

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭФФЕКТА КОГЕРЕНТНОГО ОБРАТНОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА В НЕМАТИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ

*Е. В. Аксенова**, *Д. И. Кокорин***, *В. П. Романов****

*Санкт-Петербургский государственный университет
198504, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 10 ноября 2011 г.

Рассмотрено многократное рассеяние света на флуктуациях директора в ориентированном магнитном поле нематического жидком кристалле. Путем численного моделирования рассчитан пик когерентного обратного рассеяния. Поскольку для жидкого кристалла точно известна индикатриса однократного рассеяния, вычисления удалось провести без использования каких-либо упрощающих предположений о его параметрах. Процесс многократного рассеяния моделировался как случайные блуждания фотонов в среде. Пик когерентного обратного рассеяния в такой системе чрезвычайно узкий, поэтому применялся так называемый полуаналитический подход. Параметры пика обратного рассеяния, найденные путем численного моделирования, сравнивались с известными экспериментальными данными и результатами аналитических приближений. Оказалось, что экспериментальные данные и результаты моделирования хорошо согласуются между собой. Результаты численного моделирования адекватно описывают анизотропию и ширину пика обратного рассеяния.

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование многократного рассеяния света в жидких кристаллах (ЖК) в течение многих лет привлекает большое внимание [1–9]. Наиболее детально исследуются нематические ЖК (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, ЖК 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 директора. Описание рассеивающих свойств системы частиц даже сферической формы затруднено, поскольку это требует использования формул Ми, которые чрезвычайно чувствительны к размерам частиц в случае малых концентраций, и решения дифракционной задачи для систе-

мы частиц при больших концентрациях. Еще более сложной проблемой является корректное описание рассеяния на структурных неоднородностях в твердых диэлектриках. В отличие от этих объектов, амплитуда и корреляционные свойства тепловых флуктуаций в ЖК хорошо исследованы как экспериментально, так и теоретически.

Сложность исследования многократного рассеяния в НЖК обусловлена тем, что эта система обладает значительной оптической анизотропией. Поэтому здесь невозможно описывать рассеяние в приближении скалярного поля, как это часто делается для суспензий, а необходимо учитывать поляризационные эффекты.

Порядок в НЖК в общем случае описывается функцией распределения молекул по углам. В случае рэлеевского рассеяния можно ограничиться тензорным параметром порядка второго ранга [10]. Общий анализ всех типов флуктуаций этого параметра порядка был впервые рассмотрен в работе [11]. Было показано, что можно выделить три типа флуктуаций: поперечные одноосные, или флуктуации директора, поперечные двухосные и продольные. Наиболее сильными являются флуктуации директора.

*E-mail: aksev@mail.ru

**E-mail: dmitry@kokorin.org

***E-mail: vromanov@mail.ru

Что касается других типов флуктуаций, их можно наблюдать в режиме однократного рассеяния только в тех геометриях, где отсутствует рассеяние на одноосных поперечных флуктуациях [12]. В режиме многократного рассеяния вследствие хаотизации будут вносить вклад в рассеяние все типы флуктуаций. Поэтому мы ограничимся учетом только наиболее сильных из них, а именно флуктуаций директора.

Одним из наиболее интересных эффектов, обусловленных многократным рассеянием, является когерентное обратное рассеяние. Этот эффект детально исследован теоретически и экспериментально для различных систем [13–15], в том числе и для ЖК [2, 3, 7, 8, 16]. Описание пика обратного рассеяния сводится к суммированию лестничных и циклических диаграмм. Эта задача точно решается для системы точечных рассеивателей [17], а для рассеивателей конечных размеров или флуктуаций с конечным радиусом корреляции вводятся приближения, точность которых не всегда удается контролировать из-за сложности решаемой задачи.

С другой стороны, к настоящему времени детально разработаны методы численного моделирования, которые позволяют избежать многих трудностей, возникающих при аналитических расчетах. Фактически, численное моделирование можно рассматривать как моделирование реального эксперимента. Однако в этом случае имеется возможность извлекать информацию о всех деталях изучаемого процесса и, в частности, устанавливать степень точности тех или иных приближений, вводимых при аналитических расчетах.

Настоящая работа посвящена численному моделированию когерентного обратного рассеяния в НЖК. Такие расчеты проводились в целом ряде работ [5, 7, 18]. В них был получен пик когерентного обратного рассеяния и проанализировано его поведение в различных условиях. Однако из-за сложности задачи вводились различные упрощающие предположения, такие как одноконстантное приближение, независимость коэффициента экстинкции от направления распространения луча и т. д. Это приводило к тому, что эффект когерентного обратного рассеяния можно было анализировать только на качественном уровне. В данной работе проведено моделирование с учетом реальных параметров ЖК без введения упрощающих предположений. Это позволяет количественно сравнить полученные данные с экспериментом [7, 8] и с результатами аналитических расчетов [16], в которых также учитывались реальные параметры среды.

Работа построена следующим образом. В разд. 2 приводятся необходимые данные по однократному рассеянию в НЖК. В разд. 3 описана процедура моделирования распространения фотонов в НЖК. Выражения для пика когерентного обратного рассеяния получены в разд. 4. Раздел 5 содержит результаты численного моделирования и их сравнение с экспериментальными данными и результатами аналитических расчетов. Основные выводы работы приведены в Заключение.

2. ИНДИКАТРИСА ОДНОКРАТНОГО РАССЕЯНИЯ И КОЭФФИЦИЕНТ ЭКСТИНЦИИ

По своим оптическим свойствам НЖК являются одноосными. Направление преимущественной ориентации задается единичным вектором директора \mathbf{n} . Тензор диэлектрической проницаемости имеет вид

$$\varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\perp}\delta_{\alpha\beta} + \varepsilon_a n_{\alpha}(\mathbf{r})n_{\beta}(\mathbf{r}), \quad (2.1)$$

где $\varepsilon_a = \varepsilon_{\parallel} - \varepsilon_{\perp}$, ε_{\parallel} и ε_{\perp} — диэлектрические проницаемости вдоль и поперек вектора директора, $\delta_{\alpha\beta}$ — символ Кронекера.

