

# Когерентные эффекты многократного рассеяния и метод Монте-Карло

В. Л. Кузьмин<sup>1)\*</sup>, И. В. Меглинский<sup>+</sup>

\* Санкт-Петербургский торгово-экономический институт, 194021 Санкт-Петербург, Россия

+ Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, 410026, Саратов, Россия

° Cranfield University, School of Engineering, Cranfield, MK43 0AL, UK

Поступила в редакцию 1 декабря 2003 г.

После переработки 8 января 2004 г.

На основе сопоставления итерационной процедуры решения уравнения Бете–Солпитера и метода Монте-Карло развит метод моделирования когерентных эффектов многократного рассеяния в рамках единого стохастического подхода. Рассчитаны временная корреляционная функция и интерференционная составляющая когерентного обратного рассеяния от многократно рассеивающей среды.

PACS: 42.25.–p, 42.50.Md, 82.70.–y

Численное моделирование на основе стохастического метода Монте-Карло (МК) широко используется в расчетах интенсивности рассеянного излучения в случайно-неоднородных мутных средах [1]. Однако реализация метода для моделирования когерентных эффектов, проявляющих себя, несмотря на сильное многократное рассеяние, и вызывающих в последнее время все больший интерес [2–8], требует специального подхода.

В настоящей работе, сопоставляя стохастический метод МК с теоретическим подходом, состоящим в представлении уравнения Бете–Солпитера в виде ряда по кратностям рассеяния, мы показываем, как обобщается данный метод в рамках единого подхода при расчете временных корреляций интенсивности, обратного когерентного рассеяния и других когерентных эффектов.

Корреляционная функция поля в неоднородной дисперсной среде со случайными пространственно-временными флуктуациями диэлектрической проницаемости описывается интегральным уравнением Бете–Солпитера:

$$\Gamma(\mathbf{R}_2, \mathbf{R}_1, t | \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) = \mu p_t(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s) \delta(\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1) + \mu \int p_t(\mathbf{k}_{23} - \mathbf{k}_s) \Lambda(R_{23}) \Gamma(R_3, \mathbf{R}_1, t | \mathbf{k}_{31}, \mathbf{k}_i) d\mathbf{R}_3. \quad (1)$$

Здесь  $\Gamma(\mathbf{R}_2, \mathbf{R}_1, t | \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i)$  – функция Грина, или пропагатор уравнения Бете–Солпитера, описывающий распространение пары комплексно-сопряженных полей, сдвинутых по времени на интервал  $t$ , из точки

$\mathbf{R}_1$  в точку  $\mathbf{R}_2$ , падающих в  $\mathbf{R}_1$  с волновым вектором  $\mathbf{k}_i$  и выходящих из  $\mathbf{R}_2$  с волновым вектором  $\mathbf{k}_s$ ,  $k_s = k_i = k = nk_0$ ,  $k_0 = 2\pi/\lambda$  – волновое число,  $\lambda$  – длина волны,  $n$  – показатель преломления среды:  $n = n_1 + in_2$ ,  $n_1$  и  $n_2$  – соответственно вещественная и мнимая части  $n$ ,  $(2n_2k_0)^{-1} = l$ , где  $l$  – средняя длина свободного пробега фотона. Для простоты мы ограничимся случаем, когда собственное поглощение отсутствует и потери света обусловлены только упругим рассеянием. В этом случае коэффициент рассеяния  $\mu = l^{-1}$ . Функция  $\Lambda(R) = R^{-2} \exp(-R/l)$  представляет собой произведение комплексно-сопряженной пары функций Грина соответствующего волнового уравнения и описывает распространение излучения между двумя актами рассеяния. Функция  $p_t(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s)$  выражается через фурье-образ парной корреляционной функции флуктуаций диэлектрической проницаемости и при  $t = 0$  совпадает с фазовой функцией рассеяния  $p_0(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s) = p(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s)$ .

