétrica, sí afectaba a la orientación del cristal.

4.1.2. Caso 2D

En esta subsección presentamos el comportamiento de una celda planar con diversas configuraciones y bajo los efectos de campos eléctricos externos y ópticos. El caso más sencillo es la consideración únicamente del ángulo de cabeceo, caso que restringe la variedad de dispositivos posibles dado que, al no permitir el movimiento de torsión del cristal líquido, no podemos considerar la presencia de campos en las dos componentes transversales. Estos casos serán considerados más adelante con el modelo que contempla ambas variaciones angulares.

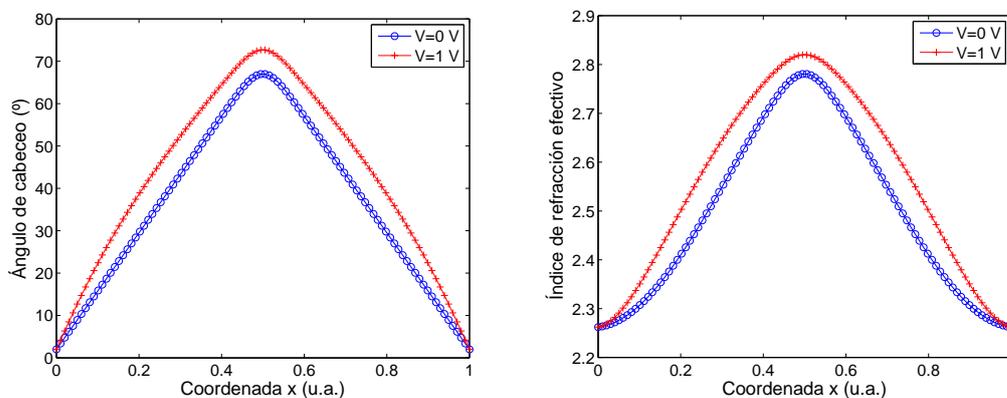


Figura 4.5: Ángulo de cabeceo para tensiones de $V = 0$ V y $V = 1$ V (izquierda). Perfiles de índice de refracción efectivo que producen las orientaciones molecular mostradas a la izquierda (derecha).

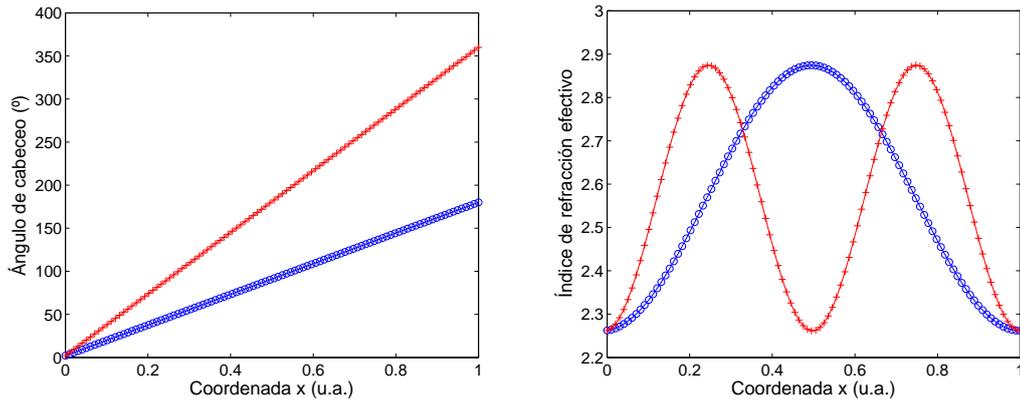


Figura 4.6: Posición de equilibrio del ángulo de cabeceo con frontera desfasada 180° y 360° (izquierda). A la derecha se muestran los perfiles de índice de refracción efectivos en tales configuraciones.

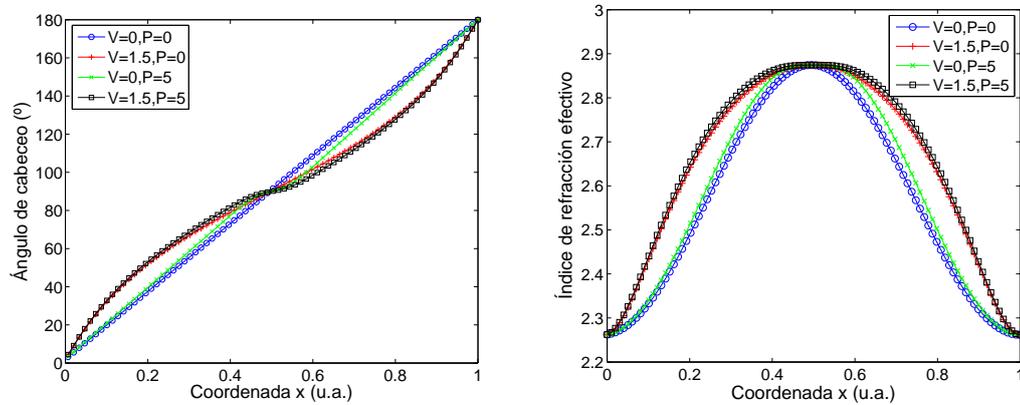


Figura 4.7: Ángulo de cabeceo (izquierda). Perfiles de índice de refracción efectivo (derecha).

Electrodos continuos

El dispositivo de celda planar de la figura 2.3 permite aplicar un potencial en los electrodos que produce un campo eléctrico en la componente x únicamente en el seno del cristal líquido. Esta componente E_x del campo eléctrico hará cambiar el ángulo de cabeceo de las moléculas buscando su alineamiento con el eje x . En ausencia de otro tipo de excitación, éste será el único movimiento permitido a las moléculas del CLN. Será posible orientar también el ángulo de torsión si introducimos una componente y del campo óptico.

Para realizar un estudio numérico completo, como se hiciera en el caso unidimensional, de las dependencias del ángulo de cabeceo con la potencia óptica, con el voltaje y con la excentricidad del haz, realizamos un barrido de simulaciones que contemplen la afectación de estos parámetros sobre la disposición del cristal líquido. Para visualizar los datos de manera clara, separamos las influencias de cada uno de los parámetros, esto es, mantenemos dos de ellos fijos mientras variamos el tercero. Para cada uno de los casos dibujamos una familia de curvas que represente el cambio de comportamiento del ángulo de cabeceo al variar una de las tres variables contempladas.

La figura 4.8 muestra las distribuciones de campo eléctrico y ángulo de cabeceo para una diversidad de potenciales aplicados, en el rango $V = 0.1 - 2.8$ V y en ausencia de campo óptico, al igual que ya hiciéramos con el modelo unidimensional. Estas simulaciones sirven más como comprobación del código que por el interés de las soluciones, ya que éstas son conocidas por el problema unidimensional, pues la situación física simulada aquí es exactamente la misma que entonces.

El campo óptico en la situación bidimensional ofrece algo más de información que en el caso unidimensional ya analizado. La afectación de la potencia óptica sobre el ángulo de cabeceo se muestra en la figura 4.9. A la izquierda vemos una representación cenital de la distribución del ángulo de cabeceo bajo afectación únicamente de campo óptico, para una potencia de $P_{opt} = 50$ W/mm. A la derecha dibujamos dos curvas

sobre una representación tridimensional, que se corresponden con las secciones de la figura de la izquierda alrededor de los planos $y = 0$ y $x = d/2$. Nótese que el dominio (x, y) de definición del problema no es un cuadrado, sino un rectángulo, dado que $x \in [0, d]$ y $y \in [-Y/2, Y/2]$, siendo $Y = 3 \cdot d$ y $d = 75 \mu\text{m}$.

El dispositivo se considera infinito en la dirección y ya que se han empleado condiciones de contorno periódicas. La deformación del ángulo de cabeceo tiene una extensión similar en las dos direcciones, sólo que en la dirección x se ve limitada por la imposición del valor de contorno. La forma de la variación en x y en y del ángulo de cabeceo no es la misma. En la dependencia con x se aprecia curvatura del ángulo de cabeceo en la zona donde hay excitación óptica. Donde la intensidad del campo óptico es nula, la solución del ángulo de cabeceo tiene una dependencia lineal con la coordenada x , como se corresponde a la solución de curvatura nula en esa zona del espacio. Sin embargo, en la dirección y podemos ver un perfil no lineal en toda la sección. La figura 4.10 muestra dos familias de curvas para el ángulo de cabeceo, donde lo único que varía es la potencia óptica empleada. En azul tenemos las secciones de la solución bidimensional por $y = 0 \mu\text{m}$ y en rojo las secciones por $x = d/2 \mu\text{m}$. En ellas puede apreciarse la dificultad que tiene el ángulo de cabeceo para superar ciertos valores. Si bien el valor de saturación es $\theta(x, y) = 90^\circ$, la resistencia a aumentar el valor es creciente con el valor del mismo. De hecho las curvas están mucho más juntas para valores altos de potencia óptica aunque no están excesivamente cerca del valor de saturación. Puede verse que la mayor sensibilidad del ángulo de cabeceo a la potencia óptica se produce entre los valores de la tercera y séptima curva, que se corresponden con potencias de entre 15 y 35 W/mm.

La representación tridimensional del caso en el que se presentan tanto campo eléctrico externo como potencia óptica se muestra en la figura 4.11. La conjunción de las dos excitaciones en el caso bidimensional tiene efectos análogos al caso unidimensional, observando mayor afectación al ángulo de cabeceo en toda la anchura de la celda, dado que el campo eléctrico aplicado externamente se extiende a todo el dominio. Podemos ver las familias de curvas para un voltaje de $V = 1 \text{ V}$ y potencias ópticas comprendidas entre 5 y 100 W/mm en la figura 4.12. La figura 4.12 muestra las mismas simulaciones que en la figura 4.10 pero en esta ocasión en presencia de los dos campos excitantes (el potencial externo y el campo óptico). Existen dos diferencias fundamentales, la primera es el mayor valor alcanzado en todos los casos por el ángulo de cabeceo debido a la mayor cantidad de energía eléctrica invertida en modificar la posición del director. La segunda diferencia es el distinto perfil de variación que posee la solución dependiendo de si la excitación es campo eléctrico, campo óptico o ambos. El campo eléctrico externo, al extenderse en todo el dominio de la celda afecta a todas las moléculas, afectando las variaciones del ángulo de cabeceo en toda la extensión de la celda. No ocurre así con el campo óptico que sólo actúa en la zona donde la potencia óptica es suficiente para reorientar las moléculas del CLN.

Al estudiar la respuesta del cristal líquido frente a la posición inicial del haz, variaremos únicamente la posición en la dirección x , pues el dispositivo tiene invariancia traslacional en la dirección y . El efecto de esta posición inicial se puede apreciar en la figura 4.13. Allí observamos una familia de curvas a potencia óptica fija $P_{opt} = 20 \text{ W/mm}$ (una curva para cada valor de la excentricidad) tomando valores $\xi = 0\%, 5\%, 10\%, 15\%, 20\%, 25\%$, expresados como porcentaje de la anchura total d . En este caso no existe

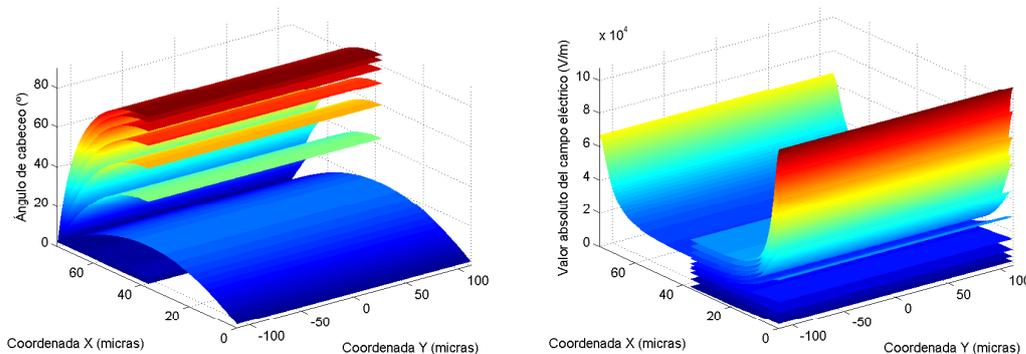


Figura 4.8: Distribuciones del ángulo de cabeceo (izquierda) y del campo eléctrico (derecha) para voltajes comprendidos entre $V = 0.1 - 2.8 \text{ V}$. Para mayor claridad se muestran dos de las superficies completas, entendiéndose que el resto respetan la simetría con respecto al plano de corte.

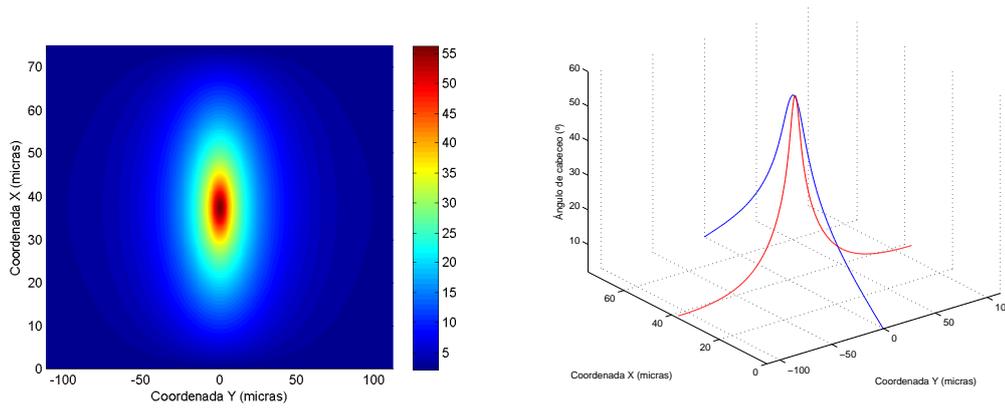


Figura 4.9: Ángulo de cabeceo para una potencia óptica de $P_{opt} = 50 \text{ W/mm}$. Representación cenital (izquierda) y secciones medias (derecha).

voltaje aplicado a los electrodos, por tanto la única excitación eléctrica es el propio campo óptico. En la dirección x la excentricidad induce menores valores del ángulo de cabeceo cuanto más cerca nos encontramos de la frontera, donde su valor está fijo por el valor del pretilt (en este caso $\theta_0 = 2^\circ$). En la dirección y se aprecia una curva distinta, producto de la diferente influencia de la frontera, que se encuentra esta vez más alejada de la zona de afectación de la solución. En esta circunstancia, la aplicación un voltaje externo de valor $V = 0.5 \text{ V}$, implica un aumento de los valores máximos alcanzados por el ángulo de cabeceo dado que estamos invirtiendo más energía eléctrica en reorientar las moléculas de cristal líquido usado un campo eléctrico externo a través de la aplicación de un potencial sobre el electrodo, como puede verse en la figura 4.14.

Podríamos también estudiar qué ocurre cuando mantenemos el valor de la excentricidad del haz en esta situación bidimensional y variamos la potencia óptica en ausencia y en presencia de campo eléctrico externo. Sin embargo no creemos que merezca la pena presentar estas figuras, visto ya el comportamiento de la excentricidad del haz sobre el ángulo de cabeceo bidimensional, pues no aparecen aspectos significativos que diferencien esta situación de la análoga unidimensional ya presentada.

En esta situación bidimensional también es posible encontrar las configuraciones que se dan cuando se emplean condiciones de contorno asimétricas para inducir guías por los valores de la frontera como ocurría en el caso unidimensional. Como el comportamiento esperado es predecible presentados ya los datos y gráficas que hemos analizado hasta aquí no creemos conveniente repetir más gráficas que no añadan información relevante al fenómeno.

Por último, el caso de electrodos continuos no impide completamente la aparición de un ángulo de torsión, dado que el campo óptico sí puede tener una componente y que lo haga girar de esta manera. Si tomamos

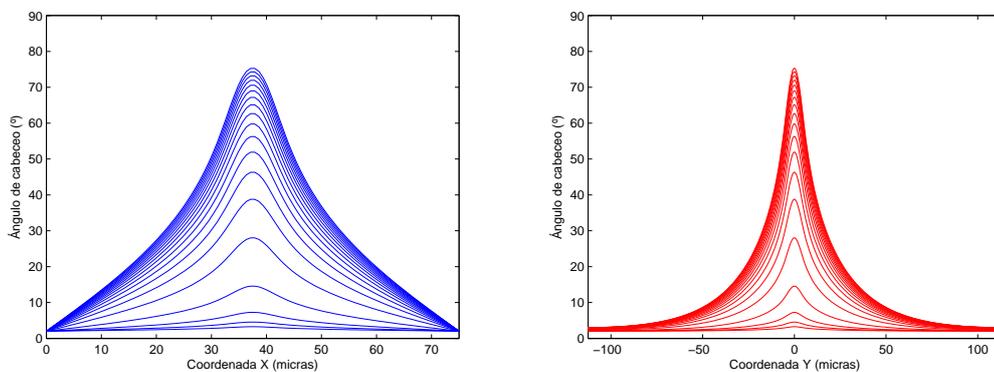


Figura 4.10: Secciones medias en las direcciones x (izquierda) e y (derecha) para valores de la potencia óptica comprendidos entre $P_{opt} = 5 - 100 \text{ W/mm}$.

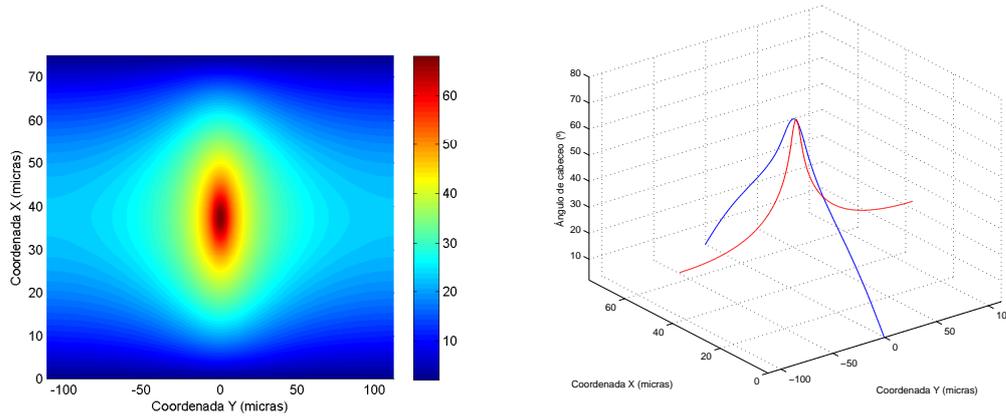


Figura 4.11: Ángulo de cabeceo para una potencia óptica de $P_{opt} = 50W/mm$. Representación cenital (izquierda) y secciones medias (derecha) y un potencial aplicado de $V = 1V$.

excitaciones gaussianas tanto para la componente x como para la componente y del campo óptico nos encontramos en el caso de polarización circular o elíptica, dependiendo a la potencia óptica que transporte cada componente y al desfase entre ellas.

También ocurre que la anisotropía inducida por el campo óptico en el perfil de índice efectivo que siente la luz se extiende tanto en la dirección x como en la dirección y , por lo que hará aparecer un pequeño ángulo de torsión al perder la guía la invariancia traslacional en la dirección y .

Estas situaciones en propagación de luz serán, en general, indeseables, pues el cristal líquido es un medio óptico uniaxial, con lo que existen siempre dos haces, canalizados cada uno de ellos en una dirección distinta, la del vector de onda de cada una de ellas. Como se ha explicado con anterioridad, el índice de refracción sensible a la posición del director es el de la componente extraordinaria, por lo que todo aquello que desvíe potencia de la componente extraordinaria a la componente ordinaria será indeseable, pues hará desaparecer la componente solitónica que nos interesa estudiar en el régimen no lineal de propagación, que es el interesante para los dispositivos que pretenden manipular la luz en cristales líquidos.

Electrodos discontinuos

El problema definido por un dispositivo con electrodo discontinuo (normalmente el superior), se ha presentado en la sección 3.5 para ejemplificar el empleo de la frontera transparente. No obstante, es aquí donde queremos mostrar el comportamiento de tal dispositivo. Mostramos el efecto que tienen el campo eléctrico externo y el campo óptico sobre la orientación molecular y, por tanto, sobre el perfil de índice de refracción efectivo resultante.

