

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Билоус Павел Юрьевич

**Изучение многократного рассеяния в нематических жидких кристаллах.**

**Оценка отношения коэффициентов диффузии света по и перпендикулярно директору.**

Курсовая работа

Научный руководитель: \_\_\_\_\_ д.ф.м.н., проф. Романов В.П.

Санкт-Петербург

2013

Некоторые органические материалы переходят из твердого состояния в жидкость не сразу, а испытывают ряд переходов, включающих новые фазы. Одной из таких фаз является нематическая фаза, обладающая рядом отличительных свойств. Корреляция положений центров тяжести соседних молекул подобна корреляции, существующей в обычной жидкости. Имеется определенный порядок в направлении молекул – они имеют тенденцию устанавливаться параллельно некоторой общей оси, характеризуемой единичным вектором  $n$ , называемом директором. В результате нематик является оптически одноосной средой с оптической осью вдоль  $n$ . Направление  $n$  в пространстве произвольно; на практике оно определяется слабыми силами (такими, как ориентирующее влияние стенок сосуда). Состояния директоров  $n$  и  $-n$  неразличимы. Нематические фазы встречаются только среди таких материалов, у которых правая и левая форма неразличимы. Каждая молекула, входящая в состав вещества, должна быть тождественна своему зеркальному отражению (ахиральность) или, если это не так, система должна быть рацемической (1:1) смесью правой и левой форм вещества.

Интерес к этим объектам обусловлен тем, что для описания процесса однократного рассеяния в них не приходится вводить дополнительные подгоночных параметров. Объяснение заключается в том, что подавляющий вклад в рассеяние вносят флуктуации ориентации, или флуктуации директора, спектр которых хорошо известен. Поэтому для нематических жидких кристаллов в принципе возможно количественное описание экспериментальных данных, то есть наиболее достоверный анализ эффектов многократного рассеяния в неоднородных средах.

Тот факт, что нематик является оптически одноосной средой, предполагает определенные свойства. В анизотропной диэлектрической среде (монокристалл) линейная связь между индукцией и напряженностью электрического поля имеет более сложный вид, не сводящийся к простой пропорциональности.

Наиболее общий вид такой зависимости дается выражением

$$D_i = D_{0i} + \varepsilon_{ik} E_k$$

Где  $D_0$  – постоянный вектор, а совокупность величин  $\varepsilon_{ik}$  составляет тензор второго ранга – тензор диэлектрической проницаемости (или

диэлектрический тензор). В большинстве кристаллов свободный член  $\mathbf{D}_0$  отсутствует.

Диэлектрический тензор является симметричным, и как любой симметричный тензор может быть приведен к диагональному виду выбором правильной системы координат. В общем случае тензор  $\varepsilon_{ik}$  определяется тремя главными значениями  $\varepsilon^{(1)}, \varepsilon^{(2)}$  и  $\varepsilon^{(3)}$ . Все эти величины всегда больше единицы.

В зависимости от той или иной симметрии кристалла число различных главных значений тензора  $\varepsilon_{ik}$  может оказаться и меньше трех.

Кристаллы, в которых два из трех главных значений совпадают, так что имеется всего две независимые величины, называются одноосными.

Как упоминалось раньше, по своим оптическим свойствам нематические жидкие кристаллы являются одноосными с тензором диэлектрической проницаемости

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

Где  $\varepsilon_a = \varepsilon_{||} - \varepsilon_{\perp}$ ,  $\varepsilon_{||}, \varepsilon_{\perp}$  - 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, (o), и необыкновенную, (e), с волновыми векторами  $\mathbf{k}^{(o)}$  и  $\mathbf{k}^{(e)}$ .

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

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

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

- показатели преломления обыкновенной и необыкновенной волны,  $\theta$  - угол между векторами  $\mathbf{n}^0$  и  $\mathbf{k}^{(e)}$ .

Поляризации волн удовлетворяют условиям

$$\mathbf{e}^{(o)} \perp \mathbf{n}^0, \quad \mathbf{e}^{(o)} \perp \mathbf{k}^{(o)}, \quad \varepsilon^0 \mathbf{e}^{(e)} \perp \mathbf{k}^{(e)}$$

$\mathbf{e}^{(e)}$  лежит в плоскости, образованной векторами  $\mathbf{k}^{(e)}$  и  $\mathbf{n}^0$ .