Пусть рассеивающая среда занимает полупространство  $z > 0$ , где  $z$  – декартова координата, нормальная границе среды. В случае нормального падения и обратного рассеяния некогерентная составляющая временной корреляционной функции, описываемая рядом лестничных диаграмм, имеет вид:

$$C^{(L)}(t | \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) = \int d\mathbf{R}_1 d\mathbf{R}_2 \times \Gamma(\mathbf{R}_2, \mathbf{R}_1, t | \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) \exp[-\mu(z_1 + z_2)]. \quad (2)$$

При углах рассеяния  $\theta_s$ , близких к  $180^\circ$ , интерференционная составляющая, обусловленная циклическими [9, 10], или веерными, диаграммами, становится сравнимой с лестничной:

<sup>1)</sup>e-mail: vladimir.kuzmin@paloma.spbu.ru

$$\begin{aligned}
C^{(V)}(t | \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) = & \int d\mathbf{R}_1 d\mathbf{R}_2 \times \\
& \times \left[ \Gamma \left( \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_1, t \left| \frac{\mathbf{k}_s - \mathbf{k}_i}{2}, \frac{\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s}{2} \right. \right) - \right. \\
& \left. - \mu p_t(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s) \delta(\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1) \right] \times \\
& \times \exp \left[ -\mu(z_1 + z_2) + ik_0(x_1 - x_2) \sin \theta_s \right], \quad (3)
\end{aligned}$$

Падающий и рассеянный лучи лежат в плоскости  $(x, z)$ .

При  $t = 0$  уравнение (2) описывает интенсивность рассеянного излучения. Соответственно, уравнение (3) определяет пик обратного когерентного рассеяния.

Итерируя уравнение Бете–Солпитера, получаем ряд, обычно иллюстрируемый в виде ряда лестничных диаграмм.

Сопоставим методику аналитического суммирования ряда лестничных диаграмм и метод МК. Заметим, что первое слагаемое итерационного ряда описывает однократное рассеяние, второй – два акта рассеяния и т.д. Таким же образом метод МК описывает распространение излучения как случайный процесс, состоящий из одного, двух, ...  $N$  актов рассеяния. Добавление в теоретическом описании одного звена лестницы  $\Lambda(R_{n+1})p_0(\mathbf{k}_{n+1} - \mathbf{k}_n)$  в численном эксперименте реализуется посредством моделирования пробега фотонов на некоторое расстояние  $s$  до очередного акта рассеяния. Основное допущение стохастического метода МК состоит в постулировании закона распределения вида [11]  $f(s) = \mu \exp(-\mu s)$  случайной величины  $s$  – длины свободного пробега фотона. Из этого распределения следует, что  $s = -\mu^{-1} \ln \xi$ , где  $\xi$  – вероятность того, что величина свободного пробега не меньше  $s$ . Метод МК состоит в выборе произвольного значения  $\xi$  посредством генератора случайных чисел в интервале  $[0, 1]$ . Изменение направления движения пакета фотонов при каждом акте упругого рассеяния определяется фазовой функцией рассеяния.

Физически ряд, возникающий при итерировании уравнения (1) представляет собой ряд по кратностям рассеяния. Если интегрирование по  $R_i$  заменяется случайным выбором  $R_i = s$ , а интегрирование по ориентациям  $\mathbf{R}_i$  реализуется посредством случайного выбора углов со статистическим весом, определяемым фазовой функцией, то решение уравнения Бете–Солпитера моделируется описанной выше схемой МК и позволяет использовать ее для расчета когерентных эффектов.

В большей части известных приложений [12, 13] изучается диффузионный механизм временной эволюции неоднородностей, когда временную корреляционную функцию флуктуаций интенсивности можно представить в виде произведения статического коррелятора и экспоненциальной функции:

$$p_t(q) \approx p_0(q) \exp(-D_s q^2 t), \quad (4)$$

где  $D_s$  – коэффициент самодиффузии. Вычисление временной корреляционной функции отличается от вычисления просто интенсивности только тем, что в процессе каждого акта рассеяния вес пакета фотонов умножается на фазовую функцию  $p_t(\mathbf{k}_n - \mathbf{k}_{n-1})$ .