Флуктуации тензора диэлектрической проницаемости, $\delta\varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r})$, вызванные флуктуациями директора, представляются в виде

$$\begin{aligned} \delta\varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) &= \varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) - \varepsilon_{\alpha\beta}^0 = \\ &= \varepsilon_a [n_{\alpha}^0 \delta n_{\beta}(\mathbf{r}) + n_{\beta}^0 \delta n_{\alpha}(\mathbf{r})], \end{aligned} \quad (2.2)$$

где $\varepsilon_{\alpha\beta}^0 = \varepsilon_{\perp}\delta_{\alpha\beta} + \varepsilon_a n_{\alpha}^0 n_{\beta}^0$ — равновесный тензор диэлектрической проницаемости, \mathbf{n}^0 — среднее направление вектора директора, $\delta\mathbf{n} = \mathbf{n} - \mathbf{n}^0$.

Фурье-образ корреляционной функции флуктуаций диэлектрической проницаемости, $B_{\alpha\beta\mu\nu}(\mathbf{q}) = k_0^4 \langle \delta\varepsilon_{\alpha\mu} \delta\varepsilon_{\nu\beta}^* \rangle(\mathbf{q})$, связан с флуктуациями директора соотношением

$$\begin{aligned} B_{\alpha\beta\mu\nu}(\mathbf{q}) &= k_0^4 \varepsilon_a^2 \sum_{l=1}^2 \langle |\delta n_l(\mathbf{q})|^2 \rangle (a_{l\mu} a_{l\nu} n_{\alpha}^0 n_{\beta}^0 + \\ &+ a_{l\mu} a_{l\beta} n_{\alpha}^0 n_{\nu}^0 + a_{l\alpha} a_{l\nu} n_{\mu}^0 n_{\beta}^0 + a_{l\alpha} a_{l\beta} n_{\mu}^0 n_{\nu}^0). \end{aligned} \quad (2.3)$$

Здесь для дальнейшего удобства введен коэффициент k_0^4 , k_0 — волновое число в вакууме. Для каждого вектора \mathbf{q} введены единичные векторы

$$\mathbf{a}_1(\mathbf{q}_{\perp}) = \mathbf{q}_{\perp}/q_{\perp}, \quad \mathbf{a}_2(\mathbf{q}_{\perp}) = \mathbf{n}^0 \times \mathbf{a}_1(\mathbf{q}_{\perp}),$$

\mathbf{q}_{\parallel} и \mathbf{q}_{\perp} — компоненты вектора \mathbf{q} вдоль и поперек \mathbf{n}^0 , $\langle |\delta n_l(\mathbf{q})|^2 \rangle$ — средний квадрат фурье-компонент флуктуаций директора [10, 19],

$$\langle |\delta n_l(\mathbf{q})|^2 \rangle = \frac{k_B T}{K_{ll} q_{\perp}^2 + K_{zz} q_{\parallel}^2 + \chi_a H^2}, \quad l = 1, 2, \quad (2.4)$$

угловые скобки обозначают статистическое усреднение, K_{jj} — модули Франка, $j = 1, 2, 3$, T — температура, k_B — постоянная Больцмана, χ_a — анизотропия магнитной восприимчивости, H — напряженность постоянного внешнего магнитного поля.

В НЖК индикатриса однократного рассеяния, обусловленного флуктуациями директора, в общем случае имеет вид [20]

$$I_{(i)}^{(s)} = I_{(i)}^0 \frac{V}{(4\pi)^2 R^2} \frac{1}{n^{(i)} \cos \delta^{(i)}} \frac{n^{(s)}}{\cos^3 \delta^{(s)}} \times \\ \times f_{(s)}^2 e_{\alpha}^{(s)} e_{\beta}^{(s)} B_{\alpha\beta\mu\nu}(\mathbf{q}) e_{\mu}^{(i)} e_{\nu}^{(i)}, \quad (2.5)$$

где индексы « i » и « s » обозначают тип падающей и рассеянной волн (« o » — обыкновенная и « e » — необыкновенная), V — рассеивающий объем, R — расстояние от рассеивающего объема до точки наблюдения, $\mathbf{q} = \mathbf{k}^{(s)} - \mathbf{k}^{(i)}$, $\mathbf{k}^{(s)}$ и $\mathbf{k}^{(i)}$ — волновые векторы рассеянного и падающего света, $\mathbf{e}^{(s)}$ и $\mathbf{e}^{(i)}$ — векторы поляризации рассеянного и падающего света, $\delta^{(s)}$ и $\delta^{(i)}$ — углы между волновыми векторами рассеянного и падающего света и вектором Пойнтинга, $I_{(i)}^0$ — интенсивность (модуль вектора Пойнтинга $\mathbf{S}_{(i)}$) падающего света,

$$I_{(i)}^0 = |\mathbf{S}_{(i)}| = \frac{c}{4\pi} E_{(i)}^{02} n^{(i)} \cos \delta^{(i)},$$

$E_{(i)}^0$ — амплитуда поля падающего света, c — скорость света в вакууме. В формуле (2.5) коэффициенты имеют вид

$$n^{(o)} = \sqrt{\varepsilon_{\perp}}, \quad n^{(e)} = \sqrt{\frac{\varepsilon_{\parallel} \varepsilon_{\perp}}{\varepsilon_{\perp} + \varepsilon_a \cos^2 \theta_e}}, \quad (2.6)$$

$$\cos \delta^{(o)} = 1, \\ \cos \delta^{(e)} = \frac{\varepsilon_{\parallel} \cos^2 \theta_e + \varepsilon_{\perp} \sin^2 \theta_e}{\sqrt{\varepsilon_{\parallel}^2 \cos^2 \theta_e + \varepsilon_{\perp}^2 \sin^2 \theta_e}}, \quad (2.7)$$

$$f_{(o)} = 1, \quad f_{(e)}^2 = \frac{1}{\varepsilon_{\parallel} \varepsilon_{\perp}^2} (\varepsilon_{\perp} \sin^2 \theta_e + \varepsilon_{\parallel} \cos^2 \theta_e) \times \\ \times (\varepsilon_{\perp}^2 \sin^2 \theta_e + \varepsilon_{\parallel}^2 \cos^2 \theta_e), \quad (2.8)$$

$$\mathbf{e}^{(o)} = \mathbf{n} \times \mathbf{s}^{(o)},$$

$$\mathbf{e}^{(e)} = \frac{\mathbf{s}^{(e)} \varepsilon_{\parallel} \cos \theta_e - \mathbf{n} (\varepsilon_{\parallel} \cos^2 \theta_e + \varepsilon_{\perp} \sin^2 \theta_e)}{\sin \theta_e (\varepsilon_{\parallel}^2 \cos^2 \theta_e + \varepsilon_{\perp}^2 \sin^2 \theta_e)^{1/2}}, \quad (2.9)$$

