

МОДЕЛЮВАННЯ ЗМІНИ ПРОФІЛЮ ПОКАЗНИКА ЗАЛОМЛЕННЯ ГРАДІЄНТНОГО СВІТЛОВОДА

Коцун В.І.

ПВНЗ «Європейський університет», м. Львів

За допомогою методу молекулярної динаміки виконано комп'ютерне моделювання зміни профілю показника заломлення в градієнтних світловодах під дією температури та електричного поля.

Планарні світловоди використовуються в оптичних колах обробки та передачі інформації як пасивні, активні та з'єднувальні елементи ланцюгів таких кіл. Застосування рідкокристалічних (РК) матеріалів як активного середовища планарних світловодів, дозволяє створювати активні та пасивні елементи світловода на основі одного матеріалу.

Для моделювання РК систем можна скористатись тими ж методами, які використовуються для дослідження властивостей рідин [1]. Основним завданням моделювання для орієнтаційного впорядкування є визначення немотичного параметру порядку та напрямку директора. Їх обчислюють за методикою, згідно з якою спочатку обчислюється тензор впорядкування, а потім він діагоналізується. Альтернативний метод базується на обчисленні далекоюсяжних орієнтаційних кореляцій. Для аналізу структури фази, якій властиве трансляційне впорядкування, ведеться обчислення парних кореляційних функцій [2].

В основі комп'ютерного моделювання лежить потенціал взаємодії, який описує мікроскопічну енергетику, характерну для системи. Для моделювання РК систем використовують класичні двочастинкові потенціали, які враховують квантово-механічні ефекти лише в ефективний спосіб [3].

Комп'ютерне моделювання молекулярних моделей в цій роботі виконане за допомогою програмного засобу GBMOLDD [4], який дає змогу отримувати розподіл напрямку директора в будь-якій області комірки та відповідну величину параметра впорядкування, який безпосередньо пов'язаний із значенням показника заломлення.

Література:

1. Frenkel. D. Understanding molecular simulation, from algorithms to applications / D. Frenkel, B. Smit. – 2nd edition. – New York: Academic, 2002.
2. Vieillard-Baron. J. The equation of state of a system of hard spherocylinders / J. Vieillard-Baron // Mol. Phys. – 1974. – Vol. 28, no. 3. – P. 809–818.
3. Ilnytskyi. J. Molecular dynamics simulations of various branched polymeric liquid crystals / J. Ilnytskyi, D. Neher, M. Saphiannikova, M.R. Wilson, L. Stimson // Molecular Crystals and Liquid Crystals. – 2008. – Vol. 496. – P. 186–201.
4. Simulation of influence of limiting surfaces optical characteristics on liquid crystal waveguide properties / Zenon Hotra, Waldemar Wójcik, Zinovij Mykytyuk, Andrij Fechan, Orest Sushynskyy, Volodymyr Kotsun, Ostap Chaban // The International Conference CADSM 2013. – Polyana-Svalyava (Zakarpattya), Ukraine, 19–23 February 2013. – P. 82.