

# Lichttransport in zellulären Strukturen

Diplomarbeit  
vorgelegt von

**Michael Schmiedeberg**

Fachbereich Physik  
Mathematisch-Naturwissenschaftliche Sektion  
Universität Konstanz

Erster Gutachter: PD Dr. Holger Stark  
Zweiter Gutachter: Prof. Dr. Georg Maret

*Oktober 2004*



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Grundlagen</b>	<b>7</b>
2.1	Schäume . . . . .	7
2.1.1	Geometrischer Aufbau von Schäumen . . . . .	7
2.1.2	Zweidimensionale Schäume . . . . .	8
2.2	Vielfachstreuung . . . . .	9
2.2.1	Lichtausbreitung als Diffusionsprozess . . . . .	9
2.2.2	Diffusing-Wave-Spectroscopy . . . . .	11
<b>3</b>	<b>Photon-Channelling</b>	<b>13</b>
3.1	Idee des Photon-Channelling . . . . .	13
3.1.1	Das Experiment von Gittings, Bandyopadhyay und Durian . . . . .	15
3.1.2	Photon-Channelling in einem zweidimensionalen Gitter	16
3.2	Theorie I: Allgemeines . . . . .	17
3.2.1	Mögliche Winkel bei geometrischen Bahnen . . . . .	19
3.2.2	Eine Beziehung zwischen Zeit und Schrittzahl . . . . .	22
3.3	Theorie II: Photonenausbreitung in unregelmäßigen Schäumen	27
3.3.1	Photonenausbreitung als Random-Walk-Prozess . . . . .	27
3.3.2	Zeitabhängigkeit beim Random-Walk-Modell . . . . .	31
3.4	Theorie III: Photonenausbreitung in exakten und fast exakten Sechseckgittern . . . . .	32
3.4.1	Ballistische Näherung für das exakte Gitter . . . . .	32
3.4.2	Abnehmende Photonenzahl auf geraden Bahnen . . . . .	38
3.4.3	Ausbreitung im exakten Gitter als Lévy-Walk . . . . .	45
3.4.4	Selbstähnlicher Lévy-Walk . . . . .	59
3.5	Theorie IV: Photonenausbreitung in Schäumen beliebiger Unregelmäßigkeit . . . . .	62
3.6	Simulation der Photonenausbreitung am Computer . . . . .	66
3.6.1	Berechnung einer Photonenbahn . . . . .	66
3.6.2	Spezielle Photonenbahnen . . . . .	73
3.6.3	Erzeugung von unregelmäßigen Gittern . . . . .	78

3.6.4	Vorgehen bei den Simulationen . . . . .	81
3.7	Ergebnisse der Simulationen und Vergleich mit der Theorie . . . . .	83
3.7.1	Simulationsgenauigkeit und Bedeutung der Wahl der Anfangsbedingungen . . . . .	83
3.7.2	Ergebnisse für das exakte Sechseckgitter . . . . .	84
3.7.3	Skalengesetz und Momentenanalyse für die Photonenverteilung . . . . .	86
3.7.4	Diffusion im Grenzfall sehr unregelmäßiger Gitter . . . . .	89
3.7.5	Abhängigkeit der Diffusionskonstanten von der Unordnung im Gitter . . . . .	91
3.8	Gültigkeitsbereich des Photon-Channelling-Modells . . . . .	94
<b>4</b>	<b>Ausbreitung durch Flüssigkeit und Luft</b>	<b>97</b>
4.1	Vorgehen bei den Simulationen . . . . .	97
4.1.1	Verhalten an Grenzflächen . . . . .	98
4.1.2	Ausbreitung im dünneren Medium . . . . .	99
4.2	Theoretische Überlegungen . . . . .	101
4.2.1	Die mittleren Transmissionswahrscheinlichkeiten . . . . .	101
4.2.2	Weg- und Zeitanteil einer Bahn in der Flüssigkeit . . . . .	103
4.2.3	Abschätzung der allgemeinen Diffusionskonstanten . . . . .	105
4.3	Ergebnisse der Simulationen . . . . .	108
4.3.1	Weganteil der Photonenverteilung in der Flüssigkeit und Transmissionswahrscheinlichkeiten . . . . .	108
4.3.2	Diffusion in unregelmäßigen Gittern . . . . .	109
4.3.3	Superdiffusion im exakten Gitter . . . . .	113
4.3.4	Untersuchung der erlaubten Winkel . . . . .	116
4.4	Gültigkeitsbereich und Interferenzeffekte beim erweiterten Photon-Channelling-Modell . . . . .	118
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>121</b>

# Kapitel 1

## Einleitung

Dem Phänomen der Lichtvielfachstreuung begegnet man alltäglich: Durch Wolken hindurch kann man die genaue Position der Sonne nicht erkennen. Das Licht wird in der Wolke nämlich so oft gestreut, dass die Richtung, in die es die Wolke verlässt, vollkommen unabhängig von der Einstrahlungsrichtung ist. Auch in weiß gestrichenen Wänden finden so viele Streuungen statt, dass eine beleuchtete Wand nicht reflektierend oder durch Interferenzeffekte bunt erscheint, sondern im Idealfall eben weiß und zwar nahezu unabhängig vom Betrachtungswinkel und der Position der Lichtquelle. Die weiße Farbe der meisten Schäume (z.B. eines Rasierschaumes) ist ebenfalls eine Folge der Lichtvielfachstreuung.

Um Lichtvielfachstreuung erklären zu können, ist es wichtig den Zusammenhang zwischen dem genauen Mechanismus des Lichttransportes und der Struktur des streuenden Mediums zu kennen. In dieser Arbeit werden Schäume oder schaumähnliche zelluläre Strukturen betrachtet, also Gebilde, bei denen Zellen einer Substanz von Wänden aus einer zweiten Substanz begrenzt sind. Auch wenn experimentell bekannt ist, dass sie vielfachstreuende Medien sind, so ist noch nicht eindeutig geklärt, wie die Vielfachstreuung zu Stande kommt. Ein Ansatz ist, die Kanten, an denen sich die Wände des Schaumes treffen, sowie deren Schnittpunkte als streuende Elemente anzusehen und die Einflüsse der Wände zu vernachlässigen [1]. Ein anderer Ansatz, der auch in dieser Arbeit verwendet wird, besteht darin, die Streuung vor allem durch Reflektionen und durch Brechung an den Wänden des Schaumes zu erklären [2, 3]. Da die Wände groß im Vergleich zur Wellenlänge sind, wird dabei geometrische Strahlenoptik verwendet.

Motiviert wurde diese Arbeit durch eine Veröffentlichung von A.S. Gittings, R. Bandyopadhyay und D.J. Durian, deren Messungen darauf hinweisen, dass die Dichte der Aufenthaltswahrscheinlichkeit für ein Photon in den Wänden des Schaumes größer ist als in der Luft dazwischen, also im

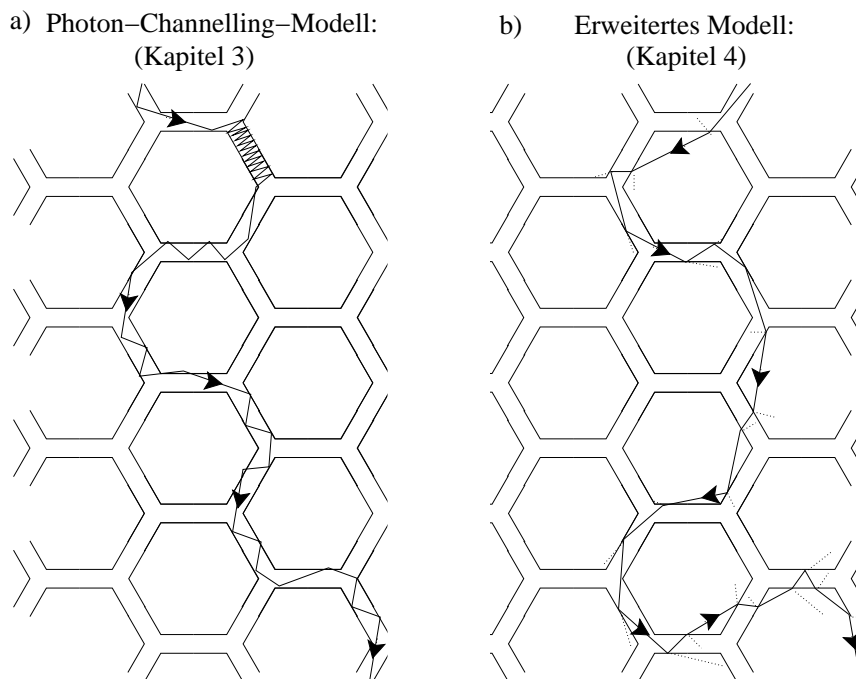


Abbildung 1.1: **a)** Beim sogenannten Photon-Channelling-Modell, welches in Kapitel 3 näher untersucht wird, breiten sich die Photonen nur in den Wänden aus. An jeder Linie werden sie immer reflektiert. **b)** In Kapitel 4 wird die grundsätzliche Reflexion aufgehoben. Die Photonen können an jeder Linie entweder reflektiert oder transmittiert werden. Die Wahrscheinlichkeiten dafür ergeben sich aus den Fresnel'schen Formeln.

Inneren der Zellen selbst [4]. Damit drängt sich die Frage auf, was für ein Ausbreitungsverhalten man erhält, wenn sich die Photonen vor allem in den Wänden fortbewegen. Dies wird in der vorliegenden Arbeit für zweidimensionale Schäume beantwortet. Dazu wird als Schaum oder zelluläre Struktur ein zweidimensionales Sechseckgitter betrachtet, dessen Linien durch Wände bzw. Kanäle ersetzt werden. In Kapitel 3 wird zunächst untersucht, wie die Photonen sich in einer solchen Struktur ausbreiten, wenn sie sich nur in den Wänden bewegen dürfen und an jeder Grenzlinie der Kanäle reflektiert werden (siehe Abbildung 1.1a). In Kapitel 4 wird das Modell erweitert: Die Photonen können nun entweder reflektiert oder in die Zellen transmittiert werden und bewegen sich daher sowohl in den Wänden als auch in den Luftblasen (siehe Abbildung 1.1b). Für beide Modelle wird vor allem die Photonenverteilung nach einer bestimmten Zeit und die zeitliche Entwicklung des quadratischen Mittels der Photonenpositionen untersucht. Dabei stellt man fest, dass die Ergebnisse wesentlich davon abhängen, ob man die Ausbreitung in einem perfekten hexagonalen Schaum oder in einem ungeordneten Sechseckgitter untersucht: In einem Gitter mit Störungen breiten sich

die Photonen, so wie man es für die Vielfachstreuung üblicherweise erwartet, diffusiv aus, d.h. die Photonenverteilung ist gaußförmig, deren Breite, also das mittlere Abstandskadrat, nimmt proportional zur Zeit zu. In einem exakten Gitter jedoch bewegen sich die Photonen bevorzugt entlang der sechs Hauptgitterrichtungen, was zu einer sternförmigen Photonenverteilung führt. Das mittlere Abstandskadrat  $\langle r^2 \rangle$  gehorcht in Abhängigkeit von der Zeit  $t$  einem Potenzgesetz ( $\langle r^2 \rangle \propto t^\nu$ ) mit einem Exponenten  $\nu$  der zwischen eins und zwei liegt. Die Photonen breiten sich also superdiffusiv aus. In dieser Arbeit werden die Ursachen dieser Superdiffusion aufgedeckt und der Übergang von der Superdiffusion zur Diffusion beim Einführen von Unregelmäßigkeiten im Gitter untersucht.

In Kapitel 2 sind die Grundlagen der Physik von Schäumen und der Lichtvielfachstreuung kurz zusammengestellt. Das Photon-Channelling-Modell wird in Kapitel 3 untersucht. Nach einer Motivation in Abschnitt 3.1, bei der vor allem die oben bereits erwähnten Schlussfolgerungen aus dem Experiment von A.S. Gittings, R. Bandyopadhyay und D.J. Durian genauer erläutert werden, behandeln die darauffolgenden Abschnitten die Theorie der Photonenausbreitung in den Wänden: Insbesondere wird für die diffusive Ausbreitung in unregelmäßigen Schäumen ein Random-Walk-Modell betrachtet, bei dem die Photonen an Kanalverzweigungen rein zufällig eine neue Richtung einschlagen (Abschnitt 3.3). Um die Superdiffusion im exakten Sechseckgitter erklären zu können, wird in Abschnitt 3.4 ein Lévy-Walk-Modell motiviert, bei dem die Photonen entweder sehr lange gerade Schritte ausführen oder eine bestimmte Zeit im wesentlichen auf der Stelle stehen bleiben. Das erste und zweite Moment der verwendeten Schrittlängenverteilung ist dabei divergent. Das Modell liefert eine deutlich superdiffusive Ausbreitung und auch die Sternenform der Photonenverteilung wird mit dem Lévy-Walk-Modell erklärt. Den Abschluss des Theorieteils bildet Abschnitt 3.5, welcher das Random-Walk-Modell mit zufälligen Kanalwechselln und das Lévy-Walk-Modell kombiniert und somit die Ausbreitung in Gittern beliebiger Unregelmäßigkeit beschreibt. Insbesondere kann die starke Abhängigkeit der Diffusionskonstante von der Größe der Gitterstörungen berechnet werden. Nach dem Theorieteil erklärt Abschnitt 3.6 das Vorgehen bei der Simulation der Photonenausbreitung am Computer. Deren Ergebnisse werden dann in Abschnitt 3.7 präsentiert und mit den theoretischen Berechnungen verglichen. Am Ende des Kapitels wird in Abschnitt 3.8 die Gültigkeit des Photon-Channeling-Modells besprochen.

Kapitel 4 untersucht das erweiterte Modell. Dazu wird zunächst in Abschnitt 4.1 beschrieben, wie die Simulationsprogramme verändert werden müssen, um die Ausbreitung nach dem erweiterten Modell zu berechnen. In Abschnitt 4.2 folgen einige theoretische Überlegungen. Insbesondere wird eine von A.S. Gittings, R. Bandyopadhyay und D.J. Durian in [4] vermutete

Beziehung für die mittleren Transmissionskoeffizienten theoretisch hergeleitet. Desweiteren enthält der Abschnitt eine Abschätzung der Diffusionskonstante für die Ausbreitung nach dem erweiterten Modell. Die Ergebnisse der Simulationen werden in Abschnitt 4.3 dargestellt und mit den theoretischen Vorhersagen und den Ergebnissen aus [4] verglichen. Am Ende des Kapitels bespricht Abschnitt 4.4 die Gültigkeit des erweiterten Modells; unter anderem enthält er eine Diskussion zu den Auswirkungen von Interferenzeffekten, die ansonsten in dieser Arbeit nicht berücksichtigt werden. Kapitel 5 fasst schließlich die wichtigsten Ergebnisse dieser Arbeit zusammen.



## Kapitel 2

# Grundlagen

### 2.1 Schäume

Ein Schaum ist ein Gebilde aus zwei Substanzen, wobei eine Substanz in Blasen von der anderen umschlossen wird. Das bekannteste Beispiel für einen Schaum sind durch Wasser voneinander getrennte Luftblasen. Dem Wasser werden dabei meist stabilisierende Substanzen (z.B. Tenside oder andere amphiphile Stoffe) beigemischt, die einerseits die Oberflächenspannung reduzieren und andererseits verhindern, dass die Wasserflächen zu dünn werden und eventuell reißen. Es gibt aber auch sehr viele andere Systeme, die man als Schaum oder zumindest als zelluläre Struktur bezeichnen kann [5]: Dazu gehören Gebilde, die aus zwei Flüssigkeiten bestehen, z.B. Emulsionen. Auch ein magnetisches System, bei dem zwei unterschiedliche Magnetisierungsrichtungen eine zelluläre Struktur bilden, kann als Schaum bezeichnet werden. Desweiteren gibt es den Bereich der Festkörperschäume, zu dem unter anderem aufgeschäumte Metalle und Kunststoffe gehören. Auch in der Biologie gibt es sehr viele Beispiele für zelluläre, schaumähnliche Strukturen, wie z.B. Kork oder krebsbefallener Knochen.

In dieser Arbeit wird die Lichtausbreitung in Schäumen untersucht. Es wird normalerweise von einem aus einer Flüssigkeit und Luft bestehendem Schaum gesprochen, da dies wegen der Größenordnung und wegen der meist geringen Absorption das naheliegendste System für Lichtvielfachstreuung ist. Selbstverständlich lassen sich aber alle Ergebnisse auf andere zelluläre Systeme mit ähnlichen Eigenschaften übertragen.

#### 2.1.1 Geometrischer Aufbau von Schäumen

Im Folgenden sind die wichtigsten Grundregeln aus [5] zum geometrischen Aufbau dreidimensionaler Schäume kurz zusammengestellt (zweidimensionale Schäume werden im nächsten Abschnitt behandelt):

**Das Gesetz von Laplace:**

Die Druckdifferenz  $\Delta p$  zwischen zwei benachbarten Luftblasen ist folgendermaßen mit der Oberflächenspannung  $\gamma$  und dem Krümmungsradius  $r$  der Flüssigkeitsfläche zwischen diesen Luftblasen verknüpft:

$$\Delta p = \frac{4\gamma}{r}$$

Der Krümmungsradius  $r$  ergibt sich dabei gemäß  $\frac{1}{r} = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right)$  aus den Hauptkrümmungsradien (d.h. den extremalen Radien)  $r_1$  und  $r_2$ . Bei Druckunterschieden zwischen zwei Luftblasen krümmen sich also die dazwischenliegenden Flüssigkeitsflächen bis die Oberflächenspannung den Druckunterschied kompensiert.

**Die Regeln von Plateau:**

In einem trockenem Schaum treffen sich immer genau drei Flüssigkeitsflächen an einer Kante (auch Plateau-Border genannt), wobei zwischen zwei Flüssigkeitsflächen immer ein Winkel von  $120^\circ$  liegt. Jeweils genau vier Kanten wiederum treffen sich in einem Punkt, wobei zwischen den Kanten immer der Tetraederwinkel  $\arccos(-1/3) \approx 109,47^\circ$  liegt.

Ein feuchter Schaum besteht aus einer Ansammlung von Luftblasen; Kanten können somit nicht mehr streng definiert werden. Selbst bei einem realen trockenen Schaum sammelt sich die Flüssigkeit vor allem in der Nähe der Kanten (Plateau-Border). Strenggenommen gibt es also keine scharfen Ecken zwischen zwei sich treffenden Grenzflächen; die Grenzflächen gehen vielmehr glatt ineinander über. In der vorliegenden Arbeit wird die Lichtausbreitung nur in idealisierten trockenen Schäumen mit bis zu den Kanten hin flachen Flüssigkeitswänden untersucht.

**2.1.2 Zweidimensionale Schäume**

Zweidimensionale Schäume kann man als einschichtige Variante dreidimensionaler Schäume auffassen. Sie treten unter anderem an Flüssigkeitsoberflächen oder zwischen zwei begrenzenden Platten auf.

Ähnlich wie bei dreidimensionalen Schäumen krümmen sich die Flüssigkeits-Begrenzungslinien, wenn es einen Druckunterschied zwischen den angrenzenden Luftbereichen gibt. Die Druckunterschiede bzw. die Krümmungen werden in dieser Arbeit vernachlässigt, alle Flüssigkeitslinien werden als geradlinig angenommen.

Die  $120^\circ$ -Regel von Plateau bleibt für ideale zweidimensionale Schäume erhalten, d.h. immer genau drei Flüssigkeitslinien treffen sich in einem Punkt, wobei alle Winkel zwischen diesen Linien  $120^\circ$ -Winkel einschließen.

Das einfachste Beispiel und gleichzeitig das Beispiel mit der größtmöglichen Symmetrie für eine mögliche Schaumstruktur ist eine Sechseckparquetierung der Ebene, gemeinhin als Bienenwabenmuster bekannt. Ein solches Sechseckgitter wird in dieser Arbeit immer wieder als Schaum mit größter Ordnung betrachtet. Unregelmäßige zweidimensionale Schäume kann man durch zufälliges Verschieben der Gitterpunkte eines solchen hexagonalen Gitters erreichen oder, wenn man sicherstellen will, dass keine unphysikalischen konkaven Luftblasen vorkommen, mit der in Abschnitt 3.6.3 beschriebenen Voronoi-Konstruktion. Diese theoretisch konstruierten unregelmäßigen Gitter können Winkel aufweisen, die von  $120^\circ$  verschieden sind. Sie beschreiben somit strenggenommen keinen echten zweidimensionalen Schaum mehr. Als Modell für einen projizierten dreidimensionalen Schaum oder für fast einschichtige unregelmäßige Schäume (z.B. an einer Flüssigkeitsoberfläche) sind sie aber dennoch sehr gut geeignet. Außerdem eignen sie sich hervorragend für die Simulation der Lichtausbreitung und die so simulierte Lichtausbreitung unterscheidet sich nicht wesentlich von der in echten Schäumen mit gekrümmten Linien und ausschließlich  $120^\circ$ -Winkeln (siehe Abschnitt 3.6.3).

## 2.2 Vielfachstreuung

In diesem Abschnitt geht es um die Lichtstreuung in Medien, die sehr viele Streuer enthalten. Solche Medien sind z.B. Wolken, kolloidale Suspensionen oder auch Schäume. Die Art der Einzelstreuung, ob Rayleigh-Streuung (Streuung an Teilchen, die viel kleiner als die Wellenlänge sind), Mie-Streuung (anisotrope Streuung bei Teilchen, deren Radius vergleichbar mit der Wellenlänge ist) oder Streuung im Sinne von Reflektionen in Schäumen, soll dabei keine Rolle spielen.

### 2.2.1 Lichtausbreitung als Diffusionsprozess

Bereits 1905 wurde Licht, welches ein ausreichend trübes Medium durchquert, von A. Schuster mit einem Random-Walk-Modell beschrieben [6]. Wird ein Photon sehr häufig gestreut bevor es das Medium verläßt und verliert es dabei jegliche Information über seine ursprüngliche Richtung, so eignet sich tatsächlich ein Diffusionsmodell sehr gut zur Beschreibung der Lichtausbreitung. Die vom Medium abhängigen charakteristischen Größen dieser Ausbreitung sind die Diffusionskonstante  $D$  und die effektive mittlere freie Transportweglänge  $l^*$ , die angibt, nach welcher Weglänge die Richtung

des Photons vollkommen unabhängig von der Ausgangsrichtung ist. Bei isotropen Streuern oder im Falle der Rayleigh-Streuung ist  $l^*$  gleich der mittleren freien Weglänge, bei anisotropen Streuern hängt sie zusätzlich noch vom mittleren Kosinus der Streuwinkel ab (siehe auch Abschnitt 3.3.1). Zwischen  $D$  und  $l^*$  gilt die Beziehung (siehe z.B. in [7])

$$D = \frac{cl^*}{m}; \quad (2.1)$$

dabei ist  $m$  die Raumdimension und  $c$  die Lichtgeschwindigkeit im Medium.

Um ideale diffusive Lichtausbreitung zu erhalten, benötigt man ein ausreichend streuendes Medium; insbesondere sollte  $l^*$  klein im Vergleich zur Probengröße sein. Charakteristisch für gute vielfachstreuende Medien ist das trübe, weiße Aussehen: Trüb deshalb, weil kein Licht auf geradem Wege durch das Medium gelangt. Weiß ist es, weil Photonen aller Wellenlängen in alle Richtungen gleichermaßen das Medium wieder verlassen. Der Winkel zwischen Lichtquelle und Beobachter sollte keine Rolle spielen.

Bei streng geordneten Streuern (wie z.B. in Kristallen) kommt es zur Bragg-Streuung, man erhält also ein regelmäßiges Interferenzmuster. Unordnung bei den Streuern hingegen führt zu unregelmäßigen Interferenzeffekten: Bei der Beobachtung von gestreutem monochromatischem, kohärentem Licht (also z.B. bei der Streuung eines Laserstrahles) fallen sogenannte Speckles auf. Dabei handelt es sich um Muster mit wechselnder Lichtintensität, die durch zufällige Interferenz zu Stande kommen. Die Speckles lassen sich auch mit einem Random-Walk-Modell erklären, wenn man bei jedem Photon einen Phasenfaktor mitführt. Bildet man das Ensemble-Mittel, also das Mittel über alle Realisierungsmöglichkeiten der ungeordneten Streuerstruktur, so ergibt sich die Intensität, die man auch aus einem Diffusionsmodell ohne Berücksichtigung von Phasen und Interferenzen erhält. Im Ensemble-Mittel verschwindet also das Speckle-Muster. Experimentell erhält man einen Ensemble-Mittelwert durch Drehen der Probe oder Messen über einen Zeitraum, der lang im Vergleich zu den Bewegungen der Streuer ist.

Ein anderer Interferenzeffekt, die sogenannte schwache Lokalisation, beruht auf der Zeitumkehrsymmetrie [8, 9, 10]: Jedes Photon, welches die Probe in Richtung Lichtquelle wieder verlässt, kann konstruktiv mit einem in umgekehrter Richtung durch das Medium gelaufenem Photon interferieren. Dies führt im Verhältnis zu inkohärent gestreuten Photonen zu einer Verdoppelung der Intensität in Rückstreurichtung. Wird  $l^*$  vergleichbar mit der Wellenlänge oder kürzer, so kann es theoretisch auch noch zu einem anderen Interferenzeffekt, der sogenannten Anderson- oder starken Lokalisation, kommen.

In der vorliegenden Arbeit werden keine Interferenzeffekte berücksichtigt. Es werden nur Photonen als Random-Walker ohne Phase untersucht. Für absolut geordnete Schäume ist dies strenggenommen nicht korrekt. Allerdings sind bereits bei sehr schwachen Unordnungen im Schaum (die nur groß im Vergleich zur Wellenlänge sein müssen) die Phasen im Modell unabhängiger Photonenbahnen nicht mehr korreliert. Das Ergebnis eines Random-Walkes ohne Interferenzen entspricht dann also dem Ensemble-Mittel (siehe auch Abschnitt 4.4).

### 2.2.2 Diffusing-Wave-Spectroscopy

Die Diffusing-Wave-Spectroscopy (DWS) ist ein weit verbreitetes experimentelles Verfahren, mit dem z.B. die mittlere freie Transportweglänge  $l^*$  eines Mediums bestimmt werden kann [11, 7]. Gemessen wird dabei die zeitliche Autokorrelationsfunktion des elektrischen Feldes in einem Speckle:

$$g_1(t) = \frac{\langle E(0)E^*(t) \rangle}{\langle |E|^2 \rangle}.$$

Geht man davon aus, dass die Streuer Brown'sche Bewegungen durchführen, so tragen die Photonenpfade der Länge  $s$  in der einfachsten diffusiven Näherung zu  $g_1(t)$  folgenden Anteil bei [7]:

$$g_1^s(t) = \exp \left[ -\frac{2t}{\tau} \frac{s}{l^*} \right].$$

Dabei ist  $\tau = 1/(k_0^2 D_{\text{Streuer}})$ , wobei  $k_0$  die Wellenzahl des eingestrahnten Lichtes und  $D_{\text{Streuer}}$  die Diffusionskonstante der Streuer in der Probe ist. Berücksichtigt man zusätzlich noch Absorption, so muss man  $\frac{t}{\tau}$  durch  $\frac{t}{\tau} + \frac{l^*}{2l_a}$  ersetzen ( $l_a$ : Absorptionslänge). Mit einem gepulsten Laserstrahl läßt sich  $g_1^s(t)$  direkt messen. Bei kontinuierlicher Laserstrahlung muss noch über alle möglichen Pfadlängen  $s$  integriert werden, um eine theoretische Formel für  $g_1(t)$  zu erhalten. Diese hängt dann noch von der verwendeten Geometrie des Messaufbaus (Transmissions- oder Rückstreuung) und der Probengröße (insbesondere der Probendicke) ab. Durch Vergleich mit experimentellen Daten kann  $l^*$  bestimmt werden. Aus  $D_{\text{Streuer}}$  kann man außerdem den Teilchenradius berechnen.

Die diffusive Näherung ist nur bei stark streuenden Proben geeignet. Lichtstrahlen, die nicht oder nur wenige Male gestreut wurden, müssen so gut wie möglich unterdrückt werden. Bei der Messung in Rückstreurichtung können außerdem störende Reflektionen an der Probenoberfläche auftreten. Als Dynamik der Streuer wurden Brown'sche Fluktuationen angenommen, andere Bewegungen (z.B. bei geordnet fließenden Proben) führen zu anderen Korrelationsfunktionen [12]. Wird  $l^*$  klein im Vergleich zur Wellenlänge, so kann starke Lokalisierung des Strahlenfeldes auftreten, die sich ebenfalls in Veränderungen der zeitlichen Autokorrelation bemerkbar macht.



## Kapitel 3

# Photon-Channelling

Dieses Kapitel untersucht die Ausbreitung von Photonen, die an den Grenzflächen zur Luft immer reflektiert werden und sich somit nur in der Flüssigkeit bewegen. Zunächst motiviert Abschnitt 3.1 dieses sogenannte Photon-Channelling-Modell. In den Abschnitten 3.2 bis 3.5 wird die Theorie zu dieser Art der Photonenausbreitung entwickelt. Abschnitt 3.6 erklärt die Simulationen, deren Ergebnisse in Abschnitt 3.7 mit der Theorie verglichen werden. In Abschnitt 3.8 folgt schließlich eine Diskussion der Gültigkeit des Photon-Channelling-Modells.

### 3.1 Idee des Photon-Channelling

Betrachtet man Lichtstrahlen, die sich in einem Schaum nach rein geometrischen Gesetzen ausbreiten, d.h. mit bestimmten Reflektions- bzw. Transmissionswahrscheinlichkeit an den Grenzflächen sowie Regeln für die auftretenden Winkel (Brechungsgesetz bei Transmission und Beibehaltung des Winkels bei Reflektion), so kann man die folgenden vereinfachten Modelle betrachten:

- Es bewegen sich keine Photonen innerhalb der Wände fort. Es genügt in diesem Falle mit effektiven Transmissions- und Reflektionswahrscheinlichkeiten in Bezug auf die gesamte Wand zu rechnen. Die Photonen bewegen sich in diesem Modell also nur im optisch dünneren Medium fort; treffen sie auf eine Wand, so werden sie mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit reflektiert, ansonsten passieren sie die gesamte Wand (auf einer geraden Bahn). Bei den Wahrscheinlichkeiten können dabei auch Abhängigkeiten vom Einfallswinkel und von der Wellenlänge (aufgrund von Interferenzerscheinungen an der dünnen Wand) berücksichtigt werden. Solche Berechnungen wurden für zweidimensionale Schäume von Holger Stark und MirFaez Miri in [2] und [3] durchgeführt. Die Ergebnisse gleichen größenordnungsmäßig vor allem im Falle unregelmäßiger Schäume den von Durian, Vera und

Saint-Jalmes gemessenen Werten [1] (siehe Abbildung 3.1) und die Diffusionskonstante bzw. die mittlere freie Weglänge ist in Übereinstimmung mit den in [13] veröffentlichten experimentellen Ergebnissen proportional zum mittleren Luftblasendurchmesser.

- Die Photonen breiten sich ausschließlich innerhalb der Wände fort und werden an den Grenzflächen zum dünneren Medium grundsätzlich totalreflektiert. Diese Photonen liefern ein Ausbreitungsverhalten, welches mit der oben kurz erläuterten Näherung der dünnen Wände nicht erklärt werden kann: Wie noch gezeigt werden wird, ergibt sich vor allem im Falle regelmäßiger zweidimensionaler Schäume ein deutlich superdiffusives Ausbreitungsverhalten. Dass die Photonenausbreitung in den Wänden („Photon-Channelling“ genannt) in der Realität tatsächlich eine große Rolle spielt, wird durch ein Experiment von Gittings, Bandyopadhyay und Durian [4] (siehe auch Abschnitt 3.1.1) nahegelegt. Aus diesem ergibt sich, dass das Verhältnis der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte eines Photons innerhalb der Wände zur Aufenthaltswahrscheinlichkeit in der Luft größer ist als das Verhältnis der Volumina.

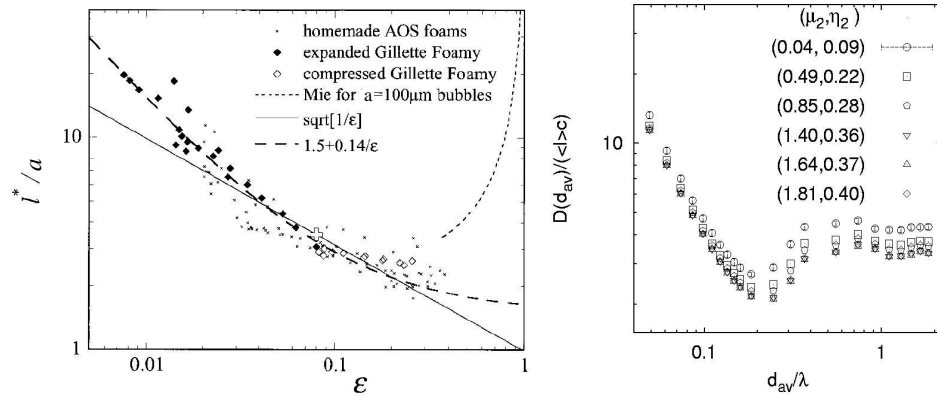


Abbildung 3.1: **Links:** Messergebnisse zur Lichtstreuung an Schäumen von Durian, Vera und Saint-Jalmes [1]: Die Ergebnisse für die effektive freie Weglänge  $l^*$  in Einheiten des durchschnittlichen Zellendurchmessers  $a$  in Abhängigkeit des Wasseranteils  $\epsilon$ . Die Messwerte liegen ungefähr auf der Kurve mit  $l^*/a = 1,5 + 0,14/\epsilon$  (gestrichelte Kurve). **Rechts:** Ergebnisse der theoretischen Berechnungen von Stark und Miri [3] für die Photonenausbreitung in unregelmäßigen zweidimensionalen Schäumen: Diffusionskonstante  $D$  dividiert durch Ausbreitungsgeschwindigkeit  $c$  und mittlerer Gitterkantenlänge  $\langle l \rangle$  in Abhängigkeit vom Verhältnis der mittleren Wanddicke  $d_{av}$  zur Wellenlänge  $\lambda$  für Gitter mit unterschiedlich starken Unregelmäßigkeiten ( $\mu_2$  und  $\eta_2$  sind Maße dieser Unregelmäßigkeiten, die Dicke der Wand variiert um bis zu 50%). Wegen  $D = cl^*/m$  ( $m$ : Raumdimension, d.h. für das rechte Bild ist  $m = 2$ ) und  $a = 2\langle l \rangle$  ist  $D/(\langle l \rangle c) = l^*/a$ . Tatsächlich erkennt man, dass die links und rechts ermittelten Größen für  $D/(\langle l \rangle c) = l^*/a$  die gleiche Größenordnung haben. (Abbildungen aus [1] und [3])



In diesem Kapitel werden nun nur Photonen betrachtet, die sich innerhalb der Wände eines Schaumes ausbreiten: An Grenzflächen zum dünneren Medium tritt immer Totalreflektion auf. Die Einschränkung auf grundsätzliche Totalreflektion wird erst in Kapitel 4 fallengelassen.

### 3.1.1 Das Experiment von Gittings, Bandyopadhyay und Durian

In dem in [4] beschriebenen Experiment haben Gittings, Bandyopadhyay und Durian der Flüssigkeit eines Schaumes einen Farbstoff zugesetzt und schließlich die Absorptionslänge  $l_a$  bei der Lichtausbreitung im Schaum gemessen. Die Absorptionslänge ist dabei definiert, als die Länge, nach der noch  $e^{-1}$  der eingestrahelten Photonen nicht absorbiert worden sind. Wenn sich die Photonen an allen Stellen des Schaumes mit gleicher Wahrscheinlichkeit aufhalten würden, so würde sich die Absorptionslänge  $l_a$  im Schaum bezogen auf die Absorptionslänge  $l_a^{soln}$  in der Flüssigkeit wie  $1/\epsilon$  verhalten ( $\epsilon$ : Volumenanteil der Flüssigkeit im Schaum). Wie man den in Abbildung 3.2 dargestellten Messwerten allerdings entnehmen kann, liegen die Messwerte meist unterhalb der Kurve  $l_a/l_a^{soln} = 1/\epsilon$ , d.h. es werden mehr Photonen absorbiert (die Absorptionslänge ist kürzer), als es der Volumenanteil der

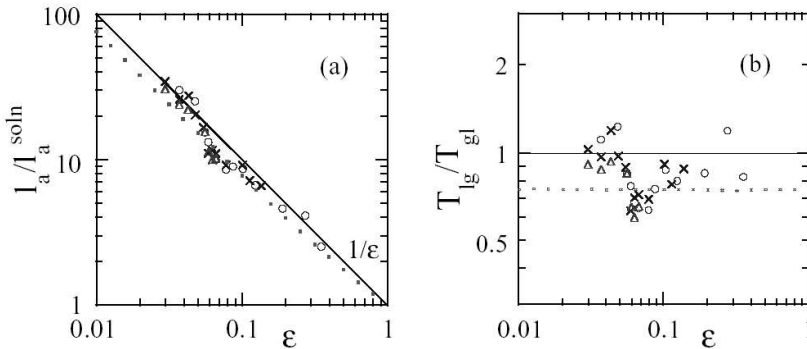


Abbildung 3.2: Experimentelle Ergebnisse von Gittings, Bandyopadhyay und Durian [4]: Messung der Absorptionslänge  $l_a$  in einem Schaum bezogen auf die Absorptionslänge  $l_a^{soln}$  des verwendeten flüssigen Mediums (links) und daraus berechnetes Verhältnis zwischen Photonentransmissionswahrscheinlichkeit von der Flüssigkeit ins Gas  $T_{lg}$  zur Transmissionswahrscheinlichkeit vom Gas in die Flüssigkeit  $T_{gl}$  (rechts). In beiden Fällen dargestellt in Abhängigkeit vom Flüssigkeitsanteil  $\epsilon$  bei unterschiedlich starken Konzentrationen des verwendeten Farbstoffes Rhodamin (Kreise:  $0,005 \frac{\text{g}}{\text{l}}$ , Kreuze:  $0,01 \frac{\text{g}}{\text{l}}$ , Dreiecke:  $0,012 \frac{\text{g}}{\text{l}}$ ). Würden sich die Photonen in jedem Bereich des Schaumes gleichhäufig aufhalten, so wäre  $l_a/l_a^{soln} = 1/\epsilon$  und  $T_{lg}/T_{gl} = 1$  (durchgezogene Linien). Die Messwerte liegen jedoch größtenteils unterhalb dieser Linien (vor allem für  $0,004 \leq \epsilon \leq 0,2$ ). Eine Simulation aus [4] sagt eine größere Aufenthaltswahrscheinlichkeit innerhalb der Wände vorher (gepunktete Linien), wobei ungefähr  $T_{lg}/T_{gl} = n_g/n_{fl}$  ist. Die Ergebnisse dieser Simulation stimmen mit den Berechnungen der Abschnitte 4.2.1 und 4.2.2 in dieser Arbeit überein. (Abbildung aus [4])

Flüssigkeit am gesamten Volumen des Schaumes vermuten lässt. Dies gilt vor allem für Schäume mit  $0,004 \leq \epsilon \leq 0,2$ . Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte eines Photons in der Flüssigkeit eines solchen Schaumes ist also grösser als in den Zwischenräumen. Als möglicher Grund für diese Tatsache wird in [4] vermutet, dass viele Photonen in der Flüssigkeit häufig unter einem so flachen Winkel auf die Grenzfläche zum dünneren Medium stoßen, dass sie totalreflektiert werden und somit die Wände des Schaumes nicht verlassen können. Eine genauere Erklärung wird diese Arbeit liefern.