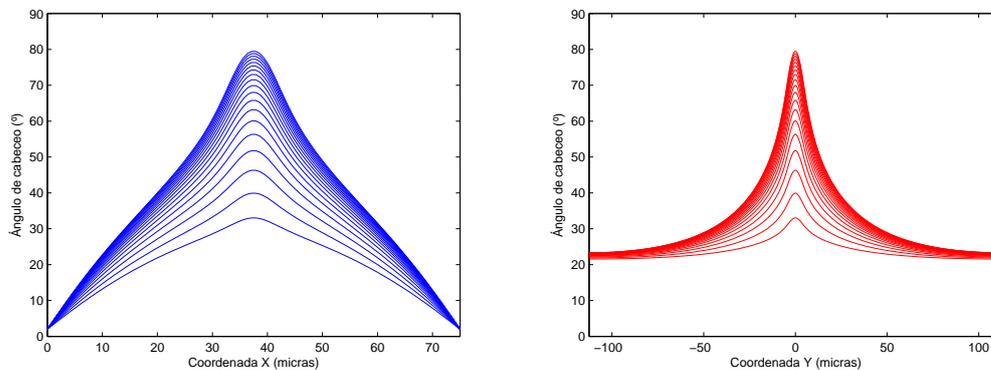


Figura 4.12: Secciones medias en las direcciones x (izquierda) e y (derecha) para valores de la potencia óptica comprendidos entre $P_{opt} = 5 - 100 W/mm$ y un valor de voltaje aplicado de $V = 1 V$.

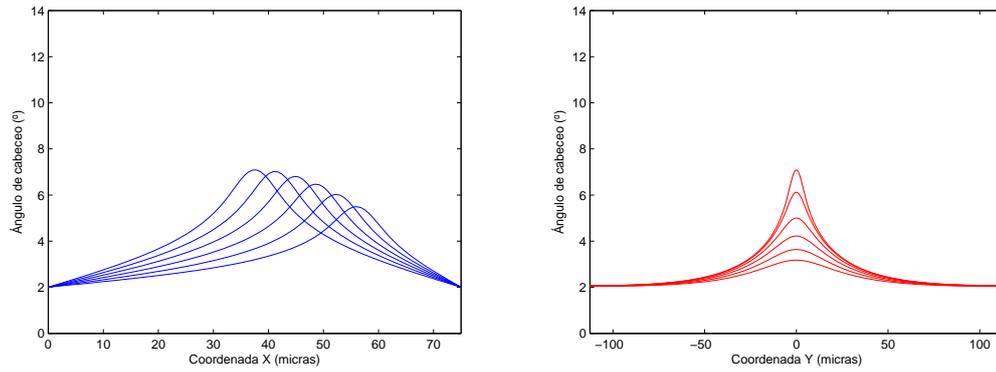


Figura 4.13: Secciones medias en las direcciones x (izquierda) e y (derecha) para valores de la excentricidad comprendidos entre $\xi = 0 - 25$ % de la anchura total de la celda con valores de potencia óptica de $P_{opt} = 20$ y voltaje aplicado $V = 0$ V.

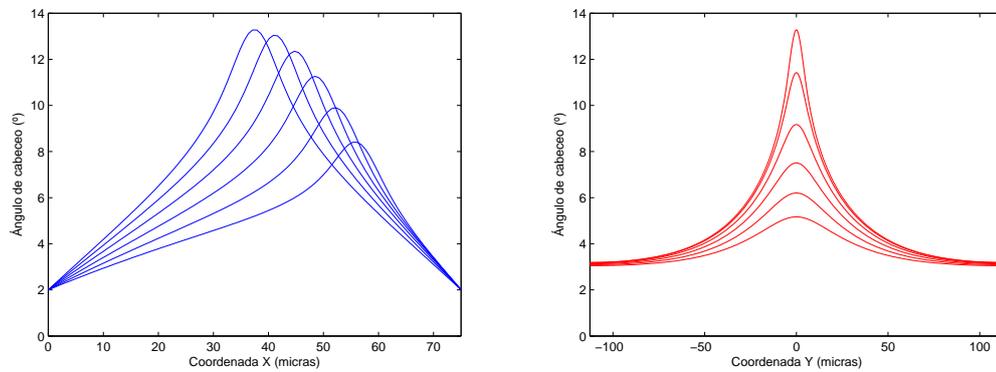


Figura 4.14: Secciones medias en las direcciones x (izquierda) e y (derecha) para valores de la excentricidad comprendidos entre $\xi = 0 - 25$ % de la anchura total de la celda con valores de potencia óptica de $P_{opt} = 20$ y voltaje aplicado $V = 0.5$ V.

Ya se ha visto en la figura 3.14 como evolucionan los valores máximos de los ángulos de cabeceo y torsión en este dispositivo con electrodo discontinuo. Una representación tridimensional de la situación aplicando una tensión de $V = 2$ V se presentó en la figura 3.12. Allí se apreciaba la forma de las soluciones para este tipo de dispositivo. Para el resto de valores de potencial la forma de las soluciones se conserva, suavizándose o acentuándose los valores en función del valor del voltaje. Para que quede claro qué secciones vamos a representar para caracterizar el comportamiento de los ángulos, las definimos en la figura 4.15, donde se aprecia la figura tridimensional y las secciones medias en ambas direcciones de las distribuciones del ángulo de cabeceo $\theta(x, y)$ y de torsión $\varphi(x, y)$. Nótese que estas secciones no se tocan entre sí en ningún punto, aunque pudiera parecerlo por la perspectiva empleada. La figura 4.16 muestra una familia de curvas correspondientes a las secciones ya indicadas para valores distintos del potencial. En la figura 4.17 se muestran las mismas secciones, en este caso a potencial fijo $V = 1$ V pero con distintos valores de potencia óptica, para apreciar la influencia del campo óptico sobre las distribuciones angulares. El campo óptico actúa principalmente sobre el ángulo de cabeceo. El ángulo de torsión debería verse también afectado en las proximidades del campo óptico, dado que él mismo genera variaciones en la dirección y del índice de refracción. De hecho puede apreciarse la mayor separación entre las secciones para x fijo (las rojas) del ángulo de torsión entre las figuras 4.16 y 4.17. Esto se debe a la influencia del campo óptico sobre el ángulo de torsión.

Mostramos también las distribuciones angulares que se tienen al variar la anchura del electrodo discontinuo. Esta variable, la anchura del electrodo superior, marca dos límites: la situación en la que el electrodo tiene la máxima anchura (la del electrodo inferior) reproduce el caso de electrodo continuo. El otro extremo se sitúa en un valor puntual (sin anchura apreciable) del electrodo, mientras en medio tenemos una casuística que se corresponde con todos los valores intermedios. La gráfica 4.18 muestra la curva de valores máximos de

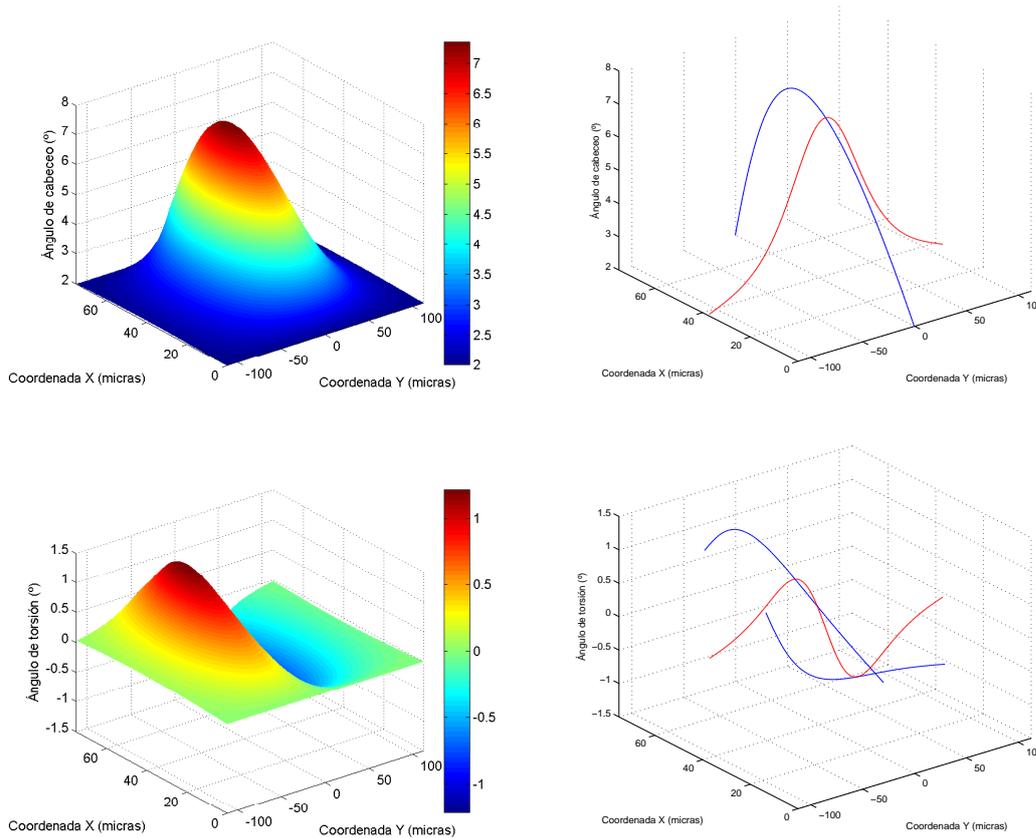


Figura 4.15: Distribuciones de los ángulos de cabeceo para un potencial aplicado de $V = 1$ V y en ausencia de no linealidad óptica. Se han dibujado en azul las secciones por los planos definidos por $y = \text{constante}$ que pasan por los valores máximos en cada caso. En el caso del ángulo de torsión han querido dibujarse dos planos (para el máximo y el mínimo). En rojo se ha dibujado la sección definida por el plano medio $x = d/2$.

las distribuciones angulares en cada caso siempre para un potencial aplicado de $V = 1$ V. Puede verse que, a potencia fija, el ángulo de cabeceo sube su valor máximo conforme aumenta la anchura del electrodo. Este resultado es previsible en tanto que la cantidad de energía eléctrica en el seno del cristal líquido aumenta con la anchura del electrodo, por lo tanto afecta más a la orientación molecular. También ocurre lo mismo para el ángulo de torsión. Se aprecia la gran diferencia existente entre los valores máximos del ángulo de cabeceo y del ángulo de torsión. Este último siempre queda por debajo de 5° en el régimen de parámetros en el que nos movemos, mientras que el ángulo de cabeceo llega a alcanzar un máximo de 35° .

4.2. Problemas de evolución

En esta sección presentamos los resultados del acoplo en evolución de las tres ecuaciones diferenciales, tanto del problema unidimensional como del problema bidimensional. En el problema unidimensional se exploran los casos de evolución paraxial, escalar y vectorial, mientras que en el caso bidimensional siempre nos restringimos a la evolución paraxial escalar de la luz. Aunque propagamos soluciones bidimensionales que no tienen en cuenta la anisotropía propia del cristal líquido en las direcciones transversales, sí presentamos la forma de los modos de la guía anisótropa constituida por el efecto de un campo eléctrico externo sobre una celda planar de cristal líquido. Las simulaciones bidimensionales pues son válidas en el régimen escalar, en el que el ángulo de torsión no despolariza el haz lo suficiente como para que la componente solitónica se pierda, y con trayectorias de muy pocos grados de inclinación.

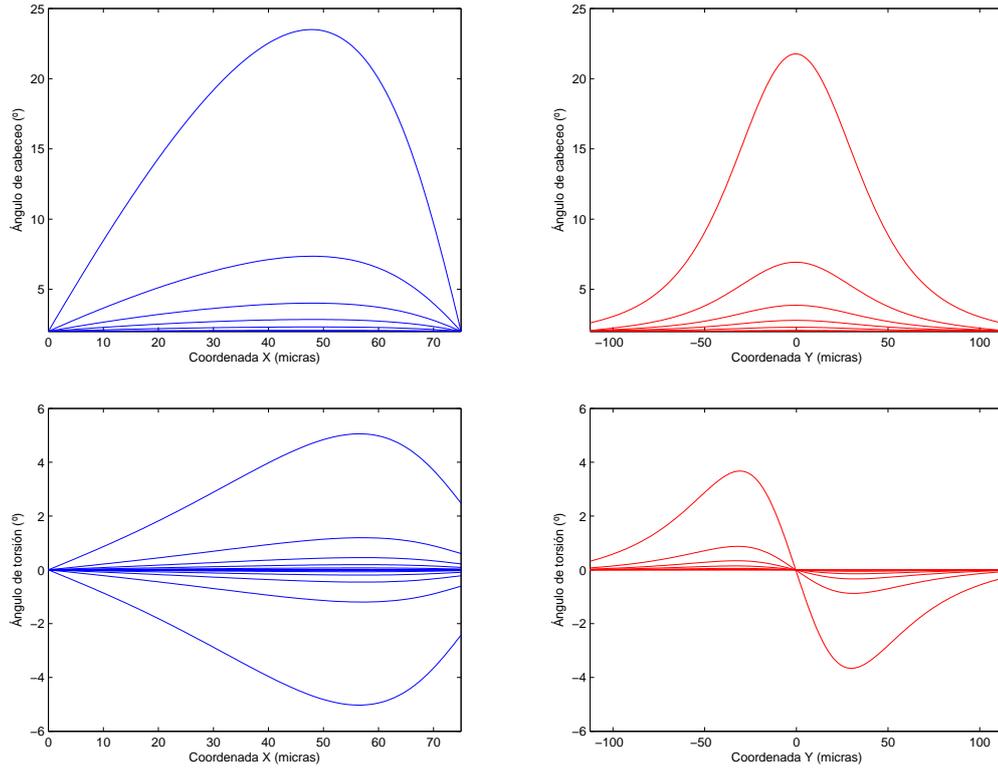


Figura 4.16: Secciones de los ángulo de cabeceo y torsión por los planos que seccionan los valores máximos de cada ángulo, para valores de potencial aplicado de $V = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1, 1.2$ V.

El haz gaussiano que se propaga tiene una intensidad

$$P = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right) dx = ac\sqrt{\pi},$$

con $a = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}$ y $c = \sqrt{2}\sigma^1$, x_0 el centro del paquete gaussiano y σ la anchura del haz. En el caso de querer normalizar la función a cualquier otra potencia deseada, P' ,

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx &= \int_{-\infty}^{\infty} A\Psi(x) \cdot A\Psi(x) dx \\ &= A^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right) dx, \end{aligned}$$

con lo que $A = \sqrt{\frac{P'}{P}}$.

4.2.1. Evolución 1+1D en aproximación escalar y paraxial

Haz centrado en la celda planar

La ecuación (3.9) presenta tres regímenes distintos en el modelo 1D de propagación en el seno del cristal líquido nemático, debido a la no linealidad orientacional. Para bajas potencias, el campo óptico no es capaz de modificar la posición de las moléculas de cristal líquido, por lo que se propaga en un medio lineal e isótropo, difractando.

¹La integral de Poisson es un resultado útil para esta subsección:

$$\int_{-\infty}^{\infty} a \exp\left(-\frac{(x+b)^2}{c^2}\right) dx = ac\sqrt{\pi}$$

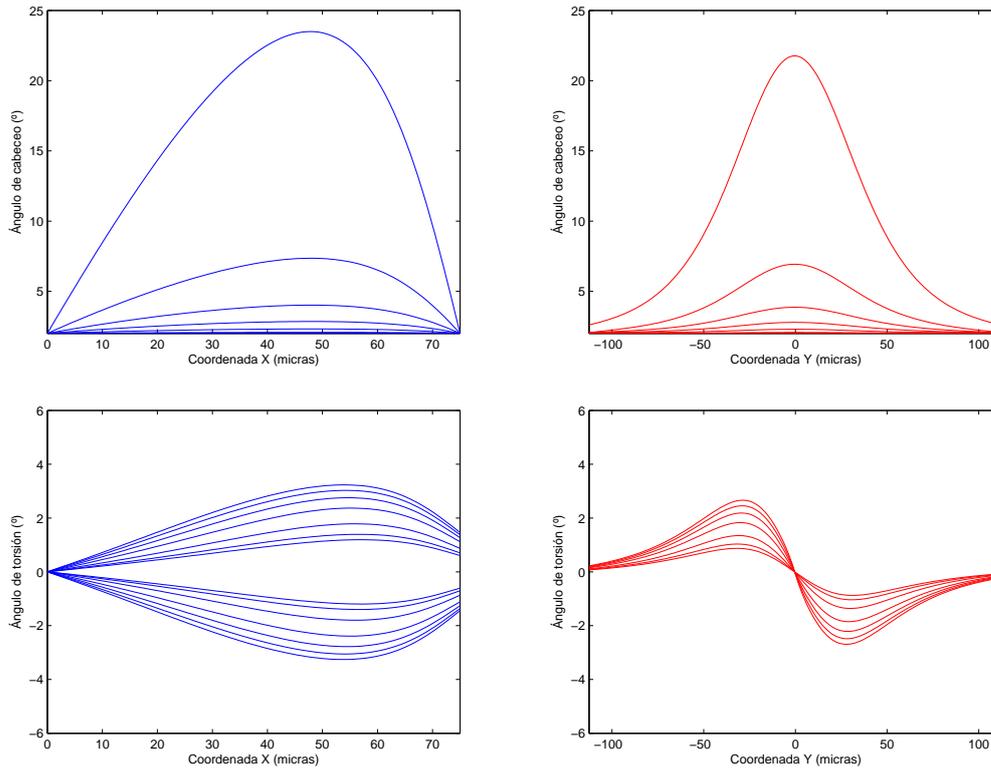


Figura 4.17: Secciones de los ángulo de cabeceo y torsión por los planos que seccionan los valores máximos de cada ángulo, para valores de potencial aplicado de $V = 1$ V y potencias ópticas $P_{opt} = 10^{-5}, 5, 10, 15, 20, 25, 30$ W/mm..

Existe una potencia umbral a partir de la cual, la afectación del campo óptico sobre las moléculas es tal que modifica el índice de refracción del medio hasta conseguir formar una guía por la que se propaga el haz. Se trata de una guía autoinducida por el propio haz en un fenómeno no lineal de acoplamiento óptico-elástico. Cuando se alcanza la potencia del haz que le permite propagarse sin observar difracción durante mucha distancia, se habla de comportamiento tipo solitónico. Sin embargo, nunca llega a ser un solitón, pues el haz gaussiano no es autoestado (estado estacionario) de la guía que induce no linealmente. Se han hecho varios estudios para encontrar de manera iterativa el perfil de los solitones unidimensionales en este tipo de dispositivos [198]. Sin embargo, en la literatura de cristales líquidos suele referirse a este tipo de soluciones como solitones nemáticos o nematicones [152, 199]. Por encima de esta potencia, ocurre un fenómeno de *breathing*, en el que se observa una oscilación periódica de amplitud, cuya frecuencia es tanto mayor cuanto mayor es la potencia óptica involucrada. La figura 4.19 muestra la anchura del haz, en términos de FWHM (*Full Width Half Maximum*), en cada caso. Allí se aprecia mejor lo que queremos decir.

Haz descentrado en la celda planar

Cuando el haz gaussiano es lanzado con un offset respecto del centro de la celda planar, se tienen las distribuciones del ángulo de cabeceo de la figura 4.4 izquierda. Ocurre además que el pico de intensidad del campo óptico no coincide exactamente con el máximo del ángulo de cabeceo en esa situación. Se muestra en la figura 4.21 un ejemplo en el que se ha lanzado el haz con una excentricidad de $e = 33\%$ para que pueda apreciarse el desfase entre los máximos del ángulo de cabeceo y del campo óptico.

