

Санкт-Петербургский Государственный Университет

На правах рукописи

Кокорин Дмитрий Иванович

**Диффузия света и когерентное обратное
рассеяние в нематических жидких кристаллах**

01.04.02 – Теоретическая физика

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Научный руководитель

д. ф.-м. н.

Аксёнова Елена Валентиновна

Санкт-Петербург – 2014

Содержание

Введение	3
Глава 1. Многократное рассеяние света в сильно неоднородных средах	9
1.1. Рассеяние света в НЖК	9
1.2. Многократное рассеяние в НЖК	13
1.3. Моделирование многократного рассеяния	18
1.4. Моделирования рассеяния в анизотропных средах	22
1.5. Моделирование рассеяния в НЖК	29
1.6. Выводы	34
Глава 2. Диффузия света в НЖК	35
2.1. Диффузия в анизотропных средах	35
2.2. Моделирование диффузии света в НЖК	39
2.3. Особенности диффузии света в НЖК	48
2.4. Выводы	61
Глава 3. Когерентное обратное рассеяние света в НЖК	62
3.1. Аналитический подход	63
3.2. Численное моделирование	65
3.3. Результаты моделирования	69
3.4. Выводы	77
Заключение	78
Литература	80

Введение

Актуальность темы исследования. Исследование многократного рассеяния света в жидких кристаллах привлекает большое внимание в течение многих лет [1–9]. Наиболее детально исследуются нематические жидкие кристаллы (НЖК). Оптические свойства этих систем хорошо известны и, как правило, для них с высокой точностью измерены все необходимые оптические характеристики. С точки зрения проблем многократного рассеяния жидкие кристаллы выделены тем, что в них в отличие от других изучаемых объектов источником многократного рассеяния являются не отдельные частицы, как в суспензиях, и не структурные неоднородности, как в неоднородных твердых диэлектриках, а тепловые флуктуации ориентации, амплитуда и корреляционные свойства которых хорошо исследованы как экспериментально, так и теоретически.

Сложность исследования многократного рассеяния в НЖК обусловлена тем, что эта система обладает значительной оптической анизотропией, а индикатриса однократного рассеяния имеет сложную структуру.

Наиболее интересными и хорошо изученными эффектами в многократном рассеянии в нематических жидких кристаллах являются когерентное обратное рассеяние и диффузия света.

Эффективным методом при описании переноса излучения в сильно неоднородных средах является диффузионное приближение. Анализ этого подхода посвящено значительное число работ [10–17]. Экспериментально скорость диффузии фотонов и коэффициенты диффузии определяются путем исследования прохождения коротких импульсов через среду [18]. В изотропных системах коэффициент диффузии определяется соотношением $D = \frac{1}{3}vl_{tr}$, где v скорость света в неоднородной среде, l_{tr} — транспортная длина. В поглощающих средах для D используется соотношение $D = \frac{v}{3(\mu'_s + \mu_a)}$, где μ'_s и μ_a — коэффициенты рассеяния и поглощения. Вопросу о корректности этого выражения посвящен целый ряд работ [19–21].

Значительный интерес проявляется к исследованию диффузии фотонов и в нематических жидких кристаллах. Эта проблема рассматривалась в работах [2, 3, 12, 22–24]. Экспериментально компоненты тензора диффузии измерялись путем пропускания короткого светового импульса через слой с НЖК [22, 23], а также по деформации светового пучка [1], прошедшего сквозь образец. Для аналитического вычисления коэффициентов диффузии применялись два подхода. Один подход использует аналогию между переносом излучения и задачей рассеяния электронов на примесях, для которой выражения для коэффициентов диффузии были получены при помощи формулы Кубо–Гринвуда [3–5, 25]. Другой подход предполагает построение приближенного решения интегрального уравнения Бете–Солпитера [1, 2].

Эффект когерентного обратного рассеяния детально исследован теоретически и экспериментально для различных систем [26–28], в том числе и для жидких кристаллов [2, 3, 7, 8, 29]. Описание пика обратного рассеяния сводится к суммированию лестничных и циклических диаграмм. Эта задача точно решается для системы точечных рассеивателей [12], а для рассеивателей конечных размеров или флуктуаций с конечным радиусом корреляции вводятся приближения, точность которых не всегда удается контролировать из-за сложности решаемой задачи.

Также к настоящему времени детально разработаны методы численного моделирования многократного рассеяния [1, 4, 5, 30], которые позволяют избежать многих трудностей, возникающих при аналитических расчетах. Ввиду значительной сложности задачи как аналитические, так и численные подходы используют некоторые упрощающие предположения. Несмотря на эти упрощения авторам удалось показать тензорный характер коэффициента диффузии и получить узкий пик когерентного обратного рассеяния с эллиптической формой поперечных сечений.

Цели и задачи диссертационной работы: Появление новых экспериментальных данных о диффузии света [22, 23] и когерентном обратном рассея-

нии [7, 8] ставит вопрос о том, насколько хорошо согласуются между собой результаты теории, моделирования и эксперимента. Естественным решением этой проблемы является проведение моделирования многократного рассеяния света в НЖК, не использующее упрощающих предположений о свойствах жидкого кристалла. Целью нашего исследования было решить эту проблему и сравнить результаты моделирования с результатами аналитических исследований и экспериментальными данными.

Для достижения поставленной цели были решены следующие задачи:

- Предложено обобщение стандартной схемы моделирования многократного рассеяния на случай одноосной среды с произвольной достаточно гладкой индикатрисой однократного рассеяния.
- Проведено моделирование диффузии света в НЖК без использования упрощающих предположений о свойствах жидкого кристалла .
- Проведено моделирование когерентного обратного рассеяния света в НЖК, не пренебрегающее различием модулей Франка.

Научная новизна и практическая значимость В диссертации впервые решены следующие задачи:

- Предложено обобщение подхода к моделированию многократного рассеяния на случай анизотропных сред с произвольной достаточно гладкой индикатрисой однократного рассеяния. Предложенный способ моделирования может быть использован в различных областях физики, таких как океанология, геофизика, физика атмосферы, биофизика, задачах медицинской диагностики и других.
- Проведено моделирование многократного рассеяния света в НЖК, не пренебрегающее различием модулей Франка.

- Проведен анализ перехода от процесса многократного рассеяния света к диффузионному режиму.
- При помощи моделирования исследована зависимость компонент тензора анизотропной диффузии от напряженности внешнего магнитного поля, ориентирующего жидкий кристалл. Обнаружено, что эта зависимость имеет немонотонный характер. Предложено качественное объяснение такого немонотонного поведения.
- Рассчитана зависимость тензора анизотропной диффузии от длины волны падающего на НЖК света.
- Проведено моделирование когерентного обратного рассеяния света в НЖК, не использующее упрощающие предположения о свойствах жидкого кристалла.

На защиту выносятся следующие результаты и положения:

- Проведено моделирование многократного рассеяния света в НЖК. Показано, что переход от описания в терминах отдельных кратностей рассеяния к диффузионному режиму происходит после $10 \div 15$ актов рассеяния.
- Предсказанные моделированием значения поперечного коэффициента диффузии хорошо согласуются с известными данными. Для продольного коэффициента диффузии моделирование предсказывает большие значения, чем эксперимент и результаты приближенных аналитических вычислений.
- Обнаружена немонотонная зависимость рассчитанных коэффициентов анизотропной диффузии от напряженности магнитного поля, ориентирующего НЖК. Немонотонность обусловлена оптической анизотропией жидкого кристалла.

- Показано, что в оптическом диапазоне компоненты тензора диффузии меняются в несколько раз в зависимости от длины световой волны.
- При помощи моделирования получен близкий по ширине к экспериментальному пик когерентного обратного рассеяния для ориентированных НЖК.

Степень достоверности и апробация результатов. Моделирование проводилось хорошо апробированным методом Монте-Карло, описывающим многократное рассеяние, как случайное блуждание частиц в среде. Использовалась известная модель однократного рассеяния. На каждом этапе моделирования выполнялся контроль точности проведенных расчетов.

Основные результаты диссертации докладывались на международных конференциях:

- 24th International Liquid Crystal Conference, Майнц, Германия, 2012
- 25th International Liquid Crystal Conference, Дублин, Ирландия, 2014

и на семинарах кафедры статистической физики физического факультета СПбГУ.

Публикации. Материалы диссертации опубликованы в 3 печатных работах [31–33].

Личный вклад автора. Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Подготовка к публикации полученных результатов проводилась совместно с соавторами, причем вклад диссертанта был определяющим. Все представленные в диссертации результаты получены лично автором.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 3 глав, заключения и библиографии. Общий объем диссертации 88 страниц, включая 21 рисунок. Библиография включает 77 наименований на 9 страницах.

В главе 1 рассматриваются теория и соответствующее ей моделирование многократного рассеяния в применении к рассеянию света в НЖК. Раздел 1.1

посвящен оптическим свойствам НЖК и описанию однократного рассеяния света. В разделе 1.2 изложена теория многократного рассеяния света в анизотропных средах. Рассматривается уравнение Бете-Солпитера и соответствующая ему диаграммная техника. В разделе 1.3 описан стандартный подход к моделированию многократного рассеяния, основанному на формальном решении уравнения Бете-Солпитера в виде бесконечного ряда лестничных диаграмм. В разделе 1.4 рассматривается предложенное автором диссертации обобщение стандартного подхода к моделированию на случай анизотропных сред с произвольной индикатрисой однократного рассеяния. В разделе 1.5 показано, как предложенное обобщение может быть использовано для моделирования рассеяния света в НЖК.

Глава 2 посвящена диффузии света в НЖК. В ней кратко описаны приближенные аналитические методы для вычисления коэффициентов анизотропной диффузии. Описана техника моделирования диффузии света. Приводится сравнение результатов моделирования с известными данными. Особое внимание уделено исследованию немонотонной зависимости коэффициентов диффузии от напряженности внешнего магнитного поля. В конце главы описана зависимость коэффициентов диффузии от длины световой волны. Приведенные в главе результаты опубликованы в работах [32, 33].

В главе 3 описано когерентное обратное рассеяние света в НЖК. Рассмотрен применявшийся при моделировании полуаналитический метод. Проведено сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными и результатами приближенных аналитических вычислений. Результаты моделирования опубликованы в работах [31, 33].

Глава 1

Многократное рассеяние света в сильно неоднородных средах

1.1. Рассеяние света в НЖК

Объектом исследования диссертации являются НЖК. Такие жидкие кристаллы состоят из вытянутых молекул, которые могут быть ориентированы приблизительно в одном направлении внешним полем. Положение молекул при этом не является упорядоченным и они могут свободно перемещаться, сохраняя свое направление. Такая структура жидкого кристалла приводит к тому, что по своим оптическим свойствам НЖК, как правило, являются одноосными кристаллами.

Рассмотрим НЖК во внешнем магнитном поле. Ориентация в жидком кристалле задается с помощью единичного вектора директора $\mathbf{n}(\mathbf{r})$. Свободная энергия искажения имеет вид [34]

$$F = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \{ K_{11}(\text{div } \mathbf{n})^2 + K_{22}(\mathbf{n} \cdot \text{rot } \mathbf{n})^2 + K_{33}(\mathbf{n} \times \text{rot } \mathbf{n})^2 - \chi_a(\mathbf{n} \cdot \mathbf{H})^2 \}. \quad (1.1)$$

Здесь K_l , $l = 1, 2, 3$ — модули Франка, $\chi_a = \chi_{\parallel} - \chi_{\perp}$, $\chi_{\parallel}$, $\chi_{\perp}$ — магнитные восприимчивости вдоль и поперек $\mathbf{H}$, $\mathbf{H}$ — напряженность внешнего магнитного поля. Будем считать образец достаточно большим, так что можно пренебречь энергией взаимодействия с поверхностью. Положим $\chi_a > 0$. В состоянии равновесия вектор директора $\mathbf{n} = \mathbf{n}^0$ постоянен и в случае $\chi_a > 0$ направлен вдоль магнитного поля, $\mathbf{n}^0 \parallel \mathbf{H}$. В дальнейшем будем учитывать, что $\chi_{\parallel, \perp} \ll 1$, то есть тензор магнитной проницаемости имеет вид $\mu_{\alpha\beta} \approx \delta_{\alpha\beta}$.

Рассмотрим одноосный НЖК с тензором диэлектрической проницаемости

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\perp} \delta_{\alpha\beta} + \varepsilon_a n_{\alpha}(\mathbf{r}) n_{\beta}(\mathbf{r}), \quad (1.2)$$

где $\varepsilon_a = \varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}$, $\varepsilon_{\parallel}$, $\varepsilon_{\perp}$ — диэлектрические проницаемости вдоль и поперек директора $\mathbf{n}^0$.

Собственные волны $\mathbf{E}^0(\mathbf{r})$ в одноосной среде представляют собой две плоские волны, обыкновенную, (о), и необыкновенную, (е), с волновыми векторами $\mathbf{k}^{(o)}$ и $\mathbf{k}^{(e)}$

$$\mathbf{E}_{(j)}^0 = E_{(j)}^0 \mathbf{e}^{(j)} e^{i\mathbf{k}^{(j)} \cdot \mathbf{r}}, \quad j = o, e.$$

Здесь $E_{(j)}^0$ — амплитуда поля, $\mathbf{e}^{(j)}$ — единичный вектор поляризации, $k^{(j)} = k_0 n^{(j)}$,

$$n^{(o)} = \sqrt{\varepsilon_{\perp}}, \quad n^{(e)} = \sqrt{\frac{\varepsilon_{\parallel} \varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_a \cos^2 \theta_e}} \quad (1.3)$$

— показатели преломления обыкновенной и необыкновенной волны, θ_j — угол между векторами $\mathbf{n}^0$ и $\mathbf{k}^{(j)}$.

Для описания распространения волн в неоднородной среде удобно использовать волновое уравнение в интегральной форме

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}^0(\mathbf{r}) + k_0^2 \int d\mathbf{r}_1 \hat{G}^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1) \delta \hat{\varepsilon}(\mathbf{r}_1) \mathbf{E}(\mathbf{r}_1), \quad (1.4)$$

где $\delta \hat{\varepsilon}(\mathbf{r})$ — флуктуации тензора диэлектрической проницаемости, $\hat{G}^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1)$ — функция Грина электромагнитного поля.

В дальней зоне в координатном представлении функция Грина в одноосной среде имеет вид [35, 36]

$$\hat{G}^0(\mathbf{R}) = \frac{k_0^2}{4\pi R} \sum_{j=o,e} n^{(j)} f_{(j)} \frac{\mathbf{e}^{(j)} \otimes \mathbf{e}^{(j)}}{(\mathbf{e}^{(j)} \hat{\varepsilon}^0 \mathbf{e}^{(j)})} \exp(i\mathbf{k}_{st}^{(j)} \cdot \mathbf{R}), \quad (1.5)$$

Здесь

$$\mathbf{k}_{st}^{(o)} = \sqrt{\varepsilon_{\perp}} k_0 \frac{\mathbf{R}}{R}, \quad \mathbf{k}_{st}^{(e)} = k_0 \left[\frac{\varepsilon_{\parallel} \varepsilon_{\perp}}{(\mathbf{R}(\hat{\varepsilon}^0)^{-1} \mathbf{R})} \right]^{1/2} (\hat{\varepsilon}^0)^{-1} \mathbf{R} \quad (1.6)$$

— векторы стационарной фазы обыкновенной и необыкновенной волн,

$$f_{(o)} = 1, \quad f_{(e)}^2 = \frac{(\mathbf{s}^{(e)} \hat{\varepsilon}^0 \mathbf{s}^{(e)}) (\mathbf{s}^{(e)} \hat{\varepsilon}^{02} \mathbf{s}^{(e)})}{\varepsilon_{\parallel} \varepsilon_{\perp}}, \quad (1.7)$$

где $\mathbf{s}^{(j)} = \mathbf{k}^{(j)}/k^{(j)}$ — единичный вектор, направленный вдоль волнового вектора. Флуктуации тензора диэлектрической проницаемости, прежде всего, обусловлены флуктуациями директора и имеют вид

$$\delta\varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) - \varepsilon_{\alpha\beta}^0 = \varepsilon_a(n_\alpha^0\delta n_\beta(\mathbf{r}) + n_\beta^0\delta n_\alpha(\mathbf{r})), \quad (1.8)$$

где $\varepsilon_{\alpha\beta}^0 = \varepsilon_\perp\delta_{\alpha\beta} + \varepsilon_a n_\alpha^0 n_\beta^0$.

В борновском приближении решение интегрального уравнения (1.4) описывает однократное рассеяние на флуктуациях диэлектрической проницаемости $\delta\hat{\varepsilon}(\mathbf{r})$. Интенсивность однократного рассеяния равна [37]

$$I_{(i)}^{(s)} = I_{(i)}^0 \frac{V_{sc}}{(4\pi)^2 R^2} \frac{1}{n^{(i)} \cos \delta^{(i)}} \sum_{j=o,e} \frac{n^{(j)}}{\cos^3 \delta^{(j)}} f_{(j)}^2 e_\alpha^{(s)} e_\beta^{(s)} B_{\alpha\beta\mu\nu}(\mathbf{q}) e_\mu^{(i)} e_\nu^{(i)}, \quad (1.9)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{e}^{(o)} &= \frac{\mathbf{n} \times \mathbf{s}^{(o)}}{\sin \theta_o}, \\ \mathbf{e}^{(e)} &= \frac{\mathbf{s}^{(e)} \varepsilon_\parallel \cos \theta_e - \mathbf{n} (\varepsilon_\parallel \cos^2 \theta_e + \varepsilon_\perp \sin^2 \theta_e)}{\sin \theta_e (\varepsilon_\parallel^2 \cos^2 \theta_e + \varepsilon_\perp^2 \sin^2 \theta_e)^{1/2}}, \end{aligned} \quad (1.10)$$

где $\mathbf{e}^{(o)}, \mathbf{e}^{(e)}$ — векторы поляризации, индексы $i, s = (o, e)$ обозначают тип падающей и рассеянной волны, V_{sc} — рассеивающий объем, R — расстояние от рассеивающего объема до точки наблюдения,

$$\cos \delta^{(o)} = 1, \quad \cos \delta^{(e)} = \frac{(\mathbf{e}^{(e)} \hat{\varepsilon}^0 \mathbf{e}^{(e)})^{1/2}}{n^{(e)}}, \quad (1.11)$$

$\mathbf{q} = \mathbf{k}^{(s)} - \mathbf{k}^{(i)}$, $\mathbf{k}^{(s)}$ и $\mathbf{k}^{(i)}$ — волновые векторы рассеянного и падающего света, $I_{(i)}^0$ — интенсивность падающего света, $B_{\alpha\beta\mu\nu}(\mathbf{q}) = k_0^4 \langle \delta\varepsilon_{\alpha\mu} \delta\varepsilon_{\nu\beta}^* \rangle(\mathbf{q})$ — корреляционная функция флуктуаций диэлектрической проницаемости. Она связана с флуктуациями директора соотношением

$$B_{\alpha\beta\gamma\delta}(\mathbf{q}) = k_0^4 \varepsilon_a^2 \sum_{l=1}^2 \langle |\delta n_l(\mathbf{q})|^2 \rangle (a_{l\alpha} a_{l\gamma} n_\beta^0 n_\delta^0 + a_{l\alpha} a_{l\delta} n_\beta^0 n_\gamma^0 + a_{l\beta} a_{l\delta} n_\alpha^0 n_\gamma^0 + a_{l\beta} a_{l\gamma} n_\alpha^0 n_\delta^0). \quad (1.12)$$

Здесь

$$\langle |\delta n_l(\mathbf{q})|^2 \rangle = \frac{k_B T}{K_{ll} q_\perp^2 + K_{33} q_\parallel^2 + \chi_a H^2}, \quad l = 1, 2, \quad (1.13)$$

$$\mathbf{a}_1(\mathbf{q}) = \frac{\mathbf{q}}{q}, \quad \mathbf{a}_2(\mathbf{q}) = \mathbf{n}^0 \times \mathbf{a}_1(\mathbf{q})$$

При отсутствии внешнего поля флуктуации директора расходятся как $1/q^2$ при $q \rightarrow 0$, а радиус корреляции флуктуаций неограниченно возрастает. Наличие внешнего поля делает эти флуктуации конечными, а роль радиуса корреляции в данном случае играет магнитная длина когерентности $\xi_H = \sqrt{K_{33}/(\chi_a H^2)}$.

Если подставить явное выражение для корреляционной функции в формулу для интенсивности однократного рассеяния (1.9), то нетрудно убедиться, что в силу ортогональности вектора поляризации обыкновенного луча и директора $\mathbf{n}^0$, нет рассеяния обыкновенного луча в обыкновенный, (o)→(o). Таким образом, возможны только рассеяния типа (o)→(e), (e)→(o) и (e)→(e). Обратим внимание, что рассеяние типа (o)→(e) и (e)→(o) происходит на векторе $\mathbf{q}$ с длиной $q \sim k_0|n^{(o)} - n^{(e)}|$, то есть, вектор рассеяния на всех углах остается конечным. Рассеяние типа (e)→(e) при малых углах имеет резкий пик, особенно в случаях малых полей, $H \rightarrow 0$. При этом рассеяние необыкновенного луча в необыкновенный происходит в основном вперед. Заметим, однако, что поляризационные множители также влияют на индикатрису однократного рассеяния. Например, рассеяние типа (e)→(e) строго вперед отсутствует при $\mathbf{k}^{(i)} = \mathbf{k}^{(s)}$, направленных перпендикулярно директору.

В пренебрежении собственным поглощением коэффициент экстинкции определяется потерями света на рассеяние и имеет вид

$$\tau_{(j)}(\mathbf{k}^{(j)}) = \frac{1}{(4\pi)^2} \frac{e_\alpha^{(j)} e_\beta^{(j)}}{n^{(j)} \cos^2 \delta^{(j)}} \sum_{l=o,e} \int d\Omega_{\mathbf{q}}^{(l)} \frac{n^{(l)} e_\nu^{(l)} e_\mu^{(l)}}{\cos^2 \delta^{(l)}} B_{\alpha\nu\beta\mu}(\mathbf{k}^{(l)} - \mathbf{q}), \quad (1.14)$$

где $\int d\Omega_{\mathbf{q}}^{(l)}$ означает интегрирование по поверхности $q = k^{(l)}(\mathbf{q})$. Обратная коэффициенту экстинкции величина $l_{(j)} = \tau_{(j)}^{-1}$ имеет смысл средней длины пробега света до рассеяния. Выражение (1.14) может быть получено при помощи оптической теоремы [37]. При этом важно отметить, что коэффициент экстинкции отличается от полного сечения рассеяния $\sigma_{(i)}$:

$$\sigma_{(i)} = \tau_{(i)} \cos \delta^{(i)}. \quad (1.15)$$

Такое отличие связано с тем, что для необыкновенного луча направление вектора Пойнтинга и направление волнового вектора $\mathbf{k}^{(i)}$ не совпадают.

Наличие флуктуаций диэлектрической проницаемости приводит к тому, что при вычислении среднего поля и средней интенсивности рассеяния необходимо использовать функцию Грина, усредненную по неоднородностям среды. Такая усредненная функция Грина в координатном представлении имеет вид [2]

$$\langle \hat{G}^{R/A} \rangle(\mathbf{R}) = \frac{k_0^2}{4\pi R} \sum_{j=o,e} n^{(j)} f_{(j)} \frac{\mathbf{e}^{(j)} \otimes \mathbf{e}^{(j)}}{(\mathbf{e}^{(j)} \hat{\varepsilon}^0 \mathbf{e}^{(j)})} \exp \left(\pm i \mathbf{k}_{st}^{(j)} \cdot \mathbf{R} - \frac{R}{2l_{(j)}(\mathbf{k}_{st}^{(j)}/k_{st}^{(j)})} \right). \quad (1.16)$$

где индексы R и A обозначают опережающую и запаздывающую функции Грина, $\hat{G}^A = [\hat{G}^R]^*$.

1.2. Многократное рассеяние в НЖК

Наблюдаемыми величинами являются моменты поля $\mathbf{E}$. Среднее поле $\langle E_\alpha \rangle(\mathbf{x})$ определяется средней функцией Грина

$$\langle E_\alpha \rangle(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{x}_1 \langle G_{\alpha\beta}^R \rangle(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) F_\beta(\mathbf{x}_1),$$

где $\mathbf{F}(\mathbf{x}_1)$ — источник. В этом разделе и далее мы будем обозначать пространственные координаты буквами $\mathbf{x}$ и $\mathbf{y}$.

Свойства рассеянного света определяются функцией когерентности:

$$\langle E_\alpha(\mathbf{x}_1) E_\beta^*(\mathbf{x}_2) \rangle.$$

Нас будет интересовать автокорреляционная функция

$$I_{\alpha\beta}(\mathbf{x}) = \langle E_\alpha(\mathbf{x}) E_\beta^*(\mathbf{x}) \rangle = \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \langle G_{\alpha\alpha'}^R(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1) G_{\beta'\beta}^A(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}) \rangle F_{\alpha'}(\mathbf{x}_1) F_{\beta'}^*(\mathbf{x}_2), \quad (1.17)$$

через которую выражается интенсивность рассеянного света. Заметим, что полная функция Грина $\hat{G}^{R/A}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1)$ зависит от двух пространственных аргументов, так как во флуктуирующей среде отсутствует трансляционная симметрия.