In einer Simulation haben Gittings, Bandyopadhyay und Durian außerdem das Verhältnis  $T_{fl \rightarrow g}/T_{g \rightarrow fl}$  der mittleren Transmissionswahrscheinlichkeit  $T_{fl \rightarrow g}$  eines Photons für den Übergang von der Flüssigkeit in die Luft und der mittleren Transmissionswahrscheinlichkeit  $T_{g \rightarrow fl}$  von Luft in die Flüssigkeit bestimmt (ebenfalls [4], dort wurde  $T_{fl \rightarrow g}/T_{g \rightarrow fl}$  englisch  $T_{lg}/T_{gl}$  genannt). Im Bereich  $0,004 \leq \epsilon \leq 0,2$  stimmen die daraus erhaltenen Werte mit den Messwerten überein (siehe gepunktete Linien in Abbildung 3.2). Für ihre Simulationsergebnisse stellten sie fest, dass

$$\frac{T_{fl \rightarrow g}}{T_{g \rightarrow fl}} = \frac{n_g}{n_{fl}} \quad (3.1)$$

gilt, ohne dies erklären zu können ( $n_g$  bzw.  $n_{fl}$  sind die Brechungsindizes der Luft bzw. der Flüssigkeit). Das Verhältnis  $T_{fl \rightarrow g}/T_{g \rightarrow fl}$  wird in dieser Arbeit in Abschnitt 4.2.1 theoretisch hergeleitet und Gleichung (3.1) bestätigt.

Wegen dieser erhöhten Aufenthaltswahrscheinlichkeit in den Wänden des Schaumes, stellten Gittings, Bandyopadhyay und Durian in [4] die Vermutung auf, dass Photonen, die sich innerhalb der Wände eines Schaumes bewegen, zu einem neuem Ausbreitungsverhalten führen. Einige Photonen würden in den Wänden wie in einer Glasfaser geleitet („Photon-Channelling“), dadurch sei die herkömmliche Beschreibung der Photonenausbreitung als Diffusionsprozess mit einheitlicher effektiver Streulänge  $l^*$  nicht mehr zutreffend. Im Folgenden wird nun also das Ausbreitungsverhalten der Photonen in den Wänden theoretisch untersucht.

### 3.1.2 Photon-Channelling in einem zweidimensionalen Gitter

Um herauszufinden, wie sich die Photonen verhalten, die sich nur in den Wänden eines Schaumes bewegen, werden im Folgenden zweidimensionale Modelle der Schäume betrachtet. Für einen exakten regelmäßigen Schaum wird ein regelmäßig hexagonales Gitter verwendet; für unregelmäßige Schäume werden Voronoi-Gitter von zufälligen Dreiecksgittern benutzt (dies wird in Abschnitt 3.6.3 genauer beschrieben).

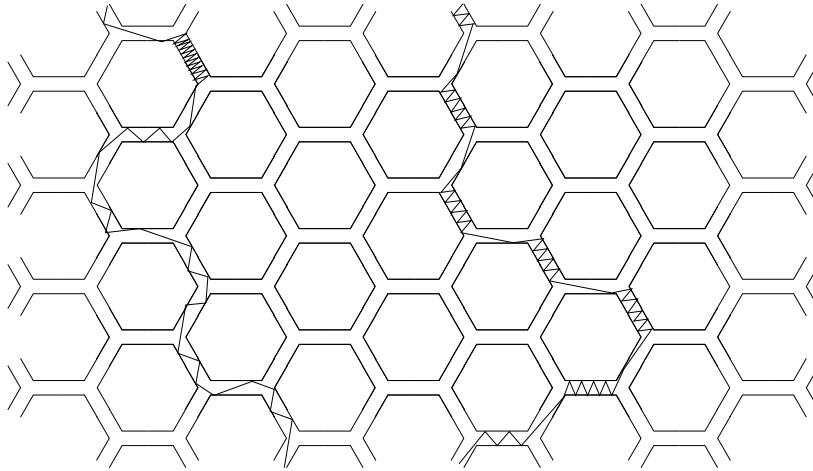


Abbildung 3.3: In einem zweidimensionalen hexagonalen Gitter werden die Photonen betrachtet, die innerhalb der Gitterwände laufen. Dazu werden die Wände nicht als Linie, sondern als Streifen bzw. Kanäle angesehen, welche durch vollständig reflektierende Randlinien begrenzt sind.

Beim Photon-Channelling werden nun die Photonen betrachtet, die innerhalb der Gitterlinien laufen. Dazu werden ausgehend von einem zweidimensionalen Sechseckgitter oder Voronoi-Gitter alle Gitterlinien durch Streifen ersetzt (siehe auch Abbildung 3.3). Diese Streifen (im Folgenden Kanäle genannt) liegen dabei symmetrisch zu den Gitterlinien des ursprünglichen Gitters, d.h. die Mittelparallelen der Kanäle sind identisch mit den Linien des Ursprunggitters. Die Breite der Kanäle wird als konstant angesehen, somit handelt es sich um ein Modell für einen idealisierten trockenen Schaum.

### 3.2 Theorie I: Allgemeines

Die Simulationen werden ergeben, dass sich die Photonen in einem exakt hexagonalen Schaum superdiffusiv ausbreiten, d.h. es ist  $\sigma^2 = \langle |\vec{r}|^2 \rangle \sim t^m$  mit einem Exponenten  $m$  zwischen 1 und 2 (für  $m = 1$  wäre die Ausbreitung diffusiv, für  $m = 2$  ballistisch). Der Mittelwert wird dabei über eine große Anzahl von Photonen gebildet, die mit unterschiedlichen Winkeln zu einer Kanalmittparallelen gestartet worden sind. Die Photonverteilung nach einer bestimmten Zeit ist sternförmig (siehe Abbildung 3.4 links): Es laufen mehr Photonen in die Richtungen der Gitterlinien im Sechseckgitter und die Ausbreitung in diese Richtungen findet schneller statt als in andere Richtungen. In unregelmäßigen Gittern jedoch, wird die Ausbreitung (zumindest für große Zeiten) diffusiv, die Photonverteilung ergibt, wie erwartet, eine zweidimensionale Gauß-Verteilung (Abbildung 3.4 rechts).

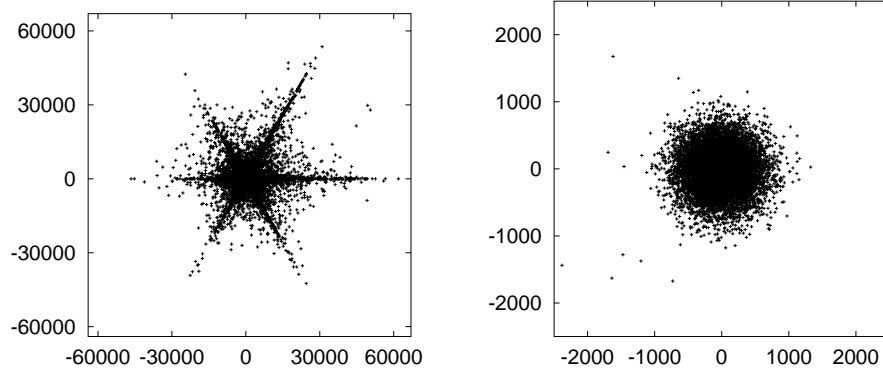


Abbildung 3.4: Photonenverteilung nach der Zeit  $t = 100000 l_0/c$  ( $l_0$ : Kanallänge,  $c$ : Lichtgeschwindigkeit in der Flüssigkeit). Links für ein exaktes Sechseckgitter, rechts für ein unregelmäßiges Gitter mit  $\delta r = 0.3$  (siehe dazu Abschnitt 3.6.3). In beiden Fällen ist das Verhältnis von Kanalbreite zu Kanallänge  $d/l_0 = 0,1$  und die Entfernungsskalen sind in Einheiten von  $l_0$ . Das Vorgehen bei den Simulationen wird in Abschnitt 3.6 beschrieben.

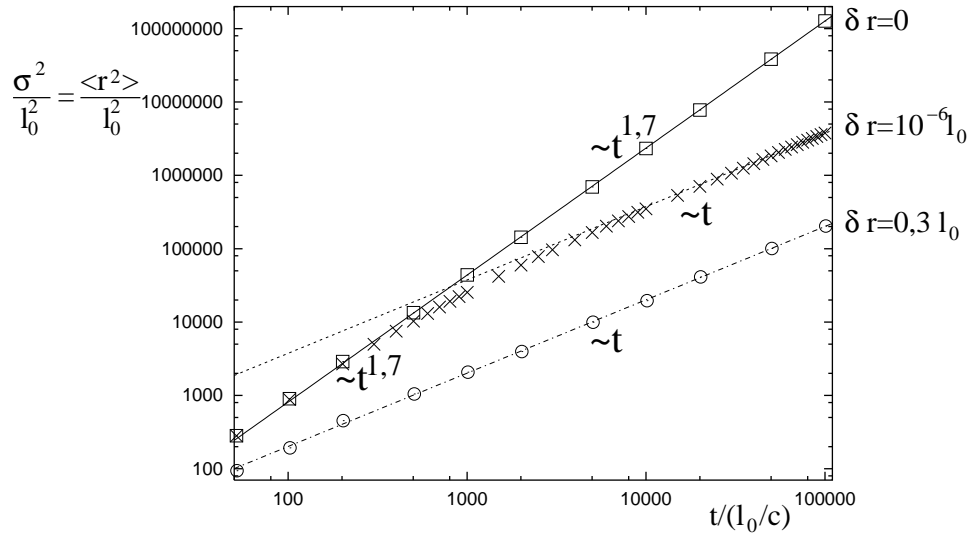


Abbildung 3.5: Doppeltlogarithmische Darstellung der mittleren quadratischen Abweichung  $\sigma^2$  in Abhängigkeit von der Zeit für die Photonen ausbreitung in Gittern mit verschiedenen großen Unregelmäßigkeiten. Im exakten Gitter (Quadrate) verhält sich  $\sigma^2$  wie  $t^{1,7}$ , d.h. die Photonen ausbreitung ist superdiffusiv. Im schwach unregelmäßigen Gitter (Kreuze) mit  $\delta r = 10^{-6} l_0$  (zum Maß der Unregelmäßigkeit siehe Abschnitt 3.6.3) verhalten die Photonen sich zunächst superdiffusiv ( $\sigma^2 \sim t^{1,7}$ ), später jedoch diffusiv ( $\sigma^2 \sim t$ ). Im stark unregelmäßigen Gitter (Kreise) mit  $\delta r = 0,3 l_0$  breiten die Photonen sich diffusiv aus ( $\sigma^2 \sim t$ ). Die Linien sind gemäß Potenzgesetzen angefüttete Kurven. In allen Fällen ist  $d/l_0 = 0,1$ . Das Vorgehen bei den Simulationen wird in Abschnitt 3.6 beschrieben.

Abbildung 3.5 zeigt die mittlere quadratische Abweichung in Abhängigkeit von der Zeit für verschiedene Gitter: Im exakten Schaum erkennt man deutlich das superdiffusive Verhalten. Beim schwach unregelmäßigen Gitter geht die superdiffusive Ausbreitung in eine diffusive Ausbreitung über. Im stark unregelmäßigen Gitter ist die Ausbreitung rein diffusiv.

Bevor das Vorgehen bei den Simulationen und deren Ergebnisse genauer beschrieben werden, werden die hier kurz angedeuteten Ergebnisse zunächst mit unterschiedlichen theoretischen Methoden hergeleitet. Dieser Abschnitt untersucht dazu zunächst, welche Winkel im Verlaufe einer Photonenbahn auftreten. Aus dieser Untersuchung wird schließlich eine Beziehung zwischen Zeit und Schrittzahl hergeleitet. Abschnitt 3.3 nutzt ein Random-Walk-Modell mit rein zufälligen Kanalwechselln, um die Photonenausbreitung in unregelmäßigen Gittern zu beschreiben. In Abschnitt 3.4 wird die Photonenausbreitung in einem exakten oder fast exakten Sechseckgitter mit Hilfe von Lévy-Walks untersucht. Abschnitt 3.5 verbindet schließlich das Modell für unregelmäßige Gitter mit dem Lévy-Walk für fast exakte Gitter zu einem einzigen Näherungsmodell für Schäume beliebiger Unregelmäßigkeit.

### 3.2.1 Mögliche Winkel bei geometrischen Bahnen

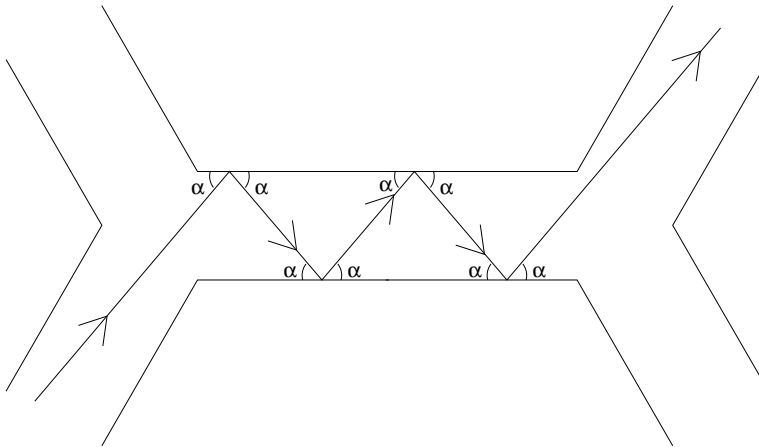


Abbildung 3.6: Solange der Lichtstrahl innerhalb eines Kanals läuft und nicht an eine Verzweigung kommt, ändert sich der Winkel zwischen Lichtstrahl und einer der beiden den Kanal begrenzenden Linien nicht.

Im Folgenden werden rein geometrische Bahnen innerhalb der Wände der Struktur betrachtet. Trifft ein Strahl auf eine Begrenzungsline, so wird er unter dem Winkel zurückreflektiert, unter dem er auf die Grenzlinie getroffen ist („Einfallswinkel=Ausfallswinkel“). Innerhalb einer Gitterverbindung (im Folgenden Kanal genannt) ändert sich der Winkel zwischen Strahl und einer

der beiden parallelen Begrenzungslinien des Kanals nicht (siehe Abbildung 3.6), solange der Strahl nicht bei einer Verzweigung in einen neuen Kanal eintritt.

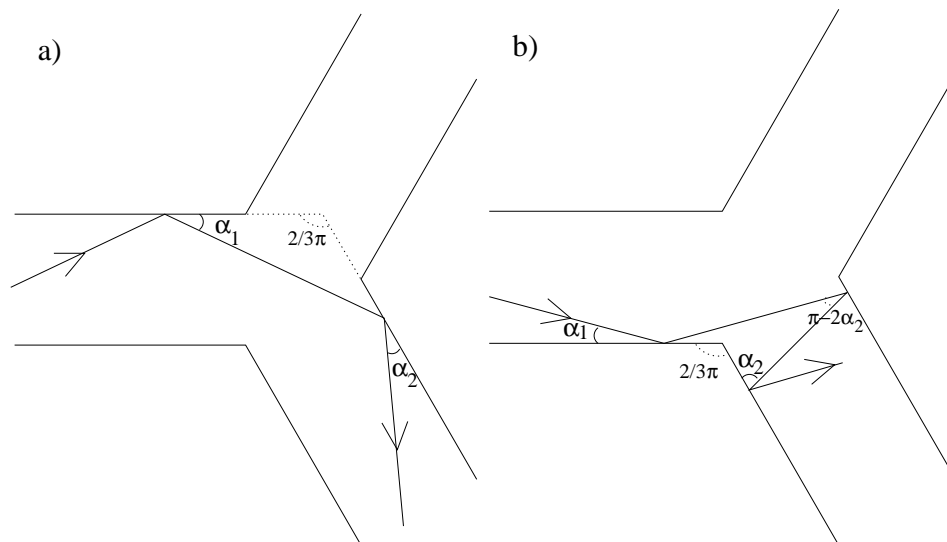


Abbildung 3.7: Beim Wechsel in einen neuen Kanal müssen zwei Fälle unterschieden werden: a) Der Strahl benutzt den Kanal, der in die der letzten Reflektionsstelle entgegengesetzten Richtung verläuft. Die Abbildung zeigt dies für einen Winkel, der kleiner als  $\frac{\pi}{3}$  ist. Ist der Winkel größer, so findet die erste Reflektion im neuen Kanal auf der gegenüberliegenden Kanalseite statt. b) Der Strahl läuft in den anliegenden Kanal. In diesem Fall muss der Winkel vor dem Kanalwechsel kleiner als  $\frac{\pi}{6}$  gewesen sein.

Wechselt ein Lichtstrahl den Kanal, so ändert sich der Winkel. Der Winkel, den der Lichtstrahl mit den Begrenzungen des neuen Kanals einschließt kann mit Hilfe der Skizzen in Abbildung 3.7 wie folgt berechnet werden: Geht man davon aus, dass der Winkel im Ursprungskanal  $\alpha_1$  im Intervall von 0 bis  $\frac{\pi}{6}$  liegt, so gibt es zwei Möglichkeiten, wie er im nächsten Kanal sein wird:

- Fall a (Abbildung 3.7 links): In diesem Fall läuft der Strahl in den Kanal, der der letzten Reflektionsstelle im alten Kanal gegenüber liegt. Der Winkel zwischen dem Strahl und den Begrenzungslinien des neuen Kanals ist, wie man der Abbildung entnehmen kann,  $\alpha_2 = \frac{\pi}{3} - \alpha_1$ . Der neue Winkel  $\alpha_2$  liegt also im Intervall von  $\frac{\pi}{6}$  bis  $\frac{\pi}{3}$ .
- Fall b (Abbildung 3.7 rechts): Hier benutzt der Strahl den Kanal, der auf der Seite der letzten Reflektionsstelle liegt. Der neue Winkel ergibt sich zu  $\alpha_2 = \frac{\pi}{3} + \alpha_1$ , d.h. der neue Winkel liegt im Intervall von  $\frac{\pi}{3}$  bis  $\frac{\pi}{2}$ .

In beiden Fällen kann beim zweiten Kanalwechsel ein Wechsel gemäß Fall b nicht eintreten, da die neuen Winkel  $\alpha_2$  in beiden Fällen größer als  $\frac{\pi}{6}$  sind und somit zu groß sind, um einen Wechsel in den anliegenden Kanal zu ermöglichen. In beiden Fällen findet als zweiter Kanalwechsel also ein Wechsel in den dem letzten Reflektionspunkt gegenüberliegenden Kanal statt. Dies bedeutet, dass für den Winkel im dritten Kanal gilt:

- Falls der erste Kanalwechsel gemäß Fall a stattfand, findet der zweite Wechsel auch wieder wie in Fall a beschrieben statt und es gilt:  $\alpha_3 = \frac{\pi}{3} - \alpha_2 = \alpha_1$ .
- Falls der erste Wechsel gemäß Fall b stattfand, findet der zweite Wechsel wie ein in Abbildung 3.7b rückwärts laufender Strahl ab. Im Gegensatz zu dem in Abbildung 3.7a gezeigtem Strahlenverlauf findet die erste Reflektion im neuen Kanal nun auf der Seite des alten Kanales statt, da der Ursprungswinkel  $\alpha_2$  größer als  $\frac{\pi}{3}$  ist. Somit gilt für den Winkel im dritten Kanal:  $\alpha_3 = \alpha_2 - \frac{\pi}{3} = \alpha_1$ .

In beiden Fällen ergibt sich  $\alpha_3 = \alpha_1$ . Nach zwei Kanalwechseln erhält man also wieder den Ausgangswinkel. Dieses Winkelverhalten ist als Übersicht in Abbildung 3.8 dargestellt.

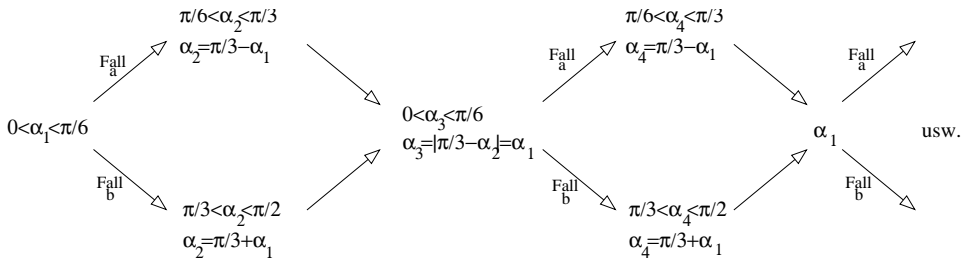


Abbildung 3.8: Winkel, die bei einer Bahn in einem regelmäßig hexagonalem Gitter vorkommen können: In jedem zweiten Kanal tritt dabei der gleiche Winkel zwischen 0 und  $\frac{\pi}{6}$  auf. In den Kanälen dazwischen liegt entweder ein Winkel im Bereich von  $\frac{\pi}{6}$  bis  $\frac{\pi}{3}$  vor oder ein Winkel zwischen  $\frac{\pi}{3}$  und  $\frac{\pi}{2}$ . Auf jeden Fall kommt im Verlaufe einer Bahn nie ein von diesen drei Winkeln abweichender Winkel vor.

Im Verlaufe einer Bahn im regelmäßig hexagonalen Gitter treten also nur drei verschiedene Winkel auf (interessanterweise die gleichen wie in [2]), die außerdem nicht unabhängig voneinander sind:

- Ein Winkel  $\alpha_1$  aus dem Intervall von 0 bis  $\frac{\pi}{6}$ : Dieser Winkel tritt sicher in jedem zweiten Kanal auf.
- Ein Winkel  $\alpha_2^{(a)} = \frac{\pi}{3} - \alpha_1$  aus dem Intervall von  $\frac{\pi}{6}$  bis  $\frac{\pi}{3}$ : Dieser Winkel tritt immer dann nach einem Kanal mit Winkel  $\alpha_1$  auf, wenn der Kanalwechsel gemäß Fall a stattfindet.

- Ein Winkel  $\alpha_2^{(b)} = \frac{\pi}{3} + \alpha_1$  aus dem Intervall von  $\frac{\pi}{3}$  bis  $\frac{\pi}{2}$ : Dieser Winkel tritt immer dann nach einem Kanal mit Winkel  $\alpha_1$  auf, wenn der Kanalwechsel gemäß Fall b stattfindet.

Diese Überlegungen gelten selbstverständlich für beliebige Anfangswinkel: Liegt als Anfangswinkel ein Winkel größer als  $\frac{\pi}{6}$  vor, so muss wie oben gezeigt, der Winkel im zweiten Kanal zwischen 0 und  $\frac{\pi}{6}$  liegen, so dass die obigen Überlegungen auch für einen solchen Fall gültig sind.

### 3.2.2 Eine Beziehung zwischen Zeit und Schrittzahl

Die Zeit, die ein Photon braucht, um eine bestimmte Schrittzahl zurückzulegen, hängt von den Winkeln der Photonenbahn innerhalb der Kanäle ab. Im vorherigen Abschnitt wurde gezeigt, dass im Verlaufe jeder Bahn im regelmäßig hexagonalem Gitter nur drei verschiedene Winkel auftreten können. Der kleinste Winkel  $\alpha_1$  tritt dabei jedes zweite Mal auf; die Winkel  $\alpha_2^{(a)} = \frac{\pi}{3} - \alpha_1$  und  $\alpha_2^{(b)} = \frac{\pi}{3} + \alpha_1$  in den Kanälen dazwischen. Ob  $\alpha_2^{(a)}$  oder  $\alpha_2^{(b)}$  auftritt, hängt davon ab, ob der Kanalwechsel gemäß Fall a (Abbildung 3.7a) oder Fall b (Abbildung 3.7b) stattfindet. Um nun festzustellen, wie häufig bei einer Bahn der Winkel  $\alpha_2^{(a)}$  und wie häufig  $\alpha_2^{(b)}$  vorkommt, muss berechnet werden, wann bei einem Kanalwechsel Fall a und wann Fall b eintritt. Da dies sehr kritisch von den Anfangsbedingungen abhängt (wie in späteren Abschnitten noch genauer gezeigt werden wird), werden hier nur Wahrscheinlichkeiten für Kanalwechsel gemäß Fall a oder Kanalwechsel gemäß Fall b berechnet.

#### Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten von Fall a bzw. b:

Um die Wahrscheinlichkeiten für das Eintreten von Fall a oder b zu berechnen, geht man im Ursprungskanal von einem festen Winkel  $\alpha_1$  aus dem Intervall 0 bis  $\frac{\pi}{6}$  aus, die genaue Lage des Strahles hingegen wird als rein zufällig angenommen. Ausgehend von einem Strahl kommen alle senkrecht zum Strahlenverlauf verschobenen Strahlen mit der gleichen Wahrscheinlichkeit vor. Um nun die Wahrscheinlichkeit für einen der Fälle zu erhalten, muss also berechnet werden, für wie viele dieser Strahlen der Fall eintritt. Dazu werden zu jedem Fall die Strahlen betrachtet, die bei dem gegebenen Winkel gerade noch in den geforderten Kanal gelangen (siehe auch Abbildung 3.9). Als Maß für die Anzahl der Strahlen zwischen diesen Grenzstrahlen, wird der senkrecht Abstand  $h_a$  bzw.  $h_b$  zwischen diesen berechnet. Man erhält (wobei  $d$  die Breite der Kanäle ist):

$$h_a = d \sin\left(\frac{\pi}{6} + \alpha_1\right)$$

$$h_b = d \sin\left(\frac{\pi}{6} - \alpha_1\right)$$



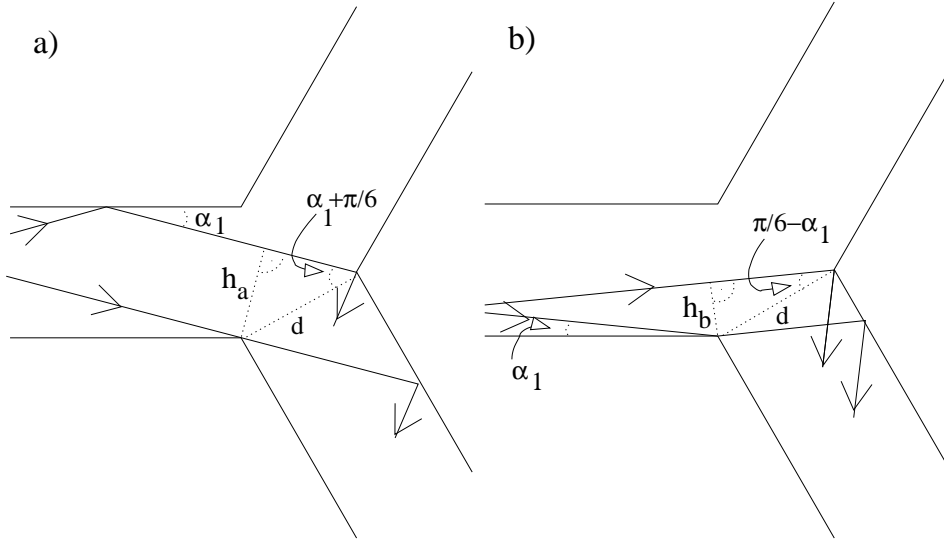


Abbildung 3.9: Um die Wahrscheinlichkeiten zu berechnen, mit denen Fall a (links) oder Fall b (rechts) auftreten, wird die maximale Breite  $h_a$  bzw.  $h_b$  der Strahlen berechnet, die in den geforderten Kanal gelangen können.

Hiermit lassen sich die Wahrscheinlichkeiten  $p_a$  und  $p_b$  für das Auftreten der Fälle a bzw. b wie folgt berechnen:

$$p_a = \frac{h_a}{h_a + h_b} = \frac{\sin\left(\frac{\pi}{6} + \alpha_1\right)}{\sin\left(\frac{\pi}{6} + \alpha_1\right) + \sin\left(\frac{\pi}{6} - \alpha_1\right)} = \frac{\sin\left(\frac{\pi}{6} + \alpha_1\right)}{\cos(\alpha_1)} \quad (3.2)$$

$$p_b = \frac{h_b}{h_a + h_b} = \frac{\sin\left(\frac{\pi}{6} - \alpha_1\right)}{\sin\left(\frac{\pi}{6} + \alpha_1\right) + \sin\left(\frac{\pi}{6} - \alpha_1\right)} = \frac{\sin\left(\frac{\pi}{6} - \alpha_1\right)}{\cos(\alpha_1)} \quad (3.3)$$

### Die mittlere Zeit pro Schritt:

Die Zeit, die ein Strahl für das Durchlaufen des  $i$ -ten Kanales benötigt, kann aus der Kanallänge  $l_0$ , der Kanalbreite  $d$  und dem Winkel  $\alpha_i$  zwischen Kanalbegrenzungslinien und dem Strahl berechnet werden:

Zunächst wird nur die Zeit betrachtet, die der Strahl benötigt, um den Kanal zwischen den dreieckigen Verzweigungsflächen zu durchqueren. Die Länge dieses Kanalbereiches, welche gleich der Länge einer Begrenzungslinie ist, ergibt sich aus Abbildung 3.10 zu  $l_0 - \frac{\sqrt{3}}{3}d$ . Die Zeit, die ein Strahl braucht, um diesen Kanalabschnitt zu durchqueren, ist, wenn  $c$  die Lichtgeschwindigkeit im Wandmedium ist:

$$t'_i = \frac{l_0 - \frac{\sqrt{3}}{3}d}{c \cos(\alpha_i)}. \quad (3.4)$$

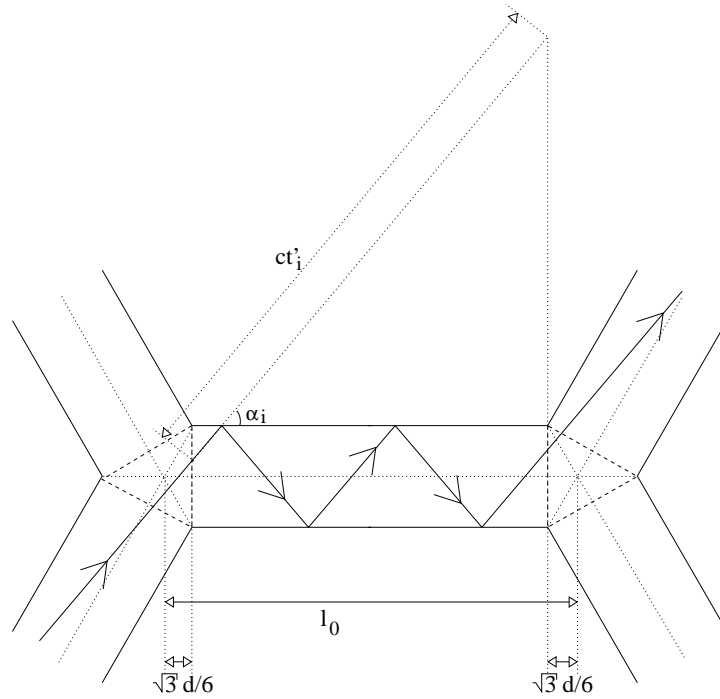


Abbildung 3.10: Die Zeit, die ein Strahl zum Durchlaufen eines Kanals benötigt wird aus der Länge des Strahles innerhalb des Kanals bestimmt, wobei hier zunächst nur der Anteil betrachtet wird, der im geraden Kanal zwischen den Verzweigungen liegt. Der Anteil, der beim Durchlaufen der Dreiecksfläche bei der Verzweigungsstelle hinzukommt wird gesondert betrachtet. Die Länge des Kanals zwischen den Verzweigungsflächen ist wie man der Zeichnung entnehmen kann  $l_0 - \sqrt{3}d/3$ .

Zu dieser Zeit muss nun noch die Zeit hinzugezählt werden, die der Strahl benötigt, um die dreieckige Fläche zwischen den Kanälen zu durchqueren. Geht man wie bei der Berechnung der Wahrscheinlichkeiten  $p_a$  und  $p_b$  davon aus, dass alle parallel verschobenen Strahlen gleichhäufig vorkommen, so lässt sich ein Mittelwert dieser Länge wie folgt berechnen:

Zunächst wird von einem Winkel zwischen  $0$  und  $\frac{\pi}{6}$  ausgegangen. Es werden die Photonbahnen betrachtet, die gerade noch in den neuen Kanal gelangen. Wie man in Abbildung 3.11 erkennt, sind dies die Bahnen, die die längste bzw. kürzeste Zeit zum Durchqueren des Dreiecks benötigen. Diese extremalen Zeiten sind  $t''_{i,min} = 0$  und  $t''_{i,max} = \frac{1}{c} \frac{\sqrt{3}}{2} d / \cos(\alpha_i)$ . Mittelt man über alle Zeiten, die die Photonen der dazwischenliegenden Bahnen benötigen, so erhält man:

$$t''_i = \frac{1}{2} \left( 0 + \frac{\frac{\sqrt{3}}{2} d}{c \cos(\alpha_i)} \right) = \frac{\frac{\sqrt{3}}{4} d}{c \cos(\alpha_i)} \quad (3.5)$$

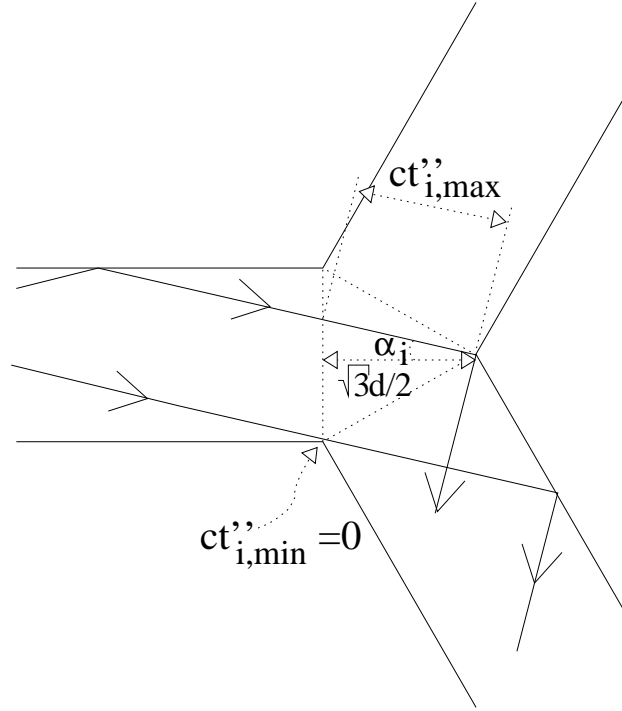


Abbildung 3.11: Die Zeit, die der Strahl braucht, um die Dreiecksfläche zwischen den Kanälen zu durchqueren, kann als Mittelwert der extremalen Photonenbahnen berechnet werden.

Liegt  $\alpha_i$  nicht im Intervall von 0 bis  $\frac{\pi}{6}$ , so muss wie im vorhergehenden Abschnitt gezeigt wurde  $\alpha_{i+1}$  in diesem Intervall liegen und Gleichung (3.5) lässt sich ebenfalls anwenden, nur dass  $\alpha_i$  durch  $\alpha_{i+1}$  ersetzt werden muss.

Als Gesamtzeit, die ein Photon im Mittel pro Schritt benötigt, ergibt sich durch Addition der Zeiten aus (3.4) und (3.5):

$$\begin{aligned}
 0 \leq \alpha_i \leq \frac{\pi}{6} : \quad t_i &= t'_i + t''_i = \frac{l_0 - \frac{\sqrt{3}}{3}d}{c \cos(\alpha_i)} + \frac{\frac{\sqrt{3}}{4}d}{c \cos(\alpha_i)} = \frac{l_0 - \frac{\sqrt{3}}{12}d}{c \cos(\alpha_i)} \\
 \alpha_i > \frac{\pi}{6} : \quad t_i &= t'_i + t''_{i+1} = \frac{l_0 - \frac{\sqrt{3}}{3}d}{c \cos(\alpha_i)} + \frac{\frac{\sqrt{3}}{4}d}{c \cos(\alpha_{i+1})}
 \end{aligned} \quad (3.6)$$

### Die Beziehung zwischen Zeit und Schrittzahl:

Gleichung (3.6) enthält noch den Winkel zwischen Strahl und Kanalrandlinie. Um eine allgemeine Formel, die die Zeit mit der Schrittzahl für eine beliebige Bahn im regelmäßig hexagonalem Gitter verbindet, zu erhalten, müssen die Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten bestimmter Winkel verwendet werden. Wie im vorherigen Abschnitt gezeigt, tritt  $\alpha_1$  bei jedem

zweiten Schritt auf. In den übrigen Fällen kommt der Winkel  $\alpha_2^{(a)} = \frac{\pi}{3} - \alpha_1$  mit der Wahrscheinlichkeit  $p_a$  und  $\alpha_2^{(b)} = \frac{\pi}{3} + \alpha_1$  mit  $p_b$  vor. Somit ergibt sich unter Verwendung der Gleichungen (3.2) und (3.3) als mittlere Zeit für  $n$  Schritte:

$$\begin{aligned}
t(n) &= \frac{1}{2} \left( t_1 + \left( p_a t_2^{(a)} + p_b t_2^{(b)} \right) \right) n \\
&= \frac{l_0 - \frac{\sqrt{3}}{12}d}{2c \cos(\alpha_1)} n \\
&\quad + \frac{1}{2} \frac{\sin(\alpha_1 + \frac{\pi}{6})}{\cos(\alpha_1)} \left( \frac{l_0 - \frac{\sqrt{3}}{3}d}{c \cos(\frac{\pi}{3} - \alpha_1)} + \frac{\frac{\sqrt{3}}{4}d}{c \cos(\alpha_1)} \right) n \\
&\quad + \frac{1}{2} \frac{\sin(\alpha_1 - \frac{\pi}{6})}{\cos(\alpha_1)} \left( \frac{l_0 - \frac{\sqrt{3}}{3}d}{c \cos(\frac{\pi}{3} + \alpha_1)} + \frac{\frac{\sqrt{3}}{4}d}{c \cos(\alpha_1)} \right) n \\
&= \frac{l_0 - \frac{\sqrt{3}}{12}d}{2c \cos(\alpha_1)} n + \frac{\frac{\sqrt{3}}{4}d}{2c \cos(\alpha_1)} n \\
&\quad + \frac{l_0 - \frac{\sqrt{3}}{3}d}{2c \cos(\alpha_1)} \left( \frac{\sin(\alpha_1 + \frac{\pi}{6})}{\cos(\frac{\pi}{3} - \alpha_1)} + \frac{\sin(\alpha_1 - \frac{\pi}{6})}{\cos(\frac{\pi}{3} + \alpha_1)} \right) n \\
&= \frac{1}{2c \cos(\alpha_1)} \left( \left( l_0 - \frac{\sqrt{3}}{12}d \right) + \frac{\sqrt{3}}{4}d + 2 \left( l_0 - \frac{\sqrt{3}}{3}d \right) \right) n \\
&= \frac{3l_0 - \frac{\sqrt{3}}{2}d}{2c \cos(\alpha_1)} n \tag{3.7}
\end{aligned}$$

Diese Formel ist für hinreichend große Schrittzahlen gültig, da es dann keine Rolle mehr spielt, ob die Bahnen mit einem Winkel kleiner als  $\frac{\pi}{6}$  (also mit  $\alpha_1$ ) oder mit einem anderem Winkel begonnen wurden. Außerdem spielt es dann auch keine Rolle mehr, wo genau der Strahl gestartet worden ist: z.B. kann dann der Unterschied zwischen einem beim Schnittpunkt der Mittelparallelen zu einem zwischen den Anfangspunkten der Kanalbegrenzungslinien gestartetem Strahl vernachlässigt werden.

Löst man die Formel nach der Schrittzahl auf, so lautet sie:

$$n(t) = \frac{2c \cos(\alpha_1)}{3l_0 - \frac{\sqrt{3}}{2}d} t \tag{3.8}$$

In Abbildung 3.12 erkennt man deutlich, dass diese Formel ausgezeichnet mit Simulationsergebnissen übereinstimmt.

