

T.C.
GEBZE YÜKSEK TEKNOLOJİ ENSTİTÜSÜ
MÜHENDİSLİK ve FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

MONTE CARLO YÖNTEMLERİ İLE TERMOTROPİK SIVI
KRİSTAL ÖZELLİKLERİNİN BELİRLENMESİ

YAKUP EMÜL
DOKTORA TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

GEBZE
2014

T.C.
GEBZE YÜKSEK TEKNOLOJİ ENSTİTÜSÜ
MÜHENDİSLİK ve FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

MONTE CARLO YÖNTEMLERİ İLE
TERMOTROPİK SIVI KRİSTAL
ÖZELLİKLERİNİN BELİRLENMESİ

YAKUP EMÜL
DOKTORA TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

DANIŞMANI
PROF. DR. SAİT EREN SAN

GEBZE
2014



**GEBZE YÜKSEK
TEKNOLOJİ ENSTİTÜSÜ**

DOKTORA JÜRİ ONAY FORMU

GYTE Mühendislik ve Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun 23/06/2014 tarih ve 2014/37 sayılı kararıyla oluşturulan jüri tarafından 15/07/2014 tarihinde tez savunma sınavı yapılan Yakup EMÜL'ün tez çalışması Fizik Anabilim Dalında DOKTORA tezi olarak kabul edilmiştir.

JÜRİ

ÜYE

(TEZ DANIŞMANI) : Prof. Dr. Sait Eren SAN

ÜYE

: Prof. Dr. Faik MİKAİLZADE

ÜYE

: Doç. Dr. Numan AKDOĞAN

ÜYE

: Doç. Dr. Savaş BERBER

ÜYE

: Doç. Dr. Haluk ÖZBEK

ONAY

GYTE Mühendislik ve Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun tarih ve/..... sayılı kararı.

İMZA/MÜHÜR

ÖZET

Bu çalışma, dört bölümden oluşmaktadır. İlk iki bölümde sırasıyla termotropik sıvı kristallerin temel özellikleri, Monte Carlo simülasyon tekniği ve Polarize ışığın Mueller-Stokes formalizmi verilmektedir. Üçüncü bölümde ise bir örgü içinde düğüm noktalarına yerleştirilmiş SKM'nin Lebwohl-Lasher modelinde nematik-izotropik faz geçişi, faz geçiş sıcaklığı ve moleküllerin sıcaklığa bağlı yönelim dinamikleri ayrıntılı bir şekilde incelenmiştir. Daha sonra düzlemsel sınır şartlarına sahip bir SK hücre içindeki moleküllerin duvar kuvvetleri ve dış elektrik altında yönelim karakteristikleri hücre kalınlığına bağlı olarak MC simülasyon tekniğiyle belirlenmiştir. MC yöntemiyle elde edilmiş denge konfigürasyonları kullanılarak, SK hücrenin elektro-optik özellikleri kapsamlı bir şekilde analiz edilmiştir. Bu bölümde son olarak düzlemsel ve burğu geometrili aynı kalınlıkta iki hücre için MC simülasyonları kullanılarak elektrik alan bağımlı yönelimsel ve optik iletim karakterleri karşılaştırılmıştır. Dördüncü ve son bölümde ise tez kapsamında yapılan çalışmalar ve ileriye yönelik SK fiziğiyle ilgili bazı başlıklar için genel bir değerlendirme yapılmıştır.

Anahtar Kelimeler: Nematic Sıvı Kristaller, Sıvı Kristal Hücreler , Monte Carlo Simülasyonu , Duvar Kuvvetleri.

SUMMARY

This study consists of four chapters. In the first two chapters, the basic features of thermotropic liquid crystals, Monte Carlo simulation technique, and the Mueller-Stokes formalism of polarized light are yielded respectively. In the third chapter, nematic-isotropic phase transition of a Lebwohl-Lasher lattice model have been investigated in detail. Phase transition temperature, and field dependent molecular orientations also have been identified. Later, the orientational characteristics of the molecules in a liquid crystal cell which have plane anchoring boundary conditions and are under external electric field have been studied by MC simulation technique. By using MC equilibrium configurations, the eletro-optic properties of liquid crystal cells have been analyzed comprehensively. Lastly in this chapter, electric field dependent orientations and optical transmission characteristics have been compared between the cells with plane boundary conditions and the cell with twist boundary conditions by using Monte Carlo simulations. In the last and the fourth chapter, some general evaluations have been given on studies in the comprehension of this thesis and liquid crystal physics for future references.

Key Words: Nematic Liquid Crystals, Liquid Crystal Cell, Monte Carlo Simulation, Anchoring Forces.

TEŞEKKÜR

Başta sevgili eşim Akgül'e, çocuklarım Selma ve Edip'e, sevgili annem, babam ve değerli kardeşlerime her daim sevgi ve desteklerini eksik etmedikleri için teşekkür ederim.

Doktora çalışmam boyunca desteğini ve yardımlarını esirgemeyen aynı zamanda tez danışmanım olan Prof. Dr. Sait Eren SAN hocama teşekkür ederim.

Doktora tez izleme jürimde bulunan Doç. Dr. Numan AKDOĞAN ve Doç. Dr. Haluk ÖZBEK hocalarıma katkı ve desteklerinden ötürü teşekkür ederim.

Prof Dr. Özhan KAYACAN hocama, değerli katkı ve yorumlarından ötürü teşekkür erim.

Değerli arkadaşım ve dostum Yrd. Doç. Ömer POLAT'a katkı ve desteklerinden ötürü teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	iv
SUMMARY	v
TEŞEKKÜR	vi
İÇİNDEKİLER	vii
SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ	ix
ŞEKİLLER DİZİNİ	x
TABLolar DİZİNİ	xii
1. GİRİŞ	1
1.1. Sıvı Kristaller	1
1.2. Sıvı Kristallerin Temel Özellikleri	2
1.2.1. Düzen Tensörü	2
1.2.2. Direktör ve Düzen Parametresi	4
1.3. Anizotropik Özellikler	5
1.3.1. Dielektrik Anizotropi	5
1.3.2. Optiksel Anizotropi: Çift Kırıcılık	7
1.4. Sıvı Kristal Hücreler ve Yüzey Etkileri	9
1.4.1. Homojen Geometrilı Nematik Hücre	9
1.4.2. Burgu Geometrilı Nematik Hücre	10
2. MONTE CARLO YÖNTEMİ VE MUELLER FORMALİZMİ	11
2.1. Monte Carlo Yöntemi	11
2.1.1. Markov Zinciri ve Ayrıntılı Denge	13
2.1.2. Metropolis Algoritması	15
2.2. Polarize Işık: Mueller-Stokes Formalizmi	17
2.2.1. Polarize Işık	18
2.2.2. Stokes Parametreleri ve Poincaré Küresi	20
2.2.3. Mueller-Stokes Formalizmi	23
3. TERMOTROPİK SIVI KRİSTALLERİN MONTE CARLO SİMÜLASYONLARI	25
3.1. Bir SK Tabaka İçin Nematik-İzotropik Geçiş	25

3.1.1. Teori ve Model	26
3.1.2. Sonuçlar ve Değerlendirmeler	27
3.2. Kalınlığa Bağlı Düzlemsel SK Hücrede Elektro-optik Özelliklerin Belirlenmesi	38
3.2.1. Düzlemsel Nematik Sıvı Kristal Hücre	38
3.2.2. Model ve Simülasyon Detayları	39
3.2.3. Sonuçlar ve Değerlendirmeler	41
3.3. Düzlemsel ve Burgu Geometrilili SK Hücrelerde Elektro-optik İletim	49
3.3.1. Model ve Simülasyon Detayları	49
3.3.2. Sonuçlar ve Değerlendirmeler	49
4. SONUÇ ve YORUMLAR	53
KAYNAKLAR	54
ÖZGEÇMİŞ	57
EKLER	58

SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ

Simgeler ve Açıklamalar

Kisaltmalar

ÇK	: Çift Kırıcılık
DK	: Duvar Kuvveti
MC	: Monte Carlo
MCAS	: Monte Carlo Adım Sayısı
MCS	: Monte Carlo Simülasyonu
NSK	: Nematik Sıvı Kristal
SK	: Sıvı Kristal
SKG	: Sıvı Kristal Görüntüleme
SKM	: Sıvı Kristal Molekülü

ŞEKİLLER DİZİNİ

<u>Sekil No:</u>	<u>Sayfa</u>
1.1: a) Tek eksenli bir SKM için $\epsilon_{\parallel}$ -paralel ve $\epsilon_{\perp}$ -dik dielektrik sabitleri b) direktör yönü.	6
1.2: a) Pozitif ve b) negatif dielektrik anizotropili SKM'nin elektrik alan altındaki yönelimi.	7
1.3: Çift kırıcı ortamda dik polarizasyonlara bağlı gecikme.	8
1.4: Düzlemsel sınır şartlarına sahip SK hücrenin temsili resmi.	9
1.5: Burgu sınır şartlarına sahip SK hücrenin temsili resmi.	10
2.1: Standart MC Metropolis algoritması.	17
2.2: Polarizasyon durumlarının Poincaré küresi ile temsili.	22
3.1: Parçacık başına düşen toplam enerjinin MCAS ile değişimi. Simülasyon için indirgenmiş sıcaklık değeri $k_B T=0.7$ dir.	28
3.2: Düzen parametresi S'nin, sıcaklığa bağlı değişim grafiği.	29
3.3: C_V Öz-ısının, sıcaklığa bağlı değişimi.	30
3.4: Parçacık başına düşen toplam enerjinin sıcaklığa bağlı değişimi.	31
3.5: İndirgenmiş enerjinin sıcaklığa bağlı değişimi.	32
3.6: SKM'nin bir denge konfigürasyonu için anlık yönelim düzenleri a) sıcaklık $k_B T=0.20$, düzen parametresi $S=0.644$ b) sıcaklık $k_B T=0.40$, düzen parametresi $S=0.619$.	33
3.7: SKM'nin bir denge konfigürasyonu için anlık yönelim düzenleri a) sıcaklık $k_B T=0.60$, düzen parametresi $S=0.594$ b) sıcaklık $k_B T=0.80$, düzen parametresi $S=0.559$.	34
3.8: SKM'nin bir denge konfigürasyonu için anlık yönelim düzenleri a) sıcaklık $k_B T=1.00$, düzen parametresi $S=0.525$ b) sıcaklık $k_B T=1.25$, düzen parametresi $S=0.396$.	35
3.9: SKM'nin bir denge konfigürasyonu için anlık yönelim düzenleri a) sıcaklık $k_B T=1.30$, düzen parametresi $S=0.094$ b) sıcaklık $k_B T=1.40$, düzen parametresi $S=0.051$.	36
3.10: SKM'nin bir denge konfigürasyonu için anlık yönelim düzenleri a) sıcaklık $k_B T=1.60$, düzen parametresi $S=0.001$ b) sıcaklık $k_B T=2.35$,	37

düzen parametresi $S=0.000$.

- 3.11: Simülasyonu yapılan sistemin şematik gösterimi. 38
- 3.12: Farklı kalınlıklar için elektrik alan bağımlı ortalama ışık şiddeti iletimi. Uygulanan alan değerleri, ilgili kalınlıktaki hücrenin karakteristik alanına bölünmüştür (Tablo 3.1). P_1 ve P_2 çaprazlamış polarizörlerinin açıları sırasıyla $\varphi = \pm 45^\circ$ 'dir. 44
- 3.13: Farklı kalınlıklar için düzen parametresi S 'nin uygulanan elektrik alana bağlı değişim grafiği 45
- 3.14: SK hücreden geçen ışık şiddetinin φ polarizör açısı ve uygulanan elektrik alana bağlı değişim grafiği. Hücrenin kalınlığı $L_z=12$ 'dir. Bölgeler için ilgili elektrik alan değerleri: Bölge-I'de $0 \leq E/E_{2\pi} \leq 1.54$, Bölge-II'de $1.54 < E/E_{2\pi} \leq 3.10$, ve Bölge-III'de $3.10 < E/E_{2\pi}$. 46
- 3.15: Çaprazlanmış $\varphi = \pm 45^\circ$ polarizör açıları için, $L_x \times L_y=22 \times 22$ ve $L_z=12$ kalınlığındaki SK hücrenin a) $E/E_{2\pi} = 0.26$, b) $E/E_{2\pi} = 1.04$, c) $E/E_{2\pi} = 2.07$, d) $E/E_{2\pi} = 3.11$ dış alan değerlerindeki anlık optik doku görüntüleri ve ilgili direktörleri. 47
- 3.16: $L_x \times L_y \times L_z=22 \times 22 \times 6$ örgü yapısında ki düzlemsel ve burgu geometrilili iki hücrenin genel düzen parametresi S 'nin elektrik alanla değişimi 50
- 3.17: $L_x \times L_y \times L_z=22 \times 22 \times 6$ örgü yapısında a) düzlemsel- ve b) burgu-geometrilili hücrenin farklı elektrik alan değerleri için optik iletim değerlerinin çaprazlanmış polarizör açısı φ 'ye bağlı değişimi. 51

TABLÖLAR DİZİNİ

<u>Tablo No:</u>	<u>Sayfa</u>
3.1: Farklı kalınlıkların için eşik alanlar ($E_{eşik}$), karakteristik alanlar ($E_{2\pi}$), eşik voltajlar ($V_{eşik}$) ve karakteristik voltajlar ($V_{2\pi}$).	42

1. GİRİŞ

Uzun yıllar boyunca maddenin katı, sıvı ve gaz olmak üzere üç fazdan birinde bulunduğu kabul edilmiştir. Ancak 1888’de Reinitzer’in çalışması [Reinitzer, 1888], tamamen katı ya da tamamen sıvı olarak nitelendirilemeyecek başka fazların da olduğunu göstermiştir. Katı ve sıvı arasında gözlemlenen bu ara fazlar mezofazlar ya da SK fazları olarak isimlendirilmiştir. Buna göre SK ortam, kelime manası olarak, maddenin sıvı ve kristal durumları arasında bulunan bir ara durum (yada mezofaz) anlamına gelmektedir. Akışkanlık, damla yapıya bürünme ve bulunduğu kabın şeklini alma gibi sıvılara has özelliklerin yanında optiksel anizotropi, elektriksel ve manyetik özellikler, belirli bir yön doğrultusunda kendini tekrarlama gibi kristallere özgü özellikleri taşımasından dolayı bu isim verilmiştir.

1.1. Sıvı Kristaller

SKM, termodinamik olarak izotropik sıvı ile katı kristal arasında konumlandırılmış makro-molekül olarak betimlediğimiz oldukça büyük anizotropik geometrili yapılardır [Gennes and Prost, 1993]. Bu anizotropilerin simetriteri aynı zamanda mezofazlar arasındaki geçişleri de tanımlamaktadır. Deneysel ve teorik olarak şimdiye kadar en çok çalışılan SK fazı nematik fazdır. Nematik fazda direktör ($\hat{n}$) olarak isimlendirilen uzun erimli bir yönelimsel düzen olduğu halde konum ötelemesine bağlı uzun erimli bir düzenden bahsedilemez [Kumar, 2001]. Bu düzen aynı zamanda SK malzemenin optik, elektrik, manyetik ve elastiki özelliklerinde gözlemlenen anizotropik karakterinde bir nedenidir. Buna ek olarak, ÇK olarak da isimlendirilen optik anizotropi, SK’in uygulama alanlarında önemli bir role sahiptir. SKG’nin bütün çeşitlerinde, maksimum bir kontrast oranı elde edilmesi, maksimum bir ÇK değerini gerektirir. SKM’i düşük bir dış alana dahi tepki verdiğinden, ÇK değerlerini de kontrol etmek mümkündür [Pelzl, 1998], [Hirschmann and Reiffenrath, 1998]. Böylece SK’de, optiksel iletimin alan bağımlı karakterizasyonunu yapmak mümkün olur.

Anizotropiklik ve öztoplanım doğaları nedeniyle SKM, birçok cihazın elektro-optik uygulamalarında vazgeçilmez bir öneme sahiptir [Kim et al., 2002], [Yaroshchuk et al., 2010], [Ha et al., 2012], [Lagerwall and Scalia, 2012].

Literatürde, SKM ve SK dispersiyonlarının voltaja bağlı ışık geçirgenliği üzerine çok sayıda deneysel ve hesaplamalı çalışma bulmak mümkündür. Son zamanlarda bu çalışmaların özellikle karbon nano-tüp ya da nano-parçacık katkılı SK'in voltaja bağlı ışık geçirgenliği konusunda yoğunlaştığı görülmektedir (Dolgov et al., 2008], [Jo et al., 2009], [Castellón et al., 2010], [Lee et al., 2011]. SK'in elektro-optik özellikleri üzerine yapılan bilgisayar simülasyonu çalışmaları teorik modellerin ve deneysel gözlemlerin karşılaştırılmasında çok önemli bir yere sahiptir.

Uygulama alanlarının ve modellemenin kolaylığı açısından SKM sıklıkla çubuk şeklinde temsil edilirler. Bu sayede moleküllerin makroskobik davranışları daha iyi anlaşılmaktadır. Bu tez boyunca da SKM ya elipsoit ya da çubuk şekilli silindir olarak modellenecek ve bu silindirlerin (ya da elipsoitlerin) uzun eksenleri direktör doğrultuları olarak kabul edilecektir.

1.2. Sıvı Kristallerin Temel Özellikleri

Sıvı kristaller genel olarak termotropikler ve liyotropikler olmak üzere iki ana gruba ayrılırlar. Sıvı kristal fazları sıcaklıktan bağımsız, fakat kristal moleküllerinin konsantrasyonuna bağlı ise liyotropikler olarak isimlendirilir. Termotropik sıvı kristaller de faz geçişleri sıcaklığa bağlıdır.

Bu tezinde kapsamında olan termotropik SK fazlarından olan nematik faz, genel olarak uzun-erimli dönme düzeni ile belirlenir. Nematik kristal molekülleri belirli bir yönde dönme eğilimindedirler. Yerel dönme eğilimleri, bulundukları ortam şartlarına göre değişebilir. Nematik fazda, moleküllerin uzun eksenlerinin yönelimi, $\mathbf{u}^{(i)}$ gibi üç boyutlu uzayda bir birim vektörle tanımlanır. Nematik molekülleri kütle merkezlerine göre geometrik olarak simetrik olduklarından “ $\langle \mathbf{u}^{(i)} \rangle = 0$ ” olur. Bu nedenle nematik sıvı kristallerde düzeni tanımlamak için ferromanyetizmaya benzer bir vektör temsili kullanmak mümkün değildir. Bunun yerine düzen, rank-2 bir matrisle temsil edilir. Bu matrisin özdeğer ve ilgili özvektörleri sistemin düzen parametresi ve fiziksel özelliklerinin belirlenmesinde kullanılır.

1.2.1. Düzen Tensörü

Nematikler için sistemin fazlarını belirleyen düzen,

$$Q_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(u_{\alpha}^{(i)} u_{\beta}^{(i)} - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \right) \quad (1.1)$$

şekinde bir “ rank-2 düzen tensörü” ile tanımlanır [Singh, 2000]. Burada N, $\mathbf{r}$ konumundaki küçük ama makroskobik bir nokta civarındaki moleküllerin sayısı ve $\alpha, \beta = (x, y, z)$ yönlerini tanımlayan indislerdir. Düzen tensörünün temel özellikleri şu şekilde sıralanabilir; düzen tensörü simetriktr:

$$Q_{\alpha\beta} = Q_{\beta\alpha} \quad (1.2)$$

Düzen tensörünün izi sıfırdır:

$$Tr(Q_{\alpha\beta}) = 0 \quad (1.3)$$

yani, :

$$Tr(Q_{\alpha\beta}) = \sum_{\alpha} Q_{\alpha\alpha} = \frac{1}{N} \sum_i \left[\left(u_x^{(i)} \right)^2 + \left(u_y^{(i)} \right)^2 + \left(u_z^{(i)} \right)^2 - \frac{1}{3} 3 \right] = 0 \quad (1.4)$$

şeklinde gösterilebilir.. Düzen tensörünün değişken sayısı: 3x3=9 tanedir. Eşitlik (1.2) dolayısıyla bağımsız değişken sayısı: 9-3=6 ve eşitlik (1.3) dolayısıyla da 6-1=5 olarak bulunur.

İzotropik fazda, $Q_{\alpha\beta}^{izo} = 0$ olur. Z-ekseninde mükemmel şekilde yönelmiş nematik SKM içinse; $u_{\alpha}^{(i)} = [0.0, 0.0, 1.0]$ olmak üzere, $Q_{\alpha\beta} = 0, \alpha \neq \beta$:

$$Q_{yy} = Q_{xx} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(u_x^{(i)} u_x^{(i)} - \frac{1}{3} \delta_{xx} \right) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(0 - \frac{1}{3} 1 \right) = \frac{1}{N} N \left(-\frac{1}{3} \right) = -\frac{1}{3} \quad (1.5)$$

olmak üzere,

$$Q_{zz} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(u_z^{(i)} u_z^{(i)} - \frac{1}{3} \delta_{zz} \right) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(1 - \frac{1}{3} 1 \right) = \frac{1}{N} N \left(\frac{2}{3} \right) = \frac{2}{3} \quad (1.6)$$

bulunur. Bu durumda düzen parametresi:

$$Q = \begin{pmatrix} -\frac{1}{3} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2}{3} \end{pmatrix} \quad (1.7)$$

bulunur. $u_z=0$, durumunda ise yani moleküller sadece xy-düzlemi üzerinde düzgün bir şekilde yayılmışsa, düzen tensörü,

$$Q = \begin{pmatrix} \frac{1}{6} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{6} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{3} \end{pmatrix} \quad (1.8)$$

olarak bulunur.

1.2.2. Direktör ve Düzen Parametresi

Düzen tensörü simetrik rank-2 bir matris olduğu için 3 tane reel özdeğeri ve bunların her birine karşılık birer ortogonal özvektörü bulunur. Bu özdeğerlerden mutlak değerce en büyüğü nemati düzen parametresi (S) ve bu özdeğere karşılık gelen özvektör de direktör olarak tanımlanır. S değeri fiziksel olarak makroskobik bir nokta civarındaki moleküllerin eksenlerinin ortalama bir yönelimidir. Sıvı kristal ortamların anlaşılmasında genellikle ilgilenilen nicelik bu vektörün değişim dinamikleri ve oluşan geometrilerin analiz edilmesi şeklinde olur. Bu vektörün büyüklüğünün bir önemi olmadığı için büyüklüğü birim vektör olarak alınır. Nematik fazdaki sıvı kristal moleküllerinin kütle merkezleri için uzun erimli bir düzen yoktur. Ancak kısa erimli düzenler gözlemlenebilir. SKM'nin her iki ucunda seçilebilen bir yön olmadığı için direktörün yönünün işareti de önemli değildir. İzotropik fazda " $S \approx 0$ " civarında olur. Nematik fazda ise " $0 < S < 1$ " olduğu gözlenir. " $S = 1$ " limiti tüm

moleküllerin aynı doğrultuda olduğunu gösterir ancak gerçek hayatta bu durumu gözlemek mümkün değildir. Genel olarak düzen parametresi, “ $-0.5 < S < 1$ ” aralığında bulunur. Düzen parametresinin negatif olması, moleküllerin yassı bir geometri oluşturdıkları anlamına gelir.