Объем выборки падающих фотонов варьировался в пределах  $10^5 - 10^7$ . При числе актов рассеяния более  $10^4$  моделирование траектории фотона прекращалось. Мы также переставали следить за фотоном в случае, когда его статистический вес становился меньше  $10^{-3}$ ; поскольку, по нашим оценкам, вероятность детектирования такого фотона на поверхности не превышает величину порядка  $10^{-2}$ , то такое пренебрежение приводит к погрешности не более  $10^{-5}$ . Мы контролировали точность вычисляемых параметров по устойчивости числовых значений с ростом объема выборки. При мощности выборки  $10^5$  величина интенсивности устойчива с точностью не менее четырех знаков.

Мы рассчитали временную корреляционную функцию поля  $g_1(t)$  для сред с различными значениями фактора анизотропии  $\overline{\cos \theta} = 0; 0.5$  и  $0.9$ . При моделировании мы использовали фазовую функцию Хеней–Гринштейна. В терминах  $\sqrt{t/\tau}$ , где  $\tau = 1/D_s k^2$  – характерное время диффузии рассеивающей частицы на расстояние порядка длины волны, временная корреляционная функция практически универсальна и не зависит от анизотропии однократного рассеяния, в согласии с экспериментом [12, 13] и теоретическим решением в  $P_1$ -приближении [14], а вся специфика рассеивающей системы учитывается при переходе к описанию в единицах характерного времени  $\tau$ . Полученная зависимость временной корреляционной функции хорошо описывается формулой вида  $g_1(t) \propto \exp(-\gamma \sqrt{6t/\tau})$ , предложенной в работе [13].

Мы провели расчеты временной корреляционной функции для слоев различной толщины. И в случае слоев конечной толщины зависимость от  $\overline{\cos \theta}$  достаточно слабая, как это видно из таблицы. Здесь  $l^*$  – транспортная длина, определяемая как  $l^* = l(1 - \overline{\cos \theta})^{-1}$ , где  $\overline{\cos \theta}$  – средний косинус угла однократного рассеяния.

**Интенсивность рассеянного назад света в зависимости от толщины слоя  $L$  для различных значений параметра анизотропии**

$\overline{\cos\theta}$	$L = l^*$	$L = 2l^*$	$L = 5l^*$	$L = 10l^*$	$\infty$
0	0.3481	0.5254	0.7507	0.8665	1
0.9	0.3214	0.5318	0.7784	0.9003	1

На рис.1 представлены результаты моделирования временных корреляционных функций поля для слоев конечной толщины при  $\overline{\cos\theta} = 0.9$ . Видно,

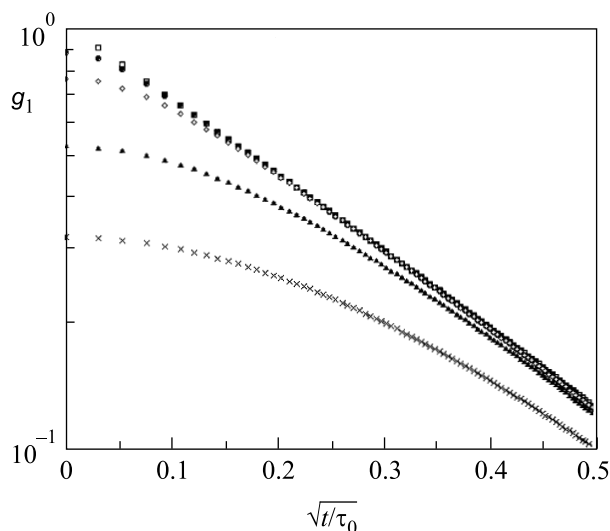


Рис.1. Временные корреляционные функции рассеянного назад излучения  $g_1$  для слоев с толщиной:  $L = l^*$  (x),  $L = 2l^*$  (▲),  $L = 5l^*$  (◇),  $L = 10l^*$  (●), и полубесконечной среды  $L = \infty$  (□). Все кривые нормированы на интенсивность света диффузионно-отраженного от полубесконечной среды. Оптические параметры среды:  $\mu = 30 \text{ мм}^{-1}$ ,  $\overline{\cos\theta} = 0.9$