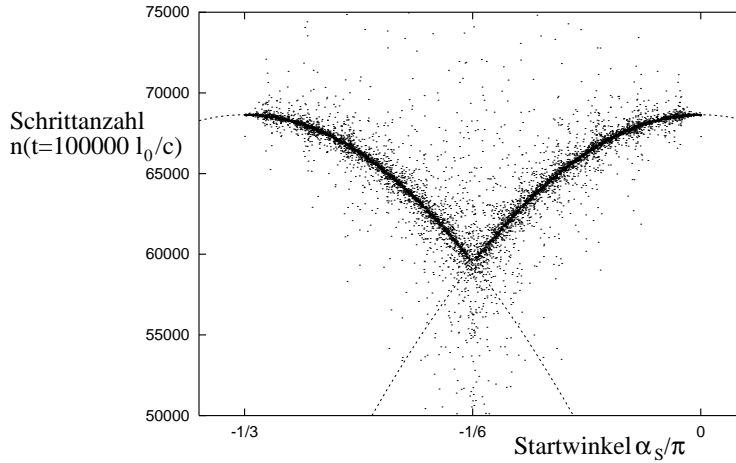


Abbildung 3.12: Schrittzahl nach der Zeit  $t = 100000 l_0/c$  im exakten Sechseckgitter mit  $d/l_0 = 0,1$  in Abhängigkeit vom Startwinkel  $\alpha_S/\pi$ . Die Punkte ergeben sich aus Simulationen (siehe auch Abschnitt 3.6), die gestrichelten Kurven stellen (3.8) mit  $\alpha_1 = \alpha_S$  bzw.  $\alpha_1 = \frac{\pi}{3} - \alpha_S$  dar. Die meisten Simulationspunkte liegen fast unmittelbar auf diesen Kurven (für  $-\frac{\pi}{3} \leq \alpha_S \leq -\frac{\pi}{6}$  auf der Kurve mit  $\alpha_1 = \frac{\pi}{3} - \alpha_S$ , für  $-\frac{\pi}{6} \leq \alpha_S \leq 0$  auf der mit  $\alpha_1 = \alpha_S$ ), nur sehr wenige Punkte weichen wesentlich ab (einige wenige liegen nicht im dargestellten Bereich).

### 3.3 Theorie II: Photonenausbreitung in unregelmäßigen Schäumen

In diesem Teil interessieren nur die Positionen der Kanäle, durch die ein Photon läuft. Die genaue Position des Photons innerhalb eines Kanales wird nicht betrachtet. Die Wahl des nächsten Kanales an einem Verzweigungspunkt erfolgt zunächst rein zufällig, d.h. mit der Wahrscheinlichkeit 0,5 wechselt ein Photon an einem Verzweigungspunkt in einen Kanal, mit der Wahrscheinlichkeit 0,5 in den anderen.

#### 3.3.1 Photonenausbreitung als Random-Walk-Prozess

Da die genaue Position des Photons innerhalb eines Kanales hier vernachlässigt wird, kann man die Photonenbewegung als Bewegung entlang der Gitterlinien (also der Mittelsenkrechten der Kanäle) beschreiben. Für den Ort nach  $n$  Schritten (ein Schritt geht hier jeweils von einer Verzweigung zur nächsten) gilt somit:

$$\vec{r}(n) = \sum_{i=1}^n \vec{r}_i \quad (3.9)$$

Dabei ist  $\vec{r}_i$  jeweils der Vektor, der von einer Verzweigung zur nächsten zeigt. Ist  $l_0$  die Länge einer Sechseckkante im Ausgangsgitter, so gilt  $|\vec{r}_i| = l_0$ .

Außerdem wurde der Ursprung des Koordinatensystems so gewählt, dass die Photonen zum Zeitpunkt 0, d.h. vor dem ersten Schritt, bei  $\vec{r} = \vec{0}$  gestartet werden.

### Berechnung des mittleren Photonenaufenthaltsortes:

Werden die Photonen vom Startgitterpunkt aus mit gleicher Wahrscheinlichkeit in eine der drei möglichen Richtungen entsandt, so ergibt sich aus Symmetriegründen sofort, dass für den mittlere Aufenthaltsort nach beliebiger Schrittzahl immer  $\langle \vec{r}(n) \rangle = \vec{0}$  gilt. Folgen alle Photonen im ersten Schritt allerdings immer der gleichen Gitterlinie, so ergibt sich ein anderer mittlerer Ort: Ist also z.B. immer  $\vec{r}_1 = l_0 \vec{e}_x$ , wobei das Koordinatensystem so gewählt sei, dass  $\vec{e}_x$  Einheitsvektor entlang einer Gitterlinie ist, so ist der mittlere Ort nach  $n$  Schritten

$$\langle \vec{r}(n) \rangle = l_0 \sum_{i=1}^n \frac{1}{2^{i-1}} \vec{e}_x. \quad (3.10)$$

Nach einem Schritt gilt nämlich klarerweise  $\langle \vec{r}(1) \rangle = l_0 \vec{e}_x$ . Der mittleren Ort nach  $n+1$  Schritten ergibt sich aus dem mittleren Ort nach  $n$  Schritten durch Vorschalten einer weiteren Verzweigung:  $\langle \vec{r}(n+1) \rangle$  ergibt sich somit aus der Mittelung aller Photonen, die bei dieser vorgeschalteten ersten Verzweigung in eine Richtung gehen und anschließend  $n$  weitere Schritte zurücklegen und aller Photonen, die in die andere Richtung gehen, um dann  $n$  weitere Schritte zurückzulegen. Da der erste Schritt in  $\vec{e}_x$ -Richtung geht, sind die beiden Richtungen, über die zu mitteln ist, gegeben durch  $\cos(\frac{\pi}{3})\vec{e}_x \pm \sin(\frac{\pi}{3})\vec{e}_y = \frac{1}{2}\vec{e}_x \pm \frac{\sqrt{3}}{2}\vec{e}_y$ . Die Mittelung ergibt:

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}(n+1) \rangle &= l_0 \vec{e}_x + \frac{1}{2} |\langle \vec{r}(n) \rangle| \left( \left( \frac{1}{2} \vec{e}_x + \frac{\sqrt{3}}{2} \vec{e}_y \right) + \left( \frac{1}{2} \vec{e}_x - \frac{\sqrt{3}}{2} \vec{e}_y \right) \right) \\ &= l_0 \vec{e}_x + \frac{1}{2} |\langle \vec{r}(n) \rangle| \vec{e}_x = l_0 \vec{e}_x + l_0 \sum_{i=1}^n \frac{1}{2^i} \vec{e}_x = l_0 \sum_{i=1}^{n+1} \frac{1}{2^{i-1}} \vec{e}_x. \end{aligned}$$

Gleichung (3.10) ist somit bewiesen und kann weiter umgeformt werden:

$$\langle \vec{r}(n) \rangle = l_0 \sum_{i=1}^n \frac{1}{2^{i-1}} \vec{e}_x = 2l_0 \left( 1 - \frac{1}{2^n} \right) \vec{e}_x.$$

Im Grenzfall sehr vieler Schritte (d.h.  $n \rightarrow \infty$ ) ergibt sich  $\langle \vec{r}(n) \rangle = 2l_0 \vec{e}_x$ . Dies ist, wie man durch Vergleich mit dem Ergebnis des nächsten Abschnittes feststellen kann, eine vernachlässigbare Abweichung vom Ursprung.

**Berechnung der mittleren quadratischen Abweichung:**

Als mittlere quadratische Abweichung  $\sigma^2(n) = \langle \vec{r}(n) \cdot \vec{r}(n) \rangle$  der Photonen-aufenthaltsorte  $\vec{r}(n)$  in Abhängigkeit von der Schrittzahl  $n$  ergibt sich unter Verwendung von Gleichung (3.9):

$$\begin{aligned} \sigma^2(n) &= \langle \vec{r}(n) \cdot \vec{r}(n) \rangle = \left\langle \left( \sum_{i=1}^n \vec{r}_i \right) \cdot \left( \sum_{i=1}^n \vec{r}_i \right) \right\rangle = \left\langle \sum_{i,j=1}^n \vec{r}_i \cdot \vec{r}_j \right\rangle \\ &= \sum_{i=1}^n \langle \vec{r}_i \cdot \vec{r}_i \rangle + 2 \sum_{\substack{i,j=1 \\ j < i}}^n \langle \vec{r}_i \cdot \vec{r}_j \rangle = nl_0^2 + 2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{i-1} \langle \vec{r}_i \cdot \vec{r}_j \rangle \quad (3.11) \end{aligned}$$

Um dies weiter zu berechnen, wird zunächst der Mittelwert des Skalarproduktes  $\langle \vec{r}_i \cdot \vec{r}_j \rangle$  bestimmt: Als mittleren Wert des Vektors beim  $n$ -ten Schritt erhält man unter Verwendung von Gleichung (3.10):

$$\langle \vec{r}_n \rangle = \langle \vec{r}(n) \rangle - \langle \vec{r}(n-1) \rangle = \frac{1}{2^{n-1}} \vec{r}_1.$$

Entsprechend gilt (für  $i > j$ ):

$$\langle \vec{r}_i \rangle = \frac{1}{2^{i-j}} \vec{r}_j.$$

Somit erhält man:

$$\langle \vec{r}_i \cdot \vec{r}_j \rangle = \frac{1}{2^{i-j}} \vec{r}_j \cdot \vec{r}_j = \frac{1}{2^{i-j}} l_0^2$$

Dieses Ergebnis wird in Gleichung (3.11) eingesetzt und die Summe mit Hilfe der Summenformel für (endliche) geometrische Summen ([14]:  $\sum_{i=1}^n q^i = \frac{q^{n+1}-1}{q-1}$  für  $q \neq 1$ ) berechnet:

$$\begin{aligned} \sigma^2(n) &= nl_0^2 + 2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{i-1} \frac{1}{2^{i-j}} l_0^2 = nl_0^2 + 2l_0^2 \sum_{i=1}^n \left( 1 - \frac{1}{2^{i-1}} \right) \\ &= \left( 3n - 4 + \frac{4}{2^n} \right) l_0^2 \end{aligned}$$

Für große Schrittzahlen lautet dieses Ergebnis näherungsweise:

$$\sigma^2(n) = 3nl_0^2. \quad (3.12)$$

**Diffusionskonstante und effektive freie Weglänge:**

Betrachtet man also die Photonen ausbreitung als Random-Walk-Prozess mit rein zufälligem Verhalten an den Verzweigungen, so erhält man erwartungsgemäß ein diffusives System. Die Diffusionskonstante  $D$  ergibt sich durch Vergleich von Gleichung (3.12) mit  $\sigma^2(n) = 4Dt = 4D \frac{n}{c}$  (zweidimensionaler

Diffusionsprozess) zu  $D = \frac{3}{4}l_0c'$  (mit der Ausbreitungsgeschwindigkeit  $c'$  in Schritten pro Zeiteinheit). Die effektive freie Weglänge  $l^*$  ergibt sich somit aus (2.1) zu  $l^* = \frac{2D}{c'} = \frac{3}{2}l_0$ .

Man beachte, dass man mit der häufig verwendeten Formel (siehe z.B. [1, 7, 15])

$$l^* = l_0 \frac{1}{\langle 1 - \cos \theta \rangle} \quad (3.13)$$

durch Einsetzen von  $\theta = \frac{\pi}{3}$  ein falsches Ergebnis, nämlich  $l^* = 2l_0$ , erhält. Gleichung (3.13) ergibt sich aus [15]

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= \left\langle \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (\vec{r}_i \cdot \vec{r}_j) \right\rangle \\ &= n \langle l^2 \rangle + 2 \langle l \rangle^2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n \left\langle \cos \left( \sum_{k=i+1}^j \theta_k \right) \right\rangle \\ &= n \langle l^2 \rangle + 2 \langle l \rangle^2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=i+1}^n \langle \cos \theta \rangle^{j-i} \\ &= n \langle l^2 \rangle + 2n \langle l \rangle^2 \frac{\langle \cos \theta \rangle}{\langle 1 - \cos \theta \rangle} \end{aligned} \quad (3.14)$$

Dabei ist  $\theta$  bzw.  $\theta_k$  der Streuwinkel zwischen zwei aufeinanderfolgender Schrittvektoren. Die beim Berechnen von  $\left\langle \cos \left( \sum_{k=i+1}^j \theta_k \right) \right\rangle$  auftretenden  $\sin \theta$ -Terme mitteln sich heraus. Um nun Gleichung (3.13) zu erhalten, wird vorausgesetzt, dass die Schrittlängen  $l$  exponentiell verteilt sind und somit  $\langle l \rangle = l_0$  und  $\langle l^2 \rangle = 2l_0^2$  ist. Durch Vergleich mit  $\sigma^2 = 2n^*(l^*)^2$  erhält man dann Gleichung (3.13) und  $n^* = n \langle 1 - \cos \theta \rangle$ . Bei dem hier betrachteten Random-Walk von Photonen im Sechseckgitter sind jedoch alle Schritte gleich lang. Bei immer gleicher Schrittlänge  $l_0$ , also  $\langle l \rangle = l_0$  und  $\langle l^2 \rangle = l_0^2$ , aber variierenden Streuwinkeln  $\theta$ , muss Gleichung (3.13) ersetzt werden durch

$$l^* = \frac{1}{2} l_0 \frac{\langle 1 + \cos \theta \rangle}{\langle 1 - \cos \theta \rangle}. \quad (3.15)$$

Dann ergibt sich auch für  $\theta = \frac{\pi}{3}$  oder  $\langle \cos \theta \rangle = \frac{1}{2}$  das Ergebnis  $l^* = \frac{3}{2}l_0$ , welches zu Gleichung (3.12) führt.

In Gleichung (3.12) wäre statt der Abhängigkeit von der Schrittzahl natürlich die Abhängigkeit von der Zeit interessanter. Dazu wird im nächsten Abschnitt die Beziehung (3.8) zwischen Schrittzahl und Zeit aus Abschnitt 3.2.2 verwendet.



### 3.3.2 Zeitabhängigkeit beim Random-Walk-Modell

Setzt man Gleichung (3.8) in (3.12) ein, so erhält man:

$$\sigma^2(t) = \frac{6cl_0^2 \cos(\alpha_1)}{3l_0 - \frac{\sqrt{3}}{2}d} t \quad (3.16)$$

Diese Gleichung ist noch winkelabhängig. Diese Winkelabhängigkeit würde allerdings nur Sinn machen, wenn im Verlaufe einer Bahn die Winkel nie von einem der drei im letzten Abschnitt beschriebenen Winkeln abweichen. Dies gilt nur in regelmäßig hexagonalen Gittern. Um das vorliegende Random-Walk-Modell aber überhaupt verwenden zu dürfen, darf das Verhalten eines Strahlen an einer Verzweigung nicht vom Verhalten an der vorherigen Verzweigung abhängen. Wiederholen sich die Winkel andauernd, so ist ein solch zufälliges Verhalten nicht für alle Strahlen zu erwarten. Vielmehr gibt es dann, wie im nächsten Abschnitt und in den Computersimulationen gezeigt wird, auch periodische Bahnen, so dass sich die Photonen superdiffusiv und nicht diffusiv ausbreiten. Das Random-Walk-Modell gilt also nur für hinreichend unregelmäßige Gitter. Bei diesen Gittern werden die Winkel im Laufe einer Bahn von den drei Winkeln im exakten Gitter abweichen. Somit muss Gleichung (3.16) über den Winkel  $\alpha_1$ , der zwischen 0 und  $\frac{\pi}{6}$  liegt, gemittelt werden. Wegen

$$\frac{6}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{6}} \cos(\alpha_1) d\alpha_1 = \frac{3}{\pi}$$

ergibt diese Mittelung:

$$\sigma^2(t) = \frac{36cl_0^2}{\pi(6l_0 - \sqrt{3}d)} t \quad (3.17)$$

Bei der Berechnung von  $\sigma^2 = \langle \vec{r} \cdot \vec{r} \rangle$  in Abschnitt 3.3.1 wurden dabei Winkel verwendet, die denen im regelmäßig hexagonalem Gitter entsprechen. Dies führt allerdings zu keinem Widerspruch: In einem unregelmäßigem Gitter mitteln sich die Abweichungen von den exakten Winkeln bei der Berechnung von  $\sigma^2$  heraus. Die Berechnungen aus Abschnitt 3.3.1 können also auf unregelmäßige Gitter angewendet werden. Die Annahme der Zufälligkeit bei Kanalwechseln ist besonders gut erfüllt, wenn es sich um ausreichend unregelmäßige Gitter handelt (Dies wird beim Vergleich mit den Simulationen in Abschnitt 3.7.5 genauer erläutert). Außerdem benötigt man lange Bahnen, so dass möglichst viele Winkel in einer solchen Bahn auftreten, oder man muss über viele unter verschiedenen Winkeln gestartete Photonen mitteln.

### 3.4 Theorie III: Photonenausbreitung in exakten und fast exakten Sechseckgittern

Abschnitt 3.4.1 unterteilt zunächst die Photonen in die Gruppe der Photonen auf geraden Bahnen, also Photonen, die für sehr lange Zeit in die gleiche Richtung fliegen, und die Gruppe der andere Photonen, die sich scheinbar zufällig bewegen. Geht man stark vereinfachend davon aus, dass die Photonen auf einer geraden Bahn beliebig lange auf dieser bleiben, also unendlich lange in die gleiche Richtung fliegen, so führt dies zu einem ballistischen Anteil bei der Photonenausbreitung. Da die Photonenausbreitung im exakten Gitter jedoch superdiffusiv und nicht ballistisch ist, wird in Abschnitt 3.4.2 berechnet, wie viele Photonen nach einer bestimmten Zeit eine gerade Bahn verlassen. Dieses Ergebnis wird dann verwendet, um für Abschnitt 3.4.3 eine effektive Schrittlängenverteilung  $p(l)$  zu bekommen, d.h. eine Funktion, die die Wahrscheinlichkeit dafür liefert, dass ein Photon die Strecke  $l$  auf einer geraden Bahn zurücklegt. Mit dieser Schrittlängenverteilung und mit dem Continuous-Time-Random-Walk-Formalismus für Lévy-Walks wird in Abschnitt 3.4.3 das superdiffusive Ausbreitungsverhalten der Photonen im exakten Gitter sowie der Übergang zur diffusiven Ausbreitung in schwach unregelmäßigen Gittern erklärt. Die mittlere quadratische Abweichung im exakten Gitter ergibt sich dabei als proportional zu  $t^2/\ln(t)$  (für  $t \rightarrow \infty$ ). Die Simulationen weichen davon leicht ab. Sie folgen einem Potenzgesetz mit nicht ganzzahligem Exponenten. In Abschnitt 3.4.4 wird schließlich gezeigt, wie man dieses Potenzgesetz über den Formalismus der Lévy-Walks erhält, wenn man eine selbstähnliche Schrittlängenverteilung annimmt.

#### 3.4.1 Ballistische Näherung für das exakte Gitter

In Abschnitt 3.3.1 wurde die mittlere quadratische Ortsabweichung  $\sigma^2 = \langle \vec{r} \cdot \vec{r} \rangle$  der Photonen für den Fall berechnet, dass die Photonen an den Verzweigungen rein zufällig in einen der beiden möglichen Kanäle übergehen. Im regelmäßig hexagonalen Gitter geschieht der Kanalwechsel jedoch nicht zufällig, sondern kann exakt berechnet werden. Dies wird in den Simulationen auch gemacht werden (siehe Abschnitt 3.6.1). Man könnte meinen, dass durch die Mittelung über Bahnen mit vielen verschiedenen Startwinkeln und verschiedenen Startpositionen, sich ein ähnliches Ergebnis wie bei rein zufälligen Kanalwechseln ergibt. In Abschnitt 3.2.1 wurde jedoch gezeigt, dass im regelmäßig hexagonalen Gitter im Verlaufe einer Photonenbahn nur drei verschiedene Winkel auftreten können. Dies legt nahe, dass auch bei Mittelung über viele Startkonfigurationen, man eine andere Photonenverteilung als bei einer rein zufälligen Photonenausbreitung erhält, da der Kanalwechsel eines Photons von der Vorgeschichte abhängt. Auch gibt es im regelmäßig hexagonalen Gitter einige streng periodische Bahnen oder Bahnen, bei denen sich die Photonen über sehr viele Schritte im-

mer in die gleiche Richtung bewegen (ein paar Beispiele für solche Bahnen werden in Abschnitt 3.6.2 beschrieben). Solche Bahnen tragen dazu bei, dass bei Mittelung über verschiedene Startwinkel, die Skalarprodukte in  $\sigma^2 = \langle \vec{r} \cdot \vec{r} \rangle = nl_0^2 + 2 \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^{n-i} \langle \vec{r}_i \cdot \vec{r}_{i+k} \rangle$  wesentlich von denen, die man bei zufälliger Ausbreitung erhält, abweichen.

Auch in diesem Abschnitt werden bei der Berechnung von  $\sigma^2$  wie bereits in Abschnitt 3.3 nur die Kanäle betrachtet, durch die ein Photon läuft. Die Photonenposition nach  $n$  Schritten ist  $\vec{r} = \sum_{i=1}^n \vec{r}_i$  wobei  $|\vec{r}_i| = l_0$  die Kanallänge ist.

Im Folgenden wird eine Photonenbahn immer einer der beiden Kategorien zugeordnet:

- Gerade Bahn: Ein Photon auf einer geraden Bahn läuft bei jedem zweiten Schritt in die gleiche Richtung. Die Schritte dazwischen sind beliebig. In Abbildung 3.13 sind die möglichen nach rechts laufenden geraden Bahnen (durchgezogene Linien) dargestellt. Für die Skalarprodukte muß also gelten:  $\vec{r}_i \cdot r_{i+2j} = 1$  und  $\vec{r}_i \cdot r_{i+2j+1} = \frac{1}{2}$  für alle  $j$ .
- Andere Bahnen: Die Photonen laufen entweder auf geschlossenen Kreisbahnen oder es ist keine besondere Regelmäßigkeit festzustellen. Diese Photonen tragen nichts zum superdiffusiven Ausbreitungsverhalten bei, deshalb wird hier näherungsweise angenommen, dass die Skalarprodukte im Mittel verschwinden, dass also  $\langle \vec{r}_i \cdot r_{i+j} \rangle = 0$  für  $j \geq 1$  ist.

Um das superdiffusive Ausbreitungsverhalten erklären zu können, muss man ausschließlich die geraden Bahnen betrachten. Dabei interessieren vor allem die folgenden beiden Fragen:

- Wenn sich ein Photon im  $i$ -ten Schritt z.B. nach rechts bewegt, mit welcher Wahrscheinlichkeit befindet es sich dann auf einer geraden Bahn, d.h. mit welcher Wahrscheinlichkeit wird es sich danach in jedem zweiten Schritt nach rechts bewegen?
- Wenn ein Photon auf einer geraden Bahn läuft, wann wird es diese wieder verlassen?

Die auftretenden Wahrscheinlichkeiten werden hier über eine sehr große Anzahl von Photonen definiert, die mit unterschiedlichen Winkeln gestartet werden. Die Frage nach dem Zeitpunkt des Verlassens einer geraden Bahn wird erst in Abschnitt 3.4.2 vollständig behandelt. Um die erste Frage soll es nun gehen:

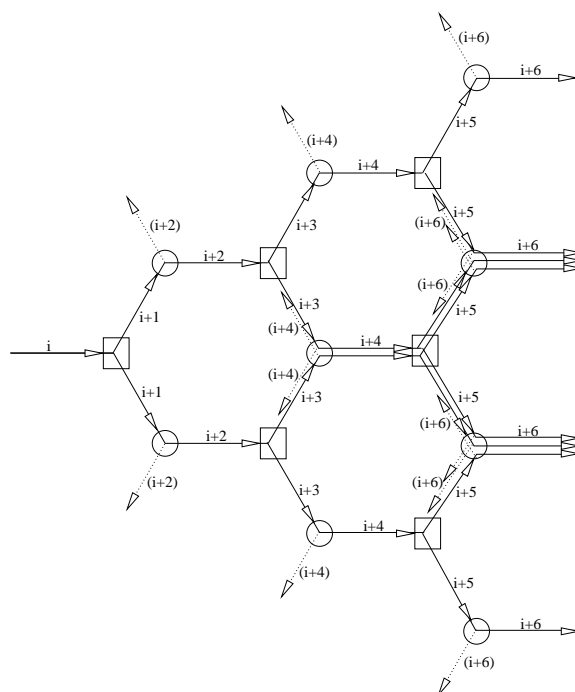


Abbildung 3.13: Die Grafik verdeutlicht gerade Bahnen, also Wege, bei denen jeder zweite Schritt in die gleiche Richtung wie der  $i$ -te Schritt geht (durchgezogene Linien). Desweiteren ist dargestellt, an welchen Verzweigungen ein Photon eine gerade Bahn verlassen kann. Dies ist nämlich nur an den mit einem Kreis gekennzeichneten Verzweigungen möglich (die abweichenden Bahnen sind gepunktet angedeutet). An den mit einem Quadrat gekennzeichneten Verzweigungen spielt es keine Rolle, welche Richtung das Photon einschlägt: War ein Photon zuvor auf einer geraden Bahn, so ist es danach sicher immer noch auf einer solchen. Mit diesen Überlegungen kann abgeschätzt werden, wie viele Photonen sich auf einer geraden Bahn bewegen (siehe Text).

### Häufigkeit gerader Bahnen:

Es gilt herauszufinden, wie viele der Photonen, die im  $i$ -ten Schritt einen Kanal in eine bestimmte Richtung durchqueren, danach auf einer geraden Bahn in diese Richtung weiterlaufen. In Abbildung 3.13 ist dargestellt, welche geraden Bahnen es gibt, wenn das Photon beim  $i$ -ten Schritt nach rechts gelaufen ist. Um auf einer geraden Bahn zu bleiben spielt es an den Quadratverzweigungen keine Rolle, in welchen Kanal das Photon weitergeht. An den Kreisverzweigungen jedoch entscheidet sich, ob das Photon auf einer geraden Bahn weiterläuft oder diese verläßt. Der Kanalwechsel an den Kreisverzweigungen ist also entscheidend. Er kann auf zwei Arten stattfinden:

- Fall 1: Der Winkel zwischen Photonenbahn und Kanalmittelparallelen im Kanal vor der Kreisverzweigung ist kleiner als  $\frac{\pi}{6}$ : Dann gibt es die

in Abschnitt 3.2.1 in Abbildung 3.7 mit Fall a und b bezeichneten Möglichkeiten des Kanalwechsels.

- Fall 2: Der Winkel im Kanal vor der Kreisverzweigung ist größer als  $\frac{\pi}{6}$ : Somit entscheidet nur die Anzahl der Reflektionen im Kanal vor der Kreisverzweigung über den Verbleib auf einer geraden Bahn: Ist diese Anzahl gerade, so läuft das Photon auf der geraden Bahn weiter; ist die Anzahl ungerade, so verläßt es die gerade Bahn (siehe Abbildung 3.14).

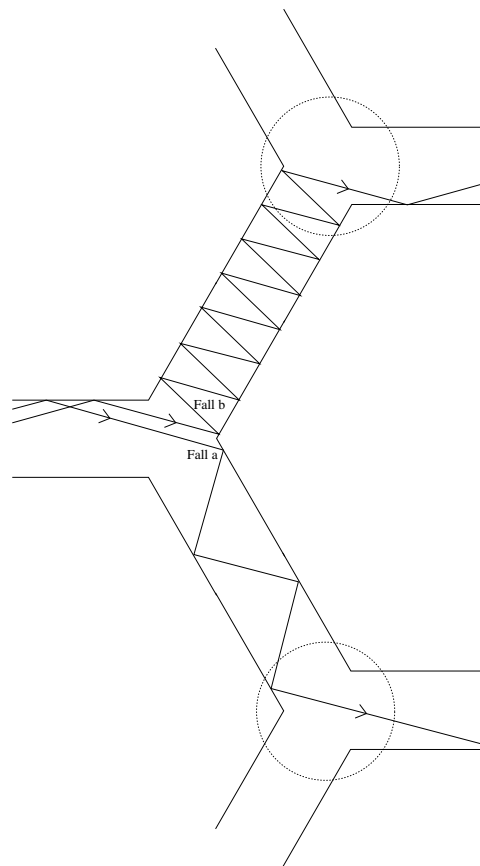


Abbildung 3.14: Das Photon läuft auf einer geraden Bahn weiter, wenn die Anzahl der Reflektionen im Kanal vor der entscheidenden Verzweigung (siehe Kreise) gerade ist. Würde das Photon einmal mehr oder weniger reflektiert, so würde es die gerade Bahn verlassen. Dies gilt unabhängig davon ob der Kanalwechsel zuvor gemäß Fall a (unten) oder b (oben) stattfand.

Da sich der Winkel kleiner  $\frac{\pi}{6}$  in jedem zweiten Kanal wiederholt (siehe Abschnitt 3.2.1), tritt bei einer geraden Bahn entweder an allen Kreisverzweigungen immer Fall 1 oder immer Fall 2 auf. Im Folgenden wird nun

davon ausgegangen, dass innerhalb einer geraden Bahn es zu jedem Winkel eine feste Reflektionsanzahl gibt. Wird das Photon in einem Kanal, in dem die Photonenbahn den Winkel  $\alpha$  zur Kanalmittelparallelen hat, also  $m$  mal reflektiert, so wird es auch in jedem späteren Kanal, in dem der Winkel  $\alpha$  ist,  $m$  mal reflektiert. Diese Forderung geht davon aus, dass der Weg des Photons in einem Kanal sich bei einer geraden Bahn in einem regelmäßigen Gitter exakt wiederholt. Eine solche gerade Bahn weist also eine Art Periodizität auf. In Abschnitt 3.4.2 wird von dieser Forderung abgesehen. Tatsächlich kann sich die Position des Photons innerhalb des Kanals bei jedem Schritt leicht verschieben. Dies führt dann dazu, dass das Photon nach einiger Zeit die gerade Bahn verläßt. Aus Gründen der Darstellung soll aber zunächst die Forderung nach sich wiederholenden Reflektionsanzahlen streng erfüllt sein. Somit ergibt sich für die obigen Fälle:

- bei Fall 1 an allen Kreisverzweigungen: Damit ein Photon auf einer geraden Bahn bleibt, müssen die Kanalwechsel an den Kreisverzweigungen immer gemäß Fall a oder immer gemäß Fall b stattfinden; erfolgt einmal ein Kanalwechsel gemäß dem anderen Fall, so verläßt das Photon die gerade Bahn. Nach  $2j$  Schritten befindet sich ein Photon also nur noch mit der Wahrscheinlichkeit  $p_a^j + p_b^j$  auf einer geraden Bahn, wobei  $p_a$  bzw.  $p_b$  die Wahrscheinlichkeiten für das Eintreten eines Kanalwechsels gemäß Fall a bzw. b sind. Diese Wahrscheinlichkeit nimmt exponentiell mit der Schrittzahl ab; die entsprechenden Photonen spielen daher keine Rolle für das superdiffusive Ausbreitungsverhalten (wie unten noch genauer erläutert wird).
- bei Fall 2 an allen Kreisverzweigungen: Entscheidend für den Verbleib dieser Photonen auf geraden Bahnen ist nur, dass die Anzahl der Reflektionen vor dem Kanalwechsel an den Kreisverzweigungen immer gerade sein muss (siehe oben). Vor einer Kreisverzweigung tritt entweder ein Winkel  $\alpha^{(a)}$  zwischen  $\frac{\pi}{6}$  und  $\frac{\pi}{3}$  (wenn zuvor ein Kanalwechsel gemäß Fall a stattfand) oder ein Winkel  $\alpha^{(b)}$  zwischen  $\frac{\pi}{3}$  und  $\frac{\pi}{2}$  (nach Wechseln gemäß Fall b) auf. Interessant ist der Fall, bei dem sowohl für  $\alpha^{(a)}$  als auch für  $\alpha^{(b)}$  die Reflektionsanzahlen gerade sind. Dann bleibt das Photon nämlich für immer auf der geraden Bahn. Dies ist der entscheidende Anteil, der zum nichtdiffusiven Ausbreitungsverhalten führt. Alle anderen Fälle tragen nicht zum superdiffusiven Verhalten bei: Ist die Reflektionsanzahl für beide Winkel ungerade, so wird das Photon immer die gerade Bahn verlassen (das Photon läuft dann übrigens auf einer Kreisbahn). Ist sie nur für  $\alpha^{(a)}$  gerade, so darf nur Fall a eintreten, damit das Photon auf der geraden Bahn bleibt (Wahrscheinlichkeit nach  $2j$  dafür:  $p_a^j$ ). Ist entsprechend die Reflektionsanzahl nur für  $\alpha^{(b)}$  gerade, so darf nur Fall b stattfinden (Wahrscheinlichkeit  $p_b^j$ ).

Geht man davon aus, dass alle hier genannten Fälle gleichhäufig auftreten, so kommt der interessante Fall, bei dem das Photon unendlich lange auf einer geraden Bahn bleibt, mit der Wahrscheinlichkeit  $\frac{1}{8}$  vor. Bei den anderen Fällen ist das Photon nach  $2j$  Schritten mit einer Wahrscheinlichkeit proportional zu  $(p_a^j + p_b^j)$  auf einer geraden Bahn. Dieser exponentiell abnehmende Anteil führt zu einem diffusiven Anteil bei der Photonenausbreitung, der gegenüber dem ballistischen Anteil der unendlich langen geraden Bahnen vernachlässigt werden kann. Erst in Abschnitt 3.5 wird der diffusive Anteil wieder berücksichtigt, wenn es darum geht, ein Modell für den Übergang von der Ausbreitung in fast exakten zur Ausbreitung in unregelmäßigen Gittern zu finden.

Für die Skalarprodukte auf geraden Bahnen gilt (siehe oben):  $\vec{r}_i \cdot \vec{r}_{i+2j} = 1$  und  $\vec{r}_i \cdot \vec{r}_{i+2j+1} = \frac{1}{2}$  für alle  $j$ . Auf diesen Bahnen laufen  $\frac{1}{8}$  der Photonen. Somit ergibt sich für die mittlere quadratische Abweichung:

$$\begin{aligned} \sigma^2(n) &= nl_0^2 + 2 \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^{n-i} \langle \vec{r}_i \cdot \vec{r}_{i+k} \rangle \\ &\approx nl_0^2 + 2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{[(n-i)/2]} \langle \vec{r}_i \cdot (\vec{r}_{i+2j} + \vec{r}_{i+2j+1}) \rangle \\ &= nl_0^2 + 2l_0^2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{[(n-i)/2]} \frac{1}{8} \left( 1 + \frac{1}{2} \right) \end{aligned}$$

Beim Berechnen der Summen wird  $n$  als groß angenommen. Alle Terme, die nicht quadratisch in  $n$  sind, werden vernachlässigt:

$$\begin{aligned} \sigma^2(n) &= nl_0^2 + 2l_0^2 \sum_{i=1}^n \frac{3(n-i)}{32} = nl_0^2 + \frac{3}{16} l_0^2 n^2 - \frac{3}{32} l_0^2 n(n+1) \\ &\approx \frac{3}{32} l_0^2 n^2 \end{aligned} \quad (3.18)$$

Man erkennt, dass sich dieser Näherungsrechnung zufolge ein Teil der Photonen rein ballistisch ausbreitet. Sie dominieren dann auch das gesamte Ausbreitungsverhalten.

### Ergebnis in Abhängigkeit von der Zeit:

Das Ergebnis für  $\sigma^2$  in der ballistischen Näherung (3.18) läßt sich durch Einsetzen von Gleichung (3.8) in Abhängigkeit von der Zeit  $t$  ausdrücken. Die dann entstehende Formel ist vom Winkel  $\alpha_1$  abhängig. Bei der Herleitung der entsprechenden Ausdrücke wurde allerdings bereits verwendet, dass es sich um einen Mittelwert von Photonen, die unter vielen verschiedenen

Winkeln gestartet wurden, handelt. Es muss also noch über den Winkel  $\alpha_1$  gemittelt werden, der Werte zwischen 0 und  $\frac{\pi}{6}$  annimmt:

$$\begin{aligned}\sigma^2(n) &= \frac{6}{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{6}} d\alpha_1 \frac{3}{32} l_0^2 \left( \frac{4c \cos(\alpha_1)}{6l_0 - \sqrt{3}d} t \right)^2 \\ &= \frac{9\sqrt{3} + 6\pi}{8\pi \left(6 - \sqrt{3}\frac{d}{l_0}\right)^2} c^2 t^2\end{aligned}\quad (3.19)$$

Vergleiche mit den Simulationen sowie Diskussionen über die Qualität der Näherungen, finden sich in Abschnitt 3.7.

### 3.4.2 Abnehmende Photonenzahl auf geraden Bahnen

Im vorigen Abschnitt wurde davon ausgegangen, dass es auf einer geraden Bahn zu jedem Winkel eine feste Reflektionsanzahl gibt, die sich im Verlaufe der Bahn nie ändert. Dies würde bedeuten, dass der Weg des Photons im Kanal sich bei einer geraden Bahn exakt wiederholt, weshalb man eine solche Bahn auch als periodische Bahn bezeichnen könnte. Hier wird jetzt davon ausgegangen, dass sich die Position des Photons in Bezug auf den Kanal bei jedem Schritt leicht verschieben kann. Nach einiger Zeit wird es dann passieren, dass ein Photon einmal mehr oder weniger in einem Kanal reflektiert wird und dadurch den Kanal anders wechselt als im Idealfall der sich ständig wiederholenden konstanten Reflektionsanzahlen. Das Photon wird also nach einiger Zeit die periodische Bahn verlassen. Es wird nun untersucht, wann sich noch wie viele Photonen auf einer periodischen Bahn befinden. Übrigens muss es strenggenommen nicht um eine gerade Bahn gehen. Man könnte genauso eine beliebige andere Photonenbahn betrachten und sich fragen, nach wie vielen Schritten ein Photon, welches anfangs von dem Photon auf dieser Bahn nur um einen kleinen Winkel abweicht, in einen anderen Kanal wechseln wird. Da für das superdiffusive Ausbreitungsverhalten allerdings die geraden Bahnen besonders interessant sind und diese im vorigen Abschnitt immer aus periodischen Bahnen konstruiert worden sind, wird im Folgenden immer von der Abweichung von geraden, periodischen Bahnen gesprochen.