Однако в среднем среда является однородной, и после усреднения функция $\langle \hat{G}^{R/A} \rangle(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1)$ в безграничной среде будет зависеть лишь от разности пространственных аргументов.

Поскольку в НЖК флуктуации директора не малы, при распространении света в достаточно толстых образцах ЖК формируется режим многократного рассеяния. Для описания интенсивности многократного рассеяния удобно использовать уравнение Бете–Солпитера (см. напр. [12]), которое имеет вид:

$$\begin{aligned} \Gamma_{\alpha\beta\alpha'\beta'}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_4, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_4) &= \Gamma_{\alpha\beta\alpha'\beta'}^0(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_4, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_4) + \\ &+ \int d\mathbf{R}_2 d\mathbf{R}_3 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \Gamma_{\alpha\beta\gamma\delta}^0(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) U_{\gamma\delta\mu\nu}(\mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \Gamma_{\mu\nu\alpha'\beta'}(\mathbf{R}_3, \mathbf{R}_4, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4), \end{aligned} \quad (1.18)$$

где

$$\Gamma_{\alpha\beta\alpha'\beta'}^0(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Gamma_{\alpha\beta\alpha'\beta'}^0(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \langle G_{\alpha\alpha'}^R(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \rangle \langle G_{\beta'\beta}^A(\mathbf{y}_2 - \mathbf{y}_1) \rangle, \quad (1.19)$$

$$\Gamma_{\alpha\beta\alpha'\beta'}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle G_{\alpha\alpha'}^R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) G_{\beta'\beta}^A(\mathbf{y}_2, \mathbf{y}_1) \rangle. \quad (1.20)$$

Функция $\hat{\Gamma}$ учитывает пространственные корреляции функции Грина в неоднородной среде. Функция $\hat{U}$ содержит неприводимые диаграммы оператора интенсивности. Здесь вместо координат $\mathbf{x}_n, \mathbf{y}_n, n = 1, \dots, 4$ введены переменные

$$\mathbf{R}_n = \frac{\mathbf{x}_n + \mathbf{y}_n}{2}, \quad n = 1, \dots, 4,$$

описывающие координаты “центров масс”, и переменные

$$\mathbf{r}_n = \mathbf{x}_n - \mathbf{y}_n, \quad n = 1, \dots, 4,$$

характеризующие пространственную корреляцию полей в сильно неоднородной среде.

В приближении слабого рассеяния $l_{(j)} \gg \lambda$, где λ — длина световой волны, $j = 1, 2$, основной вклад в интенсивность рассеяния вносит выражение

$$U_{\gamma\delta\mu\nu}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = B_{\gamma\delta\mu\nu}(\mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (1.21)$$

Такой вид $U_{\gamma\delta\mu\nu}$ позволяет решать уравнение Бете-Солпитера методом итераций. Решение имеет вид бесконечного ряда. Члены этого ряда физически соответствуют вкладам по кратностям рассеяния. Обычно в этом формальном решении выделяют сумму лестничных диаграмм $\hat{L}$, и тогда оно записывается в виде

$$\begin{aligned} \Gamma_{ikjl}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_4, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_4) &= \Gamma_{ikjl}^0(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_4, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_4) + \\ &+ \int d\mathbf{R}_2 d\mathbf{R}_3 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \Gamma_{ikpq}^0(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) L_{pqmn}(\mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \Gamma_{mnjl}^0(\mathbf{R}_3, \mathbf{R}_4, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4), \end{aligned} \quad (1.22)$$

где

$$\Gamma_{ikjl}^0(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle G_{ij}^R \rangle(\mathbf{R}_1 + \frac{\mathbf{r}_1}{2}, \mathbf{R}_2 + \frac{\mathbf{r}_2}{2}) \langle G_{lk}^A \rangle(\mathbf{R}_3 + \frac{\mathbf{r}_3}{2}, \mathbf{R}_4 + \frac{\mathbf{r}_4}{2}), \quad (1.23)$$

$$\Gamma_{ikjl}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle G_{ij}^R(\mathbf{R}_1 + \frac{\mathbf{r}_1}{2}, \mathbf{R}_2 + \frac{\mathbf{r}_2}{2}) G_{lk}^A(\mathbf{R}_3 + \frac{\mathbf{r}_3}{2}, \mathbf{R}_4 + \frac{\mathbf{r}_4}{2}) \rangle, \quad (1.24)$$

Функция $\hat{\Gamma}$ учитывает пространственные корреляции функции Грина в неоднородной среде. Сумму лестничных диаграмм удобно представить в виде

$$L_{jkl} = \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} + \dots, \quad (1.25)$$

где волнистые линии обозначают корреляционные функции $\hat{B}$, параллельные линии — произведения средних функций Грина $\hat{\Gamma}_0$, в каждой вершине предполагается интегрирование по пространственной переменной.

Уравнение Бете–Солпитера обычно удобно анализировать переходя к пространственному спектру Фурье. При этом учитывается, что после статистического усреднения характеристики системы становятся пространственно однородными, то есть, не зависят от абсолютных значений координат, а зависят только от их разностей. Поэтому функция $\hat{\Gamma}$ в (1.24) реально является функцией не четырех, а трех переменных $\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$. При этом удобно выполнить преобразование Фурье по всем трем переменным

$$\begin{aligned} \hat{\Gamma}(\mathbf{K}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) &= \int d(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \exp[-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2) - i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2] \times \\ &\times \hat{\Gamma}(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \end{aligned} \quad (1.26)$$

В представлении Фурье уравнение Бете–Солпитера имеет вид

$$\begin{aligned} \Gamma_{ikjl}(\mathbf{K}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = & \Gamma_{ikmn}^0(\mathbf{K}, \mathbf{k}_1) I_{mnjl}^{(4)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) + \\ & + \Gamma_{ikpq}^0(\mathbf{K}, \mathbf{k}_1) \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} B_{pqmn}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}) \Gamma_{mnjl}(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{k}_2), \end{aligned} \quad (1.27)$$

а соответствующее итерационное решение

$$\begin{aligned} \Gamma_{ikjl}(\mathbf{K}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = & \Gamma_{ikmn}^0(\mathbf{K}, \mathbf{k}_1) I_{mnjl}^{(4)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) + \\ & + \Gamma_{ikpq}^0(\mathbf{K}, \mathbf{k}_1) \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} L_{pqmn}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}) \Gamma_{mnjl}^0(\mathbf{K}, \mathbf{k}, \mathbf{k}_2), \end{aligned} \quad (1.28)$$

где

$$\Gamma_{ikpq}^0(\mathbf{K}, \mathbf{k}) = \langle G_{ip}^R \rangle(\mathbf{k} + \mathbf{K}/2) \langle G_{qk}^A \rangle(\mathbf{k} - \mathbf{K}/2), \quad (1.29)$$

$$I_{mnjl}^{(4)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \frac{\delta_{mj} \delta_{nl} + \delta_{ml} \delta_{nj}}{2}. \quad (1.30)$$

Описание интенсивности многократного рассеяния света сводится к решению уравнения Бете–Солпитера. Для построения аналитического решения развиты два подхода. Один способ состоит в построении приближенного решения интегрального уравнения (1.27). Этот подход применялся в том числе и для НЖК [2]. Другой подход [29] основан на суммировании бесконечного ряда лестничных диаграмм (1.25). При этом как правило используется т.н. диффузионное приближение. Подробнее о диффузии света см. в главе 2.

Решение уравнения Бете–Солпитера в диффузионном приближении позволяет описать многократное рассеяние света во всех направлениях, кроме узкой окрестности рассеяния строго назад. В этой области становится существенным эффект когерентного обратного рассеяния, являющийся оптическим аналогом Андерсоновской слабой локализации электронов. Физически он заключается в том, что поля, рассеянные на тех же неоднородностях, но в обратном порядке, являются когерентными. Это приводит к дополнительному вкладу и появлению узкого пика в угловой зависимости интенсивности рассеяния.

Для описания этого пика интенсивности требуется учитывать последовательности рассеяний, происходящих в обратном порядке. Такие последователь-

ности описываются циклическими диаграммами, $\hat{C}$,

$$C_{\gamma\delta\mu\nu}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \tilde{L}_{\gamma\nu\mu\delta} \left(\frac{\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2}{2} + \frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{4}, \frac{\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2}{2} - \frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{4}, \right. \\ \left. \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2 + \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}, \mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1 + \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \right). \quad (1.31)$$

Здесь введено обозначение $\tilde{L}_{\gamma\nu\mu\delta}$ для суммы лестничных диаграмм (2.19), начинающейся с двукратного рассеяния

Сумма циклических диаграмм может быть представлена в виде (см. напр. [38])

$$C_{\gamma\delta\mu\nu}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \text{diag}_1 + \text{diag}_2 + \dots \quad (1.32)$$

Вклад циклических диаграмм нетрудно получить из лестничного, выполнив разворот нижней линии диаграмм на π :

$$\begin{array}{ccc} \begin{array}{c} \mathbf{x}_1; \gamma \quad \mathbf{x}_2; \mu \\ \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \mathbf{y}_1; \delta \quad \mathbf{y}_2; \nu \end{array} & \leftarrow & \begin{array}{c} \mathbf{x}_1; \gamma \quad \mathbf{x}_2; \mu \\ \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \mathbf{y}_2; \nu \quad \mathbf{y}_1; \delta \end{array}, \\ \\ \begin{array}{c} \mathbf{x}_1; \gamma \quad \mathbf{x}_3 \quad \mathbf{x}_2; \mu \\ \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \mathbf{y}_1; \delta \quad \mathbf{y}_3 \quad \mathbf{y}_2; \nu \end{array} & \leftarrow & \begin{array}{c} \mathbf{x}_1; \gamma \quad \mathbf{x}_3 \quad \mathbf{x}_2; \mu \\ \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \mathbf{y}_2; \nu \quad \mathbf{y}_3 \quad \mathbf{y}_1; \delta \end{array}. \end{array}$$

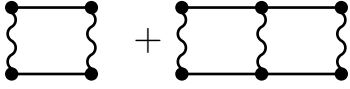
Выполняя эту процедуру для каждой диаграммы, можно получить общее соотношение для всего ряда. Подчеркнем, что такая связь лестничных и циклических диаграмм начинается с диаграммы, описывающей двукратное рассеяние. Имеем

$$C_{\gamma\delta\mu\nu}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \\ = \tilde{L}_{\gamma\nu\mu\delta} \left(\frac{\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2}{2} + \frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{4}, \frac{\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_2}{2} - \frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{4}, \right. \\ \left. \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2 + \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}, \mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1 + \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \right) \quad (1.33)$$

в координатном представлении и

$$C_{\gamma\delta\mu\nu}(\mathbf{K}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \tilde{L}_{\gamma\nu\mu\delta} \left(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \frac{\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 + \mathbf{K}}{2}, \frac{\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1 + \mathbf{K}}{2} \right) \quad (1.34)$$

после преобразования Фурье. Здесь введено обозначение $\tilde{L}_{\gamma\nu\mu\delta}$ для суммы лестничных диаграмм, начинающейся с двукратного рассеяния

$$\tilde{L}_{\gamma\nu\mu\delta} = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \dots, \quad (1.35)$$


Подробнее когерентное обратное рассеяние рассматривается в главе 3.

1.3. Моделирование многократного рассеяния

Альтернативой аналитическому подходу к решению уравнения Бете-Солпитера является моделирование многократного рассеяния методом Монте-Карло [39–43]. Этот подход основан на представлении о переносе интенсивности излучения в случайной среде. При этом фазовые соотношения между полями, образующими интенсивность, выходят за рамки моделирования рассеяния и должны быть учтены отдельно. Описанная далее техника моделирования не является специфичной для рассеяния света в НЖК и может применяться в том числе и для скалярного поля.

Перенос интенсивности моделируется, как случайное блуждание “фотонов” в среде. Необходимо подчеркнуть, что в этом контексте “фотоны” являются объектами моделирования, а не физическими частицами. Далее слово “фотоны”, как общепринятый в такого рода моделировании термин, мы будем употреблять без кавычек. Выбор названия для частиц исторически обусловлен тем, что описываемая техника изначально была разработана для моделирования многократного рассеяния света.

Идея моделирования тесно связана с итерационным решением уравнения Бете–Солпитера в виде ряда по кратностям рассеяния. Сопоставим суммирование лестничного ряда и процедуру моделирования.

Выражение (1.17) с точностью до размерного множителя равно интенсивности рассеянного излучения некоторого источника света. В численном эксперименте обычно рассматривают точечный источник, который моделируется путем

помещения фотонов с некоторым, обычно одинаковым, волновым вектором в начало координат. При моделировании когерентного обратного рассеяния, когда на границу рассеивающей среды падает плоская волна, результат моделирования рассеяния света от точечного источника обобщают, пользуясь при этом трансляционной инвариантностью среды.

Помещенные в рассеивающую среду фотоны последовательно перемещаются, претерпевая акты однократного рассеяния. При этом фотоны переносят “энергию”, и относительную интенсивность излучения в интересующей нас точке можно определить, как отношение числа фотонов, попавших в окрестность этой точки к полному числу фотонов. Число рассеяний, которые претерпели попавшие в окрестность детектора фотоны, для разных фотонов может быть разным. При этом суммирование фотонов, рассеявшихся n раз, соответствует вкладу в интенсивность от диаграммы с n ступенями в теоретическом описании. Для того, чтобы от суммирования фотонов перейти к интегрированию в духе членов ряда (1.25), формально число фотонов нужно устремить к бесконечности. Для моделирования это означает, что число фотонов должно быть достаточно большим.

Акт однократного рассеяния для каждого фотона моделируется следующим образом. Фотон, имеющий до рассеяния волновой вектор $\mathbf{k}^{(i)}$ перемещается на некоторое случайное расстояние s вдоль направления $\mathbf{k}^{(i)}$. Величина s обычно имеет экспоненциальное распределение:

$$f(s) = \frac{1}{l} \exp(-s/l), \quad (1.36)$$

где l – средняя длина пробега фотона. В среде без собственного поглощения l совпадает с длиной экстинкции. В поглощающей среде справедливо

$$\frac{1}{l} = \frac{1}{l_s} + \frac{1}{l_a}, \quad (1.37)$$

где l_a – длина затухания световой волны. Выражение (1.36) имеет вид закона Бугера-Ламберта-Бера и фактически означает постоянство сечения рассеяния

вдоль направления волнового вектора $\mathbf{k}_i$ (направления распространения фотона). Заметим, что это выражение остается справедливым и для таких сред, в которых $l = l(\mathbf{k}_i)$. Вероятность того, что длина свободного пробега фотона больше s равна

$$\xi = \int_s^{\infty} f(s') ds', \quad (1.38)$$

где ξ — случайное число с равномерным распределением в интервале $(0, 1]$. Из формул (1.36), (1.38) можно получить явное выражение для s

$$s = -l \ln \xi. \quad (1.39)$$

Выражение (1.39) позволяет получать длины свободных пробегов фотонов с заданной плотностью вероятности (1.36).

Для разыгрывания волнового вектора фотона после рассеяния используют зависящую от конкретного типа рассеивающей среды фазовую функцию (индикатрису) однократного рассеяния. Для многих задач, таких, например, как распространение света в биологических тканях, индикатриса изучена только экспериментально. Поэтому при моделировании однократного рассеяния используется какая-либо модельная индикатриса, например — фазовая функция Хеньи-Гринстайна [44] или ее модификации [45]. Индикатриса Хеньи-Гринстайна имеет вид:

$$I(\theta, \phi) = \frac{1}{4\pi} \frac{1 - g^2}{(1 + g^2 - 2g \cos \theta)^{3/2}}, \quad (1.40)$$

где θ — угол рассеяния, g — средний косинус угла рассеяния. Такой простой вид индикатрисы позволяет на каждом акте рассеяния разыгрывать направление распространения фотона аналитически с помощью метода обратных функций [46]. Численно этот способ является очень эффективным и позволяет моделировать большое количество актов рассеяния. Такой упрощенный способ моделирования однократного рассеяния возможен не только на процессорах общего назначения, но и на видеокартах (GPU) [47–50], что позволяет одновременно моделировать распространение большого числа фотонов и, таким образом, быст-

рее получать приемлемую статистику. Моделирование с помощью GPU часто применяют в задачах медицинской физики.

Моделирование не может учесть все члены бесконечного ряда (1.25). В поглощающей среде эта проблема решается введением весов для фотонов. Фотоны помещаются в среду с весом $w_0 = 1$. На каждом акте рассеяния вес фотона уменьшается по правилу

$$w_{i+1} = w_i \exp(-s/l_a), \quad (1.41)$$

что соответствует потере интенсивности за счет поглощения. Распространение фотона прекращается, когда его вес становится меньше некоторого порогового значения. Интенсивность при этом рассчитывается как сумма весов фотонов. В среде без собственного поглощения моделирование обычно ограничивают некоторым экспериментально подобранным максимальным числом кратностей рассеяния. Такая регуляризация обосновывается наличием пренебрежимо малого поглощения и ограниченностью размеров рассеивающей среды. В задачах с границами условием завершения распространения фотона также может быть выход за пределы рассеивающего объема.

Таким образом, стандартный алгоритм моделирования многократного рассеяния имеет следующий вид:

- Фотон с заданным волновым вектором $\mathbf{k}^{(i)} = \mathbf{k}_0^{(i)}$ помещается в рассеивающую среду. Ему приписывается начальный вес w_0 .
- До тех пор, пока фотон находится внутри рассеивающего объема, его вес больше минимального, а число рассеяний, которые он претерпел, меньше максимального, фотон подвергается однократным рассеяниям:
 - Фотон перемещается на случайное расстояние s , выбранное согласно плотности вероятности (1.36).
 - В случае попадания фотона в детектор его вес добавляется к суммарной интенсивности излучения.

- Вес фотона уменьшается согласно правилу (1.41).
- Согласно индикатрисе однократного рассеяния $I(\mathbf{k}^{(i)}, \mathbf{k}^{(s)})$ выбирается волновой вектор фотона после рассеяния $\mathbf{k}^{(s)}$.
- После рассеяния $\mathbf{k}^{(i)}$ полагается равным $\mathbf{k}^{(s)}$.
- Процедура повторяется для следующего фотона.

Фактически, описанная процедура моделирования соответствует вычислению многократных интегралов, являющихся членами ряда (1.25), методом Монте-Карло.

1.4. Моделирования рассеяния в анизотропных средах

Для многих задач рассеяния индикатриса может быть получена аналитически. Такие индикатрисы известны в задачах океанологии [51–55] и физики атмосферы [56–58], в медицинской диагностике [39, 42, 59–61], при исследовании суспензий [62–64], в физике жидких кристаллов и т.д. При этом форма индикатрисы может быть достаточно сложной, а рассеивающая среда как изотропной, так и анизотропной. В этом случае при моделировании многократного рассеяния возникают существенные трудности. Они обусловлены тем, что метод обратных функций для разыгрывания направления по такой индикатрисе приводит к вычислению функций, которые не могут быть рассчитаны аналитически. Поскольку такую процедуру необходимо проводить на каждом акте рассеяния, моделирование становится неэффективным, а получение большого набора статистических данных – чрезвычайно трудоемким.

Одним из подходов к решению такой задачи является использование вместо истинной индикатрисы некоторой упрощенной модели. Эта модель выбирается так, чтобы для нее можно было использовать метод обратных функций. Однако, эта процедура не всегда возможна, поскольку при использовании упрощенной модели не удастся учесть все особенности рассматриваемой физической

задачи.

Другой подход состоит в том, что истинная индикатриса предварительно аппроксимируется с заданной точностью и в дальнейшем на каждом акте рассеяния используется построенная аппроксимация.

Описанная далее техника является обобщением традиционного подхода к моделированию рассеяния, изложенного в разделе 1.3, на случай анизотропных сред. Процедура построения аппроксимации предложена автором диссертации и может использоваться не только для описания рассеяния света в НЖК, но и для любых других задач с достаточно гладкой индикатрисой однократного рассеяния.

1.4.1. Аппроксимация индикатрисы и выбор направления

В сферических координатах индикатриса однократного рассеяния $I(\theta, \phi)$ является функцией полярного и азимутального углов $\theta \in [0, \pi]$ и $\phi \in [0, 2\pi]$. В дальнейшем мы будем считать, что индикатриса $I(\theta, \phi)$ нормирована на единицу:

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} I(\theta, \phi) \sin \theta d\theta = 1 \quad (1.42)$$

Аппроксимация индикатрисы используется для разыгрывания направления на каждом акте рассеяния. Она должна быть достаточно простой, чтобы направление по ней можно было разыграть быстро. Кроме того, мы хотим, чтобы наш подход работал для разных типов индикатрис. То есть, аппроксимация должна хорошо приближать любые достаточно гладкие функции.

Известны многочисленные способы [65] аппроксимации и интерполяции, как правило основанные на разложении приближаемой функции по некоторому базису. Такие способы не очень хорошо подходят для моделирования рассеяния. Это связано с тем, что при использовании сложной интерполяции разыгрывание направления при помощи метода обратных функций приведет к численному

решению нелинейных алгебраических уравнений, что делает процедуру моделирования однократного рассеяния медленной.

В качестве аппроксимации мы использовали набор билинейных интерполяций индикатрисы, заданных на некоторой специально выбранной сетке. Сетка покрывает всю область определения индикатрисы.

Пусть $\{K_i\}$ – массив узлов сетки. Каждый узел задается значениями координат ϕ и θ , а также значением аппроксимируемой индикатрисы $I(\phi, \theta)$. Пусть $\{S_j\}$ – массив ячеек сетки. Каждая ячейка этой сетки представляет собой прямоугольник на плоскости (ϕ, θ) . Ячейка задается набором индексов $\{i_1, i_2, i_3, i_4\}$, которые соответствуют узлам сетки, находящимся в вершинах прямоугольника. Кроме того, для каждой ячейки будем хранить величину

$$w_j = \sum_{k=0}^j \left(\int_{S_k} J_k d\phi d\theta \right), \quad (1.43)$$

где J_k – билинейная интерполяция подынтегрального выражения в (1.42) на k -й ячейке. Для каждой ячейки функция $J(\phi, \theta)$ представляет собой поверхность второго порядка

$$\begin{aligned} J(\phi, \theta) &= \frac{I(\phi_0, \theta_0) \sin \theta_0}{(\phi_1 - \phi_0)(\theta_1 - \theta_0)} (\phi_1 - \phi)(\theta_1 - \theta) + \frac{I(\phi_1, \theta_0) \sin \theta_0}{(\phi_1 - \phi_0)(\theta_1 - \theta_0)} (\phi - \phi_0)(\theta_1 - \theta) + \\ &+ \frac{I(\phi_0, \theta_1) \sin \theta_1}{(\phi_1 - \phi_0)(\theta_1 - \theta_0)} (\phi_1 - \phi)(\theta - \theta_0) + \frac{I(\phi_1, \theta_1) \sin \theta_1}{(\phi_1 - \phi_0)(\theta_1 - \theta_0)} (\phi - \phi_0)(\theta - \theta_0) = \\ &= A\phi\theta + B\phi + C\theta + D \end{aligned} \quad (1.44)$$

Здесь координаты узлов ячейки имеют вид $(\phi_0, \theta_0), (\phi_0, \theta_1), (\phi_1, \theta_0), (\phi_1, \theta_1)$. Поскольку индикатриса I имеет смысл плотности вероятности, набор чисел $\{w_j\}$ возрастает с ростом j . Если мы учтем все ячейки, то величина $\{w_j\}$ примет максимальное значение w_{max} .

Опишем, как разыгрывается направление распространения фотонов для такой аппроксимации индикатрисы. Во-первых, нужно выбрать ячейку. Для этого разыгрывается случайное число $\xi_s \in [0, w_{max}]$ и выбирается такая ячейка

S_j , для которой $w_{j-1} < \xi_s \leq w_j$. Интервал разыгрывания числа ξ_s обусловлен тем, что, в отличие от индикатрисы $I(\phi, \theta)$, наша аппроксимация не нормирована на 1. После того, как ячейка найдена, по ее узлам восстанавливается вид соответствующей билинейной интерполяции J_j , по которой методом обратных функций разыгрываются углы ϕ и θ внутри ячейки.