что диффузионный характер распространения света, приводящий к линейной зависимости от  $\sqrt{t/\tau}$ , проявляется при все больших значениях времени с уменьшением толщины. Отметим хорошее совпадение с экспериментальными данными [13]: рис.1 практически воспроизводит рис.2 указанной работы.

На рис.2 представлены результаты расчета угловой зависимости пика когерентного обратного рассеяния также для значений  $\overline{\cos\theta} = 0; 0.5$  и  $0.9$ . Согласно (3), все отличие в случае нормального падения и малости угла обратного рассеяния от выражения для интенсивности некогерентной составляющей состоит в наличии множителя  $\exp(i\mathbf{q}_\perp(\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_2))$  который в силу трансляционной инвариантности по поперечным координатам  $\boldsymbol{\rho}$  можно заменить на  $\cos(\mathbf{q}_\perp(\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_2))$ .

Тогда, при вычислении интенсивности когерентной составляющей обратного рассеяния следует ум-

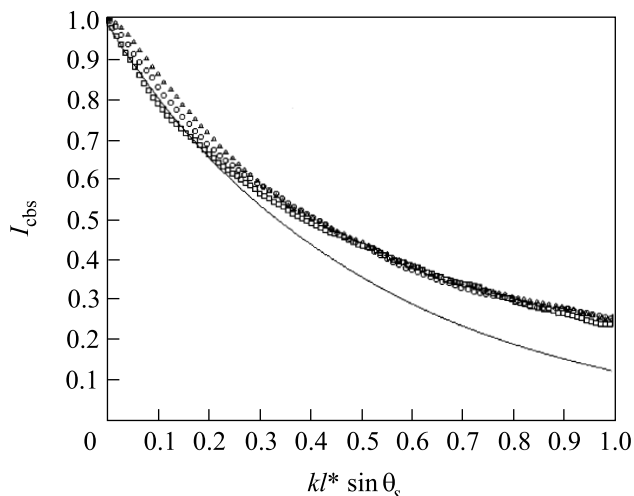


Рис. 2. Угловая зависимость пика обратного когерентного рассеяния от безразмерного параметра  $kl^* \sin \theta_s$ ;  $\lambda = 0.6 \text{ мкм}$ ,  $n_1 = 1$ ,  $\mu = 30 \text{ мм}^{-1}$ ,  $\overline{\cos\theta} = 0$  (□),  $\overline{\cos\theta} = 0.5$  (○),  $\overline{\cos\theta} = 0.9$  (△); сплошная линия – аппроксимация  $\exp(-2kl^* \sin \theta_s)$

ножить суммарный вес пакетов фотонов, пришедших на границу раздела с вектором  $\mathbf{k}_s$  на расстоянии  $\rho$  от точки входа, на множитель  $\cos(\mathbf{q}_\perp \boldsymbol{\rho})$  и просуммировать по всей поверхности.