Bei einer idealen geraden und periodischen Bahn wie in Abschnitt 3.4.1 wiederholt sich die Position des Strahls innerhalb eines Kanales mindestens bei jedem zweiten Schritt. Die Position des Photonenstrahls im  $k$ . Kanal wird wie in Abbildung 3.15 angedeutet gemessen als Abstand  $x_k$ . Bei einer periodischen Bahn gilt also  $x_{k+2} = x_k$ . Im Folgenden sei  $\alpha_1$  der Startwinkel und  $x_1$  die Startposition einer periodischen geraden Bahn. Nun wird eine Bahn betrachtet, die unter dem Winkel  $\alpha_1^* = \alpha_1 + \delta\alpha$  bei  $x_1^* = x_1$  gestartet wird. Diese Bahn wird nach einigen Schritten in einen anderen Kanal wechseln als die periodische Bahn. Um zu bestimmen, wann genau dies der Fall



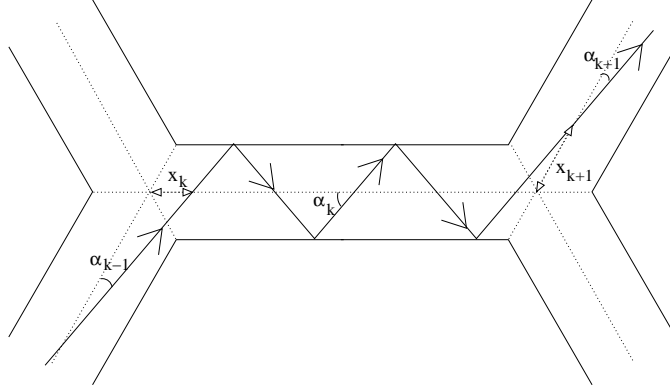


Abbildung 3.15: Die Position des Photonenstrahls im  $k$ -ten Kanal wird mit der Größe  $x_k$  angegeben. Dabei ist  $x_k$  der Abstand zwischen dem Schnittpunkt der Mittelparallelen in der Verzweigung, durch die das Photon in den Kanal gelangt ist, und dem ersten Schnittpunkt der Photonenbahn mit der Kanalmittelebene.

sein wird, muss die Abweichung der Positionen im  $k$ -ten Kanal berechnet werden. Für die Positionen nach zwei Kanalwechselln gilt:

$$\begin{aligned}
 x_3 &= x_1 - l_0 - \frac{\sin\left(\pm\frac{\pi}{3} \mp \alpha_1\right)}{\sin(\alpha_1)} l_0 \\
 &\quad + \frac{\cos\left(\pm\frac{\pi}{3} \mp \alpha_1\right) m_2 d}{\sin(\alpha_1)} + \frac{m_1 d}{\tan(\alpha_1)} \\
 \text{bzw. } x_3^* &= x_1 - l_0 - \frac{\sin\left(\pm\frac{\pi}{3} \mp \alpha_1 \mp \delta\alpha\right)}{\sin(\alpha_1 + \delta\alpha)} l_0 \\
 &\quad + \frac{\cos\left(\pm\frac{\pi}{3} \mp \alpha_1 \mp \delta\alpha\right) m_2 d}{\sin(\alpha_1 + \delta\alpha)} + \frac{m_1 d}{\tan(\alpha_1 + \delta\alpha)}
 \end{aligned}$$

Diese Gleichungen ergeben sich aus den Formeln (3.47), (3.48) und (3.49), die in Abschnitt 3.6.1 mit einfachen geometrischen Überlegungen hergeleitet werden. Darin ist  $l_0$  die Länge und  $d$  die Dicke der Kanäle. Das Vorzeichen hängt von der Art des Kanalwechsels (gemäß Fall a oder b) ab. Die Zahlen  $m_1$  und  $m_2$  sind die Anzahlen der Reflektionen im ersten bzw. im zweiten Kanal. Diese Reflektionsanzahlen lassen sich näherungsweise aus der Länge des Kanals berechnen (siehe dazu auch Abschnitt 3.6.1):

$$m_1 = \frac{l_0}{d} \tan(\alpha_1) \quad \text{und} \quad m_2 = \frac{l_0}{d} \tan\left(\pm\frac{\pi}{3} \mp \alpha_1\right)$$

Als Differenz ergibt sich somit im Falle des oberen Vorzeichens (d.h. Kanalwechsel gemäß Fall a):

$$x_3^* - x_3 = \frac{1 - \sqrt{3} \tan(\alpha_1)}{\cos(\alpha_1) + \sqrt{3} \sin(\alpha_1)} \frac{\sin(\delta\alpha)}{\sin(\alpha_1 + \delta\alpha)}$$

Bei einem Kanalwechsel gemäß Fall b ist:

$$x_3^* - x_3 = \frac{-3 - \sqrt{3} \tan(\alpha_1)}{\cos(\alpha_1) + \sqrt{3} \sin(\alpha_1)} \frac{\sin(\delta\alpha)}{\sin(\alpha_1 + \delta\alpha)}$$

Nach  $j_a$  Doppelschritten mit Kanalwechseln nach Fall a und  $j_b$  Kanalwechseln gemäß Fall b gilt insgesamt für diese Differenz:

$$x_{2(j_a+j_b)+1}^* - x_{2(j_a+j_b)+1} = \frac{j_a (1 - \sqrt{3} \tan(\alpha_1)) + j_b (-3 - \sqrt{3} \tan(\alpha_1))}{\cos(\alpha_1) + \sqrt{3} \sin(\alpha_1)} \cdot \frac{\sin(\delta\alpha)}{\sin(\alpha_1 + \delta\alpha)}$$

Die Häufigkeit eines Kanalwechsels gemäß Fall a bzw. b ist  $p_a$  bzw.  $p_b$  (aus den Gleichungen (3.2) und (3.3)). Somit ergibt sich die Differenz nach  $k = 2j + 1$  Schritten in Abhängigkeit von  $\delta\alpha$ :

$$\begin{aligned} (x_{2j+1}^* - x_{2j+1}) (\delta\alpha) &= \frac{p_a (1 - \sqrt{3} \tan(\alpha_1)) + p_b (-3 - \sqrt{3} \tan(\alpha_1))}{\cos(\alpha_1) + \sqrt{3} \sin(\alpha_1)} j \\ &\quad \cdot \frac{\sin(\delta\alpha)}{\sin(\alpha_1 + \delta\alpha)} \\ &= \frac{\sqrt{3} \tan(\alpha_1) - 1}{\cos(\alpha_1) + \sqrt{3} \sin(\alpha_1)} \frac{\sin(\delta\alpha)}{\sin(\alpha_1 + \delta\alpha)} j \end{aligned} \quad (3.20)$$

Wird der Unterschied in den Positionen größer als ein kritischer Wert  $x_{max}$  oder kleiner als  $x_{min}$ , so weicht die Bahn mit Startwinkel  $\alpha_1 + \delta\alpha$  von der periodischen Bahn ab. Die Größen  $x_{min}$  und  $x_{max}$  können wie folgt berechnet werden: Es werden die Strahlen betrachtet, die von der ungestörten geraden Bahn um eine Strecke  $x$  parallel zur Mittelparallelen verschoben wurden, aber gerade noch in den gleichen Kanal gelangen, wie der unverschobene Strahl. Die maximal möglichen Verschiebungen sind  $x_{min}$  und  $x_{max}$ . Aus Abbildung 3.16 ergibt sich für das exakte Gitter  $x_{max} - x_{min} = \frac{d}{\tan \alpha}$ . Es wird vereinfachend davon ausgegangen, dass die Position des Photons zu Beginn ungefähr in der Mitte der maximal verschobenen Strahlen lag. Es wird also  $x_{max} = -x_{min}$  gefordert. Damit ergibt sich:

$$\begin{aligned} x_{min} &= -\frac{d}{2 \tan \alpha} \\ \text{und} \quad x_{max} &= \frac{d}{2 \tan \alpha} = -x_{min} \end{aligned} \quad (3.21)$$

Der Winkel  $\alpha$  ist der Winkel im momentanen Kanal, es ist also in jedem zweiten Kanal  $\alpha = \alpha_1$  und in den anderen Kanälen  $\alpha = \pi/3 - \alpha_1$  oder  $\alpha = \pi/3 + \alpha_1$ .

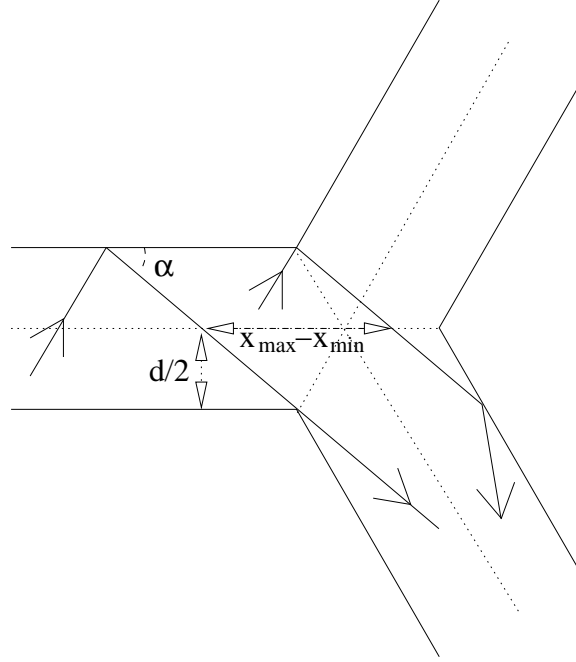


Abbildung 3.16: Im exakten Gitter erhält man als maximalen Abstand in Richtung einer Kanalmittelparallelen zwischen zwei Strahlen, die gerade noch in den gleichen Kanal gelangen  $x_{\max} - x_{\min} = \frac{d}{\tan \alpha}$ .

Geht man nun davon aus, dass sehr viele Photonen mit gleichmäßig verteilten Startwinkeln aus dem Intervall von  $\alpha_1 - \delta\alpha$  bis  $\alpha_1 + \delta\alpha$  gestartet werden, so ergibt sich als Anteil  $N/N_0$  der Photonen, die sich nach  $k = 2j$  Schritten noch auf einer periodischen Bahn befinden:

$$\frac{N(2j)}{N_0} = \frac{1}{N_0} \sum_{m=1}^{N_0} \theta(x_{\max} - (x_{2j+1}^* - x_{2j+1})((2m/N_0 - 1)\delta\alpha)) \cdot \theta((x_{2j+1}^* - x_{2j+1})((2m/N_0 - 1)\delta\alpha) - x_{\min})$$

Dabei ist  $N_0$  die Anzahl der Photonen und  $\theta(x)$  die Heavyside-Funktion, die für positive  $x$  eins und für negative null ist. Für große Photonenanzahlen läßt sich die Summe in ein Integral umwandeln und man erhält:

$$\frac{N(2j)}{N_0} = \int_{-\delta\alpha}^{\delta\alpha} \theta\left(x_{\max} - \frac{\sqrt{3} \tan(\alpha_1) - 1}{\cos(\alpha_1) + \sqrt{3} \sin(\alpha_1)} \frac{\sin(\delta\alpha')}{\sin(\alpha_1 + \delta\alpha')} j\right) \cdot \theta\left(\frac{\sqrt{3} \tan(\alpha_1) - 1}{\cos(\alpha_1) + \sqrt{3} \sin(\alpha_1)} \frac{\sin(\delta\alpha')}{\sin(\alpha_1 + \delta\alpha')} j - x_{\min}\right) d(\delta\alpha') \quad (3.22)$$

Um dieses Integral zu lösen müssen die Ungleichungen

$$x_{max} > \frac{\sqrt{3} \tan(\alpha_1) - 1}{\cos(\alpha_1) + \sqrt{3} \sin(\alpha_1)} \frac{\sin(\delta\alpha')}{\sin(\alpha_1 + \delta\alpha')} j > x_{min}$$

nach  $\delta\alpha'$  aufgelöst werden. Da  $\alpha_1$  zwischen 0 und  $\frac{\pi}{6}$  liegt ist  $\sqrt{3} \tan(\alpha_1) - 1$  negativ. Außerdem ist  $x_{max}$  positiv und  $x_{min}$  negativ. Für  $\delta\alpha' > 0$  kommt man somit zu der Ungleichung

$$\frac{\cos(\alpha_1) + \sqrt{3} \sin(\alpha_1)}{\sqrt{3} \tan(\alpha_1) - 1} \frac{\sin(\alpha_1 + \delta\alpha')}{\sin(\delta\alpha')} < \frac{j}{x_{min}}$$

Für  $\delta\alpha' < 0$  erhält man:

$$\frac{\cos(\alpha_1) + \sqrt{3} \sin(\alpha_1)}{\sqrt{3} \tan(\alpha_1) - 1} \frac{\sin(\alpha_1 + \delta\alpha')}{\sin(\delta\alpha')} > \frac{j}{x_{max}}$$

Mit

$$\frac{\sin(\alpha_1 + \delta\alpha')}{\sin(\delta\alpha')} = \cos(\alpha_1) + \frac{\sin(\alpha_1)}{\tan(\delta\alpha')}$$

lassen sich diese Ungleichungen umformen zu

$$\begin{aligned} \cot(\delta\alpha') &> \cot(\delta\alpha_{max}) \quad (\text{für } \delta\alpha' > 0) \\ \cot(\delta\alpha') &< \cot(\delta\alpha_{min}) \quad (\text{für } \delta\alpha' < 0) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{mit } \delta\alpha_{max} &= \arccot\left(\frac{(\sqrt{3} \tan \alpha_1 - 1) j}{x_{min} \sin \alpha_1 (\cos \alpha_1 + \sqrt{3} \sin \alpha_1)} - \frac{1}{\tan \alpha_1}\right) \\ \text{und } \delta\alpha_{min} &= \arccot\left(\frac{(\sqrt{3} \tan \alpha_1 - 1) j}{x_{max} \sin \alpha_1 (\cos \alpha_1 + \sqrt{3} \sin \alpha_1)} - \frac{1}{\tan \alpha_1}\right) \end{aligned}$$

Da bei beiden Ungleichungen beide Seiten jeweils gleiches Vorzeichen haben (im Falle der unteren Ungleichung gilt dies zumindest für ausreichend große  $j$  also hinreichend kleines  $|\delta\alpha|$ ), erhält man:

$$\begin{aligned} \delta\alpha' &< \delta\alpha_{max} \quad (\text{für } \delta\alpha' > 0) \\ \delta\alpha' &> \delta\alpha_{min} \quad (\text{für } \delta\alpha' < 0) \end{aligned}$$

Diesen Ungleichungen kann man die neuen Integrationsgrenzen für das Integral aus (3.22) entnehmen:

$$\frac{N(2j)}{N_0} = \int_{\delta\alpha_{min}}^{\delta\alpha_{max}} d(\delta\alpha')$$

Somit kann das Integral berechnet werden und man erhält:

$$\begin{aligned} \frac{N(2j)}{N_0} &= \operatorname{arccot} \left( \frac{j}{x_{min}} f_1(\alpha_1) - f_2(\alpha_1) \right) \\ &\quad - \operatorname{arccot} \left( \frac{j}{x_{max}} f_1(\alpha_1) - f_2(\alpha_1) \right) \quad (3.23) \\ \text{mit } f_1(\alpha_1) &= \frac{\sqrt{3} \tan \alpha_1 - 1}{\sin \alpha_1 (\cos \alpha_1 + \sqrt{3} \sin \alpha_1)} \\ \text{und } f_2(\alpha_1) &= \frac{1}{\tan \alpha_1} \end{aligned}$$

Die Schrittzahl  $j$  kann außerdem mit (3.8) in Abhängigkeit von der Zeit, die das Photon bereits auf der geraden Bahn war, ausgedrückt werden. Insgesamt ergibt sich somit aus (3.23) eine Beziehung der Form:

$$\begin{aligned} \frac{N(t)}{N_0} &= \operatorname{arccot} \left( \frac{t}{t_1(\alpha_1)} - \cot(\alpha_1) \right) \\ &\quad + \operatorname{arccot} \left( \frac{t}{t_1(\alpha_1)} + \cot(\alpha_1) \right) \end{aligned}$$

Dabei ist

$$t_1 = t \left( n = \frac{x_{min}}{f_1} \right),$$

wobei  $t(n)$  die durch (3.7) gegebene Funktion ist, die die Zeit in Abhängigkeit von der Schrittzahl liefert. Die Zeit  $t_1$  läßt sich mit Hilfe von (3.7), (3.21) und (3.23) abschätzen: Es handelt sich um eine positive Zeit der Größenordnung  $l_0/c$  (positiv, da für  $\alpha_1 < \frac{\pi}{6}$  in (3.23)  $f_1(\alpha_1) < 0$  ist). Für große Zeiten ist der Anteil der Photonen, die sich nach der Zeit  $t$  noch immer auf der gleichen geraden Bahn wie zum Zeitpunkt 0 befinden, somit näherungsweise:

$$\frac{N(t)}{N_0} \approx 2 \operatorname{arccot} \left( \frac{t}{t_1} \right). \quad (3.24)$$

In Abbildung 3.17 sind die simulierten Bahnen einiger rein zufällig ausgewählter Photonen dargestellt. Man sieht deutlich, dass einige Photonen für sehr lange Zeiten auf geraden Bahnen in den Richtungen der Gitterlinien unterwegs sind. Abbildung 3.18 liefert die Anzahl von Photonen, die über längere Zeit in einem sehr engen Winkelbereich um eine der Gitterhauptrichtungen bleiben; diese kann man nämlich als Photonen auf einer geraden Bahn auffassen. Somit ist ein Vergleich mit (3.24) möglich: Eine gefittete Kurve der Form (3.24) passt, wie in Abbildung 3.18 gezeigt wird, sehr gut mit den Anzahlen aus der Simulation zusammen, auch wenn dies natürlich wegen der Beliebigkeit des gewählten Winkelbereichs und den nach einiger Zeit sehr klein werdenden Photonenanzahlen, nur eine recht ungenaue Überprüfung von (3.24) darstellt.

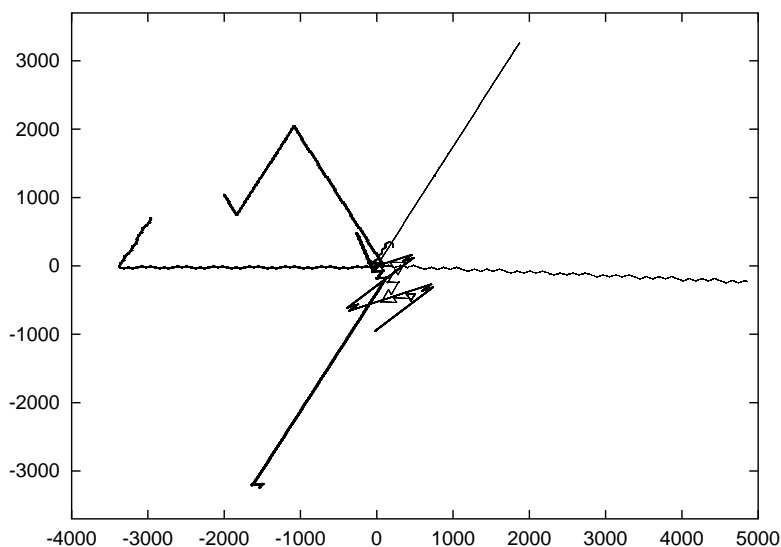


Abbildung 3.17: Rein zufällig ausgewählte Photonenbahnen im exakten Sechseckgitter mit  $d/l_0 = 0,1$ . Deutlich zu erkennen ist, dass einige Photonen sehr lange auf geraden Bahnen in Richtungen der Gitterlinien laufen. Die Photonenbahnen wurden bis zur Zeit  $t = 10000 l_0/c$  simuliert; die Längen sind in Einheiten von  $l_0$  dargestellt.

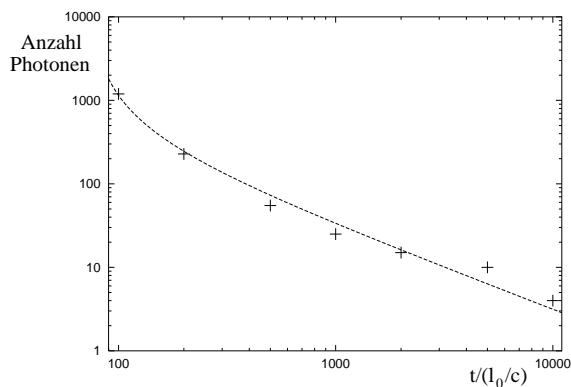


Abbildung 3.18: Anzahl der Photonen, die bei der Zeit  $t = 100 l_0/c$  vom Startpunkt aus gesehen nicht mehr als  $0,3^\circ$  von einer der sechs Hauptgitterrichtungen abgewichen sind, und die bei der Zeit  $t$  immer noch in diesem Bereich liegen. Dies lässt die Interpretation zu, dass diese Photonen zur Zeit  $t = 100 l_0/c$  auf einer geraden Bahn unterwegs gewesen sind und zur hier dargestellten Zeit  $t$  immer noch auf dieser geraden Bahn sind. Den Daten wurde die Funktion  $a \cdot \operatorname{arccot}(t - b)$  mit den Fitkonstanten  $a$  und  $b$  angefitet. Diese Funktion entspricht dem Ergebnis aus (3.24). Bemerkenswert ist auch, dass bei  $t = 100 l_0/c$  in einem Winkelbereich von insgesamt  $6 \cdot 0,6^\circ = 3,6^\circ$ , der also nur 1% aller möglichen Winkel abdeckt, fast 12% der Photonen unterwegs sind. Die Anzahlen stammen aus einer Simulation mit 10000 Photonen in einem exakten Gitter mit  $d/l_0 = 0,1$  (weitere Hinweise zu Simulationen: siehe Abschnitt 3.6).

### 3.4.3 Ausbreitung im exakten Gitter als Lévy-Walk

Wie in den Auswertungen der Simulationen zu sehen sein wird (siehe Abschnitt 3.7), ist die Photonenausbreitung im exakten Gitter weder ballistisch noch diffusiv, sondern superdiffusiv, d.h. es ist  $\sigma^2 \propto t^\nu$  mit einem Exponenten  $\nu$  zwischen 1 und 2. Der Ursprung dieses superdiffusiven Verhaltens soll in diesem Abschnitt mit Hilfe der Theorie der Lévy-Walks erklärt werden.

Dazu wird zuerst ein neues Random-Walk-Modell eingeführt, welches nur noch aus langen Schritten entlang der Gitterlinien und Wartezeiten besteht. Danach wird der Continuous-Time-Random-Walk-Formalismus vorgestellt, mit dem das mittlere Abstandsquadrat für die Lichtausbreitung in exakten Gittern berechnet werden kann. Anschließend wird gezeigt, dass aus diesem Modell die sternförmige Form der Photonerverteilung folgt. Schließlich wird noch gezeigt, dass sich das hier verwendete Modell so modifizieren lässt, dass es auch die Ausbreitung in schwach unregelmäßigen Gittern korrekt beschreibt. Insbesondere läßt sich der Übergang von der Superdiffusiven zur Diffusiven Ausbreitung beobachten.

#### Ein neues Random-Walk-Modell mit effektiven Schrittlängen:

Die Beziehung (3.24) legt nahe, die Ausbreitung in einem exakten Gitter als Random-Walk anzusehen, wobei drei verschiedene Typen für einen Schritt vorkommen:

- Ein Schritt besteht mit der Wahrscheinlichkeit von  $\frac{1}{8}$  (ballistischer Anteil in Abschnitt 3.4.1) aus einem Schritt auf einer geraden Bahn entlang einer der sechs möglichen Kanalrichtungen. Für den Anteil der Photonen, die nach der Zeit  $t$  immer noch einen solchen Schritt ausführen, gilt (3.24).
- Mit der gleichen Wahrscheinlichkeit von  $\frac{1}{8}$  läuft das Photon lange Zeit auf einer geschlossenen periodischen Kreisbahn. Näherungsweise kann man dies als für lange Zeit ruhende Photonen annehmen. Die Wahrscheinlichkeit  $\frac{1}{8}$  berechnet sich wie im ballistischen Fall, auch die Beziehung (3.24) gilt entsprechend.
- In den übrigen Fällen macht das Photon einen Schritt kurzer Zeitdauer, dessen Richtung als rein zufällig angenommen wird. Die Länge des Schrittes sei von der Größenordnung einer Kanallänge, die Dauer von der Größenordnung  $l_0/c$ . Diese Schritte liefern nur einen diffusiven Beitrag, spielen somit verglichen mit den Schritten, die zur Superdiffusion führen, für große Zeiten keine Rolle.

Die ersten beiden Schritttypen können sehr lange Zeit in Anspruch nehmen: Ein Schritt der Dauer  $t$  (genaugenommen ist damit wie im Folgenden häufiger eine Zeit aus dem Intervall  $[t, t + \delta t]$  gemeint) kommt wegen (3.24) mit einer Wahrscheinlichkeit proportional zu  $(-\text{arccot}(t/t_1))' = t_1^{-1}/(1 + t^2/t_1^2)$  vor. Verglichen damit ist der letzte Schritttyp von kurzer Dauer; da er außerdem keinen großen Beitrag zur Superdiffusion liefert, wird er im Folgenden nicht mehr berücksichtigt. Für die Wahrscheinlichkeit, dass ein effektiver Schritt der Länge  $l$  und Dauer  $t$  vorkommt gilt also:

$$P(l, t) \propto \frac{1}{1 + \left(\frac{t}{t_1}\right)^2} \left( \frac{1}{8} \delta(l - c_{eff}t) + \frac{1}{8} \delta(l) \right) \quad (3.25)$$

Dabei ist  $c_{eff}$  die effektive Geschwindigkeit auf einer geraden Bahn. Da das Photon auf einer geraden Bahn im Mittel pro Schritt die Strecke  $\frac{3}{4}l_0$  zurücklegt, ergibt sich zusammen mit (3.8):

$$c_{eff} = \frac{3c \cos(\alpha_1)}{6 - \sqrt{3}d/l_0}. \quad (3.26)$$

Das Besondere an (3.25) ist, dass der Mittelwert für die Schrittdauer und -länge nicht berechnet werden kann, da das Integral  $\int_0^\infty l/(1+l^2)dl \propto \langle l \rangle$  divergiert. Würde dieses Integral und das Integral  $\int_0^\infty l^2/(1+l^2)dl \propto \langle l^2 \rangle$  konvergieren, würde man eine diffusive Ausbreitung erhalten und könnte die Diffusionskonstante mit Hilfe von (3.14) bestimmen. Das superdiffusive Verhalten hat seinen Ursprung also in der Divergenz der Integrale  $\int_0^\infty l/(1+l^2)dl$  bzw.  $\int_0^\infty l^2/(1+l^2)dl$ . Dies liefert auch nochmals eine Rechtfertigung dafür, die Schritte des letzten Schritttyps zu vernachlässigen, deren mittlere Schrittlänge nämlich endlich ist. Die in Abbildung 3.17 zufällig ausgewählten Photonenbahnen bestätigen dieses Bild: Es gibt viele Photonen, die für lange Zeiten auf geraden Bahnen laufen. An den Endpunkten dieser Schritte kommt es manchmal zu sehr kurzen Zwischenschritten (die an einen zufälligen Random-Walk, also einen Diffusionsprozess erinnern), die jedoch für den Gesamteindruck kaum eine Rolle spielen.

In dem hier betrachteten Random-Walk-Modell kommen also mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit Schritte mit divergierender mittlerer Schrittlänge und -dauer, mit der gleichen Wahrscheinlichkeit Wartezeiten mit divergierender mittlerer Dauer vor. Diese beiden Schritttypen sind verantwortlich für die Superdiffusion. Die genaue Wahrscheinlichkeit spielt übrigens strenggenommen für dieses Modell keine Rolle. Statt der Wahrscheinlichkeit von jeweils  $\frac{1}{8}$  könnte man auch eine beliebige andere Wahrscheinlichkeiten annehmen, es muss nur die Wahrscheinlichkeit für die langen geraden Schritte gleich der Wahrscheinlichkeit für die Wartezeiten sein. Alle anderen Schritte werden hier nicht mehr berücksichtigt.



Das hier eingeführte neue Random-Walk-Modell eignet sich zur Beschreibung der Photonenausbreitung im exakten Gitter, wie bereits in Abschnitt 3.4.2 motiviert wurde und wie man an den Ergebnissen, die im Folgenden berechnet werden, erkennen kann (siehe auch die Vergleiche mit den Simulationen in Abschnitt 3.7).

### Die Theorie der Lévy Walks und der Continuous-Time-Random-Walk-Formalismus:

Bei einem Lévy-Flight springt man in jedem Schritt auf einen neuen zufälligen Punkt, wobei für die Schrittlänge und die Richtung, in der der neue Punkt in Bezug auf den zuletzt besuchten liegt, bestimmte Wahrscheinlichkeitsverteilungen vorgegeben sind. Die Momente der Schrittlängenverteilung dürfen dabei auch divergieren. Bei einem Lévy Walk benötigt man für die Strecke von einem Punkt eines Lévy Flights zum nächsten eine bestimmte Zeit. Üblicherweise ergibt sich diese Zeit, aus einer vorgegebenen Geschwindigkeit und der Schrittlänge (oder gemäß einer allgemeineren Weg-Zeit-Beziehung). Zur Beschreibung eines solchen Lévy Walks eignet sich der Continuous-Time-Random-Walk-Formalismus (CTRW) ([16] bis [25]). Bei einem sehr verbreiteten Modell des CTRW [16, 17, 19, 20, 21, 22, 25] wird jeweils am Anfangspunkt des Schrittes für die Dauer des Schrittes gewartet und dann an den Endpunkt gesprungen. Für kontinuierlich fliegende Photonen ist das Modell, bei dem die Schritte kontinuierlich mit einer bestimmten Geschwindigkeit abgelaufen werden, offensichtlich zutreffender. Die folgende Kurzzusammenstellung der für diese Arbeit wichtigsten Grundlagen und Ergebnisse des CTRW-Formalismus in der Variante der kontinuierlich abgelaufenen Schritte orientiert sich an Arbeiten von Klafter, Zumhofen, Shlesinger und deren Mitautoren [18, 22, 23, 24]:

Gegeben sei die Verteilung  $\psi(\vec{r}, t)$ , die die Wahrscheinlichkeit dafür angibt, dass ein Schritt entlang des Vektors  $\vec{r}$  mit der Dauer  $t$  stattfindet. Diese Wahrscheinlichkeitsverteilung sei das Produkt aus einer Schrittlängen- (oder Schrittdauer-) Verteilung  $\lambda(t)$  und einem Weg-Zeit-Gesetz  $p(\vec{r}|t)$ , welches die bedingte Wahrscheinlichkeit dafür ist, bei einem Schritt der Dauer  $t$  den Weg  $\vec{r}$  zurückzulegen. Es sei also:

$$\psi(\vec{r}, t) = p(\vec{r}|t)\lambda(t) \quad (3.27)$$

Im Folgenden wird eine Integralgleichung für die Photonenauftretenswahrscheinlichkeit  $P(\vec{r}, t)$  hergeleitet. Zunächst betrachtet man dazu die Wahrscheinlichkeit  $Q(\vec{r}, t)$  dafür, dass man zur Zeit  $t$  im Punkt  $\vec{r}$  ankommt (d.h. dort einen Schritt beendet). Diese ergibt sich durch Integration über alle möglichen Schrittrichtungen  $\vec{r}'$  und Schrittdauern  $t'$  gewichtet mit der

Wahrscheinlichkeit für einen solchen Schritt  $\psi(\vec{r}', t')$  und der Wahrscheinlichkeit, zur richtigen Zeit am Startpunkt gewesen zu sein  $Q(\vec{r} - \vec{r}', t - t')$ :

$$Q(\vec{r}, t) = \int d\vec{r}' \int_0^t dt' Q(\vec{r} - \vec{r}', t - t') \psi(\vec{r}', t') + \delta(\vec{r})\delta(t) \quad (3.28)$$

Die  $\delta$ -Funktionen geben dabei die Anfangsbedingung wieder: Der Random-Walk wird zum Zeitpunkt  $t = 0$  bei  $\vec{r} = \vec{0}$  gestartet.

Da hier die Variante des Random-Walks, bei dem die Schritte kontinuierlich abgelaufen werden, betrachtet werden soll, benötigt man noch die Wahrscheinlichkeit  $R(\vec{r}, t)$  dafür, bei einem bei  $t = 0$  und  $\vec{r} = \vec{0}$  gestarteten Schritt zur Zeit  $t$  im Punkt  $\vec{r}$  vorbeizukommen. Diese Wahrscheinlichkeit ergibt sich als Produkt der Wahrscheinlichkeit dafür, dass der Schritt länger als  $t$  dauert, und der Wahrscheinlichkeit  $p(\vec{r}|t)$ , dass der Punkt  $\vec{r}$  zur Zeit  $t$  erreicht wird. Somit gilt:

$$R(\vec{r}, t) = p(\vec{r}|t) \int_t^\infty dt' \lambda(t') \quad (3.29)$$

Somit kann man nun die Wahrscheinlichkeit  $P(\vec{r}, t)$  dafür, dass man zum Zeitpunkt  $t$  im Punkt  $\vec{r}$  ist, angeben. Diese Wahrscheinlichkeit unterscheidet sich von  $Q(\vec{r}, t)$  dadurch, dass nun nicht nur Schritte, die gerade enden, betrachtet werden, sondern auch Schritte, die durch den Punkt  $\vec{r}$  hindurchgehen.  $P(\vec{r}, t)$  ergibt sich also durch Integration (über alle möglichen Vektoren  $\vec{r}'$  und Zeiten  $t'$ ) der Wahrscheinlichkeit  $R(\vec{r}', t')$ , die angibt, dass bei einem im Punkt  $\vec{r} - \vec{r}'$  zur Zeit  $t - t'$  gestarteten Schritt, der Punkt  $\vec{r}$  gerade zur Zeit  $t$  erreicht wird (wobei der Schritt dort nicht enden muss), gewichtet mit der Wahrscheinlichkeit  $Q(\vec{r} - \vec{r}', t - t')$  dafür, dass ein solcher Schritt starten kann:

$$P(\vec{r}, t) = \int d\vec{r}' \int_0^t dt' Q(\vec{r} - \vec{r}', t - t') R(\vec{r}', t') \quad (3.30)$$

Um diese Integralgleichungen zu lösen, wird in den Fourier-Laplace-Raum gewechselt, wobei die transformierten Größen die Name beibehalten und nur die Argumente anders benannt werden. Die transformierten Größen haben also die Form:

$$f(\vec{k}, u) = \mathcal{F}(\mathcal{L}(f))(\vec{k}, u) = \int d\vec{r} \int_0^\infty dt e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{-ut} f(\vec{r}, t)$$

Dabei steht  $\mathcal{F}(f)$  für die Fourier-Transformierte und  $\mathcal{L}(f)$  für die Laplace-Transformierte einer Funktion  $f$ .

Mit dem Faltungssatz (siehe z.B. in [26]) wird aus den Gleichungen (3.28) und (3.30):

$$Q(\vec{k}, u) = Q(\vec{k}, u)\psi(\vec{k}, u) + 1 \quad (3.31)$$

bzw.

$$P(\vec{k}, u) = Q(\vec{k}, u)R(\vec{k}, u) \quad (3.32)$$

Löst man Gleichung (3.31) nach  $Q(\vec{k}, u)$  auf und setzt dies in (3.32) ein, so erhält man

$$P(\vec{k}, u) = \frac{R(\vec{k}, u)}{1 - \psi(\vec{k}, u)}. \quad (3.33)$$

Aus einer gegebenen Schrittlängenverteilung  $\psi(\vec{r}, t)$  der Form (3.27) kann man also durch Berechnung von  $R(\vec{r}, t)$  mit (3.29) und anschließender Fourier-Laplace-Transformation von  $\psi(\vec{r}, t)$  und  $R(\vec{r}, t)$  mit Gleichung (3.33) die Fourier-Laplace-Transformierte der gesuchten Wahrscheinlichkeitsverteilung  $P(\vec{r}, t)$  berechnen.

Das mittlere Abstandsquadrat  $\sigma^2(t) = \langle |\vec{r}(t)|^2 \rangle$  kann bereits direkt aus  $P(\vec{k}, u)$  berechnet werden:

$$\sigma^2(t) = \int d\vec{r} \vec{r}^2 P(\vec{r}, t) = \mathcal{L}^{-1} \left( -\Delta_{\vec{k}} P(\vec{k}, u) \Big|_{\vec{k}=\vec{0}} \right) \quad (3.34)$$

Dabei ist  $\Delta_{\vec{k}} = \partial_{k_x}^2 + \partial_{k_y}^2$ .

### Photon-Channelling in Schäumen als Lévy-Walk:

Der oben eingeführte CTRW-Formalismus soll nun auf das Problem der Photonen ausbreitung im exakten Sechseckgitter angewendet werden. Dazu wird die Schrittlängenverteilung aus (3.25) angenommen, wobei einfachheitshalber nun alle Zeiten auf  $t_1$  bezogen werden (welches größenordnungsmäßig  $l_0/c$  war). Die (normierte) Schrittdauerverteilung ist somit:

$$\lambda(t) = \frac{2}{\pi} \frac{1}{t^2 + 1} \quad (3.35)$$

Der Weg-Zeit-Zusammenhang  $p(\vec{r}|t)$  ergibt sich aus der Tatsache, dass ein Teil der Photonen mit konstanter Geschwindigkeit  $c_{eff}$  entlang der sechs möglichen Gitterrichtungen laufen (im Gegensatz zu (3.25) wird nun also noch die Richtung mitberücksichtigt) und ebenso viele Photonen auf der Stelle stehen bleiben. Die diffusiven Photonen werden vernachlässigt. Somit

ergibt sich (nach Normierung):

$$\begin{aligned}
p(\vec{r}|t) = & \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{6} \left[ \delta(x - c_{eff}t)\delta(y)\theta(x) \right. \\
& + \delta(x + c_{eff}t)\delta(y)\theta(-x) \\
& + \delta(x + \frac{c_{eff}t}{2})\delta(y + \frac{\sqrt{3}c_{eff}t}{2})\theta(-x)\theta(-y) \\
& + \delta(x - \frac{c_{eff}t}{2})\delta(y + \frac{\sqrt{3}c_{eff}t}{2})\theta(x)\theta(-y) \\
& + \delta(x + \frac{c_{eff}t}{2})\delta(y - \frac{\sqrt{3}c_{eff}t}{2})\theta(-x)\theta(y) \\
& \left. + \delta(x - \frac{c_{eff}t}{2})\delta(y - \frac{\sqrt{3}c_{eff}t}{2})\theta(x)\theta(y) \right] \\
& + \frac{1}{2} \delta(x)\delta(y)
\end{aligned}$$

Dabei ist  $\theta(x)$  die Heavyside-Funktion (1 für positive  $x$ , 0 für negative). Sie definiert zusammen mit den  $\delta$ -Funktionen die jeweiligen Gitterhauptlinien als Halbgeraden.

Die Fouriertransformation von  $p(\vec{r}|t)$  läßt sich nun folgendermaßen durchführen: Wegen

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}(\delta(x + ac_{eff}t)\delta(y + bc_{eff}t)\theta(-\text{sgn}(a)x)\theta(-\text{sgn}(b)y)) \\
= \exp(-i(ak_x + bk_y)c_{eff}t)
\end{aligned}$$

(wobei  $\text{sgn}$  die Signumsfunktion ist) erhält man:

$$p(\vec{k}|t) = \mathcal{F}(p(\vec{r}|t)) = \frac{1}{2} + \frac{1}{12} \sum_{j=0}^6 \exp[-i(a_j k_x + b_j k_y)c_{eff}t].$$

Die Koeffizienten sind dabei:

$$\begin{aligned}
a_1 = -1 \quad a_2 = 1 \quad a_3 = \frac{1}{2} \quad a_4 = -\frac{1}{2} \quad a_5 = \frac{1}{2} \quad a_6 = -\frac{1}{2} \\
b_1 = 0 \quad b_2 = 0 \quad b_3 = \frac{\sqrt{3}}{2} \quad b_4 = \frac{\sqrt{3}}{2} \quad b_5 = -\frac{\sqrt{3}}{2} \quad b_6 = -\frac{\sqrt{3}}{2}
\end{aligned}$$

Gemäß dem Dämpfungssatz gilt bei der Laplace-Transformation [26]:

$$\mathcal{L}(\exp(-at)f(t)) = \mathcal{L}(f)(u + a).$$

Die Fourier-Laplace-Transformierte von  $\psi(\vec{r}, t) = p(\vec{r}|t)\lambda(t)$  lautet also:

$$\psi(\vec{k}, u) = \frac{1}{2}\mathcal{L}(\lambda(t))(u) + \frac{1}{12} \sum_{j=0}^6 \mathcal{L}(\lambda(t))(u + i(a_j k_x + b_j k_y)c_{eff}). \quad (3.36)$$

Für  $R(\vec{r}, t) = p(\vec{r}|t) \int_t^\infty dt' \lambda(t')$  ergibt sich als Transformierte:

$$\begin{aligned} R(\vec{k}, u) &= \frac{1}{2} \mathcal{L} \left( \int_t^\infty dt' \lambda(t') \right) (u) \\ &\quad + \frac{1}{12} \sum_{j=0}^6 \mathcal{L} \left( \int_t^\infty dt' \lambda(t') \right) (u + i(a_j k_x + b_j k_y) c_{eff}) \end{aligned}$$

Mit der Transformationsregel für Integrale aus [27] erhält man:

$$\mathcal{L} \left( \int_t^\infty dt' \lambda(t') \right) (u) = -\frac{\mathcal{L}(\lambda(t))(u)}{u} + \frac{\int_0^\infty dt' \lambda(t')}{u} = \frac{1 - \mathcal{L}(\lambda(t))(u)}{u}$$

Dabei folgte  $\int_0^\infty dt' \lambda(t') = 1$  aus der Normierung. Somit ist:

$$R(\vec{k}, u) = \frac{1}{2} \frac{1 - \mathcal{L}(\lambda(t))(u)}{u} + \frac{1}{12} \sum_{j=0}^6 \frac{1 - \mathcal{L}(\lambda(t))(u + i(a_j k_x + b_j k_y) c_{eff})}{u + i(a_j k_x + b_j k_y) c_{eff}} \quad (3.37)$$

Aus den Tabellen von [27] kann man außerdem folgende Formel entnehmen:

$$\mathcal{L}(\lambda(t))(u) = \mathcal{L} \left( \frac{2}{\pi} \frac{1}{t^2 + 1} \right) (u) = \cos u + \frac{2}{\pi} \sin u \operatorname{Ci} u - \frac{2}{\pi} \cos u \operatorname{Si} u. \quad (3.38)$$

Dabei ist

$$\begin{aligned} \operatorname{Ci} u &= - \int_u^\infty \frac{\cos \xi}{\xi} d\xi && \text{der Integralcosinus} \\ \text{und } \operatorname{Si} u &= \int_0^u \frac{\sin \xi}{\xi} d\xi && \text{der Integralsinus.} \end{aligned}$$

Die Fourier-Laplace-Transformierte der gesuchten Wahrscheinlichkeitsverteilung  $P(\vec{r}, t)$  erhält man also, wenn man (3.38) in die Formeln (3.36) und (3.37) einsetzt und damit nach (3.33)  $P(\vec{k}, u) = R(\vec{k}, u)/(1 - \lambda(\vec{k}, u))$  berechnet.