Esta diferencia de posición se traslada también al pico del perfil de índice de refracción efectivo, pues va como el $\sin^2 \theta$. De este modo, el haz gaussiano se desplaza hacia el máximo del perfil de índice de refracción, que se encuentra ligeramente desplazado. De esta manera el haz comienza una trayectoria hasta el centro de la celda, durante la que, en todo momento, existe un desfase entre el máximo de índice de refracción y de intensidad del campo. Es este desfase el que *empuja* al campo óptico, arrastrándolo al centro de la celda. Así se produce una trayectoria oscilatoria producida por la fuerza que ejerce la frontera sobre el

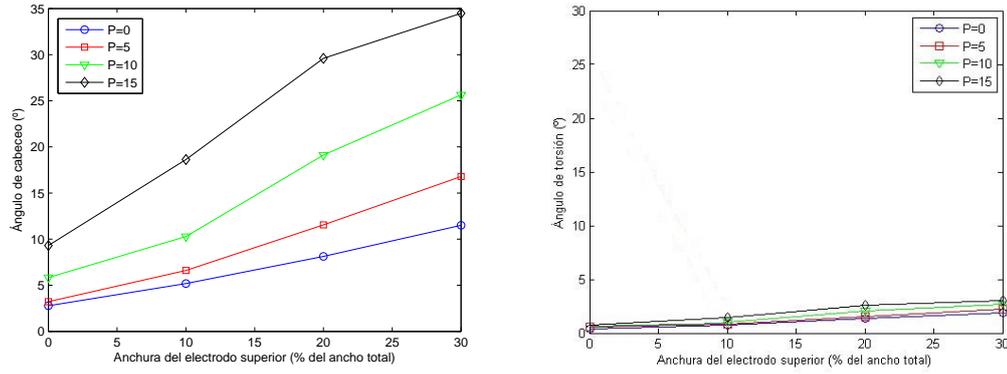


Figura 4.18: Valores máximos de los ángulo de cabeceo (izquierda) y torsión (derecha). Mostramos los valores máximos frente a la anchura del electrodo superior, expresada ésta como porcentaje de la anchura total de la celda. Cada curva de la familia que se representa muestra los valores para una potencia distinta (medida en W/mm), tal y como muestra la leyenda.

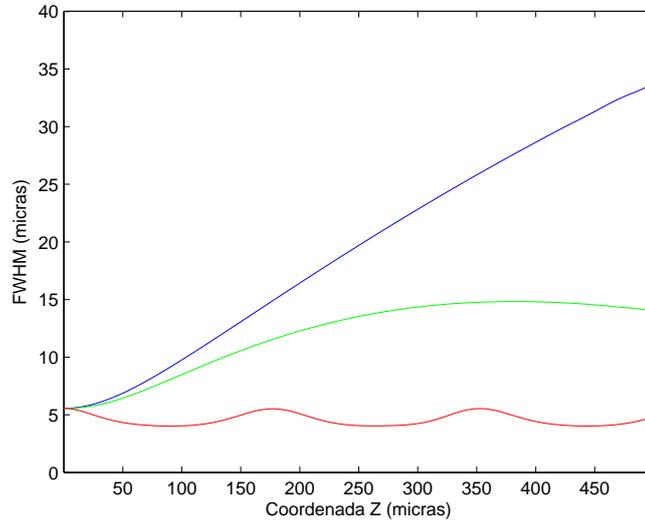


Figura 4.19: Evolución de la anchura del haz para potencias ópticas $P_{opt} = 0.3, 0.4, 0.5 W/mm$.

haz de luz, dado que es ésta la responsable de que los valores máximos no coincidan. Se ha pretendido estudiar analíticamente este movimiento transversal a través de un estudio modulacional [153] y algunas aproximaciones que restringen bastante el régimen de parámetros en los que el modelo que se ha presentado en esta tesis es capaz de trabajar. En esta subsección realizamos un estudio numérico comparativo de lo que ocurre al tratar de reproducir la oscilación transversal con el modelo simplificado que se propone en [200] y lo que ocurre al tratar el modelo completo estudiado por [148] y en esta tesis. El modelo lineal que se utiliza en estudios como [200] asume dos hipótesis: la primera es que el problema orientacional es linealizado, por lo que el modelo sólo es aproximadamente correcto en el régimen de ángulos de cabeceo pequeños. Para que esto tenga algún interés y pueda producir comportamientos tipo solitónico, se resuelve la ecuación de orientación alrededor del ángulo de cabeceo para el cual el par óptico es máximo, esto es $\theta = 45^\circ$. De manera que la configuración de equilibrio es $\theta(x) = 45^\circ, \forall x$ y la excitación óptica lo desplazará unos pocos grados más por encima de este valor. Con estos valores se maximizan los efectos no lineales. La segunda aproximación es más una limitación del modelo, pues no es posible introducir el efecto del campo eléctrico externo. Las ecuaciones del modelo bajo estas circunstancias, a las que nos referiremos de ahora en adelante como modelo A, son

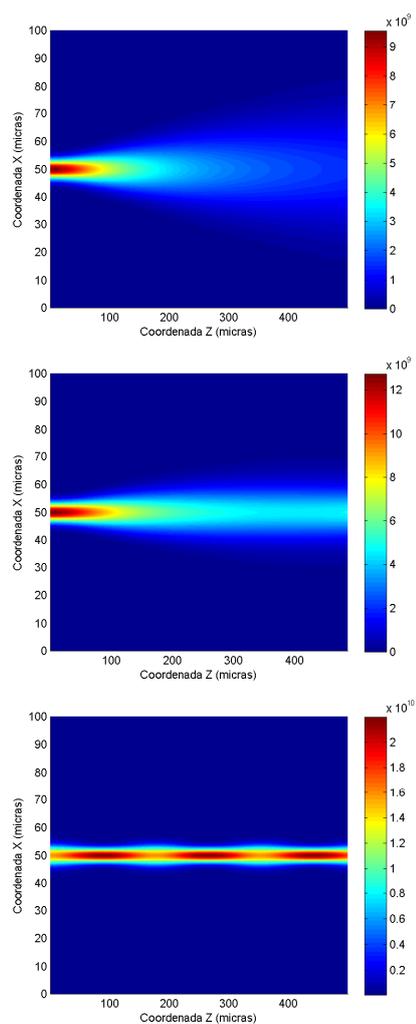


Figura 4.20: Representaciones cenitales de la evolución del campo óptico en aproximación escalar paraxial para valores de potencias ópticas $P_{opt} = 0.3, 0.4$ y $0.5 \text{ mW}/\mu\text{m}$.

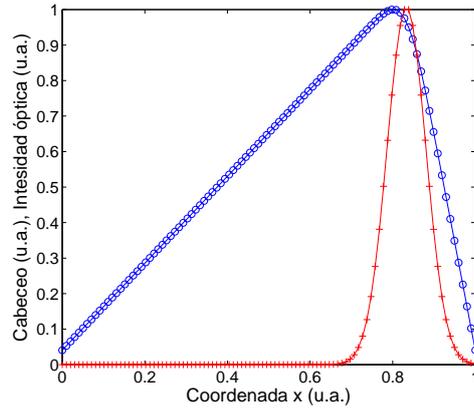


Figura 4.21: Ángulo de cabeceo e intensidad del campo óptico normalizados a la unidad.

entonces,

$$K \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + 2|E_x^o|^2 = 0, \quad (4.1)$$

$$i \frac{\partial E_x^o}{\partial z} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E_x^o}{\partial x^2} + 2\theta E_x^o, \quad (4.2)$$

donde K es la constante elástica, $\theta(x)$ es el ángulo de cabeceo y E_x^o representa la amplitud de la envolvente del campo óptico polarizado linealmente en la dirección x .

La ecuación (4.1) se soluciona analíticamente en [201] para estudiar la oscilación transversal del nematico bajo el efecto de la fuerza de la frontera cuando el haz es lanzado con una excentricidad sobre la celda planar. Allí se emplea el teorema de Eherenfest para estudiar tanto la fuerza ejercida por la frontera como las características de la trayectoria oscilatoria. En particular se muestran las dependencias de su periodo y amplitud con la potencia óptica.

Nosotros utilizamos el sistema que describe el dispositivo de la manera más amplia posible, tal y como se ha explicado anteriormente en el capítulo 2. Recordemos aquí el sistema de ecuaciones que resolvemos, al que nos referiremos de aquí en adelante como modelo B:

$$K \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{1}{2} \epsilon_0 \sin(2\theta) (\Delta \epsilon^s |E_x^s|^2 + \Delta \epsilon^o |E_x^o|^2) = 0, \quad (4.3)$$

$$\int_0^d E_x^s dx = \int_0^d \frac{D_x^s}{\epsilon_{xx}} dx = -V_0, \quad (4.4)$$

$$2jk_0 n_0 \frac{\partial E_x^o}{\partial z} = \frac{\partial^2 E_x^o}{\partial x^2} + k_0^2 (\epsilon - n_0^2) E_x^o, \quad (4.5)$$

donde E_x^s es la amplitud del campo eléctrico externo en la dirección x , D_x^s es el correspondiente campo desplazamiento eléctrico, V_0 es el valor del potencial eléctrico externo aplicado al electrodo, ϵ_0 es la constante dieléctrica del vacío, $k_0 = 2\pi/\lambda_0$ es el vector de onda del campo óptico, n_0 es el índice de refracción lineal, $\Delta \epsilon^s = \epsilon_{\parallel} - \epsilon_{\perp}$ es la birrefringencia del medio para las frecuencias del campo externo, $\Delta \epsilon^o = n_{\parallel}^2 - n_{\perp}^2$ es la birrefringencia óptica, ϵ es la permitividad óptica no lineal (recuérdese que depende del ángulo de cabeceo) y ϵ_{xx} es la permitividad eléctrica. Ya sabemos que las dependencias angulares de las permitividades son del tipo $\epsilon = \epsilon_{\perp} + \Delta \epsilon \sin^2 \theta$, usando las constantes correspondientes en cada caso. El valor de las constantes para nuestras simulaciones es: $K = 12 \times 10^{-12}$ N, $\epsilon_{\parallel} = 19.6$, $\epsilon_{\perp} = 5.1$, $n_{\parallel} = 1.6954$, y $n_{\perp} = 1.5038$. Así, $\Delta \epsilon^s = 19.6 - 5.1 = 15.4$, y $\Delta \epsilon^o = n_{\parallel}^2 - n_{\perp}^2 = 1.6954^2 - 1.5038^2 = 0.613$. También hemos usado $\epsilon_0 = 8.8541878176 \times 10^{-12}$, $n_0 = 1$, y $\lambda_0 = 1064 \times 10^{-9}$ m.

En el capítulo 3 ya hemos explicado la manera iterativa en la que se resuelve este problema acoplado. Vamos a recordarlo aquí brevemente por facilitar la lectura del documento: primero alcanzamos una solución auto consistente de las ecuaciones (4.3) y (4.4) que será utilizada para calcular el campo óptico en el siguiente paso de propagación mediante la ecuación (4.5). Dado que el propio campo óptico afecta también a la orientación molecular, se hace necesario recalculer la solución autoconsistente del problema estático compuesto

por (4.3) y (4.4). Así establecemos otro bucle iterativo que permite alcanzar una solución auto consistente de las tres ecuaciones diferenciales. Este procedimiento se repite para cada paso de propagación.

Nuestro objetivo en esta subsección es comprobar la validez de la aproximación lineal al estudiar la oscilación transversal del nematicon comentada anteriormente. Para comparar los resultados de cada modelo debemos llevar al modelo B al rango de parámetros que lo haga equivalente al modelo A, en la medida de lo posible. Para conseguirlo tomamos $k_0 = 1$, $\epsilon_{\perp} = 1$, $\Delta\epsilon = 4$, $K = \mu\Delta\epsilon\epsilon_0\theta_{max}/2$, $\theta_{max} = 1/2$ y régimen de ángulos pequeños, esto es, $\theta \ll 1$.

La amplitud de esta oscilación transversal depende de la posición inicial del haz y su periodo depende de la potencia óptica y de la excentricidad inicial del haz.

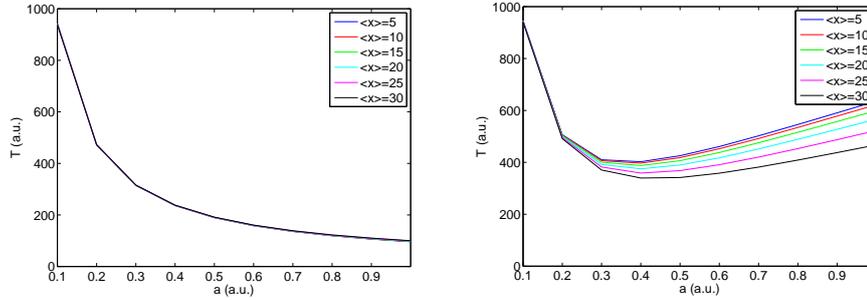


Figura 4.22: Periodo de la oscilación transversal T frente a la amplitud del campo óptico a para el modelo A (izquierda) y para el modelo B (derecha).

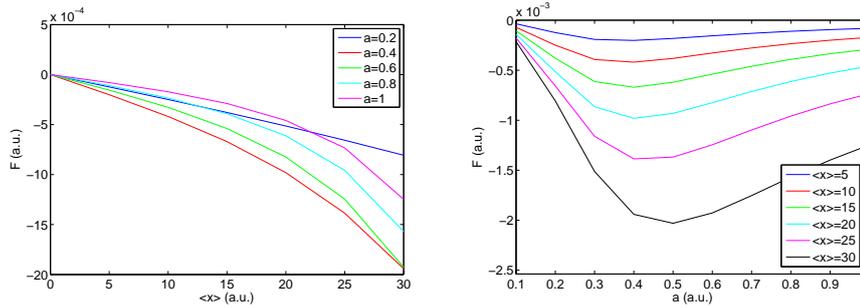


Figura 4.23: Fuerza F ejercida por la frontera frente a posición inicial $\langle x \rangle$ para diferentes amplitudes del campo óptico, a . A la derecha, fuerza F frente a la amplitud del campo óptico a para diferentes posiciones iniciales del haz $\langle x \rangle$.

La dependencia del periodo de oscilación con la amplitud del campo óptico se muestra en la figura 4.22 para ambos modelos. Puede verse cuán diferentes son los comportamientos de ambos modelos. A la izquierda puede verse como el periodo de oscilación para el modelo A sigue una pauta monótona decreciente con la amplitud del campo (ya que la fuerza ejercida por la frontera es lineal con la densidad de potencia). El modelo B, a la derecha de la figura, muestra un comportamiento no monótono, ya que presenta un mínimo del periodo de oscilación cercano al valor 0.4 para la amplitud del campo óptico y para cualquier valor de la excentricidad. Este comportamiento no lineal es muestra de que la linealidad de la intensidad del campo con el índice de refracción no es válida. La figura 4.22 también muestra que la posición inicial del haz no tiene ningún efecto sobre el periodo de oscilación en el modelo A pero sí lo tiene en el modelo B, de acuerdo con [201, 202]. La fuerza ejercida por la frontera ha sido calculada numéricamente a través de la segunda derivada de la trayectoria del centro de masas de la energía del campo óptico. Se sabe que esta fuerza crece conforme nos acercamos a la frontera [53]. La figura 4.23 muestra las dependencias de la fuerza con la posición inicial del haz (parte izquierda) y con la amplitud del campo óptico (parte derecha de la figura). Allí puede verse la relación no lineal entre la fuerza y la amplitud del campo óptico que hace aparecer un mínimo, responsable a su vez del mínimo que aparece en la dependencia del periodo de oscilación con la amplitud del campo óptico.

La evolución del pico de amplitud del campo óptico puede observarse en las figuras 4.24 y 4.25. Vemos que los resultados son cualitativamente (incluso cuantitativamente) iguales a bajas potencias mientras la

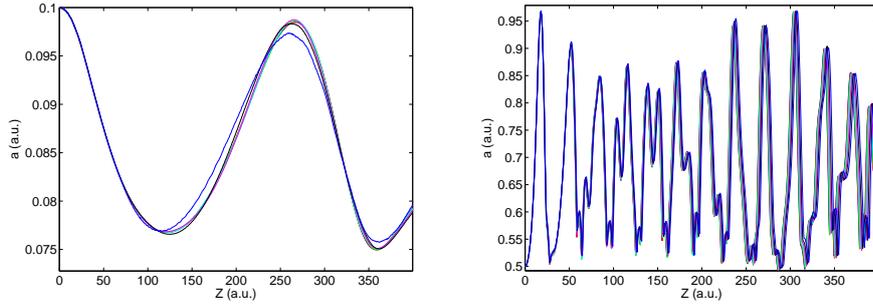


Figura 4.24: Evolución del pico de amplitud del campo óptico a para $a = 0.1$ (izquierda) y $a = 0.5$ (derecha) usando el modelo A. Cada color representa un valor distinto de la posición inicial $\langle x \rangle$.

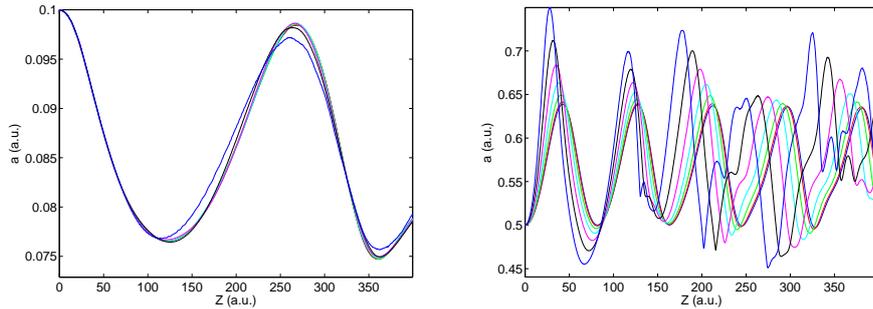


Figura 4.25: Evolución del pico de amplitud del campo óptico a para $a = 0.1$ (izquierda) y $a = 0.5$ (derecha) usando el modelo B. Cada color representa un valor distinto de la posición inicial $\langle x \rangle$.

aproximación linealizada del modelo A es válida. Sin embargo, conforme la potencia crece van apareciendo diferencias. Primero, la frecuencia de oscilación del pico de amplitud crece conforme crece la potencia óptica de manera proporcional en el modelo A. No ocurre así en el modelo B. Este fenómeno está directamente relacionado con los valores artificialmente altos que alcanza el valor del ángulo de cabeceo en el modelo A, que, por cierto, no está acotado. Valores grandes del ángulo de cabeceo implican índices de refracción efectivos más atractivos, pues están relacionados linealmente como $\epsilon = 2\theta$ para el modelo A, mientras que el modelo B ofrece una dependencia más realista al imponer $\epsilon = \epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \sin^2 \theta$. Esta última expresión ofrece una saturabilidad del índice de refracción conforme el ángulo de cabeceo se acerca a su valor máximo ($\theta = 90^\circ$), algo que no sucede en el modelo A y que se trata, sin duda, de un artificio indeseado consecuencia de un modelo incompleto o inválido en el régimen de parámetros de θ grande. En segundo lugar, el modelo A muestra que las amplitudes del campo óptico no son sensibles a los cambios de posición inicial del haz, pues todas las curvas solapan como puede apreciarse en la figura 4.25. No ocurre así en el modelo B, en el que la amplitud del campo óptico no evoluciona igual al cambiar la posición inicial del haz. Por último, puede verse el efecto de la saturabilidad de la no linealidad del modelo B, que limita tanto el valor del ángulo de cabeceo, como el de la amplitud del campo óptico. El modelo A no presenta esta saturabilidad y por tanto, no distingue entre valores de ángulo por encima o por debajo de $\theta = \pi/2$, lo cual incide a su vez en un mayor autoenfoco del campo óptico, entrando en dinámicas violentamente autoenfocantes.

Modos de propagación para guías inducidas por la frontera. Solitones topológicos

Presentamos en esta subsección cuales son los modos de propagación de una guía inducida por la frontera cuando la celda planar presenta condiciones de contorno tipo Dirichlet asimétricas, en particular $\theta_0 = 0^\circ$ y $\theta_1 = n\pi$ para el valor del ángulo de cabeceo en los electrodos inferior y superior respectivamente, con $n \in \mathcal{Z}$. Este tipo de soluciones para el ángulo de cabeceo han sido estudiadas en la subsección 4.1.1.