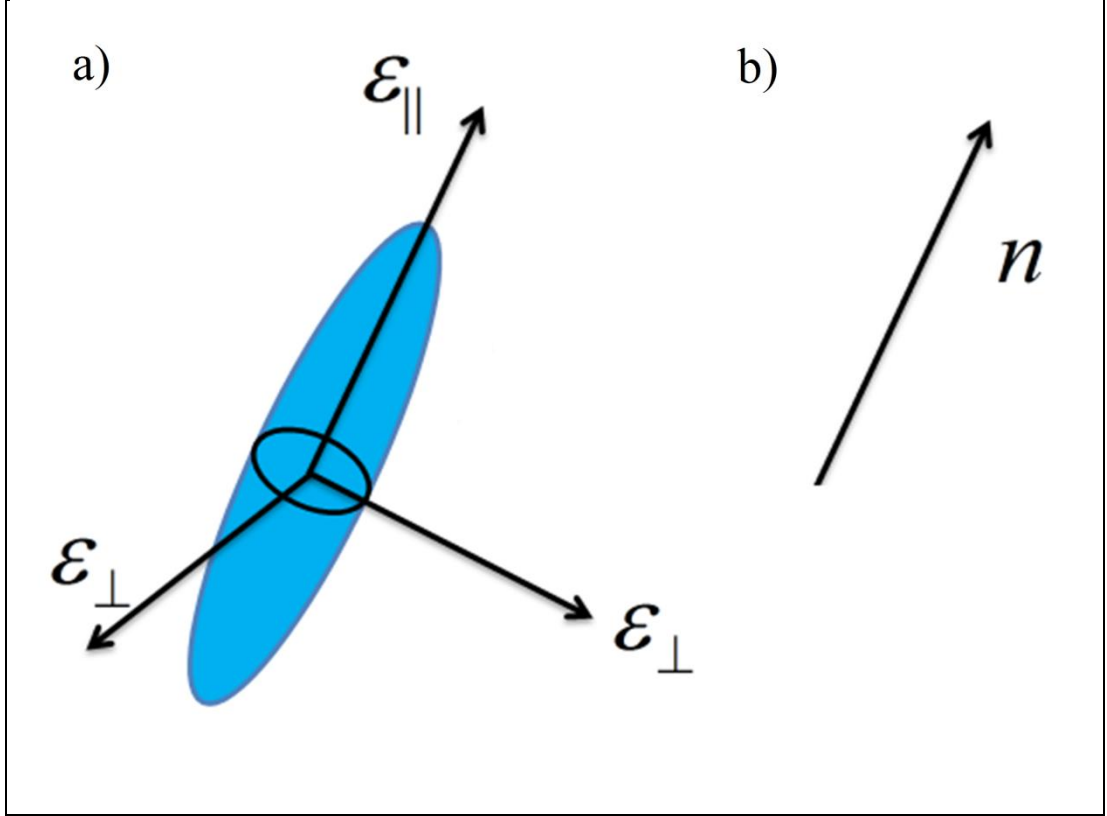
1.3. Anizotropik Özellikler

Yukarda bahsedildiği üzere, SKM geometrik ve optiksel açıdan anizotropik makroskopik moleküllerdir. NSK’de her bir fiziksel özellik, yöne bağlı olarak iki farklı değer alır. Bu değerler, SKM’nin tek eksenli yönelim simetrilerinden dolayı incelenen ana doğrultuya, direktörün paralel ya da dik olmasına bağlı olarak değişir [Khoo, 2007]. SK direktör doğrultusuna bağlı fiziksel özellikler, biri dielektrik ve diğeri optiksel (ÇK) olmak üzere iki tür anizotropi ile belirlenir.

1.3.1. Dielektrik Anizotropi

SKM elektrik ve manyetik alan altında anizotropik doğaları gereği dielektrik özellik gösterirler. NSK’in birbirinden farklı iki dielektrik sabiti vardır: $\epsilon_{\parallel}$ -direktör eksenine paralel bileşen ve $\epsilon_{\perp}$ - direktör eksenine dik bileşen (Şekil-1.1). NSK için dielektrik özellikler, diyagonal formdaki dielektrik tensörü ile verilir:

$$\bar{\epsilon} = \begin{bmatrix} \epsilon_{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{\parallel} \end{bmatrix} \quad (1.9)$$

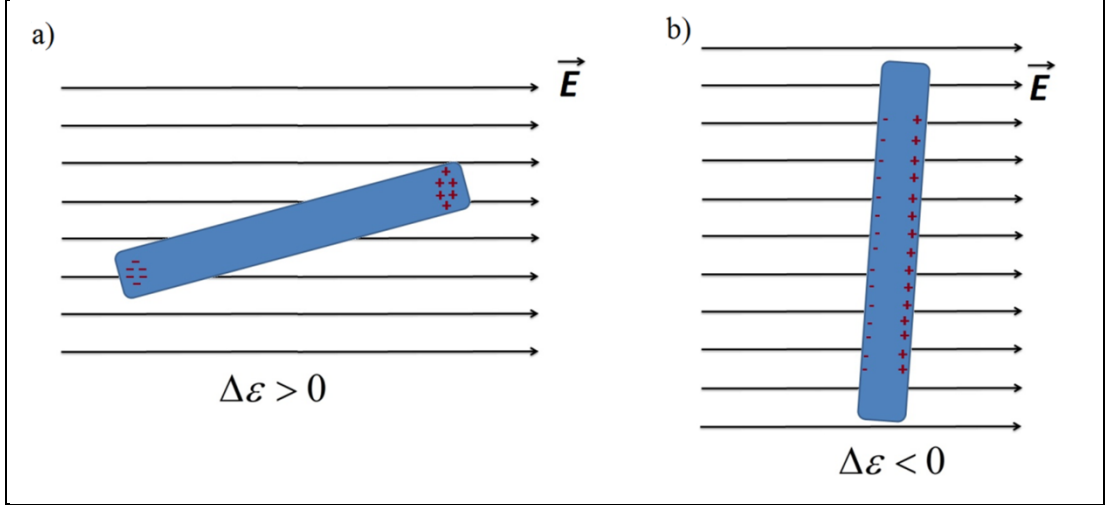


Şekil 1.1: a) Tek eksenli bir SKM için $\epsilon_{||}$ -paralel ve $\epsilon_{\perp}$ -dik dielektrik sabitleri b) direktör yönü.

Bu durumda SK'in dielektrik anizotropisi:

$$\Delta\epsilon = \epsilon_{||} - \epsilon_{\perp} \quad (1.10)$$

ile belirlenir. SKM pozitif dielektrik anizotropili ($\epsilon_{||} > \epsilon_{\perp}$) ise uzun eksen doğrultusunda ki polarizasyon kapasitesi, negatif dielektrik anizotropili ($\epsilon_{||} < \epsilon_{\perp}$) ise uzun eksene dik olan doğrultudaki polarizasyon kapasitesi daha büyüktür. Dielektrik anizotropinin işareti, SKM'nin elektrik alan yönüne paralel ya da dik yönelip yönelmeyeceğini belirler (Şekil. 1-2).



Şekil 1.2: a) Pozitif ve b) negatif dielektrik anizotropili SKM'nin elektrik alan altındaki yönelimi.

1.3.2. Optiksel Anizotropi: Çift Kırıcılık

Çift kırıcılık isminden de anlaşılacağı üzere birbirinden farklı iki kırınım indeksinin bulunması demektir. Bu da ışığın ilerleme hızının polarizasyona bağlı olması anlamına gelir. Şekil 1-3, ÇK ortama giren elektromanyetik bir dalganın polarizasyon bileşenlerine bağlı olarak nasıl davrandığını göstermektedir. Sırasıyla adi ve ekstra kırınım indeksleri n_o ve n_e 'ye bağlı Δ faz farkı, dik polarizasyonlar arasında ortaya çıkar. Şekil 1-3 de görüldüğü üzere, ÇK ortama giren elektromanyetik dalganın Oy-bileşeni, Ox-bileşeninden daha yavaştır. Başka bir deyişle " $n_e \neq n_o$ " olur. Bir ortamın kırınım indeksi, ışığın boşluktaki hızı olan (c)'nin ortamdaki hızı olan (c')'ye oranı olarak tanımlanır:

$$n = \frac{c}{c'} \quad (1.11)$$

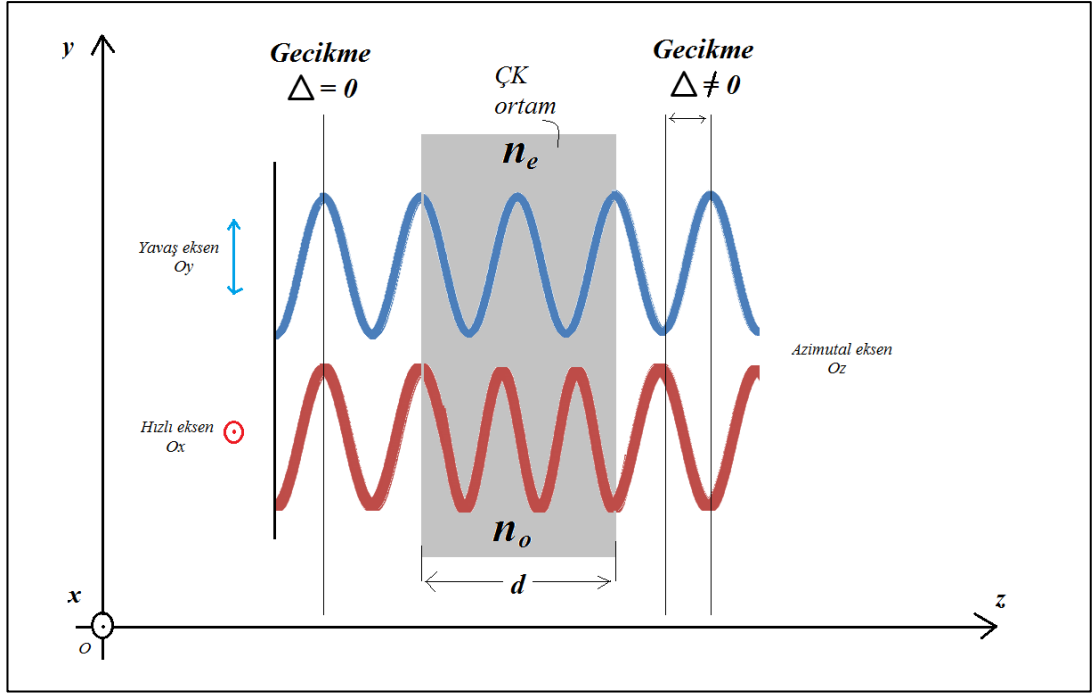
ÇK indeksi ise,

$$\Delta n = n_e - n_o \quad (1.12)$$

ve ÇK faz farkı,

$$\Delta = 2\pi\Delta n\left(\frac{d}{\lambda}\right) \quad (1.13)$$

olarak tanımlanır. Işığın hızlı ilerlediği salınım doğrultusu hızlı eksen (öncü faz) ve yavaş ilerlediği salınım doğrultusu ise yavaş eksen (geciken faz) olarak isimlendirilir.



Şekil 1.3: Çift kırıcı ortamda dik polarizasyonlara bağlı gecikme.

Optiksel açıdan, SK gibi ÇK özelliğine sahip ortamlar anizotropik, cam gibi ÇK özelliği bulunmayan ortamlar ise izotropik olarak isimlendirilirler. SKM'ye gelen ışın ($\mathbf{n}_e$) ve ($\mathbf{n}_o$) kırınım indeksleri ile karşılaşır. $\mathbf{n}_e$ doğrultusu SKM'nin optik eksenini ve $\mathbf{k}$ gelen ışının ilerleme yönü olmak üzere aralarındaki açı φ ise, SKM'nin etkin kırınım indeksi (n_{eff}) ve ÇK (Δn) değerleri [Blinov, 2010],

$$n_{eff} = \frac{n_e n_o}{\sqrt{n_e^2 \cos^2 \varphi + n_o^2 \sin^2 \varphi}} \quad (1.14)$$

$$\Delta n = n_{eff} - n_o \quad (1.15)$$

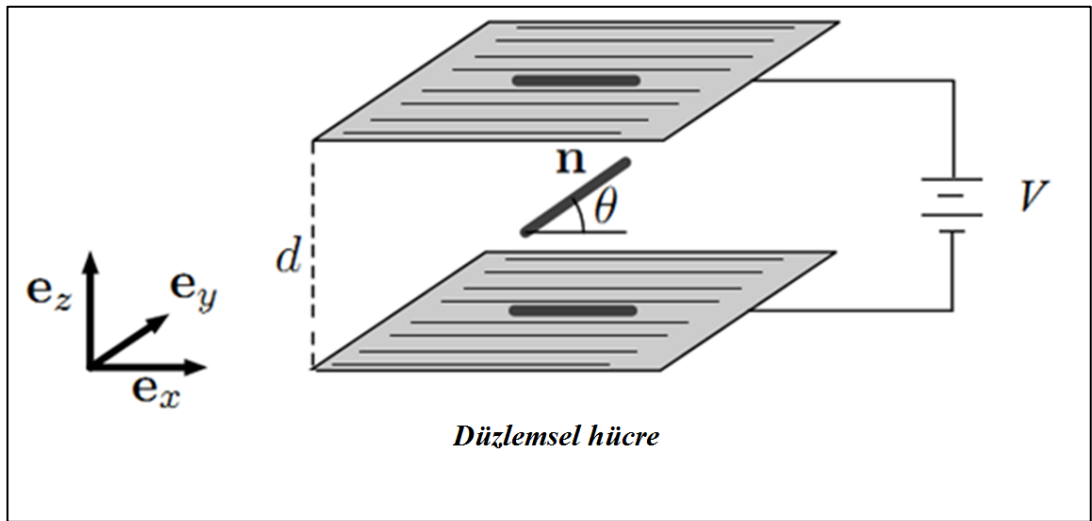
ile belirlenir.

1.4. Sıvı Kristal Hücreler ve Yüzey Etkileri

LCD'ler olarak bilinen SKG cihazları, aralarında yaklaşık 1-10 μ m mesafe bulunan ve kendisine yakın SK moleküllerini belirli bir doğrultuda yöneltme yeteneğine sahip bir filmle kaplı iki cam arasına sıkıştırılmış SK'lerden oluşan bir film tabakalarıdır. SK hücre duvarlarındaki bu yönlendirici etki DK olarak isimlendirilir. Bu filmlerin yönlendirici doğrultusuna ve etki kapasitelerine bağlı olarak SKM'nin doğrultusu şekillenir. SKM'nin yönlendirilmesi elektro-optik uygulamalar açısından çok önemlidir. Bu tez boyunca da incelenecek olan homojen ve burğu geometrili SK hücrelerin kendilerine has yönlendirici ve optik özellikleri bulur [Takatoh, 2005].

1.4.1. Homojen Geometrili Nematik Hücre

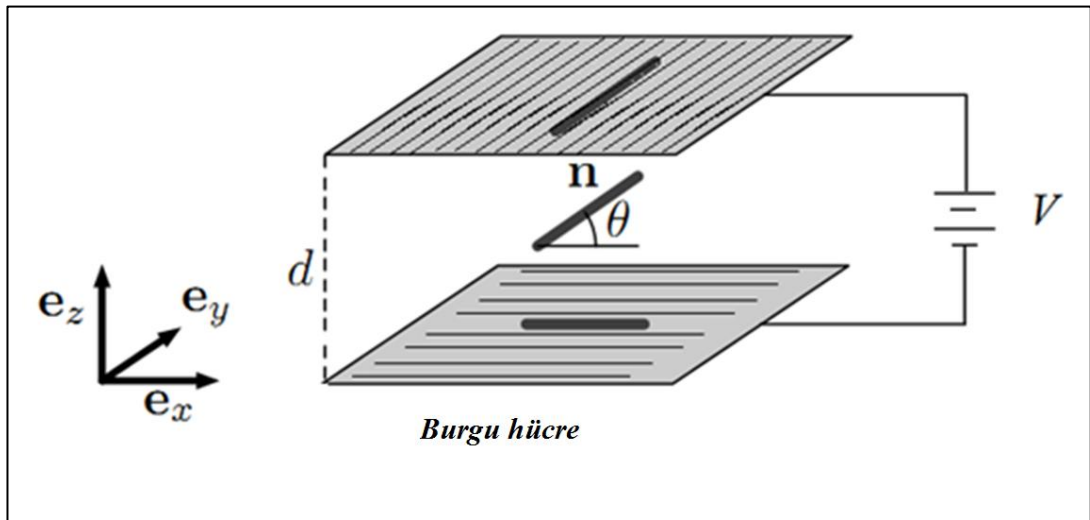
Bu tür hücrelerde cam plakalar üzerindeki kaplamaların yönelim doğrultuları birbirlerine paraleldir. Şekil 1.4'te gösterildiği üzere tabaka düzlemleri üzerindeki yönlendirici doğrultular (ince çizgilerle gösterilen) birbirlerinin eşidir yani paraleldir. Yüzey kuvvetleri nedeniyle, bu duvarlarla temas halindeki SK molekülleri pürüzlendirilme doğrultusunda yönelme eğiliminde olurlar. Arada kalan moleküllerin yönelimleri, dış alan ve moleküller arası etkileşmeye bağlı olarak şekillenir.



Şekil 1.4: Düzlemsel sınır şartlarına sahip SK hücrenin temsili resmi.

1.4.2. Burgu Geometrili Nematik Hcre

Bu tr hcrelerde paralel cam plakalar zerindeki kaplamaların ynelim dođrultuları birbirlerine dik olacak Őekilde bir faz farkı oluŐturur (Őekil 1.5). Yzey kuvvetleri nedeniyle, bu duvarlarla temas halindeki SKM, ynlendirici dođrultuda ynelme eđilimindedir ancak homojen hcreden farklı olarak en alt tabakaya yakın molekller ile en st tabakaya yakın molekller direktrleri tabaka dzlemine paralel fakat birbirlerine dik dođrultuda bulunur. Bu ikisi arasında kalan molekller ise ara ynelimlerde serbest enerjiyi minimize edecek Őekilde ynelirler. Bir duvardan diđerine molekller arası ynelim farkı srekli olarak arz eden bir karakterde olacađından, hcre boyunca ilerleyen elektromanyetik dalganın polarizasyonundaki deđiŐimde srekli olarak arz eder.



Őekil 1.5: Burgu sınır Őartlarına sahip SK hcrenin temsili resmi.

2. MONTE CARLO YÖNTEMİ ve MUELLER FORMALİZMİ

Modern fizik, doğada gözlemlenen yapıları en genel ve sade haliyle tasvir eden matematik modellerin belirlenmesi esasına dayanır. Böyle bir modelin geçerliliği, modelden gelen öngörülerin test edilmesine dayalıdır, yani deneye. Birçok durumda ele alınan modelin deneye test edilmesi oldukça zahmetli, ya da çok maliyetlidir. Ayrıca deney esnasında bir ya da daha çok parametrenin doğru şekilde kontrol edilmesi en basit sistemler için bile oldukça zor olabilir. Bilgisayar simülasyonları, bu tür zorluklarla baş etmek için birçok durumda etkili çözümler üretebilmektedir. Bu bakımdan, simülasyonları, deneye teori arasında bir yerde konumlandırmak mümkündür ve çoğu durumda deneye örtüşen sonuçlar bulunmuştur. Günümüzde simülasyonlar, doğayı anlama çalışmaları içinde özellikle artan işlemci gücü ve yeni algoritmalarla, yerini her geçen gün sağlamlaştırmaktadır.

Bilgisayar simülasyonları kendi içlerinde birçok çeşitlilik arz etmektedirler. Bunlar içinde en eski ve en çok bilinenlerden biri olan Monte Carlo yöntemi, 1940'lı yıllarda Los Alamos National Laboratory'de nükleer silah projesinde çalışan fizikçiler S. Ulam, E. Fermi, J. von Neumann, ve N. Metropolis tarafından geliştirilmiştir. Monte Carlo isminin, Monaco'daki bir kumarhane isminden esinlenildiği düşünülmektedir.

2.1. Monte Carlo Yöntemi

Denge durum istatistiği simülasyonu dendiğinde akla ilk gelen yöntem, MC simülasyonudur. Bu yöntem, karmaşık sistemlerin denge durum istatistiklerinin belirlenmesinde 1950'ler den beri kullanılmakta ve güvenilirliğini birçok sistem için kanıtlamıştır [Landau, 2009]. MC yöntemleri genel olarak, Boltzman-seçim ve Boltzman-dışı-seçim teknikleri olmak üzere ikiye ayrılır. Bu tez boyunca Boltzman seçim tekniklerinden olan Metropolis yöntemi kullanılacaktır.

İstatistiksel fizikte, enerji, düzen parametresi, manyetizasyon, öz-ısı gibi gözlemlenebilir nicelikler bir “Z” bölüşüm fonksiyonu üzerinden alınan ortalamalarla belirlenir. Kanonik bir yığın içinde sabitlenmiş bir “T” sıcaklığı için bir “A” gözlemlenebilirinin termal ortalaması ya da beklenen değeri:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_s A(s) e^{-\beta H(s)} \quad (2.1)$$

olur. Burada “s” tüm olası durumları, “ k_B ” Boltzman sabiti olmak üzere $\beta = (k_B T)^{-1}$ Boltzman faktörünü ve “H” sistemin ilgili durumu için toplam enerjisini veren Hamiltonyen’ini temsil etmektedir. Bölüşüm fonksiyonu,

$$Z = \sum_s e^{-\beta H(s)} \quad (2.2)$$

kanonik yığının tüm olası durumları üzerinden bir toplamdır. Bu durumda normalize edilmiş Boltzman olasılık dağılımı ve sistemin iç enerjisinin beklenen değeri sırasıyla,

$$P(s) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(s)} \quad (2.3)$$

$$E = \langle H(s) \rangle = \frac{1}{Z} \sum_s H(s) P(s) = \frac{1}{Z} \sum_s H(s) e^{-\beta H(s)} \quad (2.4)$$

olur. Bu sistemin tüm durumlarını belirleyen konfigürasyon uzayındaki bir U_n enerjili durumda bulunma olasılığı,

$$P(U_n) = \frac{\exp(-U_n / k_B T)}{\sum_i \exp(-U_i / k_B T)} \quad (2.5)$$

olarak verilir. Benzer şekilde aynı sistem için U_m enerjili bir durumda bulunma olasılığı:

$$P(U_m) = \frac{\exp(-U_m / k_B T)}{\sum_i \exp(-U_i / k_B T)} \quad (2.6)$$

olur. Paydadaki toplam ifadesi, tüm olası enerji değerlerine karşı gelen durumlar üzerinden bir toplamdır. Buradan hareketle sistemin $U_n \rightarrow U_m$ durumuna geçiş olasılığı,

$$P(U_n \rightarrow U_m) = \frac{P(U_m)}{P(U_n)} = \exp[-(U_m - U_n)/k_B T] \quad (2.7)$$

olarak bulunur.