**Bestimmung des mittleren Abstandsquadrates  $\sigma^2(t) = \langle |\vec{r}(t)|^2 \rangle$ :**

Bevor nun allerdings  $P(\vec{k}, u)$  genauer betrachtet wird, soll hier zunächst das mittlere Abstandsquadrat  $\sigma^2(t)$  gemäß (3.34) berechnet werden:

Zunächst werden dazu die ersten und zweiten Ableitungen nach  $k_x$  bzw.  $k_y$  bestimmt (im Folgenden ist  $p_j = u + i(a_j k_x + b_j k_y) c_{eff}$  und mit  $\mathcal{L}\lambda$  ist  $\mathcal{L}(\lambda(t))$  aus (3.38) und mit  $(\mathcal{L}\lambda)'$  die Ableitung dieser Funktion nach dem

Argument gemeint):

$$\begin{aligned}\partial_{k_x} R(\vec{k}, u) &= \frac{1}{12} \sum_{j=0}^6 \frac{-ia_j c_{eff}}{p_j} \left( \frac{1 - \mathcal{L}\lambda(p_j)}{p_j} + (\mathcal{L}\lambda)'(p_j) \right) \\ \partial_{k_x} \psi(\vec{k}, u) &= \frac{1}{12} \sum_{j=0}^6 ia_j c_{eff} (\mathcal{L}\lambda)'(p_j) \\ \partial_{k_x}^2 R(\vec{k}, u) &= \frac{1}{12} \sum_{j=0}^6 \frac{-a_j^2 c_{eff}^2}{p_j} \left( 2 \frac{1 - \mathcal{L}\lambda(p_j)}{p_j^2} + 2 \frac{(\mathcal{L}\lambda)'(p_j)}{p_j} - (\mathcal{L}\lambda)''(p_j) \right) \\ \partial_{k_x}^2 \psi(\vec{k}, u) &= \frac{1}{12} \sum_{j=0}^6 -a_j^2 c_{eff}^2 (\mathcal{L}\lambda)''(p_j)\end{aligned}$$

Die Ableitungen nach  $k_y$  ergeben sich entsprechend, es muss nur  $a_j$  durch  $b_j$  ersetzt werden. Es werden nur die Ableitungen an der Stelle  $\vec{k} = \vec{0}$  benötigt. Dadurch wird  $p_j$  zu  $u$ . Da außerdem  $\sum_{j=0}^6 6a_j = \sum_{j=0}^6 6b_j = 0$  und  $\sum_{j=0}^6 6a_j^2 = \sum_{j=0}^6 6b_j^2 = 3$  ist, erhält man:

$$\begin{aligned}\partial_{k_x} R(\vec{k}, u)|_{\vec{k}=\vec{0}} &= \partial_{k_y} R(\vec{k}, u)|_{\vec{k}=\vec{0}} = 0 \\ \partial_{k_x} \psi(\vec{k}, u)|_{\vec{k}=\vec{0}} &= \partial_{k_y} \psi(\vec{k}, u)|_{\vec{k}=\vec{0}} = 0 \\ \partial_{k_x}^2 R(\vec{k}, u)|_{\vec{k}=\vec{0}} &= \partial_{k_y}^2 R(\vec{k}, u)|_{\vec{k}=\vec{0}} \\ &= -\frac{1}{4} \frac{c_{eff}^2}{u} \left( 2 \frac{1 - \mathcal{L}\lambda(u)}{u^2} + 2 \frac{(\mathcal{L}\lambda)'(u)}{u} - (\mathcal{L}\lambda)''(u) \right) \\ \partial_{k_x}^2 \psi(\vec{k}, u)|_{\vec{k}=\vec{0}} &= \partial_{k_y}^2 \psi(\vec{k}, u)|_{\vec{k}=\vec{0}} = -\frac{1}{4} c_{eff}^2 (\mathcal{L}\lambda)''(u)\end{aligned}$$

Mit diesen Ableitungen läßt sich nun die Laplace-Transformierte von  $\sigma^2(t)$  gemäß (3.34) berechnen:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(\sigma^2(t))(u) &= -\Delta_{\vec{k}} P(\vec{k}, u)|_{\vec{k}=\vec{0}} = -2\partial_{k_x}^2 \frac{R(\vec{k}, u)}{1 - \psi(\vec{k}, u)} \Big|_{\vec{k}=\vec{0}} \\ &= 2 \frac{R(\vec{k}, u) \partial_{k_x}^2 \psi(\vec{k}, u) - (1 - \psi(\vec{k}, u)) \partial_{k_x}^2 R(\vec{k}, u)}{(1 - \psi(\vec{k}, u))^2} \Big|_{\vec{k}=\vec{0}} \\ &= \frac{c_{eff}^3}{u^3} + \frac{c_{eff}^2}{u^2} \frac{(\mathcal{L}\lambda)'(u)}{1 - \mathcal{L}\lambda(u)}\end{aligned}$$

Mit  $\mathcal{L}\lambda(u)$  aus (3.38) und

$$(\mathcal{L}\lambda)'(u) = -\sin u + \frac{2}{\pi} \cos u \operatorname{Ci} u + \frac{2}{\pi} \sin u \operatorname{Si} u$$

ergibt sich schließlich

$$\mathcal{L}(\sigma^2(t))(u) = \frac{c_{eff}}{u^3} \cdot \frac{\frac{\pi}{2}(\cos u + u \sin u - 1) + \text{Ci } u(\sin u - u \cos u) - \text{Si } u(\cos u + u \sin u)}{\frac{\pi}{2}(\cos u - 1) + \text{Ci } u \sin u - \text{Si } u \cos u} \quad (3.39)$$

Für eine näherungsweise Laplace-Rücktransformation wird der folgende Tauber'sche Satz verwendet [17]: Es sei  $0 < \nu < \infty$  und  $L(t)$  eine bei unendlich schwach variierende Funktion, d.h. für alle  $\mu > 0$  gelte  $L(\mu t)/L(t) \rightarrow 1$  für  $t \rightarrow \infty$ . Bei einer nicht negative Funktion  $f(t)$ , die für  $t \rightarrow \infty$  monoton ist, gilt dann für die Laplace-Transformierte

$$\mathcal{L}(f)(u) \simeq \frac{L\left(t = \frac{1}{u}\right)}{u^\nu} \quad \text{für } u \rightarrow 0$$

genau dann, wenn

$$f(t) \simeq \frac{t^{\nu-1}L(t)}{\Gamma(\nu)} \quad \text{für } t \rightarrow \infty.$$

$\sigma^2(t)$  ist nicht negativ und monoton und (3.39) läßt sich in der Form

$$\mathcal{L}(\sigma^2(t))(u) = \frac{L\left(\frac{1}{u}\right)}{u^3}$$

schreiben. Die Funktion  $L\left(\frac{1}{u}\right)$  ergibt sich direkt aus (3.39). Da für den Taubersch'schen Satz nur das Verhalten von  $L\left(\frac{1}{u}\right)$  bei  $u \rightarrow 0$  benötigt wird, reicht es für  $L\left(\frac{1}{u}\right)$  den ersten Term in einer Potenzreihenentwicklung um  $u = 0$  zu verwenden. Das Programm Mathematica liefert dafür:

$$L\left(\frac{1}{u}\right) = \frac{c_{eff}^2}{1 - \gamma - \ln(u)} + O(u).$$

Hier ist  $\gamma$  die Euler-Konstante  $\gamma = -\Gamma'(1) \approx 0,577$ . Für diese Funktion  $L(t)$  gilt wie notwendig für alle  $\mu > 0$ :

$$\frac{L(\mu t)}{L(t)} = \frac{1 - \gamma + \ln(t)}{1 - \gamma + \ln(\mu t)} = \frac{1 - \gamma + \ln(t)}{1 - \gamma + \ln(\mu) + \ln(t)} \rightarrow 1 \quad \text{für } t \rightarrow \infty.$$

Somit ergibt sich als mittleres Abstandquadrat für große Zeiten  $t$ :

$$\sigma^2(t) = \frac{t^2 L(t)}{\Gamma(3)} = \frac{c_{eff}^2 t^2}{2 - 2\gamma + 2 \ln(t)} \quad (3.40)$$

Wie in Abbildung 3.19 zu erkennen ist, entspricht das mittlere Abstandskquadrat, welches man aus den Simulationen erhält, eher einem Potenzgesetz als (3.40). Trotzdem ist (3.40) eine sehr gute Näherung und erklärt deutlich das superdiffusive Ausbreitungsverhalten.

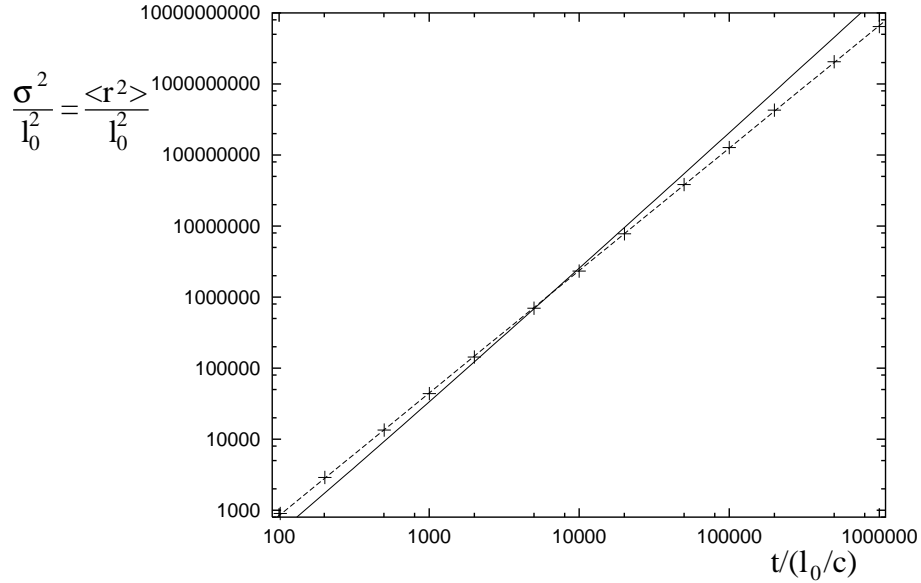


Abbildung 3.19: Der mittlere quadratische Abstand  $\sigma^2$  in Abhängigkeit von der Zeit in einem exakten Gitter mit  $d/l_0 = 0,1$ . Die Kreuze sind die Ergebnisse einer Simulation (siehe dazu Abschnitt 3.6). Die durchgezogene Linie ist das Ergebnis aus (3.40) ohne Fit-Parameter. Die gestrichelte Linie ist ein angefitztes Potenzgesetz (hier ergibt sich der Exponent 1,72).

Aus einer Schrittlängenverteilung proportional zu  $t^{-2}$  (für  $t \rightarrow \infty$ ) folgt in diesem Modell  $\sigma^2 \propto t^2/\ln(t)$ . Dies entspricht dem in [22] für eindimensionale Lévy-Walk-Modelle dieser Art hergeleitetem Ergebnis. Das eindimensionale Verhalten folgt wahrscheinlich aus der Beschränkung auf die Ausbreitung entlang der sechs Gitterhauptrichtungen. Um das Potenzgesetz  $\sigma^2 \propto t^\nu$  mit  $1 < \nu < 2$  (in Abbildung 3.19 ist z.B.  $\nu = 1,72$ ) zu erhalten, benötigt man nach [22] eine Schrittlängenverteilung, die proportional zu  $t^{\nu-4}$  ist (für  $t \rightarrow \infty$ ). Wie man auf eine solche Schrittlängenverteilung mit nicht ganzzahligem Exponenten kommen kann, wird in Abschnitt 3.4.4 beschrieben.

#### Folgerungen aus der Form von $P(\vec{k}, t)$ :

In diesem Abschnitt wird aus Eigenschaften der fouriertransformierten Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $P(\vec{k}, t)$  auf Eigenschaften von  $P(\vec{r}, t)$  geschlossen, ohne eine Fourier-Rücktransformation explizit durchzuführen.

Die Laplace-Rücktransformation von  $P(\vec{k}, u)$ , welches man aus (3.33) erhält, kann man wie bei der Rücktransformation des mittleren Abstandsquadrates mit dem oben genannten Tauber'schen Satz durchführen. Die da-



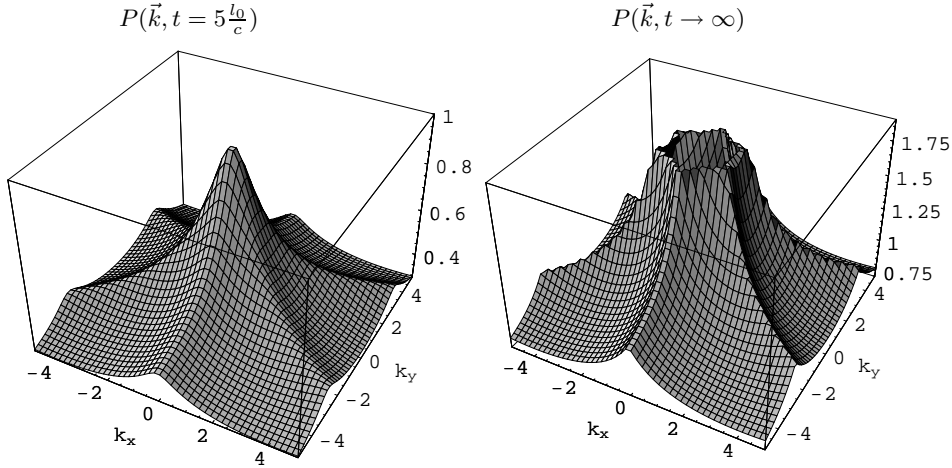


Abbildung 3.20: Die Fouriertransformierten  $P(\vec{k}, t)$  der Photonverteilung (mit  $c_{eff} = 0,49c$ , dies ergibt sich für  $\frac{d}{l_0} = 0.1$  aus (3.26) nach Mittelung über  $\alpha_1$ ), links für  $t = 5\frac{l_0}{c}$ , rechts der Grenzfall  $t \rightarrow \infty$  (letzterer divergiert für  $k_x \rightarrow 0$  und  $k_y \rightarrow 0$ ). Die sechsfache Rotationsymmetrie ist deutlich zu erkennen. Bei der Fourierrücktransformation erhält sich diese Symmetrie, allerdings ist die Verteilung  $P(\vec{r}, t)$  um  $\frac{\pi}{2}$  gegenüber den hier gezeigten gedreht, d.h. die höchste Photonendichten befinden sich entlang der Gitterachsen, also entlang der  $x$ -Achse und den dazu um  $\frac{\pi}{3}$  bzw.  $-\frac{\pi}{3}$  gedrehten Achsen.

durch resultierende Verteilung  $P(\vec{k}, t)$  ist in Abbildung 3.20 für  $t = 5\frac{l_0}{c}$  und für den Grenzfall  $t \rightarrow \infty$  dargestellt. In beiden Fällen erkennt man deutlich die Symmetrie um eine sechsfache Drehachse durch den Ursprung. Beim Fall  $t \rightarrow \infty$  ist der Unterschied zwischen den sechs nach außen verlaufenden Graden und den Senken dazwischen auch für kleinere  $\vec{k}$ -Vektoren wesentlich ausgeprägter als für  $t = 5\frac{l_0}{c}$ . Dies ist auch zu erwarten, da das Verhalten für große  $\vec{r}$  im Ortsraum vor allem durch diese kleinen  $\vec{k}$  bestimmt wird.

Im Folgenden soll nun untersucht werden, wie sich die Symmetrie von  $P(\vec{k}, t)$  auf die gesuchte Verteilung  $P(\vec{r}, t)$  überträgt. Da vor allem das Muster für große  $\vec{r}$  interessiert, wird einfachheitshalber die Verteilung  $P(\vec{k}, t)$  für  $t \rightarrow \infty$  und  $\vec{k} \rightarrow 0$  untersucht. Dazu wird  $P(\vec{k}, t \rightarrow \infty)$  mit Hilfe von Mathematica berechnet, und in Polarkoordinaten umgewandelt ( $k_x = k \cos \varphi_k$  bzw.  $k_y = k \sin \varphi_k$ ) und anschließend in  $k$  entwickelt. Das Ergebnis hat die Form:

$$P(k, \varphi_k, t \rightarrow \infty) \approx \frac{\Phi(\varphi_k)}{k} + O(k^0)$$

Dabei ist  $\Phi(\varphi_k)$  eine von  $k$  unabhängige Funktion, die die sechsfache Symmetrie der Drehachse widerspiegelt: Es ist  $\Phi(\varphi_k) = \Phi(\varphi_k + \frac{\pi}{3})$ ; die Maxima liegen bei  $\pm\frac{\pi}{6}$ ,  $\pm\frac{\pi}{2}$  und  $\pm\frac{5\pi}{6}$  (siehe Abbildung 3.21).

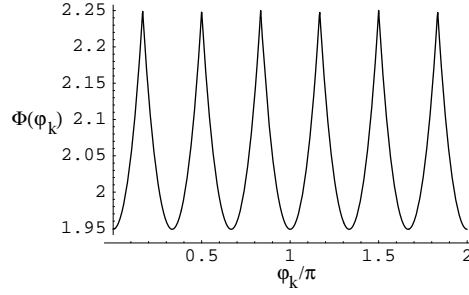


Abbildung 3.21: Die Funktion  $\Phi(\varphi_k)$  ist der winkelabhängige Anteil von  $P(k, \varphi_k, t \rightarrow \infty)$  für kleine  $k$ . Man erkennt an ihr deutlich die sechsfache Symmetrieachse von  $P(k, \varphi_k, t \rightarrow \infty)$ . Für große  $|\vec{r}|$  ist der winkelabhängige Teil der Photonverteilung  $P(\vec{r}, t \rightarrow \infty)$  durch die verschobene Funktion  $\Phi\varphi_k = (\varphi + \frac{\pi}{2})$  gegeben, d.h. die Maxima liegen dann nicht wie hier bei  $\pm\frac{\pi}{6}$ ,  $\pm\frac{\pi}{2}$  und  $\pm\frac{5\pi}{6}$ , sondern bei  $0$ ,  $\pm\frac{\pi}{3}$ ,  $\pm\frac{2\pi}{3}$  und  $\pi$ . Letzteres sind genau die Hauptrichtungen des Sechseckgitters.

Die Fourier-Rücktransformation von  $P(k, \varphi_k, t \rightarrow \infty)$  läuft dann folgendermaßen:

$$\begin{aligned}
P(r, \varphi, t \rightarrow \infty) &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} e^{-ik \cos \varphi_k r \cos \varphi - ik \sin \varphi_k r \sin \varphi} \frac{\Phi(\varphi_k)}{k} k d\varphi_k dk \\
&= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} e^{-ikr \cos(\varphi_k - \varphi)} \Phi(\varphi_k) d\varphi_k dk \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \delta(r \cos(\varphi_k - \varphi)) \Phi(\varphi_k) d\varphi_k \\
&= \frac{1}{2\pi} \frac{\Phi(\varphi + \frac{\pi}{2})}{r}
\end{aligned} \tag{3.41}$$

Für lange Zeiten  $t$  und große  $|\vec{r}|$  besitzt die Photonverteilung also eine sechsfache Symmetrieachse. Die Maxima der Verteilung finden sich unter den Winkeln  $0$ ,  $\pm\frac{\pi}{3}$ ,  $\pm\frac{2\pi}{3}$  und  $\pi$ , dies sind die Richtungen der Gitterlinien des Sechseckgitters. Die bei den Simulationsergebnissen deutlich sichtbare Sternform der Photonverteilung ergibt sich also aus dem hier untersuchten Lévy-Walk-Modell.

### Der Einfluss kleiner Unregelmäßigkeiten im Gitter auf die Superdiffusion:

Besitzt das Gitter kleine Unregelmäßigkeiten, so kann das Photon unter Umständen schon vorzeitig von einer geraden Bahn abkommen. Die Positionen eines Photons in einem Kanal wiederholen sich bei einer exakt ballistischen Bahn. Bei unregelmäßigen Gittern jedoch verändert sich eine Position im Kanal bei jedem Schritt um einen Betrag, der von der Störung des Gitter abhängt. Sie kann also als Random-Walk-Variable aufgefaßt werden, die sich bei jedem Schritt um einen zufälligen Betrag ändert. Einfachheitshalber wird

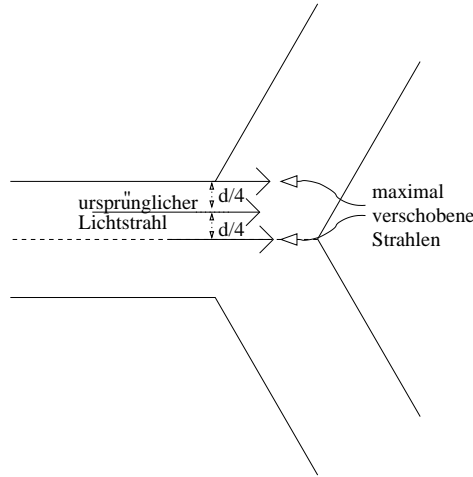


Abbildung 3.22: Ein Strahl der ursprünglich waagrecht in der Mitte einer Kanalhälfte verläuft, darf in  $y$ -Richtung nur um maximal  $d/4$  verschoben werden, um nicht in einen anderen Kanal zu gelangen bzw. gar nicht mehr im Kanal zu laufen. Liegt der ursprüngliche Strahl nicht in der Mitte einer Kanalhälfte, so liegt die maximale Abweichung zwischen 0 und  $d/4$  (im Mittel also bei  $d/8$ ). Für nicht waagrecht verlaufenden Strahlen hat die maximale erlaubte Verschiebung in  $y$ -Richtung eine ähnliche Größenordnung und wird deshalb in dieser groben Abschätzung näherungsweise auch als  $d/8$  angenommen.

hier in grober Näherung nur die Position  $y$  senkrecht zur Kanalmittelparallelen betrachtet. Aus Abbildung 3.22 geht hervor, dass sich diese Position des Photons in  $y$ -Richtung näherungsweise im Mittel nur um maximal  $y_0 = d/8$  ändern darf, ohne dass das Photon in den anderen Kanal gelangt. Die Diffusionskonstante  $D_y$  des Random-Walks der  $y$ -Position ergibt sich nach (3.14) zu  $D_y = \langle \delta y^2 \rangle$ . Dabei bezeichnet  $\delta y$  die Gitterverschiebungen projiziert auf die  $y$ -Richtung. In dieser Arbeit wird als Maß für die Unregelmäßigkeiten zumeist die maximale Verschiebung  $\delta r$  im Dreiecksgitter verwendet, aus dem das unregelmäßige Sechseckgitter mit der Voronoi-Konstruktion erzeugt wird (siehe Abschnitt 3.6.3). Der Zusammenhang zwischen  $\langle \delta y^2 \rangle$  und  $\delta r$  ist wie noch gezeigt werden wird (3.58):  $\langle \delta y^2 \rangle = 2\delta r^2/27$ . Somit ist also:  $D_y = 2\delta r^2/27$ . Die Diffusionsgleichung dieses Prozesses lautet:

$$\partial_j p(j, y) = D_y \partial_y^2 p(j, y).$$

dabei ist  $p(j, y)$  die Wahrscheinlichkeit dafür, dass sich das Photon nach  $j$  Schritten bei der Position  $y$  befindet. Für  $y > y_0 = d/8$  oder  $y < -y_0$  muss  $p(y)$  verschwinden, denn dann befindet sich das Photon nicht mehr auf der gleichen geraden Bahn. Die Lösung der Differentialgleichung unter diesen Randbedingungen lautet:

$$p(j, y) = e^{-\frac{j}{j_{y,0}}} \cos\left(\frac{\pi y}{2y_0}\right) \quad \text{mit} \quad j_{y,0} = \frac{4y_0^2}{\pi^2 D}.$$

Integriert man  $p(j, y)$  über  $y$ , so sieht man, dass nach  $j$  Schritten sich das Photon noch mit der Wahrscheinlichkeit  $\exp(-j/j_{y,0})$  auf der geraden Bahn befindet, falls man nur Abweichungen in  $y$ -Richtung betrachtet. Betrachtet man auch die Abweichungen in  $x$ -Richtung und schreibt diesen Einfachheits halber einen identischen Faktor  $\exp(-j/j_{x,0}) = \exp(-j/j_{y,0})$  zu, so ergibt sich insgesamt als Wahrscheinlichkeit, dass ein Photon nach  $j$  Schritten noch nicht von der idealen geraden Bahn abgewichen ist,  $\exp(-j/j_0)$  mit

$$j_0 = \frac{27}{64\pi^2} \frac{d^2}{\delta r^2}. \quad (3.42)$$

Dieses  $j_0$  ist natürlich nur ein sehr grober Schätzwert, der, wie man im Folgenden sehen wird, auch nicht immer mit den Simulationsergebnissen übereinstimmt.

Der exponentielle Abfall der Photonenzahl kann berücksichtigt werden, indem man die Schrittlängenverteilung (3.35) durch

$$\lambda_{\text{neu}}(t) = \frac{2}{\pi} \frac{1}{t^2 + 1} \exp\left(-\frac{t}{t(n=j_0)}\right) \quad (3.43)$$

ersetzt. Der Übergang von der Schrittzahlabhängigkeit zur Zeitabhängigkeit des Exponentialfaktors ergibt sich dabei mit (3.7), d.h. es ist:

$$t(n=j_0) = \frac{3l_0 - \frac{\sqrt{3}}{2}d}{2c \cos \alpha_1} j_0.$$

Die Fourier-Laplace-Transformierten lassen sich wie zuvor berechnen, wobei aus (3.36) nun

$$\begin{aligned} \psi_{\text{neu}}(\vec{k}, u) &= \frac{1}{2} \mathcal{L}(\lambda(t)) \left( u + \frac{1}{t(n=j_0)} \right) \\ &+ \frac{1}{12} \sum_{j=0}^6 \mathcal{L}(\lambda(t)) \left( u + i(a_j k_x + b_j k_y) c_{\text{eff}} + \frac{1}{t(n=j_0)} \right) \end{aligned}$$

wird; dabei ist  $\mathcal{L}(\lambda(t))$  unverändert durch (3.38) gegeben.

Mit Mathematica läßt sich hieraus durch Ableiten und Anwenden des Tauber'schen Satzes das mittlere Abstandsquadrat  $\sigma^2(t) = \langle r^2(t) \rangle$  berechnen. An den Ergebnissen, die man dabei erhält, fällt vor allem der Knick auf, der ungefähr bei  $t(n=j_0)$  liegt (siehe doppeltlogarithmische Graphen in Abbildung 3.23): Für kleine Zeiten ist die Photonausbreitung superdiffusiv, für Zeiten  $t \gg t(n=j_0)$  jedoch ist die Ausbreitung diffusiv. Die Diffusionskonstante hängt ebenfalls von  $t(n=j_0)$  und damit letztendlich von der Stärke der Unregelmäßigkeiten ab: Je unregelmäßiger ein Gitter, desto

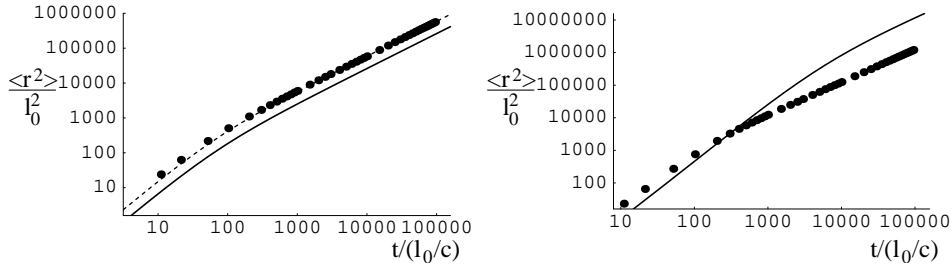


Abbildung 3.23: Mittleres Abstandsquadrat  $\sigma^2$  in Abhängigkeit von der Zeit. Links für ein Gitter der Unregelmäßigkeit  $\delta r = 0,01l_0$ , rechts ein weniger unregelmäßiges Gitter mit  $\delta r = 0,001l_0$  (zum Maß der Unregelmäßigkeit siehe Abschnitt 3.6.3). In beiden Fällen ist  $d/l_0 = 0,1$ . Die Punkte stammen aus Simulationen (siehe dazu Abschnitt 3.6), die durchgezogenen Linien wurden wie im Text beschrieben mit der Schrittlängenverteilung (3.43) bestimmt. Im linken Bild wurde diese Lösung zusätzlich über einen Faktor den Simulationen angepasst (gestrichelte Linie). In beiden Fällen ist zu erkennen, dass es einen Übergang vom superdiffusiven Ausbreitungsverhalten bei kleinen Zeiten zum diffusiven Verhalten bei großen Zeiten gibt. Die Position des Übergangs liegt gemäß den theoretischen Abschätzungen bei  $t(n = j_0)$  mit  $j_0$  aus (3.42). Diese theoretische Position wird im Falle  $\delta r = 0,01l_0$  (und im übrigen auch bei noch unregelmäßigeren Gittern) durch die Simulationsergebnisse bestätigt (links); im Falle  $\delta r = 0,001l_0$  (und bei weniger unregelmäßigen Gittern) liegt der theoretische Übergang bei wesentlich größeren Zeiten als der Übergang, der sich aus den Simulationen ergibt (rechts).

kleiner die Diffusionskonstante. Dies wird auch direkt aus (3.43) ersichtlich: Für stark unregelmäßige Gitter wird  $t(n = j_0)$  beliebig klein und damit auch die Schrittlängen. Hieraus ergibt sich auch, dass dieses Modell nur für schwach unregelmäßige Gitter geeignet ist, für die  $t(j_0) \gg l_0/c$  gilt. Bei starken Unregelmäßigkeiten kann durch den eingeführten Exponentialfaktor die Schrittweite kleiner als eine Kanallänge werden, was der Grundidee der effektiven Schrittlängen widerspricht. In Abschnitt 3.5 wird daher versucht, den Übergang von diesem Modell zum Random-Walk-Modell mit rein zufälligen Kanalwechseln, welches das Photonenausbreitungsverhalten in stark unregelmäßige Gitter korrekt erklärt, zu beschreiben und Näherungswerte für die Diffusionskonstanten im Grenzfall großer Zeiten zu berechnen.

### 3.4.4 Selbstähnlicher Lévy-Walk

Die Zeitabhängigkeit der mittleren quadratischen Abweichung im exakten Sechseckgitter läßt sich am besten durch ein Potenzgesetz der Form  $\sigma^2 \propto t^\nu$  (für  $t \rightarrow \infty$ ) beschreiben. Im Beispiel aus Abbildung 3.19 ist der Exponent  $\nu = 1,72$ . Nach [22] ergibt sich ein solches Potenzgesetz aus einem Lévy-Walk wie er im vorherigen Abschnitt beschrieben wurde mit einer Schrittdauerverteilung proportional zu  $t^{\nu-4}$  (für Abbildung 3.19 also proportional zu  $t^{-2,28}$ ). Solche Verteilung mit nicht ganzzahligen Exponenten ergeben sich z.B. aus einem selbstähnlichen Lévy-Walk-Modell. In Abbildung 3.17

sind einige rein zufällig ausgewählte Photonenbahnen dargestellt, die durch eine selbstähnliche Schrittlängenverteilung gut beschrieben werden können, d.h. Ausschnitte aus dieser Abbildung mit unterschiedlicher Größe sind sich ähnlich.

Für eine selbstähnliche (einfachheitshalber eindimensionale) Schrittlängenverteilung  $p(l)$  gilt:

$$b \cdot p(bl) = p(l)/M$$

$M$  ist der Faktor, um den die Wahrscheinlichkeit bei einer Änderung der Größenskala um den Faktor  $b$  reduziert wird; links taucht der Faktor  $b$  aus Gründen der Normierung auf. Die Gleichung wird für große  $|l|$  durch das Potenzgesetz

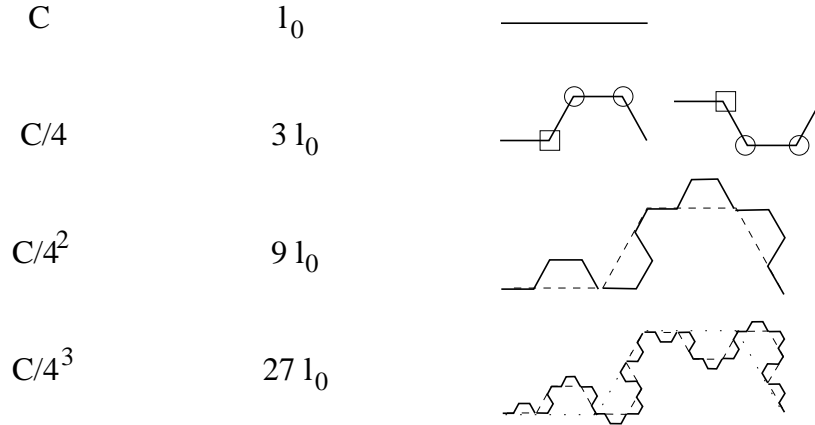
$$p(l) \propto \frac{1}{|l|^{1+\alpha}} \quad \text{mit} \quad \alpha = \frac{\ln b}{\ln M} \quad (3.44)$$

gelöst.

Ein solcher selbstähnlicher Random-Walk ist z.B. der Weierstrass-Random-Walk. Er wird im Folgenden kurz so wie von W. Paul und J. Baschnagel in [25] beschrieben vorgestellt. Beim Weierstrass-Random-Walk kommt ein Schritt einer Länge  $\pm a$  mit der Wahrscheinlichkeit  $C$  vor, ein Schritt der Länge  $\pm ab$  mit der Wahrscheinlichkeit  $C/M$ , ein Schritt der Länge  $\pm ab^2$  mit der Wahrscheinlichkeit  $C/M^2$ ; ein Schritt der Länge  $\pm ab^j$  kommt entsprechend mit der Wahrscheinlichkeit  $C/M^j$  vor. Es kommen also beliebig lange Schritte vor, allerdings wird die Wahrscheinlichkeit für besonders lange Schritte auch immer kleiner. Damit dieses Modell zu einem superdiffusiven Verhalten führt, muss  $b^2 > M$  gelten, dann divergieren nämlich das erste und zweite Moment der Schrittlängenverteilung. Asymptotisch (d.h. für  $|l| \rightarrow \infty$ ) kann diese Schrittlängenverteilung mit dem Potenzgesetz (3.44) beschrieben werden.

Das Weierstrass-Modell läßt sich nicht unmittelbar für die Lichtausbreitung in Schäumen anwenden, da bei der Lichtausbreitung die Schrittlängenverteilung kontinuierlich und nicht diskret ist. Im Folgenden wird trotzdem ein Beispiel für eine mögliche diskrete Schrittlängenverteilung kurz beschrieben: Es werden nur Schritte entlang der Gitterhaupttrichtungen betrachtet. Der kürzest mögliche Schritt, der mit einer Wahrscheinlichkeit  $C$  vorkommt, hat die Länge eines Kanales  $l_0$ . Der nächstgrößere mögliche Schritt entlang einer Gitterhaupttrichtung besteht aus der Durchquerung von vier Kanälen und hat eine Länge entlang der Gitterlinie von  $3l_0$  (siehe Abbildung 3.24). Um einen solchen Schritt zu erhalten, kann das Photon an der ersten Verzweigung (durch ein Quadrat in Abbildung 3.24 markiert) in einen beliebigen Kanal abbiegen, an den darauffolgenden beiden Verzweigungen (mit Kreisen markiert) ist die Kanalwahl nicht beliebig, um weiter entlang der Horizon-

Wahrscheinlichkeit    Schrittlänge



zum Vergleich: Koch-Kurve:



Abbildung 3.24: Beispiel für eine selbstähnliche Schrittlängenverteilung: Ein Schritt der Länge  $l_0$  kommt mit der Wahrscheinlichkeit  $C$  vor, ein Schritt der Länge  $3l_0$  mit der Wahrscheinlichkeit  $C/4$  usw. Die Konstruktion der Schritte gleicht der eines Fraktals. Sie ähnelt insbesondere der Konstruktion der sogenannten Koch-Kurve [14] (siehe unterer Bildteil). Ganz allgemein gilt für die fraktale Dimension übrigens  $d_f = \alpha = \frac{\ln b}{\ln M}$  [25]. Das sich hier ergebene Fraktal hat somit die Dimension  $d_f = \ln 4 / \ln 3 \approx 1,26$  (genau wie die Koch-Kurve).

talen zu laufen. Geht man (stark vereinfacht) von einer Wahrscheinlichkeit von  $\frac{1}{2}$  für einen bestimmten Kanal aus, so beträgt die Wahrscheinlichkeit, dass dieser Schritt der Länge  $3l_0$  eintritt  $C/4$ , weil nur bei den Kreisverzweigungen der horizontale Weg verlassen werden kann. Den nächstgrößeren Schritt erhält man, indem man vier Schritte der Länge  $3l_0$  so verbindet, wie man es zuvor mit vier Schritten der Länge  $l_0$  getan hat, um einen Schritt der Länge  $3l_0$  zu generieren. Dies ist in der dritten Zeile von Abbildung 3.24 durch die gestrichelten Linien angedeutet. Es ergibt sich ein Schritt der Länge  $3 \cdot 3l_0 = 9l_0$ , der mit der Wahrscheinlichkeit  $C/4^2 = C/16$  vorkommt. Dieses Verfahren läßt sich fortsetzen: Der  $j + 1$  kürzeste Schritt ergibt sich aus vier der  $j$  kürzesten Schritte; er hat eine Länge von  $3^j l_0$  und kommt mit der Wahrscheinlichkeit  $C/4^j$  vor. Diese Schrittlängenverteilung läßt sich asymptotisch durch das Potenzgesetz (3.44) beschreiben, wobei  $\alpha = \ln 4 / \ln 3 \approx 1,26$  gilt. Die Schrittlängenverteilung ist also proportional zu  $|l|^{-2,26}$ , was der für das Beispiel in Abbildung 3.19 geforderten Schrittdauerverteilung, die proportional zu  $t^{-2,28}$  sein sollte, erstaunlich ähnelt.

Dieses Modell mit diskreter Schrittlängenverteilung wirkt etwas willkürlich konstruiert. Man erkennt jedoch, dass es das einzige Modell ist, welches die folgenden Forderungen erfüllt:

- diskrete, selbstähnliche Schrittlängenverteilung
- Schritte nur exakt in Richtung der Hauptgitterlinien
- möglichst kurze Schritte (jedoch nicht kleiner als  $l_0$ )

Würde man davon ausgehen, dass Schrittlänge und -dauer proportional zueinander sind, so ergibt sich aus der Schrittlängenverteilung  $\propto |l|^{-2,26}$  nach [22] das folgende Potenzgesetz für die mittlere quadratische Abweichung:  $\sigma^2 \propto t^{1,74}$ . Dies gleicht den Simulationsergebnissen, bei denen der Exponent ungefähr 1,72 ist (siehe Abschnitt 3.7.2). Allerdings muss bemerkt werden, dass bei dem selbstähnlichen Modell die Zeit strenggenommen nicht proportional zur Schrittlänge ist: Die Schrittlängen betragen in diesem Modell  $3^j l_0$ , wohingegen die Zeit proportional zu  $4^j l_0 / c$  ist.

Die Selbstähnlichkeit bei der Schrittlängenverteilung spiegelt sich auch in der Photonenverteilung wieder: In Abschnitt 3.7.3 wird die simulierte Photonenverteilung auf ein mögliches Skalengesetz untersucht.

### 3.5 Theorie IV: Photonenausbreitung in Schäumen beliebiger Unregelmäßigkeit

In diesem Abschnitt wird das Modell für die Photonenausbreitung in stark unregelmäßigen Gittern aus Abschnitt 3.3 mit den Modellen für exakte bzw. fast exakte Gitter aus Abschnitt 3.4 kombiniert. Insbesondere ergibt sich dabei die Abhängigkeit der Diffusionskonstanten von der Stärke der Unordnung.