En ausencia de excitaciones eléctricas, sin campo eléctrico externo ni campo óptico, la ecuación que rige

la orientación molecular, ecuación (4.3), resulta en la ecuación de Laplace homogénea

$$K \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} = 0, \quad (4.6)$$

cuya solución analítica es bien conocida, pues es una recta que conecta los valores de la función solución en la frontera. Esta solución cumple con la condición de curvatura nula que impone la ecuación de Laplace a la función solución. Por tanto, tenemos que la solución a la ecuación (4.6) es $\theta(x) = \frac{n\pi}{d}x$, siendo $n\pi$ el valor de la función en la frontera situada en $x = d$ y d el grosor de la celda o la separación de electrodos, como queramos verlo. Sustituyendo este valor del ángulo de cabeceo en la permitividad dieléctrica óptica que aparece en la ecuación de propagación del campo óptico (4.5) tendremos la ecuación para la propagación de luz bajo estas circunstancias

$$2jkn \frac{\partial A}{\partial z} = \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + k^2 \left(\left(\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon^o \sin^2\left(\frac{n\pi}{d}x\right) \right) - n^2 \right) A, \quad (4.7)$$

que rige la evolución de un haz bajo la influencia de un perfil de índice efectivo de variación gradual que constituye una guía inducida por la frontera. Si nos preguntamos por la forma que poseen los modos de propagación de semejante guía, procedemos por separación de variables sobre la ecuación (4.7) a obtener la ecuación estacionaria, que resulta

$$\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + \left[k^2 \left(\left(\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon^o \sin^2\left(\frac{n\pi}{d}x\right) \right) - n^2 \right) - E_m \right] X = 0. \quad (4.8)$$

Esta ecuación puede reescribirse también como

$$\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + \left[k^2 \left(\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon^o \left(\frac{1}{2} (1 - \cos\left(\frac{2n\pi}{d}x\right)) \right) \right) - n^2 \right) - E_m \right] X = 0, \quad (4.9)$$

de la que, reordenando coeficientes, podemos obtener

$$\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + [a - 2q \cos(2x)] X = 0, \quad (4.10)$$

con $a = k^2 \left(\epsilon_{\perp} + \frac{\Delta\epsilon^o}{2} - n^2 \right) - E_m$ y $q = k^2 \frac{\Delta\epsilon^o}{4}$. La ecuación (4.10) resulta ser la ecuación de Mathieu, conocida, entre otras cosas, en el tratamiento de las ecuaciones de Maxwell en coordenadas elípticas, pero no muy difundida en nuestro contexto de propagación de luz en cristales líquidos en coordenadas cartesianas. Aplicando el teorema de Floquet-Bloch, nos preguntamos por soluciones de la ecuación (4.8) de la forma $\varphi_p(x) = \exp(ipx)u_p(x)$ siendo p el valor del pseudo momento asociado a la solución $\varphi_p(x)$ y con $u_p(x)$ una función π -periódica. Sustituyendo esta forma de soluciones en la ecuación (4.8) tenemos la ecuación

$$\frac{\partial^2 u_p}{\partial x^2} + 2ip \frac{\partial u_p}{\partial x} + (a - 2q \cos(2x) - p^2) u_p = \epsilon u_p, \quad (4.11)$$

que representa un problema de autovalores que caracterizan los autovectores con pseudo momento p de la guía inducida por la frontera de variación gradual del índice de refracción.

Se puede ver en la figura 4.26 la evolución de un haz gaussiano en una guía inducida por la frontera, en el sentido explicado en este apartado. Se propaga un haz de potencia óptica suficientemente baja como para que no afecte a la orientación molecular. Se trata pues de una propagación lineal. No se aplica en este caso voltaje externo, por lo que el efecto de confinamiento que se aprecia se debe en exclusividad a la guía inducida por la frontera. El haz se lanza exactamente centrado en la celda. No obstante, si calculamos el centro de masas de la energía óptica y graficamos su evolución, apreciamos una pequeña oscilación de algo más de una micra de amplitud. La amplitud del campo óptico también sigue una evolución oscilatoria. Sus valores máximos además decrecen conforme avanza el haz, mientras que los mínimos no siguen una tendencia monótona.

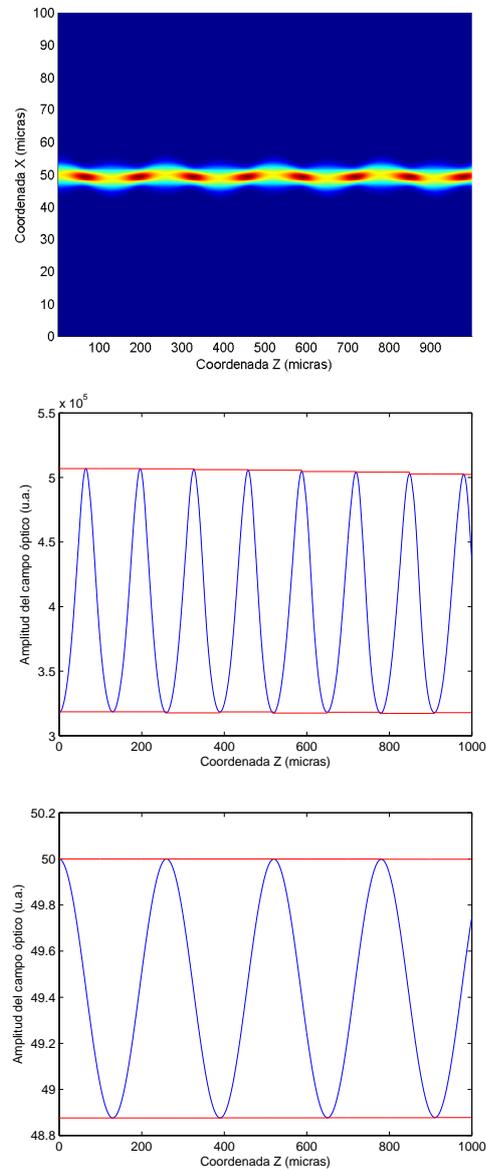


Figura 4.26: Evolución de un haz gaussiano en el régimen lineal en la guía inducida por las condiciones de frontera asimétricas del ángulo de cabeceo. La primera figura representa la trayectoria de la intensidad de campo óptico. La figura central muestra la evolución del pico de amplitud del campo óptico. La última figura refleja el comportamiento oscilatorio del centro de masas de la energía.

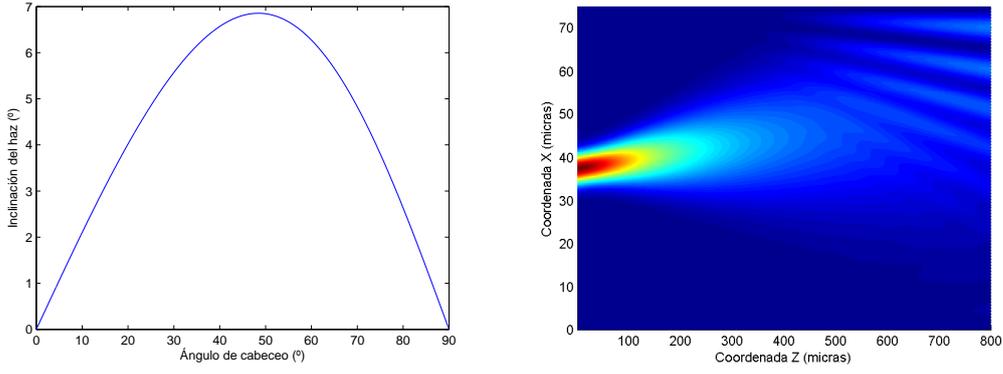


Figura 4.27: A la izquierda se representa el ángulo de inclinación inducida por la anisotropía en el plano XZ en función del ángulo de cabeceo del cristal líquido. A la derecha se muestra la evolución de la intensidad del campo óptico, sufriendo reflexión al llegar a la frontera debido a la trayectoria inclinada inducida por la anisotropía.

4.2.2. Evolución 1+1D vectorial. Anisotropía en el plano XZ

Es bien conocido que el efecto que tiene la anisotropía en el plano de evolución XZ en una situación $1 + 1D$ es la inclinación de la trayectoria debido a los distintos valores del tensor dieléctrico en direcciones distintas [148].

Este ángulo de inclinación del haz δ puede calcularse como

$$\tan \delta = \frac{\epsilon_{xz}}{\epsilon_{zz}} = \frac{\Delta\epsilon \sin \theta \cos \theta}{\epsilon_{\perp} + \Delta\epsilon \cos^2 \theta}, \quad (4.12)$$

cuya representación gráfica para el cristal líquido $E7$ que se estudia en esta tesis puede verse en la figura 4.27, a la izquierda. En la figura 4.28 puede verse el comportamiento de un haz en propagación lateral teniendo en cuenta la anisotropía en el plano XZ . En ausencia de campo eléctrico y de no linealidad óptica orientacional, el haz se desvía un ángulo que depende del valor del ángulo de cabeceo del medio (según la ecuación (4.12)), quien, a su vez, viene dado por el valor del pretilt en la frontera.

Así, para los valores pequeños que suelen emplearse experimentalmente la desviación es pequeña. Puede verse este comportamiento en la figura 4.27, en la que el voltaje aplicado es $V = 0$ V y la potencia óptica $P_{opt} = 0.03$ mW/ μ m. Cuando, en ausencia de campo eléctrico externo, incrementamos la potencia del campo óptico, aparece la no linealidad orientacional. Dado que nos encontramos en el caso vectorial, el campo sufrirá una oscilación vectorial que, junto con la no linealidad orientacional, producirá una guía generada por la propia luz que, por tanto, seguirá su trayectoria. Este comportamiento puede verse en la figura 4.28, en la que se han aplicado potencias ópticas de $P_{opt} = 0.375, 0.625$ y 0.75 WmW/ μ m.

En el caso de que apliquemos un campo eléctrico externo, este campo produce una reorientación molecular, como ya sabemos, del tipo representado en la figura 4.1. Esto afecta al ángulo de inclinación δ y provoca una mayor inclinación del flujo de energía óptica en la celda, como puede verse en la figura 4.29, en la que se ha aplicado $V = 1$ V. Si, además, hacemos concurrir potencia óptica en el régimen no lineal, tenemos un mayor efecto de auto enfoque, como puede verse en la misma figura.

4.2.3. Modos de propagación de una guía anisótropa inducida eléctricamente

En esta subsección se muestran los modos de propagación de una guía inducida por un potencial eléctrico aplicado externamente sobre los electrodos de una celda planar con un electrodo discontinuo como el de la figura 2.3(b). La tensión eléctrica aplicada al electrodo superior produce una distribución de campo eléctrico externo estático en el seno del cristal líquido de manera que influye sobre la posición molecular del cristal líquido quien, a su vez, influye sobre el perfil de índice efectivo que afecta a la luz.

Aplicando una tensión eléctrica de $V_0 = 1$ V, sobre los electrodos, las distribuciones del campo eléctrico y de los ángulos que definen la posición del director son los que se muestran en la figura 4.30.

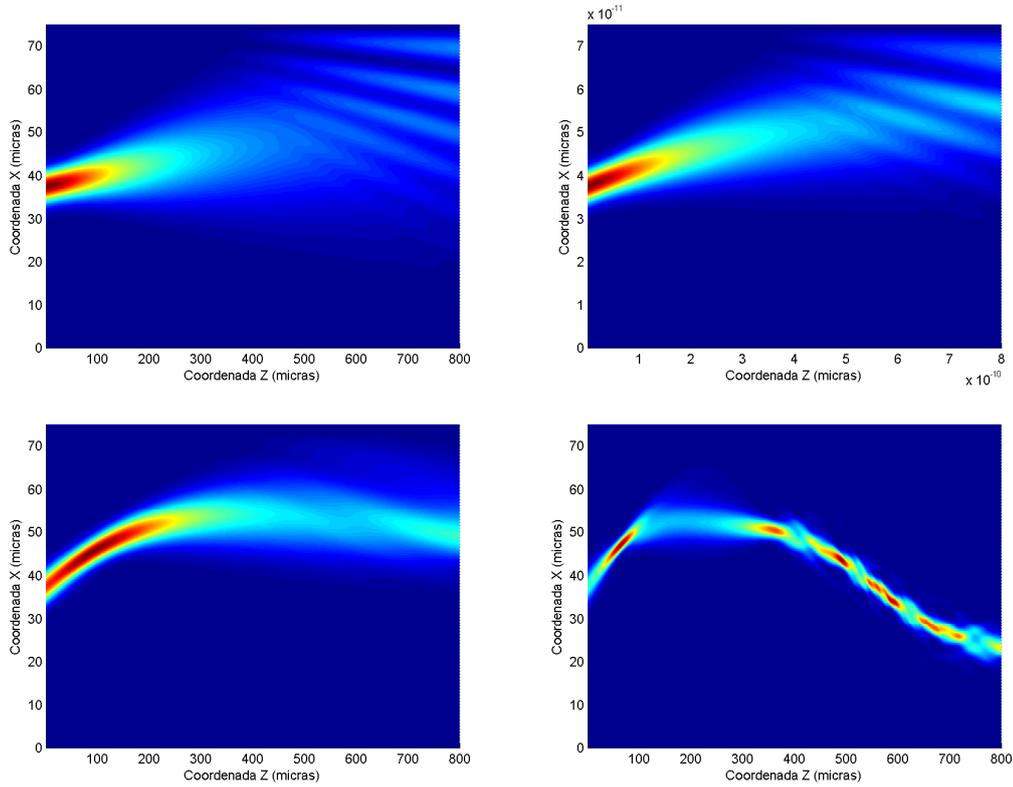


Figura 4.28: Evolución del campo h_y en propagación vectorial, en ausencia de campo eléctrico externo y con potencias ópticas de $P_{opt} = 0.375, 0.05, 0.625$ y $0.75 \text{ WmW}/\mu\text{m}$.

Puede verse como la discontinuidad del electrodo superior hace aparecer las dos componentes transversales del campo eléctrico, E_x y E_y . La componente en la dirección x de este campo eléctrico se encarga de alinear las moléculas del nemático (el eje mayor del elipsoide que las representa) en la dirección x , provocando pues cambios en el ángulo de cabeceo $\theta(x, y)$. Sin embargo, la componente y del campo pretende alinear las moléculas en el eje y , con lo que obliga a las moléculas a girar en el plano paralelo a los electrodos. Así aparece el ángulo de torsión $\varphi(x, y)$, empujado por las componentes y de los campos eléctricos, en este caso resultado del voltaje aplicado por un electrodo discontinuo. Estos campos eléctricos experimentan valores críticamente elevados en las proximidades de la frontera del electrodo para luego moderar su valor conforme nos alejamos de esta frontera para adentrarnos en el seno del cristal líquido. Podemos ver los efectos de las componentes del campo eléctrico sobre los ángulos de cabeceo y torsión en la figura 4.30. El ángulo de cabeceo presenta una variación muy importante en la zona en la que se encuentra el electrodo superior, pues allí es donde el campo eléctrico en la componente x es más intenso, y, por tanto, donde más reorientación molecular se produce. Puede apreciarse también como el valor máximo del ángulo de cabeceo no se encuentra en la mitad de la celda planar, sino que se encuentra ligeramente desplazado hacia el electrodo superior. En cuanto al ángulo de torsión, vemos que la distribución del mismo tiene una simetría impar con respecto al eje $y = 0$, consecuencia directa de la simetría impar de la componente y del campo eléctrico, que es quien induce este movimiento de torsión. Nótese el empleo de la frontera transparente para todos los campos en la dirección y . Puede apreciarse también como los valores máximos que alcanza el ángulo de torsión son bastante menores que los del ángulo de cabeceo para la misma tensión eléctrica.

En la figura 4.31 se aprecia cuales son algunos de los autoestados, los seis primeros modos de propagación, de la guía anisótropa inducida en el cristal líquido nemático mediante la aplicación del campo eléctrico externo. Se han calculado resolviendo la ecuación (2.56). De tener, un código de propagación $2D+1$ vectorial, podríamos apreciar el batido de estos modos en la propagación del haz en la guía inducida.

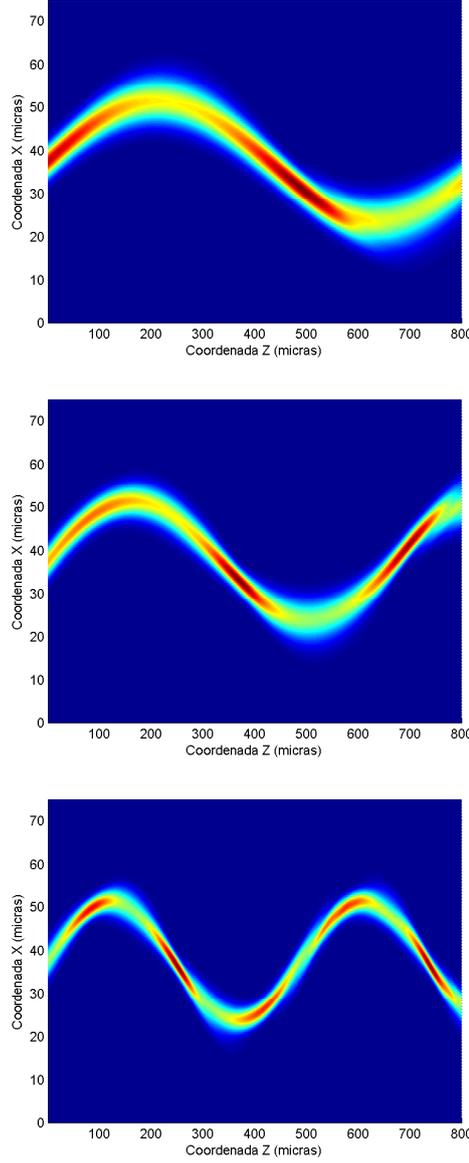


Figura 4.29: Evolución del campo h_y aplicando una tensión de $V = 1$ V y unas potencias ópticas de $P_{opt} = 0.03, 0.11, 0.24$ $mW/\mu m$.

4.3. Evolución 2+1D paraxial escalar

En esta sección mostramos las simulaciones correspondientes a la evolución bidimensional escalar paraxial de un haz gaussiano en una celda planar de cristal líquido nemático. Como ya ocurriera en el caso unidimensional, existen tres regímenes de potencia distintos que conducen a comportamientos distintos del haz. Existe un pequeño rango de potencias para las que el haz es capaz de generar una no linealidad efectiva debida a la orientación molecular que logra compensar la difracción, generando una solución tipo solitónico. Por debajo de esta potencia el haz difracta, y por encima se produce un colapso provocado por el autoenfoco y permitido por la paraxialidad de la ecuación. El caso difractivo puede observarse en la figura 4.32, en la que se muestra a la izquierda la difracción del haz en su evolución (2+1)D y a la derecha se muestra la evolución de la anchura (utilizando el FWHM de la intensidad) del haz. Como no existe no linealidad, apenas hay afectación molecular por parte de la potencia óptica, con lo que nos encontramos en este caso con un medio isótropo, por lo que la evolución de la anchura del haz en las dos direcciones es la misma, pues existe simetría rotacional tanto en el medio como en la solución propagante.

La figura 4.33 muestra la propagación de un nematicón en la celda planar de CLN. Debe decirse que encontrar la potencia exacta para la cual ocurre el balance más exacto posible para compensar la difracción,

por tanteo, es un problema numérico costosísimo. Tengamos en cuenta que esta propagación es no lineal y, aunque no estamos utilizando el acoplo con el campo eléctrico externo puesto que no hay, el cálculo es bastante costoso, pues hay muchos pasos de propagación. En general, cualquier simulación en la que aparezca la no linealidad orientacional es computacionalmente costosa. Puede apreciarse en la pseudo perspectiva de la izquierda como el haz parece no deformarse a simple vista. Si en cambio estudiamos lo que hace la anchura, en términos del FWHM de la intensidad, sí que apreciamos cambios, pero entendemos que, para la longitud de propagación elegida, son suficientemente pequeños como para considerar aquí una propagación tipo solitónico.

4.3.1. Acopladores direccionales ópticos

Los acopladores direccionales son dispositivos utilizados en radio tecnología utilizados para desviar la potencia de un canal hacia otro canal. Los dos canales se sitúan lo suficientemente cerca como para que ocurra un acoplamiento significativo de la potencia. Una vez se ha transferido la potencia de un canal a otro se separan para impedir continuos acoplamientos y conseguimos así transferir la potencia de un canal a otro. Nuestra intención en este apartado es construir un acoplador direccional óptico utilizando celdas planares de cristal líquido nemático. Han habido varios trabajos relacionados con acopladores direccionales ópticos, pero ninguno en el contexto de cristales líquidos. La figura 4.34 muestra cual es la geometría del dispositivo. Puede verse que se trata de un dispositivo de dos canales sobre los que aplicamos tensiones eléctricas distintas. De esta manera induciremos dos guías sobre el cristal líquido en las inmediaciones de cada uno de los electrodos. Estas guías serán tanto más confinantes cuanto mayor sea el potencial aplicado, pues la orientación molecular se habrá visto más afectada y, consecuentemente, el perfil de índice de refracción.