2.1.1. Markov Zinciri ve Ayrıntılı Denge

Kompleks sistemler aynı zamanda dejenere sistemlerdir. Yani bu tür sistemlerde sistemin durum sayısı sonsuz ve her sonlu enerji durumuna karşılık da birden çok durum söz konusudur. Bu yüzden, sistem hakkında makroskobik veriler elde edebilmek için bu dejenere durumlar üzerinden ortalamalar almak gerekir. Ancak, dejenereliği çok yüksek olan bir sistem için (sistemin serbestlik derecesine göre sonsuza yakın değerler), bu tür bir ortalama almak analitik olarak mümkün olmayabilir. Böylesi durumlar için MC Metropolis algoritması, “Markov zinciri” olarak isimlendirilen ardışık rastlantısal sistem ötelemeleri üzerinden ortalamalar almayı önerir öyle ki bu ötelemeler sonlu kez tekrarlandığında gerçek ortalama değere oldukça yakınsayacağı varsayılmaktadır. Buna göre sistemi tanımlayan konfigürasyon uzayında yapılan rastlantısal ötelemelerin (konum ötelemesi yada dönme gibi) her biri bir Markov zinciridir Sistemin ardışık rastlantısal durumları $s_1, s_2, \dots, s_n$ ve bu durumlar için ilgili olasılıklar $P(s_1), P(s_2), \dots, P(s_n)$ olarak verilmiş olsun. Sistemin durumları arasında bir korelasyon yoksa yani sistem tam anlamıyla rastlantısal ise,

$$P(s_1, s_2, \dots, s_n) = P(s_1)P(s_2) \dots P(s_n) \quad (2.8)$$

eşitliği sağlanır. Sistemin ardışık durumları arasında bir korelasyon varsa bu durumda eşitlik (2.8),

$$P(s_1, s_2, \dots, s_n) = P(s_1)T(s_1 \rightarrow s_2)P(s_2)T(s_2 \rightarrow s_3) \dots T(s_{n-1} \rightarrow s_n)P(s_n) \quad (2.9)$$

haline gelir. Burada $T(s \rightarrow s')$ durumlar arası geçiş olasılığıdır ve,

$$\sum_{s'} T(s \rightarrow s') = 1 \quad (2.10)$$

normalizasyon şartını sağlar ve bu tip rastlantısal ötelemeler Markov zinciri olarak isimlendirilir.

Markov zincirinin en önemli özelliklerinden bir tanesi, faz uzayındaki her bir konfigürasyonun, sonlu sayıdaki adımlarla diğer konfigürasyonlardan elde edilebilmesi yani bağlanabilirlik özelliğidir. İstatistiksel sistemin, bir “ t ” bilgisayar zamanı için (iterasyon sayısı anlamında) “ s ” durumunda bulunma olasılığı $P(s, t)$, “ s' ” durumunda bulunma olasılığı $P(s', t)$ ve sistemin birim zamanda $s \rightarrow s'$ geçiş olasılığı $T(s \rightarrow s', t)$ ise,

$$P(s, t+1) = P(s, t) + \sum_{s'} [T(s' \rightarrow s)P(s', t) - T(s \rightarrow s')P(s, t)] \quad (2.11)$$

olur. Çok büyük “ t ” değerleri için (denge durumuna yaklaştıkça) sistem durumlarının olasılık dağılımının zaman bağımlılığı kaybolur:

$$\sum_{s'} [T(s' \rightarrow s)P(s', t) - T(s \rightarrow s')P(s, t)] = 0 \quad (2.12)$$

yani,

$$T(s' \rightarrow s)P(s', t) = T(s \rightarrow s')P(s, t) \quad (2.13)$$

şartı sağlanır. Bu durum ayrıntılı denge şartı olarak isimlendirilir.

Ayrıntılı denge şartını verilen herhangi bir olasılık dağılımı için uygulamak mümkündür. Eğer eşitlik (2.3)’de verilen Boltzman dağılımı için uygulayacak olursak:

$$\frac{T(s \rightarrow s')}{T(s' \rightarrow s)} = \frac{P(s')}{P(s)} = \frac{\frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{U_{s'}}{k_B T}\right)}{\frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{U_s}{k_B T}\right)} = \exp\left[-(U_{s'} - U_s) / k_B T\right] \quad (2.14)$$

bulunur. Dikkat edilirse Z bölüşüm fonksiyonu terimleri burada birbirlerini sadeleşmektedir. Bu nedenle geçiş olasılıkları için bölüşüm fonksiyonlarını dikkate almaya gerek yoktur.

2.1.2. Metropolis Algoritması

20. yy ortalarında geliştirilmiştir. Seçilen bir sıcaklıktaki kanonik bir yığın için mikro durumların asimptotik (denge) kısmını barındıran bir Markov-zinciri üretir. Makroskobik özellikler MC örneğinden alınan aritmetik ortalamalarla kolayca hesaplanabilir. Metropolis algoritması, sistemin durumları arasında stokastik geçişlerin bir kontrol mekanizmasına bağlı yapılmasını sağlar öyle ki bu geçişler arasındaki olasılık dağılımı belirli bir yerden sonra Boltzman dağılımına yakınsar, yani kararlı hale gelir. Metroplis algoritması için ayrıntılı denge şartı:

$$T(s \rightarrow s') = \begin{cases} \exp\left[-(U_{s'} - U_s) / k_B T\right], & (U_{s'} - U_s) > 0 \\ 1, & (U_{s'} - U_s) \leq 0 \end{cases} \quad (2.15)$$

olur. Böylece yeni s' konfigürasyonu eski s konfigürasyonu kullanılarak elde edilebilir [Landau, 2009]. Ayrıntılı denge şartını içeren Metropolis algoritması adımları (bu tez boyunca simülasyonlarda kullanılan) şu şekilde sıralanabilir:

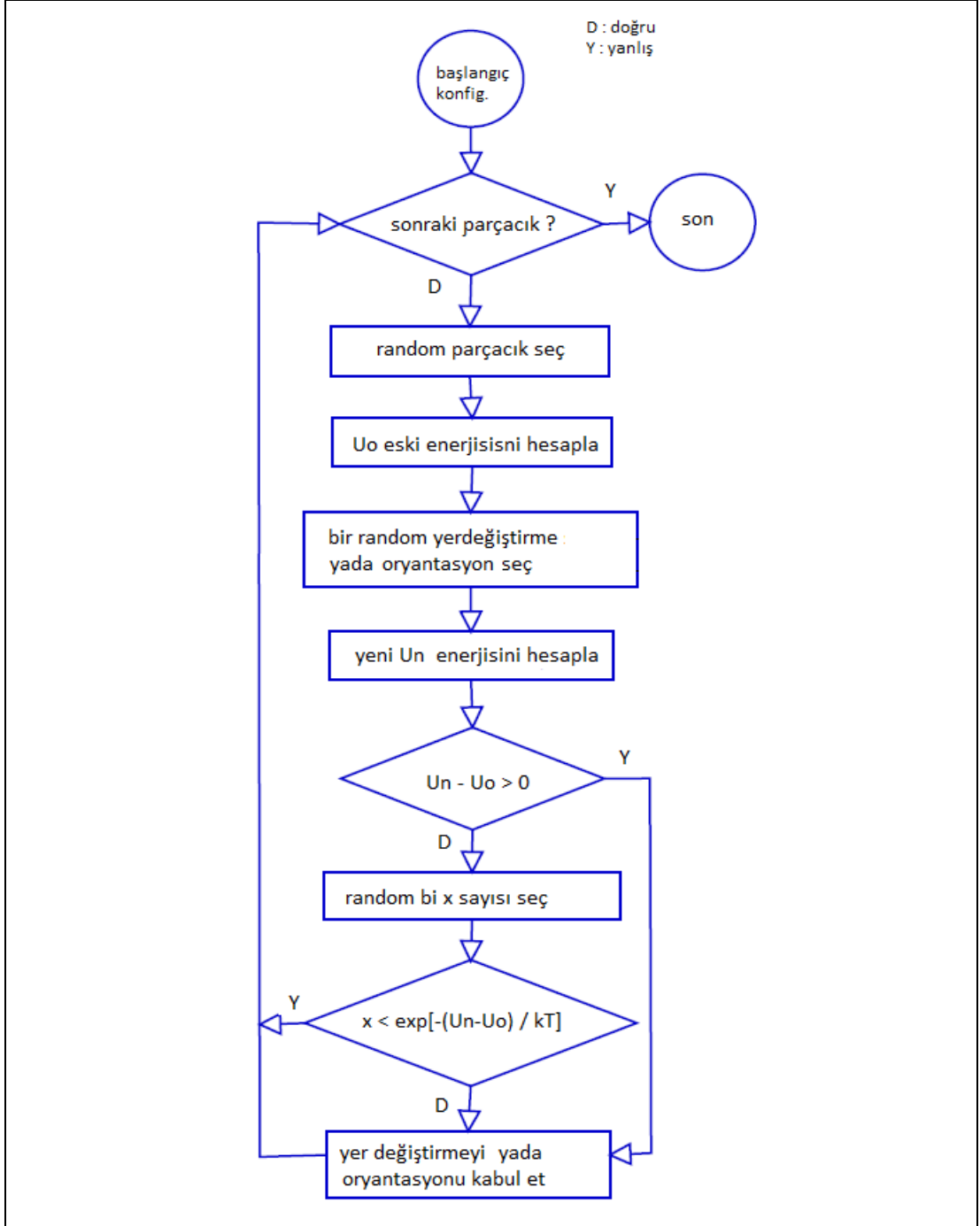
- i) Sistem için tamamen rastlantısal bir konfigürasyonunu oluştur ve bu konfigürasyon için U_s enerjisini hesapla.
- ii) Bir parçacık seç ve bu parçacığa faz uzayında rastlantısal bir öteleme yap (dönme yada konum ötelemesi gibi).
- iii) Oluşan yeni konfigürasyona için $U_{s'}$ enerjisini hesapla.
- iv) Enerjideki $\Delta U = U_{s'} - U_s$ değişimi hesapla

v) Eğer

- $\Delta U < 0$ ise yeni konfigürasyonu kabul et.
- $\Delta U \geq 0$ ise, $T(s \rightarrow s') = \exp[-(U_{s'} - U_s)/k_B T]$ geçiş olasılığını hesapla ve $0 \leq R \leq 1$ aralığında bir rastgele sayı seç. Eğer $T(s \rightarrow s') > R$ ise yeni konfigürasyonu kabul et değilse eski konfigürasyonu yeni konfigürasyon olarak ata.

vi) MC zinciri dengeye ulaşınca kadar ii)-v) adımlarını tekrarla.

Yukarda verilen MC Metropolis algoritmasının şematik bir temsili şekil 2.1'de ayrıca verilmiştir. Sistem için ayrıntılı denge şartı sağlandıktan sonra, makroskobik gözlemlenebilirler (enerji, öz-ısı, düzen parametresi gibi) sistem konfigürasyonları üzerinden ortalamalarla hesaplanabilir.



Şekil 2.1: Standart MC Metropolis algoritması.

2.2. Polarize Işık: Mueller-Stokes Formalizmi

Işık karakteristik olarak dalga ya da parçacık gibi davranır. Gözlem sistemine ya da incelenen fiziksel fenomene bağlı olarak dalga davranışı ya da parçacık davranışını ayrı ayrı belirlemek mümkündür. Genellikle fotoelektrik olay gibi ışık madde etkileşimini betimleyen kuantum etkiler ışığın parçacık özelliğini yansıtırken

polarizasyon, girişim, kırınım ve yansıma gibi özellikleri dalga karakterini yansıtır. Işığın dalga özellikleri Maxwell'in klasik elektromanyetik teorisiyle son derece başarılı bir şekilde açıklanmaktadır. Bu tez boyunca da ışıkla ilgili fenomenler Maxwell'in elektromanyetik dalga teorisi üzerine inşa edilecektir.

2.2.1. Polarize Işık

Işık elektrik ve manyetik alanların birbirlerine dik bir şekilde titreştiği bir dalga olduğu halde optik özellikler genellikle elektrik alan titreşimleri dikkate alınarak belirlenir. Sağ-elli koordinat sistemine göre z-ekseni doğrultusunda ilerleyen bir ışının yatay ve dikey bileşenleri sırasıyla x- ve y-eksenlerinde olsun. Bu durumda elektrik alan bileşenleri:

$$E_x(t) = A_{0x} \exp \left[i \left(\omega t - \frac{2\pi}{\lambda} z + \varphi_x \right) \right] \quad (2.16)$$

$$E_y(t) = A_{0y} \exp \left[i \left(\omega t - \frac{2\pi}{\lambda} z + \varphi_y \right) \right] \quad (2.17)$$

E_x ve E_y bileşenlerine sahip elektrik alan titreşimleri bir SK (yada ÇK) ortama girdiğinde her bir bileşene büyüklüğü farklı olacak şekilde hızlarını yavaşlatıcı bir etkiye uğrarlar. Ortam kalınlığına ve gelen ışının dalga boyuna bağlı olarak çıkan ışının şiddetinde ve polarizasyonunda bazı değişiklikler gözlemlenir. ÇK özelliğine sahip SK ortamlar için yavaşlatıcı etki,

$$\delta = \varphi_y - \varphi_x \propto 2\pi(n_0 - n_e) \frac{d}{\lambda} \quad (2.18)$$

ile belirlenir. Burada “ d ” ortamın kalınlığı, “ λ ” ışığın dalga boyu, “ n_0 ” ve “ n_e ” ise sırasıyla adi ve harici kırınım indeksleridir. Çizgisel, dairesel ve eliptik polarizasyonlar “ A_{0x} ” ve “ A_{0y} ” genlikleri cinsinden bulmak mümkündür:

$$\left(\frac{E_y(t)}{A_{0y}}\right)^2 + \left(\frac{E_x(t)}{A_{0x}}\right)^2 - 2\left(\frac{E_y(t)E_x(t)}{A_{0y}A_{0x}}\right)\cos\delta = \sin^2\delta \quad (2.19)$$

“ A_{0x} ”, “ A_{0y} ” ve “ δ ” sabitler olduğundan, $E_x(t)$, $E_y(t)$, açıkça zamana bağlıdır. Eşitlik (2.19)’u, optik alanın gözlemlenebilirliği olarak belirleyebilmek için zaman üzerinden bir ortalama alınması gerekir:

$$\frac{\langle E_y(t) \rangle^2}{A_{0y}^2} + \frac{\langle E_x(t) \rangle^2}{A_{0x}^2} - 2\frac{\langle E_y(t)E_x(t) \rangle}{A_{0y}A_{0x}}\cos\delta = \sin^2\delta \quad (2.20)$$

Burada,

$$\langle E_i(t)E_j(t) \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T E_i(t)E_j(t)dt \quad i, j = x, y \quad (2.21)$$

dir. Eşitlik (2.21) yi $4A_{0y}^2A_{0x}^2$ ile çarparsak,

$$4A_{0y}^2\langle E_y^2(t) \rangle + 4A_{0x}^2\langle E_x^2(t) \rangle - 8A_{0y}A_{0x}\langle E_y(t)E_x(t) \rangle\cos\delta = (2A_{0y}A_{0x}\sin\delta)^2 \quad (2.22)$$

ve (2.16) ve (2.17) eşitlikleri için ortalamalar alınırsa:

$$\langle E_x(t) \rangle^2 = \frac{1}{2}A_{0x}^2 \quad (2.23)$$

$$\langle E_y(t) \rangle^2 = \frac{1}{2}A_{0y}^2 \quad (2.24)$$

$$\langle E_y(t)E_x(t) \rangle = \frac{1}{2}A_{0y}A_{0x}\cos\delta \quad (2.25)$$

Eşitlik (2.22)’de, (2.23), (2.24) ve (2.25) eşitlikleri yerine yazılır ve her iki tarafına $(A_{0x}^4 + A_{0y}^4)$ ifadesi eklenip çıkarılırsa,

$$(A_{0x}^2 + A_{0y}^2)^2 - (A_{0x}^2 - A_{0y}^2)^2 - (2A_{0x}A_{0y} \cos \delta)^2 = (2A_{0x}A_{0y} \sin \delta)^2 \quad (2.26)$$

elde edilir. Parantez içindeki her bir ifade için,

$$S_0 = A_{0x}^2 + A_{0y}^2 \quad (2.27)$$

$$S_1 = A_{0x}^2 - A_{0y}^2 \quad (2.28)$$

$$S_2 = 2A_{0x}A_{0y} \cos \delta \quad (2.29)$$

$$S_3 = 2A_{0x}A_{0y} \sin \delta \quad (2.30)$$

tanımlar ve eşitlik (2.26) de yerine yazılırsa,

$$S_1^2 + S_2^2 + S_3^2 = S_0^2 \quad (2.31)$$

bulunur. Eşitlikler (2.27-30)'da tanımlanan parametreler, bir düzlem dalga için Stokes parametreleri olarak bilinir [Goldstein, 2011].

2.2.2. Stokes Parametreleri ve Poincaré Küresi

Eşitlikler (2.27-30)'da verilen parametreler 1852 yılında George Gabriel Stokes tarafından tanımlanmıştır ve Stokes parametreleri olarak bilinir. Tüm Stokes parametreleri reel niceliklerdir ve eliptik polarizasyonun gözlemlenebilirleridir. S_0 parametresi ışığın toplam şiddetini, S_1 yatay ya da dik çizgisel polarizasyon miktarını, S_2 $+45^\circ$ yada -45° çizgisel polarizasyon miktarını ve S_3 'de sağ-elli ya da sol-elli dairesel polarizasyon miktarını verir. Polarize ışığın bütün durumları için Schwartz eşitsizliği daima sağlanır:

$$S_0^2 \geq S_1^2 + S_2^2 + S_3^2 \quad (2.32)$$

Stokes parametreleri ile ışığın ne kadarının polarize olduğu ise P polarizasyon derecesi ile belirlenebilir:

$$P = \frac{I_{polarize}}{I_{toplaml}} = \frac{\sqrt{S_1^2 + S_2^2 + S_3^2}}{S_0} \quad 0 \leq P \leq 1 \quad (2.33)$$

Burada $I_{polarize}$ ışığın polarizasyon bileşenlerinin toplan şiddeti ve $I_{toplaml}$ toplam ışık şiddetidir. $P=1$ değeri ışığın tamamıyla polarize olduğu ve $P=0$ ise anpolarize olduğu anlamına gelir.

Stokes parametreleri bir kolon matrisi halinde bir araya getirilebilir. Bu matris Stokes vektörü olarak isimlendirilir. Eliptik polarize ışık için Stokes vektörü,

$$\vec{S} = \begin{bmatrix} S_0 \\ S_1 \\ S_2 \\ S_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{0x}^2 + A_{0y}^2 \\ A_{0x}^2 - A_{0y}^2 \\ 2A_{0x}A_{0y} \cos \delta \\ 2A_{0x}A_{0y} \sin \delta \end{bmatrix} \quad (2.34)$$

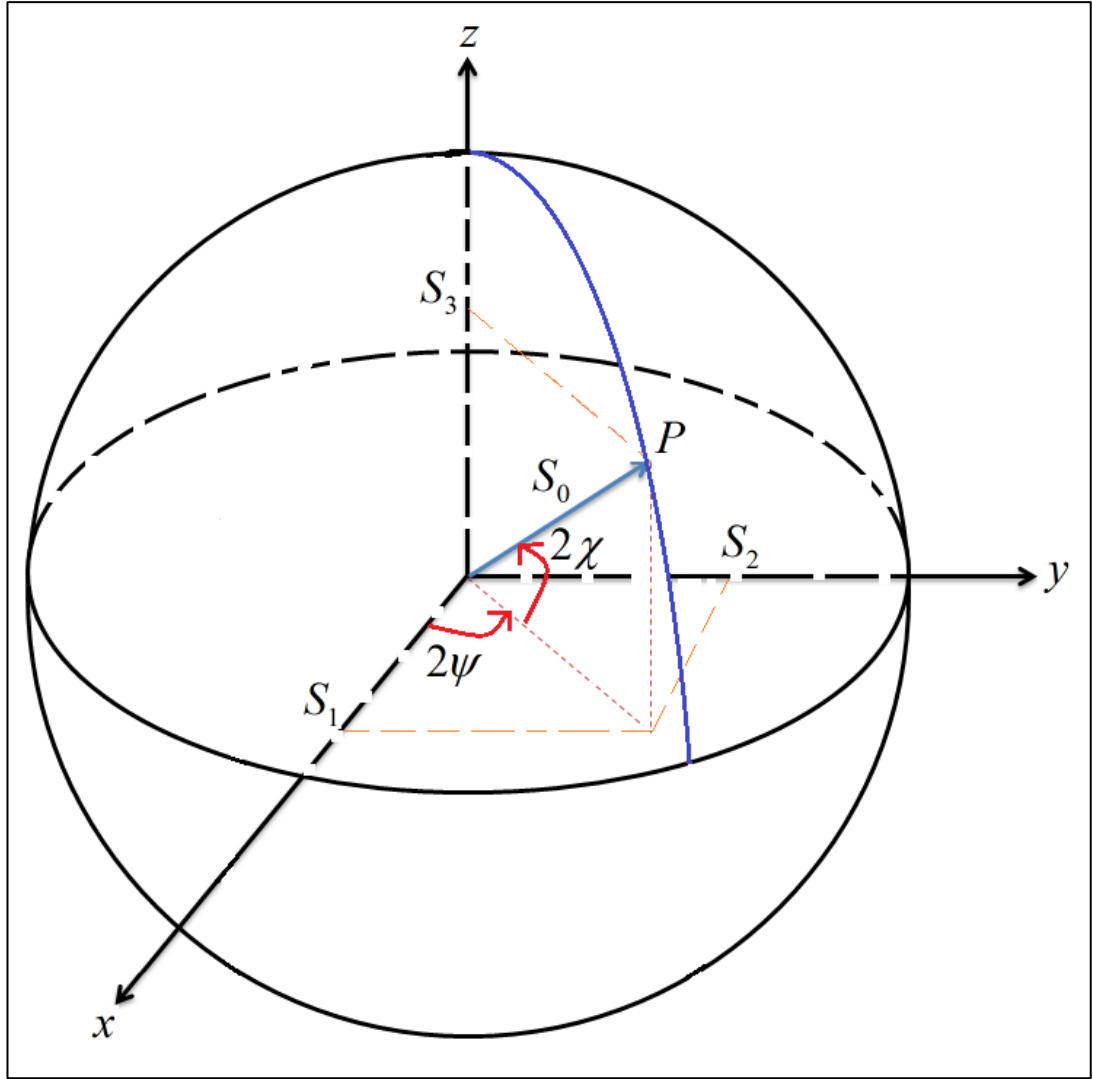
olur.

Dik bir kordinat siteminde verilen polarizasyon elipsinin bir ψ dönme ve χ eliptiklik açıları Stokes parametreleriyle tanımlanabilir [Goldstein, 2011]:

$$\tan 2\psi = \frac{S_2}{S_1} = \frac{2A_{0x}A_{0y} \cos \delta}{A_{0x}^2 - A_{0y}^2}, \quad 0 \leq \psi \leq \pi \quad (2.35)$$

$$\sin 2\chi = \frac{S_3}{S_0} = \frac{2A_{0x}A_{0y} \sin \delta}{A_{0x}^2 + A_{0y}^2}, \quad \frac{-\pi}{4} \leq \chi \leq \frac{\pi}{4} \quad (2.36)$$

Bu açılar kullanılarak polarizasyon durumları için Stokes parametreleri bir küre yüzeyi üzerinde temsil edilebilirler. Bu küreye Poincaré Küresi denir (şekil 2.2).



Şekil 2.2: Polarizasyon durumlarının Poincaré Küresi ile temsili.

Eşitlikler (2.35) ve (2.36)'da verilen polarizasyon temsiliinin yanında başka bir kullanışlı temsil kutupsal koordinat temsilidir. Buna göre S_0 toplam ışık şiddeti ise,

$$S_0 = E_0^2 = E_{0x}^2 + E_{0y}^2 \quad (2.37)$$

$$E_{0x} = E_0 \cos \alpha, \quad E_{0y} = E_0 \sin \alpha, \quad 0 \leq \alpha \leq \frac{\pi}{2} \quad (2.38)$$

bulunur. Bu durumda eşitlik (2.34) ifadesi,

$$\vec{S} = \begin{bmatrix} S_0 \\ S_1 \\ S_2 \\ S_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{0x}^2 + A_{0y}^2 \\ A_{0x}^2 - A_{0y}^2 \\ 2A_{0x}A_{0y} \cos \delta \\ 2A_{0x}A_{0y} \sin \delta \end{bmatrix} = I_0 \begin{bmatrix} 1 \\ \cos 2\alpha \\ \sin 2\alpha \cos \delta \\ \sin 2\alpha \sin \delta \end{bmatrix} = \quad (2.39)$$

olarak bulunur. Genellikle Stokes vektörleri normalize edilmiş ışık şiddeti ($I_0 = 1$) formunda yazılır. Buna göre eşitlik (2.39),

$$\vec{S} = \begin{bmatrix} 1 \\ \cos 2\alpha \\ \sin 2\alpha \cos \delta \\ \sin 2\alpha \sin \delta \end{bmatrix} \quad (2.40)$$

olur. Eşitlikler (2.37-38)'i, (2.40)'da yerine yazarsak,

$$\vec{S} = S_0 \begin{bmatrix} 1 \\ \cos 2\chi \cos 2\psi \\ \cos 2\chi \sin 2\psi \\ \cos 2\chi \end{bmatrix} \quad (2.41)$$

bulunur. Yatay, dikey, $\pm 45^\circ$, sağ-elli, sol-elli polarizasyon durumları ve anpolarize ışık için Stokes vektörleri ve elde edilişleri için Ek B'ye bakılabilir.