Метод обратных функций для билинейной интерполяции сводится к разыгрыванию еще двух случайных чисел ξ_θ и ξ_ϕ и решению двух алгебраических уравнений относительно $\tilde{\theta}$ и $\tilde{\phi}$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2} A(\phi_1^2 - \phi_0^2) + C(\phi_1 - \phi_0) \right] (\tilde{\theta}^2 - \theta_0^2) + \left[\frac{1}{2} B(\phi_1^2 - \phi_0^2) + D(\phi_1 - \phi_0) \right] (\tilde{\theta} - \theta_0) &= \xi_\theta \\ \frac{1}{2} (A\tilde{\theta} + B)(\tilde{\phi}^2 - \phi_0^2) + (C\tilde{\theta} + D)(\tilde{\phi} - \phi_0) &= \xi_\phi, \end{aligned} \quad (1.45)$$

где

$$\xi_\theta \in [0, \int_{\theta_0}^{\theta_1} \int_{\phi_0}^{\phi_1} J(\theta, \phi) d\theta d\phi] \quad (1.46)$$

и

$$\xi_\phi \in [0, \int_{\phi_0}^{\phi_1} J(\tilde{\theta}, \phi) d\phi]. \quad (1.47)$$

Корни уравнений (1.45) выбираются так, чтобы $\theta_0 < \tilde{\theta} \leq \theta_1, \phi_0 < \tilde{\phi} \leq \phi_1$. Более сложный вид интерполяции индикатрисы на ячейке мог бы привести к необходимости численно решать более сложные уравнения, а это сделало бы процедуру разыгрывания направления медленной и неэффективной.

1.4.2. Построение сетки

Наша цель заключается в том, чтобы построить оптимальное разбиение прямоугольника (ϕ, θ) на ячейки. Это разбиение должно обеспечивать наперед заданную точность описания многократного рассеяния. Для этого требуется, чтобы аппроксимация индикатрисы в каждой ячейке сетки мало отличалась от истинного значения индикатрисы. Для оценки точности аппроксимации мы

будем использовать L_1 -норму. Аппроксимация должна приближать индикатрису с заданной точностью $\|I(\phi, \theta) \sin \theta - J(\phi, \theta)\| < \epsilon_1 \|I(\phi, \theta) \sin \theta\|$. Для описанной выше аппроксимации это может быть реализовано с помощью выбора узлов сетки $\{K_i\}$. Для этого мы используем двоичное разбиение пространства (binary space partitioning) и структуру данных, похожую на дерево квадрантов (quadtree). Такой способ представления поверхностей изначально был разработан для применения в компьютерной графике [66].

Используемый нами алгоритм разбиения области определения индикатрисы на ячейки использует идею, применяющуюся при адаптивном численном интегрировании, и состоит в следующем. Разбиение начинается с ячейки, занимающей всю область определения индикатрисы. Пусть на некотором шаге построения разбиения у нас есть ячейка с узлами в точках (ϕ_0, θ_0) , (ϕ_0, θ_1) , (ϕ_1, θ_0) , (ϕ_1, θ_1) . Наша задача состоит в том, чтобы оценить, устраивает ли нас имеющееся разбиение, и если нет – то “улучшить” его и продолжить построение разбиения. Нам выгодно иметь минимально устраивающее нас число ячеек разбиения, поэтому, в отличие от традиционного построения дерева квадрантов, мы будем делить ячейку не на 4, а на 2 части: или по ϕ , или по θ . Введем обозначения

$$\phi_m = \frac{\phi_0 + \phi_1}{2} \quad (1.48)$$

$$\theta_m = \frac{\theta_0 + \theta_1}{2} \quad (1.49)$$

Пусть J^0 – текущая аппроксимация на рассматриваемой ячейке (билинейная интерполяция (1.44)). Поделим ячейку прямыми $\phi = \phi_m$ и $\theta = \theta_m$. Пусть J^4 – аппроксимация, состоящая из четырех билинейных интерполяций, построенных на четырех получившихся прямоугольниках, J^ϕ и J^θ – аппроксимации, состоящие из двух билинейных интерполяций, построенных на двух прямоугольниках, полученных разбиением исходной ячейки прямой $\phi = \phi_m$ или $\theta = \theta_m$ соответственно. Мы будем использовать J^4 в качестве более точного приближения для индикатрисы. Если $\|J^4 - J^0\| \leq \epsilon_1 \|J^4\|$, то для рассматриваемой ячейки би-

линейная интерполяция J^0 уже является достаточно хорошим приближением и дальнейшее разбиение не требуется. Если $\|J^4 - J^0\| > \epsilon_1 \|J^4\|$, то мы разобьем ячейку на две части. Для случая $\|J^4 - J^\phi\| < \|J^4 - J^\theta\|$ ячейка будет разбита по ϕ , в противном случае – по θ . После этого описанная выше процедура рекурсивно проводится с каждой из двух образовавшихся частей ячейки. В результате область определения индикатрисы будет адаптивно разбита на ячейки, для каждой из которых билинейная интерполяция, построенная на узлах ячейки, приближает на ячейке индикатрису с точностью не хуже заданной. А значит и вся аппроксимация удовлетворяет заданному критерию точности.

1.4.3. Каналы рассеяния

Однократное рассеяние может иметь несколько каналов. Например, такая ситуация возникает, если в среде может распространяться несколько типов волн. При моделировании считается, что между актами рассеяния фотон находится в одном из каналов рассеяния. В результате однократного рассеяния тип волны фотона может измениться случайным образом согласно вероятностям попадания в тот или иной канал. Эти вероятности определяются как отношение интенсивности рассеяния в данный канал к полной интенсивности рассеяния

$$w_{ik} = \frac{\int I_{ik} \sin \theta d\theta d\phi}{\sum_l \int I_{il} \sin \theta d\theta d\phi}, \quad (1.50)$$

где I_{ik} - интенсивность рассеяния из канала i в канал k , $i, k = 1, 2, \dots$. Для выбора канала на каждом акте рассеяния необходимо разыгрывать случайное число $\xi_w \in [0, 1]$ и находить номер канала k такой, что

$$\sum_{l=1}^{k-1} w_{il} < \xi_w \leq \sum_{l=1}^k w_{il} \quad (1.51)$$

1.4.4. Одноосная среда

Описанная выше техника хорошо работает для изотропной среды. При моделировании рассеяния в анизотропных средах возникают дополнительные

трудности.

В случае одноосной среды одна из проблем состоит в том, что индикатриса однократного рассеяния сильно зависит от угла между направлением распространения частицы до рассеяния и выделенным направлением среды $\mathbf{n}$ (директором). В нашем моделировании мы решили эту проблему следующим образом. Пусть $\theta^i \in [0, \pi]$ — угол между направлением до рассеяния и директором. (Для среды, в которой направления $\mathbf{n}$ и $-\mathbf{n}$ эквивалентны, можно ограничиться интервалом $[0, \pi/2]$). Будем считать, что индикатриса плавно меняется с изменением θ^i . Разобьем диапазон углов θ^i на интервалы, такие, что на каждом интервале индикатриса меняется не более, чем в ϵ_2 раз. Для каждого такого интервала будем пользоваться описанной выше аппроксимацией, построенной для величины $I(\phi, \theta|\theta_m^i) \sin \theta$, где θ_m^i принадлежит построенному интервалу. Удобно в качестве θ_m^i использовать середину интервала. Для каждого интервала

$$||I(\phi, \theta|\theta^i) \sin \theta - J(\phi, \theta|\theta_m^i) \sin \theta|| \leq \epsilon_1 ||I(\phi, \theta|\theta_m^i) \sin \theta|| + \epsilon_2 ||I(\phi, \theta|\theta^i) \sin \theta||. \quad (1.52)$$

Для разбиения диапазона θ^i на интервалы можно использовать дихотомию, на каждом шаге сравнивая индикатрисы на краях текущего интервала и, если они различаются больше, чем в ϵ_2 раз, разбивая интервал пополам. Этот принцип аналогичен тому, который мы использовали при построении разбиения в предыдущей части.

Разбиения, построенные для каждого из полученных интервалов, могут занимать значительный объем оперативной памяти. В этом случае выгодно минимизировать число интервалов. Для этого, например, при каждом разбиении интервала пополам можно интересоваться только его “левой” половиной. Пусть исходный интервал — $[\theta_l^i, \theta_r^i]$. Последовательно применяя дихотомию, получим интервал $[\theta_l^i, \theta_1^i]$, на котором индикатриса меняется не более чем в ϵ_2 раз. После этого проведем эту же процедуру для интервала $[\theta_1^i, \theta_r^i]$, затем, получив θ_2^i , — для $[\theta_2^i, \theta_r^i]$ и т.д. Такой подход позволяет уменьшить число полученных интервалов, но приводит к необходимости вычислять L_1 -норму значительно большее число

раз. Уменьшить время расчетов можно предварительно разбив интервал $[0, \pi/2]$ на равные интервалы, число которых равно количеству вычислительных ядер (нитей процессора) и параллельно разбивая каждый из этих интервалов.

Для одноосной среды вероятности w_{ik} рассеяния в разные каналы могут зависеть от угла θ_i , и это необходимо принимать во внимание при расчетах. То же самое относится и к длинам пробега.

1.5. Моделирование рассеяния в НЖК

В НЖК одноосность среды приводит к тому, что в процессе рассеяния возникает два типа волн, обыкновенные и необыкновенные. Значение волнового вектора необыкновенной волны зависит от угла между направлением распространения волны и вектором директора. Индикатриса однократного рассеяния этой волны зависит от углов между направлением оптической оси и направлениями волновых векторов падающей и рассеянной волн. Наконец, длина свободного пробега фотона $l_{(j)}$, связанная с коэффициентом экстинкции, зависит от направления распространения волны и от ее типа. Угловая зависимость коэффициента экстинкции (1.14) определяется как оптической анизотропией ЖК, так и значениями модулей ориентационной упругости. Эта зависимость не исчезает даже в пренебрежении различием между модулями Франка [5, 30]. На рис. 1.1 для иллюстрации показаны угловые зависимости экстинкции при различных соотношениях между модулями Франка при одной и той же оптической анизотропии. Для того, чтобы учесть эти особенности, была использована схема моделирования, предложенная в параграфе 1.4. Опишем подробно моделирование рассеяния в НЖК.

В нашей модели перед каждым актом рассеяния фотон находится в одном из двух “каналов” рассеяния, т. е., имеет одну из двух поляризаций: (o) или (e) . Вероятность рассеяния в тот или иной канал поляризации выбирается в соответствии с соотношением между полными сечениями рассеяния в каждый

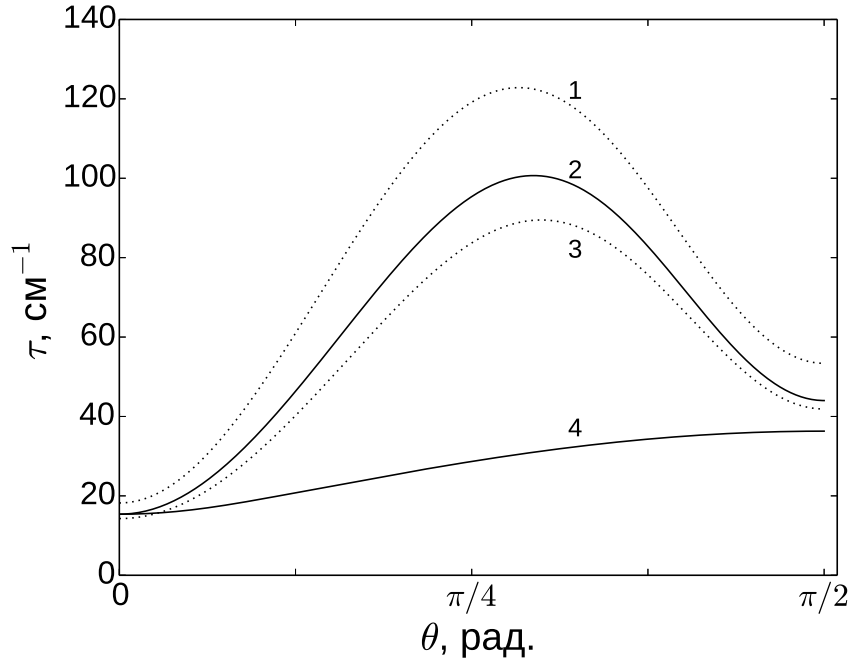


Рис. 1.1. Угловая зависимость коэффициентов экстинкции для обыкновенного (кривая 4) и необыкновенного (кривые 1-3) лучей. Расчеты выполнены по формуле (1.14) для следующих значений параметров: $\varepsilon_{\perp} = 2.2$, $\varepsilon_a = 0.8$, $\lambda = 4.88 \cdot 10^{-5}$ см, $T = 301$ К, $H = 5000$ Э, $\chi_a = 1.38 \cdot 10^{-7}$. Значения модулей Франка: $K_{11} = 0.79 K_{33}$, $K_{22} = 0.43 K_{33}$, $K_{33} = 6.1 \cdot 10^{-7}$ дин для кривых 2 и 4; $K_{11} = 2.6 \cdot 10^{-7}$ дин, $K_{22} = 1.4 \cdot 10^{-7}$ дин, $K_{33} = 9.5 \cdot 10^{-7}$ для кривой 1 и $K_{11} = K_{22} = K_{33} = 4.5 \cdot 10^{-7}$ дин для кривой 3 (одноконстантное приближение). Для всех трех случаев сумма модулей Франка совпадает.

из двух каналов.

Между последовательными рассеяниями фотоны перемещаются в среде с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon(\mathbf{k})$. В каждом акте рассеяния необходимо разыграть направление, в котором фотон будет распространяться, тип волны, в которую происходит рассеяние, и расстояние, которое он пролетит до следующего рассеяния.

Направление, в котором фотон будет распространяться после рассеяния, выбирается случайным образом. Плотность вероятности рассеяния фотона в единицу телесного угла, задается индикатрисой однократного рассеяния (1.9). Поскольку исследуемая система анизотропна, эта вероятность зависит от угла θ_i между волновым вектором $\mathbf{k}^{(i)}$ до рассеяния и вектором директора $\mathbf{n}$.

При моделировании однократного рассеяния в НЖК как правило используют одно- или двухконстантное приближения [5, 43], позволяющие упростить выражения для индикатрисы. Разыгрывание направления $\mathbf{k}^{(s)}$ при этом производится при помощи метода обратных функций. Поскольку нашей целью является моделирование с учетом всех особенностей НЖК, мы использовали настоящую индикатрису однократного рассеяния. Для нее генерация случайных направлений методом обратных функций приводит к громоздкой процедуре, включающей в себя обращение специальных функций типа эллиптических интегралов. Поскольку выбор направления необходимо проводить на каждом акте рассеяния, такой подход представляется бесперспективным для численного моделирования.

Для того, чтобы обойти эту трудность, мы будем согласно схеме, изложенной в разделе 1.4, строить аппроксимацию индикатрисы (1.9) в специально выбранной системе координат. Для описания однократного рассеяния необходимо в общем случае задать четыре параметра: два угла, определяющих направление вектора $\mathbf{k}^{(i)}$, и два угла для вектора $\mathbf{k}^{(s)}$. Вследствие оптической одноосности в нашей системе существует симметрия, состоящая в том, что при одновременном вращении векторов $\mathbf{k}^{(i)}$ и $\mathbf{k}^{(s)}$ вокруг директора $\mathbf{n}$ вероятность рассеяния $\mathbf{k}^{(i)}$ в

$\mathbf{k}^{(s)}$ не меняется. Это позволяет сократить число параметров с четырех до трех. В качестве одного из параметров выберем угол θ_i . Для заданного вектора $\mathbf{k}^{(i)}$ введем локальную декартову систему координат с ортами

$$\mathbf{v}_3 = \frac{\mathbf{k}^{(i)}}{k^{(i)}}, \quad \mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_3 \times \mathbf{n}, \quad \mathbf{v}_2 = \mathbf{v}_3 \times \mathbf{v}_1. \quad (1.53)$$

С этой системой координат естественным образом связана соответствующая сферическая система координат, углы θ и ϕ в которой мы и будем использовать для описания направления рассеяния. Таким образом, с точностью до преобразования координат (1.53), для генерации случайного направления фотона после рассеяния нужно при заданном угле θ_i разыграть углы θ и ϕ , задающие направление $\mathbf{k}^{(s)}$. При этом для угла ϕ достаточно рассмотреть интервал $[0, \pi]$, поскольку выражение (1.9) обладает зеркальной симметрией относительно точки $\phi = \pi$. Для того, чтобы проводить интерполяцию индикатрисы (1.9), мы заранее для θ_i задаем дискретный набор углов $\{\tilde{\theta}_1, \tilde{\theta}_2, \dots, \tilde{\theta}_M\}$. При каждом угле $\tilde{\theta}_j$ из этого набора разбиваем телесный угол рассеяния $\theta \in [0, \pi]$, $\phi \in [0, \pi]$ на прямоугольные ячейки s^j

$$s^j : \quad \theta \in [\theta_l^j, \theta_r^j], \quad \phi \in [\phi_l^j, \phi_r^j], \quad (1.54)$$

где индексы l и r относятся к левой и правой границам прямоугольника. Размеры прямоугольников подбираются так, чтобы билинейная интерполяция индикатрисы $I^j(\theta, \phi)$, построенная по ее значениям, вычисленным в вершинах ячейки, описывала индикатрису рассеяния с заданной точностью. При моделировании точность интерполяции составляла 1%. Для случая $(e) \rightarrow (e)$ рассеяния, когда индикатриса сильно вытянута вперед, данная точность достигалась при числе ячеек порядка $3 \cdot 10^4$.

При моделировании каждого акта однократного рассеяния для угла θ_i выбирается ближайший элемент из набора $\{\tilde{\theta}_1, \tilde{\theta}_2, \dots, \tilde{\theta}_M\}$ и соответствующая ему интерполяция $I^j(\theta, \phi | \theta_i)$. Вероятность того, что направление рассеяния попада-

ет в ячейку s^j равна

$$p_j = \frac{\int_{\phi, \theta \in s^j} I^j(\theta, \phi | \theta_i) d\Omega}{\sum_t \int_{\phi, \theta \in s^t} I^t(\theta, \phi | \theta_i) d\Omega}. \quad (1.55)$$

Разыграем с равномерным распределением случайное число r в интервале $[0, 1]$.

Выберем ячейку с номером t из массива, такую, что

$$\sum_{j=1, j < t} p_j < r, \quad \sum_{j=1, j \leq t} p_j \geq r. \quad (1.56)$$

После того, как ячейка выбрана, необходимо разыграть значения углов θ и ϕ уже внутри ячейки. Это можно сделать с помощью двумерного аналога метода обратных функций [46], взяв за плотность вероятности соответствующую ячейке билинейную интерполяцию I^t . Полученные таким образом углы θ и ϕ , принадлежащие этой ячейке, будут определять направление распространения фотона после рассеяния.

В случае $(e) \rightarrow (e)$ рассеяния адаптивное разбиение, построенное способом, изложенным в параграфе 1.4, позволило описать узкий пик индикатрисы, куда преимущественно и рассеиваются фотоны. Отметим, что от параметра θ_i индикатриса зависит слабо и поэтому удалось обойтись небольшим (~ 300) количеством заранее заготовленных интерполяций.

В нематическом жидком кристалле для каждого из типов рассеяния $(o) \rightarrow (e)$, $(e) \rightarrow (o)$ и $(e) \rightarrow (e)$ выбирался свой набор углов $\{\tilde{\theta}_1, \tilde{\theta}_2, \dots, \tilde{\theta}_M\}$ и выполнялось построение аппроксимации соответствующей индикатрисы.

После того, как выбран волновой вектор рассеянного фотона $\mathbf{k}^{(s)}$, необходимо определить расстояние, которое он пройдет до следующего акта рассеяния. Плотность вероятности распределения длины свободного пробега между двумя последовательными актами рассеяния s имеет вид [46]

$$f(s) = \frac{1}{l} \exp(-s/l_{(i)}), \quad (1.57)$$

где $l_{(i)}$ — зависящая от типа волны и вектора $\mathbf{k}^{(i)}$ длина экстинкции.

При моделировании вначале выбирался канал рассеяния, потом направление рассеяния и затем расстояние, которое пробегает фотон до следующего акта рассеяния.

1.6. Выводы

Мы изложили теорию многократного рассеяния света в НЖК и описали технику моделирования, соответствующую формальному решению уравнения Бете-Солпитера в виде бесконечного ряда лестничных диаграмм. В главе 2 мы покажем, как теория и моделирование могут быть применены для описания диффузии света. В главе 3 будет показано, как моделирование позволяет учесть циклические диаграммы в решении уравнения Бете-Солпитера и, таким образом, рассчитать пик когерентного обратного рассеяния.

Глава 2

Диффузия света в НЖК

2.1. Диффузия в анизотропных средах

В результате многократного рассеяния свет хаотизируется и “забывает” информацию об источнике излучения. Перенос интенсивности при этом может быть описан в терминах уравнения диффузии. Аналитически такой результат может быть получен как следствие уравнения Бете–Солпитера (1.27).

Решение уравнения (1.27) сводится к суммированию бесконечного ряда (1.25). Для скалярного поля и изотропной рассеивающей среды это уравнение было решено в работе [12] в приближении точечных рассеивателей. В этом случае все величины, входящие в уравнение (1.27), являются скалярами и уравнение можно записать в виде

$$\Gamma(\mathbf{K}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \Gamma^0(\mathbf{K}, \mathbf{k}_1)(2\pi)^3\delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) + \Gamma^0(\mathbf{K}, \mathbf{k}_1)L(\mathbf{K}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)\Gamma^0(\mathbf{K}, \mathbf{k}_2). \quad (2.1)$$

В скалярном изотропном случае функции G^0 и $\langle G^{R/A} \rangle$ принимают вид

$$G^0(\mathbf{k}) = \frac{1}{k^2 - k_0^2}, \quad \langle G^{R/A} \rangle(\mathbf{k}) = \frac{1}{k^2 - k_0^2 \mp ik_0/l}, \quad (2.2)$$

где l — длина свободного пробега фотона. В приближении точечных рассеивателей функция B принимает вид

$$B(\mathbf{r}) = \gamma\delta(\mathbf{r}), \quad (2.3)$$

где γ — постоянная величина, связанная с длиной свободного пробега l оптической теоремой: $l = 4\pi/\gamma$. В этом случае ряд вида (1.25) легко суммируется и имеет вид геометрической прогрессии со знаменателем

$$Q(\mathbf{K}) = \gamma \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \langle G^R \rangle(\mathbf{q} + \mathbf{K}/2) \langle G^A \rangle(\mathbf{q} - \mathbf{K}/2) \approx 1 - \frac{1}{3}l^2 K^2. \quad (2.4)$$

Суммирование геометрической прогрессии дает

$$L(\mathbf{K}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \frac{\gamma}{1 - Q(K)} \approx \frac{3\gamma}{l^2 K^2} = \frac{\gamma}{\tau} \frac{1}{DK^2}, \quad (2.5)$$

где $D = lc/3$ — коэффициент диффузии, τ — среднее время жизни фотона. Использование асимптотики вида K^{-2} в выражении (2.5) соответствует расстояниям $R \gg l$, когда применимо диффузионное приближение уравнения переноса излучения [67], то есть, расстояниям, на которых излучение будет хаотизировано. В случае рассеяния на частицах конечных размеров диффузионное приближение приводит к замене длины свободного пробега l в (2.5) на транспортную длину l^* , которая может значительно превышать l .

В случае анизотропных систем и электромагнитного поля приближенное решение уравнения (1.27) было получено в работе [2]. Это решение соответствует диффузионному приближению. Сложность решения задачи здесь состоит в том, что требуется учитывать векторный характер электромагнитного поля и различные поляризации собственных волн среды. Поэтому был предложен метод решения интегрального уравнения Бете–Солпитера, основанный на разложении по собственным функциям ядра интегрального уравнения. Если в разложении ограничиться учетом только минимального собственного значения, то решение уравнения Бете–Солпитера имеет вид [2]

$$\Gamma_{ikjl}^{(D)}(\mathbf{K}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = -\frac{1}{N} \frac{\Delta G(\mathbf{k}_1)_{ik} \Delta G_{jl}(\mathbf{k}_2)}{(\mathbf{K} \hat{D} \mathbf{K})}, \quad (2.6)$$

где

$$N = \frac{2k_0^2}{\pi c} \frac{1}{8\pi} \sum_{j=o,e} \int d\Omega_{\mathbf{k}} n^{(j)3}(\mathbf{s}),$$

$$\Delta \hat{G}(\mathbf{k}) = 2i \operatorname{Im} \langle \hat{G}^R \rangle(\mathbf{k}), \quad (2.7)$$

$\hat{D}$ — тензорный коэффициент диффузии света, который для НЖК имеет вид

$$\hat{D} = D_{\perp} \hat{I} + (D_{\parallel} - D_{\perp}) \mathbf{n}^0 \otimes \mathbf{n}^0, \quad (2.8)$$

$D_{\parallel}$ и $D_{\perp}$ — коэффициенты диффузии вдоль и поперек $\mathbf{n}^0$. Тензорный коэффициент диффузии был получен в [2] путем разложения по сферическим гармоникам и учетом вклада низших мод.