**Berechnung von  $\sigma^2(n) = \langle |\vec{r}(n)|^2 \rangle$ :**

In Abschnitt 3.4.1 wurde der Anteil der Photonen berechnet, die sich in einem exakten Gitter auf geraden Bahnen befinden. Dabei sind  $\frac{1}{8}$  aller Photonen (in der ballistischen Näherung aus Abschnitt 3.4.1) unendlich lange auf geraden Bahnen unterwegs. Außerdem gibt es noch einen Anteil an Photonen, die mit einer exponentiell abnehmenden Wahrscheinlichkeit proportional zu  $(p_a^j + p_b^j)$  nach  $2j$  Schritten noch auf einer geraden Bahn sind. Andere Photonen werden hier nicht betrachtet; es wird davon ausgegangen, dass diese keinen Anteil zu den Korrelationen liefern, dass für sie also  $\langle \vec{r}_i \cdot \vec{r}_j \rangle = 0$  für  $i \neq j$  ist. Aus Gründen der Einfachheit wird außerdem die in



Abschnitt 3.4.2 berechnete zusätzliche schwache Abnahme der Photonenzahl auf geraden Bahnen hier nicht berücksichtigt. Handelt es sich nun nicht mehr um ein exaktes hexagonales Gitter, sondern um ein unregelmäßiges Gitter, so werden wesentlich mehr Photonen die geraden Bahnen verlassen als im exakten Gitter. Diese Abnahme soll nun bestimmt werden, um damit die mittlere quadratische Abweichung für unregelmäßige Gitter zu berechnen, wobei vorerst noch davon ausgegangen wird, dass die gestörten Gitter immer noch ausschließlich aus Sechsecken aufgebaut sind.

Es sei  $p_{\delta r}$  die Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein Photon im unregelmäßigen Gitter an einer Verzweigung immer noch in den Kanal gelangt, in den es auch im regelmäßigen Gitter gelangt wäre. Diese Wahrscheinlichkeit hängt von der Stärke der Unregelmäßigkeiten ab, gemessen über einen Parameter  $\delta r$ , der in Abschnitt 3.6.3 vorgestellt wird.

Hier muss also untersucht werden, wie Abweichungen bei Kanalwechseln sich auf den in Abschnitt 3.4.1 berechneten Anteil der Photonen auf geraden Bahnen auswirkt. Dazu werden die in Abschnitt 3.4.1 untersuchten Photonenanteile nochmals erneut betrachtet:

- $\frac{1}{8}$  der Photonen weichen im exakten Gitter nie von einer geraden Bahn ab. Im unregelmäßigen Gitter können sie bei jedem Kanalwechsel von der bisherigen geraden Bahn abweichen, die Wahrscheinlichkeit für den Verbleib sei jeweils  $p_{\delta r}$ . Nach  $2j$  Schritten beträgt der Anteil der Photonen auf geraden Bahnen also nur noch  $\frac{1}{8}p_{\delta r}^{2j-1}$  statt  $\frac{1}{8}$ . Der ersten Schritt spielt keine Rolle, deshalb der Exponent  $2j - 1$ .
- $\frac{1}{8}$  der Photonen laufen im exakten Gitter ständig auf einer geschlossenen Kreisbahn. Dieser Anteil ergibt sich ebenso wie der Photonenanteil auf einer geraden Bahn. Weichen diese Photonen bei jedem Kanalwechsel von ihrer Kreisbahn ab (jeweils mit Wahrscheinlichkeit  $1 - p_{\delta r}$ ), so laufen sie auf einer geraden Bahn. Der Anteil dieser Photonen auf einer geraden Bahn nach  $2j$  Schritten ist also:  $\frac{1}{8}(1 - p_{\delta r})^{2j-1}$
- Ein Anteil proportional zu  $(p_a^j + p_b^j)$  ist im exakten Gitter nach  $2j$  Schritten noch auf einer geraden Bahn, da die Photonen dann an jeder zweiten Verzweigung immer gemäß Fall a oder immer gemäß Fall b wechseln. Im gestörten Gitter ergibt sich die Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein Photon an einer Verzweigung gemäß Fall a wechselt folgendermaßen: Entweder das Photon wechselt bereits im exakten Gitter so und weicht im unregelmäßigen auch nicht von dieser Bahn ab (Wahrscheinlichkeit  $p_{\delta r}p_a$ ) oder es wechselt im exakten Gitter gemäß Fall b, weicht nun aber davon ab, d.h. im unregelmäßigen Gitter tritt doch Fall a ein (Wahrscheinlichkeit  $(1 - p_{\delta r})p_b$ ). Die Wahrscheinlichkeit für einen Kanalwechsel nach Fall a im gestörten Gitter ist also  $p_{\delta r}p_a + (1 - p_{\delta r})p_b$ .

Somit ist der Anteil der Photonen, die immer gemäß Fall a wechseln, nach  $2j$  Schritten proportional zu  $(p_{\delta r} p_a + (1 - p_{\delta r}) p_b)^j$ ; entsprechend ist der Anteil, der immer gemäß Fall b wechselt, proportional zu  $(p_{\delta r} p_b + (1 - p_{\delta r}) p_a)^j$ . In beiden Fällen darf das Photon außerdem an allen Verzweigungen dazwischen nicht anders abbiegen als ein Photon im exakten Gitter; somit muss zum Schluß der gesamte Ausdruck noch mit  $p_{\delta r}^j$  multipliziert werden. Der Anteil der Photonen nach  $2j$  Schritten auf einer geraden Bahn ist somit proportional zu

$$p_{\delta r}^j \left( (p_{\delta r} p_a + (1 - p_{\delta r}) p_b)^j + (p_{\delta r} p_b + (1 - p_{\delta r}) p_a)^j \right).$$

Der Proportionalitätsfaktor ergibt sich durch Abzug der obigen beiden Fälle von der 1 zu  $1 - \frac{1}{8} - \frac{1}{8} = \frac{3}{4}$ .

Insgesamt erhält man somit, dass nach  $2j$  Schritten in einem beliebigen Gitter noch

$$\begin{aligned} H_{\delta r}(2j) &:= \frac{1}{8} \left( p_{\delta r}^{2j-1} + (1 - p_{\delta r})^{2j-1} \right) \\ &\quad + \frac{3}{4} p_{\delta r}^j \left( (p_{\delta r} p_a + (1 - p_{\delta r}) p_b)^j + (p_{\delta r} p_b + (1 - p_{\delta r}) p_a)^j \right) \end{aligned}$$

der Photonen auf einer geraden Bahn unterwegs sind. Der häufiger auftretende Faktor  $p_{\delta r}^j$  entspricht übrigens ungefähr dem Exponentialfaktor, der in Abschnitt 3.4.3 für schwach unregelmäßige Gitter eingeführt wurde. Für  $p_{\delta r}^j = 1$ , also für exakte Gitter, liefert  $H_{\delta r}(2j)$  erwartungsgemäß den bereits in Abschnitt 3.4.1 hergeleiteten Ausdruck. Für beliebige Gitter mit  $p_{\delta r}^j \neq 1$  läßt sich die mittlere quadratische Abweichung wie folgt berechnen:

$$\begin{aligned} \sigma_{\delta r}^2(n) &= n l_0^2 + 2 \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^{n-i} \langle \vec{r}_i \cdot \vec{r}_{i+k} \rangle \\ &\approx n l_0^2 + 2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{[(n-i)/2]} \frac{3}{2} l_0^2 H_{\delta r}(2j) \\ &= konst + l_0^2 n + \frac{3}{8} \frac{p_{\delta r}}{1 - p_{\delta r}^2} l_0^2 n + \frac{3}{8} \frac{1 - p_{\delta r}}{1 - (1 - p_{\delta r})^2} l_0^2 n \\ &\quad + \frac{9}{4} \frac{p_{\delta r}^2 (p_a - p_b) + p_{\delta r} p_b}{1 + p_{\delta r}^2 (p_b - p_a) - p_{\delta r} p_b} l_0^2 n + \frac{9}{4} \frac{p_{\delta r}^2 (p_b - p_a) + p_{\delta r} p_a}{1 + p_{\delta r}^2 (p_a - p_b) - p_{\delta r} p_a} l_0^2 n \end{aligned} \quad (3.45)$$

Der Ausdruck *konst* steht dabei für Terme, die für große  $n$  verschwinden oder konstant sind. Die Terme in  $\sigma_{\delta r}^2(n)$  sind also höchstens linear in  $n$ . Die Photonenausbreitung im unregelmäßigen Gitter ist somit diffusiv, wobei die Diffusionskonstante von der Stärke der Gitterunregelmäßigkeiten abhängt, was in Abschnitt 3.7 anhand der Simulationsergebnisse bestätigt wird.

Falls  $p_{\delta r} = \frac{1}{2}$ , also bei rein zufälligen Kanalwechseln, ergibt sich mit  $p_b = 1 - p_a$  für große  $n$ :

$$\sigma^2(n) = 3nl_0^2,$$

also genau Gleichung (3.12), die aus dem Random-Walk-Modell mit rein zufälligen Kanalwechseln folgte. Dieser Random-Walk-Grenzfall ist auch in stark unregelmäßige Gitter gültig, in denen es bereits Fünf- und Siebenecke gibt, solange noch ungefähr  $\langle \cos \theta \rangle = \frac{1}{2}$  ( $\theta$ : Streuwinkel an einer Verzweigung) ist (siehe Abschnitt 3.3.1).

#### Abschätzung von $p_{\delta r}$ :

$p_{\delta r}$  gibt die Wahrscheinlichkeit an, mit der ein Photon beim Kanalwechsel in den richtigen Kanal wechselt um seine gerade Bahn fortzusetzen. Für exakte Gitter soll das Photon überhaupt nicht von der geraden Bahn abweichen (ballistische Näherung) während bei kleinen Unregelmäßigkeiten im Gitter die Abnahme der Photonenzahl auf geraden Bahnen wie in Abschnitt 3.4.3 sein soll, d.h. für  $\delta r \rightarrow 0$  ist  $p_{\delta r}^j \approx \exp(-j/j_0)$  mit  $j_0$  aus Gleichung 3.42. Bei stark unregelmäßigen Gittern soll der Photonenwechsel rein zufällig geschehen, d.h. für  $\delta r \rightarrow \infty$  gilt  $p_{\delta r} \rightarrow \frac{1}{2}$ . Die Beziehung

$$p_{\delta r} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2 \left( a \frac{\delta r^2}{d^2} + 1 \right)}$$

erfüllt diese Bedingungen, wenn die Konstante  $a$  als  $a = \frac{128\pi^2}{27}$  gewählt wird, denn dann ist näherungsweise für kleine  $\delta r$ :

$$p_{\delta r} \approx 1 - \frac{1}{2} a \frac{\delta r^2}{d^2} = 1 - \frac{128\pi^2}{27} \frac{\delta r^2}{d^2} = 1 - 1/j_0 \approx \exp\left(-\frac{1}{j_0}\right).$$

Mit

$$p(\delta r) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2 \left( \frac{128\pi^2}{27} \frac{\delta r^2}{d^2} + 1 \right)} \quad (3.46)$$

erhält man also für exakte Gitter die ballistische Photonenausbreitung (d.h. die Diffusionskonstante ist unendlich), für nur leicht unregelmäßige Gitter ergeben sich Lösungen, die dem Langzeitlimites der in Abschnitt 3.4.3 beschriebenen Ergebnisse entsprechen, und für sehr unregelmäßige Gitter ergibt sich ein Diffusionsprozess, der dem in Abschnitt 3.3.1 beschriebenen Random-Walk mit unabhängigen, rein zufälligen Kanalwechseln gleicht.

### Zeitabhängigkeit des Ausbreitungsverhaltens:

Mit Gleichung (3.8) kann man  $\sigma^2$  in Abhängigkeit von der Zeit ausdrücken. Die Mittelung über den Winkel  $\alpha_1$  erfolgt durch numerische Integration, da die analytische Integration zu kompliziert ist. Das Ergebnis wird in Abschnitt 3.7 mit den Simulationsergebnissen verglichen. Im Grenzfall sehr unregelmäßiger Gitter kann die Mittelung durch exakte Integration über den Winkel durchgeführt werden; man erhält wie im Random-Walk-Modell Gleichung (3.17).

## 3.6 Simulation der Photonenausbreitung am Computer

In diesem Teil der Arbeit wird erläutert, wie die Photonenausbreitung am Computer simuliert wird. Zunächst wird in Abschnitt 3.6.1 erklärt, wie sich eine einzelne Photonenbahn berechnen läßt. In Abschnitt 3.6.2 werden einige spezielle Bahnen gesondert untersucht. Das Erzeugen von unregelmäßigen Gittern am Computer wird in Abschnitt 3.6.3 beschrieben. Schließlich wird in Abschnitt 3.6.4 das bei den Simulationen übliche Vorgehen erläutert.

Bei der Simulation der Photonenausbreitung am Computer, wird zunächst ein zweidimensionales Gitter vorgegeben. Dieses kann ein exaktes Sechseckgitter oder ein unregelmäßiges Gitter sein (siehe Abschnitt 3.6.3). Die Linien der Gitter werden als Kanäle konstanter Dicke  $d$  aufgefasst. Die Begrenzungslinien dieser Kanäle sind vollständig reflektierend. Die Photonen bewegen sich auf rein geometrischen Bahnen in den Kanälen fort. Interferenzeffekte werden nicht berücksichtigt.

### 3.6.1 Berechnung einer Photonenbahn

Innerhalb eines Kanales ist eine Photonenbahn vollständig durch die folgenden beiden Größen bestimmt (siehe Abbildung 3.25):

- dem Winkel  $\alpha$  zwischen Strahl und den Kanalbegrenzungslinien bzw. der Mittelparallelen. Dabei erhält der Winkel nun auch ein Vorzeichen: Kann man den einlaufende Strahl mit einem Drehwinkel kleiner als  $\frac{\pi}{2}$  gegen den Uhrzeigersinn auf die Mittelparallele drehen, so ist  $\alpha$  positiv, ansonsten negativ. Bei jeder Reflektion ändert sich also das Vorzeichen dieses Winkels. Der Winkel des in den  $i$ -ten Kanal einlaufenden Strahles wird  $\alpha_i$  und der Winkel des auslaufenden Strahles  $\alpha'_i$  genannt. Ist  $m$  die Anzahl der Reflektionen in diesem Kanal, so ist  $\alpha'_i = (-1)^m \alpha_i$ .

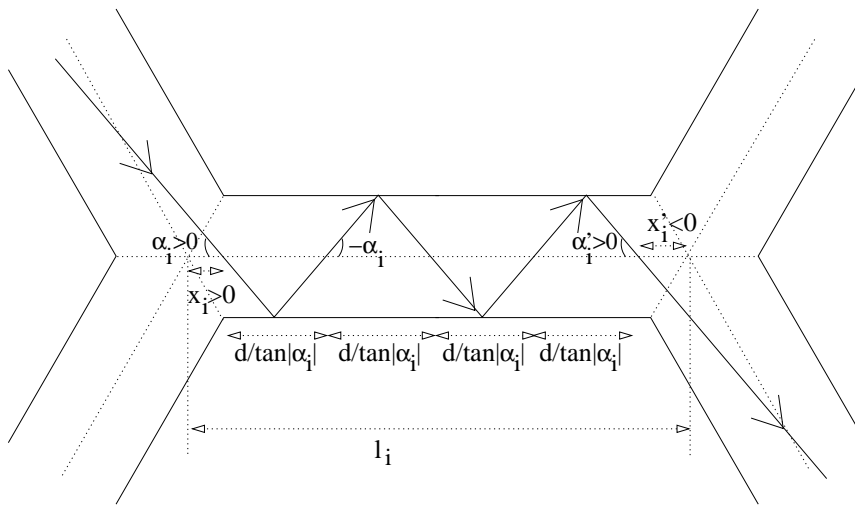


Abbildung 3.25: Eine Photonenbahn in einem Kanal ist durch zwei Größen  $\alpha_i$  und  $x_i$  bzw.  $\alpha'_i$  und  $x'_i$  gegeben.  $\alpha_i$  ist dabei der gegen den Uhrzeigersinn gemessene Winkel zwischen einkommendem Photonenstrahl und der Mittelparallelen,  $\alpha'_i$  zwischen Mittelparallelen und ausgehendem Strahl.  $x_i$  ( $x'_i$ ) ist der Abstand zwischen dem Schnittpunkt der Mittelparallelen mit dem eintreffenden (auslaufenden) Photonenstrahl und dem Schnittpunkt der Mittelparallelen des vorherigen (nächsten) Kanales. Das Vorzeichen ist positiv, wenn die Mittelparallele den Photonenstrahl näher am nächsten Kanal (in der Abbildung also weiter rechts) schneidet als die Mittelparallelen des alten (neuen) Kanales.

- der Position des ersten oder letzten Schnittpunktes zwischen Photonenbahn und Mittelparallelen des Kanales bezogen auf die Schnittpunkte der Mittelparallelen. Dabei ist  $x_i$  der Abstand beim Eintritt in den  $i$ -ten Kanal,  $x'_i$  den Abstand beim Verlassen. Diese Größen sind positiv, wenn die Schnittpunkte näher am neuen Kanal liegen, ansonsten negativ. Bei kleinen Winkeln kann es vorkommen, dass die Photonenbahn die Mittelparallele nie schneidet. In diesem Fall wird die Photonenbahn über die Reflektionsstelle im nächsten Kanal hinaus verlängert und der Schnittpunkt dieser Verlängerung mit der Mittelparallelen als Punkt zur Abstandsmessung verwendet. Der Zusammenhang zwischen  $x'_i$  und  $x_i$  ist:  $x'_i = l_i - x_i + \frac{md}{\tan|\alpha_i|}$ . Dabei ist  $l_i$  die Länge des Kanales gemessen zwischen den Schnittpunkten der Mittelparallelen.

Tritt der Winkel  $\alpha = 0$  auf, so schneidet der Strahl die Mittelparallele nicht. Solche Photonenbahn werden gesondert in Abschnitt 3.6.2 untersucht. In den Computersimulationen wird für solche Bahnen mit sehr kleinen Winkeln gerechnet, so dass die Schnittpunkte sehr weit außerhalb des Kanales liegen. Der dadurch entstehende Fehler liegt im Bereich der numerischen Rundungsfehler (siehe dazu Abschnitt 3.6.4).

**Kanalwechsel:**

Um die Größen  $\alpha_{i+1}$  und  $x_{i+1}$  im neuen Kanal in Abhängigkeit von den Größen im alten Kanal  $\alpha'_i$  und  $x'_i$  zu berechnen, muss man folgende Fälle unterscheiden (siehe Abbildung 3.26):

- Fall a: Übergang in den Kanal, der auf der dem letzten Reflektionspunkt gegenüberliegenden Seite liegt.
- Fall b: Übergang in den Kanal, der auf der Seite des letzten Reflektionspunktes liegt.
- Fall c: Rückreflektion: Das Photon wird von einer Wand des neuen Kanales sofort wieder in den ursprünglichen Kanal zurückreflektiert.
- Fall d: Richtungsänderung: Der Winkel im neuen Kanal ist größer als  $\frac{\pi}{2}$ . Das Photon läuft im neuen Kanal also in Rückwärtsrichtung und wird den neuen Kanal durch die Verzweigung verlassen, durch die es in ihn eingetreten ist. Das Photon kann dabei wieder in den ursprünglichen Kanal gelangen (dann handelt es sich gleichzeitig auch um eine Rückreflektion wie in Fall c) oder es gelangt in den dritten Kanal an dieser Verzweigung.

Die Fälle c und d können nur bei unregelmäßigen Gittern auftreten. Man kann sie auch einfach behandeln, indem man Kanalwechsel zunächst nur gemäß der Fälle a und b berechnet, dann aber sofort nach einem Kanalwechsel überprüft, ob eine Rückreflektion oder eine Richtungsumkehr vorliegt. Dazu muss man mit den Winkeln  $\pi - \alpha_{i+1}$  (für  $\alpha_{i+1} > 0$ ) bzw. mit  $-\pi - \alpha_{i+1}$  (für  $\alpha_{i+1} < 0$ ) und  $-x_{i+1} - \frac{d}{2 \tan|\alpha_{i+1}|}$  überprüfen, ob mit diesen Größen ein Kanalwechsel in den Ursprungskanal (also eine Rückreflektion) stattfindet. Tritt eine Rückreflektion ein, so läuft die Simulation einfach mit diesen neuen Größen weiter. Ein Richtungswechsel liegt vor, wenn der Betrag des Winkels  $|\alpha_{i+1}|$  größer als  $\frac{\pi}{2}$  ist. Dann wird mit  $\alpha_{i+1} - \pi$  (für  $\alpha_{i+1} > 0$ ) bzw. mit  $\alpha_{i+1} + \pi$  (für  $\alpha_{i+1} < 0$ ) und  $-x_{i+1}$  weitersimuliert. In beiden Fällen c und d muss außerdem die Richtung des neuen Kanales umgekehrt werden, d.h. die Bezeichnung nächste Verzweigung erhält dann die Verzweigung, durch die das Photon in den Kanal gelangt ist. Diese Richtungsumkehr ist für die Angabe des Vorzeichens von  $x_{i+1}$  notwendig.

Der Winkel im neuen Kanal berechnet sich wie folgt (siehe dazu auch die oberen Skizzen in Abbildung 3.26): In beiden Fällen gilt für  $\alpha'_i > 0$ :

$$\alpha_{i+1} = \alpha'_i + \phi_{a,b} - \pi \quad (\alpha'_i > 0) \quad (3.47)$$

Dabei ist  $\phi_{a,b}$  der Winkel zwischen den Mittelparallelen der beteiligten Kanäle, im Fall a gemessen als Winkel zwischen 0 und  $\pi$  im Fall b als Winkel

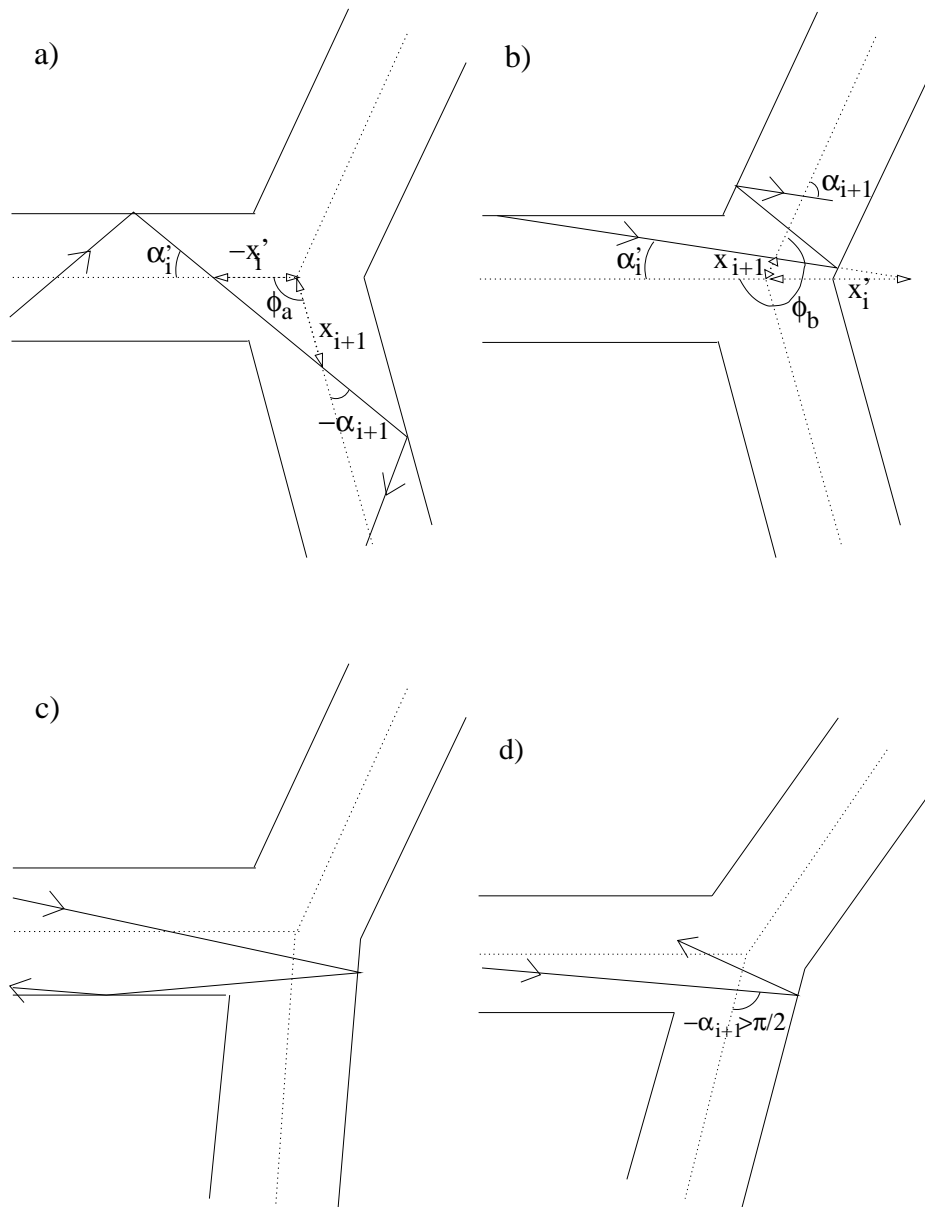


Abbildung 3.26: Übersicht über die vier möglichen Fälle eines Kanalwechsels: a) Übergang in den der letzten Reflektionsstelle gegenüberliegenden Kanal; b) Übergang in den anliegenden Kanal; c) Rückreflektion in den Ursprungs kanal; d) Richtungsänderung: Der Winkel im neuen Kanal ist größer als  $\frac{\pi}{2}$ . Das Photon läuft im neuen Kanal also in umgekehrter Richtung und wird anschließend entweder (wie in Fall c) zurück in den Ursprungs kanal oder in den dritten, bisher unbeteiligten Kanal (hier rechts oben) gelangen.

zwischen  $\pi$  und  $2\pi$ . Ist  $\alpha'_i < 0$ , so ändert sich in Gleichung (3.47) auch das Vorzeichen von  $\alpha_{i+1}$  und man erhält:  $-\alpha_{i+1} = -\alpha'_i + \phi_a - \pi$  bzw.

$$\alpha_{i+1} = \alpha'_i - \phi_{a,b} + \pi \quad (\alpha'_i < 0). \quad (3.48)$$

Für die Position im neuen Kanal gilt in beiden Fällen nach dem Sinussatz  $x_{i+1} = x'_i \frac{\sin(\alpha'_i)}{\sin(\alpha_{i+1})}$  und somit:

$$x'_{i+1} = x_{i+1} - l_{i+1} = x'_i \frac{\sin(\alpha'_i)}{\sin(\alpha_{i+1})} - l_{i+1}, \quad (3.49)$$

wobei  $l_{i+1}$  die Länge des  $i + 1$ -ten Kanales ist (siehe Abbildung 3.25).

### Berechnen einer Photonenbahn mit dem Computer:

Der Zustand eines Photons im Gitter ist gegeben durch folgende Informationen:

- den letzten Verzweigungspunkt, den das Photon passiert hat, sowie die nächste Verzweigung, die es durchqueren wird. Durch diese Größen ist der Kanal, in dem sich das Photon befindet, zusammen mit der Richtung, in der der Kanal durchquert wird, gegeben. Von den Verzweigungspunkten (als Schnittpunkt der Mittelparallelen) sind die Koordinaten gegeben, so dass man mit deren Hilfe die Winkel zwischen den Kanälen sowie die absolute Position des Photons im Gitter berechnen kann.
- den Winkel  $\alpha'_i$  und die Position  $x'_i$  als Information über den Zustand innerhalb des Kanales (siehe oben).
- weitere Informationen zur Auswertung: Neben der Anzahl der durchquerten Kanäle (also der Schrittzahl) gehört hierzu auch die Zeit, die das Photon seit Beginn der Simulation benötigt hat, um an die momentane Stelle im Gitter zu gelangen (siehe unten).

Für ein solches Photon können nun folgende Fälle eintreten:

- Das Photon wechselt den Kanal zunächst nicht, sondern wird innerhalb des Kanales reflektiert. In diesem Fall ändert sich das Vorzeichen von  $\alpha'_i$  und der Abstand vom nächsten Verzweigungspunkt reduziert sich um  $\frac{d}{\tan|\alpha'_i|}$ , d.h. es gilt  $x'_{i,neu} = x'_{i,alt} + \frac{d}{\tan|\alpha'_i|}$ .



- Das Photon wird innerhalb dieses Kanales nicht mehr reflektiert, sondern wechselt sofort den Kanal gemäß Fall a oder Fall b. Nun müssen also die Informationen über die letzte und nächste Verzweigung angepasst werden. Winkel und Position innerhalb des neuen Kanales können mit den Gleichungen (3.47), (3.48) und (3.49) berechnet werden. Unmittelbar nach dem Kanalwechsel müssen diese Ergebnisse auf die Fälle Rückreflektion und Richtungsumkehr untersucht werden (siehe oben).

Um nun festzustellen, ob das Photon den Kanal wechselt, wird mit den Bahnen verglichen, bei denen gerade noch ein Kanalwechsel stattfindet. Die letzten Positionswerte dieser Grenzbahnen im alten Kanal werden mit  $x_{a,min}$  bzw.  $x_{b,min}$  bezeichnet. Wie man in Abbildung 3.27 erkennt, werden Photonen mit  $x'_i < x_{a,min}$  erneut reflektiert, Photonen mit  $x_{a,min} < x'_i < x_{b,min}$  wechseln den Kanal gemäß Fall a und Photonen mit  $x_{b,min} < x'_i$  gemäß Fall b.

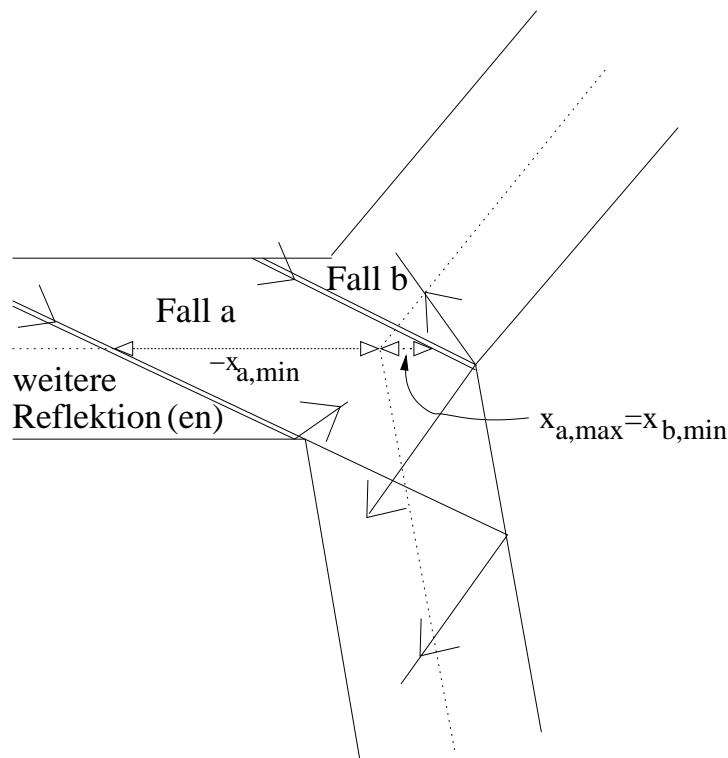


Abbildung 3.27: Photonen mit  $x'_i < x_{a,min}$  werden erneut reflektiert, Photonen mit  $x_{a,min} < x'_i < x_{b,min}$  wechseln den Kanal gemäß Fall a und Photonen mit  $x_{b,min} < x'_i$  gemäß Fall b.

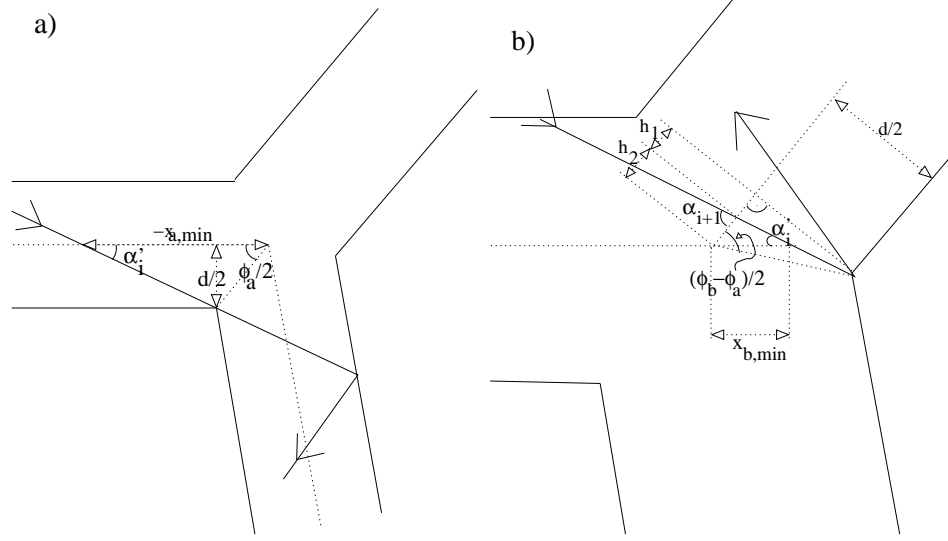


Abbildung 3.28: Anhand dieser Grafik können die in Abbildung 3.27 eingeführten Größen  $x_{a,min}$  (links) und  $x_{b,min}$  (rechts) berechnet werden.

Die Größen  $x_{a,min}$  und  $x_{b,min}$  erfüllen folgende Relationen: Nach Abbildung 3.28a ist

$$x_{a,min} = -\frac{d}{2 \tan |\alpha'_i|} - \frac{d}{2 \tan \left(\frac{\phi_a}{2}\right)}. \quad (3.50)$$

Mit den Hilfsgrößen  $h_1$  und  $h_2$  (siehe Abbildung 3.28b), für die  $h_1 + h_2 = d / \left(2 \tan \left(\frac{\phi_b - \phi_a}{2}\right)\right)$  und  $h_1 = d / (2 \tan (|\alpha_{i+1}|))$  gilt, und mit dem Sinussatz  $h_2 / \sin |\alpha'_i| = x_{b,min} / \sin (\pi - |\alpha_{i+1}|)$  sowie Gleichung (3.47) ergibt sich:

$$x_{b,min} = -\frac{d \sin (|\alpha'_i| - \phi_b)}{\sin |\alpha'_i|} \left( \frac{1}{\tan \left(\frac{\phi_b - \phi_a}{2}\right)} - \frac{1}{\tan (|\alpha| + \phi_b - \pi)} \right). \quad (3.51)$$

Das Simulationsprogramm berechnet  $x_{a,min}$  und  $x_{b,min}$  und entscheidet damit, ob eine weitere Reflektion oder ein Kanalwechsel stattfindet.

### Berechnung der Zeit für eine Photonenbahn:

Bei der Simulation interessiert natürlich auch, welche Zeit das Photon für seine Bahn benötigt. Dazu wird jedem Photon bei der Simulation eine Zeit zugeordnet. Diese Variable wird beim Übergang von einem Schnittpunkt mit der Mittelparallelen zum nächsten Schnittpunkt (also bei einer Reflektion innerhalb eines Kanals) um  $\Delta t = \frac{d}{c \sin |\alpha'_i|}$  erhöht, wobei  $c$  die Lichtgeschwindigkeit innerhalb des Kanalmediums ist. Beim Kanalwechsel muss

eine Zeitkorrektur gemessen vom letzten Schnittpunkt im alten Kanal bis zum ersten Schnittpunkt im neuen Kanal addiert werden. Diese Zeitkorrektur kann auch negativ sein, wenn der Strahl zuerst die Mittelparallele des neuen Kanals und dann die des alten schneidet. Diese Zeitkorrektur  $\Delta t'$  ist in beiden Fällen nach Kosinussatz:

$$\Delta t' = \pm \frac{1}{c} \sqrt{x_i'^2 + x_{i+1}^2 + 2x_i'x_{i+1} \cos(\phi_a)}.$$

Dabei ergibt sich für das Vorzeichen:

- Im Fall a gilt das Pluszeichen für  $x_{i+1} > 0$  und das Minuszeichen für  $x_{i+1} < 0$ .
- Im Fall b gilt das Pluszeichen für  $x_{i+1} < 0$  und das Minuszeichen für  $x_{i+1} > 0$ .

Weiteren Einzelheiten der Simulation werden in Abschnitt 3.6.4 beschrieben.

### 3.6.2 Spezielle Photonenbahnen

Bei einigen speziellen Winkeln zwischen Photonenstrahl und Mittelparallelen treten einfach zu berechnende Bahnen auf. Einige davon werden in diesem Abschnitt beschrieben. Anhand dieser einfachen Beispiele wird die Stabilität der Bahnen untersucht. Sie wurden außerdem verwendet, um das Computersimulationsprogramm zu überprüfen. Solange nicht ausdrücklich erwähnt, gelten alle in diesem Abschnitt beschriebenen Bahnen nur im regelmäßig hexagonalen Gitter.

#### Bahnen mit dem Winkel $\frac{\pi}{6}$ :

Das Besondere an dem Winkel  $\frac{\pi}{6}$  ist, dass sich der Betrag des Winkels bei Bahnen im regelmäßig hexagonalem Gitter nicht ändert: Im regelmäßig hexagonalem Gitter ist in den Gleichungen für den Winkel beim Kanalwechsel (3.47) und (3.48)  $\phi_a = \frac{2\pi}{3}$ . Fall b tritt bei diesem Winkel nie ein. Somit ist immer  $|\alpha_i| = \frac{\pi}{6}$ . Startet man ein Photon in einem Kanal auf der Mittelparallelen auf Position  $x_0$  und unter dem Winkel  $\alpha_0 = \pm \frac{\pi}{6}$ , so erhält man, wenn das Photon vor dem Kanalwechsel  $m_0$  mal reflektiert wurde:

$$x'_0 = x_0 - l_0 + \frac{m_0 d}{\tan |\alpha_0|} = x_0 - l_0 + m_0 \sqrt{3} d.$$

Dabei muss nach Gleichungen (3.50) und (3.51) gelten:

$$-\frac{2\sqrt{3}}{3}d < x'_0 < \frac{\sqrt{3}}{3}d \quad (3.52)$$

Aus Gleichung (3.49) ergibt sich außerdem:

$$x_1 = -x'_0 = -x_0 + l_0 - m_0\sqrt{3}d.$$

Wird der Strahl nun  $m_1$  mal vor dem nächsten Kanalwechsel reflektiert, so ist:

$$x_2 = -x'_1 = -x_1 + l_0 - m_1\sqrt{3}d. \quad (3.53)$$

Beim nächsten Kanalwechsel ergibt sich entsprechend:

$$\begin{aligned} x_3 = -x'_2 &= -x_2 + l_0 - m_2\sqrt{3}d = x_1 + (m_1 - m_2)\sqrt{3}d \\ \text{und} \quad &-\frac{2\sqrt{3}}{3}d < x'_2 < \frac{\sqrt{3}}{3}d \\ \text{bzw.} \quad &\frac{1}{\sqrt{3}d} \left( -\frac{2\sqrt{3}}{3}d + x_1 \right) \leq m_2 - m_1 \leq \frac{1}{\sqrt{3}d} \left( \frac{\sqrt{3}}{3}d + x_1 \right) \end{aligned}$$

Kombiniert man die letzte Ungleichung mit Ungleichung (3.52), so erhält man:

$$-1 < m_2 - m_1 < 1$$

Es muss also  $m_2 - m_1 = 0$  bzw.  $m_2 = m_1$  sein.

Führt man diese Rechnung entsprechend fort, so ergibt sich

$$m_i = m_1 \text{ für alle } i \geq 1. \quad (3.54)$$

Außerdem gilt:

$$x_{2i+1} = x_1 \text{ und } x_{2i} = x_2 \text{ für alle } i \geq 1. \quad (3.55)$$

Gleichung (3.54) bedeutet, dass die Anzahl der Reflektionen innerhalb eines Kanales immer gleich bleibt. Dieses Resultat ist vor allem deshalb besonders interessant, da die Anzahl der Reflektionen bestimmt, welche Richtung das Photon an der nächsten Verzweigung einschlägt: Das Photon läuft an der letzten Verzweigung nämlich immer in den der letzten Reflektionsstelle gegenüberliegenden Kanal, da für  $\alpha_i = \pm\frac{\pi}{6}$  nur Fall a und nie Fall b eintreten kann. Abhängig davon, ob die Anzahl der Reflektionen in einem Kanal gerade oder ungerade ist, ergeben sich die folgenden zwei Photonenbahnen:

- **Kreisbahn:** Ist die Anzahl der Reflektionen in einem Kanal ungerade, so biegt das Photon an einer Verzweigung in den Kanal ab, der auf der Seite liegt, auf der auch der vorherige Kanal liegt. Das Photon biegt also in Laufrichtung gesehen immer nach rechts oder immer nach links ab. Es durchläuft somit immer die gleichen ein Sechseck begrenzenden Kanäle (siehe Abbildung 3.29 links).