θ_e — угол между волновым вектором $\mathbf{k}^{(e)}$ необыкновенной волны и вектором директора, $\mathbf{s}^{(j)} = \mathbf{k}^{(j)} / k^{(j)}$ ($j = i, s$) — единичный вектор, направленный вдоль волнового вектора.

Будем считать, что в системе отсутствует собственное поглощение. Тогда длина свободного пробега фотона связана с коэффициентом экстинкции соотношением

$$l_{(j)}(\mathbf{s}^{(j)}) = \frac{1}{\tau_{(j)}(\mathbf{s}^{(j)})}.$$

Коэффициент экстинкции определяется интенсивностью рассеяния в полный телесный угол и для однофазной среды имеет вид

$$\tau_{(i)}(\mathbf{k}^{(i)}) = \frac{1}{(4\pi)^2} \frac{e_{\alpha}^{(i)} e_{\beta}^{(i)}}{n^{(i)} \cos^2 \delta^{(i)}} \times \\ \times \sum_{s=o,e} \int d\Omega_{\mathbf{k}^{(s)}} B_{\alpha\beta\mu\nu}(\mathbf{q}) \frac{n^{(s)} e_{\mu}^{(s)} e_{\nu}^{(s)}}{\cos^2 \delta^{(s)}}. \quad (2.10)$$

3. МОДЕЛИРОВАНИЕ РАССЕЯНИЯ В АНИЗОТРОПНОЙ СРЕДЕ

Будем моделировать процесс многократного рассеяния с помощью метода Монте-Карло. Геометрия системы приведена на рис. 1. Ориентированный НЖК заполняет полупространство $z > 0$. Вектор директора лежит в плоскости границы. Ориентация НЖК поддерживается с помощью постоянно внешнего магнитного поля напряженностью H .

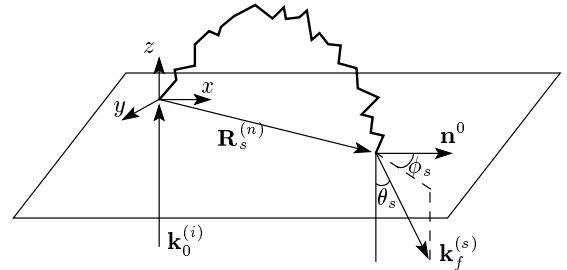


Рис. 1. Геометрия, используемая для расчета эффекта когерентного обратного рассеяния. Рассеивающая среда занимает полупространство $z > 0$, волна падает вдоль оси z . Рассеянный свет собирается под малым углом θ_s , отсчитываемым от направления, обратного направлению оси z . Директор \mathbf{n}^0 направлен 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

Такая геометрия аналогична используемой в эксперименте [7, 8].

Будем считать, что фотоны падают на среду по нормали к границе, $\mathbf{k}_0^{(i)} = k_0(0, 0, 1)$ в точку $\mathbf{r} = 0$. В среде фотоны претерпевают многократное рассеяние. Нас интересует интенсивность света, выходящего из среды с произвольным направлением волнового вектора $\mathbf{k}_f^{(s)}$. В дальнейшем для промежуточных актов рассеяния будем обозначать волновые векторы фотонов до и после рассеяния как $\mathbf{k}^{(i)}$ и $\mathbf{k}^{(s)}$.

Обычная процедура моделирования процесса многократного рассеяния состоит в следующем. Между актами рассеяния фотон распространяется прямолинейно. Длина пути, проходимого фотоном между актами рассеяния, генерируется случайным образом так, чтобы среднее расстояние между последовательными актами совпадало с длиной свободного пробега фотона. Выбор направления движения фотона после рассеяния также носит случайный характер и зависит от индикатрисы однократного рассеяния.

В рассматриваемой нами задаче эта процедура существенно усложняется. Одноосность среды приводит к тому, что в процессе рассеяния возникают два типа волн, обыкновенные и необыкновенные, причем значение волнового вектора необыкновенной волны зависит от направления. Кроме того, индикатриса однократного рассеяния этой волны зависит от углов между направлением оптической оси и направлениями волновых векторов падающей и рассеянной волн. Наконец, длины свободного пробега фотонов, соответствующих обыкновенной и необыкновенной волнам, зависят от угла между волновым вектором и директором.

При моделировании многократного рассеяния в одноосной среде будем считать, что фотон, перемещаясь в среде, последовательно участвует в актах однократного рассеяния. Эти процессы считаются точечными, между ними фотоны перемещаются прямолинейно в среде с некоторым эффективным значением диэлектрической проницаемости $\varepsilon(\mathbf{k})$. В каждом акте однократного рассеяния необходимо «разыграть» (выбрать случайным образом) направление, в котором фотон будет распространяться, тип волны, в которую происходит рассеяние, и расстояние, которое он пролетит до следующего акта рассеяния.

Индикатриса однократного рассеяния определяет зависимость интенсивности рассеянного света от направлений падающей и рассеянной волн. Направление, в котором фотон будет распространяться после рассеяния, при моделировании выбирается слу-

чайным образом с плотностью вероятности рассеяния фотона в единицу телесного угла, задаваемой индикатрисой однократного рассеяния. Поскольку исследуемая система анизотропна, эта вероятность зависит от угла θ_i между волновым вектором $\mathbf{k}^{(i)}$ до рассеяния и вектором директора \mathbf{n} . Генерация случайной величины с заданной плотностью вероятности обычно выполняется с помощью метода обратных функций [21]. Как правило, при таком подходе пользуются модельной индикатрисой, например индикатрисой Хенби–Гринстайна [22–24].