Aplicando unos voltajes de $V = 1$ y $V = 1.25$ voltios a los electrodos uno y dos respectivamente, conseguimos un índice de refracción como el que se ven en la figura 4.35. En este dispositivo lanzamos un haz centrado en el canal uno y observamos como ocurre la transferencia del canal uno al dos y viceversa. En la figura 4.36 mostramos la evolución de la trayectoria del haz, calculada ésta como la posición del centro de masas de la energía en la dirección transversal y . Podemos ver como, además de desplazarse hacia el canal 2 en la dirección y , el haz también sufre un desplazamiento en la dirección x debido a la ubicación del pico de índice de refracción. La tensión aplicada al electrodo discontinuo induce una orientación que es máxima no en el centro de la celda, sino algo más cerca del electrodo discontinuo.

4.3.2. Osciladores transversales en el régimen lineal

La no linealidad orientacional de los CLN puede utilizarse para producir fenómenos de conmutación todo óptica. En estos casos la no linealidad óptica establece diferencias de comportamiento de un haz en un mismo dispositivo y con los mismos parámetros de funcionamiento, siendo la potencia óptica la variable que separa unos comportamientos de otros. Así es como se reproducen fenómenos de conmutación óptica. Sin embargo, no tenemos esta posibilidad de control del haz en el régimen lineal. En esta sección presentamos un dispositivo electro-óptico que permite alterar la trayectoria del haz en el régimen lineal, induciendo oscilaciones transversales. Las oscilaciones transversales de haces en cristales líquidos ocurren generalmente como efectos no lineales orientacionales. Se pueden conseguir lanzando un haz excéntrico con potencia suficiente para afectar a la orientación molecular, como hemos visto en este mismo capítulo. Se pueden conseguir también como consecuencia natural de la anisotropía del medio en el plano de evolución. Sin embargo, en estos casos las oscilaciones suelen ser efectos indeseados e ineludibles (más que alterando la dirección de lanzamiento del haz sobre la celda). Nuestro dispositivo permite modificar a voluntad tanto amplitud como frecuencia de oscilación en función de la geometría del dispositivo y la tensión aplicada al mismo.

El dispositivo con el que trabajamos tiene un electrodo discontinuo en la pared superior donde aplicamos tensiones positivas referidas a masa, representada por el electrodo continuo de la pared inferior. Podemos ver la configuración del dispositivo en la figura 2.3(b). Vamos a utilizar el electrodo de la pared superior para generar un potencial asimétrico en y , de manera que generemos una guía inducida externamente asimétrica en esa dirección. Lanzando un haz en el régimen lineal, en el borde que tiene menores valores del índice de refracción, el haz se sentirá atraído por el máximo del perfil de la guía inducida externamente y se desplazará por tanto en el sentido positivo del eje y hasta alcanzar la zona donde el perfil de índice de refracción es máximo. Podemos ver en la figura 4.38 la distribución de potencial en el seno de la celda, así como la

distribución de los ángulos de cabeceo y torsión y el perfil de índice de refracción efectivo. Nótese que los valores para el ángulo de torsión son un orden de magnitud menores que los del ángulo de cabeceo, por lo que no contemplamos el efecto de despolarización del haz provocado por la existencia de componentes y del campo eléctrico inducido por el electrodo. Se aprecia mejor en la figura 4.37 que el hecho de aplicar una rampa positiva en el electrodo discontinuo genera la asimetría del potencial en la dirección y que buscábamos para desplazar el haz lateralmente.

Una vez el haz se ha situado cerca del otro extremo de la guía, empujado por el potencial a esa zona, alteramos el potencial aplicado al electrodo discontinuo. Aplicamos esta vez una rampa negativa con la intención de empujar al haz en la otra dirección y conseguir así que oscile. Los valores de potencial, ángulos y perfil de índice efectivo son las imágenes especulares de las distribuciones que se han mostrado en la figura 4.38. En evolución, observamos una oscilación al conseguir que el haz cambie de sentido su trayectoria y vuelva a la zona donde fue lanzado, como puede verse en la figura 4.39 izquierda. Llegados a este punto volvemos a conmutar la tensión aplicada aplicando otra vez la rampa positiva para empujar al haz en el sentido contrario y continuar así el movimiento oscilatorio. En el régimen no lineal, el propio haz induce una guía por interacción no lineal con el medio que le permite no verse afectado por la tensión externa y continuar con una trayectoria rectilínea en tanto que ha quedado confinado en la guía que él mismo induce, apareciendo así el comportamiento tipo solitónico. Ver figura 4.39 derecha.

El circuito eléctrico empleado hace uso de un fototransistor que gobierna el encendido y apagado de un relé. La figura 4.40 muestra el circuito empleado. Allí se muestra el acoplo electro-óptico a través de un diodo emisor de luz que excita la base del fototransistor para ponerlo en conducción. Nosotros reemplazaríamos la fuente de luz, quitando el diodo y dejando ese papel al haz que es guiado por el dispositivo. El relé es un dispositivo mecánico gobernado eléctricamente compuesto por un conmutador doble. Dispone de seis contactos y es capaz de trabajar en dos posiciones distintas. La primera posición, la mostrada en la figura puede corresponderse a la de relé armado, con tensión eléctrica en sus bornes. Si el relé está armado es porque el fototransistor está en conducción, por lo que el haz está excitando la base de este fototransistor. En esta situación la corriente eléctrica sale del positivo de la pila y pasa por los puntos C1-B1-P5-P4-P3-P2-P1-B2-C2, de manera que la tensión en el punto P5 es máxima ($V_{P5} = V_{cc}$) y en P1 es mínima ($V_{P1} = 0$). Así conseguimos en los puntos intermedios una distribución lineal de tensión para el caso en el que todos los resistores son iguales en valor. Cuando el haz deja de iluminar la base del fototransistor, éste entra en corte bloqueando entre sus terminales colector y emisor toda la tensión que da la pila. Así al relé no le llega tensión y entonces se desarma, cambiando el estado del conmutador doble. Ahora la intensidad de corriente sale de la pila y atraviesa los puntos C1-A1-P1-P2-P3-P4-P5-A2-C2, siendo que la tensión en P1 ahora es la máxima y en P5 es la mínima, al revés de lo que ocurría en la otra posición del conmutador doble. De esta manera se genera una rampa de tensión definida por los puntos intermedios situados entre las resistencias, que tiene pendiente contraria a la que se generaba en la otra posición del relé, que es lo que pretendíamos conseguir.

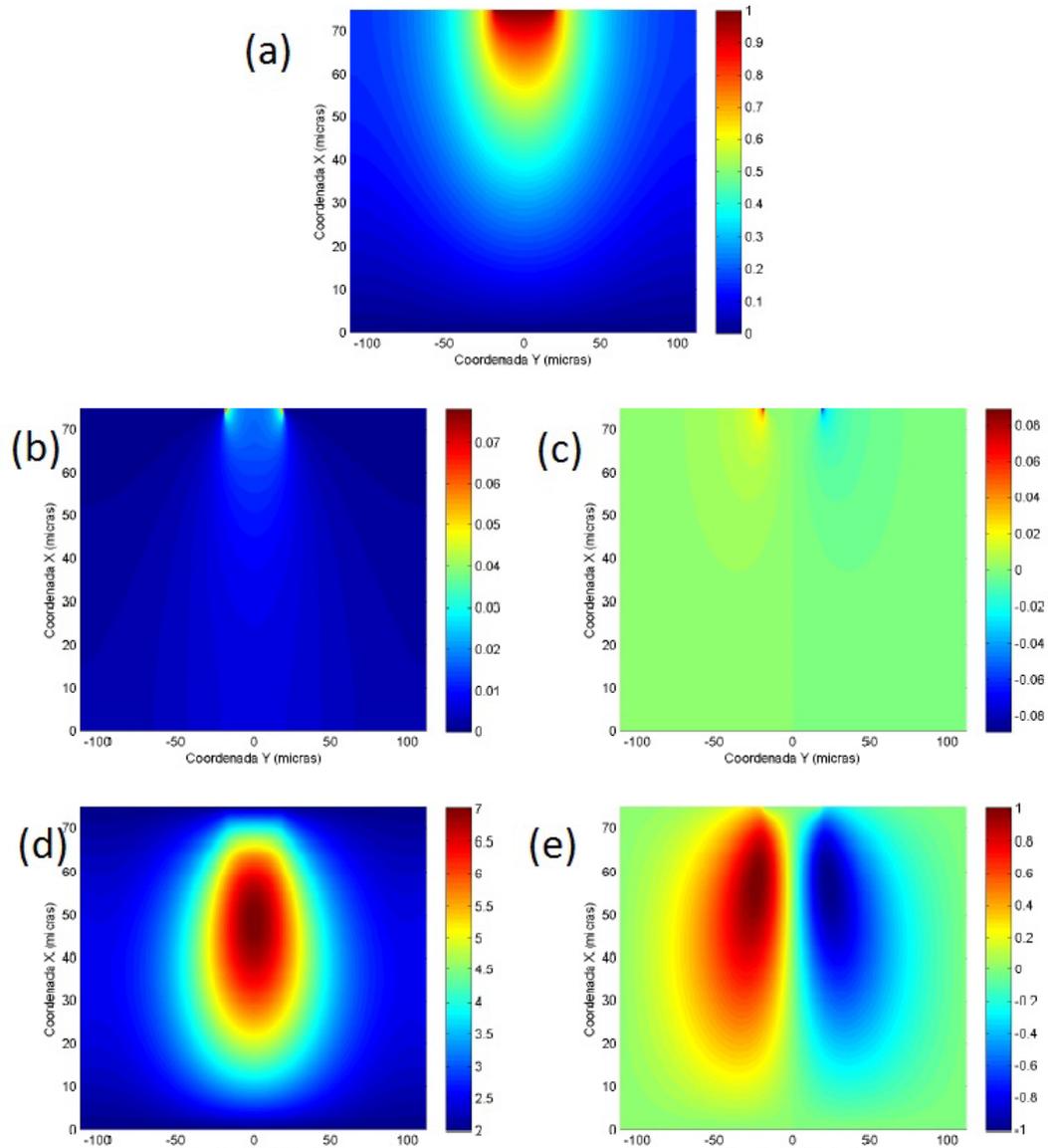


Figura 4.30: (a) Distribución de voltaje eléctrico en el seno del cristal líquido con aplicación de $V = 1$ V en el electrodo superior. (b) y (c) Distribución de las componentes x e y del campo eléctrico inducido por el voltaje externo, respectivamente. Nótese que la componente E_x es par, mientras que la E_y es impar, propiedad que se traslada a la distribución de los ángulos de cabeceo y de torsión respectivamente, pues son los causantes de tales deformaciones (gráficas (d) y (e) respectivamente). Los ángulos se muestran en grados.

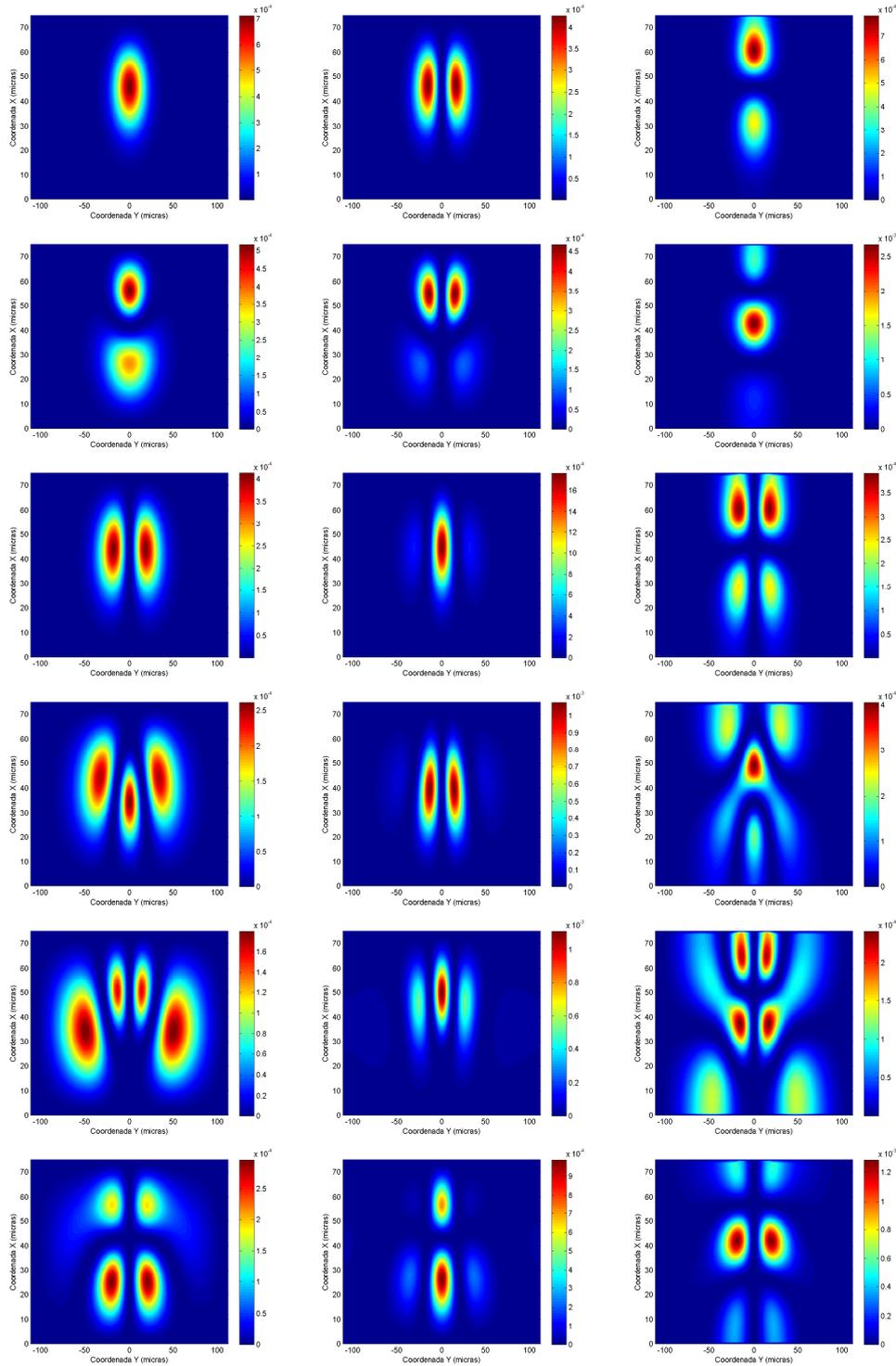


Figura 4.31: Cada una de las filas se corresponde al triplete de modos de propagación H_z , E_x y E_y , leídos de izquierda a derecha. La primera fila se corresponde con el modo fundamental, la segunda con el primer modo excitado, la tercera con el segundo modo excitado y así hasta el quinto modo excitado. EN todos los casos estamos representando intensidades de campo.

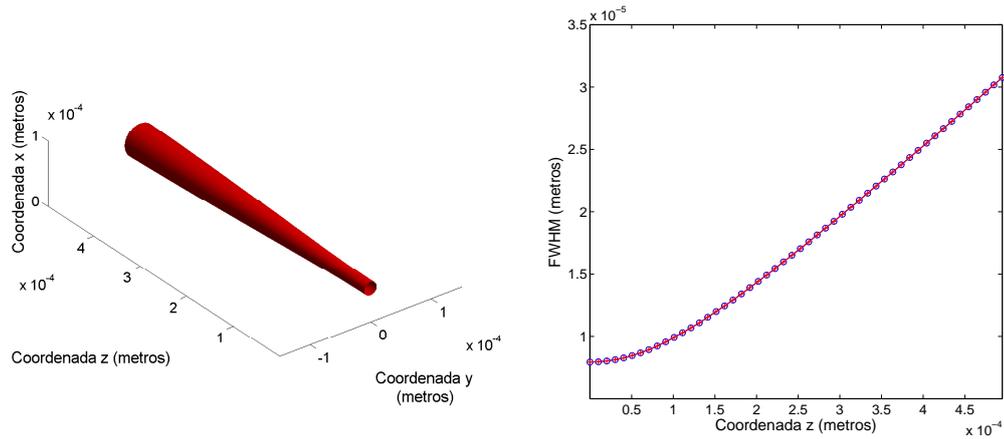


Figura 4.32: Evolución de un haz en el régimen lineal, sin excitaciones eléctricas ni ópticas afectando a la orientación molecular.

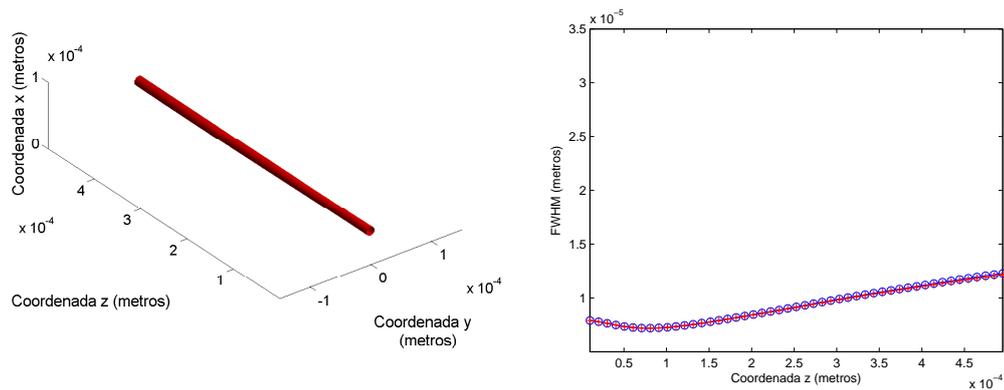


Figura 4.33: Evolución de un haz en el régimen solitónico, sin excitación eléctrica externa.

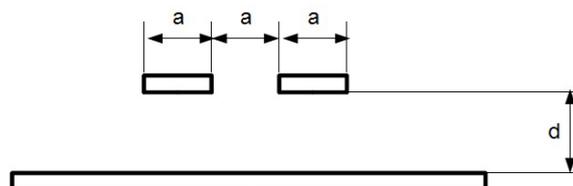


Figura 4.34: Configuración del dispositivo de celda planar con dos electrodos discontinuos en la pared superior. La anchura de los electrodos se representa por $a = 15 \mu\text{m}$, que es, a su vez, la distancia que separa los electrodos. Las tensiones aplicadas son de $V = 1 \text{ V}$, en el electrodo de la izquierda y $V = 1.25 \text{ V}$, en el de la derecha. La separación entre placas, d , es de $75 \mu\text{m}$.

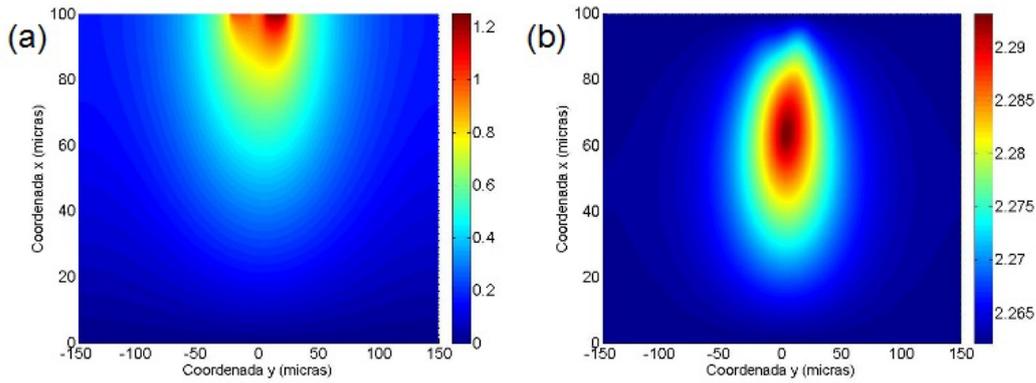


Figura 4.35: (a) Distribución de tensión eléctrica en el seno del dispositivo. El electrodo de la izquierda, electrodo 1, tiene aplicado 1 V, mientras que el de la derecha, electrodo 2, tiene aplicado 1.25 V. (b) Índice de refracción producido por el dispositivo. Sólo se aprecia afectación del campo eléctrico externo, por lo que nos encontramos en el régimen lineal.