2.2.3. Mueller-Stokes Formalizmi

Mueller formalizmi, ışığın tüm polarizasyon durumlarını veren Stokes vektörlerini değiştirebilen bir matris yöntemidir. 1943 yılında Hans Mueller tarafından geliştirilmiştir. Bu formalizm de bütün optik elemanlar 4x4 matrislerle temsil edilirler. Herhangi bir optik elemanın Mueller matrisi “ M ” ve bu optik elemana doğru ilerleyen bir ışının Stokes vektörü “ S ” olsun. Gelen ışın, bu optik elemandan geçtiğinde, çıkan ışının Stokes vektörü “ S' ”:

$$S' = MS \quad (2.42)$$

matris çarpımıyla bulunur. Işığın ilerleme doğrultusu boyunca birden çok optik eleman var ve bu elemanların Mueller matrisleri $M_1, M_2, \dots, M_n$ olmak üzere, çıkan ışının Stokes vektörü

$$S' = M_1 M_2 \dots M_n S \quad (2.43)$$

olur. Polarizör ve optik geciktirici gibi optik elemanlar için ilgili genel Mueller matrisleri Ek C'de ayrıca verilmiştir.

3. TERMOTROPİK SIVI KRİSTALLERİN MONTE CARLO SİMÜLASYONLARI

SK, izotropik sıvı fazı ve katı kristal fazı arasında konumlanmış maddenin bir durumunu temsil eder. Birinci bölümde bahsedildiği üzere, sıvılar gibi akışkan özellik göstermelerinin yanında optiksel, elektriksel ve manyetik özellikleri bakımından katılara has anizotropik karakterde davranışlar da sergilerler. Bilindiği üzere SKM'nin doğrultuları elektrik alan, manyetik alan ya da duvar kuvvetleri ile kolaylıkla kontrol edilebildiğinden endüstride SKG cihazları için vazgeçilmez niteliktedir. SKM'den oluşan bir sistemin molekül yönelimlerine bağlı elektro-optik özelliklerinin belirlenmesi bu nedenle çok önemlidir. İstatistiksel fizikte birçok karmaşık sistemin simülasyonu için oldukça güvenilir sonuçlar veren MC yöntemi [Landau, 2009]. bu özelliklerin belirlenmesinde hayati bir role sahiptir [Pasini et al., 2005].

Bu bölüm iki ana kısımdan oluşmaktadır. Öncelikle Lebwohl-Lasher modeli kullanılarak nematik-izotropik faz geçi MC yöntemi kullanılarak belirlenecektir. Nematik-izotropik geçiş sıcaklığı düzen parametresinin sıcaklığa bağlı değişim grafiği kullanılarak çıkartılacaktır. Sistemin sabit hacimdeki “ C_V ” öz-ısı, ile indirgenmiş “ V_4 ” Binder enerjisi ayrıca elde edilecektir. İkinci kısımda SK hücreler incelenecek, anizotropik sınır şartları altında elektro-optik özellikler hücre kalınlığına ve farklı polarizör konfigürasyonlarına bağlı olarak elde edilecektir.

3.1. Bir SK Tabaka İçin Nematik-İzotropik Geçiş

Bu bölümde, boyutları $N = L_x \times L_y \times L_z = 14 \times 14 \times 4$ olan ve 784 düğüm noktasından oluşan bir SK tabaka için sıcaklığa bağlı özellikleri incelenecektir. T sıcaklık ve k_B Boltzman sabiti olmak üzere tüm sıcaklık değerleri için $k_B=1$ seçilerek ($k_B T$) indirgenmiş sıcaklık değerleri kullanılacaktır. Her bir molekül birim uzunluktaki 3-boyutlu bir $|u\rangle$ spin vektörü ile temsil edilmektedir. Her bir spin başsız yani baş-kuyruk simetrisi olan tek eksenli SKM'nin doğrultusunu vermektedir bu nedenle de birim uzunluktadır yani $\langle u_i | u_i \rangle = 1$ dir.

3.1.1. Teori ve Model

En yakın komşu spinler arasındaki etkileşme baş-kuyruk simetrisine sahip Lebwohl-Lasher potansiyali [Lebwohl, 1972] ile verilir:

$$\varepsilon_{ij} = -\frac{1}{2} [3 \cos^2 \theta_{ij} - 1] \quad (3.1)$$

Burada “ i ve j ”, birbirine en yakın örgü noktaları, ve θ_{ij} iki spin arasındaki açıdır. Bu durumda $\cos \theta_{ij} = \langle u_i | u_j \rangle$ olur. Kübik bir örgü için en yakın komşu örgü noktalarının sayısı 6’dır. Buna göre eşitlik (3.1) den en yakın iki spin arasındaki etkileşme enerjisi, spin doğrultuları arasındaki açı $0 \leq \theta_{ij} \leq \pi/2$ olacağından $-1 \leq \varepsilon_{ij} \leq 0.5$ aralığında hesaplanır. Bu durumda bir “ C ” mikrodurumunda buluna sistem için toplam enerji,

$$E(C) = -\sum_{\langle ij \rangle} \varepsilon_{ij} \quad (3.2)$$

olur.

Örgü noktalarında bulunan spinler bir “ C ” mikrodurumunda bulunsun. $|u_i\rangle$, i - numaralı örgü noktasındaki spin ise, “ C ” mikrodurumuna karşılık gelen izdüşüm operatörü, tüm spinler üzerinden alınan bir tensör çarpımı ile hesaplanabilir [Singh, 2000], [Jayasri et al., 2005], [Pasini et al., 2005]:

$$A(C) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |u_i\rangle \langle u_i| \quad (3.3)$$

Burada $N = L_x \times L_y \times L_z$ olmak üzere örgü noktalarının (ya da SKM’nin) sayısı ve $|u_i\rangle$, “ i ” indisli örgü noktasındaki spin vektörüdür. Bu durumda, izi sıfır olan rank-2 $Q(C)$ düzen tensörü,

$$Q(C) = A(C) - \frac{1}{3} \text{trace}(A) \times I_3 \quad (3.4)$$

olarak hesaplanır. Burada I_3 üçüncü-dereceden birim matristir. Eğer $\eta, Q(C)$ 'nin en büyük özdeğeri ise, düzen parametresi $S = 3\eta/2$ değerini alır ve bu özdeğere karşılık gelen $|n\rangle$ (yada $\hat{n}$ şeklinde temsil edilen) özvektörü, *mikrodurum-C* nin direktörü olur.

Bu sistem için sabit hacimde enerjideki dalgalanmanın bir ölçüsü olan “ C_V ” ÖZ-İSİSİ,

$$C_V = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T} \quad (3.5)$$

ve Binder'in 4. dereceden indirgenmiş enerjisi [Challa et al., 1986],

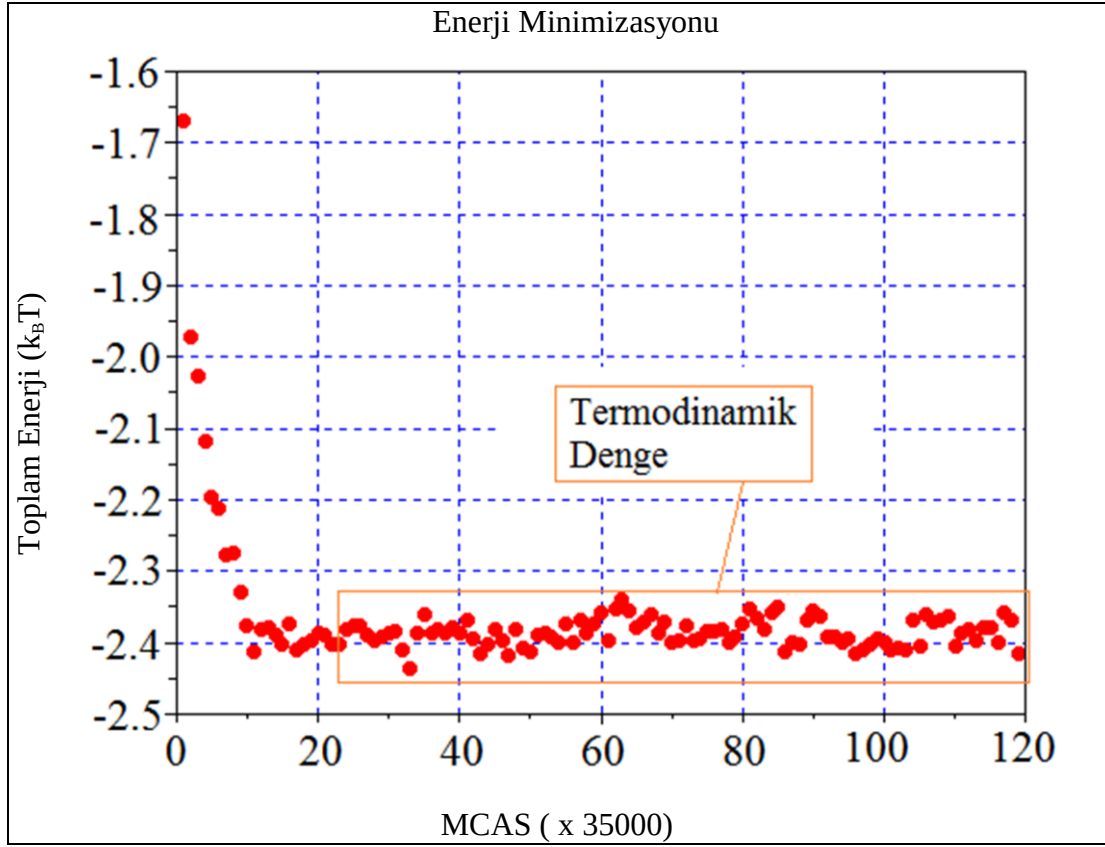
$$V_4 = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle}{3 \langle E^2 \rangle^2} \quad (3.6)$$

ile tanımlanır.

3.1.2. Sonuçlar ve Değerlendirmeler

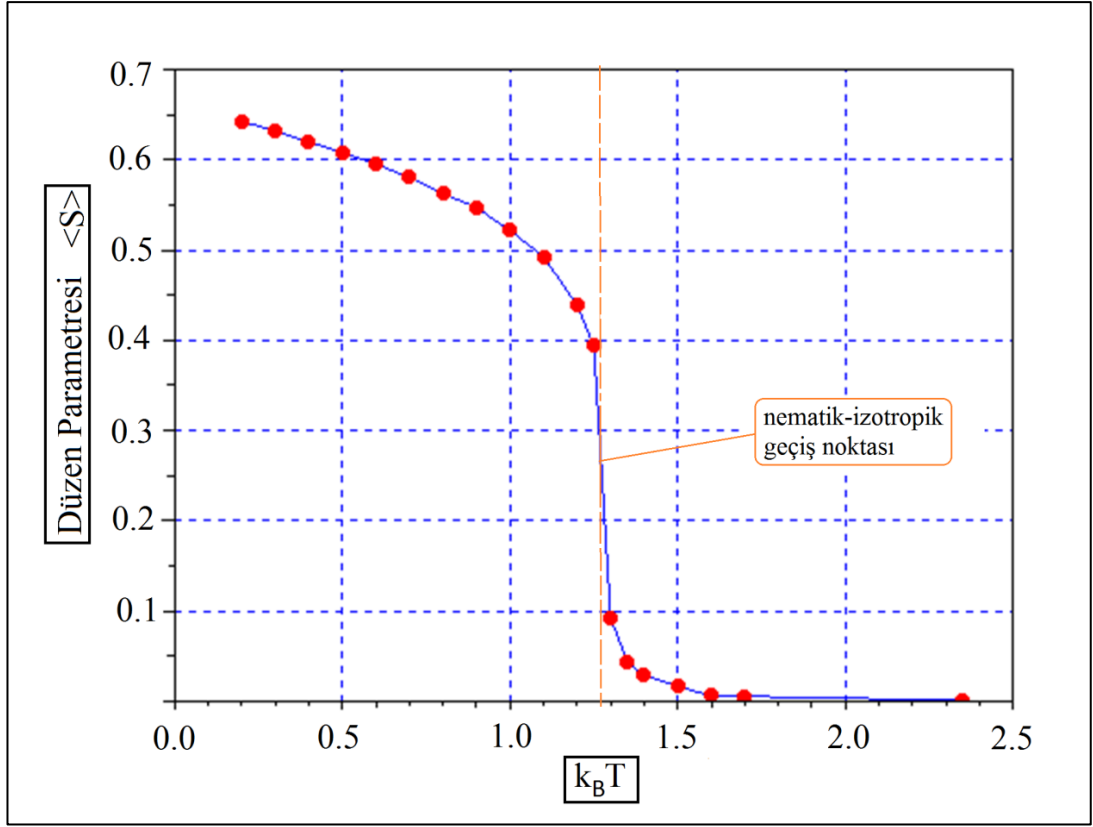
MC simülasyonları kullanılarak elde edilen sistemin gözlemlenebilirleri, verilen bir sıcaklık değeri için sistemin denge konfigürasyonları üzerinden alınan aritmetik ortalamalarla hesaplanabilir. (eşitlik (2.1)). İncelenen sistemin böyle bir denge civarında olup olmadığı ancak sistemin enerjisinin MC adım sayına bağlı olarak nasıl değiştiği incelenerek anlaşılabilir. Şekil 3.1'de, $k_B T = 0.7$ sıcaklık değeri için SK tabakadaki parçacık paşına düşen enerjinin MC adım sayısına bağlı olarak nasıl değiştiği verilmektedir. Görüldüğü üzere adım sayısı 20 (x 35000) civarında sistemin termodinamik olarak dengeye gelmiş, yani toplam enerjideki dalgalanmalar (ya da değişim) minimize olmuştur. Termodinamik denge olarak işaretlenen bölgede incelediğimiz gözlemlenebilir değerleri (düzen parametresi, öz ısı, indirgenmiş Binder enerjisi gibi), sistemin bu adımlarına karşılık gelen konfigürasyonları

üzerinden hesaplanabilir. Bu tez boyunca tüm hesaplamalar verilen bir sıcaklık değeri için bu tür denge konfigürasyonları üzerinden yapılacaktır.



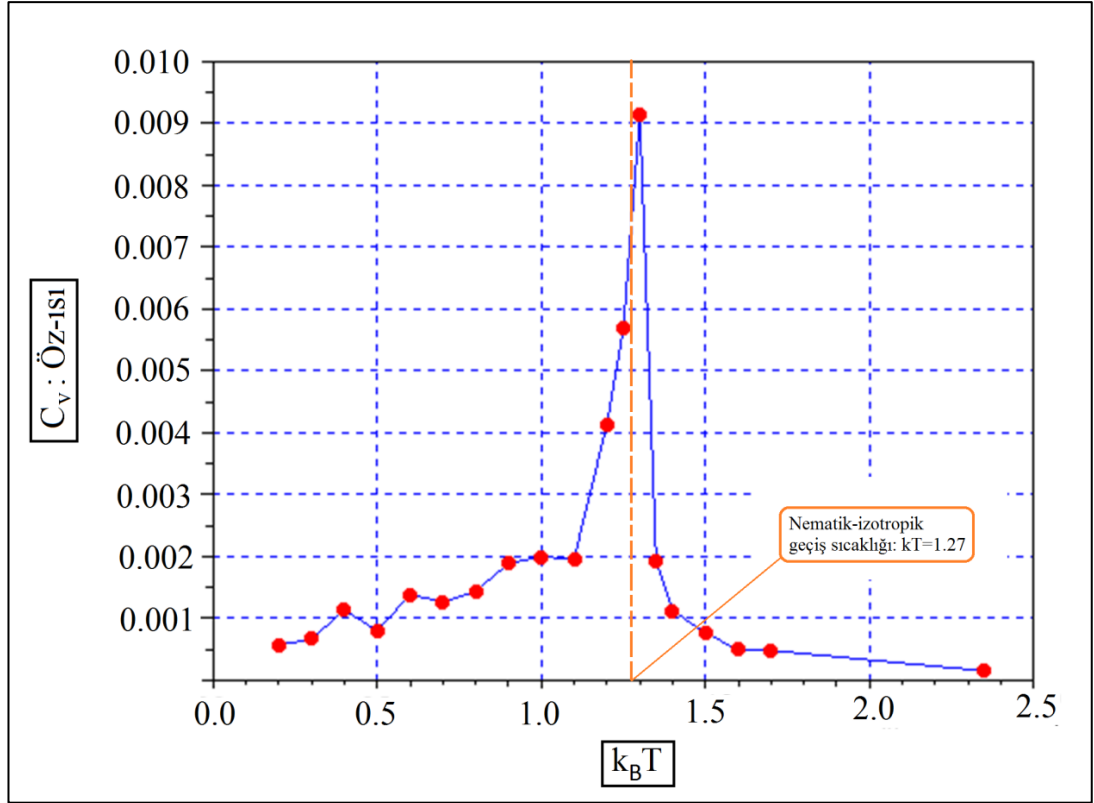
Şekil 3.1: Parçacık başına düşen toplam enerjinin MCAS ile değişimi. Simülasyon için indirgenmiş sıcaklık değeri $k_B T=0.7$ dir.

Şekil 3.2’de moleküllerin yönelimsel durumu olan düzen parametresinin, sıcaklığa bağlı değişimi verilmektedir. Ardışık simülasyonlar arasındaki sıcaklık farkı, düşük sıcaklıklar (faz geçiş sıcaklığı civarı) için $\Delta k_B T=0.10$ ($\Delta k_B T=0.05$) seçilmiştir. Düşük sıcaklıklar için molekül eksenlerinin doğrultuları arasındaki fak minimum olduğu halde sıcaklık arttıkça bu farkın azaldığı dolayısıyla yüksek sıcaklıklar için ortalama bir yönelim düzeninden bahsetmenin imkansız olduğu anlaşılmaktadır. Nematik-izotropik geçiş sıcaklığı, düzen parametresi eğrisinin büküm noktası olan $k_B T \approx 1.27$ dir.



Şekil 3.2: Düzen parametresi S 'nin, sıcaklığa bağlı değişim grafiğı.

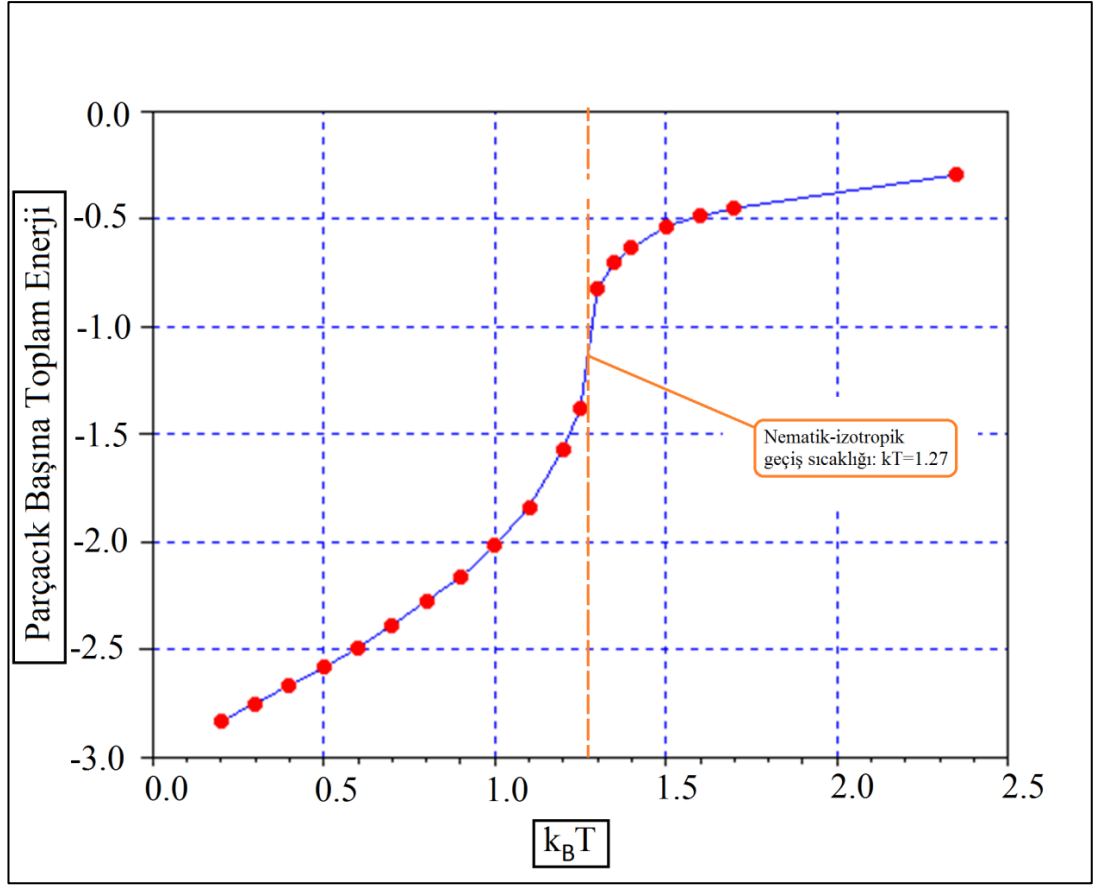
Şekil 3.3'te öz-ısının sıcaklığa bağlı değişim grafiğı eşitlik (3.5) kullanılarak belirlenmiştir. Şekil 3.3 aynı zamanda enerjideki dalgalanmanın sıcaklığa bağlı değişimini vermektedir. Nematik-izotropik faz geiş sıcaklığına ($k_B T \approx 1.27$) karşılık gelen sıcaklık civarında beklendiğı üzere C_V değerinde ani bir sıçrama görölmektedir. Sistemin öz-ısı düşük sıcaklıklar ($k_B T < 1.0$, nematik bölge) için sıcaklığa bağlı olarak monoton artmaktadır. Sistemin sıcaklığı faz geiş sıcaklığına yaklaştıkça öz-ısındaki artış eğilimi dramatik bir şekilde artmış ve nihayet faz geiş sıcaklığı civarında en tepe noktasını bulmuştur. Faz geiş sıcaklığından sonra, izotropik fazda) öz ısı değeri önce çok sert bir şekilde azalmış daha sonra ise asimptotik bir karakter göstermiştir. Sıcaklık daha da arttıkça C_V değeri sıfıra yaklaşmıştır.



Şekil 3.3: C_v Öz-ısının, sıcaklığa bağlı değişimi.