В нашем случае выражение для индикатрисы (2.5) значительно сложнее. Генерация случайных направлений в каждом акте рассеяния с заданной плотностью вероятности приводит к громоздкой процедуре, включающей в себя использование обратных специальных функций типа эллиптических интегралов. Поэтому такой подход представляется бесперспективным для численного моделирования. Для того чтобы обойти эту трудность, будем строить интерполяцию индикатрисы (2.5) в специально выбранной системе координат. Для описания однократного рассеяния необходимо в общем случае задать четыре параметра: два угла, определяющие направление вектора $\mathbf{k}^{(i)}$, и два угла для вектора $\mathbf{k}^{(s)}$. 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 волны с волновым вектором $\mathbf{k}^{(i)}$ в волну с волновым вектором $\mathbf{k}^{(s)}$ не меняется. Это позволяет сократить число параметров с четырех до трех. В качестве одного из параметров выберем угол θ_i . Введем локальную декартову систему координат, связанную с вектором $\mathbf{k}^{(i)}$, с осями

$$\mathbf{v}_3 = \frac{\mathbf{k}^{(i)}}{k^{(i)}}, \quad \mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_3 \times \mathbf{n}, \quad \mathbf{v}_2 = \mathbf{v}_3 \times \mathbf{v}_1. \quad (3.1)$$

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 (3.1), для генерации случайного направления фотона после однократного рассеяния нужно при заданном угле θ_i разыграть углы θ и ϕ , задающие направление $\mathbf{k}^{(s)}$. Кроме того, выражение (2.5) обладает зеркальной симметрией по углу ϕ относительно точки $\phi = \pi$. Для того чтобы проводить интерполяцию индикатрисы (2.5), мы заранее для θ_i задаем дискретный набор углов $\{\tilde{\theta}_1, \tilde{\theta}_2, \dots, \tilde{\theta}_M\}$ и для каждого угла из этого набора разбиваем возможные

углы рассеяния $\theta \in [0, \pi]$, $\phi \in [0, \pi]$ на прямоугольные ячейки s^j ,

$$s^j: \theta \in [\theta_l^j, \theta_r^j], \quad \phi \in [\phi_l^j, \phi_r^j], \quad (3.2)$$

где индексы « l » и « r » относятся к левой и правой границам прямоугольника. Границы прямоугольников подбираются так, что билинейная интерполяция индикатрисы $I^j(\theta, \phi)$, построенная по значениям индикатрисы, вычисленным в вершинах ячейки, описывает 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 $3 \cdot 10^4$ для каждого угла из дискретного набора $\{\tilde{\theta}_1, \tilde{\theta}_2, \dots, \tilde{\theta}_M\}$. При моделировании каждого акта однократного рассеяния для угла θ_i выберем ближайший элемент из набора $\{\tilde{\theta}_1, \tilde{\theta}_2, \dots, \tilde{\theta}_M\}$ и соответствующее ему разбиение (3.2). Для каждой ячейки разбиения построим соответствующую ей билинейную интерполяцию $I^j(\theta, \phi|\theta_i)$ индикатрисы. Вероятность того, что направление рассеяния попадает в ячейку s^j при заданном θ_i , равна

$$p_j = \frac{\int_{\phi, \theta \in s^j} I^j(\theta, \phi) d\Omega}{\sum_t \int_{\phi, \theta \in s^t} I^t(\theta, \phi) d\Omega}. \quad (3.3)$$

По формуле (3.3) вычислим вероятности p_j для каждой ячейки s^j . Затем разыграем с равномерным распределением случайное число r в интервале $[0, 1]$. Выберем из массива такую ячейку с номером t , что

$$\sum_{j=1, j < t} p_j < r, \quad \sum_{j=1, j \leq t} p_j \geq r. \quad (3.4)$$

После того как ячейка выбрана, необходимо разыграть значения θ и ϕ уже внутри ячейки. Это можно сделать с помощью двумерного аналога метода обратных функций [21], взяв за плотность вероятности соответствующую ячейке билинейную интерполяцию I^t . Идея метода обратных функций изложена ниже. Полученные таким образом углы θ и ϕ , принадлежащие этой ячейке, будут определять направление распространения фотона после рассеяния.

В случае $e \rightarrow e$ -рассеяния индикатриса может быть сильно вытянута вперед. Поэтому разбиение было построено таким образом, чтобы на узкий пик индикатрисы, куда преимущественно и рассеиваются фотоны, пришлось достаточно большое число яче-

ек. Отметим, что от параметра θ_i индикатриса зависит слабо, и поэтому можно обойтись небольшим количеством заранее заготовленных разбиений.

После того как выбран волновой вектор $\mathbf{k}^{(s)}$ рассеянного фотона, необходимо определить расстояние, которое он пройдет до следующего акта рассеяния. Плотность вероятности распределения длины свободного пробега между двумя последовательными актами рассеяния имеет вид [21]

$$f(u) = \frac{1}{l} e^{-u/l}, \quad (3.5)$$

где l — средняя длина свободного пробега. Тогда вероятность того, что длина свободного пробега фотона больше u , равна

$$F(u) = \int_u^\infty f(u') du', \quad (3.6)$$

где величина $F(u)$ равномерно распределена на интервале $(0, 1]$. Будем выбирать случайным образом величину $\xi \in (0, 1]$. Заменяем $F(u)$ в выражении (3.6) на ξ . Из формул (3.5), (3.6) можно получить явное выражение для u :

$$u = -l \ln \xi. \quad (3.7)$$

Этот подход называют методом обратных функций. Выражение (3.7) позволяет получать длины свободных пробегов фотонов с заданной плотностью вероятности (3.5).