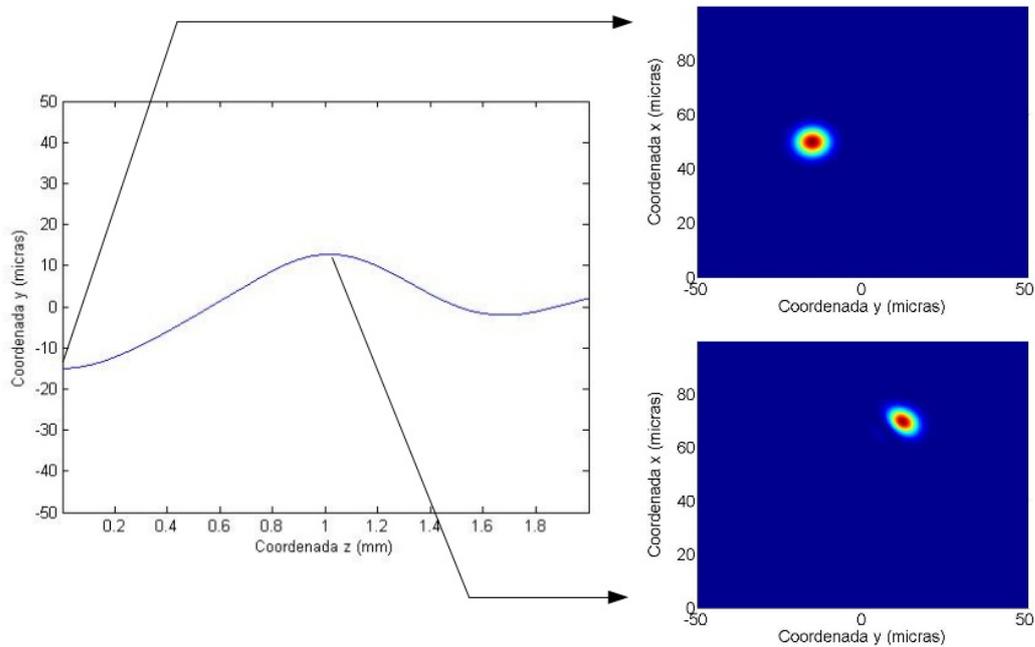


Figura 4.36: Trayectoria del flujo de energía del haz en la dirección transversal y . A la derecha aparece la intensidad del campo en $z = 0$ y en $z = 1$ mm.

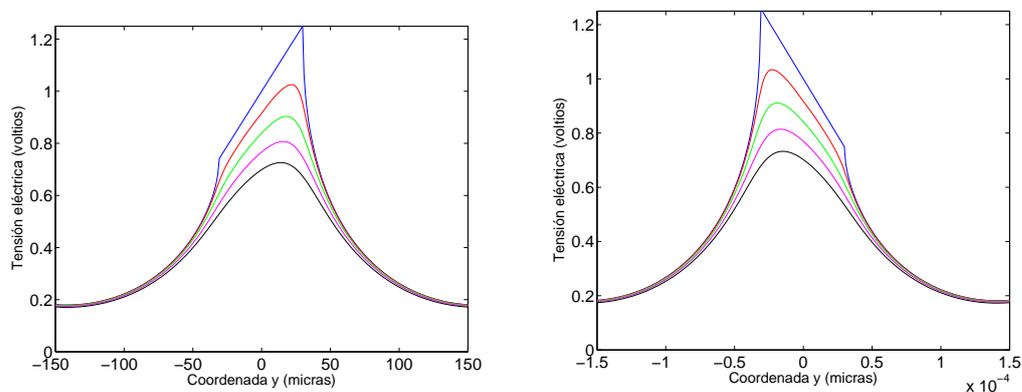


Figura 4.37: Secciones al 80 %, 85 %, 90 %, 95 % y 100 % de la anchura total del electrodo en la coordenada x .

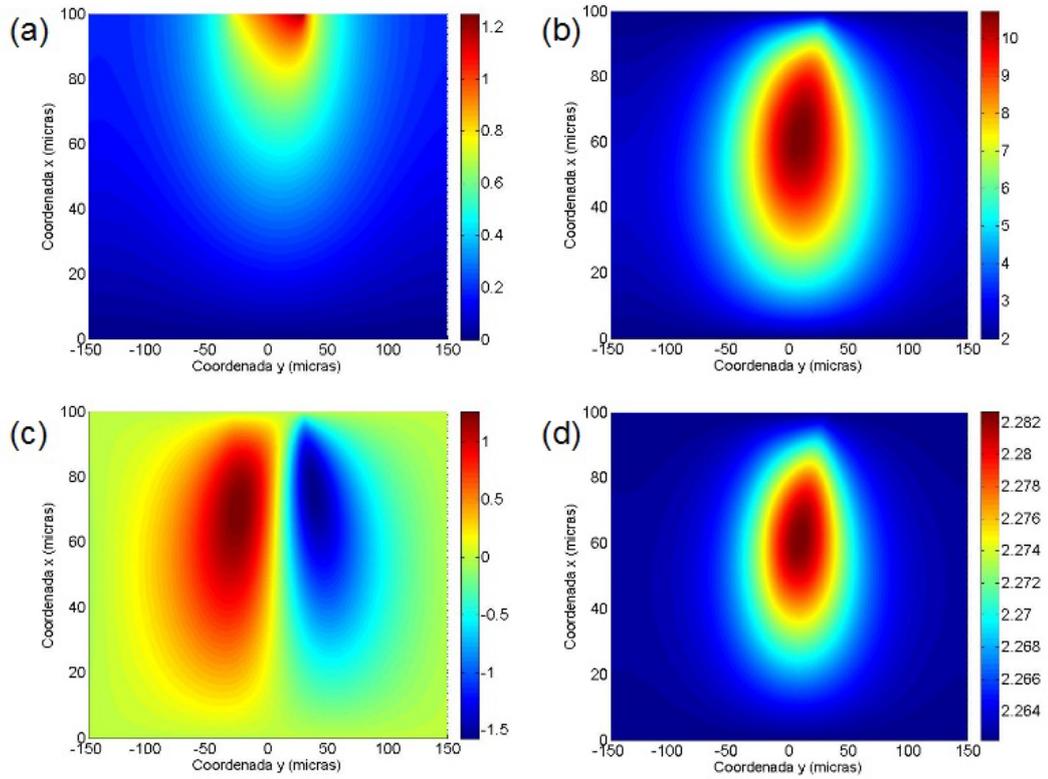


Figura 4.38: (a) Distribución de potencial eléctrico. (b) Distribución del ángulo de cabeceo. (c) Distribución del ángulo de torsión. (d) Distribución del índice de refracción.

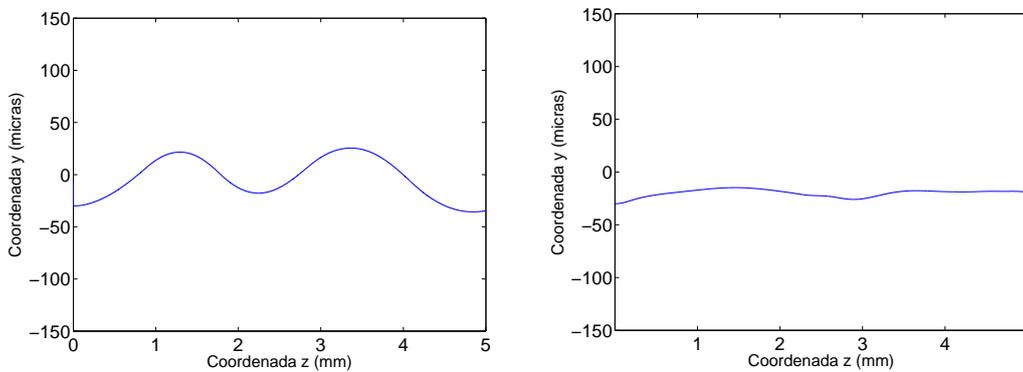


Figura 4.39: Trayectoria del haz en el régimen lineal (izquierda) y no lineal(derecha) bajo el efecto de la alternancia de tensión impuesta por el dispositivo electro-óptico.

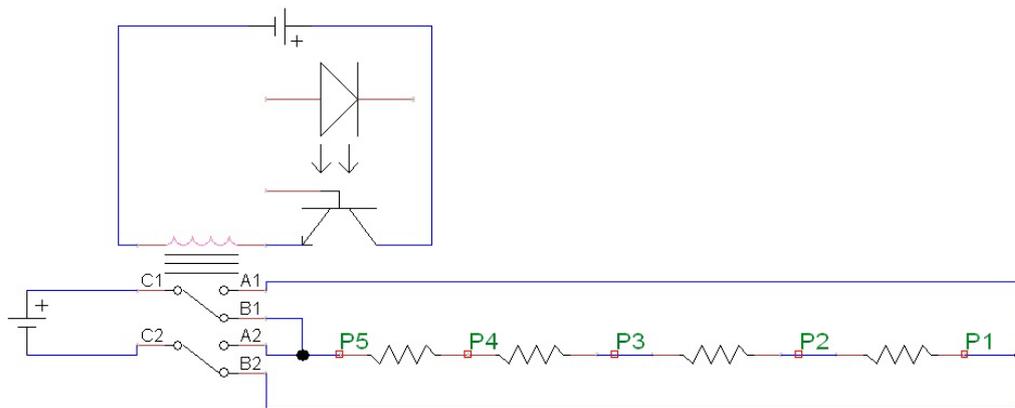


Figura 4.40: Circuito de inversión de sentido de giro de la corriente gobernado por un fototransistor.

Conclusiones y trabajo futuro

En esta tesis se ha presentado la derivación de uno de los modelos más completos y realistas posibles para dispositivos de celdas planares de cristales líquidos nemáticos en $1 + 1D$. Aunque ya presentado en algunos estudios del campo, este modelo no es el más utilizado, pues al no tener solución analítica, no permite la conclusión de sus propiedades más que con el estudio numérico. Sin embargo es el más interesante dado que no presenta las limitaciones típicas de la mayoría de trabajos como por ejemplo el que trata ángulos de cabeceo pequeños obligado por la linealización de las ecuaciones. Se ha obtenido la solución autoconsistente de las ecuaciones diferenciales que componen el modelo mediante el uso de técnicas iterativas bien establecidas. Estas técnicas se han aplicado a las ecuaciones resultantes de la aproximación numérica por el método de diferencias finitas del modelo. Se ha explorado el comportamiento del modelo en el régimen lineal y en el no lineal.

Se ha realizado un estudio comparativo de un modelo no lineal escalar con un modelo lineal (también escalar) frecuentemente utilizado en la bibliografía. La comparación se ha centrado en el estudio de la evolución del campo óptico cuando es lanzado de manera excéntrica sobre la celda. En estas condiciones se espera que la solución presente una oscilación transversal inducida por la fuerza que realiza la frontera sobre la solución. Se han puesto de manifiesto las diferencias entre las oscilaciones de los modelos lineal y no lineal. Se ha ofrecido una explicación cualitativa que justifica las diferencias observadas. Se ha cuantificado la desviación de ambas soluciones en diversos regímenes de parámetros.

Se ha resuelto la propagación de campo óptico en el régimen no lineal vectorial. La única aproximación empleada ha sido la paraxialidad del campo. Se ha observado la oscilación transversal debido a la anisotropía del medio en el plano de evolución. Se ha propuesto el estudio combinado de las oscilaciones transversales producidas por la anisotropía por un lado y por la excentricidad del haz por otro para analizar el efecto no lineal vectorial sobre la trayectoria del haz.

Se ha explorado un nuevo conjunto de soluciones para la ecuación de orientación molecular unidimensional, las producidas por una condición de contorno tipo Dirichlet asimétrica, con un desfase de $n\pi$ con n entero sobre las fronteras del problema $x = 0$ y $x = d$. Se ha resuelto el problema lineal analíticamente y se ha estudiado el efecto que tiene sobre la evolución paraxial escalar de un haz en una celda con esta distribución angular. Se ha obtenido la ecuación de propagación para el índice de refracción efectivo resultante. La ecuación estacionaria correspondiente ha resultado ser una ecuación de Mathieu. Así se ha presentado la solución de los estados estacionarios de una (o varias) guía inducida por la distribución angular, resultando éstos las funciones seno y coseno elípticos (funciones de Mathieu). Se han buscado soluciones del tipo de ondas de Bloch, aquellas que pueden factorizarse como $u(x) = \exp(ipx)u_p(x)$, siendo p un valor de pseudo-momento que clasifica las soluciones. Además, se ha observado la evolución de un haz gaussiano en este tipo de estructuras, presentando el haz una pequeña oscilación tanto en amplitud como en trayectoria.

Se ha resuelto el modelo bidimensional vectorial para la propagación de campo óptico, teniendo en cuenta la anisotropía en el plano transversal XY . Se han mostrado los modos de propagación anisótropos en XY para una guía inducida por un electrodo discontinuo situado en la pared superior del dispositivo. Se ha propuesto el análisis de los modos de propagación en función de la geometría del dispositivo.

En cuanto a modelos en dos coordenadas transversales, se ha resuelto el modelo acoplado para la orientación molecular, distribución de campo eléctrico y propagación de campo óptico escalar paraxial. En el modelo bidimensional no lineal acoplado, se ha estudiado la dependencia de los ángulos de orientación frente

a la potencia óptica y a la posición inicial del haz. Se observa la saturación de los ángulos de orientación en $\pi/2$, si bien el ángulo de cabeceo presenta una mayor sensibilidad al voltaje aplicado al electrodo que el ángulo de torsión. La posición inicial del haz influye en la distribución angular críticamente, encontrando una relación decreciente del pico del ángulo de cabeceo para posiciones cada vez más cercanas a la frontera. En la bibliografía suele referenciarse este fenómeno como la fuerza ejercida por la frontera sobre el haz, pues es la proximidad de la frontera la responsable de dificultar la deformación del cristal líquido.

La solución al problema bidimensional supone el acoplo iterativo de tres ecuaciones diferenciales en derivadas parciales si sólo se contempla el ángulo de cabeceo en la orientación molecular, y de cuatro en el caso en el que se contemplan ambos ángulos de posición, el de cabeceo y el de torsión. Este último modelo, resolviendo ambas distribuciones moleculares es poco empleado en bibliografía y es de gran utilidad para conocer en qué casos la influencia de campos eléctricos en las dos coordenadas transversales influyen de manera crítica al haz. En dispositivos que empleen geometrías de electrodos discontinuos en una (o ambas) paredes la distribución de campo eléctrico externo inducida por la aplicación del voltaje externo sobre los electrodos hace aparecer componentes E_y del campo eléctrico. En estos casos es muy importante calcular también el ángulo de torsión. El campo E_x del tipo de dispositivos que hemos trabajado en esta tesis induce una orientación molecular que hace aumentar el índice de refracción, focalizando el campo óptico en esa zona. Sin embargo, la otra coordenada E_y provoca un movimiento de torsión en las moléculas que altera el estado de polarización del haz, provocando pérdidas de energía sobre la onda extraordinaria que estamos guiando, debilitando así posibles soluciones tipo solitón. Es pues, en general, un efecto indeseado. El cálculo preciso de este ángulo de torsión nos ha permitido discernir en qué casos afecta o no y cuánto a la propagación del haz.

En cuanto a herramientas numéricas hemos implementado una frontera transparente aplicable a cualquiera de las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales que aparecen en la tesis. Es una modificación de la frontera transparente de Hadley, y nos permite resolver de una manera muy sencilla las distribuciones angulares y de campo eléctrico en dispositivos con electrodos discontinuos. El empleo de esta condición de contorno ahorra mucho coste computacional, pues la alternativa es la extensión del dominio numérico de manera artificial para imponer condiciones tipo Dirichlet a una distancia suficientemente grande del electrodo discontinuo para asegurarnos de que la solución no se ve afectada por la frontera en aquella zona. Se trata pues de la aplicación de una técnica novedosa en este tipo de ecuaciones diferenciales que ha demostrado una gran estabilidad, dada la gran batería de simulaciones realizadas en esta tesis y la convergencia de todas ellas. Esta condición de frontera transparente se ha aplicado principalmente a la ecuación de distribución de potencial eléctrico en el seno de la celda de cristal líquido y a la distribución del ángulo de torsión.

En el terreno de dispositivos con electrodos discontinuos, hemos hecho un estudio comparativo de las distribuciones angulares resultantes para un dispositivo publicado por Assanto en dos situaciones distintas: la que él trabaja, con orientación fija en las paredes para ambos ángulos y una nueva situación que nosotros resolvemos numéricamente que es la hipótesis de anclado suave en la frontera para el ángulo de torsión. Ambas hipótesis son realistas y dependen del tratamiento experimental que se le haya imprimido a las paredes confinantes. Observamos valores mayores para el ángulo de torsión en las proximidades de las fronteras de los electrodos discontinuos en el caso de anclado suave. Estos valores avisan que estas zonas son especialmente sensibles a alteraciones de la polarización y que, por tanto, conviene evitar en la propagación del campo óptico.

Además hemos diseñado un dispositivo electro-óptico lineal que induce una oscilación transversal en el haz que se propaga en la celda. Se dispone un circuito electrónico con un fototransistor que rige la aplicación de tensión a los electrodos del dispositivo. Al influir el haz sobre el fototransistor, se activa la tensión eléctrica de tal modo que empuja al haz en la dirección contraria. Al no recibir luz la base del fototransistor éste se corta y altera así una vez más la tensión aplicada al electrodo, provocando el cambio de sentido del haz. Es un ejemplo de la versatilidad de este tipo de dispositivos en los que la integración electro-óptica no está todavía suficientemente explotada.

También tienen gran interés los dispositivos de más de un canal de electrodos discontinuos, pues permiten el diseño de dispositivos como puertas lógicas o acopladores direccionales ópticos. En esta línea hemos simulado la transmisión de energía entre dos canales, en el régimen lineal, para demostrar la posibilidad de diseño de acopladores ópticos direccionales sobre estos dispositivos. Se sugieren geometrías oportunas y se ofrecen simulaciones del dispositivo.

Más allá de los artículos que ya han sido enviados a las revistas y que se exponen al final de esta tesis, nuestro trabajo futuro se centra en varias líneas. Se han dispuesto en esta tesis un conjunto de herramientas numéricas que nos permite proponer muchos estudios tanto de fenómenos de la óptica no lineal en dispositivos de cristales líquidos nemáticos como de dispositivos para manipulación de soluciones lineales y no lineales. En particular, estamos en desarrollo de los siguientes trabajos:

- Estudio de la propagación vectorial unidimensional no paraxial bajo la acción de la fuerza ejercida por la frontera. Conocemos la oscilación transversal inducida por la frontera sobre un nemático al lanzarlo de manera excéntrica sobre la celda planar. Se trata de un efecto no lineal debido a la orientación molecular inducida ópticamente cerca de la frontera. Sin embargo no es la única oscilación transversal que puede aparecer en estos dispositivos. La naturaleza inherentemente vectorial del problema dada la anisotropía del medio también es capaz de inducir una oscilación transversal en el régimen no lineal. La intención de este estudio es la de caracterizar la trayectoria más compleja del nemático en condiciones de no linealidad vectorial. Dado que pueden alcanzarse ángulos de valores significativos en este régimen se pretende realizar un estudio no paraxial para una descripción lo más fidedigna posible.
- Caracterización de las soluciones para las guías inducidas por condiciones asimétricas de frontera en el modelo unidimensional para distintos valores de la frontera. Bandas de energía y modos estacionarios de la ecuación de Mathieu.
- Sensibilidad del modelo no lineal a la potencia óptica y a la anchura del haz para cargas topológicas par e impar. Distribución de las energías de las soluciones con variaciones de los parámetros no lineales.
- Descripción de la evolución en régimen escalar paraxial de un haz en las guías inducidas por la frontera asimétrica. Caracterización de las oscilaciones de amplitud y de posición para un haz centrado.
- Caracterización de los modos de propagación vectoriales de las guías inducidas externamente a través del potencial aplicado a los electrodos discontinuos en celdas planares. Solución de las guías autoinducidas no linealmente a través de un método iterativo y el teorema de autoconsistencia grupal usando propiedades de simetría de la solución.
- Distribución periódica bidimensional a través de la aplicación conjunta de electrodos discontinuos y condiciones de frontera asimétrica. Modos estacionarios de estas guías malladas.
- Evolución bidimensional vectorial paraxial en dispositivos guidores de electrodos discontinuos. Efecto de los campos aplicados externamente y de los campos ópticos no lineales. Estudio de los máximos ángulos alcanzables con dispositivos guidores.
- Propagación escalar no paraxial de dispositivos guidores a través de electrodos discontinuos. Diseño de circuitos todo ópticos para ruteado de nemáticos.