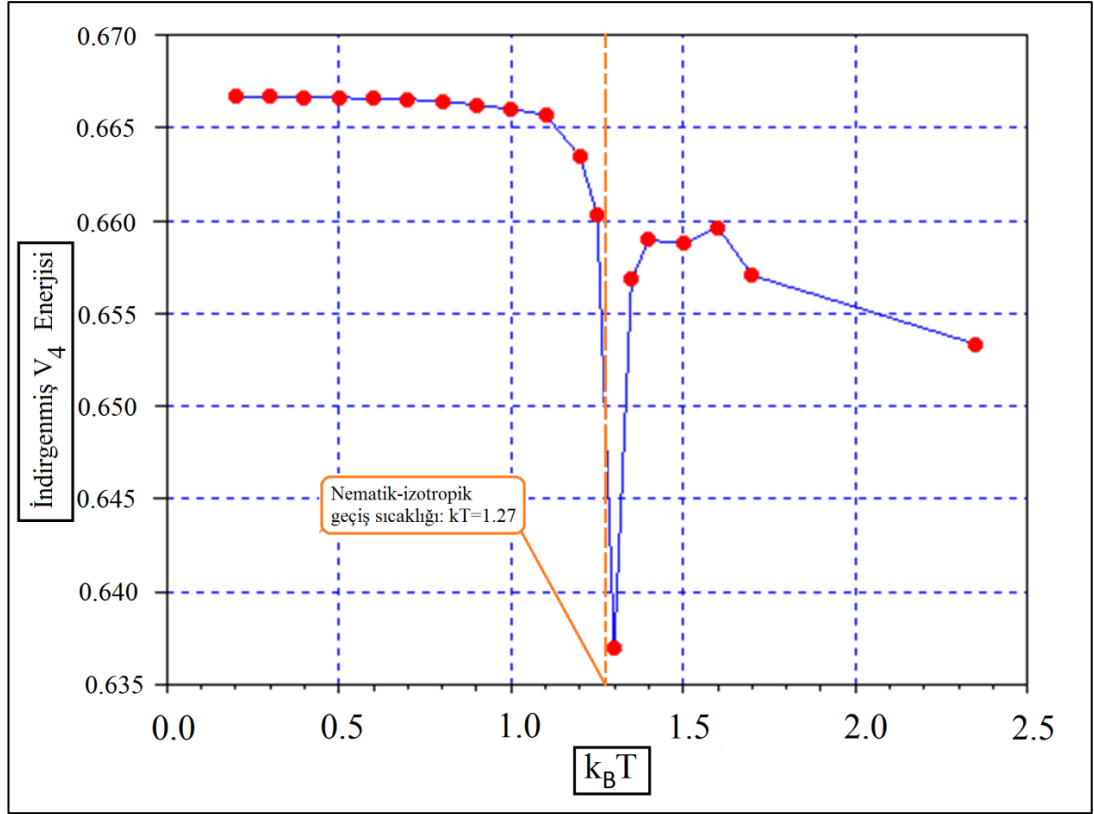
Şekil 3.4'te parçacık başına düşen toplam enerjinin sıcaklığa bağlı değişim grafiği verilmektedir. Nematik-izotropik faz geçiş sıcaklığına karşılık gelen sıcaklık değeri aynı zamanda sıcaklığa bağlı enerji eğrisinin büküm noktasıdır. Nematik fazda ($k_B T < 1.27$) enerjinin sıcaklıkla değişimi içbükey bir karakter sergilerken izotropik fazda ($k_B T > 1.27$) eğri dış bükey bir karakter kazanmaktadır.

Şekil 3.5'te Binder'in 4. dereceden V_4 indirgenmiş enerjisinin (eşitlik (3.6)) sıcaklığa bağlı değişim grafiği verilmiştir. V_4 değeri nematik fazda ($k_B T < 1.27$) düşük sıcaklıklar için monoton olarak azalırken sıcaklık değerleri faz geçiş sıcaklığına yaklaştıkça sıcaklığa bağlı azalma hızı kazanmakta ve en nihayetinde faz geçiş sıcaklığı civarında en dip noktasını görmüştür. İzotropik fazda ise faz geçiş sıcaklığı civarında sıcaklıkla beraber hızla artmakta ve bir tepe noktasına ulaştıktan sonra ise tekrar azalış eğilimine girmektedir. Her iki tarafta da V_4 eğrisi içbükey bir karakterdedir.



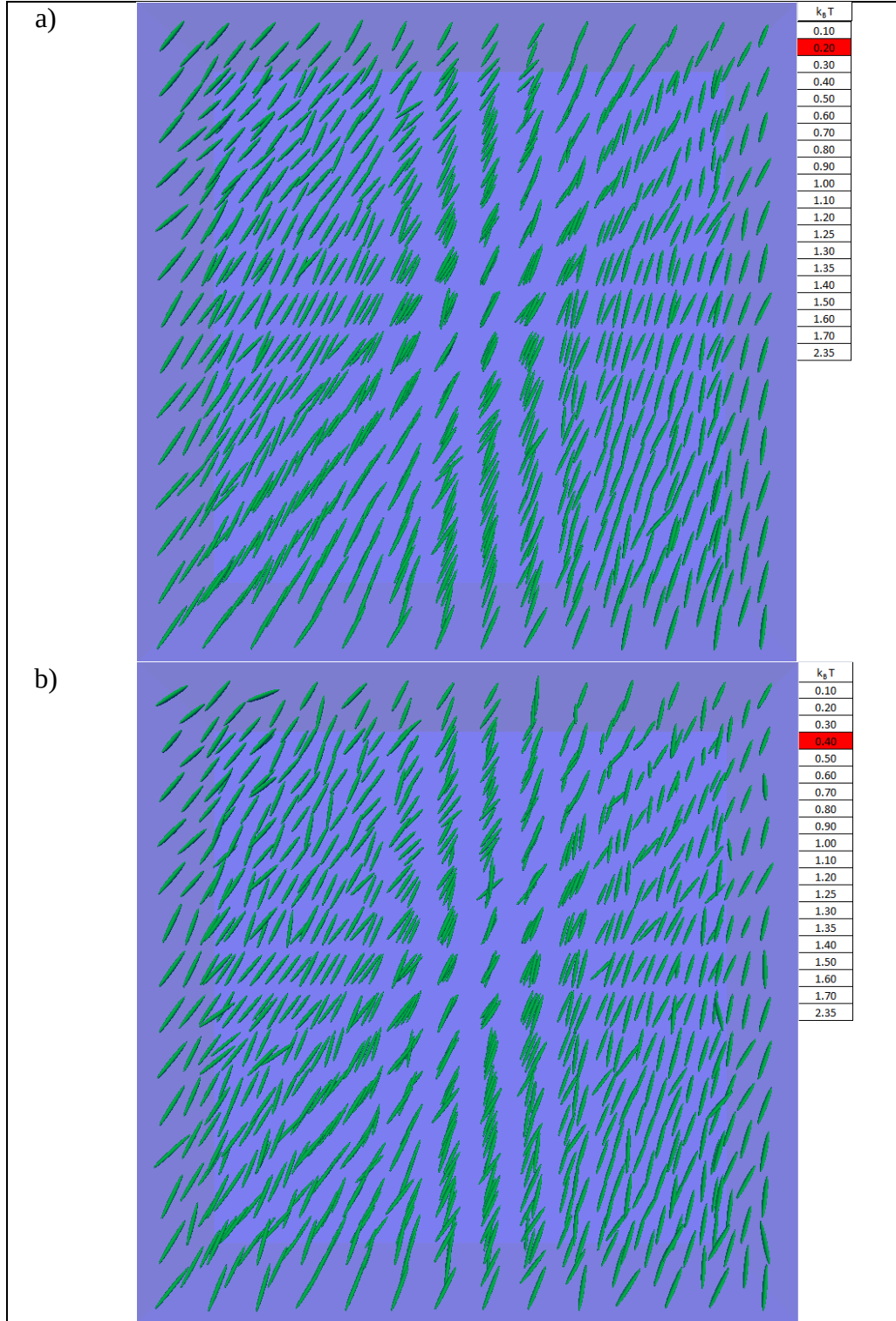
Şekil 3.4: Parçacık başına düşen toplam enerjinin sıcaklığa bağlı değişimi.

$N = L_x \times L_y \times L_z = 14 \times 14 \times 4 = 784$ tane SKM'den oluşan sistemin ilgili sıcaklık değeri için elde edilmiş anlık denge konfigürasyonları şekil 3.6-10'da verilmiştir. Moleküller, örgünün düğüm noktalarına yerleştirilmiş ve her biri elipsoit olarak temsil edilmiştir. Elipsoitlerin uzun eksenleri, aynı zamanda SKM'nin doğrultu eksenleri olarak alınmıştır. Düşük sıcaklıklar için ($k_B T < 0.40$) moleküller arasındaki yönelim farkının çok az olduğu görülmektedir (şekil 3.6.a-b)). Sıcaklık $k_B T = 0.20$ 'den $k_B T = 0.40$ 'a ($\Delta k_B T = 0.20$ artış) çıkarken düzen parametresi (şekil 3.2) $S=0.644$ 'den $S=0.619$ 'a (%4 azalma) düşmüştür. Şekil 3.11.a-b)'de anlık denge konfigürasyonları sırasıyla $k_B T = 0.60$ ve $k_B T = 0.80$ için verilmektedir. Bu sıcaklıklar için sistemin düzen parametresi, sıcaklık $\Delta k_B T = 0.20$ artarken, $S=0.594$ 'den $S=0.559$ 'a düşmüştür (% 5.9 azalma) yani yönelimsel düzendeki bozulma artma eğilimindedir. Şekil 3.6.a) ve 3.6.b)'deki moleküller arası yönelim

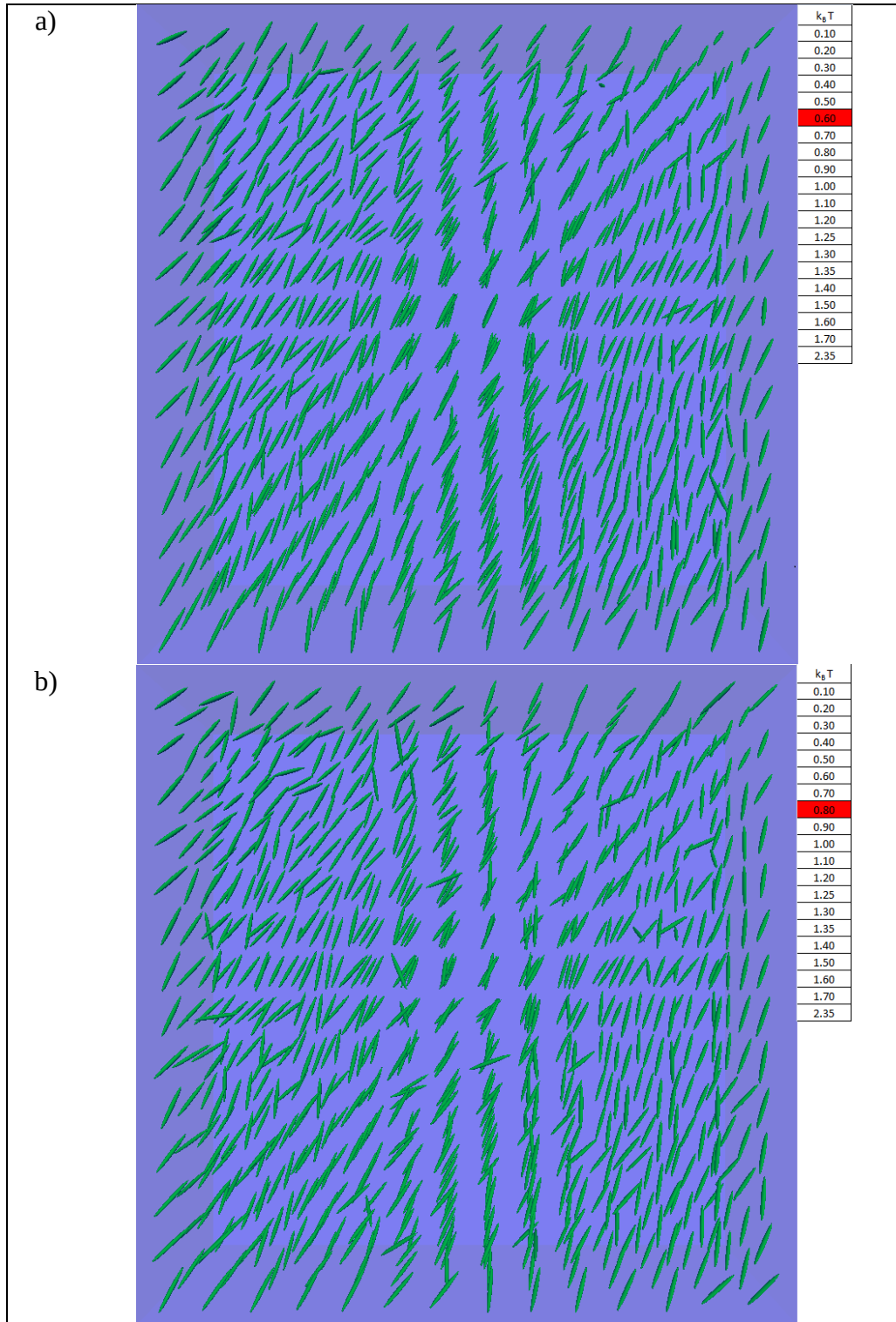


Şekil 3.5: İndirgenmiş enerjinin (eşitlik (3.6)) sıcaklığa bağlı değişimi.

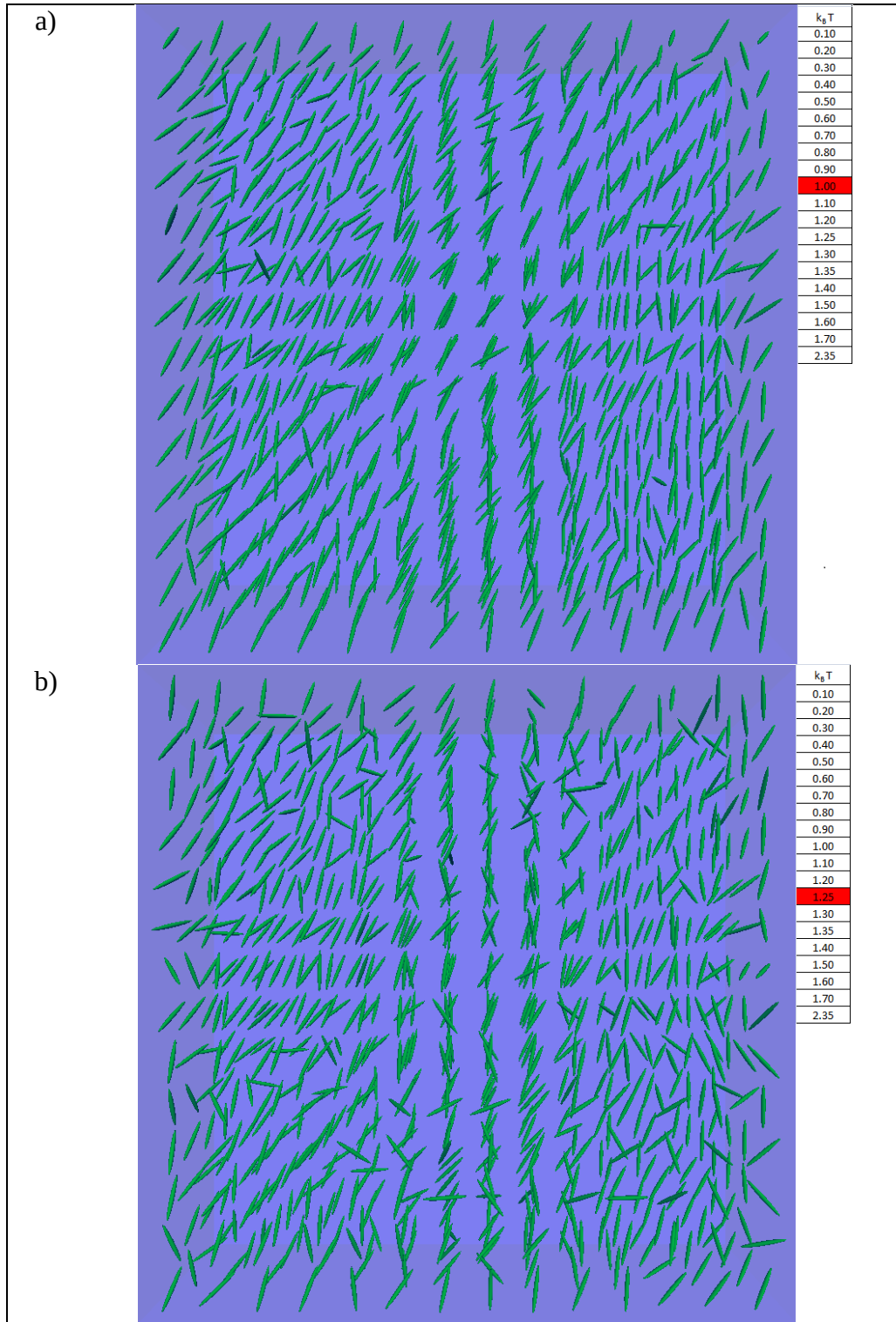
farkı çok belirgin olmamakla beraber, şekil 3.11a) ve 3.11b)'de görüldüğü üzere oldukça belirginleşmeye başlamıştır. Şekil 3.12 a-b)'de anlık denge konfigürasyonları için sıcaklık (düzen parametresi S) sırasıyla $k_B T = 1.00$ ($S=0.525$) ve $k_B T = 1.25$ ($S=0.396$) dir. Bu konfigürasyonlar için $\Delta k_B T = 0.25$ artarken düzen parametresindeki azalma %25 mertebesine çıkmıştır. Düzen parametresindeki azalmanın şiddetine rağmen her iki konfigürasyonda da moleküller halen nematik fazdadırlar. Şekil 3.12 b) aynı zamanda nematik-izotropik faz geçiş sıcaklığına ($k_B T = 1.27$) en yakın nematik konfigürasyondur. Şekil 3.9 a)'da ($k_B T = 1.30$, $S=0.094$) ise nematik-izotropik faz geçiş sıcaklığına en yakın izotropik konfigürasyon verilmektedir. Faz geçiş sıcaklığına en yakın nematik konfigürasyon (Şekil 3.12.b)) ile izotropik konfigürasyon (Şekil 3.9.a)) arasında sıcaklık değişimi $\Delta k_B T = 0.05$ iken düzen parametresindeki azalma ($\Delta S = -0.302$ azalma) %76 mertebesine çıkmıştır. Şekil 3.9 b) - 3.10 b)'de ise sıcaklık arttıkça konfigürasyonlardaki moleküller arası ortalama bir yönelimden bahsetmek imkansız hale gelmekte yani izotropik faz iyice belirginleşmektedir.



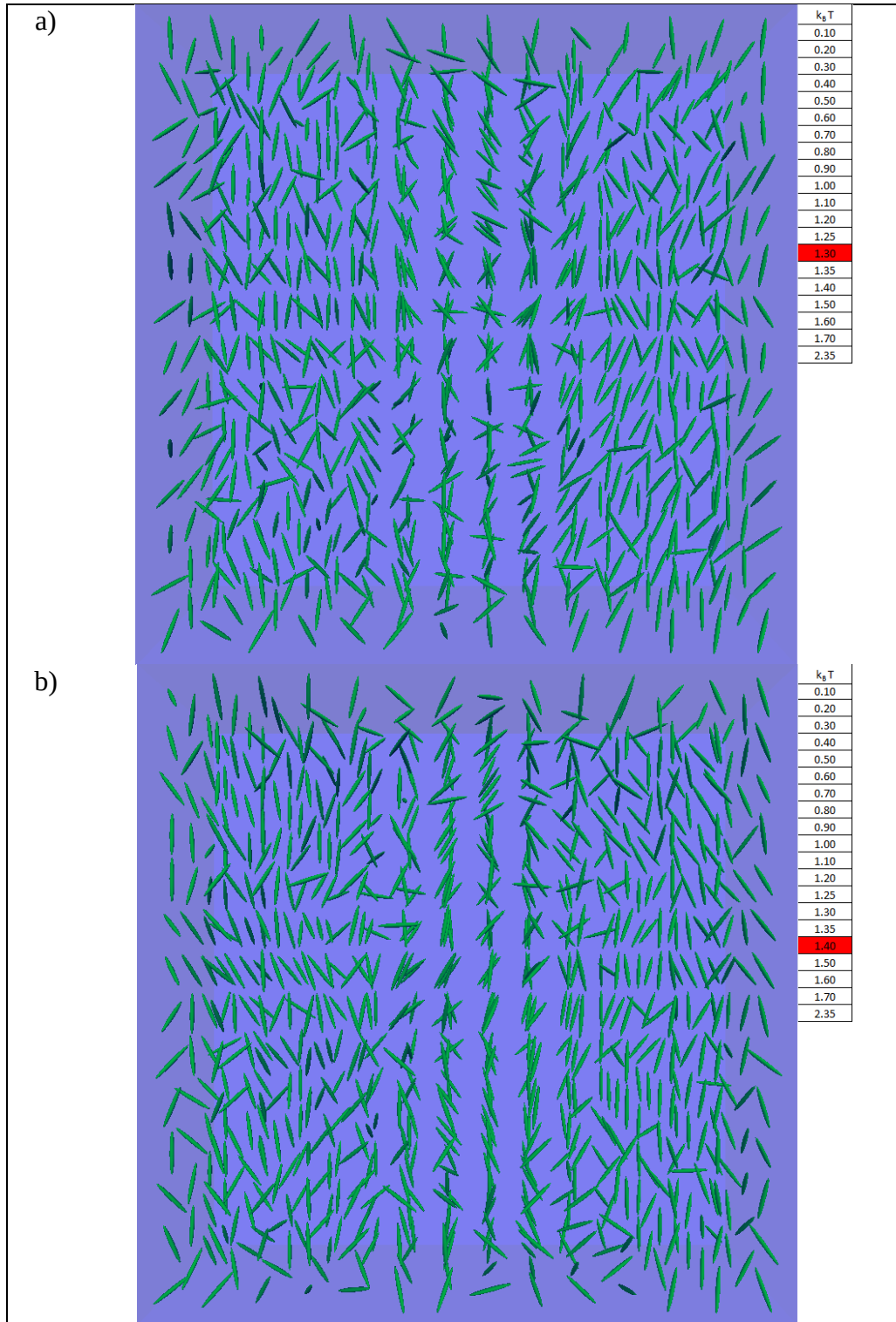
Şekil 3.6: SKM'nin bir denge konfigürasyonu için anlık yönelim düzenleri a) sıcaklık $k_B T=0.20$, düzen parametresi $S=0.644$ b) sıcaklık $k_B T=0.40$, düzen parametresi $S=0.619$.