В отличие от теоретических расчетов [16] при моделировании мы не ограничивались $e \rightarrow e$ -рассеянием. 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 из двух каналов. В НЖК имеются три типа рассеяний: $o \rightarrow e$, $e \rightarrow o$, $e \rightarrow e$. Набор углов $\{\tilde{\theta}_1, \tilde{\theta}_2, \dots, \tilde{\theta}_M\}$ выбирался для всех типов рассеяния одинаково. Построение разбиения на ячейки s^j выполнялось отдельно для каждого типа рассеяния. При моделировании в каждом акте рассеяния вначале выбирался канал рассеяния, потом направление рассеяния и затем расстояние, которое пробегает фотон до следующего акта рассеяния.

Особенность нашей системы состоит в том, что длина свободного пробега, связанная с длиной экстинкции, зависит как от направления распространения волны, так и от ее типа: o или e . Этим эффектом

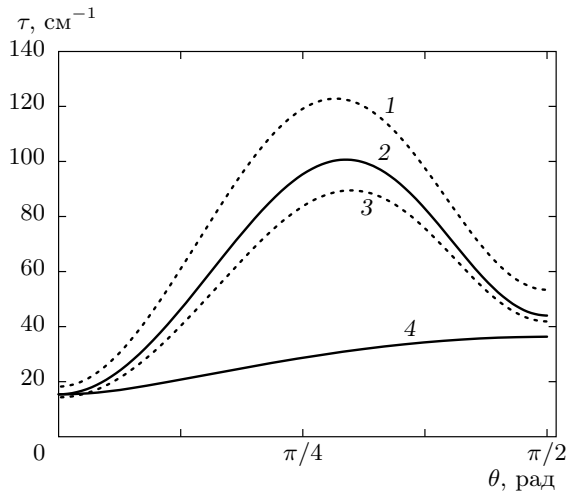


Рис. 2. Угловые зависимости коэффициентов экстинкции обыкновенного (кривая 4) и необыкновенного (кривые 1–3) лучей. Расчеты выполнены по формуле (2.10) при следующих значениях параметров: $\varepsilon_{\perp} = 2.2$, $\varepsilon_a = 0.8$, $\lambda = 4.88 \cdot 10^{-5}$ см, $T = 301$ К, $H = 5000$ Э, $\chi_a = 1.38 \cdot 10^{-7}$. Модули Франка $K_{11} = 0.79K_{33}$, $K_{22} = 0.43K_{33}$, $K_{33} = 6.1 \cdot 10^{-7}$ дин для кривых 2 и 4, $K_{11} = 2.6 \cdot 10^{-7}$ дин, $K_{22} = 1.4 \cdot 10^{-7}$ дин, $K_{33} = 9.5 \cdot 10^{-7}$ дин для кривой 1, $K_{11} = K_{22} = K_{33} = 4.5 \cdot 10^{-7}$ дин для кривой 3 — одноконстантное приближение. Для всех трех случаев сумма модулей Франка совпадает

нельзя пренебречь для ЖК. Дело в том, что угловая зависимость коэффициента экстинкции связана как с оптической анизотропией ЖК, так и со значениями модулей ориентационной упругости. Угловая зависимость не исчезает даже в пренебрежении различием между модулями Франка [5, 18], но численные значения могут при этом существенно меняться. На рис. 2 для иллюстрации показаны угловые зависимости коэффициентов экстинкции при различных соотношениях между модулями Франка и одной и той же оптической анизотропии.

4. ФОРМИРОВАНИЕ ПИКА КОГЕРЕНТНОГО ОБРАТНОГО РАССЕЯНИЯ

Специфика расчета пика когерентного обратного рассеяния в НЖК состоит в том, что нас интересуют рассеяния фотонов, вылетающих из среды в направлении, близком к нормали, под очень малыми углами 10^{-6} – 10^{-4} рад. Вероятность вылета фотона после многократного рассеяния в столь узком интер-

вале 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 [25]. Идея этого метода состоит в следующем. Учитывается вклад $\delta_n(\mathbf{k}_f^{(s)})$ каждого фотона в интенсивность на каждом акте рассеяния в интересующий нас интервал углов $\theta_s < 10^{-4}$ рад:

$$\delta_n(\mathbf{k}_f^{(s)}) = W_n p_{is}(\mathbf{k}^{(i)}, \mathbf{k}_f^{(s)}) \times \exp \left[-\frac{1}{l_s(\mathbf{k}_f^{(s)}) \cos \theta_s} z_n \right], \quad (4.1)$$

где n — кратность рассеяния, W_n — вес фотона, p_{is} — нормированная индикатриса однократного рассеяния, $\mathbf{k}_f^{(s)}$ — волновой вектор рассеянного фотона, попадающего в детектор 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 (4.1) имеет простой физический смысл. Вклад $\delta_n(\mathbf{k}_f^{(s)})$ фотона представляет собой произведение вероятности W_n того, что фотон совершает n актов рассеяния, не вылетая 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 актов рассеяния, $n \sim 10^2$. С другой стороны, существенный вклад в когерентное обратное рассеяние вносят фотоны, испытавшие очень большое число актов рассеяния, $n \sim 10^4$ – 10^5 . Для более эффективного учета таких фотонов мы модифицировали процедуру моделирования так, чтобы фотоны не вылетали из среды. 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 нуля до расстояния, которое пролетел бы фотон из данной точки в данном направлении до границы.

Вероятность того, что фотон, находящийся на расстоянии z от границы и имеющий перед рассеянием волновой вектор $\mathbf{k}^{(i)}$, вылетает из среды при каждом акте рассеяния, записывается в виде

$$\begin{aligned} \text{esc}(\mathbf{k}^{(i)}, z) &= \sum_{s=o,e} \int_0^{\pi/2} \sin \theta_s d\theta_s \times \\ &\times \int_0^{2\pi} d\phi_s p_{is}(\mathbf{k}^{(i)}, \mathbf{k}^{(s)}) \times \\ &\times \exp \left[-\frac{1}{l_s(\mathbf{k}^{(s)})} \frac{z}{\cos \theta_s} \right], \end{aligned} \quad (4.2)$$

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,

$$W_{n+1} = W_n \left[1 - \text{esc}(\mathbf{k}^{(i)}, z) \right], \quad W_1 = 1. \quad (4.3)$$

Выражение (4.3) фактически учитывает потерю интенсивности за счет вылета фотонов из среды.