Другой подход к решению интегрального уравнения Бете–Солпитера был предложен в работах [3, 4]. Было замечено, что задача многократного рассеяния света в НЖК является близкой задаче о рассеянии электронов в неупорядоченных полупроводниках [25], для решения которой существует развитый теоретический аппарат. При помощи векторного аналога формулы Кубо–Гринвуда [38] уравнение Бете–Солпитера (1.27) удалось свести к уравнению на тензор анизотропной диффузии:

$$\mathbf{q} \cdot \hat{D} \mathbf{q} = \frac{1}{(2\pi)^3 \rho(\omega)} \sum_{n=e,o} \int \frac{d\Omega_{\mathbf{k}_n}}{|\mathbf{v}_g^{(n)}|} l_{(i)}(\mathbf{k}_n) (\mathbf{v}_g^{(n)} \cdot \mathbf{q}) \gamma^{(n)}(\mathbf{k}_n, \mathbf{q}),$$

где $\mathbf{v}_g^{(n)}$ — групповая скорость для моды поляризации n , $\rho(\omega)$ плотность микросостояний на единицу объема,

$$\rho(\omega) = \frac{1}{8\pi^3} \sum_{n=o,e} \int \frac{d\Omega_{\mathbf{k}_n}}{|\mathbf{v}_g^{(n)}|},$$

а $\gamma^{(n)}(\mathbf{k}_n, \mathbf{q})$ — некоторый тензор, имеющий смысл векторного аналога множителя $(1 - \langle \cos \theta \rangle)^{-1}$ для изотропной среды. Полученное уравнение было приближенно решено в двухконстантном приближении $K_{11} = K_{22}$.

Таким образом, распространение многократно рассеявшегося в НЖК света может быть описано уравнением анизотропной диффузии:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D_{\parallel} \nabla_{\parallel}^2 P + D_{\perp} \nabla_{\perp}^2 P, \quad (2.9)$$

где $P = P(\mathbf{r}, t)$ вероятность прихода фотона в точку $\mathbf{r}$ в момент времени t . В случае точечного источника в приближении безграничной среды решение этого уравнения имеет вид

$$P(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{8(\pi t)^{3/2} D_{\perp} D_{\parallel}^{1/2}} \exp \left[-\frac{1}{4t} \left(\frac{r_{\parallel}^2}{D_{\parallel}} + \frac{r_{\perp}^2}{D_{\perp}} \right) \right], \quad (2.10)$$

где $r_{\parallel}$ и $r_{\perp}$ – расстояния вдоль и поперек директора.

Эксперименты по определению коэффициентов диффузии света в НЖК описаны в работах [1, 22, 23].

В работе [1] отношение коэффициентов диффузии $D_{\parallel}/D_{\perp}$ определялось по деформации светового пучка, прошедшего через ячейку. Ячейка была заполнена НЖК, который ориентировался внешним магнитным полем, направленным в плоскости ячейки. Интенсивность излучения, прошедшего через НЖК, измерялась как функция координат вдоль и поперек магнитного поля. Использовалась большая ячейка толщиной 1 см и диаметром 2 см, что позволило считать, что свет в НЖК распространяется в диффузионном режиме, а также пренебречь влиянием границ. Для определения отношения $D_{\parallel}/D_{\perp}$ использовалось выражение (2.10). Для этого измеренные значения интенсивности вдоль и поперек директора аппроксимировались гауссовыми кривыми. По отношению параметров полученных гауссианов определялось отношение коэффициентов диффузии. Для определения абсолютных значений коэффициентов диффузии ячейка заполнялась коллоидной суспензией, для которой диффузия света является изотропной. Концентрация суспензии подбиралась таким образом, чтобы профиль интенсивности оказался посередине между профилями вдоль и поперек директора, полученными для НЖК. По концентрации суспензии определялся коэффициент диффузии света, который использовался для нормировки коэффициентов диффузии в НЖК.

В работах [22, 23] коэффициенты диффузии определялись прямым методом путем пропускания через ячейку короткого светового импульса. Временная зависимость интенсивности света, прошедшего через слой, измерялось для случаев, когда ориентирующее магнитное поле было направлено как вдоль, так и поперек ячейки. Толщина ячейки при этом составляла 6.3 мм. Многократное отражение света от границ и потери на рассеяние света назад учитывались аналитически при помощи метода зеркальных отображений и суммирования бесконечной геометрической прогрессии. По форме временной зависимости ин-

тенсивности света, прошедшего через образец, рассчитывались коэффициенты диффузии. Для проверки корректности эксперимента отношение коэффициентов диффузии также измерялось методом, предложенным в работе [1].

2.2. Моделирование диффузии света в НЖК

При исследовании диффузии фотонов мы считали, что ориентированный магнитным полем НЖК заполняет все пространство. Для этой задачи такой подход оправдан, поскольку тензор диффузии (2.8) является макроскопической величиной и не зависит от размеров образца.

Целью моделирования было выявление статистических закономерностей переноса излучения в анизотропной среде. Для этого запускались отдельные фотоны и методом, описанным в разделе 1.5, определялись их траектории. Процедура запуска фотонов повторялась многократно и тем самым получался набор траекторий. Нас интересует развитие системы, состоящей из ансамбля фотонов, во времени. Заметим, что время в уравнении Бете–Солпитера, решению которого соответствует наше моделирование, отсутствует. Однако для фотонов, используемых в моделировании, понятие времени имеет простой смысл. Считая, что фотоны распространяются между актами рассеяния прямолинейно со скоростью света в среде $v = c/n(\mathbf{k})$, можно определить, какое время потребовалось фотону для того, чтобы попасть в какую-либо точку траектории. Такой выбор скорости обусловлен тем, что при моделировании фотоны распространяются вдоль волнового вектора.

На Рис. 2.1 показано развитие системы фотонов во времени. Проекция положений фотонов, расположенные слева, соответствуют моменту времени $t = 10^{-11}$ сек., справа — $t = 10^{-10}$ сек. Вектор директора $\mathbf{n}$ направлен вдоль оси OX , фотоны попадают в среду в начале координат с волновым вектором $\mathbf{k}_0^{(i)}$, направленным вдоль оси OZ . Рисунок носит иллюстративный характер и число фотонов на нем составляет 5000. В реальном численном эксперименте

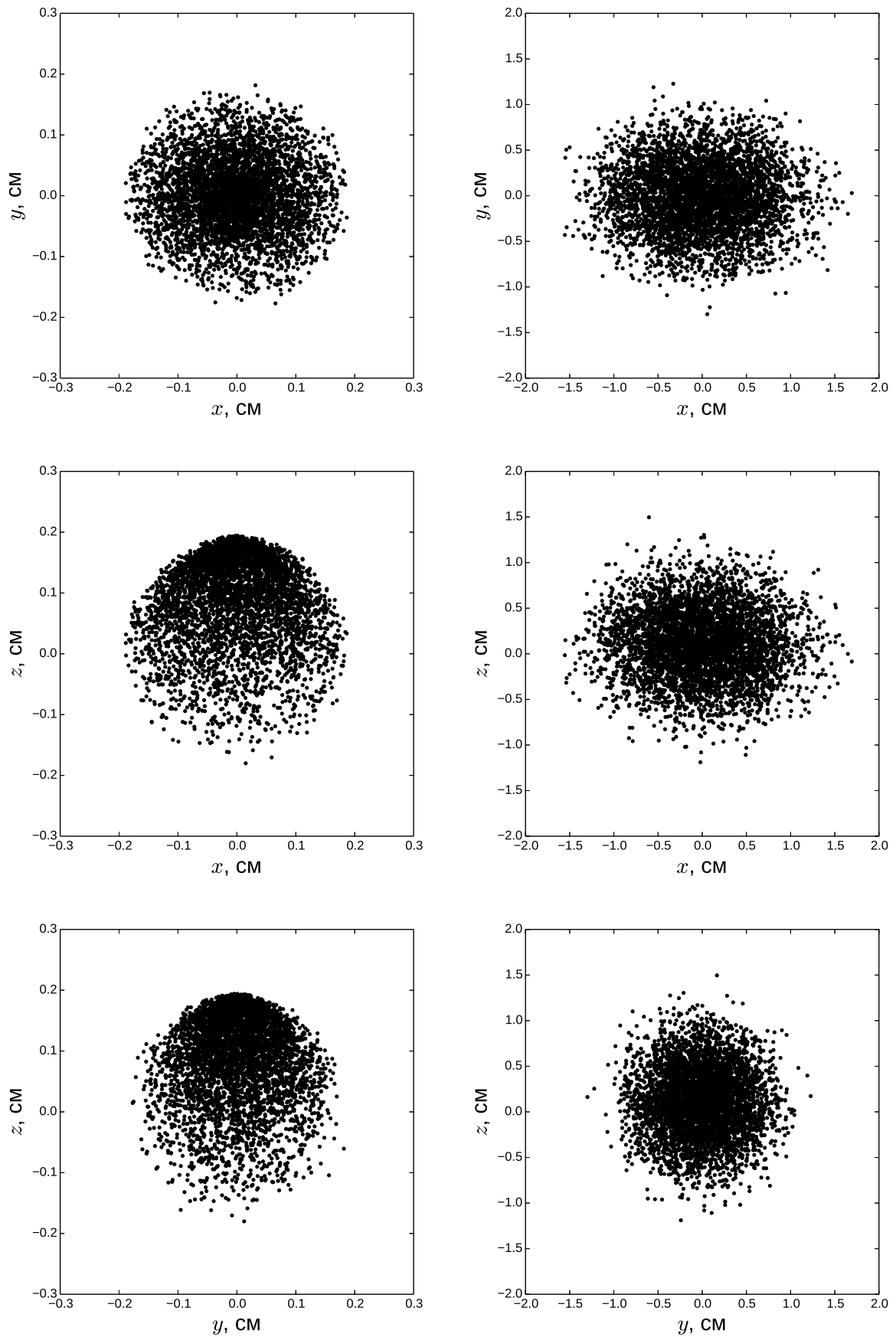


Рис. 2.1. Ансамбль фотонов до начала диффузии (слева) и после (справа)

моделировалось распространение 10^6 фотонов. Видно, что с течением времени система хаотизируется. Фотоны “забывают” свое место вылета и начальный волновой вектор.

Мы вычисляли средние квадраты смещения фотонов вдоль и поперек директора, $\langle r_{\parallel}^2 \rangle$ и $\langle r_{\perp}^2 \rangle$ в зависимости от времени распространения фотона. Начиная с некоторого момента времени рассеянное излучение может описываться в рамках диффузионного приближения. Это означает, что средний квадрат смещения фотонов начинает линейно зависеть от времени. При этом становятся справедливы соотношения

$$\langle x^2 \rangle - x_0^2 = \langle r_{\parallel}^2 \rangle = 2D_{\parallel}t \quad (2.11)$$

$$\langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle - y_0^2 - z_0^2 = \langle r_{\perp}^2 \rangle = 4D_{\perp}t \quad (2.12)$$

Точка (x_0, y_0, z_0) фактически соответствует центру масс облака фотонов после выхода системы на диффузионный режим.

Выполненные расчеты позволяют проследить за выходом на диффузионный режим. На Рис. 2.2 показана зависимость квадратов смещения фотонов вдоль (а) и поперек (б) директора от времени при трех значениях внешнего магнитного поля. На Рис. 2.3 эта же зависимость выражена в средних кратностях рассеяния. На обоих рисунках прямолинейные участки соответствуют областям, где справедливо диффузионное приближение. При моделировании направление вылета для всех фотонов было одинаково. Если специально не оговаривалось, то в качестве такого направления выбиралась ось z . Видно, что начальные участки зависимости квадрата смещения фотонов от времени не прямолинейные. Это означает, что данном участке еще не сформировался диффузионный режим. Обратим внимание, что форма кривых на рисунках 2.2 и 2.3 не совпадает. Причина состоит в том, что переход от шкалы времен к кратностям рассеяния достаточно сложен. Это связано с тем, что время пробега фотонов между последовательными рассеяниями зависит от направления распространения. Для необыкновенного луча это обусловлено зависимостью показателя

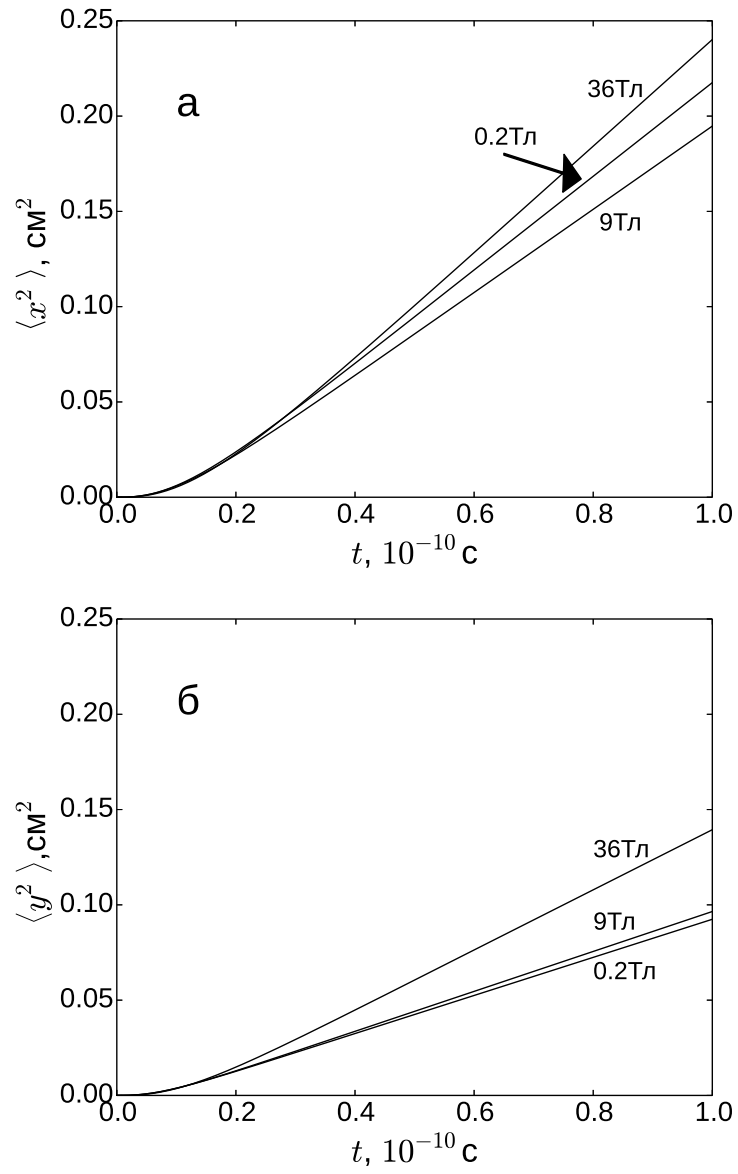


Рис. 2.2. Зависимость квадрата смещения фотонов от времени вдоль, (а), и поперек, (б), направления директора для трех значений внешнего магнитного поля.

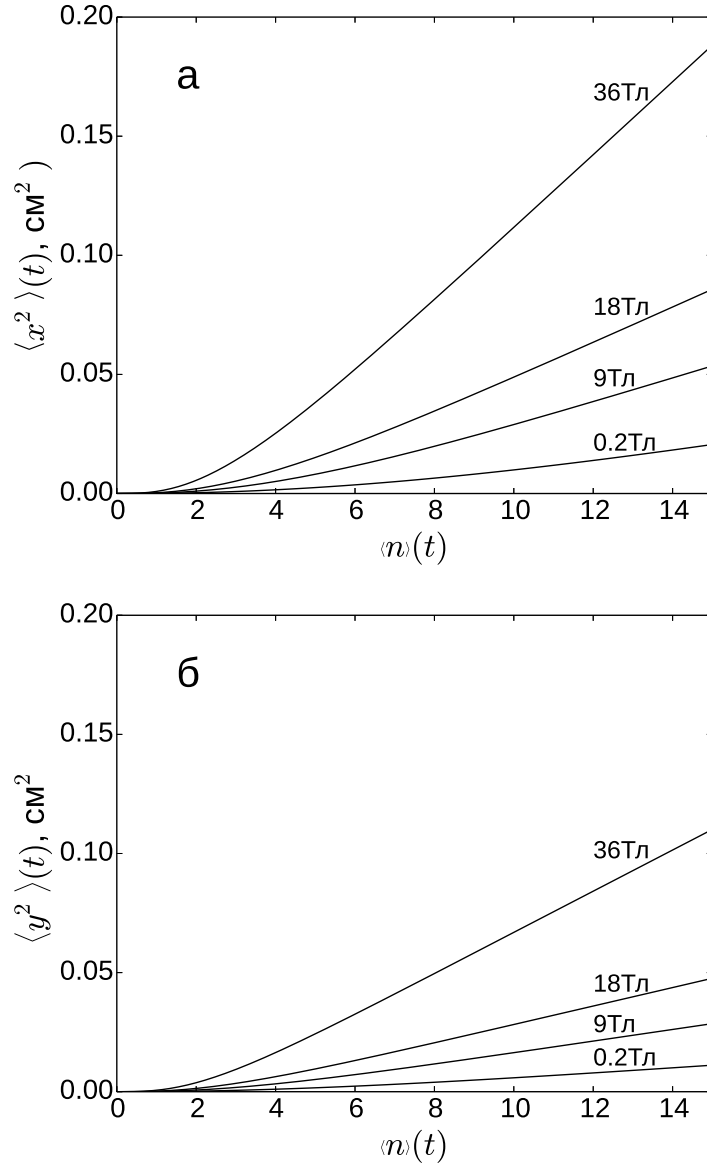


Рис. 2.3. Зависимость квадрата смещения фотонов от числа рассеяний для четырех значений внешнего магнитного поля: (а) и (б) – проекции вдоль и поперек директора. Графики были получены следующим образом. Число рассеяний, n , и квадраты координат фотонов, x^2 и y^2 , были вычислены для каждой траектории в каждый момент времени. Эти значения были усреднены по траекториям и $\langle n \rangle(t)$, $\langle x^2 \rangle(t)$, $\langle y^2 \rangle(t)$ были получены для каждого значения t .

преломления и коэффициента экстинкции от угла между волновым вектором и директором, а для обыкновенного луча угловой зависимостью коэффициента экстинкции.

Видно, что число кратностей рассеяния, необходимых для перехода к диффузионному режиму, убывает с ростом напряженности магнитного поля. Этот результат представляется естественным, поскольку с ростом магнитного поля индикатриса однократного рассеяния приближается к круговой, и хаотизация направлений распространения фотонов наступает за меньшее число кратностей рассеяния.

Была исследована скорость выхода на диффузионный режим в зависимости от направления вылета фотона из источника. Было обнаружено, что время выхода на диффузионный режим заметно меньше, если фотон вылетает в области малых углов по отношению к вектору директора. Для иллюстрации этого эффекта на Рис. 2.4 приведены зависимости $\langle x^2 \rangle(t)$ для четырех направлений вылета фотонов.

Коэффициенты диффузии были найдены из массива данных, соответствующих диффузионному режиму, методом максимального правдоподобия. В качестве статистической модели использовалась функция Грина (2.10) уравнения диффузии. Коэффициенты находились из соотношений

$$D_{\perp} = \frac{1}{4MN} \sum_{j=1}^M \frac{1}{t_j} \sum_{l=1}^N r_{\perp l}^2(t_j) = \frac{1}{4M} \sum_{j=1}^M \frac{1}{t_j} \langle r_{\perp}^2(t_j) \rangle, \quad (2.13)$$

$$D_{\parallel} = \frac{1}{2MN} \sum_{j=1}^M \frac{1}{t_j} \sum_{l=1}^N r_{\parallel l}^2(t_j) = \frac{1}{2M} \sum_{j=1}^M \frac{1}{t_j} \langle r_{\parallel}^2(t_j) \rangle, \quad (2.14)$$

где N - число запускаемых фотонов, M - число шагов по времени, индекс l нумерует запускаемые фотоны, а индекс j - шаги по времени. В наших расчетах моменты времени t_j задавались, начиная с $t = t_0$, с постоянным шагом. Здесь время $t = t_0$ относится к области диффузионного режима. Вообще говоря, можно выбирать достаточно произвольный набор значений t_j , поскольку

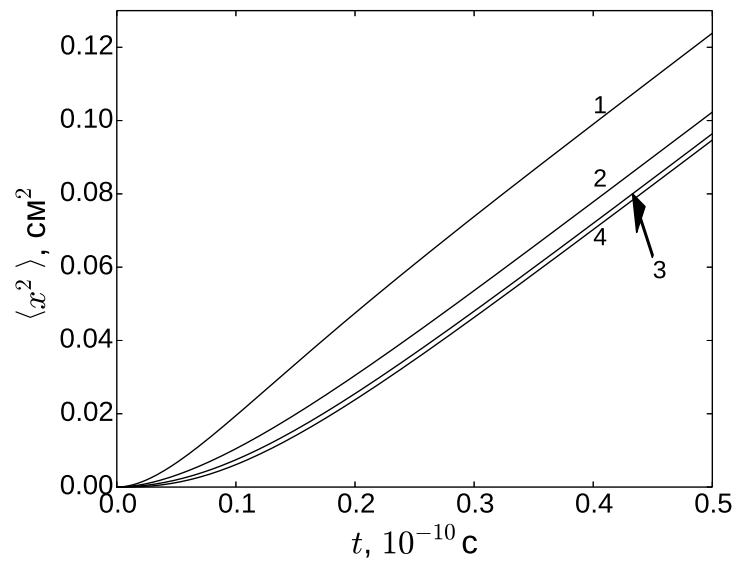


Рис. 2.4. Зависимость квадрата смещения фотона $\langle x^2 \rangle$, от угла θ между направлением падающего луча и директором: (1) — $\theta = \pi/12$, (2) — $\theta = \pi/4$, (3) — $\theta = \pi/3$, (4) — $\theta = \pi/2$.

по известной траектории не составляет труда определить положение фотона в каждый момент времени.

Выражения (2.13), (2.14) фактически соответствуют определению угла наклона прямых, аппроксимирующих методом наименьших квадратов заведомо линейные части зависимостей $\langle r_{\parallel}^2 \rangle(t)$ и $\langle r_{\perp}^2 \rangle(t)$. Для контроля коэффициенты диффузии определялись также при помощи 4 и 6 моментов

$$\langle r_{\parallel}^4 \rangle = 12D_{\parallel}^2 t^2 \quad (2.15)$$

$$\langle r_{\parallel}^6 \rangle = 120D_{\parallel}^3 t^3. \quad (2.16)$$

Кроме изложенного в диссертации исследования, моделирование диффузии света в НЖК методами Монте-Карло проводилось также в работах [1, 5, 43].

Метод, предложенный в работе [1], отличается от традиционного подхода, основанного на диаграммной технике решения уравнения Бете–Солпитера. Для описания переноса интенсивности также используется понятие фотонов. Однако фотоны, фактически, отождествляются с волновыми пакетами, т.е. распространяются не вдоль волнового вектора $\mathbf{k}$, а вдоль вектора Пойнтинга. При этом фотоны движутся с групповой скоростью v_g , а средняя длина пробега фотонов равняется не длине экстинкции $l_{(i)}$, а обратному полному сечению рассеяния $\sigma_{(i)}^{-1}$, отличающемуся от $l_{(i)}$ на множитель $\cos \delta^{(i)}$. По видимому, такой подход является эквивалентным изложенному в разделе 1.5 способу описания переноса интенсивности излучения, но в отличие от традиционного подхода, не может быть обобщен для моделирования когерентных эффектов. Моделирование в работе [1] носит вспомогательный характер. Видимо поэтому авторы не описывают подробно процедуру моделирования однократного рассеяния. Кроме самого понятия фотонов отличным от изложенного в разделе 1.5 является способ разыгрывания пробега фотона до рассеяния. Фотоны перемещаются вдоль вектора Пойнтинга шагами на расстояние $ds = v_g dt$, где дискретный малый интервал времени dt является параметром моделирования. При этом на каждом шаге разыгрывается событие, в результате которого фотон или рассеивается и

меняет направление и, возможно, поляризацию, или продолжает прямолинейное движение вперед. Такой подход годится для описания диффузии, но, в силу своей дискретности, хуже описывает выход на диффузионный режим. В работе моделировалось распространение 2000 фотонов, одна половина из которых имела при попадании в среду (o) -поляризацию, а вторая — (e) . Были рассчитаны коэффициенты анизотропной диффузии для НЖК 5СВ для условий, использовавшихся в эксперименте, описанном в этой же работе. Авторы ссылаются на известные данные [68] о параметрах НЖК 5СВ, но не приводят конкретные значения величин, использовавшихся в моделировании.

В работе [5] описан способ моделирования, в целом аналогичный изложенному в диссертации. При моделировании использовалось двухконстантное приближение $K_{11} = K_{22}$. Также считалось, что индикатриса однократного рассеяния не зависит от азимутального угла ϕ . Такие приближения позволили вместо сложного выражения (1.9) использовать упрощенную фазовую функцию, для которой направление волнового вектора после рассеяния $\mathbf{k}^{(s)}$ можно разыгрывать при помощи метода обратных функций. Предположение о независимости рассеяния от угла ϕ позволяет качественно описать рассеяние $(e) \rightarrow (e)$, происходящее в основном вперед, но является плохо контролируемым. Использованные при расчетах параметры примерно соответствуют НЖК МВВА. К сожалению, авторы не привели полный набор использовавшихся параметров, что не позволяет провести сравнение с их результатами.