Как и в случае временных корреляций, в безразмерных переменных  $\tilde{q} = kl^* \sin \theta_s$ , рассчитанная угловая зависимость пика обратного когерентного рассеяния оказывается универсальной и достаточно хорошо описывается формулой  $I_{CBS} \propto \exp(-\gamma kl^* \sin \theta_s)$  при значении  $\gamma = 2$ . Отметим, что полученная универсальная зависимость вида  $I_{CBS} \propto \exp(-\gamma kl^* \sin \theta_s)$  при  $\gamma = 2$  существенно отличается от зависимости, предсказываемой диффузионным приближением [15]:

$$I_{CBS}^{\text{diff}} \propto 1 - 2 \frac{(1 + z^*)^2}{1 + 2z^*} kl^* \sin \theta_s,$$

при  $kl^* \sin \theta_s \ll 1$ , где  $z^* = 0.71(1 - \overline{\cos\theta})^{-1}$ . Эта формула дает наклон  $\gamma^{(\text{diff})} = 2.3$  при  $\overline{\cos\theta} = 0$  и  $\gamma^{(\text{diff})} = 0.71$  при  $\overline{\cos\theta} \rightarrow 1$ .

В отличие от диффузионного приближения, которое предсказывает уменьшение коэффициента линейного наклона пика обратного когерентного рассеяния с ростом анизотропии, рассчитанная нами зависимость указывает на универсальный характер убывания. Следует также отметить, что в случае сильной анизотропии фазовой функции проявление когерентных эффектов может оказаться весьма значительным, несмотря на малость этих параметров. Так, распад временных корреляций интенсивности определяется параметром  $t/\tau$ , который может быть значительно больше по сравнению с параметром

$(t/\tau)(l/l^*)$ . Именно поэтому корреляционные функции интенсивности описываются в рамках теории многократного рассеяния даже в случае их уменьшения на два порядка.

Мы провели моделирование когерентных эффектов при условии многократного рассеяния в рамках единого стохастического подхода. Подобные расчеты без каких-либо затруднений можно выполнить для суспензий, представляемых обычно в виде системы твердых сфер (см. [16]); фазовая функция в такой системе описывается как произведение формфактора Ми и структурного фактора Перкуса–Йевики.

Проведенный сравнительный анализ позволяет значительно упростить моделирование переноса излучения и когерентных эффектов в случайно неоднородных сильно рассеивающих средах, таких, как жидкие кристаллы, биоткани и др., а также значительно расширить область применения данных методов.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант # 02-02-16577, и грантов The Royal Society (код проекта # 15298), и NATO (код проекта # PST.CLG.979652). Авторы благодарят Д. Ю. Чурмакова за помощь в проведении расчетов и В. П. Романова за ценные советы.

1. В. П. Кандидов, УФН **166**, 1309 (1996).
2. M. Ospeck and S. Fraden, Phys. Rev. **E49**, 4578 (1994).
3. T. Iwai, H. Furukawa, and T. Asakura, Opt. Rev. **2**, 413 (1995).
4. K. Ishii, T. Iwai, and T. Asakura, Opt. Rev. **4**, 643 (1997).
5. С. Е. Скипетров, С. С. Чесноков, Квантовая Электроника **25**, 753 (1998).
6. R. Lenke and G. Maret, Eur. Phys. J. **B17** 171 (2000).
7. С. Е. Скипетров, И. В. Меглинский, ЖЭТФ **113**, 1213 (1998).
8. R. Lenke, R. Tweer, and G. Maret, J. Opt. A-Pure Appl. Op. **4**, 293 (2002).
9. Ю. Н. Барабаненков, Изв. вузов., сер. Радиофизика **16**, 88 (1973).
10. А. А. Голубенцев, ЖЭТФ **86**, 47 (1984).
11. И. М. Соболев, *Метод Монте Карло*, М.: Наука, 1985.
12. G. Maret and P. Z. Wolf, Phys. **B65**, 409 (1987).
13. D. J. Pine, D. A. Weitz, P. M. Chaikin, et al., Phys. Rev. Lett. **60** 1134 (1988).
14. V. L. Kuzmin, V. P. Romanov, and E. V. Aksenova, Phys. Rev. **E65**, 016601 (2001).
15. E. Akkermans, P. E. Wolf, R. Maynard et al., J. Phys. (Fr.) **49**, 77 (1988).
16. В. Л. Кузьмин, В. П. Романов, И. В. Меглинский, Опт. и спектр. **96**, 139 (2004).