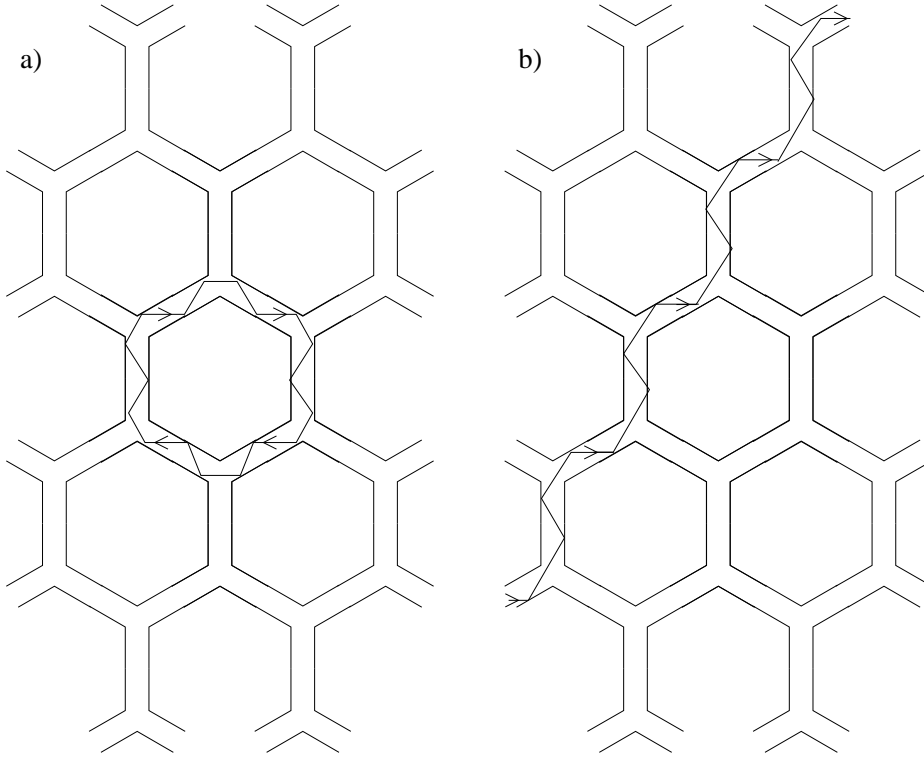


Abbildung 3.29: Die zwei Bahntypen, die bei  $\alpha_i = \pm \frac{\pi}{6}$  vorkommen: a) Kreisbahn: Die Anzahl der Reflektionen in einem Kanal ist immer ungerade; b) Treppenbahn: die Anzahl der Reflektionen ist immer gerade.

- Treppenbahn: Ist die Anzahl der Reflektionen in einem Kanal gerade, so gelangt das Photon nach einer Verzweigung in den Kanal, der dem vorherigen Kanal gegenüberliegt. Das Photon läuft also auf einer Treppenbahn durch das Gitter (siehe Abbildung 3.29 rechts).

Welcher der beiden Fälle vorliegt, hängt also nur von  $m_1$  ab. Wegen  $-\frac{2\sqrt{3}}{3}d < x'_1 < \frac{\sqrt{3}}{3}d$  ergibt sich durch Einsetzen von Gleichung (3.53) und Umformen:

$$-\frac{2}{3} + \frac{x_1 - l_0}{\sqrt{3}d} < m_1 < \frac{1}{3} + \frac{x_1 - l_0}{\sqrt{3}d} \quad (3.56)$$

Die mit dieser Ungleichung bestimmte Anzahl der Reflektionen innerhalb eines Kanales bleibt während der gesamten Bahn gleich.

Am Beispiel der  $\frac{\pi}{6}$ -Bahn lässt sich besonders einfach die Veränderungen der Bahn bei Variation der Gittergrößen  $d$  und  $l_0$  sowie der Anfangswerte  $x_0$  und  $\alpha_0$  untersuchen:

- Eine Veränderung der Größen  $d$ ,  $l_0$  und  $x_0$  führt nur dann zu einem neuen Bahntyp, falls sich nach Ungleichung (3.56) der Wert für  $m_1$  ändert. Diese Größen können also insgesamt über einen Bereich  $\Delta\left(\frac{x_1-l_0}{d}\right) = \sqrt{3}$  variiert werden, ohne dass dabei eine Änderung des Bahntypes stattfindet. Ist  $m_1$  also nicht nahe an einer Grenze des durch Ungleichung (3.56) bestimmten Intervalls, so ist die Bahn gegenüber kleinen Änderungen der Größen  $d$ ,  $l_0$  oder  $x_0$  stabil.
- Nimmt man als Startwinkel  $\alpha_0 = \pm\left(\frac{\pi}{6} + \delta\alpha\right)$ , wobei  $\delta\alpha$  eine kleine Abweichung von  $\frac{\pi}{6}$  ist, so gilt für den Winkel gemäß Gleichung (3.47)  $|\alpha_i| = \frac{\pi}{6} + (-1)^j \delta\alpha$ , solange die Bahn noch nicht den Bahntyp geändert hat, d.h. alle Kanalwechsel so wie bei der exakten  $\frac{\pi}{6}$ -Bahn stattfanden. Gleichung (3.53) muss ersetzt werden durch:

$$x_{2i+1} = x_1 + \frac{4im_1d \sin(\delta\alpha)}{\cos(\delta\alpha) + \sqrt{3} \sin(\delta\alpha)} \text{ für alle } i \geq 1$$

Dies läßt sich mit vollständiger Induktion und Gleichung (3.49) beweisen. Damit der Kanalwechsel wie bei der  $\frac{\pi}{6}$ -Bahn stattfindet, muss  $-\frac{2\sqrt{3}}{3} < x_{2i+1} < \frac{\sqrt{3}}{3}$  gelten. Dies liefert z.B. für  $x_1 = 0$  und  $\delta\alpha > 0$  die Abschätzung

$$i < \frac{\sqrt{3}}{12m_1} \left( \cot(\delta\alpha) + \sqrt{3} \right).$$

Andere Werte für  $x_1$  und  $\delta\alpha$  liefern ähnliche Abschätzungen. Daraus ergibt sich für die maximale Schrittzahl  $i_{max}$ , für die die  $\frac{\pi}{6} + \delta\alpha$ -Bahn von der  $\frac{\pi}{6}$ -Bahn gerade noch nicht wesentlich abweicht (also noch kein Unterschied bei Kanalwechseln auftritt), folgende Abschätzung:

$$i_{max} \propto \frac{\cot(\delta\alpha)}{m_1}. \quad (3.57)$$

Dies erinnert an die in Abschnitt 3.4.2 berechnete abnehmende Photonenzahl auf geraden Bahnen (siehe Gleichung (3.23)); dort wurde ebenfalls mit einer Variationen des Winkels gerechnet. Die Abschätzung (3.57) divergiert sinnvollerweise für  $\delta\alpha = 0$ . Für  $\delta\alpha \neq 0$  jedoch nimmt die maximale Schrittzahl mit zunehmendem  $\delta\alpha$  sehr schnell ab, d.h. kleine Abweichungen im Winkel führen sehr schnell zu Abweichungen von der Kreis- oder Treppenbahn. An der  $\frac{1}{m_1}$ -Abhängigkeit in (3.57) erkennt man, dass Bahnen mit wenig Reflektionen stabiler sind als Bahnen mit vielen Reflektionen. Dabei ist die Anzahl der Reflektionen ungefähr proportional zum Quotienten  $\frac{l_0}{d}$ , d.h. je dicker die Kanäle im Verhältnis zur Länge sind, desto stabiler sind die Bahnen darin.

In einem unregelmäßigem Gitter ändert sich die Länge eines Kanales von Schritt zu Schritt, außerdem wird sich der Winkel auch bei einem Startwinkel von  $\alpha_0 = \pm\frac{\pi}{6}$  ändern. Den obigen Überlegungen kann man entnehmen, dass eine kleine Abweichungen bei der Kanallänge meist nicht zu neuen Bahnen führt; Änderungen beim Winkel  $\alpha_i$  hingegen führen sehr schnell zu Abweichungen von der Kreis- oder Treppenbahn. Sie kommen also in unregelmäßigen Gittern nicht vor, selbst dann nicht, wenn die Abweichungen vom regelmäßigen Gitter sehr klein sind.

### Bahnen mit den Winkeln 0 und $\frac{\pi}{3}$ :

In einem regelmäßig hexagonalem Gitter gilt für eine Bahn, die mit  $\alpha_0 = \pm\frac{\pi}{3}$  beginnt:  $\alpha_{2i+1} = 0$  und  $|\alpha_{2i}| = \frac{\pi}{3}$ . In den Kanälen mit  $\alpha_{2i+1} = 0$  läuft der Lichtstrahl parallel zu den Kanalwänden, wird also nie reflektiert. Er verläßt den Kanal immer auf der Seite, auf der der vorherige Kanal liegt. Abhängig davon, ob die Anzahl der Reflektionen in den Kanälen mit  $|\alpha_{2i}| = \frac{\pi}{3}$  gerade oder ungerade ist, treten hier ähnlich wie im Fall  $\alpha_0 = \pm\frac{\pi}{6}$  folgende Bahntypen auf:

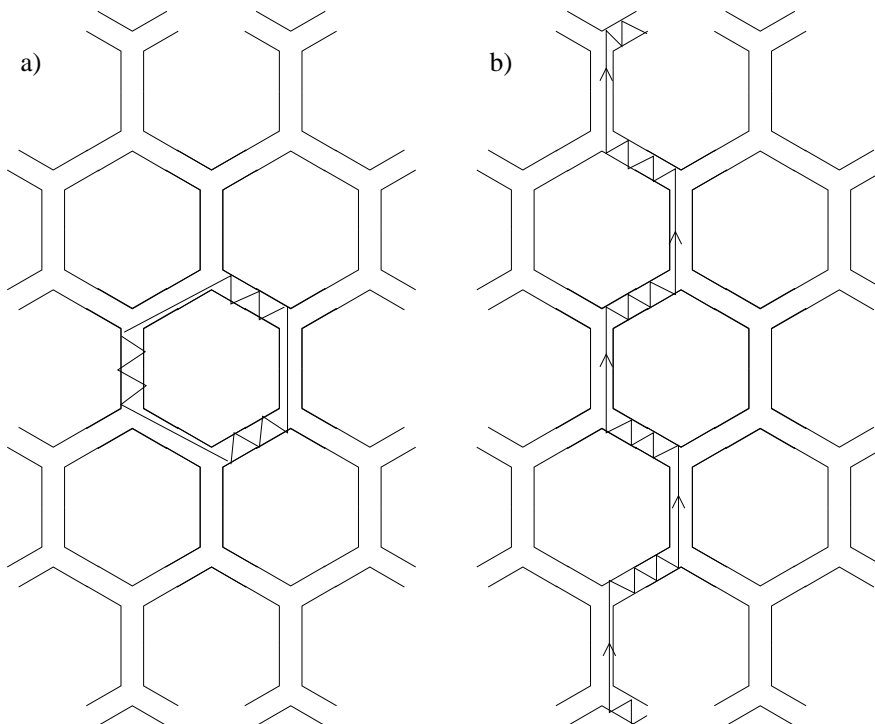


Abbildung 3.30: Die zwei Bahntypen, die bei einem Startwinkel von  $\alpha_0 = 0$  oder  $\alpha_0 = \pm\frac{\pi}{3}$  vorkommen: a) Kreisbahn: Die Anzahl der Reflektionen in den Kanälen mit Winkel  $\pm\frac{\pi}{3}$  ist immer ungerade; b) gerade Bahn: die Anzahl der Reflektionen ist immer gerade.

- Kreisbahn: Ist die Anzahl der Reflektionen in den Kanälen immer ungerade, so durchläuft das Photon nur die an ein Sechseck anliegenden Kanäle (siehe Abbildung 3.30 links).
- Gerade Bahn: Ist die Anzahl der Reflektionen in den Kanälen immer gerade, so ergibt sich eine gerade Bahn, wie in Abbildung 3.30 rechts dargestellt.

### 3.6.3 Erzeugung von unregelmäßigen Gittern

Einen möglichst realistischen zweidimensionalen Schaumes erzeugt man über das Voronoi-Gitter eines unregelmäßigen Dreieckgitters (siehe dazu auch [3, 5]): Ein Voronoi-Gitter besteht ganz allgemein aus den Wigner-Seitz-Zellen eines Punktmusters. Das Voronoi-Gitter eines regelmäßigen Dreieckgitters mit Punktabständen  $\sqrt{3}l_0$  ist also ein exaktes Bienenwabennmuster mit Seitenlängen  $l_0$ . Um ein Modell eines unregelmäßigen Schaumes für die Simulationen zu erhalten, werden die Punkte eines solchen regelmäßigen Dreiecksgitters in eine zufällige Richtung um einen zufälligen Betrag zwischen 0 und  $\delta r$  verschoben. Mit dem Computerprogramm Triangle [28] erzeugt man dazu das Voronoi-Gitter, welches als Schaum der Unregelmäßigkeit  $\delta r$  in den Simulationen verwendet wird.

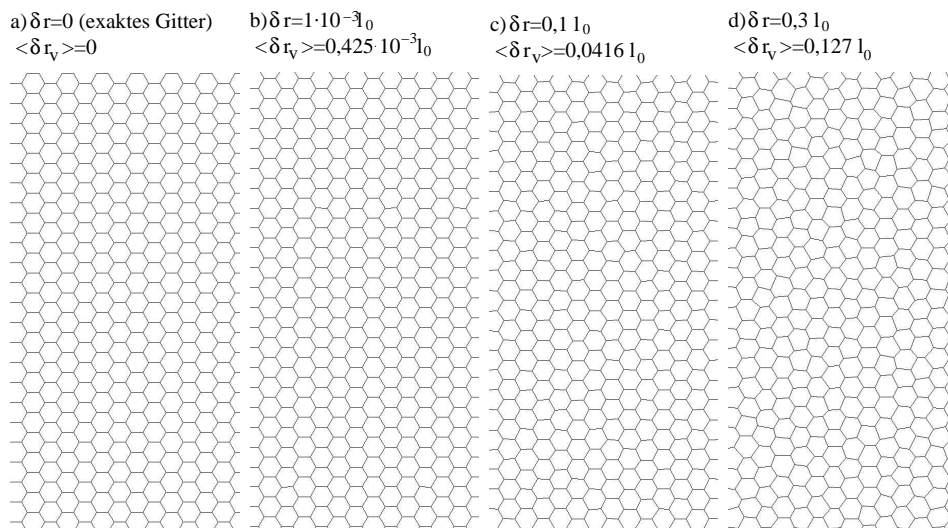


Abbildung 3.31: Ausschnitte aus Gittern mit verschiedenen starken Unregelmäßigkeiten. Die Stärke der Unregelmäßigkeiten wird angegeben durch die maximale Verschiebung  $\delta r$  der Punkte im Dreiecksgitter, aus dem die gezeigten Gitter als Voronoi-Gitter erzeugt worden sind.  $\langle \delta r_v \rangle$  ist die mittlere Verschiebung in diesen Voronoi-Sechseckgittern.



In Abbildung 3.31 sind Ausschnitte aus den für die Simulation verwendeten Voronoi-Gittern dargestellt. Es ist deutlich zu erkennen, wie die Unregelmäßigkeiten mit steigendem  $\delta r$  zunehmen. In allen Fällen sind die Unregelmäßigkeiten aber noch so klein, dass im Gitter nur Sechsecke vorkommen und sich in jedem Schnittpunkt immer genau drei Kanten treffen. Bei Gittern mit noch stärkeren Unregelmäßigkeiten ändert sich an der Photonenausbreitung nichts wesentliches (siehe Abschnitt 3.7.4). Interessant ist, das selbst bei Gittern, bei denen die Unregelmäßigkeiten kaum zu erkennen sind (wie z.B. für  $\delta r = 1 \cdot 10^{-3} l_0$ ) das Ausbreitungsverhalten sich bereits sehr stark vom exakten Gitter unterscheidet (wie in Abschnitt 3.7 gezeigt wird).

Die Kanäle in einem solchen unregelmäßigen Gitter werden symmetrisch zu den Kanten der Voronoi-Gitter gelegt, d.h. die Mittelparallelen des Gitters aus Kanälen bilden die hier dargestellten Liniengitter.

Die hier beschriebene Voronoi-Konstruktion zur Erzeugung unregelmäßiger Gitter stellt sicher, dass keine unphysikalischen konkaven Luftblasen im konstruierten Schaum vorkommen. Die Unregelmäßigkeit der Gitter drückt sich in den verschiedenen Seitenlängen und den von  $120^\circ$  abweichenden Winkeln aus. Ein echter zweidimensionaler, theoretisch wesentlich schwerer darstellbarer Schaum müsste immer nur  $120^\circ$ -Winkel haben, allerdings dürften die Linien gekrümmt sein. Für die Photonenausbreitung haben die Unregelmäßigkeiten durch verschiedene Winkel jedoch den gleichen Effekt wie gekrümmte Linien: in beiden Fällen reduziert der Kanalwechsel bei beliebigen zufälligen Winkeln bzw. die Durchquerung eines gekrümmten Kanales die Korrelationen zwischen der zukünftigen Photonenbahn von der vergangenen Bahn. Insbesondere werden lange gerade Photonenbahnen unterbunden. Um die Lichtausbreitung in unregelmäßigen zweidimensionalen Schäumen zu beschreiben, eignen sich die mit der Voronoi-Konstruktion erzeugten Gitter also ausgezeichnet als Modell für unregelmäßige Schäume.

In Abschnitt 3.4.3 wurde nicht  $\delta r$  sondern  $\langle \delta y^2 \rangle$  als Maß der Unregelmäßigkeit verwendet. Dabei war  $\delta y$  die Abweichung in  $y$ -Richtung zwischen einem Punkt im (unregelmäßigen) Voronoi-Gitter vom Punkt im exakten Sechseckgitter. Der Zusammenhang zwischen  $\delta r$  und  $\langle \delta y^2 \rangle$  ergibt sich folgendermaßen: zunächst wird ein linearer Zusammenhang zwischen der maximalen Abweichung  $\delta r$  im ursprünglichen Dreiecksgitter und der maximalen Abweichung  $\delta r_{v,\max}$  im Voronoi-Gitter angenommen (also  $\delta r_{v,\max} = k\delta r$ , siehe unten). Dann erhält man  $\langle \delta y^2 \rangle$  durch Mittelung der Quadrate aller möglichen projizierten Werte von Abweichungen zwischen 0 und  $\delta r_{v,\max} = k\delta r$ :

$$\langle \delta y^2 \rangle = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\phi \frac{1}{k\delta r} \int_0^{k\delta r} d\delta r' \delta r'^2 \sin(\phi)^2 = \frac{k^2 \delta r^2}{6} \quad (3.58)$$

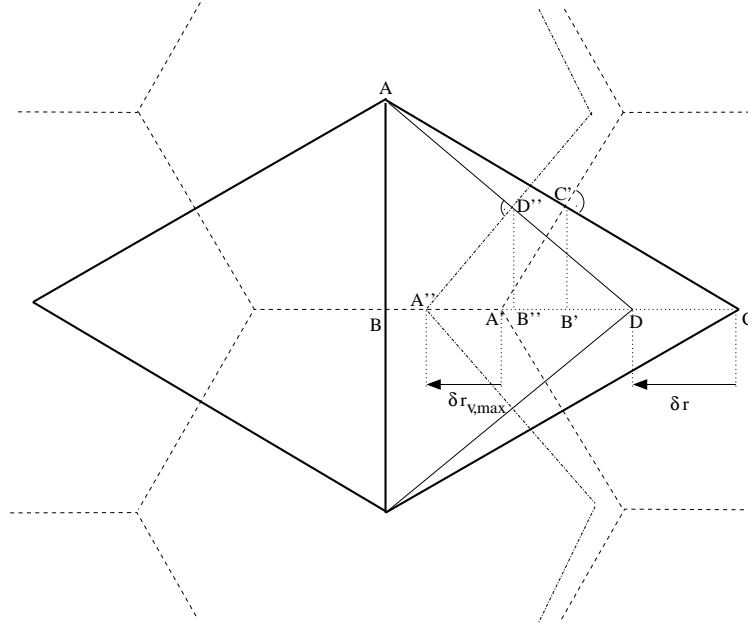


Abbildung 3.32: Skizze zur Berechnung des Zusammenhangs zwischen einer Verschiebung  $\delta r$  im Ausgangs-Dreiecksgitter (dicke durchgezogene Linien: altes Dreiecksgitter, dünne durchgezogene Linien: neues Dreiecksgitter) und der dadurch resultierenden Verschiebung  $\delta r_{v,max}$  im Voronoi-Sechseckgitter (gestricheltes bzw. gestrichpunktete Linien)

Der Proportionalitätsfaktor  $k$  aus der Beziehung  $\delta r_{v,max} = k\delta r$  lässt sich wie folgt abschätzen: In Abbildung 3.32 wird ein Punkt des Ausgangs-Dreiecksgitters (dicke durchgezogene Linien) um  $\delta r = |CD|$  verschoben (einfachheitshalber entlang einer Symmetrieachse). Diese Verschiebung führt zu einer Verschiebung im Voronoi-Sechseckgitter um  $\delta r_{v,max} = |A'A''|$ . Da die Dreiecke  $ABC$  und  $A'B'C'$  sowie die Dreiecke  $ABD$  und  $A'B''D''$  jeweils ähnlich sind, erhält man:

$$\begin{aligned}\delta r_{v,max} &= |A'A''| = |A''B''| + |B''B'| - |A'B'| \\ &= \frac{|B''D''|}{|BD|}|AB| + |B''B'| - \frac{|B'C'|}{|BC|}|AB|\end{aligned}$$

Dabei ist  $|B''D''| = |B'C'| = |AB|/2$  (Strahlensatz),  $|BD| = |BC| - \delta r$ ,  $|B''B'| = |D''C''| = \delta r/2$  (Strahlensatz) und  $|BC| = \sqrt{3}|AB| = \frac{3}{2}l_0$  ( $l_0$ : mittlere Seitenlänge im Sechseckgitter). Somit erhält man:

$$\delta r_{v,max} = \frac{\frac{3}{8}l_0^2}{\frac{3}{2}l_0 - \delta r} + \frac{\delta r}{2} - \frac{\frac{3}{8}l_0^2}{\frac{3}{2}l_0} = \left( \frac{1}{4 \left(1 - \frac{2}{3} \frac{\delta r}{l_0}\right)} + \frac{1}{2} \frac{\delta r}{l_0} - \frac{1}{4} \right) l_0$$

Für kleine Abweichungen  $\delta r \ll l_0$  ergibt sich:

$$\delta r_{v,\max} \approx \left( \frac{1}{4} \left( 1 + \frac{2}{3} \frac{\delta r}{l_0} \right) + \frac{1}{2} \frac{\delta r}{l_0} - \frac{1}{4} \right) l_0 = \frac{2}{3} \delta r.$$

In Gleichung (3.58) ist also  $k \approx \frac{2}{3}$ . Dies ist allerdings nur eine grobe Abschätzung. Aus den mit dem Computer erzeugten Gittern kann man entnehmen, dass die mittlere Abweichung  $\langle \delta r_v \rangle$  etwas größer ist als der Wert der sich gemäß  $\langle \delta r_v \rangle = \frac{1}{2} \delta r_{v,\max} = \frac{1}{3} \delta r$  ergibt (siehe dazu die Werte in Abbildung 3.31).

### 3.6.4 Vorgehen bei den Simulationen

Die Photonenbahnen werden auf die in Abschnitt 3.6.1 beschriebene Art berechnet. Dazu wird die Kanaldicke  $d$  innerhalb des Gitters als konstant angenommen. Die anderen notwendigen Gitterparameter (Länge der Kanäle und Winkel zwischen den Kanälen an einer Verzweigung) werden einem gemäß Abschnitt 3.6.3 erzeugtem Voronoi-Gitter entnommen.

Die verwendeten Voronoi-Gitter haben eine Seitenlänge von  $500l_0$  ( $l_0$  ist die Seitenlänge eines Kanales im regelmäßigen Sechseckgitter). Sollte ein Photon im Verlaufe einer Simulation an eine Verzweigung gelangen, die zu nahe am Rand des Gitters liegt, so wird es auf der gegenüberliegenden Seite mit ausreichendem Abstand vom Rand in das Gitter gesetzt. Dabei wird versucht eine Verzweigung zu finden, deren Kanäle möglichst genau in die gleichen Richtungen zeigen wie bei der Verzweigung, aus der das Photon herausgenommen wurde. Bei der Berechnung des Abstandes vom Startpunkt wird diese Verschiebung natürlich berücksichtigt. Durch diese Art der periodischen Randbedingungen entstehen im exakten Gitter keinerlei Abweichungen von einem unendlich ausgedehnten Gitter; bei unregelmäßigen Gittern kann es zu Unterschieden kommen, da ein Photon, welches kurz nach dem Umsetzen seine Richtung ändert, beim Zurücklaufen nicht exakt das Gitter vorfindet, welches es zuvor durchlaufen hat. Da die Gitter mit  $500l_0$  allerdings sehr groß sind und somit das Umsetzen von Photonen nur selten stattfindet und da außerdem die Unregelmäßigkeiten in allen bei den Simulationen verwendeten Gittern nur klein und zufällig erzeugt waren, spielen diese Fehler keine Rolle.

Um statistisch auswertbare Mittelwerte (z.B. für  $\sigma^2$ ) zu erhalten werden Bahnen von sehr vielen Photonen (meistens 10000) berechnet, die alle im gleichen Startpunkt, aber mit unterschiedlichen Winkeln gestartet wurden.

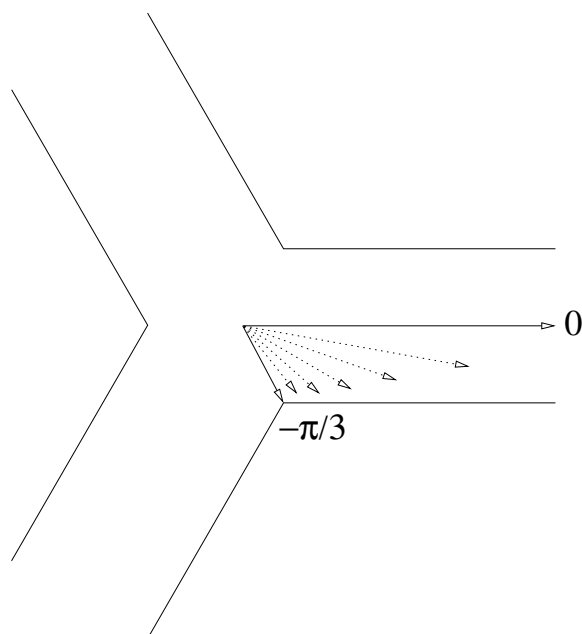


Abbildung 3.33: Bei den Simulationen werden 10000 Photonen an einem Schnittpunkt von Mittelparallelen in einem Verzweigungspunkt gestartet, wobei die Startwinkel gleichmäßig verteilt zwischen  $-\frac{\pi}{3}$  und 0 liegen.

Wenn nicht ausdrücklich anders bemerkt, wird der Startpunkt einfachheitshalber in den Schnittpunkt der Kanalmittelebenen in einer Verzweigung gelegt. Die Startwinkel werden dann gleichmäßig von  $-\frac{\pi}{3}$  bis 0 verteilt (siehe Abbildung 3.33). Winkel kleiner als  $-\frac{\pi}{3}$  werden nicht berücksichtigt, da diese Photonen (fast) immer in einen anderen Kanal gelangen würden. Außerdem ist die Photonverteilung, die sich mit Startwinkeln kleiner als  $-\frac{\pi}{3}$  ergibt, fast identisch mit der Verteilung, die man durch Spiegelung der Photonverteilung für Startwinkel größer als  $-\frac{\pi}{3}$  erhält (im Falle exakter Gitter sind die Verteilungen sogar vollkommen identisch). Ebenso gleichen die Photonbahnen mit Winkeln größer als 0 den an der Mittelparallelen des Startkanals gespiegelten Bahnen der Photonen mit Startwinkeln kleiner als 0. Es genügt also die Photonen mit Startwinkeln zwischen  $-\frac{\pi}{3}$  und 0 zu betrachten.

Meistens werden die Simulationen bis zur Zeit  $t = 100000 l_0/c$  durchgeführt. Wenn es darum geht Diffusionskonstanten oder Exponenten eines Potenzgesetzes zu bestimmen, so werden diese, wenn nicht anders vermerkt, aus einem Fit bis zu dieser Zeit entnommen.

### 3.7 Ergebnisse der Simulationen und Vergleich mit der Theorie

In den folgenden Abschnitten werden die Ergebnisse der Computersimulationen präsentiert und mit der Theorie verglichen. Zunächst beschreibt Abschnitt 3.7.1 mögliche numerische Fehlerquellen und die Genauigkeit der Simulationen. Die Simulationsergebnisse für die Ausbreitung im exakten Sechseckgitter sind in Abschnitt 3.7.2 zusammengestellt und werden mit der Theorie aus Abschnitt 3.4, insbesondere mit den Ergebnissen des Lévy-Walk-Modells aus Abschnitt 3.4.3 verglichen. Ein Skalengesetz für die Photonverteilung wird in Abschnitt 3.7.3 präsentiert und durch Untersuchung der Momente überprüft. Die Simulationsergebnisse in Abschnitt 3.7.4 für die diffusive Photonenausbreitung in ausreichend unregelmäßigen Gittern stimmen ausgezeichnet mit den theoretischen Ergebnissen des Random-Walk-Modells aus Abschnitt 3.3 überein. Schließlich wird in Abschnitt 3.7.5 die starke Abhängigkeit der Diffusionskonstanten von der Unregelmäßigkeit des Gitters dargestellt und mit der Theorie aus 3.5 verglichen. Das Simulationsprogramm benutzt die Formeln aus Abschnitt 3.6.1. Die Parameter werden so wie in Abschnitt 3.6.4 beschrieben verwendet.

#### 3.7.1 Simulationsgenauigkeit und Bedeutung der Wahl der Anfangsbedingungen

Die Ausbreitung im exakten Gitter ist rein deterministisch und hängt somit strenggenommen von den Anfangsbedingungen ab. Um festzustellen, wie stark diese Abhängigkeit ist, wurde das mittlere Abstandsquadrat bei einer Simulation in einem exakten Gitter mit  $d/l_0$  nach der Zeit  $t = 10^6 l_0/c$  jeweils für Photonen berechnet, die in einem Winkelbereich von  $0,6^\circ$  gestartet worden sind (jeweils 100 Photonen). Die Standardabweichung der sich ergebenden Werte beträgt  $5,277 \cdot 10^8 l_0$ . Der Mittelwert aller 10000 zwischen  $-\frac{\pi}{6}$  und  $0$  gestarteten Photonen liegt bei  $6,417 \cdot 10^9 l_0$ . Somit beträgt die Standardabweichung 8,2% des Mittelwertes. Die Abweichungen scheinen rein zufällig verteilt zu sein, d.h. es konnte kein Winkelbereich festgestellt werden, in dem die mittlere quadratische Abweichung (ebenso wie der Mittelpunkt der Photonverteilung) systematisch in eine Richtung abweicht. Man kann also gute, von den Anfangsbedingungen nahezu unabhängige, Mittelwerte erhalten, wenn man die Simulation mit einer ausreichenden Photonenanzahl durchführt, wobei die Photonen entweder mit zufälligen Winkeln oder verteilt über einen Winkelbereich gestartet werden.

Bei unregelmäßigen Gittern hängen die Simulationsergebnisse natürlich von dem verwendeten (zufällig erzeugten) Gitter ab. Um diese Abhängigkeit zu untersuchen, wurde das mittlere Abstandsquadrat von 10000 Photonen

nach der Zeit  $t = 10000 l_0/c$  für fünf verschiedene Startpunkte in einem Gitter mit  $\delta r = 0,3$  berechnet. Da die verwendeten Gitter sehr groß sind, entspricht eine Simulation mit einem Startpunkt, der in einem anderen Bereich des Gitters liegt, ungefähr einer Simulation in einem anderen Gitter. Die Standardabweichung der Ergebnisse beträgt  $542 l_0$ ; dies entspricht  $0,9\%$ . Die Wahl des Gitters (und des Startpunktes) hat also nahezu keine Auswirkungen auf das Simulationsergebnis.

Bei der Simulationen mit C++ wurden double-precision-Variablen, also Variablen mit doppelter Genauigkeit, verwendet. Die Genauigkeit liegt somit bei mindestens 10 signifikanten Stellen. Damit konnte bei der Simulation der in Abschnitt 3.6.2 beschriebenen speziellen Photonenbahnen bis zur Zeit  $t = 100000 l_0/c$  keine Abweichung von den theoretischen Bahnen festgestellt werden. Bei der Erzeugung unregelmäßiger Gitter wurde das Programm Triangle [28] verwendet, das die erwähnte Voronoi-Konstruktion durchführt. Es speichert die Koordinaten der Gitterpunkte mit maximal 6 signifikanten Stellen. Deshalb wurden keine Gitter mit Störungen kleiner als  $\delta r = 10^{-6}$  betrachtet.

### 3.7.2 Ergebnisse für das exakte Sechseckgitter

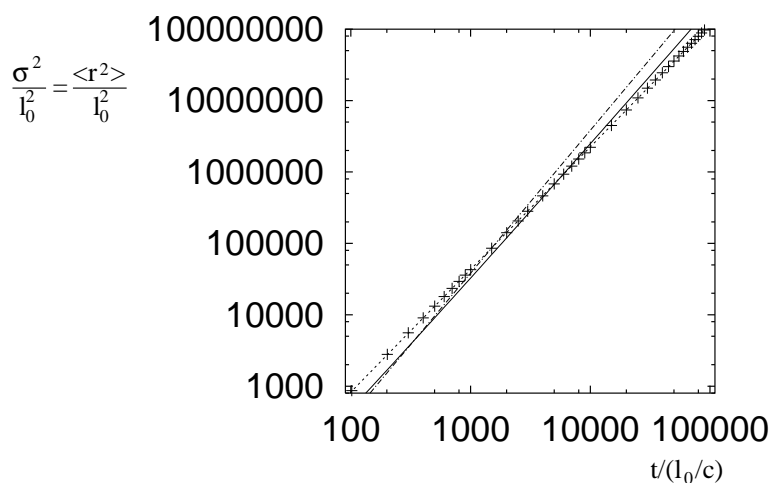


Abbildung 3.34: Das mittlere Abstandsquadrat in Abhängigkeit von der Zeit in einem exakten Gitter mit  $d/l_0 = 0.01$ . Die gestrichpunktete Linie ist die ballistische Näherung (3.19); besser passt bereits die Näherung (3.40), die sich aus dem Lévy-Walk-Modell ergibt (durchgezogene Kurve). Diese beide Näherungsformeln kommen übrigens ohne Fitparameter aus. Die gepunktete Linie ist ein angefittetes Potenzgesetz. Es ergibt sich ein Exponent von  $1,72$ .

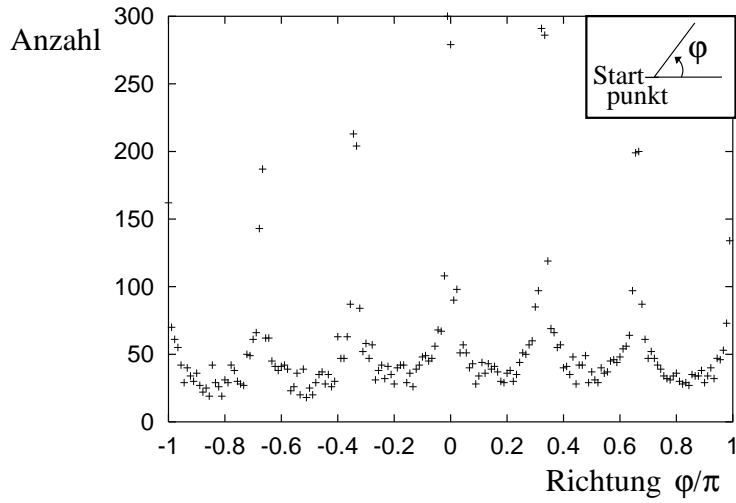


Abbildung 3.35: Anzahl der Photonen, die in einem  $2^\circ$ -Intervall um eine bestimmte Richtung  $\varphi$  liegen ( $\varphi = 0$ : Photonen rechts vom Startpunkt,  $\varphi = \frac{\pi}{2}$ : Photonen oberhalb des Startpunktes usw.). Die Simulation wurde für ein exaktes Gitter mit  $d/l_0 = 0,1$  zum Zeitpunkt  $t = 100000 l_0/c$  ausgewertet.

In Abbildung 3.19 wurde bereits die Zeitabhängigkeit des mittleren Abstandsquadrates der Simulationen für ein exaktes Gitter mit  $d/l_0 = 0.1$  mit dem Ergebnis des Lévy-Walk-Modells verglichen. In Abbildung 3.34 ist ein solcher Vergleich für  $d/l_0 = 0.01$  dargestellt. Der Exponent des angefitzten Potenzgesetzes ist wieder 1,72. Bei einem Gitter mit  $d/l_0 = 1$  ergibt sich übrigens 1,71 als Exponent. Die zweite Nachkommastelle dieser Exponenten kann sich geringfügig ändern, wenn man den Fit über andere Zeitbereiche durchführt (hier wurde immer von  $t = 0$  bis  $t = 100000 l_0/c$  gefittet), die Genauigkeit der Exponenten beträgt also ungefähr  $\pm 0,02$ . Das mittlere Abstandsquadrat wächst mit der Zeit wie ein Potenzgesetz an, wobei keine Abhängigkeit des Exponenten von  $d/l_0$  festgestellt werden kann. Die einzige Abhängigkeit von  $d/l_0$  steckt im Vorfaktor, wie übrigens auch bei der Lévy-Walk-Näherungsformel (3.40): Dort hängt nur die effektive Geschwindigkeit im Vorfaktor  $c_{eff}^2$  von  $d/l_0$  ab.

Interessant an der Photonverteilung im exakten Gitter war auch die Sternform (siehe Abbildung 3.4 links). In Abbildung 3.35 ist die Anzahl der Photonen, die in einem  $2^\circ$ -Intervall um eine bestimmte Richtung  $\varphi$  liegen, dargestellt. Die meisten Photonen liegen bei Richtungen der Gitterhauptachsen, d.h. bei  $\varphi = 0$  (rechts vom Startpunkt),  $\varphi = \pm \frac{\pi}{3}$ ,  $\varphi = \pm \frac{2\pi}{3}$  und  $\varphi = \pm \pi$  (links vom Startpunkt). Dies entspricht der Richtungsabhängigkeit, die man auch aus dem Lévy-Walk-Modell erhält (siehe Abbildung 3.21).

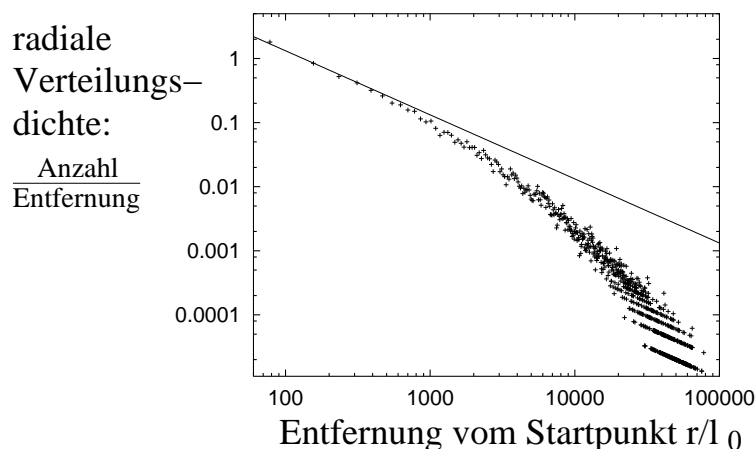


Abbildung 3.36: Doppeltlogarithmische Darstellung der radialen Verteilungsdichte zur Zeit  $t = 100000 l_0/c$  in einem exakten Gitter mit  $d/l_0 = 1$ : Hierzu wurde die Anzahl der Photonen bestimmt, die in einem bestimmten Intervall rund um eine Entfernung  $r$  (gemessen vom Startpunkt aus) liegen. Um die Verteilungsdichte zu erhalten wurde diese Anzahl durch  $r$  geteilt. Die Linie entspricht einer radialen Wahrscheinlichkeitsdichte proportional zu  $1/r$  wie man sie in Gleichung (3.41) aus dem Lévy-Walk-Modell erhält.