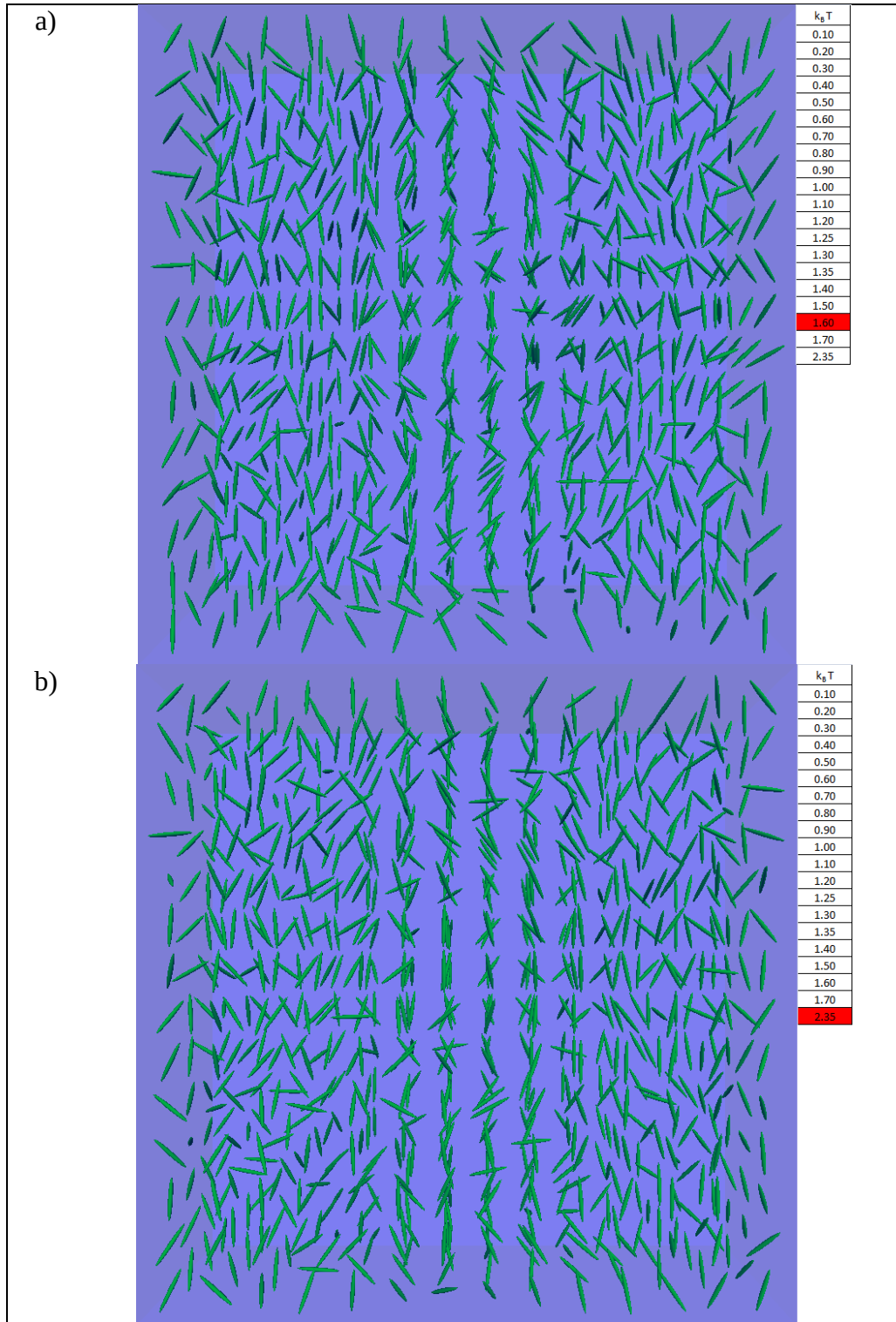
Şekil 3.7: SKM'nin bir denge konfigürasyonu için anlık yönelim düzenleri a) sıcaklık $k_B T=0.60$, düzen parametresi $S=0.594$ b) sıcaklık $k_B T=0.80$, düzen parametresi $S=0.559$.



Şekil 3.8: SKM'nin bir denge konfigürasyonu için anlık yönelim düzenleri a) sıcaklık $k_B T=1.00$, düzen parametresi $S=0.525$ b) sıcaklık $k_B T=1.25$, düzen parametresi $S=0.396$.



Şekil 3.9: SKM'nin bir denge konfigürasyonu için anlık yönelim düzenleri a) sıcaklık $k_B T=1.30$, düzen parametresi $S=0.094$ b) sıcaklık $k_B T=1.40$, düzen parametresi $S=0.051$.

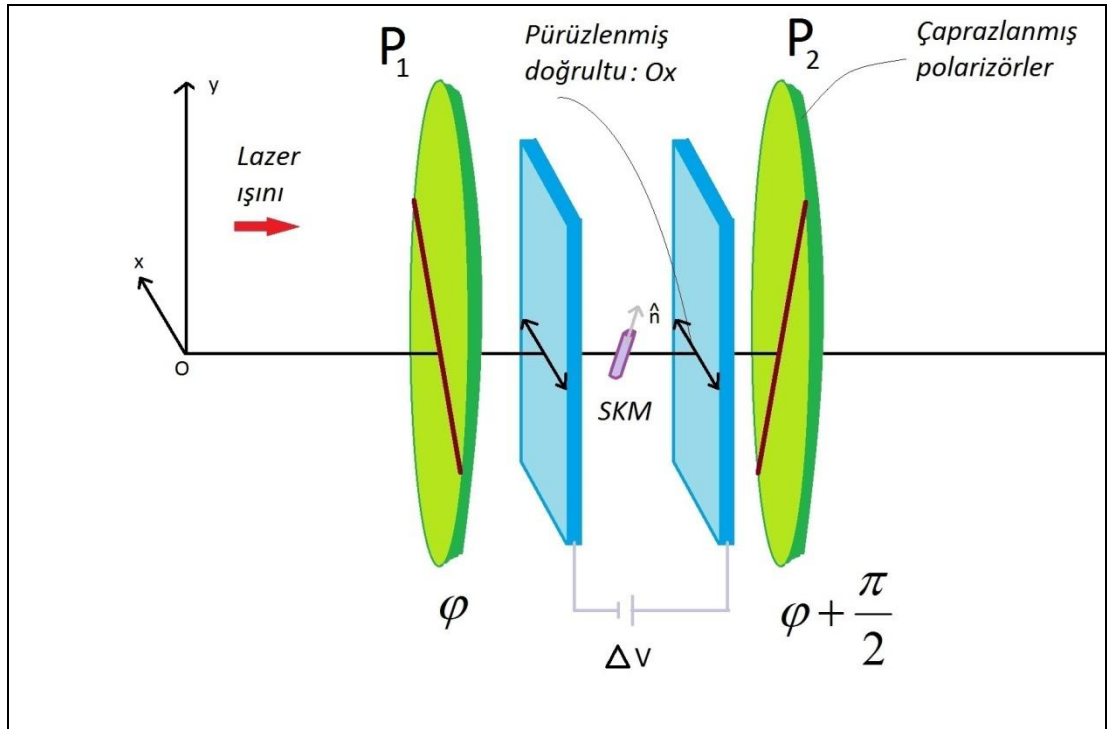


Şekil 3.10: SKM'nin bir denge konfigürasyonu için anlık yönelim düzenleri a) sıcaklık $k_B T=1.60$, düzen parametresi $S=0.001$ b) sıcaklık $k_B T=2.35$, düzen parametresi $S=0.000$.

3.2. Kalınlıđa Bađlı Düzlemsel SK Hücrede Elektro-optik Özelliklerin Belirlenmesi

SK malzemelerin elektro-optik özelliklerinin belirlenmesinde hücre kalınlıđı önemli bir parametredir. Bu çalışmada, MC Metropolis örnekleme yöntemini kullanarak düzlemsel sınır şartlarına sahip SK hücrelerin elektro-optic özelliklerinin belirlenmesi amaçlanmaktadır. Bu amaçla, elektro-optik iletim nitelikleri polarizör açısına ve elektririk alana bađlı olacak şekilde farklı hücre kalınlıkları için belirlenmiştir. Bu çalışmanın dar kapsamlı bir versiyonu için ayrıca [Emül et al., 2014]'e bakılabilir.

3.2.1. Düzlemsel Nematik Sıvı Kristal Hücre



Şekil 3.11: Simülasyonu yapılan sistemin şematik gösterimi.

Burada düzlemsel yönelimli iki SK hücre camı arasına sıkıştırılmış SKM'den oluşan bir sistem incelenmiştir. Bu sistemde moleküller kübik bir örgünün düğüm noktalarına yerleştirilmiştir. Düzlemsel yönelimler her iki plaka içinde Ox-eksenine paralel olacak şekilde seçilmiştir. Ayrıca hücrenin her iki tarafına, hücre duvarlarıyla paralel olacak şekilde çaprazlanmış polarizörler yerleştirilmiş ve ışığın ilerleme yönü

Oz-ekseni olarak seçilmiştir. Bu sistemin temsili bir gösterimi Şekil 3.11’de verilmektedir.

3.2.2. Model ve Simülasyon Detayları

SKM’nin denge konfigürasyonlarını elde etmek için standart MC Metropolis algoritması kullanılmıştır [Landau, 2009]. Sistemi tanımlayan model hamiltonyen,

$$H = -\xi \sum_{\langle i,j \rangle} P_2(\cos \beta_{ij}) - E^2 \sum_{i=1}^N P_2(\cos \varphi_i) + \alpha \sum_{k_w} \sin^2(\gamma_{k_w}) \quad (3.7)$$

ile verilmektedir. Burada P_2 , ikinci dereceden Legendre polinomudur. Eşitlik (3.7)’deki ilk terim Lebwohl-Lasher potansiyeli olarak bilinir [Lebwohl, 1972]. Bu potansiyel, komşu (en yakın) SKM arasındaki ξ şiddetli moleküler etkileşme enerjisini tanımlar. Bu modelde Her bir SKM silindirik bir çubuk (ya da önceki bölümde verildiği üzere elipsoit) şeklinde temsil edilir ve bu çubukların uzun eksenlerinin doğrultuları 3-boyutlu başsız bir spin olarak ele alınır [Chiccoli et al., 1997]. Burada β_{ij} , “-i” ve “-j” indeksli en yakın SKM arasındaki açıdır. İkinci terim i -molekülü ile E elektrik alanı arasındaki çiftlenim enerjisidir. Burada “ E ”, Oz-ekseni doğrultusundaki elektirik alan şiddeti, ve φ_i de molekül-i ile E elektirik alan vektörü arasındaki açıdır. Eşitlik (3.7)’nin üçüncü terimi Rapini [Rapini, 1969], [Papoular, 1970] terimi olarak bilinir. Burada α , molekül- k_w ’nin uzun eksen ile hücre duvarının düzlemsel yönlendirici kuvveti DK arasındaki etkileşme enerjisinin şiddetidir. Eşitlik (3.7)’de verilen model Hamiltonyen, MC simülasyonları ile NSK’nın bir çok özelliğinin ortaya çıkarılmasında önemli bir başarı göstermiştir [Pawlik et al., 2000], [Pawlik et al., 2010], [Pawlik et al., 2011]. Burada tüm çiftlenim sabitleri, ξ , E^2 , ve α , $k_B T$ biriminde olacak şekilde seçilmiştir. k_B ve T sırasıyla Boltzman sabitini (indirgenmiş birim: $k_B=1$) ve mutlak sıcaklığı temsil etmektedir.

Simülasyonlarda, xy-düzlemi boyunca periyodik sınır şartları, Oz-doğrultusunda ise düzlemsel duvar kuvveti sınır şartları uygulanmıştır. MC simülasyonu yapılan düzlemsel duvar kuvvetli SK hücre içindeki moleküller, simülasyonlarda kullanılan sıcaklık değeri için nematik bölgededir [Fabbri, 1986],

[Priezjev, 2001]. Ayrıca tüm simülasyonlar için $\xi = 1.0 k_B T$, $\alpha = 11.08 k_B T$, ve $0 \leq E^2 < 3.5^2 k_B T$ seçilmiştir. Simülasyonlarda kullanılan molekül sayıları (N) kalınlığın bir fonksiyonu olarak değişmektedir: $N = L_x \times L_y \times L_z = 22 \times 22 \times 6(7, \dots, 18)$. Bunun yanında, düzen parametresi, direktör, ve ışık iletim oranları gibi gözlemlenebilir büyüklükleri hesaplamak için hücre kalınlığına ve uygulanan dış alana bağlı olacak şekilde 400 den fazla MC simülasyonu yapılmıştır. MCAS'ı, ilgili simülasyonun molekül sayısının bir fonksiyonu olacak şekilde belirlenmiştir. Denge süreci için “ $MCAS = 1100 \times N$ ” ve örnekleme süreci içinse “ $MCAS = 484 \times N$ ” olacak şekilde seçilmiştir. Simülasyonlardaki hücre kalınlığına, dolayısıyla molekül sayısına, bağlı olarak denge süreci ve örnekleme süreci adım sayıları sırasıyla “ $3.2 \times 10^6 < MCAS < 9.6 \times 10^6$ ” ve “ $1.4 \times 10^5 < MCAS < 4.2 \times 10^6$ ” olmuştur.

SKM'den oluşan bir sistemin homojenliği duvar kuvvetleri ya da dış alan etkisi altında bozulur. Genel düzen parametresi S, genellikle homojen sistemlerin yönelim dinamiklerini anlamlandırabilmek için kullanılır. Homojen olmayan sistemler içinse çoğunlukla yerel düzen parametresi, sistem dinamiklerini anlamlandırmada belirleyici rol oynar. Burada ele alınan sistem, dış alan ve duvar kuvvetleri nedeniyle homojen değildir ancak, anizotropik şartların, sistemin geneli üzerindeki etkisini belirlemek için dış alanın bir fonksiyonu olarak S'nin oldukça kullanışlı olduğu görülmüştür. Genel düzen parametresinin kullanım limitleriyle ilgili olarak [Pawlik et al., 2012]'ye ayrıca bakılabilir.

Bu çalışma boyunca Mueller-Stokes formalizmi, elektro-optik iletim özelliklerinin ortaya çıkarılması için kullanılmıştır. Bilindiği üzere Mueller formalizmi kullanılarak bir sistemin depolarizasyonlar dahil tüm polarizasyon durumları belirlenebilir. Bu formalizmde SKM çizgisel geciktirici olarak ele alınır ve ışığın ilerleme doğrultusu boyunca karşılaştığı her bir SKM, M_i Mueller matrisi ile temsil edilir. Çaprazlanmış polarizör (P_1) ve analizör (P_2) de Mueller matrisleriyle temsil edilirler. Böylece polarizör-SKM-analizör sisteminden geçen polarize ışık, bir Stokes vektörü formunda, optik elemanların ardışık bir matris çarpımı olarak hesaplanır:

$$S_{çık} = P_2 \prod_{i=1}^{Lz} M_i P_1 S_{gel} \quad (3.8)$$

Burada S_{gel} , gelen anpolarize ışığın Stokes vektörüdür (şekil 3.11). Bu formalizmin SK sistemi için kullanım detayları ayrıca [Gerrard, 1975], [Xu et al., 1992], [Berggren et al., 1994], [Berggren et al., 1995]'te bulunabilir. Tüm simülasyonlar için, ilerleyen ışığın dalga boyu $\lambda=545$ nm, hücre kalınlığı $h=0.5 \times L_z$ μm , adi ve harici kırınım indeksleri sırasıyla $n_o=1.5$ and $n_e=1.7$ olacak şekilde seçilmiştir.

3.2.3. Sonuçlar ve Değerlendirmeler

Bu çalışmada, öncelikle temel bir deneysel düzenek olan ve [Lee et al., 2005], [Cook et al., 2010]'daki deneysel çalışmalarda incelenmiş düzlemsel sınır şartlarına sahip bir nematik SK hücrenin elektro-optik özellikleri belirlenmiş ve deneysel sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Bu düzende, gelen ışın Oz-ekseni boyunca ilerlemektedir. Nematik SK hücre çaprazlanmış iki polarizörün arasına yerleştirilmiş ve hücre duvarlarının yönlendirici doğrultuları Ox-eksenine paralel olacak şekilde ayarlanmıştır (şekil 3.11). P_1 ve P_2 polarizörlerinin Ox-ekseni ile yaptığı açılar ise sırasıyla $\varphi = +45^\circ$ ve $\varphi = -45^\circ$ olacak şekilde seçilmiştir.

Sırasıyla polarizör (P_1), SKM ve analizörden (P_2) geçen ışın, $S_{çık}$ Stokes vektörü olmak üzere, tüm simülasyonlar için (tüm elektrik alan ve kalınlık değerlerinde) hesaplanmıştır. Işığın ilerleme doğrultusu boyunca karşılaştığı tüm optik elemanların (polarizör, SKM ve analizör) Mueller matris temsilleri belirlenmiş ve eşitlik (3.8)'de verilen ardışık matris çarpımıyla $S_{çık}$ hesaplanmıştır. Tüm simülasyonlar için, ışık şiddeti 1.0 olan anpolarize, $S_{gel} = [1.0, 0.0, 0.0]$ Stokes vektörü kullanılmıştır. Işık şiddeti birimi olarak, literatürdeki kullanım şekli olan “arbitrary units (a.u.)” yani birimsiz “optik iletim şiddeti oranı” seçilmiştir. Bu durumda çıkan ışının şiddeti, $S_{çık}$ Stokes vektörünün birinci elemanı olmaktadır. Eşik voltajı ve karakteristik voltaj tanımları, [Lee et al., 2005]'ten alınmıştır: Eşik voltajı ($V_{eşik}$), geçen ışığın, elektrik alanın olmadığı durumdaki şiddetinden %10 fazla olduğu voltaj değeridir; karakteristik voltaj ($V_{2\pi}$) ise geçen ışığın şiddetinin ilk minimum olduğu (çaprazlanmış polarizörlerin $\varphi = \pm 45^\circ$ konfigürasyonu için) değere karşılık gelen voltaj değeridir. Voltaj değerleri, elektrik alan değerlerinin hücre kalınlığıyla çarpılmasıyla elde edilmiştir. Hesaplanan eşik voltajı ve karakteristik voltaj değerleri Tablo 3.1'de bir araya getirilmiştir.

Tablo 3.1: Farklı kalınlıkların için eşik alanlar ($E_{eşik}$), karakteristik alanlar ($E_{2\pi}$), eşik voltajlar ($V_{eşik}$) ve karakteristik voltajlar ($V_{2\pi}$).

Tabaka sayısı L_z	Eşik Alan $E_{eşik}$	Karakteristik Alan $E_{2\pi}$	Eşik Voltajı $V_{eşik}$	Karakteristik Voltaj $V_{2\pi}$
6	0.20	---	1.22	---
7	0.26	---	1.80	---
8	0.72	0.40	5.75	3.20
9	0.87	0.59	7.83	5.30
10	0.97	0.69	9.67	6.90
11	0.99	0.77	10.92	8.44
12	1.09	0.77	13.04	9.26
13	1.10	0.80	14.30	10.42
14	0.48	0.85	6.69	11.95
15	0.33	0.88	4.99	13.26
16	0.37	0.87	5.86	13.99
17	0.48	0.90	8.09	15.24
18	0.59	0.93	10.53	16.70

Şekil 3.12’de farklı kalınlıktaki SK hücreler için iletilen ışığın şiddetinin elektrik alana bağlı değişim grafiği verilmiştir. SK ortamda geciktirilen ışının iletimini elde etmek için xy-düzlemi üzerindeki her bir örgü noktası için çıkan ışının Stokes vektörü SKM’nin denge konfigürasyonları kullanılmış ve iletilen ortalama ışık şiddeti hesaplanmıştır:

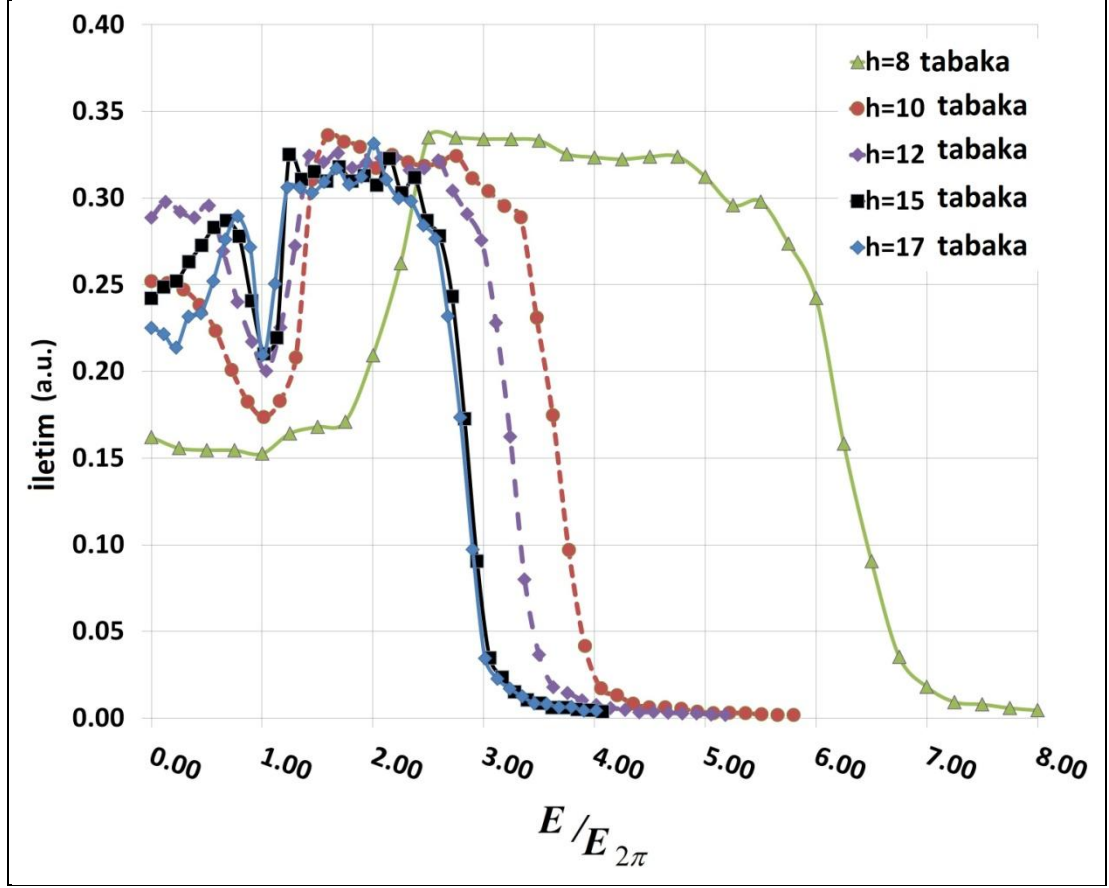
$$I_0^{(ort)} = \frac{1}{N^{(xy-düzlem)}} \sum_{y=1}^{L_y} \sum_{x=1}^{L_x} I_0^{(x,y)} \quad (3.9)$$

Burada $I_0^{(ort)}$ iletilen ortalama polarize ışık şiddetini, $N^{(xy-düzlem)} = L_x \times L_y = 22 \times 22 = 484$ xy-düzlemindeki örgü noktası sayısını, ve $I_0^{(x,y)}$ de (x,y)-örgü noktasındaki $S_{çık}$ Stokes vektörünün birinci elemanıdır. Ox-ekseni (hücre duvarı yönlendirici yönü) ile çaprazlanmış polarizörler P_1 ve P_2 arasındaki açılar sırasıyla $\varphi = \pm 45^\circ$ seçilmiştir. Genel bir fiziksel bakış açısı yakalamak için elektrik alan değerleri ilgili kalınlıktaki

hücrenin karakteristik alanına (Tablo 3.1) bölünmüştür. Dikkat edilirse $V/V_{2\pi} = (E \times L_z)/(E_{2\pi} \times L_z) = E/E_{2\pi}$ olduğu görülür.