Будем считать, что детектор, собирающий излучение, бесконечен и занимает всю плоскость xy . Нас интересует распределение выходящих из среды фотонов по углам θ_s и ϕ_s . Для каждого вылетевшего фотона 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, $R_s^{(n),z} = 0$. Суммирование вкладов фотонов $\delta_n(\mathbf{k}_f^{(s)})$ (4.1) в направлениях θ_s и ϕ_s определяет угловое распределение интенсивности в лестничном приближении. Соответствующий вклад циклических диаграмм получается умножением $\delta_n(\mathbf{k}_f^{(s)})$ на фазовый множитель $\cos(\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_s^{(n)} - \mathbf{R}_i))$ [26, 27], где вектор \mathbf{R}_i указывает место падения фотонов на среду. В нашей геометрии $\mathbf{R}_i = (0, 0, 0)$, а \mathbf{q} — вектор рассеяния, $\mathbf{q} = \mathbf{k}_f^{(s)} - \mathbf{k}_0^{(i)}$. Суммируя по всем фотонам для каждой пары углов θ_s и ϕ_s , получаем угловую зависимость относительной интенсивности рассеянного излучения [17, 28]:

$$J(\theta_s, \phi_s) = \frac{J_C + J_L}{J_L}, \quad (4.4)$$

где J_L и J_C — вклады лестничных и циклических диаграмм,

$$J_L = \sum_{a=1}^A \sum_{n=1}^N \delta_n(\mathbf{k}_f^{(s)}), \quad (4.5)$$

$$J_C = \sum_{a=1}^A \sum_{n=1}^N \delta_n(\mathbf{k}_f^{(s)}) \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_s^{(n)}). \quad (4.6)$$

Здесь суммирование по $a = 1, 2, \dots, A$ представляет собой суммирование 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, порядка 10^{-8} , то более высокие кратности для этого фотона не учитываются.

5. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Для моделирования была написана программа на языке C++ [29]. Расчеты выполнялись на компьютере 2 × Xeon X5660. Предварительный этап подготовки функции esc занимал примерно 6 ч. Основной расчет занимал около 8 ч.

Мы получили пик когерентного обратного рассеяния в геометрии, приведенной на рис. 1. Среда занимает полупространство $z \geq 0$. Директор направлен вдоль оси x . Луч падает на ЖК по нормали в точку $\mathbf{R}_i = (0, 0, 0)$. После рассеяний луч выходит из среды в направлении $\mathbf{k}_f^{(s)}(\theta_s, \phi_s)$ в точке $\mathbf{R}_s^{(n)}$. Такая геометрия выбрана потому, что она соответствует геометрии эксперимента [7, 8].

Угловая зависимость интенсивности рассеянного излучения была получена по формуле (4.4). На рис. 3 приведены зависимости интенсивности от

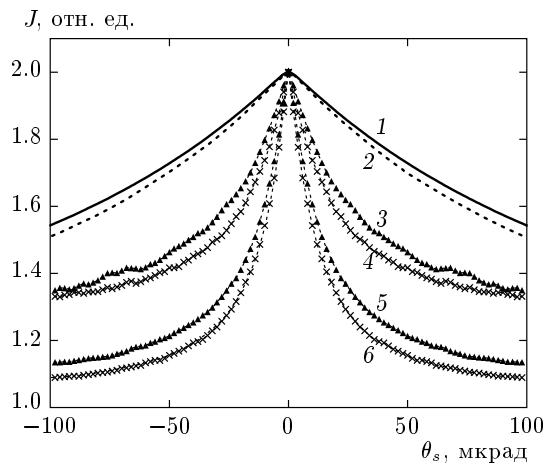


Рис. 3. Рассчитанные пики когерентного обратного рассеяния. Кривые 3 и 4 — сечения пика при $\phi_s = \pi/2$ и $\phi_s = 0$. Расчеты выполнены с учетом вкладов как e -, так и o -лучей. Кривые 5 и 6 — те же сечения пика с учетом вклада только e -лучей. Кривые 1 и 2 — результаты аналитических расчетов [16] для тех же сечений

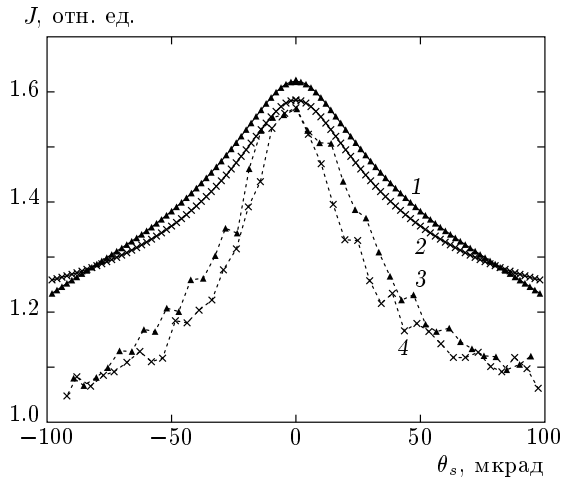


Рис. 4. Сопоставление результатов численных расчетов (кривые 1, 2) с результатами эксперимента [7, 8] (кривые 3, 4) при $\phi_s = \pi/2$ для кривых 1, 3 и при $\phi_s = 0$ для кривых 2, 4. Кривые 1 и 2 получены из кривых 3 и 4 на рис. 3 путем свертки с аппаратной функцией (5.1)

угла θ_s для двух сечений пика при $\phi_s = \pi/2$ (кривая 3) и $\phi_s = 0$ (кривая 4). Видно, что существует заметная анизотропия рассеяния.