Bibliografía

- [1] R. W. Boyd, *Nonlinear Optics* (Academic Press, Elsevier Science, 2003)
- [2] I.C. Khoo, *Liquid Crystals: Physical Properties and Nonlinear Optical Phenomena* (John Wiley & Sons, New York, 1992)
- [3] P.G. de Gennes and J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals* (Oxford: Clarendon Press, 1974)
- [4] M. Peccianti, C. Conti, G. Assanto, A. De Luca, C. Umeton, “Routing of anisotropic spatial solitons and modulational instability in liquid crystals,” *Nature* **432**, 733–737 (2004)
- [5] E. Braun, L. P. Faucheux, A. Libchaber, D. W. McLaughlin, D. J. Muraki, M. J. Shelley, “Filamentation and Undulation of Self-Focused Laser Beams in Liquid Crystals,” *Europhys. Lett.* **23**, 239–244 (1993)
- [6] E. Braun, L. P. Faucheux, A. Libchaber, “Strong self-focusing in nematic liquid crystals,” *Phys. Rev. A* **48**, 611–622 (1993)
- [7] D. W. McLaughlin, D. J. Muraki, M. J. Shelley, “Light interacting with liquid crystals,” *Phys. D* **68**, 116–126 (1993)
- [8] B. Ya. Zel’dovich, N. V. Tabiryan, “Orientational optical nonlinearity of liquid crystals,” *Sov. Phys. Usp.* **28**, 1059–1083 (1985)
- [9] I. C. Khoo, H. Li, Y. Liang, “Optically induced extraordinarily large negative orientational nonlinearity in dye-doped liquid crystal,” *IEEE J. of Quant. Elect.* **29**, 1444–1447 (1993)
- [10] I. C. Khoo, H. Li, Y. Liang, “Observation of orientational photorefractive effects in nematic liquid crystals,” *Opt. Lett.* **19**, 1723–1725 (1994)
- [11] D. W. McLaughlin, D. J. Muraki, M. J. Shelley, “Self-focused optical structures in a nematic liquid crystal,” *Phys. D* **97**, 471–497 (1996)
- [12] R. Muenster, M. Jarasch, X. Zhuang, Y. R. Shen, “Dye-induced enhancement of optical nonlinearity in liquids and liquid crystals,” *Phys. Rev. Lett.* **78**, 42–45 (1997)
- [13] L. Marucci, D. Paparo, “Photoinduced molecular reorientation of absorbing liquid crystals,” *Phys. Rev. E* **56**, 1765–1772 (1997)
- [14] B. Saad, T. V. Galstyan, M. M. Denariez-Roberge, M. Dumont, “Photoexcited azo-dye induced torque in nematic liquid crystals,” *Opt. Comm.* **151**, 235–240 (1998)
- [15] I. Jánossy, “Molecular interpretation of the absorption induced optical reorientation of nematic liquid crystals,” *Phys. Rev. E* **49**, 2957–2963 (1994)
- [16] G. Assanto, “Transistor action through nonlinear cascading in Type II interactions,” *Opt. Lett.* **20**, 1595–1597 (1995)
- [17] W. E. Torruellas, G. Assanto, B. L. Lawrence, R. A. Fuerst, G. I. Stegeman, “All optical switching by spatial walkoff compensation and solitary wave locking,” *Appl. Phys. Lett.* **68**, 1449–1451 (1996)

- [18] R. Mollame, S. Trillo, G. Assanto, "Soliton polarization rotation and switching in type II second harmonic generation," *Opt. Lett.* **21**, 1969–1971 (1996)
- [19] G. Leo, G. Assanto, W. E. Torruellas, "Intensity controlled interactions between vectorial spatial solitons in quadratic nonlinear media," *Opt. Lett.* **22**, 7–9 (1997)
- [20] G. Leo, G. Assanto, W. E. Torruellas, "Beam pointing control with spatial solitary waves in quadratic nonlinear media," *Opt. Comm.* **134**, 223–226 (1997)
- [21] C. Conti, S. Trillo, G. Assanto, "Doubly resonant bragg simultons via second harmonic generation," *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2341–2344 (1997)
- [22] K. Gallo, G. Assanto, "All optical diode based on second harmonic generation in an asymmetric waveguide," *J. Opt. Soc. Am. B* **16**, 267–269 (1999)
- [23] C. Conti, G. Assanto, S. Trillo, "Read write all optical buffer by self trapped gap simultons," *Electron. Lett.* **34**, 659–691 (1998)
- [24] M. Peccianti, A. De Rossi, G. Assanto, A. De Luca, C. Umeton, I. C. Khoo, "Electrically assisted self-confinement and waveguiding in planar nematic liquid crystal cells," *Appl. Phys. Lett.* **77**, 7–9 (2000)
- [25] M. Peccianti, G. Assanto, "Incoherent spatial solitary waves in nematic liquid crystals," *Opt. Lett.* **26**, 1791–1793 (2001)
- [26] M. Peccianti, G. Assanto, "Nematic liquid crystals: a suitable medium for self-confinement of coherent and incoherent light," *Phys. Rev. E* **65**, 035603 (2002)
- [27] K. G. Makris, H. Sarkissian, D. N. Christodoulides, G. Assanto, "Nonlocal incoherent spatial solitons in liquid crystals," *J. Opt. Soc. Am. B* **22**, 1371–1377 (2005)
- [28] M. Peccianti, C. Conti, E. Alberici, G. Assanto, "Spatially incoherent modulational instability in a non local medium," *Laser Phys. Lett.* **2**, 25–29 (2005)
- [29] Y. Izdebskaya, V. Shvedov, A. Desyatnikov, W. Krolikowski, G. Assanto, Y. Kivshar, "Incoherent interaction of nematicons in bias free liquid crystal cells," *J. Eur. Opt. Soc.* **5**, 10008 (2010)
- [30] W. Krolikowski, O. Bang, J. Wyller, "Nonlocal incoherent solitons," *Phys. Rev. E* **70**, 036617 (2004)
- [31] O. Cohen, H. Buljan, T. Schwartz, J. W. Fleischer, M. Segev, "Incoherent solitons in instantaneous nonlocal nonlinear media," *Phys. Rev. E* **73**, 015601(R) (2006)
- [32] M. Shen, Q. Wang, J. Shi, P. Hou, Q. Kong, "Partially coherent accessible solitons in strongly nonlocal media," *Phys. Rev. E* **73**, 056602 (2006)
- [33] I. A. Kol'chugina, V. A. Mironov, A. M. Sergeev, "Structure of steady state solitons in systems with a nonlocal nonlinearity," *JETP Lett.* **31**, 304–307 (1980)
- [34] A. W. Snyder, D. J. Mitchell, "Accessible solitons," *Science* **6**, 1538–1541 (1997)
- [35] D. J. Mitchell, A. W. Snyder, "Soliton dynamics in a nonlocal medium," *J. Opt. Soc. Am. B* **16**, 236–239 (1999)
- [36] C. Conti, M. Peccianti, G. Assanto, "Route to Nonlocality and Observation of Accessible Solitons," *Phys. Rev. Lett.* **71**, 073901 (2003)
- [37] S. Ming, X. Ning, K. Qian, G. Li-Juan, S. Jie-Long, W. Qi, "Gaussian solitons in nonlocal media: variational analysis," *Chin. Phys. B* **18**, 2822–2827 (2009)
- [38] C. Conti, M. Peccianti, G. Assanto, "Observation of Optical Spatial Solitons in a Highly Nonlocal Medium," *Phys. Rev. Lett.* **92**, 113902 (2004)

- [39] M. Lax, W. H. Louisell, W. B. McKnight, "From Maxwell to paraxial wave optics," *Phys. Rev. A* **11**, 1365–1370 (1975)
- [40] S. Chi, Q. Guo, "Vector theory of self-focusing of an optical beam in Kerr media," *Opt. Lett.* **20**, 1598–1600 (1995)
- [41] B. Crosignani, P. Di Porto, A. Yariv, "Nonparaxial equation for linear and nonlinear optical propagation," *Opt. Lett.* **22**, 778–780 (1997)
- [42] S. Blair, "Non paraxial one dimensional spatial solitons," *Chaos* **10**, 570–583 (2000)
- [43] A. Ciattoni, C. Conti, E. DelRe, P. Di Porto, B. Crosignani, A. Yariv, "Polarization and energy dynamics in ultrafocused optical Kerr propagation," *Opt. Lett.* **27**, 734–736 (2002)
- [44] G. Baruch, G. Fibich, S. Tsynkov, "Simulations of the nonlinear Helmholtz equation: arrest of beam collapse, nonparaxial solitons and counter-propagating beams," *Opt. Exp.* **16**, 13323–13329 (2008)
- [45] P. Chamorro-Posada, G. S. McDonald, G. H. C. New, "Non-paraxial solitons," *J. Mod. Optics* **45**, 1111–1121 (1998)
- [46] A. Ciattoni, B. Crosignani, P. Di Porto, A. Yariv, "Azimuthally Polarized Spatial Dark Solitons: Exact Solutions of Maxwell's Equations in a Kerr Medium," *Phys. Rev. Lett.* **94**, 073902 (2005)
- [47] A. Piccardi, A. Alberucci, G. Assanto, "Self-Turning Self-Confined Light Beams in Guest-Host Media," *Phys. Rev. Lett.* **104**, 213904 (2010)
- [48] A. Alberucci, G. Assanto, "Nonparaxial δ p 1PD spatial solitons in uniaxial media," *Opt. Lett.* **36**, 193–195 (2011)
- [49] A. Alberucci, G. Assanto, "Nonparaxial solitary waves in anisotropic dielectrics," *Phys. Rev. A* **83**, 033822 (2011)
- [50] M. Peccianti, A. Fratalocchi, G. Assanto, "Transverse dynamics of nematicons," *Opt. Express* **12**, 6524–6529 (2004)
- [51] A. Piccardi, A. Alberucci, G. Assanto, "Soliton self-deflection via power-dependent walk-off," *Appl. Phys. Lett.* **16**, 061105 (2010)
- [52] G. Assanto, A. Fratalocchi, M. Peccianti, "Spatial solitons in nematic liquid crystals: from bulk to discrete," *Opt. Express* **15**, 5248–5259 (2007)
- [53] A. Alberucci, M. Peccianti and G. Assanto, "Nonlinear bouncing of nonlocal spatial solitons at the boundaries," *Opt. Lett.* **32**, 2795–2797 (2007)
- [54] J. Beckman, K. Neyts, X. Hutsebaut, C. Cambournac, M. Haelterman, "Simulation of 2-D lateral light propagation in nematic-liquid-crystal cells with tilted molecules and nonlinear reorientational effect," *Opt. Quantum Electron.* **37**, 95–106 (2005)
- [55] A. Alberucci, G. Assanto, "Nonparaxial (1+1)D spatial solitons in uniaxial media," *Opt. Lett.* **36**, 193–195 (2011)
- [56] K. S. Yee, "Numerical Solution of Initial Boundary Value Problems Involving Maxwell's Equations in Isotropic Media," *IEEE Trans. Antennas Propag.* **14**, 302–307 (1966)
- [57] J. B. Cole, "High-Accuracy Yee Algorithm Based on Nonstandard Finite Differences: New Developments and Verifications," *IEEE Trans. Antennas Propag.* **50**, 1185–1191 (2002)
- [58] E. Kashdan, B. Galanti, "A new parallelization strategy for solving time-dependent 3D Maxwell equations using a high-order accurate compact implicit scheme," *Int. J. Numer. Model.* **19**, 391–408 (2006)

- [59] T. Weiland, "Time domain electromagnetic field computation with finite difference methods," *Int. J. Numer. Model.* **9**, 295–319 (1996)
- [60] J. Beeckman, K. Neyts, X. Hutsebaut, C. Cambournac, M. Haelterman, "Simulation of 2-D lateral light propagation in nematic-liquid-crystal cells with tilted molecules and nonlinear reorientational effect," *Opt. Quant. Electron.* **37**, 95–106 (2005)
- [61] P. J. M. Vanbrabant, J. Beeckman, K. Neyts, R. James, F. A. Fernandez, "A finite element beam propagation method for simulation of liquid crystal devices," *Opt. Express* **17**, 10895–10909 (2009)
- [62] J. Beeckman, R. James, F. A. Fernández, W. De Court, P. J. M. Vanbrabant, K. Neyts, "Calculation of Fully Anisotropic Liquid Crystal Waveguide Modes," *J. Lightw. Technol.* **27**, 3812–3819 (2010)
- [63] A. Alberucci, M. Peccianti, G. Assanto, "Two-Color vector solitons in nonlocal media," *Phys. Rev. Lett.* **97**, 153903 (2006)
- [64] G. Assanto, N. F. Smyth, A. L. Worthy, "Two-color, nonlocal vector solitary waves with angular momentum in nematic liquid crystals," *Phys. Rev. A* **78**, 013832 (2008)
- [65] Y. V. Izdebskaya, A. S. Desyatnikov, G. Assanto, Y. S. Kivshar, "Multimode nematicon waveguides," *Opt. Lett.* **36**, 184–186 (2011)
- [66] G. Assanto, C. García-Reimbert, A. A. Minzoni, N. F. Smyth, A. L. Worthy, "Lagrange solution for three wavelength solitary wave clusters in nematic liquid crystals," *Physica D* **240**, 1213–1219 (2011)
- [67] D. Suter, T. Blasberg, "Stabilization of transverse solitary waves by a nonlocal response of the nonlinear medium," *Phys. Rev. A* **48**, 4583–4587 (1993)
- [68] O. Bang, W. Krolikowski, J. Wyller, J. J. Rasmussen, "Collapse arrest and soliton stabilization in nonlocal nonlinear media," *Phys. Rev. E* **66**, 046619 (2002)
- [69] C. Rotschild, O. Cohen, O. Manela, M. Segev, "Solitons in Nonlinear Media with an Infinite Range of Nonlocality: First Observation of Coherent Elliptic Solitons and of Vortex-Ring Solitons," *Phys. Rev. Lett.* **95**, 213904 (2005)
- [70] C. Anastassiou, C. Pigier, M. Segev, D. Kip, E. D. Eugenieva, D. N. Chrostodoulides, "Self-trapping of bright rings," *Opt. Lett.* **26**, 911–913 (2001)
- [71] D. Briedis, D. E. Petersen, D. Edmundson, W. Krolikowski, O. Bang, "Ring vortex solitons in nonlocal nonlinear media," *Opt. Express* **13**, 435–443 (2005)
- [72] A. I. Yakimenko, Y. A. Zaliznyak, Y. Kivshar, "Stable vortex solitons in nonlocal self-focusing nonlinear media," *Phys. Rev. E* **71**, 065603 (2005)
- [73] Y. J. He, B. A. Malomed, D. Mihalache, H. Z. Wang, "Crescent vortex solitons in strongly nonlocal nonlinear media," *Phys. Rev. A* **78**, 023824 (2008)
- [74] A. S. Desyatnikov, Y. S. Kivshar, "Rotating Optical Soliton Clusters," *Phys. Rev. Lett.* **88**, 053901 (2002)
- [75] F. Ye, Y. V. Kartashov, L. Torner, "Stabilization of dipole solitons in nonlocal nonlinear media," *Phys. Rev. A* **77**, 0438921 (2008)
- [76] S. Lopez-Aguayo, A. S. Desyatnikov, Y. S. Kivshar, S. Skupin, W. Krolikowski, O. Bang, "Stable rotating dipole solitons in nonlocal optical media," *Opt. Lett.* **31**, 1100–1102 (2006)
- [77] S. Lopez-Aguayo, A. S. Desyatnikov, Y. S. Kivshar, "Azimuthons in nonlocal nonlinear media," *Opt. Express* **14**, 7903–7908 (2006)
- [78] H. Kogelnik, T. Li, "Laser beams and resonators," *App. Opt.* **5**, 1550–1567 (1966)

- [79] E. G. Abramochkin, V. G. Volostnikov, “Generalized Gaussian beams,” *J. Opt. A: Pure Appl. Opt.* **6**, 157–161 (2004)
- [80] M. A. Bandres, J. C. Gutiérrez-Vega, “Ince-Gaussian beams,” *Opt. Lett.* **29**, 144–146 (2004)
- [81] D. Deng, Q. Guo, “Ince-Gaussian solitons in strongly nonlocal nonlinear media,” *Opt. Lett.* **32**, 3206–3208 (2007)
- [82] D. Deng, Q. Guo, “Propagation of Laguerre-Gaussian beams in nonlocal nonlinear media,” *J. Opt. A: Pure Appl. Opt.* **10**, 035101 (2008)
- [83] D. Buccoliero, A. S. Desyatnikov, W. Krolikowski, Y. S. Kivshar, “Laguerre and Hermite Soliton Clusters in Nonlocal Nonlinear Media,” *Phys. Rev. Lett.* **98**, 053901 (2007)
- [84] W. Zhong, M. Belic, R. Xie, G. Chen, L. Yi, “Two-dimensional Whittaker solitons in nonlocal nonlinear media,” *Phys. Rev. A* **78**, 013826 (2008)
- [85] D. Deng, Q. Guo, W. Hu, “Complex-variable-function-Gaussian solitons,” *Opt. Lett.* **34**, 43–45 (2009)
- [86] D. Deng, Q. Guo, W. Hu, “Complex-variable-function Gaussian beam in strongly nonlocal nonlinear media,” *Phys. Rev. A* **79**, 023803 (2009)
- [87] W. Zhong, M. Belic, “Kummer solitons in strongly nonlocal nonlinear media,” *Phys. Lett. A* **373**, 296–298 (2009)
- [88] I. B. Burgess, M. Peccianti, G. Assanto, R. Morandotti, “Accessible light bullets via synergetic nonlinearities,” *Phys. Rev. Lett.* **102**, 203903 (2009)
- [89] A. J. Campillo, S. L. Shapiro, B. R. Suydam, “Periodic breakup of optical beams due to self-focusing,” *App. Phys. Lett.* **23**, 628–630 (1973)
- [90] M. Peccianti, C. Conti, G. Assanto, “Optical modulational instability in a nonlocal medium,” *Phys. Rev. E* **68**, 025602 (2003)
- [91] W. Krolikowski, O. Bang, J. J. Rasmussen, J. Wyller, “Modulational instability in nonlocal nonlinear Kerr media,” *Phys. Rev. E* **64**, 016612 (2001)
- [92] J. Wyller, W. Krolikowski, O. Bang, J. J. Rasmussen, “Generic features of modulational instability in nonlocal Kerr media,” *Phys. Rev. E* **66**, 066615 (2002)
- [93] M. Peccianti, C. Conti, G. Assanto, “Optical multisoliton generation in nematic liquid crystals,” *Opt. Lett.* **28**, 2231–2233 (2003)
- [94] G. Assanto, M. Peccianti, C. Conti, “One-Dimensional transverse modulational instability in nonlocal media with a reorientational nonlinearity,” *IEEE J. Quantum Electron.* **10**, 861–868 (2004)
- [95] M. Peccianti, C. Conti, E. Alberici, G. Assanto, “Spatially incoherent modulational instability in a non local medium,” *Laser Phys. Lett.* **2**, 25–29 (2005)
- [96] D. Kip, M. Soljajic, M. Segev, E. Eugenieva, D. N. Christodoulides, “Modulation instability and pattern formation in spatially incoherent light beams,” *Science* **290**, 495–498 (2000)
- [97] M. Peccianti, G. Assanto, “Observation of power-dependent walk-off via modulational instability in nematic liquid crystals,” *Opt. Lett.* **30**, 2290–2292 (2005)
- [98] K. A. Brzdakiewicz, M. A. Karpierz, A. Fratolocchi, G. Assanto, “Discrete optical solitons in nematic liquid crystals,” *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **421**, 61–68 (2004)
- [99] A. Fratolocchi, G. Assanto, K. A. Brzdakiewicz, M. A. Karpierz, “Discrete propagation and spatial solitons in nematic liquid crystals,” *Opt. Lett.* **29**, 1530–1532 (2004)