SK ortamın ÇK özelliğinden dolayı adi-hızı ile ekstra-hızı aynı olmaz. Bu nedenle SK ortam boyunca bir molekülden diğerine geçen ışığın oranı bu iki bileşene çok sıkı bir şekilde bağlıdır. Optik eksene paralel olan n_e kırınım indeksi kendisine dik olan n_o 'dan farklıdır [Gennes, 1993]. Şekil 3.13'de görüldüğü üzere, SKM'nin direktörü bir dış elektrik alanla değiştirilebilir. İncelenen nematik SK pozitif ($\Delta\epsilon = n_e^2 - n_o^2 = 0.64 > 0$) dieletirik anizotropiye sahip olduğundan, belirli bir eşik alanı aşıldıktan sonra, SKM'nin düzlemsel doğrultudan homeotropik doğrultuya dönmesine neden olur. Şekil 3.12'de, alan bağımlı optik iletim grafiği salınım yapma eğilimindedir. Simülasyon sonuçları ışık iletiminin karakteristik olarak hücre kalınlığına, yani hücredeki tabaka sayısına, oldukça sıkı bir şekilde bağlı olduğunu göstermiştir. İnce hücreler için salınımlar çok belirgin değildir. Hücre kalınlığı $L_z \leq 8$ için salınım davranışı gözlenmez öyle ki $L_z=8$ 'in altındaki değerler için karakteristik alan belirlenemez (Şekil 3.12 ve Tablo 3.1). Düşük alanlarda, ışığın iletiminde görülen dalgalanma hücre kalınlığının artmasıyla daha da belirgin hale gelir. Literatürdeki deneysel çalışmalarla karşılaştırıldığında, [Lee et al. 2005] ve [Cook et al., 2010]'da verilen sonuçlarla simülasyon sonuçlarının örtüştüğü görülmektedir.

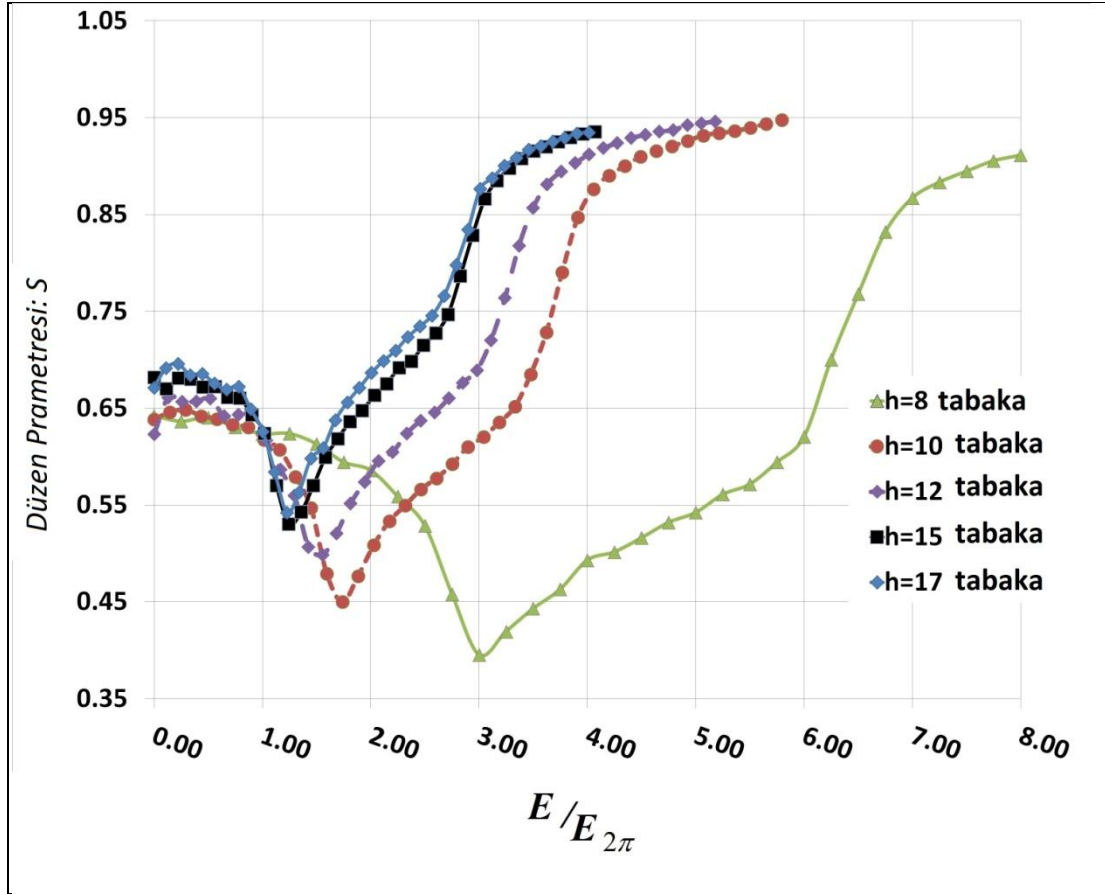
Şekil 3.13'de, farklı kalınlıklar için düzen parametresi S 'nin uygulanan elektrik alana bağlı değişim grafiği verilmiştir. S ve ilgili direktör $\hat{n}$, Boltzman denge örnekleme [Landau, 2009] yöntemiyle her bir simülasyon için tüm SKM'ler üzerinden hesaplanmıştır. SKM ve hücre duvarları arasındaki kuvvetlerden dolayı, elektrik alan yokken moleküllerin çoğu Ox-ekseni doğrultusunda yönelmektedirler. Oz-ekseni (hücre duvarlarına dik olan eksen, şekil 3.11) boyunca elektrik alan arttıkça, bazı moleküller elektrik alan doğrultusunda yönelmeye başlarlar. Bu evrede eşitlik (3.7)'de verilen elektrik alan-SKM etkileşmesi, diğer etkileşmelere göre daha baskın hale gelir. Şuna dikkat edilmeli ki, hücre kalınlığını arttırmakla simülasyondaki molekül sayısı arttığı halde duvara yakın olan moleküllerin sayısı sabit kalır. Bu da, hücre kalınlığının artmasıyla duvar kuvvetlerinin tüm sistem üzerindeki etkisinin azalma eğiliminde olması anlamına gelir.



Şekil 3.12: Farklı kalınlıklar için elektrik alan bağımlı ortalama ışık şiddeti iletimi. Uygulanan alan değerleri, ilgili kalınlıktaki hücrenin karakteristik alanına bölünmüştür (Tablo 3.1). P_1 ve P_2 çaprazlamış polarizörlerinin açıları sırasıyla $\varphi = \pm 45^\circ$ dir (şekil 3.11).

Şekil 3.12 ve 3.13 aynı zamanda hücrenin karakteristik ışık iletiminin düzen parametresi ve hücre kalınlığına sıkı bir şekilde bağlı olduğunu göstermektedir. SKM için tercih edilebilir iki doğrultu mevcuttur: Düzlemsel Ox-doğrultusu ve elektrik alan yönü. Elektrik alan doğrultusu (hücre duvarlarına dik olan Oz-doğrultusu) aynı zamanda homeotropik yön olarak da isimlendirilir. Tüm kalınlıklar için, elektrik alanın olmadığı durumlarda düzen parametresi (S) yaklaşık olarak 0.65 değerini alır (şekil 3.13). Bu durumda, düzlemsel yönelim, homeotropik yönelimden daha baskındır. Elektrik alan şiddetinin artmasıyla, düzen parametresi duvar kuvveti etkileşmesi ve dış alan çiftlenim etkileşmeleri (eşitlik (3.7)) arasındaki çekişmeden dolayı bir minimum değere iner. Düşük alan değerleri için, Lebwohl-Lasher potansiyeli ışık iletimindeki salınım karakterinden (şekil 3.12) sorumludur. S 'nin bir minimum değere ulaşmasından sonra, elektrik alan çiftlenim etkisi SKM'nin

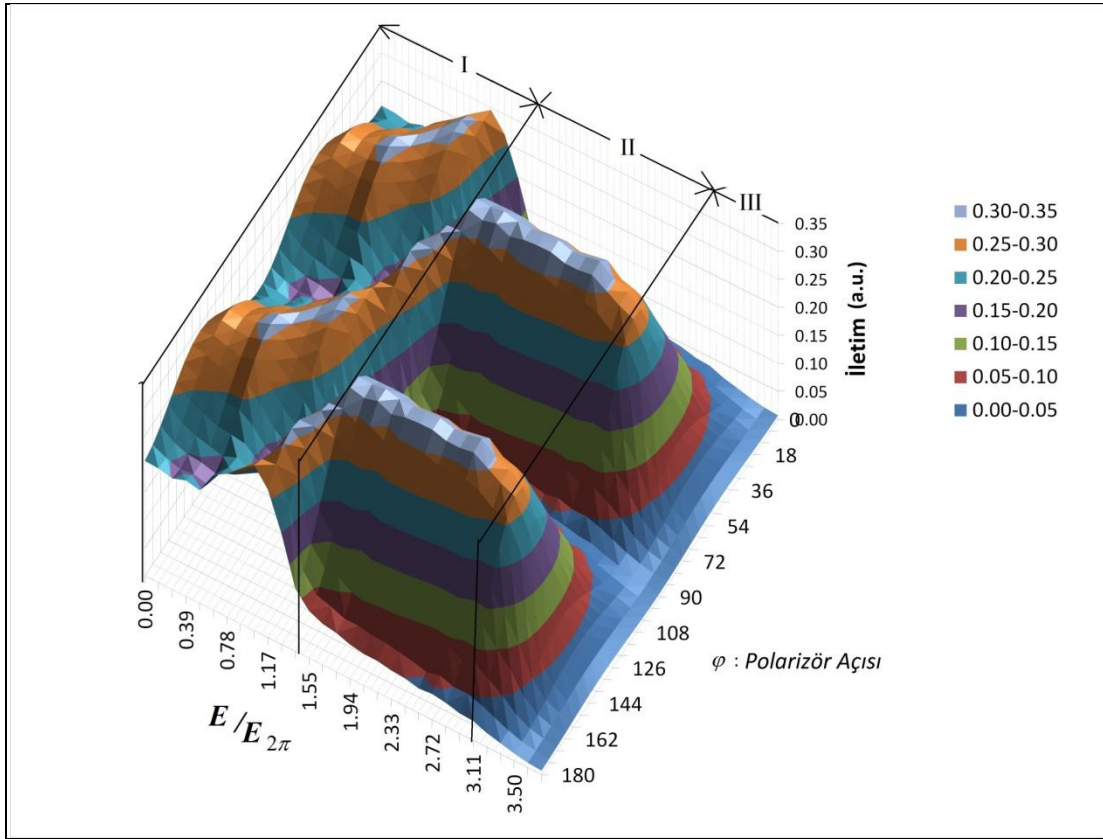
yönelim kontrolünü büyük oranda ele geçirir ve homeotropik yönelim böylece kurulmuş olur (şekil 3.13).



Şekil 3.13: Farklı kalınlıklar için düzen parametresi S 'nin uygulanan elektrik alana bağlı değişim grafiği.

Şuna dikkat edilmeli ki burada yerel-düzen parametresi yerine genel-düzen parametresi kullanılmıştır (Şekil 3.13). Anizotropik sınır şartları (duvar kuvvetleri ve elektrik alan gibi) söz konusu olduğunda genellikle yerel-düzen parametresi incelenir. Fakat şekil 3.13 ve 3.14'e bakıldığında, genel-düzen parametresinin de elektro-optik özelliklerin karakterizasyonunda belirleyici bir öneme sahip olduğu anlaşılmaktadır. Şekil 3.14'te geçen ışığın şiddeti, $0 \leq \varphi \leq 180^\circ$ aralığındaki polarizör açısının ve $E/E_{2\pi}$ uygulanan elektrik alanın bir fonksiyonu olarak verilmektedir. Hücreden ve polarizörlerden geçen ışık şiddeti, verilen bir elektrik alan değeri için φ polarizör açısının $\pi/2$ periyotlu bir fonksiyonudur. Buna göre düzlemsel nematik SK hücrenin elektrik alana ve çaprazlanmış polarizör açlarına bağlı olan ışık iletimi karakteristik yapısı üç bölgede incelenebilir: Bölge-I'de

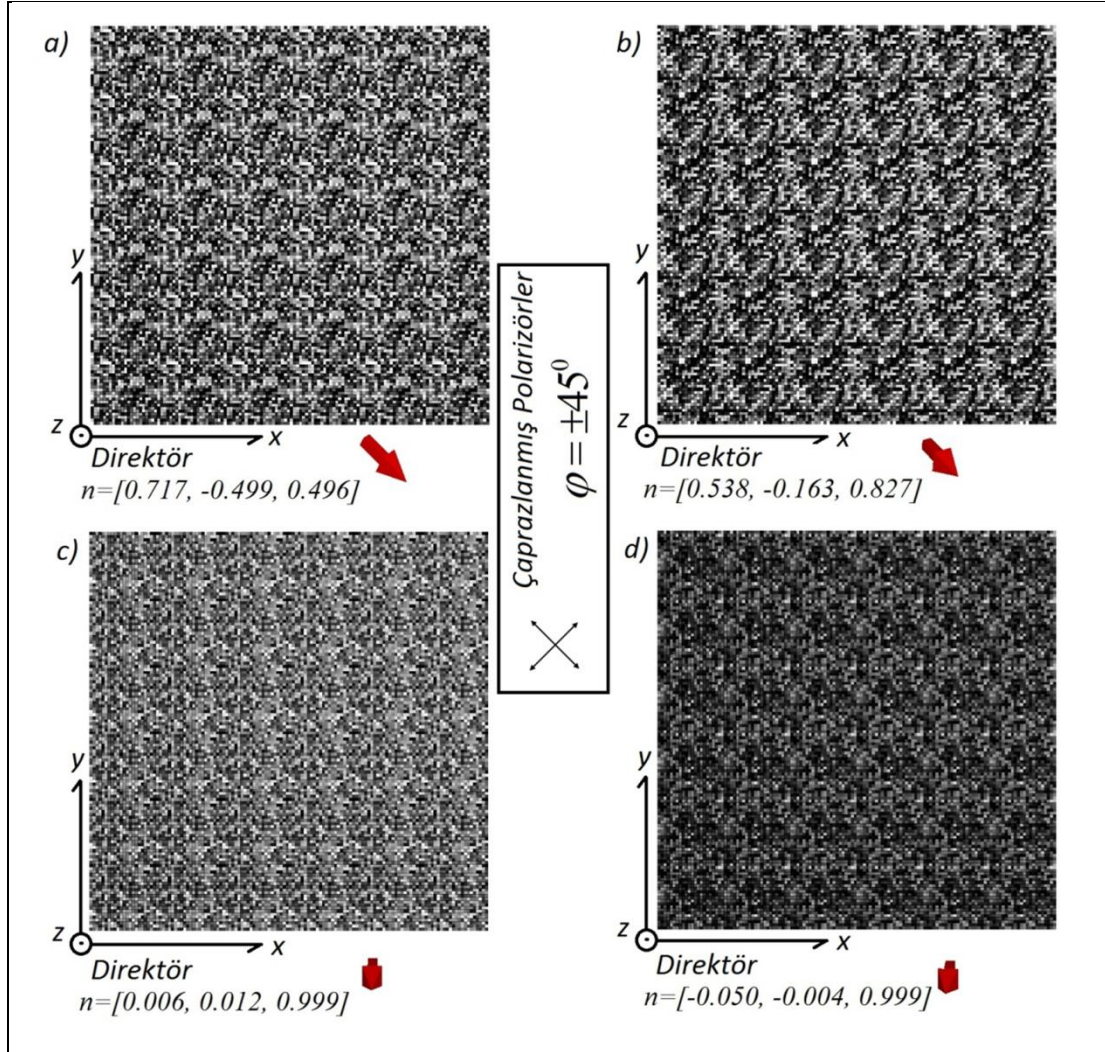
($0 \leq E/E_{2\pi} \leq 1.54$), iletilen ışık şiddeti maksimum değerlerini $\varphi = 45^\circ$ ve $\varphi = 135^\circ$ polarizör açıları için sırasıyla $E/E_{2\pi} = 0.0$ ve $E/E_{2\pi} = 1.54$ elektrik alan değerlerinde alır. Burada dikkat edilmelidir ki $E/E_{2\pi} = 1.54$ değeri $L_z=12$ kalınlığındaki hücrenin düzen parametresi S 'nin minimum olduğu değerdir (şekil 3.13). Bu değer altındaki alan değerleri için polarizör açısına bağlı periyodik ışık şiddetinde bir ($0 \leq \phi \leq \pi/2$) kadar kayma olduğu görülür ve geçen ışığın şiddeti $I_0=0.20$ a.u. and $I_0=0.35$ a.u. değerleri arasında salınım yapar.



Şekil 3.14: SK hücreden geçen ışık şiddetinin φ polarizör açısı ve uygulanan elektrik alana bağlı değişim grafiği. Hücrenin kalınlığı $L_z=12$ 'dir. Bölgeler için ilgili elektrik alan değerleri: Bölge-I'de $0 \leq E/E_{2\pi} \leq 1.54$, Bölge-II'de $1.54 < E/E_{2\pi} \leq 3.10$, ve Bölge-III'de $3.10 < E/E_{2\pi}$.

Bölge -II'de ($1.54 < E/E_{2\pi} \leq 3.10$), periyodik salınımdaki kaymalar ortadan kalkar ve $\varphi = 45^\circ, 135^\circ$ 'ler için maksimum değerlerini alır. Bu bölgede minimum ve maksimum salınım değerleri sırasıyla $I_0=0.05$ a.u. ve $I_0=0.35$ a.u.'dır. Dikkat edilirse $E/E_{2\pi} = 1.54$ ve $E/E_{2\pi} = 3.10$ değerleri $L_z=12$ kalınlığındaki hücre için düzen parametresi eğrisinin (şekil 3.13) sırasıyla minimum ve büküm noktalarıdır. Düzen parametresi eğrisi, büküm noktasında dışbükeyden içbükeye döner. Bölge-

III'de ($E/E_{2\pi} > 3.10$), salınımın genliği çok sert bir şekilde düşer öyle ki geçen ışık şiddeti $I_0=0.0$ a.u. ve $I_0=0.05$ değerleri arasında salınır. Bu da, SKM'nin neredeyse mükemmel bir homeotropik yönelimde olduğu anlamına gelir.



Şekil 3.15: Çaprazlanmış $\varphi = \pm 45^\circ$ polarizör açıları için, $L_x \times L_y = 22 \times 22$ ve $L_z = 12$ kalınlığındaki SK hücrenin a) $E/E_{2\pi} = 0.26$, b) $E/E_{2\pi} = 1.04$, c) $E/E_{2\pi} = 2.07$, d) $E/E_{2\pi} = 3.11$ dış alan değerlerindeki anlık optik doku görüntüleri ve ilgili direktörleri.

Şekil 3.15'de, farklı elektrik alan değerleri için $L_z = 12$ kalınlığındaki hücrenden geçen polarize ışığın optik doku görüntüsü verilmektedir. Görüntüler, $L_x \times L_y = 22 \times 22$ kareli anlık görüntünün x- ve y-yönlerinde altışar defa toplamda 36 kopyasının yan yana birleştirilmesinden oluşturulmuştur (x- ve y-yönlerinde MC simülasyonları gereği periyodik sınır şartları olduğu hatırlanmalıdır). Burada $E/E_{2\pi} = 1.54$ ve

$E / E_{2\pi} = 3.10$ deęerleri, Őekil 3.13’de verildięi űzere $L_z=12$ kalınlıęındaki hűcre iin sırasıyla dűzen parametresinin minimum ve bűkűm noktalarıdır. Őekil-15.a) ve -15.b), bűlge-I den (fakat farklı alan deęerlerine karŐılık gelen), Őekil 3.15.c) bűlge-II den ve Őekil 3.15.d) de bűlge-III den anlık optik doku gűrűntűleridir (Őekil 3.14). Optik doku gűrűntűleri, Őekil 3.12 ve Őekil 3.13’de verilen sonularla tutarlıdır. SKM’nin K űzellięinden dolayı, geen ıŐıęın karakteristik davranıŐı, yani ilgili hűcrenin optik dokusu, ilgili hűcre iin alan baęımlı direktűre sıkı bir Őekilde baęlıdır.

3.3. Düzlemsel ve Burgu Geometrilili SK Hücrelerde Elektro-optik İletim

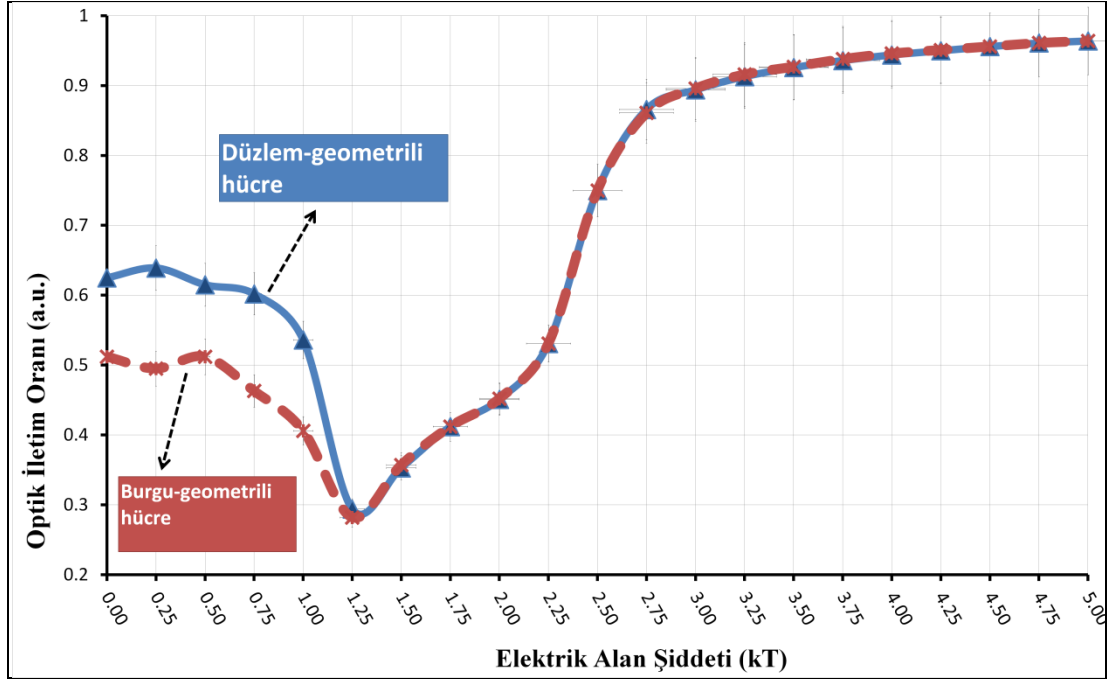
SK malzemelerin elektro-optik özelliklerinin belirlenmesinde hücre geometrisi önemli bir faktördür. Bu bölümde, MC Metropolis simülasyonları ve Mueller-Stokes formalizmi kullanılarak düzlemsel (şekil 1.4) ve burgu geometrisine (şekil 1.5) sahip aynı kalınlıkta iki tür SK hücrenin elektro-optik özellikleri incelenecektir. Bu amaçla, kalınlıkları ve örgü yapıları aynı fakat biri düzlemsel diğeri burgu geometrilili iki hücre kullanılmıştır. Hücreler çaprazlanmış çizgisel polarizörler arasına yerleştirilerek (şekil 3.11) optik iletim değerleri hesaplanmıştır.

3.3.1. Model ve Simülasyon Detayları

Her iki hücre için xy-düzlemi boyunca periyodik sınır şartları uygulanmıştır. Oz-doğrultusunda ise düzlemsel geometrilili hücrenin her iki duvarı ($z=1$ ve $z=L_z$ numaralı tabakalar) için Ox-doğrultusunda duvar kuvveti sınır şartları vardır. Burgu geometrilili hücrede ise duvar kuvvetleri $z=1$ düzleminde Ox-doğrultusunda iken $z=L_z$ de Oy-doğrultusunda uygulanmıştır. Tüm simülasyonlar için $\xi = 0.5 k_B T$, $\alpha = 5.00 k_B T$, ve $0 \leq E^2 < 5.0^2 k_B T$ seçilmiştir. Simülasyonlarda kullanılan molekül sayısı $N = L_x \times L_y \times L_z = 22 \times 22 \times 6 = 2904$ seçilmiştir. Düzen parametresi, direktör, ve ışık iletim oranları gibi gözlemlenebilir büyüklükleri hesaplamak için her bir alan değerine karşılık gelen ayrı MC simülasyonu yapılmıştır. MCAS, ilgili simülasyonun molekül sayısının bir fonksiyonu olacak şekilde belirlenmiştir. Denge süreci için “ $MCAS = 1100 \times N$ ” ve örnekleme süreci içinse “ $MCAS = 484 \times N$ ” olacak şekilde seçilmiştir. Eşitlik (3.7)’de verilen model Hamiltonyen kullanılarak, SKM’nin denge konfigürasyonları MC simülasyonlarıyla belirlenmiştir.