В работе [43] фактически был смоделирован эксперимент [1]. Отношение коэффициентов анизотропной диффузии рассчитывалось по профилю интенсивности света, прошедшего через слой с НЖК. Использовалась схожая с изложенной в разделе 1.5 схема моделирования распространения фотонов. Моделирование проводилось в одноконстантном приближении $K_{11} = K_{22} = K_{33}$. Как и в работе [5], такое упрощение позволило разыгрывать $\mathbf{k}^{(s)}$ методом обратных функций.

2.3. Особенности диффузии света в НЖК

В настоящей работе при моделировании не использовались упрощающие предположения о свойствах НЖК. Это позволило провести прямое сравнение полученных результатов с имеющимися экспериментальными и аналитическими данными. Наши расчеты, сделанные для сопоставления с экспериментами, проводились при значениях температуры, длины волны света и напряженности магнитного поля, использовавшихся в экспериментах. В этих работах измерения проводились на жидком кристалле 5СВ. В этом жидком кристалле при температуре $T_c = 35.1^\circ C$ происходит фазовый переход изотропная фаза-нематик. Вблизи T_c параметры жидкого кристалла очень чувствительны к значениям температуры. В работах [22, 23] измерения проводились при температуре $T = 27^\circ C$, напряженности магнитного поля $H = 0.5$ Тл и длине световой волны $\lambda = 405$ нм. При этой температуре модули Франка имеют значения [22, 23, 69] $K_{33} = 6,1 \times 10^{-7}$ дин, $K_{11} = 0,79K_{33}$, $K_{22} = 0,43K_{33}$. В работе [1] измерения проводились при $T = 30^\circ C$, напряженности магнитного поля $H = 0.2$ Тл и длине световой волны $\lambda = 514.5$ нм. При расчетах мы для K_{33} взяли значение $K_{33} = 7.5 \times 10^{-7}$ дин [70], а соотношение между модулями Франка были взяты такими же, как при $T = 27^\circ C$. Результаты сравнения приведены в таблице 2.1.

Из таблицы видно, что результаты моделирования, теории и эксперимента неплохо согласуются. Видно, что результаты моделирования и приближенных аналитических расчетов несколько отличаются от экспериментальных данных. Во-первых, это связано с тем, что значения параметров $\varepsilon_{||}, \varepsilon_{\perp}, K_{||}$, использовавшиеся при расчетах, могут отличаться от реальных значений для образца, использовавшегося в эксперименте. Во-вторых, при измерении коэффициентов диффузии экспериментаторы вынуждены учитывать конечные размеры образца и влияние многократного отражения света от границ ячейки. Как видно из результатов работы [22] (строка 4 в таблице 2.1), разные способы измерения, по-

№	НЖК	$\varepsilon_{\parallel}$	$\varepsilon_{\perp}$	K_{11}	K_{22}	K_{33}	H, T	ξ , мкм	$\lambda_{\text{нм}}$	T , К	Результат	$D_{\parallel}$	$D_{\perp}$	$D_{\parallel}/D_{\perp}$
1	5СВ	2.923	2.381	4.187	2.279	5.3	0.5	4.72	546.4	300	Моделирование	1.93	0.87	2.28
2				2.3	Теория [1, 71]						1.43	0.98	1.45	
					Моделирование						1.70	0.75	2.21	
					Теория [71]						—	—	1.51	
3		2.923	2.381	4.187	2.279	5.3	0.2	11.8	514.5	303.15	Моделирование	1.75	0.78	2.26
		—						—			Эксперимент [1]	0.7 ± 0.1	0.5 ± 0.1	1.6 ± 0.25
											Моделирование [1]	1.31	0.9	1.46
4		2.923	2.381	5.93	3.23	7.5	0.5	5.22	405	300	Моделирование	1.54	0.68	2.26
		—						—			Эксперимент [22]	0.456 ± 0.019	0.362 ± 0.015	1.26
											Эксперимент [22]	—	—	1.44 ± 0.06
		3.0	2.2	6.0							4.2	Моделирование	1.22	0.52
								Моделирование [43]				—	—	1.3
5	РАА	3.35	2.47	3.0		9.51	—	2.2	500	400	Моделирование	0.67	0.28	2.43
											Теория [4]	0.502	0.287	1.75
6	МВВА	4.7	5.4	3.7		7.45	—	1.5	500	300	Моделирование	1.54	0.88	1.77
											Теория [4]	1.146	0.872	1.31

Таблица 2.1. Сравнение вычисленных и измеренных коэффициентов диффузии. Модули Франка K_{jj} выражены в 10^{-7} дин. Коэффициенты диффузии выражены в $10^9 \text{ см}^2/\text{с}$.

разному учитывающие граничные эффекты, могут приводить к отличающимся значениям для коэффициентов диффузии. Моделирование и аналитические расчеты рассматривают диффузию света в бесконечном НЖК.

Прямое сравнение результатов нашего моделирования с результатами моделирования других авторов мы смогли провести только для работы [43]. Способ моделирования, использовавшийся в [43], не позволяет рассчитать абсолютные значения коэффициентов диффузии, но предсказывает близкое к экспериментальному отношение $D_{\parallel}/D_{\perp} = 1.3$. В нашем моделировании это отношение получилось значительно большим. Интересно, что такое значение получено при моделировании прохождения света через слой, имеющий толщину $L \gg l_{(o,e)}$. При моделировании прохождения света через слой с толщиной, равной длине экстинкции, значение выражения, имеющего для диффузионного режима смысл $D_{\parallel}/D_{\perp}$, равнялось 2.85 [43], то есть больше полученного нами.

Особенно интересно сравнить результаты моделирования с результатами приближенных аналитических вычислений. Фактически, и моделирование, и аналитические подходы к описанию диффузии соответствуют решению одного

и того же уравнения Бете–Солпитера в приближении слабого рассеяния. При этом точность моделирования определяется точностью построения аппроксимации индикатрисы однократного рассеяния и статистическими свойствами ансамбля фотонов, а точность аналитических расчетов — корректностью использованных приближений. Видно, что моделирование предсказывает близкие к аналитически вычисленным значения $D_{\perp}$, а значения $D_{\parallel}$ получаются больше, чем в теории. Для того, чтобы более детально сравнить результаты моделирования и аналитических расчетов, мы исследовали зависимость коэффициентов диффузии от внешнего магнитного поля и длины световой волны.

При анализе зависимости тензора диффузии от напряженности магнитного поля H расчеты проводились вплоть до значений H , для которых полевой и ориентационный вклад в энергию сравнимы. Это соответствует аномально большим значениям поля. Причина состоит в том, что оценки относились к диамагнитным жидким кристаллам, у которых очень мала анизотропия магнитной восприимчивости. В настоящее время синтезированы парамагнитные жидкие кристаллы на основе редкоземельных элементов [72, 73], у которых анизотропия магнитной восприимчивости на несколько порядков больше. Для этих жидких кристаллов даже область сильных полей вполне доступна для экспериментальных исследований. Для обычных жидких кристаллов, таких как 5CB, возможно проведение экспериментов [74] в сильных магнитных полях $H \sim 25$ Тл. При этом магнитное поле оказывает влияние на модули ориентационной упругости K_{ll} . В нашем моделировании мы пренебрегали этим эффектом. Эксперимент позволяет наблюдать однократное рассеяние света, однако режима многократного рассеяния достичь пока не удалось.

На Рис. 2.5 показаны зависимости коэффициентов диффузии от магнитного поля. Из рисунка видно, что коэффициенты диффузии с ростом поля меняются немонотонно. Однако, начиная с полей $H \gtrsim 35$ Тл, для которых магнитная длина когерентности $\chi_H \sim k_0^{-1}$, коэффициенты диффузии монотонно возрастают с ростом поля. Для сверхвысоких полей монотонный рост объясняется

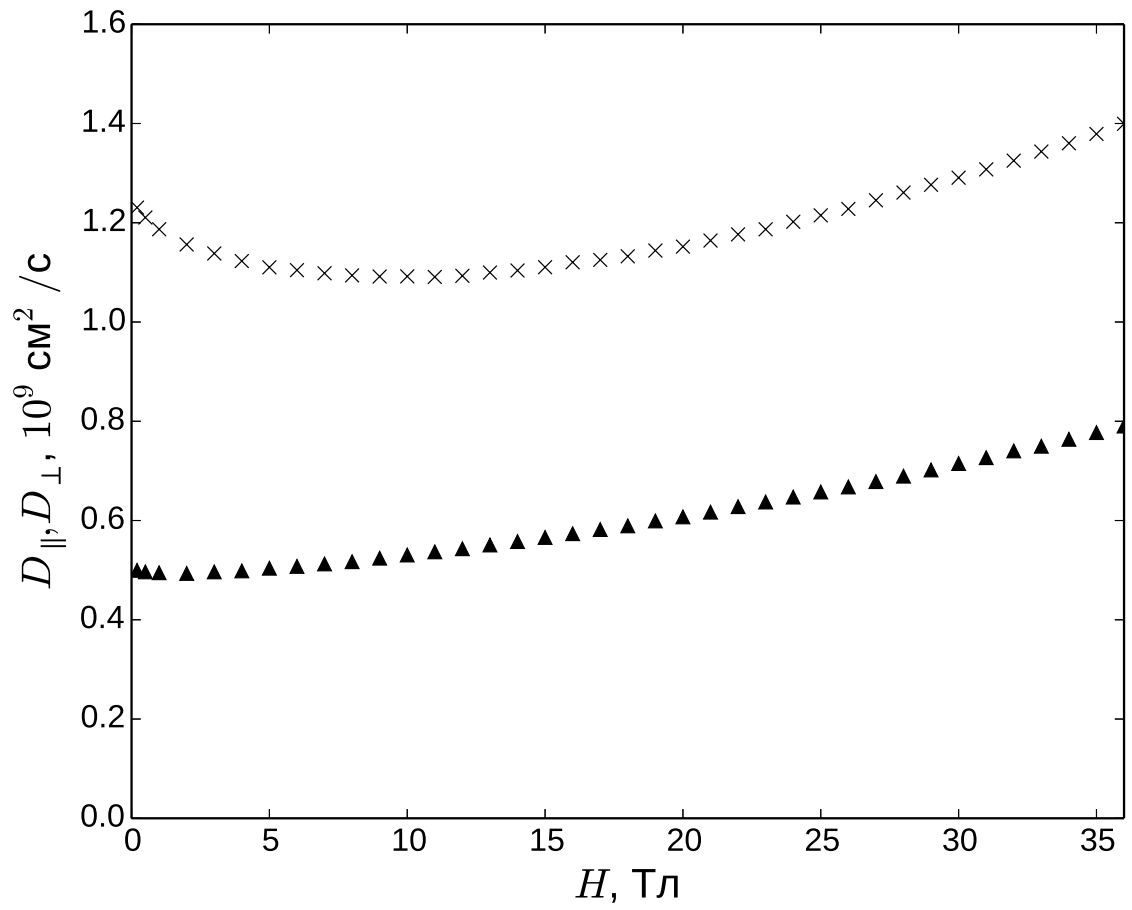


Рис. 2.5. Зависимость коэффициентов диффузии фотонов $D_{\parallel}$ (x) и $D_{\perp}$ (▲) от магнитного поля.

тем, что вклад $\chi_a H^2$ в знаменателе выражения (1.13) становится определяющим. При этом как для (o) , так и для (e) лучей индикатриса однократного рассеяния становится круговой, а длины пробега оказываются пропорциональны H^2 . Таким образом можно ожидать, что $D_{\parallel, \perp} \sim H^4$. На Рис. 2.6 показана зависимость коэффициентов диффузии от магнитного поля для сверхсильных полей. Измеренные значения аппроксимированы параболой 4-й степени вида $aH^4 + bH^2 + c$.

Для того чтобы выяснить причину немонотонного поведения, показанного на Рис. 2.5, мы попытались упростить систему, для которой проводилось моделирование. На Рис. 2.7 показаны результаты расчета, когда учитывается только $(e) \rightarrow (e)$ рассеяние. Такое упрощение часто используют в аналитических расчетах, поскольку рассеяние необыкновенного луча в необыкновенный дает наибольший вклад в интенсивность излучения. С точки зрения моделирования пренебрежение (o) лучем позволяет исключить из рассмотрения каналы рассеяния. На Рис. 2.8, помимо учета только $(e) \rightarrow (e)$ рассеяния, расчеты проведены в одноконстантном приближении. Одной из возможных причин немонотонности могла бы быть конкуренция между слагаемыми суммы (1.12), возникающая при $K_{11} \neq K_{22}$. Видно, что немонотонная зависимость коэффициентов диффузии света от поля сохраняется. Дальнейшее упрощение рассматриваемой задачи могло бы состоять в пренебрежении оптической анизотропией ε_a , но в таком приближении индикатриса (1.9) обращается в ноль. Фактически, это означает, что рассеивающая среда не является НЖК и к ней не может быть применена изложенная в разделе 1.1 теория однократного рассеяния.

Немонотонное поведение коэффициентов диффузии не согласуется с расчетом в работах [1, 2], где предсказывается плавный рост $D_{\parallel}$ и $D_{\perp}$ с ростом поля. Предсказанная теоретически зависимость коэффициентов диффузии от магнитного поля показана на Рис. 2.9. Возможно, такое несоответствие связано с тем, что в [1, 2] учитывалось только минимальное по модулю собственное значение интегрального оператора уравнения Бете-Солпитера. На правой части

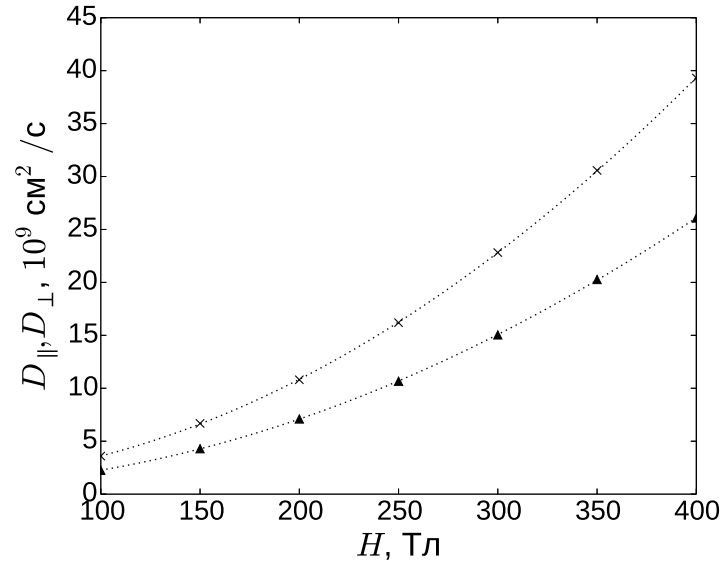


Рис. 2.6. Зависимость коэффициентов диффузии фотонов $D_{\parallel}$ (x) и $D_{\perp}$ (▲) от магнитного поля для сверхвысоких полей.

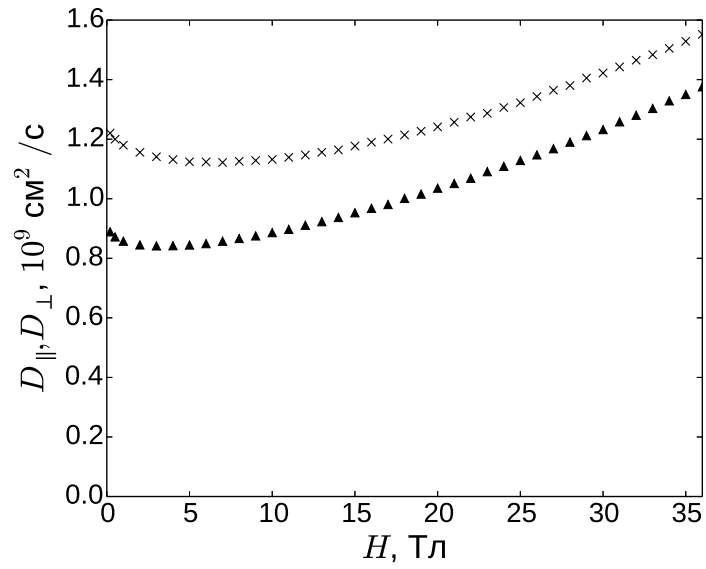


Рис. 2.7. Зависимость коэффициентов диффузии фотонов $D_{\parallel}$ (x) и $D_{\perp}$ (▲) от магнитного поля. Вычисления проводились с учетом только (e) лучей.

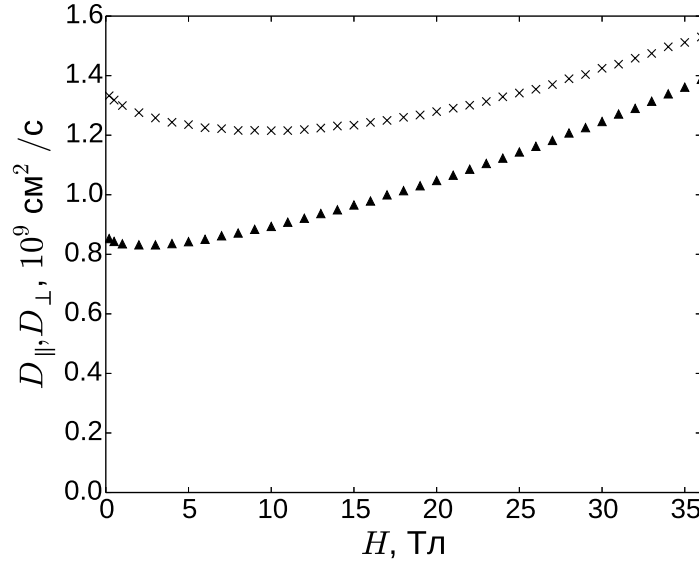


Рис. 2.8. Зависимость коэффициентов диффузии фотонов $D_{\parallel}$ ($\times$) и $D_{\perp}$ ($\blacktriangle$) от магнитного поля. Вычисления проводились с учетом только (е) лучей и в одноконстантном приближении ($K_{11} = K_{22} = K_{33}$).

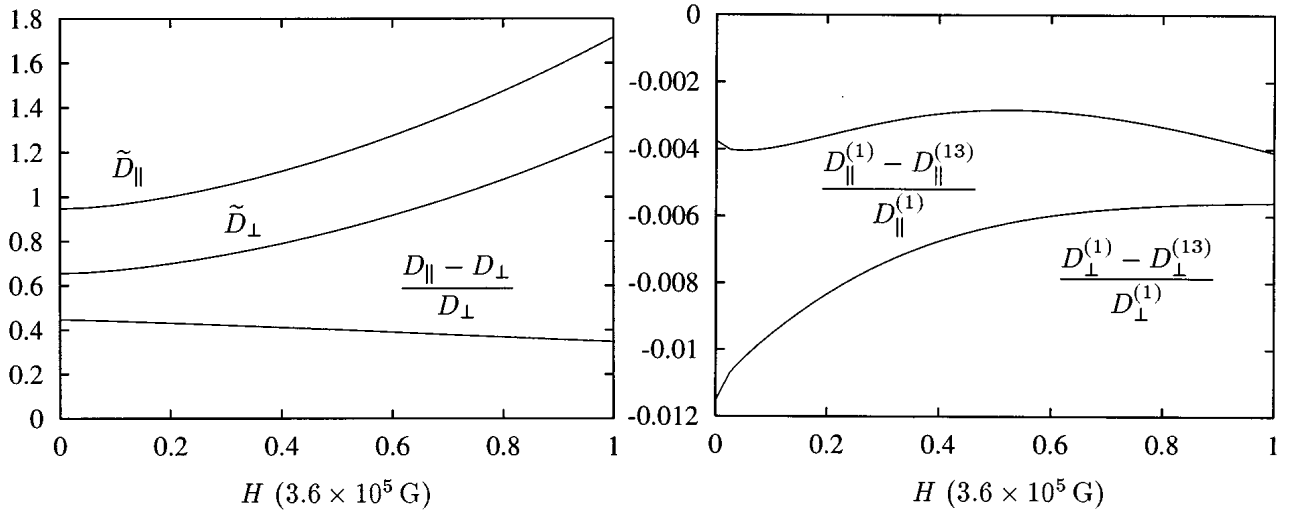


Рис. 2.9. Предсказанная аналитически [2] зависимость коэффициентов диффузии от магнитного поля. На рисунке справа показано относительное изменение коэффициентов диффузии после того, как помимо сферической гармоники с $l = 1$ были учтены гармоники вплоть до $l = 3$.

Рис. 2.9 видно, что учет более высоких собственных значений вносит малые немонотонные добавки в зависимости коэффициентов диффузии от поля. Мы предполагаем, что учет всех собственных значений привел бы кривые к виду, предсказанному моделированием. По видимому, несовпадение показанных в таблице 2.1 значений $D_{\parallel}$, полученных в результате моделирования и при аналитических расчетах, является следствием немонотонной зависимости $D_{\parallel}(H)$.

Для того, чтобы продемонстрировать, что немонотонное поведение не является следствием дефекта моделирования была рассмотрена скалярная изотропная модель. В скалярном случае коэффициент диффузии имеет вид

$$D = \frac{v}{3} \frac{1}{(\mu'_s)} = \frac{v}{3} \frac{l_{ext}}{(1 - \langle \cos \theta \rangle)} \quad (2.17)$$

где l_{ext} – длина экстинкции, $\langle \cos \theta \rangle$ – средний косинус угла рассеяния. В качестве модели в формуле для индикатрисы (1.9) вместо корреляционной функции флуктуаций диэлектрической проницаемости (1.12) примем скалярное выражение

$$B = \frac{k_0^4 \varepsilon_a^2 k_B T}{K q^2 + \chi_a H^2}. \quad (2.18)$$

Поляризационные множители, $\cos \delta^{(j)}$, $f_{(j)}^2$ положим равными единице. Тогда индикатриса однократного рассеяния имеет вид

$$I = \frac{1}{N} \frac{1}{K q^2 + \chi_a H^2}, \quad (2.19)$$

где N – нормировочный коэффициент, $q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$, θ – угол рассеяния. Фактически в рамках такой модели можно описывать многократное рассеяние света в критической области, если ограничиться приближением Орнштейна-Цернике. При этом вместо величины $K/(\chi_a H^2)$ используется радиус корреляции флуктуаций параметра порядка. С точки зрения моделирования такой вид индикатрисы мало отличается от настоящей индикатрисы однократного рассеяния в НЖК и приводит к тем же численным трудностям, связанным с узким пиком для малых значений H .

Для модели (2.19) коэффициент диффузии имеет вид

$$D = \frac{v}{3} \frac{l_{ext}}{\frac{2}{\ln(1+\frac{2}{h^2})} - h^2} \quad (2.20)$$

где $h^2 = \frac{\chi_a H^2}{2k^2 K}$,

$$l_{ext} = \frac{1}{2(4\pi k)^2 K N} \frac{1}{\ln(1 + \frac{2}{h^2})}. \quad (2.21)$$

Зависимость коэффициента диффузии от поля для модели рассчитывалась численно по формуле (2.20) и с помощью программы, которая использовалась для моделирования многократного рассеяние света в НЖК. Результаты совпадали с точностью до долей процента. На Рис. 2.10 показана зависимость D от h . Для вычислений мы использовали следующие параметры: $K = 5.55 \times 10^{-7}$ дин, $\varepsilon_{\perp} = 2.2$, $\varepsilon_{\parallel} = 3.0$, $\lambda = 514.5$ нм, $\chi_a = 1.1 \times 10^{-7}$, $T = 301$ К.

Для этой модели монотонное возрастание коэффициента диффузии с ростом поля обусловлено тем, что с увеличением поля подавляются флуктуации директора. При этом длина экстинкции и величина $1 - \langle \cos \theta \rangle$ возрастают. Однако длина экстинкции растет несколько быстрее и конкуренции между числителем и знаменателем в выражении (2.17) не происходит. В случае рассеяния света в НЖК такая синхронность может нарушаться. Для того, чтобы изучить эту проблему, было проведено моделирование, в котором в качестве фазовой функции использовалась модельная индикатриса (2.19), а в качестве длины пробега фотонов была взята зависящая от угла между $\mathbf{k}^{(i)}$ и директором длина экстинкции необыкновенного луча в НЖК в одноконстантном приближении. На Рис. 2.11 показана зависимость коэффициентов диффузии в такой модели от внешнего магнитного поля. Видно, что учет настоящей длины экстинкции НЖК является в модели определяющим, и коэффициенты диффузии начинают немонотонно зависеть от магнитного поля. При этом вид кривых на Рис. 2.11 схож с видом кривых на Рис. 2.8. На Рис. 2.12 показана зависимость средней длины экстинкции для необыкновенного луча для НЖК в одноконстантном

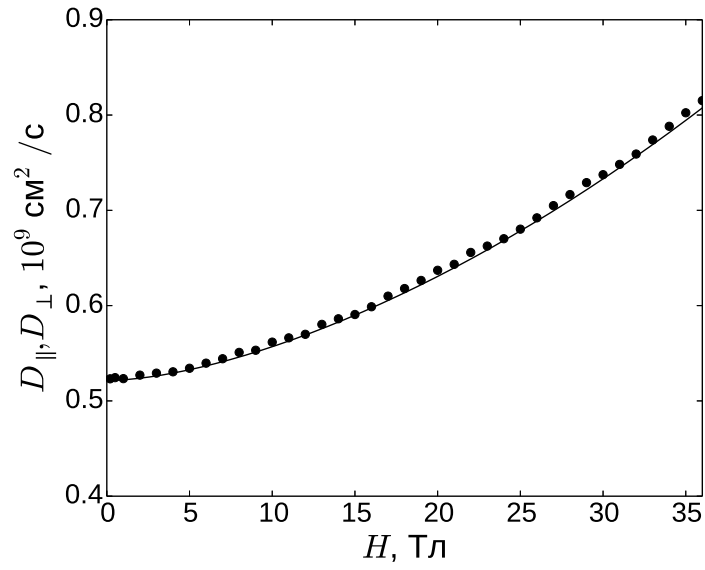


Рис. 2.10. Зависимость коэффициента диффузии от внешнего магнитного поля для скалярной модели (2.19).