- [100] A. Fratalocchi, G. Assanto, K. A. Brzdakiewicz, M. A. Karpierz, “Discrete light propagation and self-trapping in liquid crystals,” *Opt. Express* **13**, 1808–1815 (2005)
- [101] A. Fratalocchi, G. Assanto, “Discrete light localization in one-dimensional nonlinear lattices with arbitrary nonlocality,” *Phys. Rev. E* **72**, 066608 (2005)
- [102] K. A. Brzdakiewicz, M. A. Karpierz, A. Fratalocchi, G. Assanto, E. Nowinowski-Kruszelnicki “Nematic liquid crystal waveguide arrays,” *Opt-Electron. Rev.* **13**, 107–112 (2005)
- [103] C. Zener, *Proc. R. Soc. London Ser. A* **137**, 696 (1932)
- [104] A. Fratalocchi, G. Assanto, “All-optical Landau-Zener tunneling in waveguide arrays,” *Opt. Express* **14**, 2021–2026 (2006)
- [105] A. Fratalocchi, G. Assanto, K. A. Brzdakiewicz, M. A. Karpierz, “Optically induced Zener tunneling in one-dimensional lattices,” *Opt. Lett.* **31**, 790–792 (2006)
- [106] D. Mandelik, H. S. Eisenberg, Y. Silberberg, R. Morandotti, J. S. Aitchison, “Band-Gap Structure of Waveguide Arrays and Excitation of Floquet-Bloch Solitons,” *Phys. Rev. Lett.* **90**, 053902 (2003)
- [107] H. Trompeter, A. Brauer, A. S. Desyatnikov, Y. S. Kivshar, T. Pertsch, W. Krolikowski, F. Lederer, D. Michaelis, D. N. Neshev, T. Pertsch, U. Peschel, U. Streppel, A. A. Sukhorukov, “Photonic Bloch oscillations and Zener tunneling,” *Opt. Photon. News* **17**, 22–22 (2006)
- [108] A. Fratalocchi, G. Assanto, K. A. Brzdakiewicz, M. A. Karpierz, “All-optical switching and beam steering in tunable waveguide arrays,” *Appl. Phys. Lett.* **86**, 051112 (2005)
- [109] A. Fratalocchi, R. Asquini, G. Assanto, “Integrated electro-optic switch in liquid crystals,” *Opt. Express* **13**, 32–37 (2005)
- [110] J. Beekman, K. Neyts, M. Haelterman, “Patterned electrode steering of nematicons,” *J. Opt. A: Pure Appl. Opt.* **8**, 214–220 (2006)
- [111] M. Peccianti, A. Dyadyusha, M. Kaczmarek, G. Assanto, “Tunable refraction and reflection of self-confined light beams,” *Nat. Phys.* **2**, 736–742 (2006)
- [112] Y. Kivshar, “Bending light at will,” *Nat. Phys.* **2**, 729–730 (2006)
- [113] M. Peccianti, G. Assanto, A. Dyadyusha, M. Kaczmarek, “Nonspecular total internal reflection of spatial solitons at the interface between highly birefringent media,” *Phys. Rev. Lett.* **98**, 113902 (2007)
- [114] M. Peccianti, A. Dyadyusha, M. Kaczmarek, G. Assanto, “Escaping solitons from a trapping potential,” *Phys. Rev. Lett.* **101**, 153902 (2008)
- [115] G. Assanto, A. A. Minzoni, M. Peccianti and N. F. Smyth, “Optical solitary waves escaping a wide trapping potential in nematic liquid crystals: Modulation theory,” *Phys. Rev. A* **79**, 033837 (2009)
- [116] S. V. Serak, N. V. Tabiryan, M. Peccianti, G. Assanto, “Spatial soliton all-optical logic gates,” *IEEE Phot. Tech. Lett.* **18**, 1287–1289 (2006)
- [117] A. Piccardi, G. Assanto, L. Lucchetti, F. Simoni, “All-optical steering of soliton waveguides in dye doped liquid crystals,” *App. Phys. Lett.* **93**, 171104 (2008)
- [118] G. Assanto, A. Piccardi, A. Alberucci, S. Residori, U. Bortolozzo, “Liquid crystal light valves: a versatile platform for nematicons,” *Phot. Lett. Poland* **1**, 151–153 (2009)
- [119] A. Piccardi, U. Bortolozzo, S. Residori, G. Assanto, “Spatial solitons in liquid-crystal light valves,” *Opt. Lett.* **34**, 737–739 (2009)
- [120] A. Alberucci, A. Piccardi, U. Bortolozzo, S. Residori, G. Assanto, “Nematicon all-optical control in liquid crystal light valves,” *Opt. Lett.* **35**, 390–392 (2010)

- [121] A. Piccardi, A. Alberucci, U. Bortolozzo, S. Residori, G. Assanto, “Readdressable interconnects with spatial soliton waveguides in liquid crystal light valves,” *IEEE Phot. Tech. Lett.* **22**, 694–696 (2010)
- [122] A. Piccardi, A. Alberucci, U. Bortolozzo, S. Residori, G. Assanto, “Soliton gating and switching in liquid crystal light valve,” *App. Phys. Lett.* **96** 071104 (2010)
- [123] M. Peccianti, K. A. Brzdakiewicz, G. Assanto, “Nonlocal spatial soliton interactions in nematic liquid crystals,” *Opt. Lett.* **27**, 1460–1462 (2002)
- [124] M. Kwasny, A. Piccardi, A. Alberucci, M. Peccianti, M. Kaczmarek, M. A. Karpierz, G. Assanto, “Nematicon-nematicon interactions in a medium with tunable nonlinearity and fixed nonlocality,” *Opt. Lett.* **36**, 2566–2568 (2011)
- [125] Y. Izdebskaya, V. Shvedov, A. Desyatnikov, W. Krolikowski, G. Assanto, Y. Kivshar, “Incoherent interaction of nematicons in bias-free liquid crystal cells,” *J. Eur. Opt. Soc.* **5**, 10008 (2010)
- [126] Y. Izdebskaya, V. Shvedov, A. Desyatnikov, W. Krolikowski, M. Belic, G. Assanto, Y. Kivshar, “Counterpropagating nematicons in bias-free liquid crystals,” *Opt. Express* **18**, 3258–3263 (2010)
- [127] C. Desimpel, J. Beeckman, H. Desmet, K. Neyts, R. James, F. A. Fernández, “A four-electrode liquid crystal device for 2π in-plane director rotation,” *J. Phys. D:Appl. Phys.* **38**, 3976–3984 (2005)
- [128] C. Desimpel, J. Beeckman, K. Neyts, S. Verstuyft, D. V. Thourhout, K. D’havé, P. Rudquist, “Realization of a four-electrode liquid crystal device with full in-plane director rotation,” *IEEE Trans. Electron. Dev.* **54**, 1295–1300 (2007)
- [129] R. Barboza, A. Alberucci, G. Assanto, “Large electro optic beam steering with nematicons,” *Opt. Lett.* **36**, 2725–2727 (2011)
- [130] F. M. Leslie, “Some constitutive equations for anisotropic fluids,” *Q. J. Mech. Appl. Math.* **19**, 357–370 (1966)
- [131] F. M. Leslie, “Some constitutive equations for liquid crystals,” *Arch. Rat. Mech. Anal.* **28**, 265–283 (1968)
- [132] P. Pieranski, E. Guyon, “Transverse effects in nematic flows,” *Phys. Lett.* **49**, 237–238 (1974)
- [133] J.T. Jenkins, “Flows of nematic liquid crystals,” *Ann. Rev. Fluid Mech.* **10**, 197–219 (1978)
- [134] H. Heuer, H. Knepe, F. Schneider, “Flow of a nematic liquid crystal around a cylinder,” *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **200**, 51–70 (1991)
- [135] S. Chono, T. Tsujii, “Numerical simulation of nematic liquid crystalline flows around a circular cylinder,” *Mol. Liq. Cryst.* **309**, 217–236 (1998)
- [136] S. Chono, T. Tsujii, M. M. Denn, “Spatial development of director orientation of tumbling nematic liquid crystals in pressure-driven channel flow,” *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **79**, 515–527 (1998)
- [137] C. Atkinson, P. J. S. Pereira, “Flow of a nematic liquid crystal near the leading edge of an infinite prism,” *Q. J. Mech. Appl. Math.* **58**, 503–533 (2005)
- [138] P. A. Cruz, M. F. Tomé, I. W. Stewart, S. McKee, “A numerical method for solving the dynamic three-dimensional Ericksen-Leslie equations for nematic liquid crystals subject to a strong magnetic field,” *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **165**, 143–157 (2010)
- [139] C. W. Oseen, *Trans. Faraday Soc.* 883 (1933)
- [140] F. C. Frank, *Discuss. Faraday Soc.* 25:19 (1933)
- [141] G. Barbero, F. Simoni, “Enhanced nonlinear birefringence in hybrid aligned nematics,” *Appl. Phys. Lett.* **41**, 504–506 (1982)

- [142] G. Barbero, N. Scaramuzza, “On the interface substrate-nematic: Anchoring energy and topography,” *Lettere al Nuovo Cimento* **34**, 173–179 (1982)
- [143] G. Barbero, A. Strigazzi, “On the surface behaviour of a homeotropic nematic-liquid-crystal cell,” *Il Nuovo Cimento B* **64**, 101–110 (1981)
- [144] G. Barbero, R. Barberi, “Critical thickness of a hybrid aligned nematic liquid crystal cell,” *J. Physique* **44**, 609–616 (1983)
- [145] G. Barbero, N. V. Madhusudana and G. Durand, “Weak anchoring energy and pretilt of a nematic liquid crystal,” *J. Physique Lett.* **45**, 613–619 (1984)
- [146] Q. Wang, S. He, F. Yu, and N. Huang, “Iterative finite-difference method for calculating the distribution of a liquid-crystal director,” *Opt. Eng.* **40**, 2552–2557 (2001)
- [147] J.W. Thomas, *Numerical Partial Differential Equations. Finite Difference Methods. Vol. I*, Ed. Springer, (1995)
- [148] J. Beeckman, *Lateral light propagation and spatial optical solitons in liquid crystal devices*, PhD Thesis, University of Gent (2006).
- [149] M. Peccianti, A. Dyadyusha, M. Kaczmarek, G. Assanto, “Tunable refraction and reflection of self-confined light beams,” *Nat. Phys.* **2**, 737–742 (2006)
- [150] E. Kriezis and S. Elston, “A wide angle beam propagation method for the analysis of tilted nematic liquid crystal structures,” *J. Mod. Optic.* **46**, 1201–1212 (1999)
- [151] J. Beeckman, K. Neyts, X. Hutsebaut, C. Cambournac and M. Haelterman, “Simulation of 2-D lateral light propagation in nematic-liquid-crystal cells with tilted molecules and nonlinear reorientational effect,” *Optical and Quantum Electronics* **37**, 95–106 (2005)
- [152] A. Piccardi, M. Peccianti, G. Assanto, A. Dyadyusha and M. Kaczmarek, “Voltage-driven in-plane steering of nematicons,” *Appl. Phys. Lett.* **94**, 091106 (2009)
- [153] A. A. Minzoni, N. F. Smyth and A. L. Worthy, “Modulation solutions for nematicon propagation in nonlocal liquid crystals,” *J. Opt. Soc. Am. B* **23**, 1549–1556 (2007)
- [154] A. Taflove, S. C. Hagness, *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method* (Ed. Artech House, Boston, London, 2000)
- [155] B. Mayfield, *Non Local Boundary Conditions for the Schrödinger Equation*, PhD Thesis, University of Rhodes Island, Providence, RI, (1989)
- [156] D. Appelö, *Non-reflecting Boundary Conditions for Wave Propagation Problems*, PhD Thesis Kungl Tekniska Högskolan University, Stockholm, (2003).
- [157] M. Erhardt, *Discrete Artificial Boundary Conditions*, PhD Thesis, Technische Universität Berlin, Berlin, (2001)
- [158] A. Arnold, M. Ehrhardt, I. Sofronov, “Discrete Transparent Boundary Conditions for the Schrödinger Equation: Fast Calculation, Approximation, and Stability,” *Comm. Math. Sci.* **1**, 504–556 (2003)
- [159] X. Antoine, C. Besse, V. Mouysset, “Numerical schemes for the simulation of two-dimensional Schrödinger equation using non-reflecting boundary conditions,” *Math. Comp.* **73**, 1779–1799 (2004)
- [160] R. Cohen, R. Hardt, D. Kinderlehrer, S. Lin, M. Luskin, “Minimum energy configurations for liquid-crystals: computational results,” *IMA Preprint Series* **250** (1986)
- [161] S. Lin, M. Luskin, “Relaxation methods for liquid crystal problems,” *IMA Preprint Series* **332** (1987)

- [162] I. Heynderickx, H. De Raedt, “Calculation of the director configuration of nematic liquid crystals by the simulated-anneal method,” *Phys. Rev. A* **37**, 1725–1730 (1988)
- [163] R. Cohen, S. Lin, M. Luskin, “Relaxation and gradient methods for molecular orientation in liquid crystals,” *Comp. Phys. Comm.* **53**, 455–465 (1989)
- [164] F. Alouges, J. M. Guidaglia, “Minimizing Oseen-Frank energy for nematic liquid crystals: algorithms and numerical results,” *Annales de l’I.H.P.* **4**, 411–447 (1997)
- [165] P.A. Farrell, A. Ruttan, and R.R. Zeller, “Solution of the Landau-de-Gennes Equations of Liquid Crystal Physics on a SIMD Computer,” *Proc. PPSC* 266–269 (1993)
- [166] L. Ting and M.J. Miksis, “Exact Boundary Conditions for Scattering Problems,” *J. Acoust. Soc. Am.* **80**, 1825–1827 (1986)
- [167] I.L. Sofronov, “Conditions for Complete Transparency on the Sphere for the Three-Dimensional Wave Equation,” *Russian Acad. Sci. Dokl. Math.* **46**, 397–401 (1993)
- [168] I.L. Sofronov, “Artificial Boundary Conditions of Absolute Transparency for Two and Three dimensional External Time-Dependent Scattering Problems,” *Euro. J. Appl. Math.* **9**, 561–588 (1998)
- [169] M.J. Grote and J.B. Keller, “Exact nonreflecting boundary conditions for the time dependent wave equation,” *SIAM J. Appl. Math.* **55**, 280–297 (1995)
- [170] T. Hagstrom, “Radiation boundary conditions for the numerical simulation of waves,” *Acta Numerica* **8**, 47–106 (1999)
- [171] R. Kosloff and D. Kosloff, “Absorbing boundaries for wave propagation problems,” *J. Comput. Phys.* **63**, 363–376 (1986)
- [172] D. Neuhauser and M. Baer, “The time-dependent Schrödinger equation: Application of absorbing boundary conditions,” *J. Chemical Phys.* **90**, 4351–4355 (1989)
- [173] D. Yevick and B. Hermansson, “New formulations of the matrix beam propagation method: Application to rib waveguides,” *IEEE J. Quant. Electron.* **25**, 221–229 (1989)
- [174] T. Fevens and H. Jiang, “Absorbing boundary conditions for the Schrödinger equation,” *SIAM J. Sci. Comput.* **21**, 255–282 (1999)
- [175] L. N. Trefethen, “Group velocity in finite difference schemes,” *SIAM Rev.* **24**, 113–136 (1982)
- [176] B. Engquist and A. Majda, “Absorbing boundary conditions for the numerical simulation of waves,” *Math. Comp.* **31**, 629–651 (1977)
- [177] B. Engquist and A. Majda, “Radiation boundary conditions for acoustic and elastic wave calculations,” *Comm. Pure Appl. Math.* **32**, 314–358 (1979)
- [178] H. Jiang and Y. S. Wong, “Absorbing boundary conditions for second-order hyperbolic equations,” *J. Comput. Phys.* **88**, 205–231 (1990)
- [179] H.O. Kreiss, “Initial boundary value problems for hyperbolic systems,” *Comm. Pure Appl. Math.* **23**, 277–298 (1970)
- [180] R. Sakamoto, *Hyperbolic Boundary Value Problems*, Ed. Cambridge University Press, New York, (1982)
- [181] A. Bayliss and E. Turkel, “Radiation boundary conditions for wave-like equations,” *Comm. Pure Appl. Math.* **33**, 707–725 (1980)
- [182] B. Engquist and A. Majda, “Absorbing boundary conditions for the numerical simulation of waves,” *Math. Comp.* **31**, 629–651 (1977)

- [183] R. L. Higdon, “Initial-boundary value problems for linear hyperbolic systems,” *SIAM Rev.* **28**, 177–217 (1986)
- [184] R. L. Higdon, “Radiation boundary conditions for elastic wave propagation,” *SIAM J. Numer. Anal.* **27**, 831–869 (1990)
- [185] T. Shibata, “Absorbing boundary conditions for the finite-difference time-domain calculation of the one-dimensional Schrödinger equation,” *Phys. Rev. B* **43**, 6760–6763 (1991)
- [186] J. P. Kuska, “Absorbing boundary conditions for the Schrödinger equation on finite intervals,” *Phys. Rev. B* **46**, 5000–5003 (1992)
- [187] G.R. Hadley, “Transparent boundary condition for the beam propagation method,” *IEEE J. Quant. Electron.* **28**, 363–370 (1992)
- [188] G. R. Hadley, “Transparent boundary condition for beam propagation,” *Opt. Lett.* **16**, 624–626 (1991)
- [189] P. J. Roach, *Computational Fluid Dynamics* Ed. Hermosa, Albuquerque (1976)
- [190] M. Peccianti, G. Assanto, “Signal readdressing by steering of spatial solitons in bulk nematic liquid crystals,” *Opt. Lett.* **26**, 1690–1692 (2001)
- [191] M. Peccianti, C. Conti, G. Assanto, A. De Luca, C. Umeton, “All-optical switching and logic gating with spatial solitons in liquid crystals,” *App. Phys. Lett.* **81**, 3335–3337 (2002)
- [192] A. Fratolocchi, G. Assanto, K. A. Brzdakiewicz, M. A. Karpierz, “Optical multiband vector breathers in tunable waveguide arrays,” *Opt. Lett.* **30**, 174 (2005)
- [193] J. Beeckman, K. Neyts, m: Haelterman, “Patterned electrode steering of nematicons,” *J. Opt. A:Pure Appl. Opt.* **8** 214–220 (2006)
- [194] M. Peccianti, A. Dyadyusha, M. Kaczmarek, G. Assanto, “Escaping solitons from a Trapping Potential,” *Phys. Rev. Lett.* **101**, 153902 (2008)
- [195] Y. Kivshar, “Bending light at will,” *Nature Phys.* **2**, 729–730 (2006)
- [196] W. H. Press, Saul A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C, The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press, 2nd Edition, (1992)
- [197] A.P. French, Edwin F. Taylor, *Introducción a la física cuántica*, Editorial Reverté, (1982)
- [198] J. Beeckman, K. Neyts, P. J. M. Vanbrabant, R. James, F. A. Fernandez, “Finding exact spatial soliton profiles in nematic liquid crystals,” *Opt. Express* **18**, 3311 – 3321 (2010)
- [199] A. Alberucci, G. Assanto, “Nematicons beyond the perturbative regime,” *Opt. Lett.* **35**, 2520 – 2522 (2010)
- [200] A. Alberucci, G. Assanto, D. Buccoliero, A.S. Desyatnikov, T. R. Marchant, N. F. Smyth, “Modulation analysis of boundary-induced motion of optical solitary waves in a nematic liquid crystal,” *Phys. Rev. A* **79**, 043816 (2009)
- [201] A. Alberucci and G. Assanto, “Propagation of optical spatial solitons in finite-size media: interplay between nonlocality and boundary conditions,” *J. Opt. Soc. Am. B* **24**, 2314–2320 (2007)
- [202] B. Alfassi, C. Rotschild, O. Manela, M. Segev and D. N. Christodoulides, “Boundary force effects exerted on solitons in highly nonlocal nonlinear media,” *Opt. Lett.* **32**, 154–156 (2007)