Расчеты проводились для ЖК 5СВ, исследованного в работах [7, 8], с параметрами $K_{11} = 0.79K_{33}$, $K_{22} = 0.43K_{33}$, $K_{33} = 6.1 \cdot 10^{-7}$ дин, $H = 5000$ Э, $\chi_a = 1.38 \cdot 10^{-7}$, $\varepsilon_a = 0.8$, $\varepsilon_{\perp} = 2.2$, $\lambda = 4.88 \cdot 10^{-5}$ см, $T = 301$ К. Экспериментальный образец представлял собой цилиндр диаметром $d = 8$ см и высотой $h = 4$ см. Коэффициенты экстинкции для такого ЖК приведены выше на рис. 2, кривая 2 для необыкновенного луча и кривая 4 для обыкновенного. Из этого рисунка видно, что длина пробега фотона порядка $l \approx 2 \cdot 10^{-2}$ см, что значительно меньше размеров образца. Поэтому при моделировании этого эксперимента вполне оправдано приближение полубесконечной среды.

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

$$G(\theta) = \frac{1}{\pi} \frac{\theta_0}{\theta^2 + \theta_0^2}, \quad (5.1)$$

где в качестве θ_0 было взято значение $\theta_0 = 20$ мкрад. На рис. 4 показаны экспериментальные кривые из работы [7, 8] и рассчитанная интенсивность (4.4), свернутая с аппаратной функцией $G(\theta)$. Видно, что результаты моделирования неплохо согласуются с

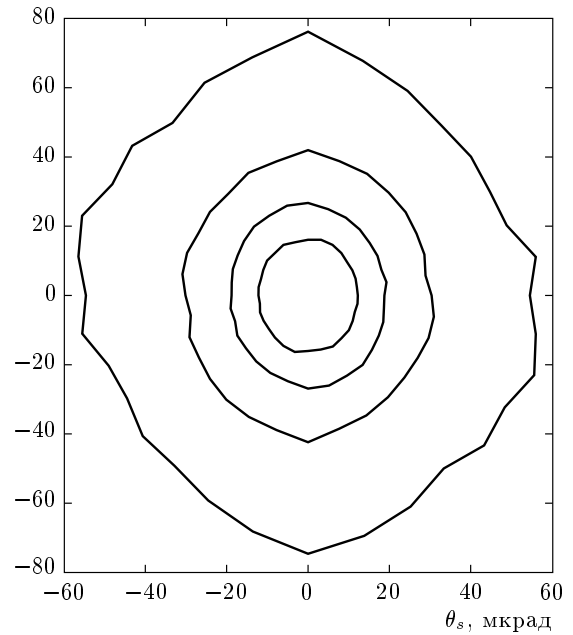


Рис. 5. Сечения пика когерентного обратного рассеяния, полученного путем численного моделирования. Сечения плоскостями, перпендикулярными оси z , построены на уровнях $J = 1.7, 1.6, 1.5, 1.4$

экспериментальными данными. Заметим, что единственным подгоночным параметром является выбор аппаратной функции.

Рассчитанная анизотропия пика обратного рассеяния приведена на рис. 5. Здесь изображены сечения пика на разных высотах. Анизотропия пика равна 1.38. Для данных, свернутых с аппаратной функцией, анизотропия равна 1.12. В эксперименте анизотропия составляла 1.17 ± 0.04 .

Для сравнения результатов моделирования с результатами аналитических расчетов [16] были дополнительно выполнены расчеты интенсивности многократного рассеяния без учета обыкновенных волн. Дело в том, что аналитические расчеты удалось выполнить только с учетом $e \rightarrow e$ -рассеяний. Результаты сравнения приведены выше на рис. 3. Здесь кривые 1 и 2 — результаты аналитических расчетов [16] для $\phi_s = \pi/2$ и $\phi_s = 0$, кривые 5 и 6 — результаты моделирования без учета обыкновенных волн для тех же углов ϕ_s . Из рисунка видно, что кривые 3 и 4 расположены выше кривых 5 и 6, т. е. реальный пик несколько шире, чем предсказывает результат моделирования только $e \rightarrow e$ -рассеяния.

Причина этого, вероятно, состоит в следующем. Известно, что чем больше экстинкция, тем шире пик [30, 31]. Как следует из формулы (2.10), при уче-

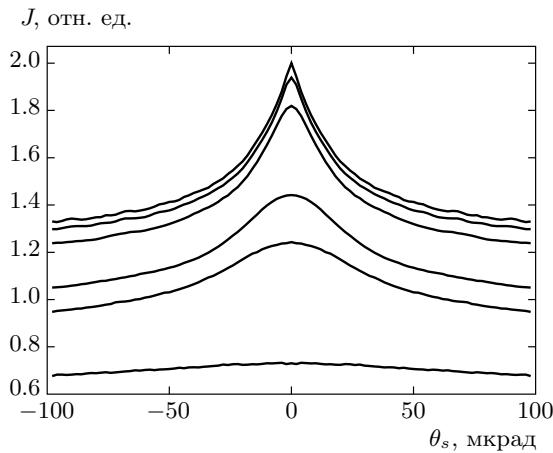


Рис. 6. Вклад n первых кратностей рассеяния в формирование пика. Снизу вверх $n = 10, 50, 10^2, 10^3, 5 \cdot 10^3, 10^5$. Все кривые нормированы на сумму лестничных диаграмм, учитывающую $n = 10^5$ рассеяний

те обоих типов рассеяния коэффициент экстинкции необыкновенного луча увеличивается, что уменьшает длину свободного пробега e -фотона. С другой стороны, в этом случае в рассеянии участвуют o -фотоны, у которых, как видно из рис. 2, длина свободного пробега значительно больше. Но вклад этих фотонов гораздо меньше, чем e -фотонов, поскольку вероятность рассеяния типа $e \rightarrow o$ значительно меньше, чем $e \rightarrow e$. Поэтому учет обыкновенных лучей эффективно уменьшает длину свободного пробега фотонов и приводит к расширению пика.

Из рис. 3 видно, что результаты аналитических расчетов (кривые 1, 2) предсказывают другую ширину пика, чем дают численные вычисления. По-видимому, это связано с тем, что при суммировании диаграммного ряда был сделан целый ряд допущений. В том числе использовано приближение типа диффузионного [2] и использовалась упрощенная модель для парной корреляционной функции.