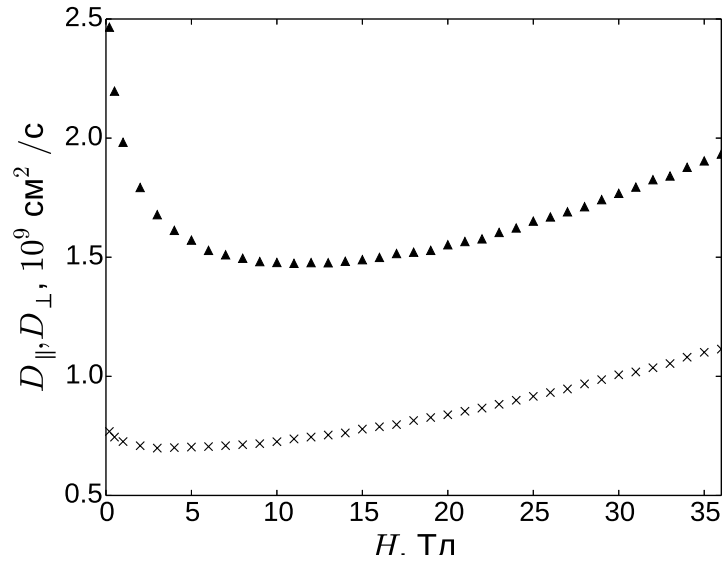


Рис. 2.11. Зависимость коэффициентов диффузии от внешнего магнитного поля для модели (2.19). При моделировании использовалась длина экстинкции необыкновенного луча для НЖК в одноконстантном приближении.

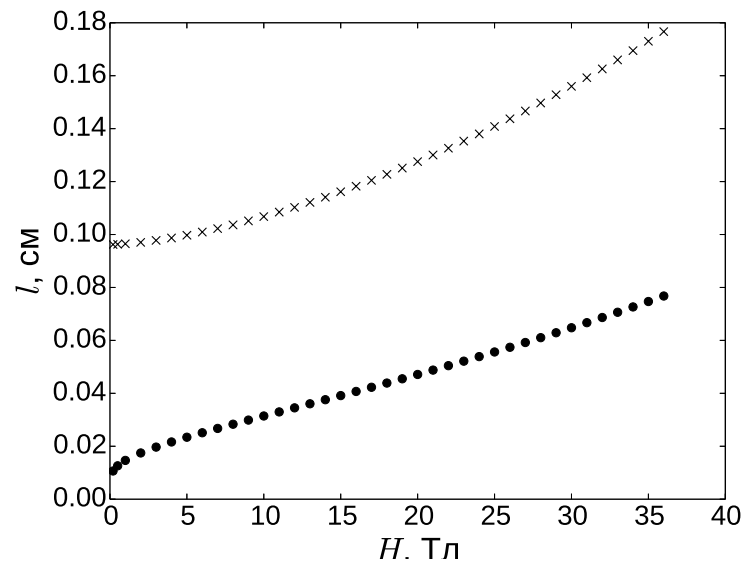


Рис. 2.12. Длина экстинкции как функция магнитного поля: $\times$ – усредненная по углу рассеяния θ длина экстинкции для НЖК в одноконстантном приближении, $\bullet$ – длина экстинкции для скалярной модели (2.19).

приближении как функция магнитного поля. Длина экстинкции усреднена по углу между $\mathbf{k}^{(i)}$ и $\mathbf{n}$. Для сравнения на том же рисунке приведена длина экстинкции, рассчитанная для модели по формуле (2.21). Видно, что обе эти длины с ростом поля монотонно возрастают. При этом в изотропном случае рост $l(H)$ определяет рост коэффициента диффузии и не компенсируется множителем $1 - \langle \cos \theta \rangle$.

В анизотропном случае, вероятно, немонотонность зависимости $D_{\parallel,\perp}(H)$ связана с тем, что длина экстинкции и параметр, характеризующий степень несферичности индикатрисы, аналогичный $1 - \langle \cos \theta \rangle$, зависят от направления распространения фотонов. Другими словами, немонотонная зависимость коэффициентов диффузии от внешнего магнитного поля является, по-видимому, следствием оптической анизотропии НЖК.

Мы также исследовали зависимость коэффициентов диффузии от длины световой волны. В выражении для интенсивности однократного рассеяния (1.9) длина волны присутствует как множитель k_0^4 в формуле (1.12), а также в знаменателе выражения (1.13), поэтому можно было ожидать, что с учетом сложного влияния оптической анизотропии зависимость $D_{\parallel,\perp}(\lambda)$ окажется нетривиальной. В интересующем нас оптическом диапазоне оказалось, что это не так. Результаты расчетов приведены на Рис. 2.13. Видно, что в пределах спектра видимого света значения коэффициентов диффузии меняются почти в два раза. Это означает, что при количественных расчетах этим эффектом нельзя пренебрегать.

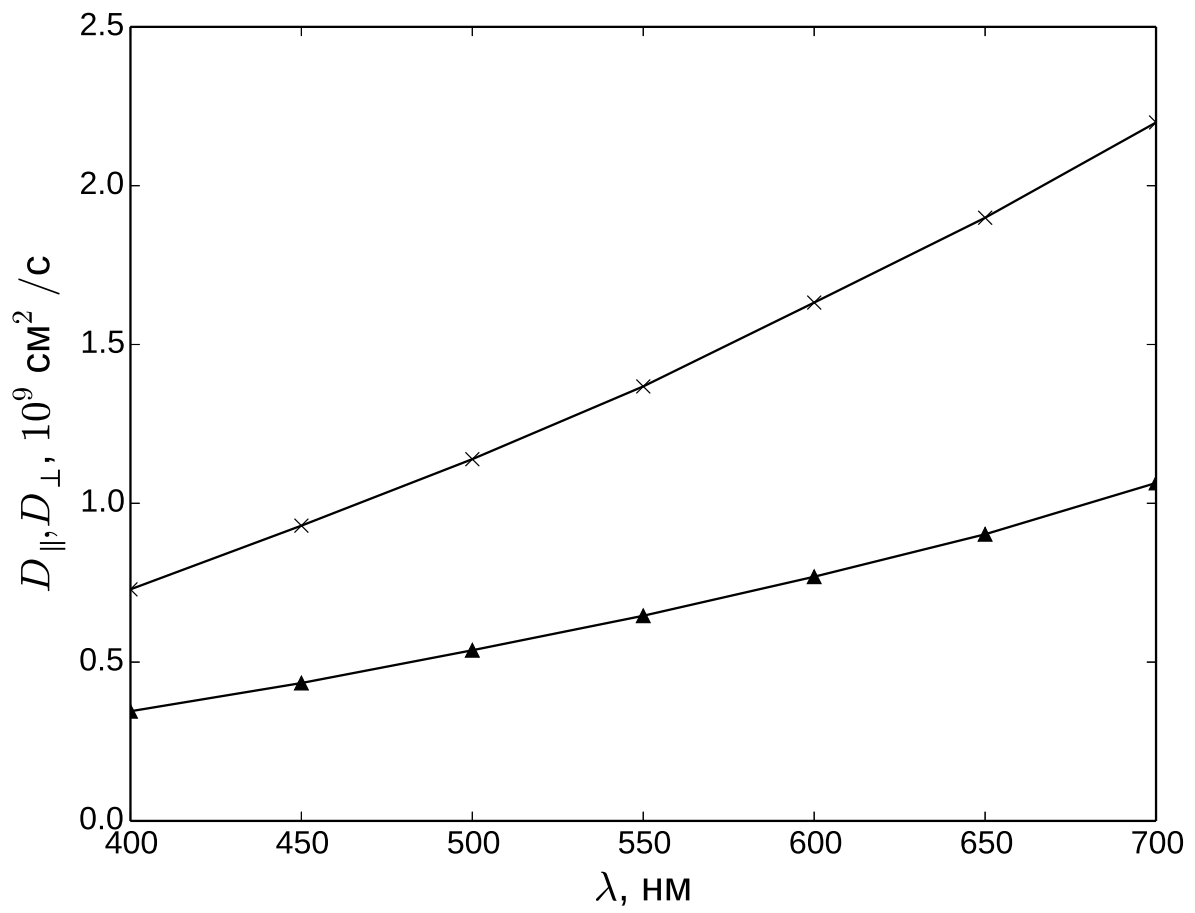


Рис. 2.13. Зависимость коэффициентов диффузии фотонов $D_{\parallel}$ ($\times$) и $D_{\perp}$ ($\blacktriangle$) от длины световой волны.

2.4. Выводы

Мы провели моделирование диффузии света в НЖК. Полученные значения коэффициентов анизотропной диффузии сравнивались с известными экспериментальными и аналитическими результатами. Оказалось, что моделирование предсказывает близкие к экспериментальным и теоретическим значения коэффициентов диффузии. Особенно интересным является сравнение результатов теории и моделирования, поскольку оба эти подхода в сущности решают одно и то же уравнение Бете-Солпитера в приближении слабого рассеяния. При этом аналитические расчеты используют плохо контролируемые приближения. Оказалось, что теория и моделирование предсказывают близкие значения $D_{\perp}$, но при этом значения $D_{\parallel}$, полученные в результате моделирования, больше рассчитанных аналитически. По-видимому, это связано с обнаруженной при моделировании немонотонной зависимостью коэффициентов диффузии от напряженности внешнего магнитного поля. Такая немонотонная зависимость отличается от предсказанной теоретически. Однако, противоречия здесь нет. По-видимому, аналитически немонотонные кривые $D_{\parallel,\perp}(H)$ могут быть получены аналитически при учете всех собственных значений интегрального оператора в уравнении Бете-Солпитера. Мы исследовали возможные причины возникновения немонотонности, последовательно упрощая модель НЖК. По-видимому, причиной немонотонной зависимости $D_{\parallel,\perp}$ является оптическая анизотропия среды. Также мы исследовали зависимость коэффициентов диффузии от длины световой волны. Оказалось, что в интересующем нас оптическом диапазоне эта зависимость имеет простой вид. При этом значения коэффициентов диффузии меняются почти в два раза. Это означает, что этим эффектом нельзя пренебрегать при расчетах.

Глава 3

Когерентное обратное рассеяние света в НЖК

Явление когерентного обратного рассеяния света состоит в резком возрастании интенсивности света, рассеянного сильно неоднородной средой, в малом телесном угле в направлении, противоположном направлению падения. Физическая картина этого эффекта достаточно проста. Пусть на систему падает когерентная плоская волна. В каждом акте рассеяния изменяются направление и фаза волны. Поскольку неоднородности распределены случайным образом, в результате многократного рассеяния свет становится полностью некогерентным. Однако каждой волне, обходящей некоторую последовательность рассеивателей, соответствует волна, обходящая эту же последовательность в обратном порядке в противоположном направлении. Такие волны будут когерентными, но в силу случайного расположения рассеивателей интерференционный вклад пропадает для всех направлений кроме направления назад, когда оптические пути и суммарный сдвиг фаз для обеих волн строго одинаковы. Впервые этот эффект детально исследован в неупорядоченных металлах и известен, как Андерсоновский эффект слабой локализации электронов.

Эффект когерентного обратного рассеяния, как аналог слабой локализации электронов, впервые наблюдался в суспензиях латексов [26, 27]. При этом были обнаружены основные особенности эффекта, такие, как близкое к двукратному усиление интенсивности и почти треугольная форма угловой зависимости пика. Теория когерентного обратного рассеяния для скалярного поля была предложена в работе [75], где треугольная форма пика была объяснена в рамках диффузионного приближения.

Эффект когерентного обратного рассеяния в НЖК исследовался экспериментально [7, 8], аналитически [29], а также при помощи моделирования [43]. Особенностью когерентного обратного рассеяния света в НЖК является крайне

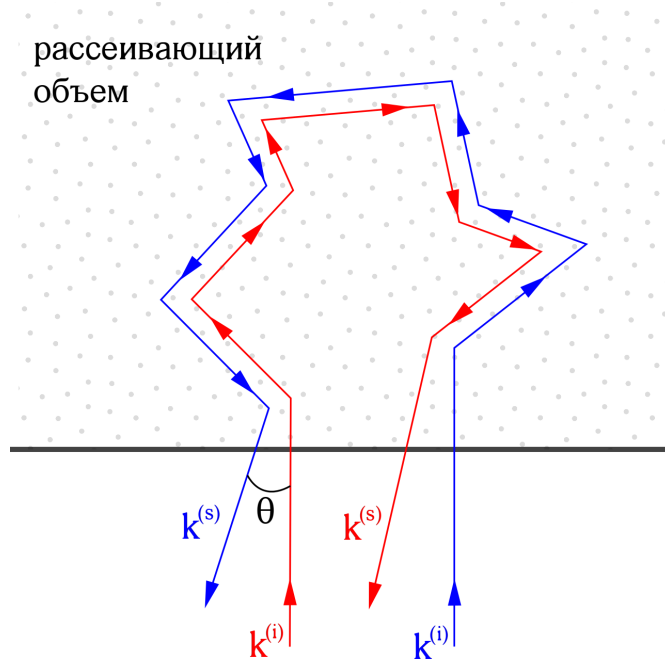


Рис. 3.1. Когерентное обратное рассеяние

малая ширина пика ~ 100 мкрад.

3.1. Аналитический подход

Эффект когерентного обратного рассеяния в ориентированном НЖК описан аналитически в работе [29]. Для этого в диффузионном приближении было произведено суммирование бесконечных рядов лестничных и циклических диаграмм. Рассматривался фурье-образ функции когерентности

$$J_{\alpha\beta}(\mathbf{R}, \mathbf{k}^{(s)}) = \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}^{(s)} \cdot \mathbf{r}} \int_{V_{sc}} d\mathbf{R}_3 d\mathbf{r}_3 \Gamma_{\alpha\beta\alpha'\beta'}(\mathbf{R}, \mathbf{R}_3, \mathbf{r}, \mathbf{r}_3) J_{\alpha'\beta'}^0(\mathbf{R}_3, \mathbf{r}_3), \quad (3.1)$$

где $J_{\alpha'\beta'}^0(\mathbf{R}_3, \mathbf{r}_3)$ — интенсивность источника, $\mathbf{k}^{(s)}$ — волновой вектор в точке наблюдения $\mathbf{R}$. Считалось, что на рассеивающий объем падает плоская волна.

С учетом вкладов лестничных и циклических диаграмм в $\hat{\Gamma}$ и интегриро-

вания по разностным координатам $\mathbf{r}$, выражение (3.1) принимает вид

$$\begin{aligned}
 J_{\alpha\beta}(\mathbf{R}, \mathbf{k}^{(s)}) &= J_{\alpha\beta}^{(L)}(\mathbf{R}, \mathbf{k}^{(s)}) + J_{\alpha\beta}^{(C)}(\mathbf{R}, \mathbf{k}^{(s)}) = \\
 &= \int d\mathbf{R}_1 d\mathbf{R}_2 \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^3} \Gamma_{\alpha\beta\gamma\delta}^0(\mathbf{R}, \mathbf{R}_1, \mathbf{k}^{(s)}, \mathbf{k}_1) \times \\
 &\times [L_{\gamma\delta\mu\nu}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) + C_{\gamma\delta\mu\nu}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)] \int_{S_{sc}} d\mathbf{R}_3 \Gamma_{\mu\nu\alpha'\beta'}^0(\mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}^{(i)}) I_{\alpha'\beta'}^{(i)},
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

где $I_{\alpha'\beta'}^{(i)} = |E_0^{(i)}|^2 e_{\alpha'}^{(i)} e_{\beta'}^{(i)}$, $E_0^{(i)}$ и $e_{\alpha'}^{(i)}$ — амплитуда и поляризация падающего поля, S_{sc} — площадь освещаемой подающим полем поверхности.

Были получены вклады обратного рассеяния за счет циклических и лестничных диаграмм:

$$\begin{aligned}
 J_{\alpha\beta}^{(C)}(\mathbf{R}, \mathbf{k}^{(s)}) &= J_{\alpha\beta}^{(C)}(\Theta, \phi) = M_{\alpha\beta}^{(C)}(\mathbf{k}^{(i)}, \mathbf{k}^{(s)}) \frac{\pi^2}{8k_0^6} \frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_{\parallel}} \frac{1}{D_{\perp}} \frac{1}{\sqrt{q'^2 + 1/\xi^2}} \times \\
 &\times \left[\frac{l_{(e)}}{\sqrt{q'^2 + 1/\xi^2} + 1/l_{(e)}} - \frac{\exp(-2z_b \sqrt{q'^2 + 1/\xi^2})}{(\sqrt{q'^2 + 1/\xi^2} + 1/l_{(e)})^2} \right], \tag{3.3}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 J_{\alpha\beta}^{(L)}(\mathbf{R}, \mathbf{k}^{(s)}) &= \frac{\pi^2}{8k_0^6} \frac{\varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_{\parallel}} \left\{ M_{\alpha\beta}^{(L)}(\mathbf{k}^{(i)}, \mathbf{k}^{(s)}) \frac{\xi}{D_{\perp}} \left[\frac{l_{(e)}}{1/\xi + 1/l_{(e)}} - \frac{\exp(-2z_b/\xi)}{(1/\xi + 1/l_{(e)})^2} \right] + \right. \\
 &\left. + M_{\alpha\beta}^{(1)}(\mathbf{k}^{(i)}, \mathbf{k}^{(s)}) l_{(e)} \right\}, \tag{3.4}
 \end{aligned}$$

где

$$q'^2 = k_0^2 \left(\frac{D_{\parallel}}{D_{\perp}} \Theta^2 \cos^2 \phi + \Theta^2 \sin^2 \phi \right).$$

$$M_{\alpha\beta}^{(C)}(\mathbf{k}^{(i)}, \mathbf{k}^{(s)}) = E_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(e)}(\mathbf{k}^{(s)}) \frac{1}{N} B_{\gamma\nu\mu'\delta'}(\mathbf{k} = 0) g_{\mu'\delta'} g_{\gamma'\nu'} B_{\gamma'\nu'\mu\delta}(\mathbf{k} = 0) E_{\mu\nu\alpha'\beta'}^{(e)}(\mathbf{k}^{(i)}) I_{\alpha'\beta'}^{(i)}.$$

$$M_{\alpha\beta}^{(L)}(\mathbf{k}^{(i)}, \mathbf{k}^{(s)}) = E_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(e)}(\mathbf{k}^{(s)}) \frac{1}{N} B_{\gamma\delta\mu'\delta'}(\mathbf{k} = 0) g_{\mu'\delta'} g_{\gamma'\nu'} B_{\gamma'\nu'\mu\nu}(\mathbf{k} = 0) E_{\mu\nu\alpha'\beta'}^{(e)}(\mathbf{k}^{(i)}) I_{\alpha'\beta'}^{(i)},$$

$$E_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(j)}(\mathbf{k}) = e_{\alpha}^{(j)}(\mathbf{k}) e_{\beta}^{(j)}(\mathbf{k}) e_{\gamma}^{(j)}(\mathbf{k}) e_{\delta}^{(j)}(\mathbf{k}).$$

$$I_{\alpha'\beta'}^{(i)} e^{i\mathbf{k}^{(i)} \cdot \mathbf{r}_3} = |E_0^{(i)}|^2 e_{\alpha'}^{(i)} e_{\beta'}^{(i)} e^{i\mathbf{k}^{(i)} \cdot \mathbf{r}_3}$$

$$\hat{g}(\mathbf{r}) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \text{Im} \langle \hat{G}^R \rangle(\mathbf{k}).$$

При получении формул (3.3) и (3.4) был сделан ряд приближений. При расчете вкладов лестничных и циклических диаграмм учитывался только один тип рассеяния, $(e) \rightarrow (e)$. Это приближение оправдано тем, что рассеяния типа $(o) \rightarrow (e)$ и $(e) \rightarrow (o)$ гораздо слабее. Для корреляционной функции флуктуаций тензора диэлектрической проницаемости $\hat{B}(\mathbf{r})$ при расчете лестничных и циклических диаграмм было использовано предположение о короткодействующем характере этой функции. Для простоты полагалось, что

$$\hat{B}(\mathbf{r}) = \hat{B}_0 \delta(\mathbf{r}), \quad (3.5)$$

где

$$\hat{B}_0 = \int \hat{B}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \hat{B}(\mathbf{k} = 0).$$

При этом все поляризационные множители, связанные с анизотропией были учтены последовательно. Такое приближение частично пренебрегает анизотропными свойствами рассеяния и является плохо контролируемым. Однако именно оно позволило просуммировать бесконечные ряды диаграмм.

3.2. Численное моделирование

При расчетах использовалась геометрия, приведенная на Рис. 3.2. Такая же геометрия использовалась в экспериментах [7, 8]. НЖК был ориентирован таким образом, чтобы оптическая ось была параллельна границе раздела сред. Считалось, что рассеивающая среда занимает полупространство $z > 0$, оптическая ось направлена по оси x , $\mathbf{n}^0 = (1, 0, 0)$.

Специфика расчета пика когерентного обратного рассеяния в нематических жидких кристаллах состоит в том, что нас интересуют рассеяния фотонов,

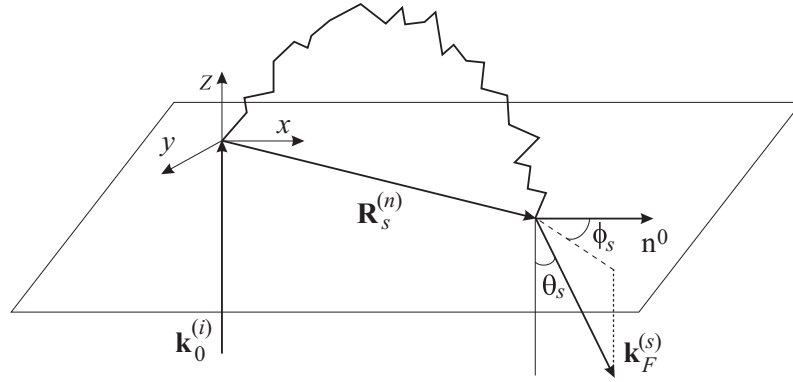


Рис. 3.2. Геометрия, используемая для расчета эффекта когерентного обратного рассеяния. Рассеивающая среда занимает полупространство $z > 0$, волна падает вдоль оси z . Рассеянное поле собирается под малым углом θ_s , отсчитываемым от направления, обратного направлению оси z . Директор $\mathbf{n}^0$ направлен вдоль оси x . Здесь ϕ_s — азимутальный угол, $\mathbf{R}_s^{(n)}$ — расстояние от точки влета фотона до точки вылета после n кратностей рассеяния, $\mathbf{k}_0^{(i)}$ — волновой вектор падающего фотона, $\mathbf{k}_F^{(s)}$ — волновой вектор вылетевшего из среды фотона.

вылетающих из среды в направлении близком к нормали, под очень малыми углами $\sim 10^{-4} \div 10^{-6}$ рад. Вероятность вылета фотона после многократного рассеяния в столь узком интервале углов очень мала. Поэтому численная процедура, основанная на простом подсчете фотонов в этом интервале углов, крайне неэффективна, и для решения этой задачи используется полуаналитический метод Монте-Карло [76]. Идея этого метода состоит в следующем. Учитывается вклад $\delta_n(\mathbf{k}_F^{(s)})$ каждого фотона в интенсивность на каждом акте рассеяния в направлении $\mathbf{k}_F^{(s)}$ в интересующем нас интервале углов $\theta_s < 10^{-4}$ рад

$$\delta_n(\mathbf{k}_F^{(s)}) = W_n p_{is}(\mathbf{k}^{(i)}, \mathbf{k}_F^{(s)}) \exp \left[-\frac{1}{l_s(\mathbf{k}_F^{(s)}) \cos \theta_s} z_n \right], \quad (3.6)$$

где n — кратность рассеяния, W_n — вес фотона, p_{is} — нормированная индикатриса однократного рассеяния, $\mathbf{k}_F^{(s)}$ — волновой вектор рассеяния, направленный в приемник под интересующим нас углом θ_s , z_n — расстояние от текущего положения фотона до границы. Угол θ_s отсчитывается от направления рассеяния строго назад $0 \leq \theta_s \leq \pi/2$. Формула (3.6) имеет простой физический смысл. Вклад фотона $\delta_n(\mathbf{k}_F^{(s)})$ представляет собой произведение вероятности W_n фо-

тону совершить n рассеяний, не вылетев из среды, плотности вероятности p_{is} иметь направление рассеяния $\mathbf{k}_F^{(s)}$ и экспоненциального множителя, имеющего смысл вероятности достичь границы, не испытав столкновений. Также следует учитывать, что фотон будет вносить вклад как в (o) , так и в (e) рассеяние.