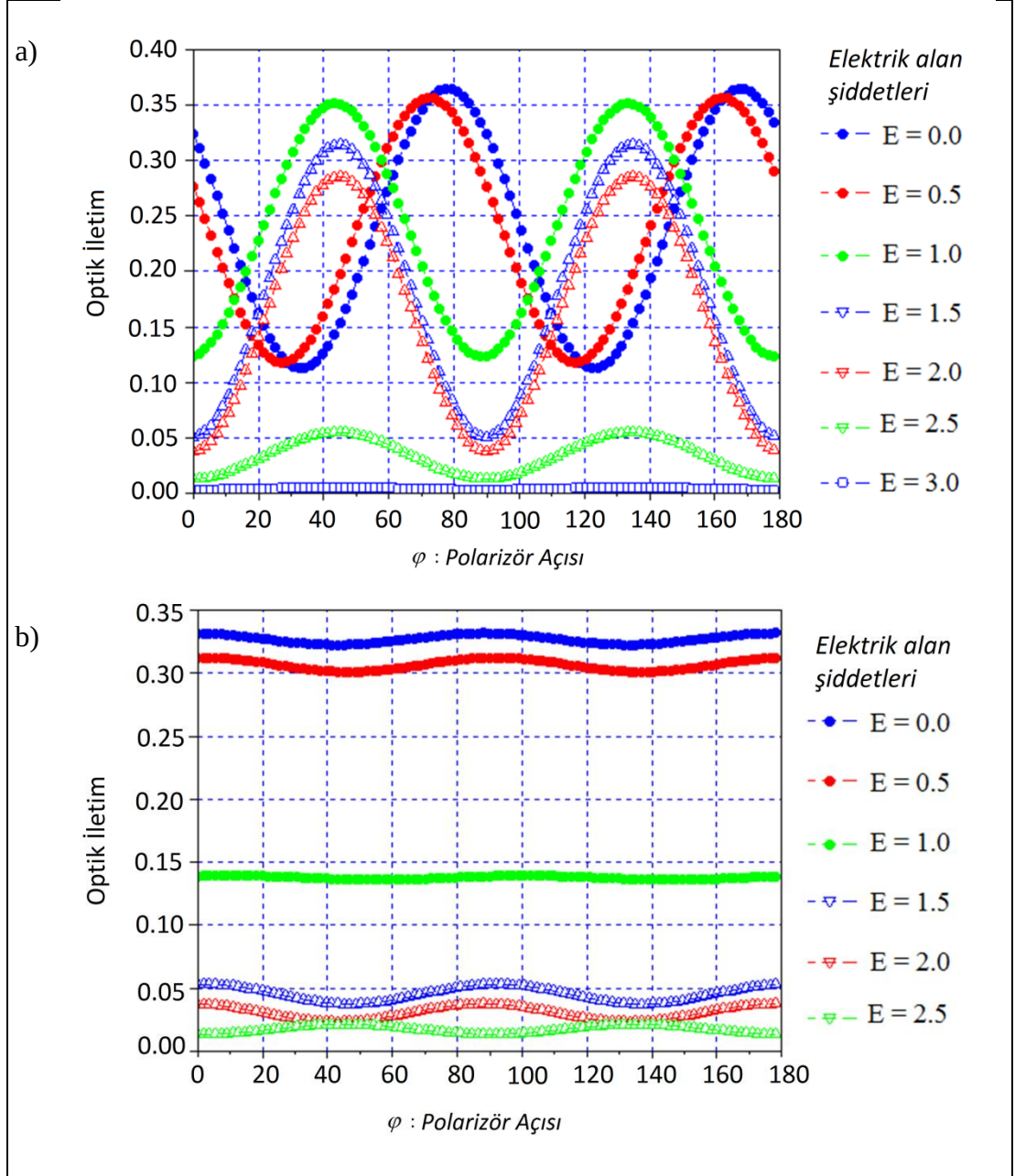
3.3.2. Sonuçlar ve Değerlendirmeler

Şekil 3.16’da, düzlemsel- ve burgu-geometrilili iki SK hücre için düzen parametresi S ’nin uygulanan elektrik alana bağlı değişim grafiği verilmiştir.



Şekil 3.16: $L_x \times L_y \times L_z = 22 \times 22 \times 6$ örgü yapısında ki düzlemsel ve burgu geometrilili iki hücrenin genel düzen parametresi S 'nin elektrik alanla değişimi

Düzlemsel-geometrilili hücrede, SKM'i ve her iki hücre duvarları arasındaki paralel yönlü kuvvetlerden dolayı, elektrik alan yokken moleküllerin çoğu Ox-ekseni doğrultusunda yönelmişlerdir. Burgu-geometrilili hücrede ise duvarlara en yakın moleküllerden $z=1$ 'dekiler Ox doğrultusunda yönlenirken $z=6$ 'dakiler Oy-doğrultusunda yönelme eğilimindedirler. Her iki hücrenin geometrilerindeki bu fark, düzen parametresi elektrik alan grafiğine de yansımıştır. Düşük alanlar için düzlemsel geometrilili hücrede birbirine paralel doğrultuda iki yönlendirici kuvvet olduğundan (Ox-doğrultusu), SKM'nin çoğu bu yönde düzen kurma eğilimindedir. Burgu-geometrilili hücrede ise yönlendirici kuvvetler birbirine dik olduğundan (Ox-ve Oy-doğrultuları) bu doğrultulardaki yönlendirici etkiler azalmış ve düzen parametresi daha düşük değerler almıştır. Oz-ekseni (hücre duvarlarına dik olan eksen, şekil 3.11) boyunca elektrik alan arttıkça, her iki hücre içinde Oz-doğrultusunda bir yönelim düzeni oluşmaya başlar. Düzen parametresinin minimum olduğu elektrik alan değerinden itibaren ($E=1.25 \text{ k}_B T$) her iki hücre içinde eşitlik (3.7)'de verilen elektrik alan-SKM etkileşmesi, diğer etkileşmelere göre daha baskın hale gelir. Bu durum, bu elektrik alan değerinden ($E=1.25 \text{ k}_B T$) sonra düzen parametresi eğrilerinin üst üste çakışması olarak yansımıştır.



Şekil 3.17: $L_x \times L_y \times L_z = 22 \times 22 \times 6$ örgü yapısında a) düzlemsel- ve b) burğu-geometrilili hücrelerin farklı elektrik alan değerleri için optik iletim değerlerinin çaprazlanmış polarizör açısı φ 'ye bağlı değişimi.

Şekil 3.17'de, polarizör-SK hücre-analizör (şekil 3.11) sisteminden geçen ışığın şiddeti farklı elektrik alan değerleri için polarizör açısının ($0 \leq \varphi \leq 180^\circ$ aralığında) bir fonksiyonu olarak belirlenmiştir. Her iki hücre içinde polarizörlerden geçen ışık şiddeti, verilen bir elektrik alan değeri için φ polarizör açısının $\pi/2$ periyotlu bir fonksiyonudur. Düzlemsel-geometrilili hücre için optik iletim genlikleri, burğu geometrilili hücrenin iletim genliklerine göre çok daha büyüktür. Düzlemsel-geometrilili hücrede (şekil 3.17.a)) düşük alanlar değerleri ($E=0, 0.5$) için şekil 3.14'te

gözlemlediğimiz bölge-I'deki gibi bir kayma gözleendiği halde, bu kaymalar burgu-geometrilili hücrede kaybolmuştur. Ayrıca düzlemsel geometrilili hücrede şekil 3.14'te tanımlanan bölge-II ve -III şekil 3.17.a) da sırasıyla $E=1.0$, 1.5 , 2.0 ve $E=2.5$, 3.0 değerleri için ortaya çıkmaktadır. Şekil 3.17.a) ve b)'ye bakıldığında düzlemsel-geometrilili hücrenin polarizör açısına ve elektrik alan değerlerine (bölge-1 için) karşı çok hassas olduğu anlaşılmaktadır. Buna karşın burgu-geometrilili hücre için aynısını söyleyemeyiz fakat elektrik alan değerleri ve polarizör açılarına karşı optik iletim değerleri son derece kararlılıdır. Özellikle iletim genlikleri çok fazla değişmemektedir. Buda optik görüntüleme açısından önemli bir özelliktir. Düzlemsel hücrenin polarizör açısı ve elektrik alana bağlı bu üç bölgeyi hassas karakteristik özelliği, elektro-optik tabanlı dedektör tasarlamak için kullanışlı olabilir.

4. SONUÇ ve YORUMLAR

Bu tez kapsamında, bölüm 3.1’de NSK bir tabakanın, nematik-izotropik faz geçişi, bölüm 3.2’de NSK hücrelerin kalınlığa bağlı optik ve elektriksel özellikleri, ve bölüm 3.3’de ise burgu ve düzlemsel duvar kuvvetleri için optik ve elektriksel özelliklerin bir karşılaştırması MC simülasyonları ve Mueller-Stokes formalizmi kullanılarak verilmiştir. Bölüm 3.2’de verilen sonuçların bir kısmı ayrıca yayınlanmıştır [Emül et al., 2014]. Bu bölümde verilen sonuçların bir kısmının (şekil 3.12) literatürdeki deneysel çalışmalardan [Lee et al., 2005] ve [Cook et al., 2010] ile uyumlu olması ileriki çalışmalar için iyi bir motivasyon kaynağıdır. Ayrıca eşitlik (3.7)’de verilen model Hamiltonyen’in güvenilirliğini de artırıcı bir sonuçtur. Şekil 3.14’de verilen üç bölgeli optik karakterizasyon yüzeyi ise literatür için yeni bir sonuçtur. Bu bölgeli yapının deneysel olarak da yakın zamanda gözlemlenmesi umulmaktadır.

Son zamanlardaki deneysel çalışmalar [Lagerwall, 2008], [Kumar, 2011], [Manohar et al., 2011] özellikle karbon nanotüp, nanoparçacık, ve boya katkılı SK yapıların elektro-optik özelliklerin artırılmasında önemli bir role sahip olacağını göstermektedir. Bu tür katkılı yapılar için model Hamiltonyen’lerin geliştirilmesi ve bu yönde hesaplamalı çalışmalarla test edilmesi gelecekte MC yöntemi ve moleküler dinamik hesapları için ufuk açıcı olacaktır.

KAYNAKLAR

- Berggren E., Zannoni C., Chiccoli C., Pasini P., Semeria F., (1994), "Computer simulations of nematic droplets with bipolar boundary conditions", *Physical Review E* 50 (4), 2929-2939.
- Bergen E., Zannoni C., Chiccoli C., Semeria F., (1995), "A Monte Carlo Simulation of a Twisted Nematic Liquid Crystal Display", *International Journal of Modern Physics C* 06 (1), 135-141.
- Blinov L. M., (2010), "Structure and properties of liquid crystals", 1st Edition, Springer.
- Castellón E., Zayat M., Levy D., (2010), "A model for the study of the optical transmission dynamics of liquid crystals dispersions under the influence of an electric field", *The European Physical Journal E* 32 (1), 81-87.
- Challa M. S. S., Landau D. P., Binder K., (1986), "Finite-size effects at temperature-driven first-order transitions", *Physical Review B* 34 (3), 1841-1852.
- Chiccoli C., Lavrentovich O. D., Pasini P., Zannoni C., (1997), "Monte Carlo Simulations of Stable Point Defects in Hybrid Nematic Films", *Physical Review Letters* 79 (22), 4401-4404.
- Cook G., Reshetnyak V. Y., Ziolo R. F., Basun S. A., Banerjee P. P., Evans D. R., (2010) "Asymmetric Freedericksz transitions from symmetric liquid crystal cells doped with harvested ferroelectric nanoparticles" *Optics Express* 18 (16), 17339-17345.
- Dolgov L., Yaroshchuk O., Lebovka M., (2008), "Effect of Electro-Optical Memory in Liquid Crystals Doped with Carbon Nanotubes", *Molecular Crystals and Liquid Crystals* 496 (1), 212-229.
- Emül Y., Polat Ö., San S. E., Kayacan Ö., Özbek H., (2014), "Investigating electro-optical properties of a nematic liquid crystal cell with planar anchoring boundary condition for various thicknesses: A Monte Carlo study", *Optical Materials* 36 (8), 1373-1377.
- Fabbri U., Zannoni C., (1986), "A Monte Carlo investigation of the Lebwohl-Lasher lattice model in the vicinity of its orientational phase transition", *Molecular Physics* 58 (4), 763-788.
- Gennes P. G. d., Prost J., (1993), "The physics of liquid crystals", 2nd Edition, Oxford University Press.
- Gerrard A., Burch J. M., (1975), "Introduction to matrix methods in optics", 1st Edition, Wiley.

Goldstein D. H., (2011), "Polarized light", 3rd Edition, CRC Press.

Ha Y. S., Kim H. J., Park H. G., Seo D. S., (2012), "Enhancement of electro-optic properties in liquid crystal devices via titanium nanoparticle doping", *Optics Express* 20 (6), 6448-6455.

Hirschmann H., Reiffenrath V., (1998), "Handbook of liquid crystals", 1st Edition, Wiley-VCH.

Jayasri D., Sastry V. S. S., Murthy K. P. N., (2005), "Wang-Landau Monte Carlo simulation of isotropic-nematic transition in liquid crystals", *Physical Review E* 72 (3), 36702-36709.

Jo E. M., Srivastava A. K., Bae J. J., Kim M., Lee M. H., Lee H. K., Lee S. E., Lee S. H., Lee Y. H., (2009), "Carbon Nanotube Effects on Electro-Optic Characteristics of Twisted Nematic Liquid Crystal Cells.", *Molecular Crystals and Liquid Crystals* 498 (1), 74-82.

Khoo I. C., (2007), "Liquid crystals", 2nd Edition, N.J., Wiley-Interscience.

Kim J. H., Yoneya M., Yokoyama H., (2002). "Tristable nematic liquid-crystal device using micropatterned surface alignment", *Nature* 420 (6912), 159-162.

Kumar A., Biradar A. M., (2011), "Effect of cadmium telluride quantum dots on the dielectric and electro-optical properties of ferroelectric liquid crystals" *Physical Review E* 83 (4), 41708-41716.

Kumar S. (2001), "Liquid crystals : experimental study of physical properties and phase transitions", 1st Edition, Cambridge University Press.

Lagerwall J. P. F., Scalia G., (2008), "Carbon nanotubes in liquid crystals", *Journal of Materials Chemistry* 18 (25), 2890-2898.

Lagerwall J. P. F., Scalia G., (2012), "A new era for liquid crystal research: Applications of liquid crystals in soft matter nano-, bio- and microtechnology", *Current Applied Physics* 12 (6), 1387-1412.

Landau D. P., K. Binder, (2009), "A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics", 3rd Edition, Cambridge University Press.

Lebwohl P. A., Lasher G., (1972), "Nematic-Liquid-Crystal Order—A Monte Carlo Calculation", *Physical Review A* 6 (1), 426-429.

Lee W. K., Choi Y. S., Kang Y. G., Sung J., Seo D. S., Park C., (2011), "Super-Fast Switching of Twisted Nematic Liquid Crystals on 2D Single Wall Carbon Nanotube Networks", *Advanced Functional Materials* 21 (20), 3843-3850.

Lee W., Gau J. S., Chen H. Y., (2005), "Electro-optical properties of planar nematic cells impregnated with carbon nanosolids", *Applied Physics B* 81 (2), 171-175.

Manohar R., Srivastava A. K., Tripathi P., Singh D., (2011), “Dielectric and electro-optical study of ZnO nano rods doped ferroelectric liquid crystals”, *Journal of Materials Science* 46 (18), 5969-5976.

Papoular M., Rapini A., (1970), "Ondes de surface dans un cristal liquide nématique", *Journal de Physique Colloques* 31 (C1), 27-28.

Pasini P., Zumer S., Zannoni C., (2005), “Computer simulations of liquid crystals and polymers. NATO science series Series II, Mathematics, physics, and chemistry v 177”, 1st Edition, Kluwer Academic Publishers.

Pawlik G., Jarema M., Walasik W., Mitus A. C., Khoo I. C., (2010), “Field-induced inhomogeneous index distribution of a nano-dispersed nematic liquid crystal metamaterial near the Freedericksz transition: Monte Carlo studies.”, *Journal of the Optical Society of America B* 27 (3), 567-576.

Pawlik G., Mitus A. C., Karpinski P., Miniewicz A., (2012), “Laser light-induced molecular reorientation in 90° twisted nematic liquid crystal: Classic approach, Monte Carlo modeling and experiment.”, *Optical Materials* 34 (10), 1697-1703.

Pawlik G., Mitus A. C., Miniewicz A., (2000), “Monte–Carlo simulations of refractive index changes in nematic liquid crystal upon spatially nonuniform illumination.”, *Optics Communications* 182 (1), 249-254.

Pawlik G., Walasik W., Mitus A. C., Khoo I. C., (2011), “Large gradients of refractive index in nanosphere dispersed liquid crystal metamaterial with inhomogeneous anchoring: Monte Carlo study”, *Optical Materials* 33 (9), 1459-1463.

Pelzl G., (1998), “Handbook of liquid crystals”, 1st Edition Wiley-VCH.

Priezjev N. V., Pelcovits R. A., (2001), “Cluster Monte Carlo simulations of the nematic-isotropic transition”, *Physical Review E* 63 (6), 62702-62706.

Rapini A., Papoular M. , (1969), “Distorsion d'une lamelle nématique sous champ magnétique conditions d'ancrage aux parois”, *Journal de Physique Colloques* 30 (C4), 54-56.

Reinitzer F., (1888), “Beiträge zur Kenntniss des Cholesterins”, *Monatshefte für Chemie und verwandte Teile anderer Wissenschaften* 9(1), 421-441.

Singh S., (2000), “Phase transitions in liquid crystals”, *Physics Reports* 324 (2–4), 107-269.

Takato K., (2005), “Alignment technologies and applications of liquid crystal devices”, 1st Edition, Taylor & Francis.

Xu F., Kitzerow H., Crooker P. P., (1992), "Electric-field effects on nematic droplets with negative dielectric anisotropy”, *Physical Review A* 46 (10), 6535-6540.

Yaroshchuk O., Tomylko S., Dolgov L., Semikina T., Kovalchuk O. , (2010), "Carbon nanotubes doped liquid crystals: Robust composites with a function of electro-optic memory", *Diamond and Related Materials* 19 (5), 567-572.

ÖZGEÇMİŞ

Yakup EMÜL 1978 yılında Sivas'ta doğdu. 1996 yılında Sivas Kongre Lisesinden mezun oldu. 1997 yılında başladığı İstanbul Teknik Üniversitesi (İTÜ), Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Mühendisliği programını 2004 yılında tamamladı ve aynı yıl İTÜ Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Mühendisliği programında yüksek lisans eğitimine başladı. 2008 yılında İTÜ Fizik Mühendisliği programından mezun oldu. 2009 yılında Gebze Yüksek Teknoloji Enstitüsü (GYTE) Mühendislik ve Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında doktora eğitimine başladı. 2006 yılından beri Bahçeşehir Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesinde araştırma görevlisi olarak çalışmaktadır. Evli ve iki çocuk babasıdır.

EKLER

Ek A: Tez Çalışması Kapsamında Yapılan Yayınlar

Emül, Y., Ö. Polat, S. E. San, Ö. Kayacan, H. Özbek, (2014), “Investigating electro-optical properties of a nematic liquid crystal cell with planar anchoring boundary condition for various thicknesses: A Monte Carlo study”, Optical Materials 36 (8), 1373-1377.

Ek B: Stokes Vektörleri

Eşitlik (2.17)'de verilen eliptik polarize bir ışığın Stokes vektörü,

$$\vec{S} = \begin{bmatrix} S_0 \\ S_1 \\ S_2 \\ S_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{0x}^2 + A_{0y}^2 \\ A_{0x}^2 - A_{0y}^2 \\ 2A_{0x}A_{0y} \cos \delta \\ 2A_{0x}A_{0y} \sin \delta \end{bmatrix} \quad (\text{B1.1})$$

ışığın tüm polarizasyon durumlarını tanımlar. Çizgisel yatay polarize ışık için Stokes vektörü: $A_{0y} = 0$,

$$\vec{S} = I_0 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{B1.2})$$

burada $I_0 = A_{0x}^2$ toplam ışık şiddetidir. Çizgisel dikey polarize ışık için Stokes vektörü: $A_{0x} = 0$ durumu,

$$\vec{S} = I_0 \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{B1.3})$$

burada $I_0 = A_0^2$ toplam ışık şiddetidir. Çizgisel $+45^\circ$ polarize ışık için Stokes vektörü: $A_{0x} = A_{0y} = A_0, \delta = 0$ durumunda,

$$\vec{S} = I_0 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{B1.4})$$

burada $I_0 = 2A_0^2$ toplam ışık şiddetidir. Çizgisel -45° polarize ışığın Stokes vektörü: $A_{0x} = A_{0y} = A_0, \delta = 180^\circ$ için,

$$\vec{S} = I_0 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{B1.5})$$

burada $I_0 = 2A_0^2$ toplam ışık şiddetidir. Sağ-elli dairesel polarize ışık için Stokes vektörü: $A_{0x} = A_{0y} = A_0, \delta = 90^\circ$ durumu,

$$\vec{S} = I_0 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (\text{B1.6})$$

burada $I_0 = 2A_0^2$ toplam ışık şiddetidir. Sol-elli dairesel polarize ışık için Stokes vektörü: $A_{0x} = A_{0y} = A_0, \delta = -90^\circ$ durumu,

$$\vec{S} = I_0 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix} \quad (\text{B1.7})$$

burada $I_0 = 2A_0^2$ toplam ışık şiddetidir. Anpolarize ışık için Stokes vektörü:
 $S_0^2 > 0$ ve $S_1^2 = S_2^2 = S_3^2 = 0$ için,

$$\vec{S} = I_0 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{B1.8})$$

burada $I_0 = S_0$ toplam ışık şiddetidir.

Ek C: Mueller Matrisleri

Oz-eksenine yerleştirilmiş ve Ox-ekseninden γ açısı kadar döndürülmüş bir optik polarizör için genel Mueller matrisi:

$$M = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \cos 2\gamma & 0 & 0 \\ \cos 2\gamma & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sin 2\gamma & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sin 2\gamma \end{pmatrix} \quad (\text{C1.1})$$

Oz-eksenine yerleştirilmiş, Ox-ekseninden θ açısı kadar döndürülmüş ve δ fazlı bir optik geciktirici için genel Mueller matrisi,

$$M(\delta, \theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos^2 2\theta + \cos \delta \sin^2 2\theta & (1 - \cos \delta) \sin 2\theta \cos 2\theta & -\sin \delta \sin 2\theta \\ 0 & (1 - \cos \delta) \sin 2\theta \cos 2\theta & \sin^2 2\theta + \cos \delta \cos^2 2\theta & \sin \delta \cos 2\theta \\ 0 & \sin \delta \sin 2\theta & -\sin \delta \cos 2\theta & \cos \delta \end{pmatrix} \quad (\text{C1.2})$$