Выполненное численное моделирование позволяет извлекать детали процесса, которые трудно получить как экспериментально, так и теоретически. В качестве иллюстрации на рис. 6 показано, как формируется пик когерентного обратного рассеяния при учете различного числа кратностей рассеяния. На этом рисунке все кривые нормированы на интенсивность, даваемую суммой лестничных диаграмм от всех, $N = 10^5$, кратностей рассеяния.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе мы рассчитали пик когерентного обратного рассеяния в НЖК. Расчеты проводились на основе метода Монте-Карло. Из-за сложного вида индикатрисы однократного рассеяния и корреляционной функции флуктуаций тензора диэлектрической проницаемости было заранее построено специальное разбиение по углам, которое сильно ускорило дальнейшие расчеты. Предложенный подход для построения такого разбиения можно применять для практически любых достаточно гладких индикатрис. Поскольку пик когерентного обратного рассеяния в НЖК очень узкий, метод, основанный на простом наборе статистики по вылетевшим фотонам, здесь крайне неэффективен, и требует времени расчета на несколько порядков больше, чем использованный нами метод. В использованном методе статистика набиралась за счет учета вклада каждого фотона при каждом акте рассеяния в интересующей нас интервал углов. Для получения достаточного количества фотонов с высшими кратностями порядка 10^4-10^5 вводился запрет на вылет фотонов из среды. Вероятность вылета фотонов из среды учитывалась с помощью специальной весовой функции.

Нам удалось получить пик обратного рассеяния и рассчитать его анизотропию. Полученные результаты сравнивались как с экспериментом, так и с аналитическими результатами. Оказалось, что результаты моделирования хорошо согласуются с экспериментальными данными как по ширине пика, так и по его анизотропии.

Достоинство проведенных расчетов состоит в том, что примененная численная процедура содержит большой объем промежуточных данных, которые могут оказаться полезными для дальнейшего развития аналитических методов. В частности, информация по каждой кратности рассеяния позволяет отслеживать как формируется пик. Пространственное распределение вылетающих фотонов позволяет оценить правомерность диффузионного подхода для таких сложных систем. Также в рамках этого подхода можно изучать временные характеристики многократного рассеяния, такие как скорость диффузии излучения и временные корреляционные функции.

Работа выполнена при поддержке Санкт-Петербургского государственного университета (грант № 11.38.45.2011).

ЛИТЕРАТУРА

1. H. Stark, M. H. Kao, K. A. Jester, T. C. Lubensky, and A. G. Yodh, *J. Opt. Soc. Amer. A* **14**, 156 (1997).
2. H. Stark and T. C. Lubensky, *Phys. Rev. E* **55**, 514 (1997).
3. B. A. van Tiggelen, R. Maynard, and A. Heiderich, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 639 (1996).
4. B. A. van Tiggelen, A. Heiderich, and R. Maynard, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **293**, 205 (1997).
5. A. Heiderich, R. Maynard, and B. A. van Tiggelen, *J. de Phys. II* **7**, 765 (1997).
6. L. V. Kuz'min, V. P. Romanov, and L. A. Zubkov, *Phys. Rev. E* **54**, 6798 (1996).
7. R. Sapienza, D. S. Wiersma, and D. Delande, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **429**, 193 (2005).
8. R. Sapienza, S. Mujumdar, C. Cheung, A. G. Yodh, and D. Wiersma, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 033903 (2004).
9. *Wave Scattering in Complex Media: From Theory to Applications*, ed. by B. A. van Tiggelen and S. E. Skipetrov, NATO Science Series II. Mathematics, Physics and Chemistry, Kluwer Acad. Publ., Dordrecht (2003).
10. П. Де Жен, *Физика жидких кристаллов*, Мир, Москва (1977).
11. В. Л. Покровский, Е. И. Кац, *ЖЭТФ* **73**, 774 (1977).
12. А. Ю. Вальков, В. П. Романов, *ЖЭТФ* **90**, 1264 (1986).
13. M. P. Van Albada and A. Lagendijk, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 2692 (1985).
14. P. E. Wolf and G. Maret, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 2696 (1985).
15. В. Л. Кузьмин, В. П. Романов, *УФН* **166**, 247 (1996).
16. Е. В. Аксенова, В. Л. Кузьмин, В. П. Романов, *ЖЭТФ* **135**, 587 (2009).
17. F. C. MacKintosh and S. John, *Phys. Rev. B* **37**, 1884 (1988).
18. В. Л. Кузьмин, А. Ю. Вальков, *Опт. и спектр.* **111**, 497 (2011).
19. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, ч. 1, Наука, Москва (1976).
20. M. Lax and D. F. Nelson, in *Proc. of III Rochester Conf. on Coherent and Quantum Optics*, Plenum Press, New York (1973), p. 415.
21. И. М. Соболев, *Численные методы Монте-Карло*, Наука, Москва (1973).
22. А. Исимару, *Распространение и рассеяние волн в случайно-неоднородных средах*, Мир, Москва (1981).
23. С. Е. Скипетров, С. С. Чесноков, *КЭ* **25**, 753 (1998).
24. I. V. Meglinski, V. L. Kuzmin, D. Y. Churmakov, and D. A. Greenhalgh, *Proc. Roy Soc. London A* **461**, 43 (2004).
25. E. Tinet, S. Avrillier, and J. M. Tualle, *J. Opt. Soc. Amer. A* **13**, 1903 (1996).
26. G. Maret and P. E. Wolf, *Z. Phys. B* **65**, 409 (1987).
27. D. J. Pine, D. A. Weitz, J. X. Zhu, and E. J. Herbolzheimer, *J. de Phys.* **51**, 2101 (1990).
28. M. J. Stephen and G. Cwilich, *Phys. Rev. B* **34**, 7564 (1986).
29. <https://github.com/DmitryKokorin/scatmc>.
30. E. Akkermans, P. E. Wolf, E. Maynard, and G. Maret, *J. de Phys.* **49**, 77 (1988).
31. Yu. N. Barabanenkov, Yu. A. Kravtsov, V. D. Ozrin, and A. I. Saichev, in *Enhanced Backscattering in Optics, Progress in Optics*, Vol. 29, ed. by E. Wolf, North Holland, Amsterdam (1991), p. 67.