Выполненные расчеты показали, что в нашей системе фотоны вылетают из среды в основном после небольшого числа рассеяний, $n \sim 10^2$. С другой стороны, существенный вклад в когерентное обратное рассеяние вносят фотоны, испытавшие очень большое число рассеяний, $n \sim 10^4 \div 10^5$. Для более эффективного учета таких фотонов мы использовали модифицированную процедуру моделирования так, чтобы фотоны не вылетали из среды [76]. При таком условии учитывается уменьшение вклада в интенсивности за счет веса W_n , а удержание фотонов в среде выполняется следующим образом. При разыгрывании текущего рассеяния в случае, если $k_z^{(s)} < 0$ (фотон летит к границе), длина пробега фотона разыгрывается в пределах от 0 до расстояния, которое пролетел бы фотон из данной точки в данном направлении до границы.

Вероятность фотона, находящегося на расстоянии z от границы и имеющего перед рассеянием волновой вектор $\mathbf{k}^{(i)}$, вылететь из среды на каждом акте рассеяния записывается в виде

$$\text{esc}(\mathbf{k}^{(i)}, z) = \sum_{s=o,e} \int_0^{\pi/2} \sin \theta_s d\theta_s \int_0^{2\pi} d\phi_s p_{is}(\mathbf{k}^{(i)}, \mathbf{k}^{(s)}) \exp \left[-\frac{1}{l_s(\mathbf{k}^{(s)})} \frac{z}{\cos \theta_s} \right], \quad (3.7)$$

где ϕ_s — азимутальный угол, отсчитываемый от оси x . Функцию $\text{esc}(\mathbf{k}^{(i)}, z)$ удобно рассчитать заранее в виде интерполяционной таблицы. Эта функция позволяет определить уменьшение веса фотона после очередного шага рассеяния

$$W_{n+1} = W_n \left(1 - \text{esc}(\mathbf{k}^{(i)}, z) \right), \quad W_1 = 1. \quad (3.8)$$

Выражение (3.8) фактически учитывает потерю интенсивности за счет вылета фотонов из среды.

Будем считать, что детектор, собирающий излучение, бесконечен и зани-

мает всю плоскость XY . Нас будет интересовать распределение выходящих из среды фотонов по углам θ_s и ϕ_s . Для каждого вылетевшего фотона мы будем запоминать углы вылета θ_s и ϕ_s , а также $\mathbf{R}_s^{(n)}$ — вектор, указывающий место вылета фотона из среды. Он лежит на поверхности среды, $R_{s,z}^{(n)} = 0$. Суммирование вкладов фотонов $\delta_n(\mathbf{k}_F^{(s)})$ (3.6) в направлении θ_s и ϕ_s определяет угловое распределение интенсивности в лестничном приближении.

В разделе 1.2 показано, что вклад циклических диаграмм может быть учтен при помощи разворота нижних линий лестничных диаграмм на π . Этот же подход можно использовать и в моделировании. Будем считать, что угол рассеяния θ_s является малым, таким, что $\frac{1}{2}(\mathbf{k}^{(i)} - \mathbf{k}^{(s)}) = \mathbf{k}^{(i)}$ и $\cos \theta_s \approx \cos \theta_i = 1$. Тогда в геометрии когерентного обратного рассеяния циклические и соответствующие им лестничные диаграммы отличаются на множитель

$$\exp\left(i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_s^{(n)} - \mathbf{R}_i)\right),$$

где вектор $\mathbf{R}_i$ указывает место падения фотонов на среду, $\mathbf{R}_i = (0, 0, 0)$, а $\mathbf{q}$ — вектор рассеяния, $\mathbf{q} = \mathbf{k}_F^{(s)} - \mathbf{k}_0^{(i)}$. С учетом трансляционной инвариантности системы по отношению к плоскости (x, y) вклад циклических диаграмм получается умножением $\delta_n(\mathbf{k}_F^{(s)})$ на фазовый множитель $\cos[\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_s^{(n)} - \mathbf{R}_i)]$, [69, 77]. Суммируя по всем фотонам для каждой пары углов θ_s и ϕ_s , получаем угловую зависимость относительной интенсивности рассеянного излучения [11, 12]

$$J(\theta_s, \phi_s) = \frac{J_C + J_L}{J_L}, \quad (3.9)$$

где J_L и J_C вклады лестничных и циклических диаграмм

$$J_L = \sum_{a=1}^A \sum_{n=1}^N \delta_n(\mathbf{k}_F^{(s)}), \quad (3.10)$$

$$J_C = \sum_{a=1}^A \sum_{n=2}^N \delta_n(\mathbf{k}_F^{(s)}) \cos[\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_s^{(n)}]. \quad (3.11)$$

Напомним, что циклические диаграммы формируются, начиная с двукратного рассеяния. Здесь суммирование по $a = 1, 2, \dots, A$ представляет собой сумму по

всем фотонам, участвующим в моделировании. Суммирование по n представляет собой суммирование по кратностям рассеяния. При моделировании мы ограничились учетом $N = 10^5$ кратностей рассеяния. Кроме того, если на какой-то кратности рассеяния вклад δ_n становится очень малым $\sim 10^{-8}$, то более высокие кратности для этого фотона не учитывались.

Заметим, что описанный способ моделирования не учитывает многократное отражение света от границы. Для этого необходимо использовать более сложный вид функции Грина электромагнитного поля. При этом для рассеяний, происходящих вблизи границы, изменится и выражение для индикатрисы (1.9).

Помимо исследования, изложенного в диссертации, моделирование когерентного обратного рассеяния света в НЖК проводилось в работах [30, 43]. Для моделирования однократного рассеяния в [30] в качестве индикатрисы использовались фазовые функции Хеньи-Гринстайна и Орнштейна-Цернике, а в [43] — индикатриса (1.9) в одноконстантном приближении $K_{11} = K_{22} = K_{33}$. При этом учитывалась зависимость длины экстинкции от угла между $\mathbf{k}^{(i)}$ и директором. Для расчета пика интенсивности применялся полуаналитический метод, отличающийся от описанного выше. Учитывались вклады, которые могли бы вносить фотоны на каждом акте рассеяния. Однако, для фотонов не вводилось понятие веса и не накладывались ограничения на вылет из рассеивающей среды. Такой подход менее аккуратно описывает рассеяния высоких кратностей.

3.3. Результаты моделирования

Угловая зависимость интенсивности рассеянного излучения была рассчитана по формуле (3.9). На Рис. 3.3 приведены зависимости интенсивности от угла θ_s для двух сечений пика при $\phi_s = \pi/2$ и $\phi_s = 0$, кривые 3 и 4. Видно, что существует заметная анизотропия рассеяния.

Расчеты проводились для жидкого кристалла 5CB, исследованного в ра-

ботах [7, 8], с параметрами: $K_{11} = 0.79K_{33}$, $K_{22} = 0.43K_{33}$, $K_{33} = 6.1 \cdot 10^{-7}$ дин, $H = 0.5$ Тл, $\chi_a = 1.38 \cdot 10^{-7}$, $\varepsilon_a = 0.8$, $\varepsilon_{\perp} = 2.2$, $\lambda = 4.88 \cdot 10^{-5}$ см, $T = 301$ К. Экспериментальный образец представлял собой цилиндр диаметром $d = 8$ см и высотой $h = 4$ см. Экстинкция для такого жидкого кристалла приведена на Рис. 1.1, кривая 2 для необыкновенного луча и кривая 4 для обыкновенного. Из рисунка видно, что длина пробега фотона порядка $l \sim 2 \cdot 10^{-2}$ см, что значительно меньше размеров образца. Поэтому при моделировании этого эксперимента вполне оправдано приближение полубесконечной среды. На Рис. 3.3 приведены также результаты аналитических расчетов, кривые 1,2 [29] и экспериментальные данные [7, 8], кривые 5,6. В выбранной геометрии отсутствует вклад однократного рассеяния в направлении строго назад. В этом случае вклады лестничных и циклических диаграмм в этом направлении становятся одинаковыми и относительная высота пика должна равняться 2. Именно такой результат и был получен при численном моделировании. На эксперименте [7, 8] эта высота была порядка 1.6. По нашему мнению это может быть обусловлено конечной шириной аппаратной функции прибора. Из Рис. 3.3 видно, что результаты аналитических расчетов 1, 2 предсказывают другую ширину пика, чем дают численные расчеты. По-видимому, это связано с тем, что при суммировании диаграммного ряда был сделан целый ряд допущений. Принималось во внимание только рассеяние необыкновенного луча в необыкновенный. Кроме того было использовано приближение типа диффузионного [2] и использовалась упрощенная модель для парной корреляционной функции. Для того, чтобы оценить допустимость сделанных приближений, мы провели моделирование с учетом только $(e) \rightarrow (e)$ рассеяния. На Рис. 3.4 видно, что при учете только необыкновенного луча моделирование предсказывает более узкий пик с шириной, близкой к полученной экспериментально. Это представляется естественным, поскольку, как видно из Рис. 1.1, обыкновенный луч имеет меньший коэффициент экстинкции, чем необыкновенный, т.е. для случая только $(e) \rightarrow (e)$ рассеяния экстинкция больше, чем для случая, когда учтены все ка-

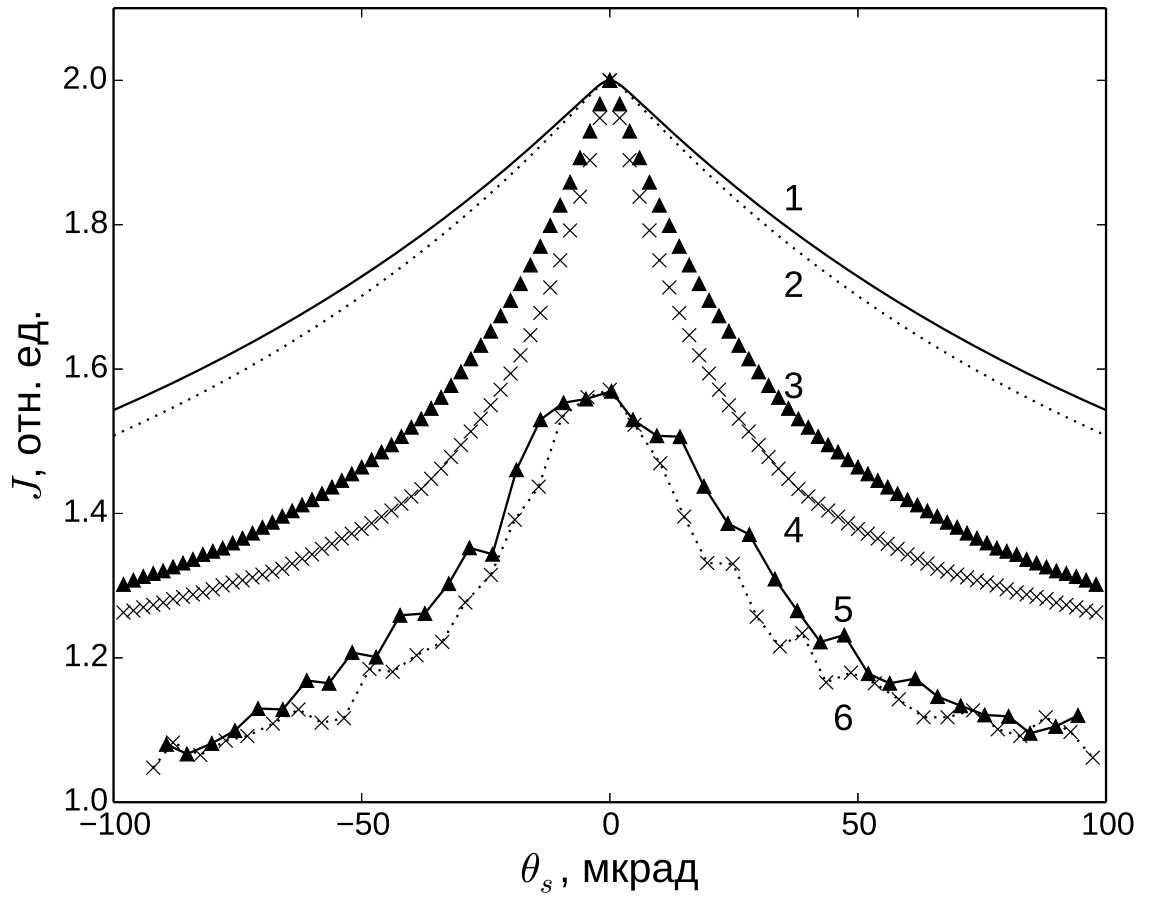


Рис. 3.3. Сечения пика когерентного обратного рассеяния. Кривые (1) и (2) получены аналитически [29], кривые (3) и (4) – результаты моделирования, на кривых (5) и (6) представлены экспериментальные данные [7, 8]. Кривые (1), (3) и (5) соответствуют углу $\phi_s = 0$, кривые (2), (4) и (6) – углу $\phi_s = \pi/2$.

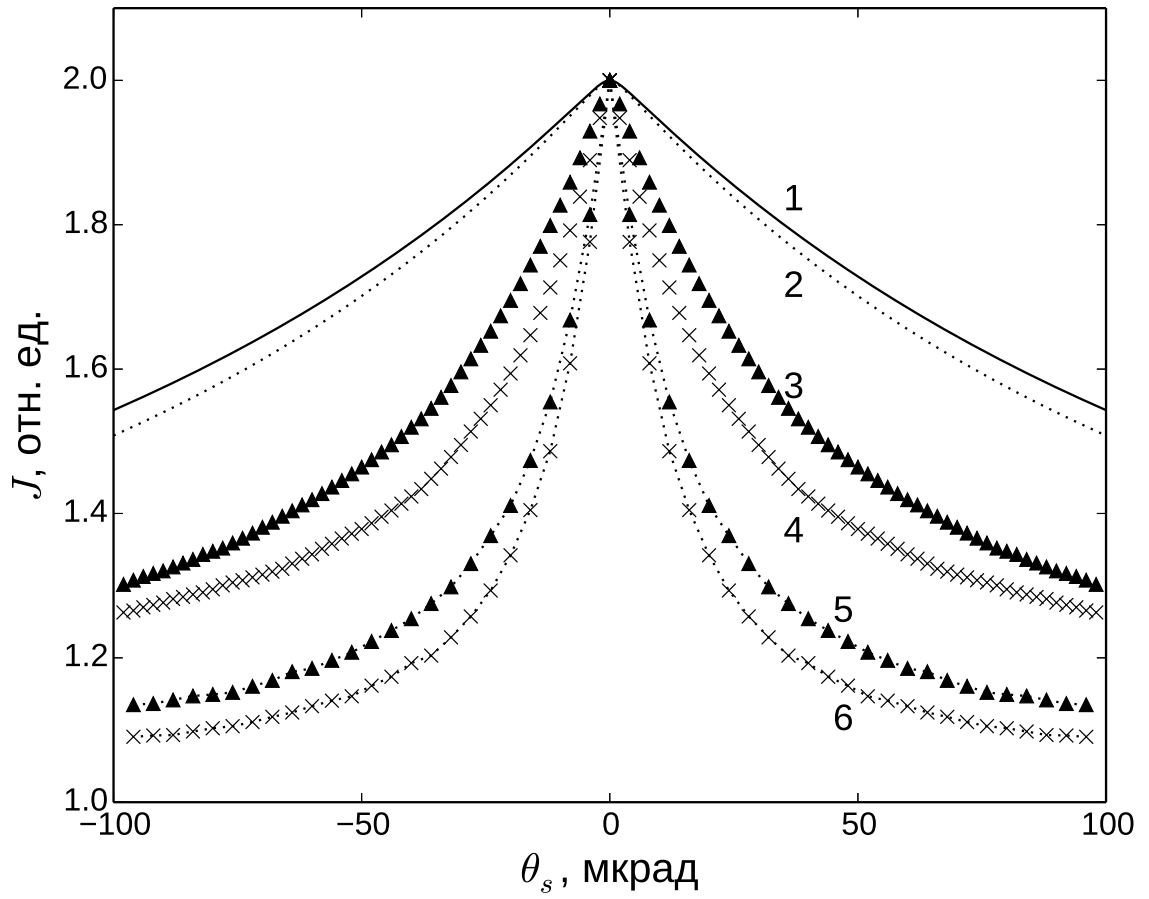


Рис. 3.4. Сечения пика когерентного обратного рассеяния. Кривые (1) и (2) получены аналитически [29], кривые (3) и (4) – результаты моделирования, на кривых (5) и (6) представлены результаты моделирования с учетом только $(e) \rightarrow (e)$ рассеяния. Кривые (1), (3) и (5) соответствуют углу $\phi_s = 0$, кривые (2), (4) и (6) – углу $\phi_s = \pi/2$.

налы рассеяния. С другой стороны, это означает, что при учете обыкновенного луча в аналитической работе [29] пик должен был получиться еще шире.

Для сравнения результатов моделирования с экспериментальными данными была выполнена свертка рассчитанных данных с аппаратной функцией лоренцовского типа

$$G(\theta) = \frac{1}{\pi} \frac{\theta_0}{\theta^2 + \theta_0^2}, \quad (3.12)$$

где в качестве θ_0 было взято значение $\theta_0 = 20$ мкрад. На Рис. 3.5 показаны экспериментальные кривые из работы [7, 8] и рассчитанная интенсивность (3.9), свернутая с аппаратной функцией $G(\theta)$. Видно, что результаты моделирования неплохо согласуются с экспериментальными данными. Заметим, что единственным подгоночным параметром является выбор аппаратной функции.

Рассчитанная анизотропия пика обратного рассеяния приведена на Рис. 3.6. Здесь изображены сечения пика на разных высотах: 1.7, 1.6, 1.5, 1.4. Анизотропия пика равна 1.46. В эксперименте анизотропия составляла 1.17 ± 0.04 .

Выполненное численное моделирование позволяет извлекать детали процесса, которые трудно получить как экспериментально, так и теоретически. В частности на Рис. 3.7 показано как формируется пик когерентного обратного рассеяния при учете различного числа кратностей рассеяния. Все кривые отнормированы на интенсивность, даваемую суммой лестничных диаграмм от всех, $N = 10^5$, кратностей рассеяния. Видно, что заметный вклад вносят низшие кратности рассеяния, для которых точность описания в рамках диффузионного приближения, как видно из главы 2, недостаточна. Это означает, что аналитические расчеты, выполненные в диффузионном приближении, заведомо не могут претендовать на описание экспериментальных кривых с высокой точностью.

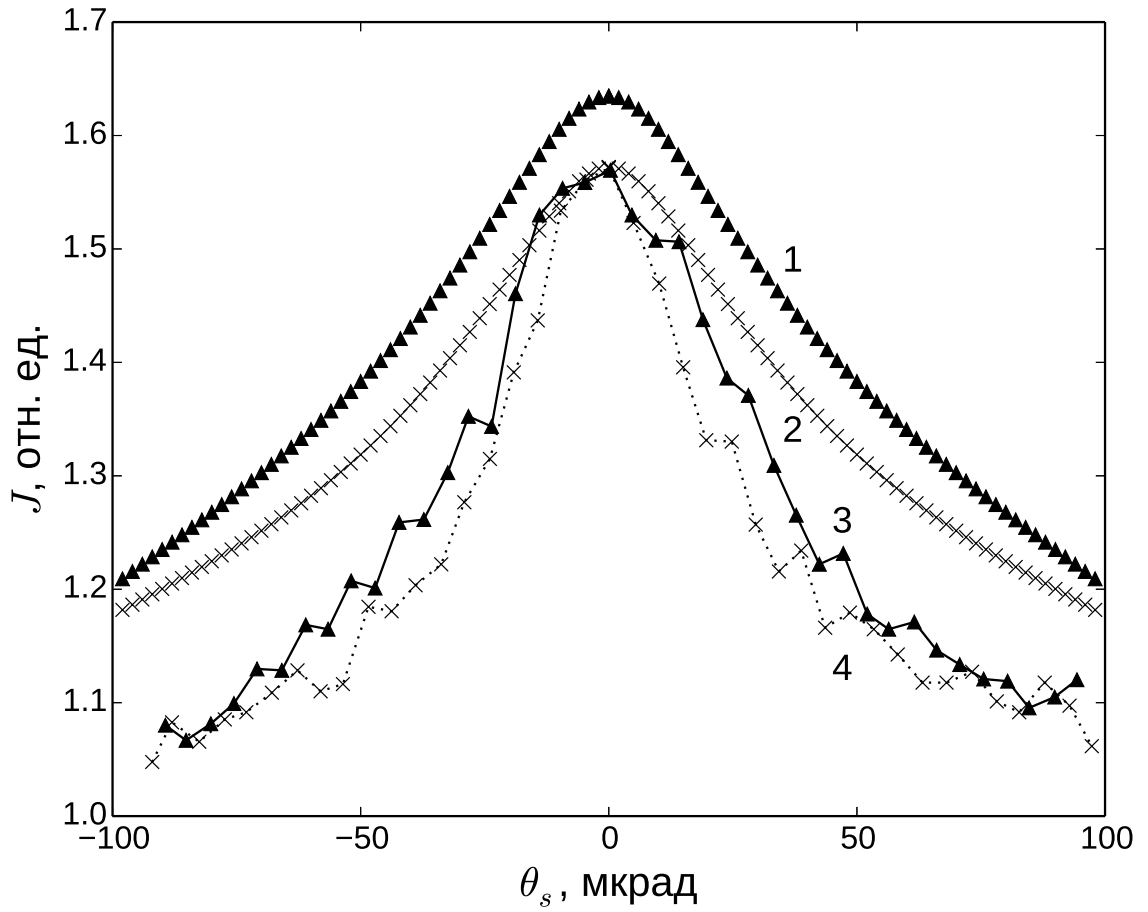


Рис. 3.5. Сопоставление результатов численных расчетов (кривые 1, 2) с результатами эксперимента [7, 8]. Для кривых 1 и 3 $\phi_s = \pi/2$, для кривых 2 и 4 $\phi_s = 0$. Кривые 1 и 2 получены из кривых 3 и 4 рисунка 3.3 путем свертки с аппаратной функцией 3.12.

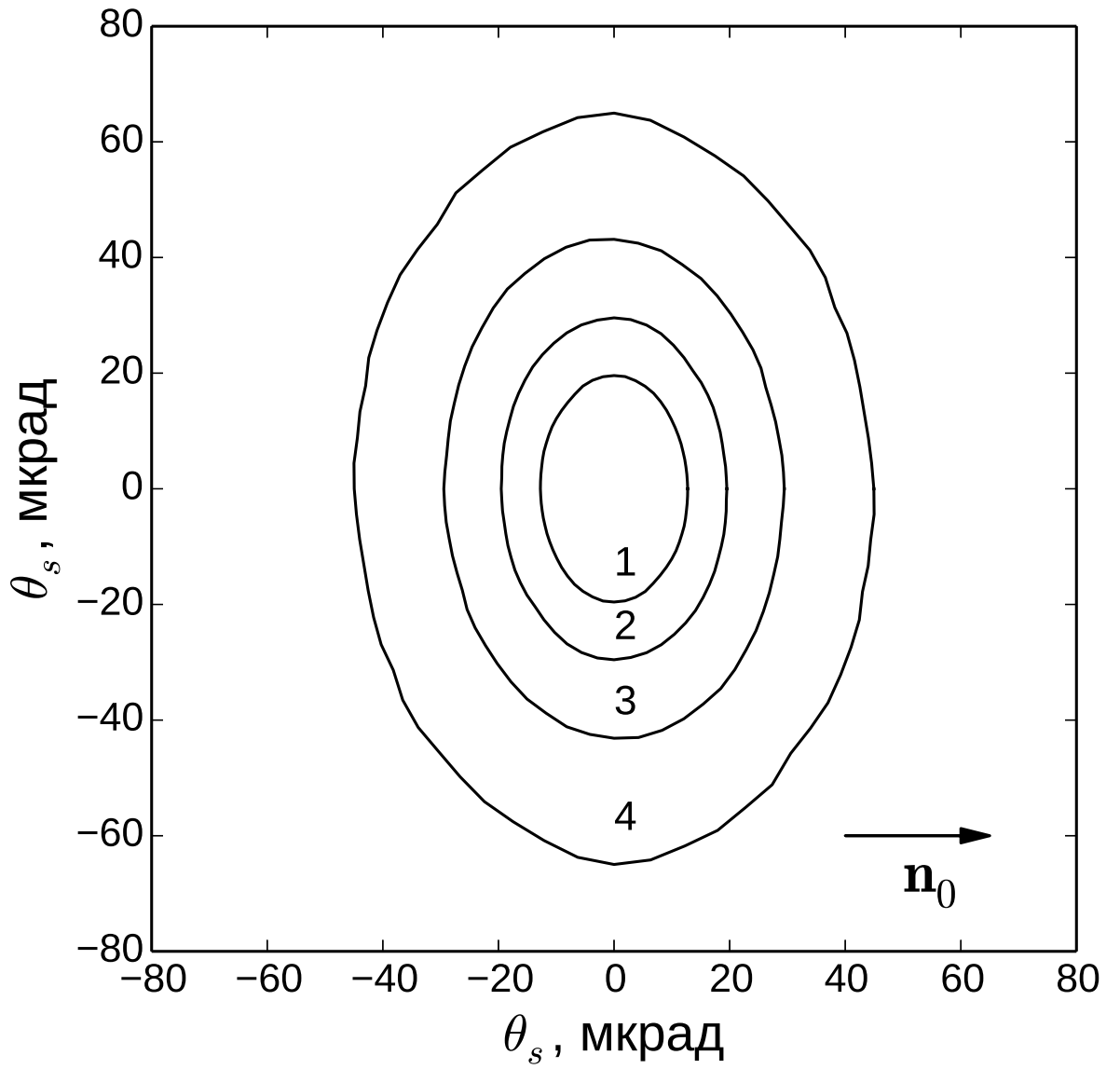


Рис. 3.6. Сечения пика когерентного обратного рассеяния, полученные путем численного моделирования, в полярных координатах (θ_s, ϕ_s) . Сечения плоскостями, перпендикулярными оси z построены на уровнях $J = 1.7$ (1), 1.6 (2), 1.5 (3) и 1.4 (4).