В статье 1996 года под названием: «Light diffusion and diffusing-wave spectroscopy in nematic liquid crystals» описан эксперимент, в котором лазер светит на лицевую поверхность образца с жидким кристаллом цилиндрической формы 1 см в диаметре и 1 см высотой, находящегося в нематической фазе. Когда достигается диффузионный режим рассеяния света, на другой стороне измеряется интенсивность. Данные по распределению интенсивности на выходе позволяют оценить отношение коэффициентов диффузии нематического жидкого кристалла. Сделать это можно, используя формулу для интенсивности, решающую уравнение диффузии света для бесконечной среды:

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} - D_{\parallel} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - D_{\perp} \nabla_{\perp}^2 \right) U(\mathbf{r}, t) = 0$$
$$U(x, r_{\perp}, t) = \frac{1}{(4\pi|t|)^{3/2}} \frac{1}{D_{\perp} \sqrt{D_{\parallel}}} \cdot \exp \left( -\frac{1}{4|t|} \left( \frac{|x|^2}{D_{\parallel}} + \frac{|r_{\perp}|^2}{D_{\perp}} \right) \right)$$

Здесь  $x$  – составляющая вдоль магнитного поля,  $r_{\perp}$  – поперек поля.

Замечание: задачей является именно оценка отношения, т.к. для точности необходимо учитывать влияния границ.

В эксперименте по интенсивности света на выходе находится отношение коэффициентов диффузии света.

Для моделирования процесса рассеяния в программе имитируется движение фотонов. Принцип моделирования построен на том, что для выделенного направления известны индикатриса однократного рассеяния и длина свободного пробега. По этим данным для фотона случайным образом в соответствии с вероятностным распределением высчитывается следующее положение для рассеяния.

В программе моделировалось многократное рассеяние методом Монте-Карло. В этой модели ориентированный магнитным полем нематический жидкий кристалл заполняет все пространство. Геометрия системы задана следующим образом. Ось  $x$  направлена вдоль магнитного поля  $\mathbf{H}$  и директора  $\mathbf{n}^0$ . Выбор двух других осей произволен.

Одноосность среды приводит к тому, что в процессе рассеяния возникает 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. Длина свободного пробега фотонов, соответствующих обыкновенной и необыкновенной волнам зависит от угла между волновым вектором и директором.

При моделировании многократного рассеяния будем считать, что, перемещаясь в среде, фотон последовательно совершает акты однократного рассеяния. Эти рассеяния считаются точечными, между ними фотоны перемещаются прямолинейно в среде с некоторым эффективным значением диэлектрической проницаемости  $\varepsilon(\mathbf{k})$  и имеют поляризацию, соответствующую одному из двух типов волн. В каждом акте однократного рассеяния необходимо разыграть тип поляризации рассеянной волны, направление, в котором фотон будет распространяться, и расстояние, которое он пролетит до следующего рассеяния. Будем считать, что источник фотонов находится в точке  $\mathbf{r}=0$  и они запускаются вдоль оси  $z$ .

Направление, в котором фотон будет распространяться после рассеяния, при моделировании выбирается случайным образом с плотностью вероятности рассеяния фотона в единицу телесного угла, задаваемой индикатрисой однократного рассеяния.

После того, как выбран волновой вектор рассеянного фотона, необходимо определить расстояние, которое фотон пройдет до следующего акта рассеяния. В нашей модели в силу однородности среды длина экстинкции не меняется вдоль выбранного направления. Тогда плотность вероятности длины свободного пробега между двумя последовательными актами рассеяния  $s$  имеет вид

$$f(s) = l e^{-\frac{s}{l}}$$

Где  $l$  – средняя длина свободного пробега.

Были добавлены границы и способ учета координат регистрируемых фотонов. При этом учитывалась симметрия при отражении вдоль осей  $x$  и  $y$ . Таким образом, интенсивность строилась в первой четверти. Четверть плоскости разбивалась сферическими слоями с равными расстояниями друг от друга. «Кольцо» под номером  $k$  разбивалось на  $2k+1$  секторов с равным углами. При этом ячейки, на которые разбивается поверхность, имеют одинаковую площадь. По этим ячейкам строится дискретная интенсивность, представляющая собой число фотонов, вылетевших через каждую ячейку.

После моделирования движения множества фотонов набирается достаточная статистика для определения отношения коэффициентов диффузии в направлениях параллельном и перпендикулярном магнитному полю.

Используя уравнение для интенсивности, в пакете origin была построена интерполяция методом наименьших квадратов распределения  $U(x,y,t)$ , взяв  $D_{||}|t|$  и  $D_{\perp}|t|$  за неизвестные параметры, которые нужно определить. Их отношение и дает искомое отношение коэффициентов диффузии вдоль и поперек магнитного поля.

В результате отношение коэффициентов диффузии света вдоль и поперек директора в исследуемом нематике равно 2,5. Как и ожидалось вдоль директора коэффициент выше.

Список литературы:

«Электродинамика сплошных сред» Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц.

«Статистическая физика. Часть 1» Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц.

«Структурные превращения в жидких кристаллах» С. А. Пикин.

«Light diffusion and diffusing-wave spectroscopy in nematic liquid crystals»  
H. Stark, M. H. Kao, K. A. Jester, T. C. Lubensky, and A. G. Yodh.

«Fast semianalytical Monte Carlo simulation for time-resolved light  
propagation in turbid media» Eric Tinet, Sigrid Avrillier, and Jean Michel Tualle.