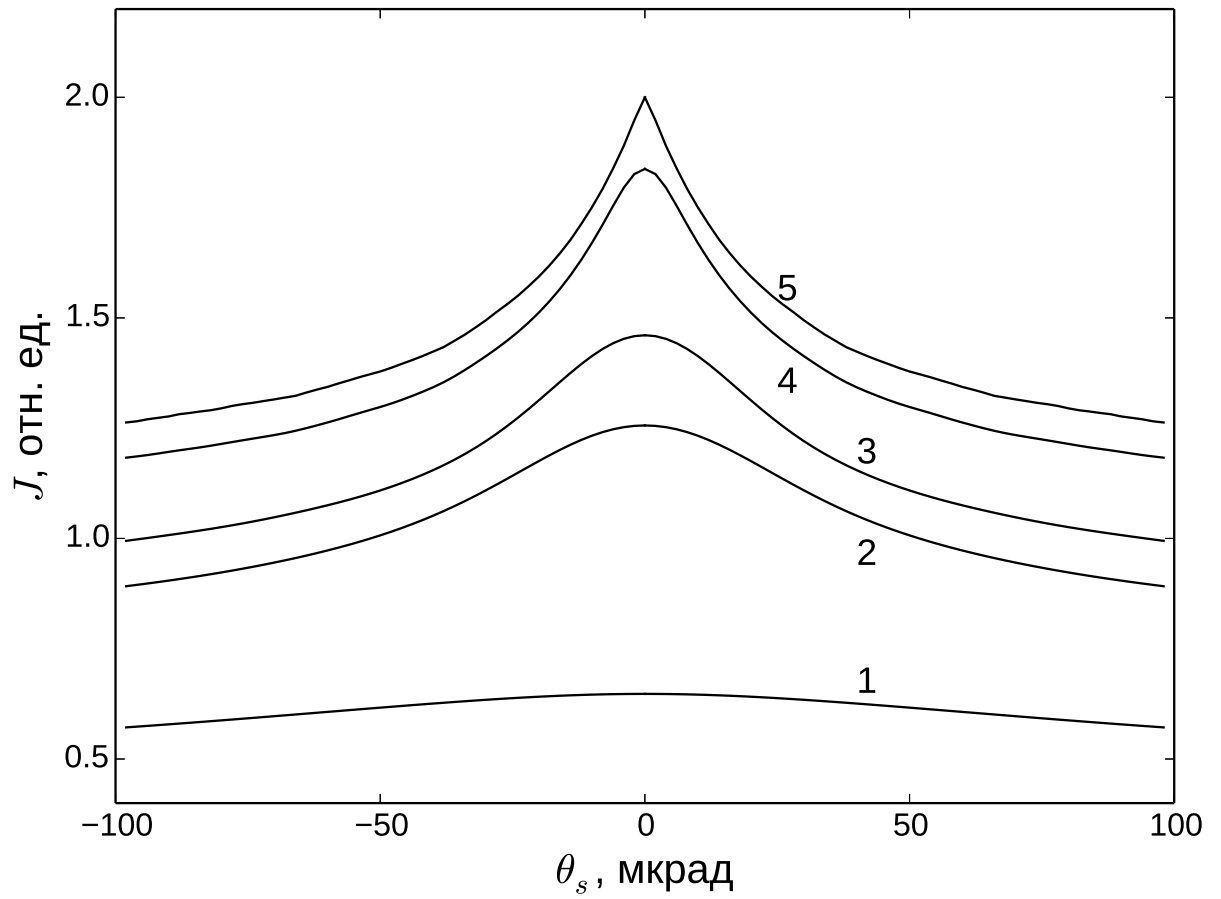


Рис. 3.7. Вклад n первых кратностей рассеяния в формирование пика: (1) $n = 10$, (2) $n = 50$, (3) $n = 10^2$, (4) $n = 10^3$, and (5) $n = 10^5$. Все кривые нормированы на сумму лестничных диаграмм, учитывающую $n = 10^5$ рассеяний.

3.4. Выводы

Мы провели моделирование когерентного обратного рассеяния света в НЖК. Впервые такое моделирование проводилось не в одноконстантном приближении. Для того, чтобы учесть излучение, попадающее в малый телесный угол шириной ≈ 100 мкрад, использовался полуаналитический метод. Моделирование предсказывает близкие к экспериментальной ширину и анизотропию пика. Отличие пика от полученного в эксперименте обусловлено аппаратной функцией экспериментального оборудования. Полученная форма пика сравнивалась с результатами приближенных аналитических вычислений. Оказалось, что моделирование лучше описывает данные эксперимента. При этом, по-видимому, наиболее грубым и сильно повлиявшим на результат аналитическим приближением является упрощенный вид корреляционной функции флуктуаций диэлектрической проницаемости, который и позволил в теоретической работе [29] просуммировать бесконечные ряды лестничных и циклических диаграмм. Также при моделировании проведен анализ вкладов различных кратностей в пик когерентного обратного рассеяния. Оказалось, что низкие кратности (~ 10 рассеяний) вносят заметный вклад в пик. Как показано в главе 2, эти кратности рассеяния не могут быть описаны в диффузионном приближении.

Заключение

Целью диссертации было проведение моделирования многократного рассеяния света в одноосном нематическом жидком кристалле, не использующего упрощающих предположений о свойствах жидкого кристалла и сравнение результатов моделирования с известными данными о диффузии и когерентном обратном рассеянии. Для этого автором было предложено обобщение стандартной схемы моделирования многократного рассеяния как случайного блуждания фотонов на случай одноосной среды с произвольной достаточно гладкой индикатрисой однократного рассеяния. Предложенный подход может быть использован не только для описания рассеяния света в НЖК, но и в задачах океанологии, физики атмосферы, биофизики, медицинской диагностики и других.

При помощи моделирования была исследована диффузия фотонов в НЖК, ориентированном внешним магнитным полем. Использованный метод позволил рассмотреть такие особенности многократного рассеяния света, которые чрезвычайно трудно проанализировать аналитически. Это, прежде всего, касается возможности изучить переходную область между описанием в виде анализа вкладов рассеяний различных кратностей и областью, где рассеяния описывается как диффузия излучения в анизотропной среде.

При помощи моделирования для параметров, близких к экспериментальным, были рассчитаны значения коэффициентов анизотропной диффузии. Впервые это было сделано с учетом различия между модулями Франка $K_{||}$, что позволило провести прямое сравнение результатов моделирования, экспериментов и приближенных аналитических расчетов. Оказалось, что результаты моделирования согласуются с экспериментальными данными и результатами аналитических приближений.

Моделирование предсказывает близкие к аналитическим значения $D_{\perp}$, а значения $D_{||}$ получаются больше, чем в теории. При этом, фактически, и мо-

делирование, и аналитические расчеты соответствуют решению одного и того же уравнения Бете–Солпитера. Вероятно, это связано с тем, что, в отличие от приближенных аналитических расчетов [2], моделирование предсказывает немонотонную зависимость коэффициентов диффузии от напряженности магнитного поля. Для того, чтобы выяснить возможные причины немонотонного поведения, мы последовательно упрощали использующуюся в моделировании модель жидкого кристалла. По-видимому, немонотонная зависимость является следствием оптической анизотропии НЖК. Вероятно, такой вид зависимости может быть получен и при помощи аналитического подхода [2] при учете всех собственных значений интегрального оператора уравнения Бете–Солпитера.

Была исследована зависимость коэффициентов диффузии от длины волны падающего света. Оказалось, что эта зависимость имеет простой вид. При этом в оптическом диапазоне коэффициенты диффузии меняются приблизительно в два раза, что означает, что эффектом нельзя пренебрегать при расчетах.

Также мы моделировали когерентное обратное рассеяние. Для решения этой задачи был использован полуаналитический метод [76], что позволило рассчитать интенсивность излучения, попадающего в интересующий нас малый телесный угол с раствором ~ 100 мкрад. Был получен пик когерентного обратного рассеяния. Ширина и форма этого пика согласуются с экспериментальными. Отличие между результатами моделирования и экспериментальными данными, по-видимому, обусловлено аппаратной функцией использовавшегося при эксперименте оборудования. Результаты моделирования оказались гораздо ближе к экспериментальным данным, чем аналитические расчеты, для проведения которых приходится делать целый ряд упрощающих предположений.

Автор благодарит Елену Валентиновну Аксёнову и Вадима Петровича Романова за помощь, поддержку, терпение и оптимизм.

Литература

1. Stark H., Kao M. H., Jester K. A. et al. Light diffusion and diffusing-wave spectroscopy in nematic liquid crystals // [J. Opt. Soc. Am. A](#). 1997. — Jan. Vol. 14, no. 1. P. 156–178.
2. Stark H., Lubensky T. C. Multiple light scattering in anisotropic random media // [Phys. Rev. E](#). 1997. — Jan. Vol. 55. P. 514–533.
3. van Tiggelen B. A., Maynard R., Heiderich A. Anisotropic Light Diffusion in Oriented Nematic Liquid Crystals // [Phys. Rev. Lett.](#) 1996. — Jul. Vol. 77. P. 639–642.
4. van Tiggelen B. A., Heiderich A., Maynard R. Light Diffusion in Oriented Nematic Liquid Crystals // [Molecular Crystals and Liquid Crystals Science and Technology. Section A. Molecular Crystals and Liquid Crystals](#). 1997. Vol. 293, no. 1. P. 205–238.
5. Anne Heiderich, Roger Maynard, Bart A. van Tiggelen. Multiple Light Scattering in Ordered Nematic Liquid Crystals // [J. Phys. II France](#). 1997. Vol. 7, no. 5. P. 765–792.
6. Kuzmin L. V., Romanov V. P., Zubkov L. A. Coherent backscattering from anisotropic scatterers // [Phys. Rev. E](#). 1996. — Dec. Vol. 54. P. 6798–6801.
7. Sapienza R., Wiersma D. S., Delande D. Anisotropic Weak Localization of Light: From Isotropic Scattering to Ordered Nematic Liquid Crystals // [Molecular Crystals and Liquid Crystals](#). 2005. Vol. 429, no. 1. P. 193–212.
8. Sapienza R., Mujumdar S., Cheung C. et al. Anisotropic Weak Localization of Light // [Phys. Rev. Lett.](#) 2004. — Jan. Vol. 92. P. 033903.
9. van Tiggelen A., Skipetrov S. Wave Scattering in Complex Media: From Theory

to Applications. NATO science series: Mathematics, physics, and chemistry. Springer, 2003. ISBN: [9781402013942](#).

10. Stephen M. J. Rayleigh Scattering and Weak Localization // [Phys. Rev. Lett.](#) 1986. — Apr. Vol. 56. P. 1809–1810.
11. Stephen M. J., Cwilich G. Rayleigh scattering and weak localization: Effects of polarization // [Phys. Rev. B.](#) 1986. — Dec. Vol. 34. P. 7564–7572.
12. MacKintosh F. C., John S. Coherent backscattering of light in the presence of time-reversal-noninvariant and parity-nonconserving media // [Phys. Rev. B.](#) 1988. — Feb. Vol. 37. P. 1884–1897.
13. Furutsu K. Boundary conditions of the diffusion equation and applications // [Phys. Rev. A.](#) 1989. — Feb. Vol. 39. P. 1386–1401.
14. Yoo K. M., Liu F., Alfano R. R. When does the diffusion approximation fail to describe photon transport in random media? // [Phys. Rev. Lett.](#) 1990. — May. Vol. 64. P. 2647–2650.
15. Zhang Z. Q., Jones I. P., Schriemer H. P. et al. Wave transport in random media: The ballistic to diffusive transition // [Phys. Rev. E.](#) 1999. — Oct. Vol. 60. P. 4843–4850.
16. Zhang X., Zhang Z.-Q. Wave transport through thin slabs of random media with internal reflection: Ballistic to diffusive transition // [Phys. Rev. E.](#) 2002. — Jul. Vol. 66. P. 016612.
17. Gerritsen S., Bauer G. E. W. Diffusion of monochromatic classical waves // [Phys. Rev. E.](#) 2006. — Jan. Vol. 73. P. 016618.
18. Genack A. Z., Drake J. M. Relationship between Optical Intensity, Fluctuations and Pulse Propagation in Random Media // [EPL \(Europhysics Letters\)](#). 1990. Vol. 11, no. 4. P. 331.

19. Durduran T., Yodh A. G., Chance B., Boas D. A. Does the photon-diffusion coefficient depend on absorption? // [J. Opt. Soc. Am. A](#). 1997. — Dec. Vol. 14, no. 12. P. 3358–3365.
20. Durian D. J. The diffusion coefficient depends on absorption // [Opt. Lett.](#) 1998. — Oct. Vol. 23, no. 19. P. 1502–1504.
21. Aronson R., Corngold N. Photon diffusion coefficient in an absorbing medium // [J. Opt. Soc. Am. A](#). 1999. — May. Vol. 16, no. 5. P. 1066–1071.
22. Wiersma D. S., Muzzi A., Colocci M., Righini R. Time-Resolved Anisotropic Multiple Light Scattering in Nematic Liquid Crystals // [Phys. Rev. Lett.](#) 1999. — Nov. Vol. 83. P. 4321–4324.
23. Wiersma D. S., Muzzi A., Colocci M., Righini R. Time-resolved experiments on light diffusion in anisotropic random media // [Phys. Rev. E](#). 2000. — Nov. Vol. 62. P. 6681–6687.
24. Mertelj A., Čopič M. Anisotropic diffusion of light in polymer dispersed liquid crystals // [Phys. Rev. E](#). 2007. — Jan. Vol. 75. P. 011705.
25. Mahan G. Many-Particle Physics. New York: Plenum Press, 1981. ISBN: [0306404117](#).
26. Albada M. P. V., Lagendijk A. Observation of Weak Localization of Light in a Random Medium // [Phys. Rev. Lett.](#) 1985. — Dec. Vol. 55. P. 2692–2695.
27. Wolf P.-E., Maret G. Weak Localization and Coherent Backscattering of Photons in Disordered Media // [Phys. Rev. Lett.](#) 1985. — Dec. Vol. 55. P. 2696–2699.
28. Кузьмин В. Л., Романов В. П. Когерентные эффекты при рассеянии света в неупорядоченных системах // [Успехи физических наук](#). 1996. Т. 166, № 3. С. 247–278.

29. Аксенова Е. В., Кузьмин В. Л., Романов В. П. Когерентное обратное рассеяние света в нематических жидких кристаллах // ЖЭТФ. 2009. Т. 135, № 3. С. 587–607.
30. Кузьмин В. Л., Вальков А. Ю. Когерентное обратное рассеяние в нематике во внешнем магнитном поле // Оптика и спектроскопия. 2011. Т. 111, № 9. С. 490–501.
31. Аксенова Е. В., Кокорин Д. И., Романов В. П. Моделирование эффекта когерентного обратного рассеяния света в нематических жидких кристаллах // ЖЭТФ. 2012. Т. 142, № 8. С. 376–385.
32. Аксенова Е. В., Кокорин Д. И., Романов В. П. Особенности диффузии света в нематических жидких кристаллах // Оптика и спектроскопия. 2013. Т. 115, № 1. С. 128–135.
33. Aksenova E. V., Kokorin D. I., Romanov V. P. Simulation of radiation transfer and coherent backscattering in nematic liquid crystals // [Phys. Rev. E](#). 2014. — May. Vol. 89. P. 052506.
34. De Gennes P.-G., Prost J. The physics of liquid crystals. Oxford: Clarendon press, 1993. Vol. 23.
35. Lax M., Nelson D. Proceedings of the III Rochester Conference on Coherent and Quantum Optics. 1973.
36. Lax M., Nelson D. In Theory of Light Scattering in Condensed Media. 1976.
37. Вальков А. Ю., Романов В. П. Особенности распространения и рассеяния света в нематических жидких кристаллах // ЖЭТФ. 1986. Т. 90. С. 1264–1274.
38. Barabanenkov Y. N., Kravtsov Y. A., Ozrin V., Saichev A. II Enhanced Backscattering in Optics // Progress in optics. 1991. Vol. 29. P. 65–197.

39. Wang L., Jacques S. L., Zheng L. MCML—Monte Carlo modeling of light transport in multi-layered tissues // Computer methods and programs in biomedicine. 1995. Vol. 47, no. 2. P. 131–146.
40. Скипетров С. Е., Чесноков С. С. Анализ методом Монте-Карло применимости диффузионного приближения для анализа динамического многократного рассеяния света в случайно-неоднородных средах // Квант. электрон. 1998. Т. 25, № 8. С. 753–757.
41. Meglinski I. V., Kuzmin V. L., Churmakov D. Y., Greenhalgh D. A. Monte Carlo simulation of coherent effects in multiple scattering // [Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Science](#). 2005. Vol. 461, no. 2053. P. 43–53.
42. Margallo-Balbfßs E., French P. J. Shape based Monte Carlo code for light transport in complex heterogeneous tissues // Optics express. 2007. Vol. 15, no. 21. P. 14086–14098.
43. Кузьмин В. Л. Анизотропия диффузии света в нематике // [Письма в ЖЭТФ](#). 2013. Т. 98, № 4. С. 231–236.
44. Henyey L. G., Greenstein J. L. Diffuse radiation in the galaxy // The Astrophysical Journal. 1941. Vol. 93. P. 70–83.
45. Cornette W. M., Shanks J. G. Physically reasonable analytic expression for the single-scattering phase function // Applied optics. 1992. Vol. 31, no. 16. P. 3152–3160.
46. Соболев И. М. Численные методы Монте-Карло. Москва: Наука, 1973.
47. Alerstam E., Svensson T., Andersson-Engels S. Parallel computing with graphics processing units for high-speed Monte Carlo simulation of photon migration // [Journal of Biomedical Optics](#). 2008. Vol. 13, no. 6. P. 060504–060504–3.

48. Fang Q., Boas D. A. Monte Carlo simulation of photon migration in 3D turbid media accelerated by graphics processing units // [Opt. Express](#). 2009. — Oct. Vol. 17, no. 22. P. 20178–20190.
49. Ren N., Liang J., Qu X. et al. GPU-based Monte Carlo simulation for light propagation in complex heterogeneous tissues // [Opt. Express](#). 2010. — Mar. Vol. 18, no. 7. P. 6811–6823.
50. Doronin A., Meglinski I. Online object oriented Monte Carlo computational tool for the needs of biomedical optics // [Biomed. Opt. Express](#). 2011. — Sep. Vol. 2, no. 9. P. 2461–2469.
51. Haltrin V. I. Analytical approximations to seawater optical phase functions of scattering // Optical Science and Technology, the SPIE 49th Annual Meeting / International Society for Optics and Photonics. 2004. P. 356–363.
52. Freda W., Król T., Martynov O. et al. Measurements of Scattering Function of sea water in Southern Baltic // The European Physical Journal-Special Topics. 2007. Vol. 144, no. 1. P. 147–154.
53. Brown O. B., Gordon H. R. Two component Mie scattering models of Sargasso Sea particles // Applied optics. 1973. Vol. 12, no. 10. P. 2461–2465.
54. Otremba Z. Oil droplets as light absorbents in seawater // Optics express. 2007. Vol. 15, no. 14. P. 8592–8597.
55. Otremba Z., Piskozub J. Polarized phase functions in oil-in-water emulsion // Optica Applicata. 2009. Vol. 39, no. 1. P. 129.
56. Gayet J.-F., Mioche G., Bugliaro L. et al. On the observation of unusual high concentration of small chain-like aggregate ice crystals and large ice water contents near the top of a deep convective cloud during the CIRCLE-2 experiment // Atmospheric Chemistry and Physics. 2012. Vol. 12, no. 2. P. 727–744.

57. Baran A., Gayet J.-F., Shcherbakov V. On the interpretation of an unusual in-situ measured ice crystal scattering phase function // *Atmospheric Chemistry and Physics*. 2012. Vol. 12, no. 19. P. 9355–9364.
58. Ulanowski Z., Hesse E., Kaye P. H., Baran A. J. Light scattering by complex ice-analogue crystals // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 2006. Vol. 100, no. 1. P. 382–392.
59. Hammer M., Yaroslavsky A. N., Schweitzer D. A scattering phase function for blood with physiological haematocrit // *Physics in medicine and biology*. 2001. Vol. 46, no. 3. P. N65.
60. Binzoni T., Leung T., Gandjbakhche A. et al. The use of the Henyey–Greenstein phase function in Monte Carlo simulations in biomedical optics // *Physics in medicine and biology*. 2006. Vol. 51, no. 17. P. N313.
61. Chicea D., Turcu I. Testing a new multiple light scattering phase function using RWMCS // *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials*. 2006. Vol. 8, no. 4. P. 1516.
62. Lu B., Shuang-Qing T., Zhen-Sen W. et al. Study of random sample scattering phase functions of polydisperse atmospheric aerosol in ultraviolet band. 2010.
63. Bai L., Xie P.-h., Wang S.-m. et al. Study on phase function in Monte Carlo transmission characteristics of poly-disperse aerosol // *Optical Engineering*. 2011. Vol. 50, no. 1. P. 016002–016002.
64. Setijadi E., Matsushima A., Tanaka N., Hendrantoro G. Effect of temperature and multiple scattering on rain attenuation of electromagnetic waves by a simple spherical model // *Progress In Electromagnetics Research*. 2009. Vol. 99. P. 339–354.

65. Press W. H. Numerical recipes 3rd edition: The art of scientific computing. Cambridge university press, 2007.
66. Fuchs H., Kedem Z. M., Naylor B. F. On Visible Surface Generation by a Priori Tree Structures // [SIGGRAPH Comput. Graph.](#) 1980. Vol. 14, no. 3. P. 124–133.
67. Ishimaru A. Wave Propagation and Scattering in Random Media. 1978.
68. Madhusudana N., Pratibha R. Elasticity and orientational order in some cyanobiphenyls: Part IV. Reanalysis of the data // *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. 1982. Vol. 89. P. 249–257.
69. Pine, D.J., Weitz, D.A., Zhu, J.X., Herbolzheimer, E. Diffusing-wave spectroscopy: dynamic light scattering in the multiple scattering limit // [J. Phys. France](#). 1990. Vol. 51, no. 18. P. 2101–2127.
70. Bradshaw M., Raynes E., Bunning J., Faber T. The Frank constants of some nematic liquid crystals // *Journal de Physique*. 1985. Vol. 46, no. 9. P. 1513–1520.
71. van Tiggelen B., Stark H. Nematic liquid crystals as a new challenge for radiative transfer // *Reviews of Modern Physics*. 2000. Vol. 72, no. 4. P. 1017.
72. Binnemans K., Galyametdinov Y. G., Van Deun R. et al. Rare-earth-containing magnetic liquid crystals // *Journal of the American Chemical Society*. 2000. Vol. 122, no. 18. P. 4335–4344.
73. Galyametdinov Y. G., Haase W., Goderis B. et al. Magnetic alignment study of rare-earth-containing liquid crystals // *The Journal of Physical Chemistry B*. 2007. Vol. 111, no. 50. P. 13881–13885.
74. Challa P. K., Curtiss O., Williams J. C. et al. Light scattering from liquid crystal director fluctuations in steady magnetic fields up to 25 tesla // [Phys. Rev. E](#). 2012. — Jul. Vol. 86. P. 011708.

- 75. Akkermans E., Wolf P., Maynard R. Coherent backscattering of light by disordered media: Analysis of the peak line shape // Physical review letters. 1986. Vol. 56, no. 14. P. 1471.
- 76. Tinetti E., Avrillier S., Tualle J. M. Fast semianalytical Monte Carlo simulation for time-resolved light propagation in turbid media // JOSA A. 1996. Vol. 13, no. 9. P. 1903–1915.
- 77. Maret G., Wolf P. Multiple light scattering from disordered media. The effect of Brownian motion of scatterers // Zeitschrift für Physik B Condensed Matter. 1987. Vol. 65, no. 4. P. 409–413.