Abbildung 3.36 zeigt die radiale Photonverteilungsdichte in Abhängigkeit von der Entfernung  $r$  vom Startpunkt. Für kurze Entfernungen (Entfernung  $r < 1000 l_0$ ) fällt diese Verteilung in grober Näherung wie  $1/r$  ab (durchgezogene Linie). Dies stimmt mit der Theorie überein: Beim Lévy-Walk-Modell wurde eine radiale Wahrscheinlichkeitsdichte berechnet, die wie  $1/r$  abfällt [Gleichung (3.41)]. Der stärkere Abfall bei den Simulationsergebnissen für größere Entfernungen hängt mit der endlichen Simulationszeit zusammen. Beim Lévy-Walk-Modell wurde die Analyse der Wahrscheinlichkeitsdichte für den Grenzfall  $t \rightarrow \infty$  durchgeführt. Für endliche Zeiten ergibt sich eine stärkerer Abnahme, da sich in großen Entfernungen dann noch nicht so viele Photonen aufhalten wie im sehr theoretischen Grenzfall  $t \rightarrow \infty$ .

### 3.7.3 Skalengesetz und Momentenanalyse für die Photonverteilung

Bei der Betrachtung der Photonverteilung im exakten Gitter zu unterschiedlichen Zeitschritten kann man feststellen, dass diese immer sternförmig ist: Zu unterschiedlichen Zeiten unterscheiden sich nur die Größenskalen, die Form der Photonverteilung bleibt nahezu unverändert (siehe Abbildung 3.37). Bei ballistischer Ausbreitung würde die Größe der Verteilung proportional zur Zeit größer werden. Dies ist hier nicht der Fall: Man



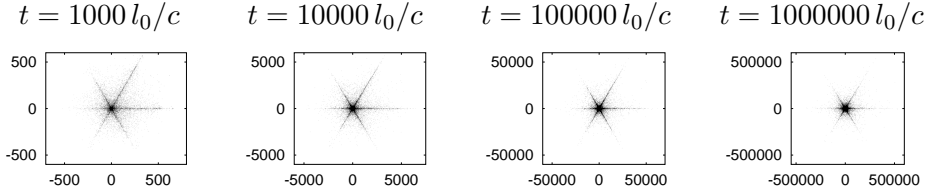


Abbildung 3.37: Photonverteilungen im exakten Gitter mit  $d/l_0 = 0,1$  für verschiedene Zeiten. Die Form der Verteilungen ist ähnlich, nur die Größenskalen sind verschieden. Alle Längen sind in Einheiten von  $l_0$  gegeben.

erkennt deutlich, dass die Größe der Verteilungsmuster weniger stark als proportional zur Zeit zunimmt; deshalb nimmt die Größe der Sterne in Abbildung 3.37 von links nach rechts ab.

Im Folgenden wird ein Skalengesetz angesetzt und mit einer Momentenanalyse überprüft. Die Zeiten verstehen sich in Einheiten von  $l_0/c$ , die Längen in Einheiten von  $l_0$ . Der Ansatz für das Skalengesetz lautet:

$$P(x, y, t) = \frac{1}{t^{2\alpha}} P\left(\frac{x}{t^\alpha}, \frac{y}{t^\alpha}, 1\right) \quad (3.59)$$

Dabei ist  $P(x, y, t)$  die Photonverteilung und  $\alpha$  eine positive Zahl. Der Faktor  $\frac{1}{t^{2\alpha}}$  ist für die Normierung notwendig. Da wie oben beschrieben die Ausdehnung der Verteilungen langsamer zunimmt als die Zeit, wird  $\alpha < 1$  erwartet (Bei ballistischer Ausbreitung wäre  $\alpha = 1$ ). Um das Skalengesetz zu überprüfen, werden die Momente von  $P(x, y, t)$  berechnet:

$$\begin{aligned} \langle |\vec{r}(t)|^q \rangle &= \int \int (x^2 + y^2)^{q/2} P(x, y, t) dx dy \\ &= \int \int (x^2 + y^2)^{q/2} \frac{1}{t^{2\alpha}} P\left(\frac{x}{t^\alpha}, \frac{y}{t^\alpha}, 1\right) dx dy \\ &= \int \int (t^{2\alpha} x'^2 + t^{2\alpha} y'^2)^{q/2} \frac{1}{t^{2\alpha}} P(x', y', 1) t^{2\alpha} dx' dy' \\ &= t^{\alpha q} \int \int (x'^2 + y'^2)^{q/2} P(x', y', 1) dx' dy' \\ &= t^{\alpha q} \langle |\vec{r}(1)|^q \rangle \end{aligned}$$

Dabei wurden die Substitutionen  $x' = x/t^\alpha$  und  $y' = y/t^\alpha$  verwendet.

Berechnet man die Momente  $\langle |\vec{r}(t)|^q \rangle$  aus den Simulationsdaten für mehrere Zeiten, so kann man als Steigung der doppeltlogarithmischen Darstellung von  $\langle |\vec{r}(t)|^q \rangle / \langle |\vec{r}(1)|^q \rangle$  für jedes  $q$  das Produkt  $\alpha q$  bestimmen. In Abbildung 3.38 ist das Ergebnis dieser Prozedur für ein exaktes Gitter mit

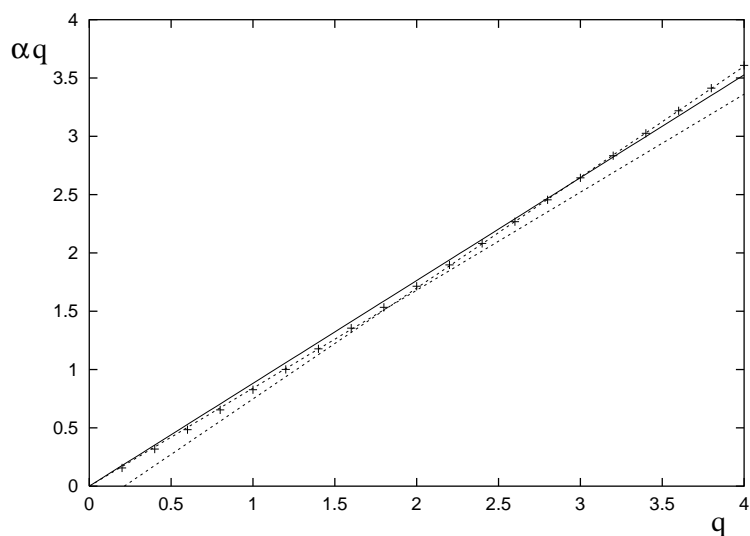


Abbildung 3.38: Momentenanalyse für die Photonenausbreitung in einem exakten Sechseckgitter mit  $d/l_0 = 1$ . Hierfür werden die Exponenten  $\alpha q$  aus der Zeitentwicklung der Momente  $\langle |\vec{r}(t)|^q \rangle \propto t^{\alpha q}$  in Abhängigkeit von  $q$  bestimmt. Die Punkte stammen aus den Simulationsergebnissen, die durchgezogene Linie ist eine angefittete Ursprungsgerade, für die sich die Steigung  $\alpha = 0,88$  ergibt. Die gestrichelten Linien sind Geraden, die für  $q < 2$  bzw.  $q > 2$  angefittet wurden. Sie haben die Steigungen  $\alpha = 0,84$  bzw.  $\alpha = 0,95$ .

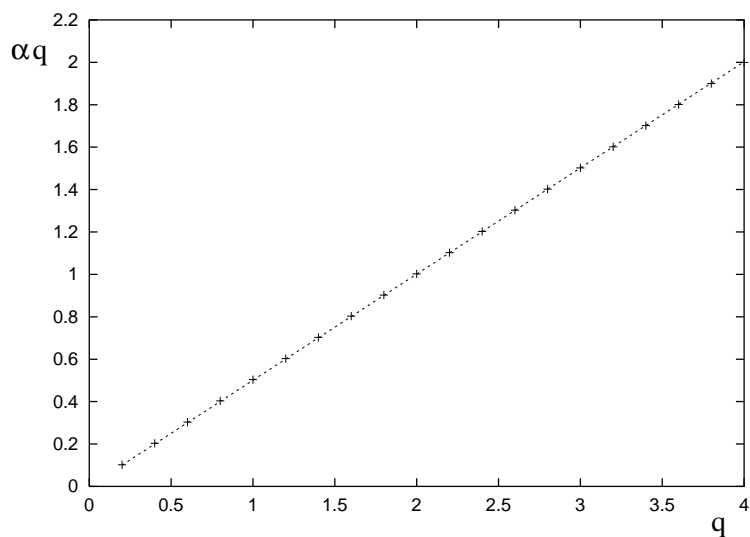


Abbildung 3.39: Momentenanalyse für die Photonenausbreitung in einem unregelmäßigen Sechseckgitter mit  $\delta r = 0,3 l_0$  und  $d/l_0 = 1$ . Die Punkte stammen aus den Simulationsergebnissen, die Linie ist eine angefittete Ursprungsgerade, für die sich die Steigung  $\alpha = 0,50$  ergibt. Dies ist genau die Steigung, die man bei einem Diffusionsprozess theoretisch erwartet.

$d/l_0 = 1$  dargestellt. Die durchgezogene Linie ist eine angefittete Ursprungsgerade mit der Steigung  $\alpha = 0,88$ . Sie läuft allerdings nicht exakt durch die aus den Simulationsdaten berechneten Punkte. Insbesondere beim mittleren Abstandsquadrat (also für  $q = 2$ ) ist der Wert der Fitgeraden etwas zu groß: In diesem Gitter ist  $\sigma^2 = \langle |\vec{r}(t)|^2 \rangle \propto t^{1,71}$ , gemäß der Ausgleichsgeraden wäre allerdings  $\sigma^2 \propto t^{\alpha q} = t^{1,76}$ . Die aus der Simulation gewonnenen Punkte lassen sich am besten durch zwei Fitgeraden beschreiben, eine für  $q < 2$  mit Steigung 0,84, die andere für  $q > 2$  mit Steigung 0,95. In [29] betrachten D.N. Armstead, B.R. Hunt und E. Ott die Momentenanalyse bei einem Billiardproblem, für das  $\sigma^2 = t \ln t$  gilt. Sie erhalten ebenfalls einen Knick bei  $q = 2$ , allerdings ist der Unterschied zwischen den Steigungen (für  $q < 2$ : 0,5; für  $q > 2$ : 1) wesentlich größer als bei der hier untersuchten Photonenausbreitung. Der Knick in der Momentenanalyse könnte dafür sprechen, dass  $\sigma^2$  nicht genau einem Potenzgesetz gehorcht und auch die Skalenrelation (3.59) nicht exakt erfüllt ist, sondern dass jeweils noch ein anderer Anteil (z.B. ein logarithmischer Beitrag) eine Rolle spielt. Die aus dem Lévy-Walk-Modell hergeleitete Beziehung (3.40) enthält einen logarithmischen Anteil, der eine nichttriviale Momentenanalyse erwarten läßt. In Abbildung 3.19 wurde allerdings bereits gezeigt, dass ein Potenzgesetz besser mit den Simulationsergebnissen übereinstimmt als (3.40). Da die Abweichungen von einer einzigen Geraden in der Momentenanalyse außerdem sehr klein sind (wesentlich kleiner als dies in [29] der Fall ist), ist das Potenzgesetz und (3.59) sehr gut erfüllt.

In einem unregelmäßigen Gitter erhält man eine zweidimensionale Gaußförmige Photonerverteilung. Für eine solche gilt das Skalengesetz (3.59) mit  $\alpha = \frac{1}{2}$  und die Momente ergeben sich zu  $\langle |\vec{r}(t)|^q \rangle \propto t^{q/2}$ . Führt man eine Momentenanalyse für die Simulationsergebnisse in einem unregelmäßigen Gitter durch (siehe Abbildung 3.39), erhält man tatsächlich  $\alpha = 0,50$ , d.h. die Momentenanalyse bestätigt die diffusive Photonenausbreitung im unregelmäßigen Gitter mit einer gaußförmigen Photonerverteilung.

### 3.7.4 Diffusion im Grenzfall sehr unregelmäßiger Gitter

Für hinreichend unregelmäßige Gitter erhält man eine diffusive Photonenausbreitung, die mit dem Random-Walk-Modell mit rein zufälligen Kanalwechseln aus Abschnitt 3.3.1 beschrieben werden kann (welche Stärke an Unregelmäßigkeiten hierfür hinreichend ist, wird in Abschnitt 3.7.5 näher erklärt). Der Random-Walk besteht aus Schritten konstanter Länge. Seine gauß'sche Photonerverteilung stimmt gut mit den Ergebnissen der Simulation überein, wie man in den Abbildungen 3.4 rechts und 3.40 erkennen kann.

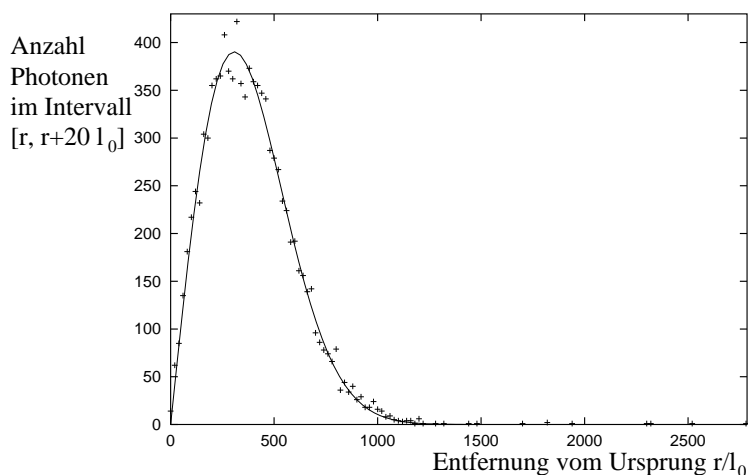


Abbildung 3.40: Anzahl der Photonen, die im Entfernungsintervall  $[r, r + \Delta r]$  liegen, in Abhängigkeit von der Entfernung vom Ursprung  $r$  nach der Zeit  $t = 100000 l_0/c$  in einem unregelmäßigen Gitter ( $\delta r = 0,3 l_0$ ) mit  $d/l_0 = 0,1$ . Die Ergebnisse aus der Simulation (insgesamt 10000 Photonen) sind als Kreuze dargestellt, die Linie ist eine angefittete Kurve der Form  $ar \cdot \exp(-br^2)$ , d.h. eine Gaußverteilung in Polarkoordinaten.

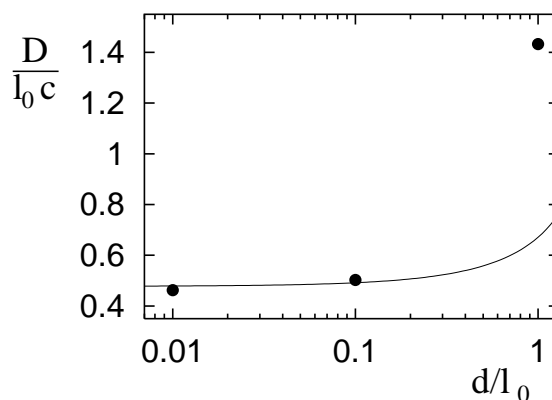


Abbildung 3.41: Diffusionskonstante in Abhängigkeit vom Verhältnis der Kanaldicke  $d$  zur Kanallänge  $l_0$  in Gittern großer Unregelmäßigkeit ( $\delta r = 0,3$ ). Die Punkte sind Ergebnisse aus Simulationen; die durchgezogene Kurve ist das Ergebnis (3.17) des Random-Walk-Modells mit zufälligen Kanalwechseln. Die Übereinstimmung ist für  $d/l_0 = 0,1$  und  $d/l_0 = 0,01$  sehr gut, bei  $d/l_0 = 1$  liegt der simulierte Wert jedoch wesentlich über der theoretischen Kurve. Dies liegt daran, dass bei höherem Wasseranteil (also größerem  $d/l_0$ ) das Gitter umso unregelmäßiger sein muß, damit die Näherung der unabhängigen Kanalwechsel zutrifft: In einem fast nur aus Flüssigkeit bestehendem Schaum sind weitreichende Korrelationen wesentlich wahrscheinlicher als in einem Schaum mit sehr dünnen Wänden, in dem das Photon sehr viel häufiger reflektiert wird (siehe dazu auch Abschnitt 3.7.5).

Das mittlere Abstandsquadrat und somit auch die Diffusionskonstante kann mittels (3.17) berechnet werden. Damit erhält man für ausreichend unregelmäßige Gitter eine sehr gute Übereinstimmung mit den Simulationsergebnissen (siehe Abbildung 3.41). Wann ein Gitter ausreichend unregelmäßig ist, wird in Abschnitt 3.7.5 untersucht. Interessant ist, dass die Diffusionskonstante in diesem Modell mit größerem  $d/l_0$ , also höherem Flüssigkeitsanteil, zunimmt. Dies unterscheidet sich vom experimentellen Verhalten [1] (siehe auch Abbildung 3.1). Im nächsten Kapitel wird gezeigt, dass im erweiterten Ausbreitungsmodell, bei dem die Photonen sich auch durch die Luft bewegen können, die Diffusionskonstante (wie im Experiment) mit größerem  $d/l_0$  abnimmt.

Die Ausbreitung in stark unregelmäßigen Gittern ergibt sich auch als Grenzfall der Formel (3.45) mit (3.46) für große  $\delta r$ . Sie beschreibt den Übergang von Gittern mit nur sehr schwachen Unregelmäßigkeiten bis hin zu stark unregelmäßigen Gittern und wird im nächsten Abschnitt näher betrachtet

### 3.7.5 Abhängigkeit der Diffusionskonstanten von der Unordnung im Gitter

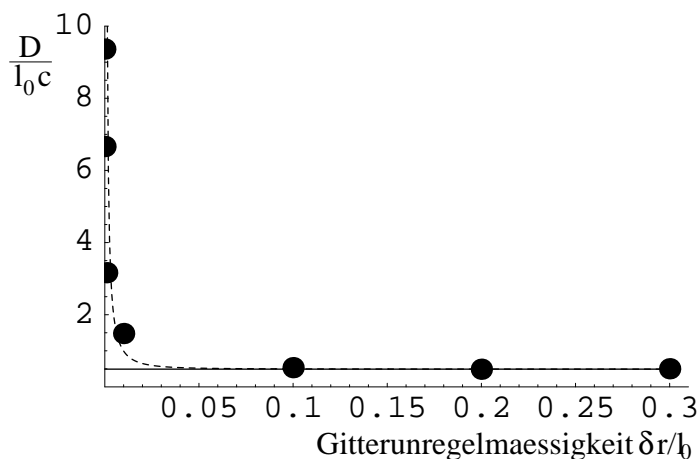


Abbildung 3.42: Diffusionskonstante in Abhängigkeit der Unregelmäßigkeit  $\delta r$  der Gitter für  $d/l_0 = 0,1$ . Die Punkte sind die Simulationsergebnisse. Für kleine  $\delta r$  werden sie sehr groß, was aus dem Übergang zur superdiffusiven Ausbreitung resultiert. Für große  $\delta r$  ergibt sich der Random-Walk-Grenzfall (3.17), eingezeichnet als durchgezogene Linie. Die gestrichelte Linie ist (3.45) mit  $p(\delta r)$  aus (3.46), diese Näherung beschreibt die Grenzfälle und das generelle Verhalten gut, auch wenn für einzelne (insbesondere für sehr kleine)  $\delta r$  die Abweichung von den Simulationsergebnissen recht groß sein kann.

Formel (3.45) mit  $p(\delta r)$  aus (3.46) beschreibt die Ausbreitung in Gittern beliebiger Unregelmäßigkeit. Insbesondere kann man damit die Abhängigkeit der Diffusionskonstante von der Stärke der Störungen berechnen (siehe Abbildung 3.42). Für den Grenzfall verschwindender Störungen divergiert die Diffusionskonstante, was der superdiffusiven Ausbreitung entspricht. Ist andererseits die Unordnung sehr groß, so erhält man das Ergebnis des Random-Walk-Modells mit zufälligen Kanalwechslern. Dabei liefert (3.45) einen Wert, der nicht mehr als 10% vom Random-Walk-Ergebnis abweicht, wenn  $p(\delta r) < 0,567$  und somit  $\delta r > 0,37d$  ist (die Werte wurden aus einer numerisch berechneten Wertetabelle von (3.45) entnommen). Für  $d/l_0 = 0,1$  wird die Diffusionskonstante also für Gitter mit  $\delta r < 0,037l_0$  wesentlich größer als im Random-Walk-Modell; für  $d/l_0 = 1$  ist dies bereits für Gitter mit  $\delta r < 0,37l_0$  der Fall (siehe auch Abbildung 3.43). Aus diesem Grund ist in Abbildung 3.41 der Wert für  $d/l_0 = 1$  wesentlich größer als der theoretische Wert des Random-Walk-Grenzfalles. Um eine erhöhte Diffusionskonstante zu beobachten, benötigt man also entweder ein sehr gut geordnetes Gitter oder einen hohen Flüssigkeitsanteil.

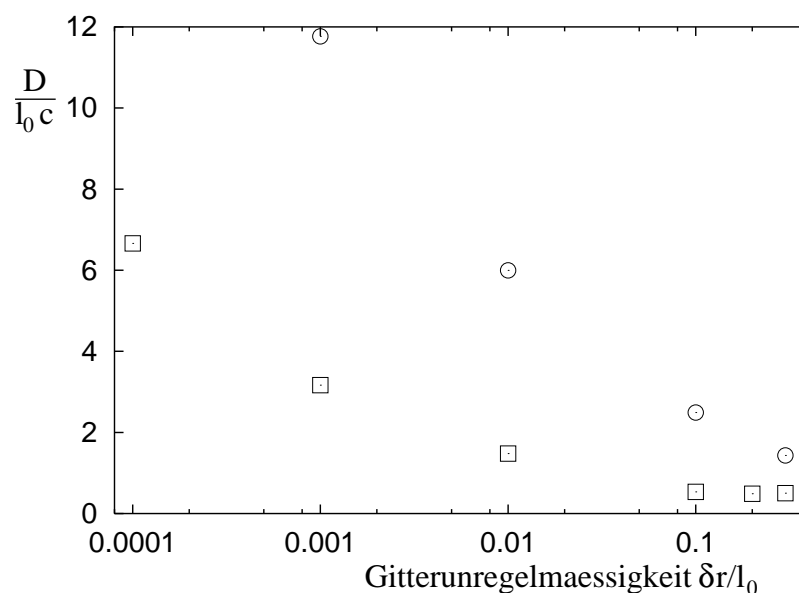


Abbildung 3.43: Diffusionskonstante in Abhängigkeit der Unregelmäßigkeit  $\delta r$  (hier logarithmisch aufgetragen) der Gitter für  $d/l_0 = 0,1$  (Quadrate) und  $d/l_0 = 1$  (Kreise). Für  $d/l_0 = 0,1$  erhält man für große  $\delta r$  eine konstante Diffusionskonstante (mit dem Wert, der sich aus dem Random-Walk-Modell mit zufälligen Kanalwechslern ergibt). Für  $d/l_0 = 0,1$  hingegen sind die Unregelmäßigkeiten noch zu klein, um den Random-Walk-Grenzfall zu erreichen.

Bei einer Photonenbahn auftretene Winkel:

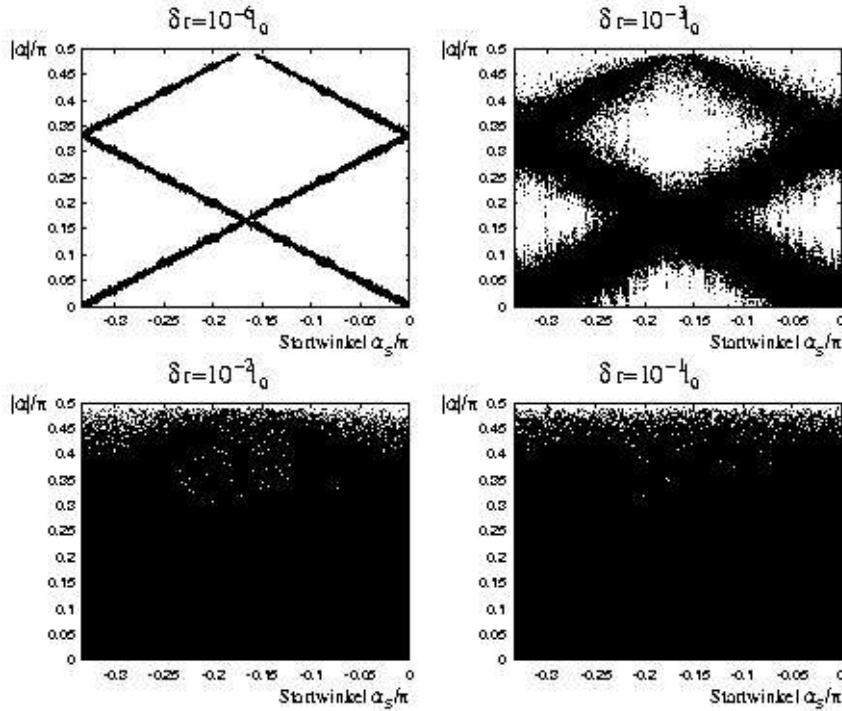


Abbildung 3.44: Bei den Simulationen im Laufe einer Photonenbahn bis zur Zeit  $t = 100000l_0/c$  auftretene Winkel in Abhängigkeit des Startwinkels. Bei allen Gittern war  $d/l_0 = 0,1$ .

Den Übergang von der Photonenausbreitung im exakten Gitter zur Ausbreitung im unregelmäßigen Gitter kann man sich auch sehr gut veranschaulichen, wenn man die Winkel betrachtet, die bei einem Photon, welches mit dem Startwinkel  $\alpha_S$  gestartet wurde, im Laufe einer Simulation auftreten können. In Abbildung 3.44 sind diese möglichen Winkel in Abhängigkeit von  $\alpha_S$  für Gitter mit unterschiedlich starken Unregelmäßigkeiten dargestellt. Im Laufe einer Photonenbahn im exakten Gitter dürfen, wie in Abschnitt 3.2.1 gezeigt wurde, nur drei (betragsmäßig) verschiedene Winkel auftreten. In einem fast exakten Gitter (z.B. für  $\delta r = 10^{-6}l_0$ ) weichen die tatsächlich vorkommenden Winkel nur minimal von diesen drei Werten ab. Mit zunehmender Unordnung werden auch die Abweichungen immer größer. Bei  $\delta r = 0,1l_0$  sind die ursprünglich erlaubten Winkel schließlich nicht mehr zu erkennen. Die Häufigkeit, mit der ein Winkel vorkommt, hängt nicht mehr vom Startwinkel ab. Dies verdeutlicht, wie die Unordnung des Gitters zum Verlust der Abhängigkeit eines Winkels von früheren Winkeln und somit auch zur Abnahme weitreichender Korrelationen führt. Nach Abschnitt

3.2.1 kommt in jedem zweiten Kanal ein Winkel zwischen  $0$  und  $\frac{\pi}{6}$  und in den Kanälen dazwischen entweder ein Winkel zwischen  $\frac{\pi}{6}$  und  $\frac{\pi}{3}$  oder einer zwischen  $\frac{\pi}{3}$  und  $\frac{\pi}{2}$  vor. Die Winkel zwischen  $0$  und  $\frac{\pi}{6}$  tauchen im Verlaufe einer Bahn also im Mittel doppelt so oft auf wie andere Winkel. Dies erkennt man auch in Abbildung 3.44: Für  $\delta r = 0, 1 l_0$  liegen die Punkte im Bereich unterhalb  $\frac{\pi}{6}$  wesentlich dichter als oberhalb.

### 3.8 Gültigkeitsbereich des Photon-Channelling-Modells

In diesem Kapitel wurde vorausgesetzt, dass die Photonen an der Grenzfläche von der Flüssigkeit zur Luft immer reflektiert werden und somit die Flüssigkeit nie verlassen. Diese Einschränkung wird im nächsten Kapitel fallengelassen und dann untersucht, inwieweit die Ergebnisse dieses Kapitels weiterhin Bestand haben.

Eine andere Einschränkung liefert das gewählte, idealisierte Modell für einen zweidimensionalen, trockenen Schaum: Im Modell befinden sich bei den Verzweigungstellen immer scharfe Ecken. In einem echten zweidimensionalen Schaum (z.B. an einer Flüssigkeitsoberfläche) wären diese Stellen immer abgerundet. Diese Abrundungen haben nur einen sehr kleinen Einfluss, so lange sie im Vergleich zur Kanallänge einen vernachlässigbaren Bereich einnehmen, d.h. so lange der Kanal selber noch durch zwei parallele gerade Linien begrenzt wird. Im Grenzfall sehr feuchter Schäume jedoch gleicht ein zweidimensionaler Schaum einer mit Kreisen (Luftblasen) parketierten Ebene (siehe Abbildung 3.45). In diesem Grenzfall ist das hier verwendete Modell der Sechseckgitter offensichtlich nicht mehr gültig. Die Photonenausbreitung mit grundsätzlicher Totalreflektion im Grenzfall sehr feuchter

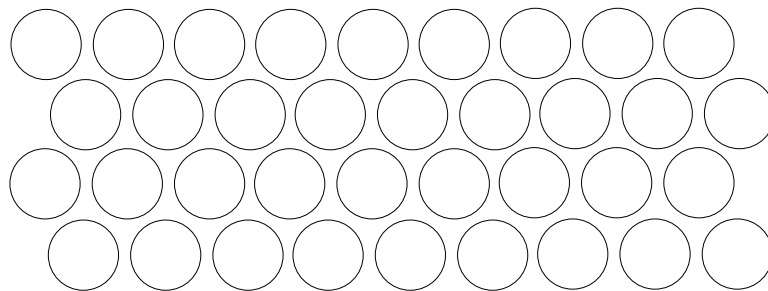


Abbildung 3.45: Modell für einen sehr feuchten zweidimensionalen Schaum, der nur noch aus einzelnen Luftblasen in Flüssigkeit besteht. Solange noch keine unendlich langen ballistischen Flugbahnen zwischen den Luftblasen möglich sind, breiten sich Teilchen, die an den Grenzlinien reflektiert werden, nach [30] diffusiv aus.



Schäume entspricht den von J. Machta und R. Zwanzig in [30] bzw. den von N. Armstead, B.R. Hunt und E. Ott in [29] untersuchten Billiardproblemen. Dort wird ein sogenanntes Lorentzgas untersucht, d.h. es wird die Ausbreitung von Teilchen zwischen totalreflektierenden Kreisen untersucht. Für den Fall, dass es unendlich lange ballistische Photonenbahnen gibt, erhielten die Autoren in [29] anomale Diffusion: Für große Zeiten ist  $\sigma^2 \propto t \ln t$ . Allerdings ist fraglich, ob man in diesem Fall noch von einem Schaum sprechen kann und außerdem ist es nicht sehr realistisch, dass sich einzelne, weit voneinander entfernte Luftblasen in einem Gitter anordnen. Für den bei Schäumen realistischeren Fall, dass die Luftblasen so dicht liegen, dass keine durchgängige ballistische Bahn möglich ist, zeigten J. Machta und R. Zwanzig in [30], dass die Teilchen sich diffusiv ausbreiten: Jedes Teilchen bleibt in einem Kreiszwischenraum längere Zeit gefangen und verliert über viele Reflektionen hinweg jegliche Information über seine Herkunft (die Teilchen in einem solchen Kugelzwischenraum bilden ein ergodisches System). Erst nach langer Zeit findet ein Wechsel in einen benachbarten Kugelzwischenraum statt. Das Teilchen wechselt also von Kugelzwischenraum zu Kugelzwischenraum, wobei jeder Wechsel immer rein zufällig und unabhängig von der bisherigen Teilchenbahn stattfindet. Dies führt somit zu einem diffusiven Ausbreitungsverhalten.

Im Falle feuchter Schäume ist das in diesem Kapitel untersuchte Photon-Channelling-Modell also nicht mehr gültig, insbesondere tritt keine Superdiffusion mehr auf. Zur Gültigkeit des Modells im Grenzfalle sehr trockener Schäume folgen am Ende des nächsten Kapitels in Abschnitt 4.4 noch einige Überlegungen.



## Kapitel 4

# Ausbreitung durch Flüssigkeit und Luft

In Kapitel 3 wurde für trockene zweidimensionale Schäume das Ausbreitungsverhalten der Photonen untersucht, die sich nur innerhalb der Wände bewegen: Kam ein Photon an die Grenzfläche von der Flüssigkeit zur Luft (bzw. zum dünneren Medium), so wurde es immer totalreflektiert. Die grundsätzliche Totalreflektion wird in diesem Kapitel aufgegeben, d.h. die Photonen werden an einer Grenzfläche mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit reflektiert oder transmittiert. Somit wird hier ganz allgemein das Ausbreitungsverhalten von Photonen untersucht, welches durch geometrische Optik sowie Reflektions- und Transmissionswahrscheinlichkeiten zu erklären ist. Einfachheitshalber wird weiterhin ein zweidimensionaler, trockener Schaum betrachtet. Wie in Kapitel 3 beschrieben, wird ein solcher aus einem Voronoi-Gitter durch Ersetzen der Gitterlinien durch Flüssigkeitskanäle einer konstanten Dicke  $d$  gewonnen.

Zunächst werden in Abschnitt 4.1 die Erweiterungen des Simulationsprogrammes beschrieben; in Abschnitt 4.2 folgen einige theoretische Überlegungen. Simulationsergebnisse und Ergebnisse der Theorie sind in Abschnitt 4.3 zusammengestellt. Zum Abschluß wird in 4.4 die Gültigkeit dieses erweiterten Modells diskutiert.

### 4.1 Vorgehen bei den Simulationen

Zur Simulation des Ausbreitungsverhaltens in beiden Medien wird das Simulationsprogramm aus Kapitel 3 ergänzt: Die Totalreflektion wird aufgegeben; trifft ein Photon auf die Grenzlinie zwischen Flüssigkeit und Luft, so wird es nur mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit reflektiert. Wird es reflektiert, so wird die Photonenausbreitung wie in Abschnitt 3.6 beschrieben simuliert. Wird es transmittiert, so breitet es sich in einer Luftblase aus, wird unter

Umständen innerhalb dieser Luftblase mehrmals reflektiert, bevor es wieder in einen Flüssigkeitskanal eintritt. Die Simulation der Ausbreitung im dünneren Medium wird in Abschnitt 4.1.2 beschrieben. Der nächsten Abschnitt erklärt zunächst die Einbindung von Reflektionswahrscheinlichkeiten und Brechung in das Simulationsprogramm.

#### 4.1.1 Verhalten an Grenzflächen

An einer Grenzfläche (im zweidimensionalen strenggenommen eine Grenzlinie) wird ein Photon mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit, gegeben durch die Reflektivität  $R$ , reflektiert, mit der Wahrscheinlichkeit  $(1 - R)$  wird es transmittiert. Die Reflektivität  $R$  läßt sich mit den Fresnel'schen Formeln folgendermaßen berechnen [31]:

$$\begin{aligned} \text{bei parallel polarisiertem Licht:} & \quad R = \left( \frac{\tan(\beta_1 - \beta_2)}{\tan(\beta_1 + \beta_2)} \right)^2 \\ \text{bei senkrecht polarisiertem Licht:} & \quad R = \left( \frac{\sin(\beta_1 - \beta_2)}{\sin(\beta_1 + \beta_2)} \right)^2 \end{aligned} \quad (4.1)$$

Bei parallel polarisiertem Licht liegt der Vektor des elektrischen Feldes  $\vec{E}$  in der Ebene, in der der ein- und auslaufende Strahl verlaufen; dies ist in dem hier betrachteten zweidimensionalen Modell die Ebene selber. Bei senkrecht polarisiertem Licht liegt der  $\vec{E}$ -Vektor senkrecht zur Ebene. Der Einfallswinkel  $\beta_1$  ist der Winkel zwischen Strahl und der Grenzflächennormalen in dem Medium, aus dem der Lichtstrahl kommt; der Brechungswinkel  $\beta_2$  wird zwischen dem transmittiertem Strahl und der Normalen gemessen. Nach dem Brechungsgesetz ergibt sich  $\beta_2$  aus  $\beta_1$  gemäß

$$\beta_2 = \arcsin \left( \frac{n_1}{n_2} \sin \beta_1 \right). \quad (4.2)$$

Dabei ist  $n_1$  der Brechungsindex des Mediums, aus dem das Photon kommt und  $n_2$  der Index des angrenzenden Mediums. Zu beachten ist, dass  $R = 1$  statt der Gleichungen (4.1) gilt, falls das Photon aus dem optisch dichteren Medium kommt und der Winkel  $\beta_1$  zwischen Strahl und Grenzflächennormalen größer als  $\arcsin(n_2/n_1)$  ist: In diesem Fall tritt nämlich Totalreflektion ein.

Aus den in Kapitel 3 verwendeten Winkeln  $\alpha$  ergibt sich  $\beta$  gemäß  $\beta = \frac{\pi}{2} - |\alpha|$ . Kommt ein Photon bei der Simulation an eine Grenzfläche, so wird mit dem Winkel  $\beta$ , dem Brechungsindex für die Flüssigkeit  $n_{fl}$  und dem Index der Luft  $n_g$  die Reflektivität  $R$  mit den oben genannten Formeln berechnet. Ein Zufallsgenerator entscheidet dann, ob das Photon reflektiert oder transmittiert wird. Die Reflektionswahrscheinlichkeit ist dabei  $R$ , die Transmissionswahrscheinlichkeit  $1 - R$ .

## 4.1.2 Ausbreitung im dünneren Medium

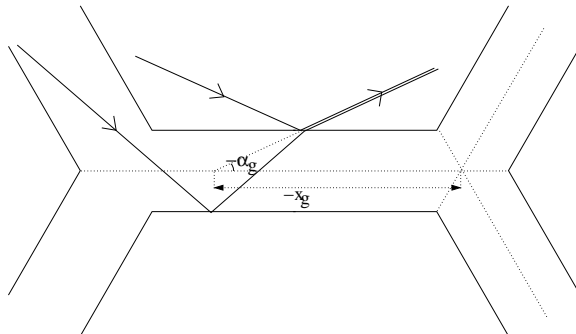


Abbildung 4.1: Die Photonenbahn in Luft ist gegeben durch die Größen  $\alpha$  und  $x$ , die den Schnittpunkt zwischen einer Kanalmittelparallelen und dem nach hinten verlängertem Photonenstrahl beschreiben. Dabei spielt es keine Rolle, ob das Photon zuvor an der Grenzfläche reflektiert wurde oder aus der Flüssigkeit kam (d.h. beide in der Abbildung dargestellten Photonen werden durch die gleichen Werte für  $\alpha$  und  $x$  beschrieben). Die Definition der Vorzeichen von  $\alpha$  und  $x$  ist dieselbe wie für Photonen in der Flüssigkeit (Abbildung 3.25).

Die Position eines Photons wird wie in Abschnitt 3.6 mit dem Kanal und den Größen  $x$  und  $\alpha$  angegeben. Hinzu kommt nun noch die Information, ob das Photon sich in der Flüssigkeit oder in der Luft befindet. Befindet sich das Photon in der Luft, so beschreibt  $x$  die Lage des ersten Schnittpunktes zwischen einem gerade nach hinten verlängertem Photonenstrahl mit einer Mittelparallelen (siehe Abbildung 4.1).

Beim Übergang eines Photons aus der Flüssigkeit in die Luft, wird der Winkel  $\alpha_g$  in der Luft zwischen Grenzfläche und Strahl mit dem Brechungsgesetz (4.2) und den Beziehungen  $\beta_1 = \frac{\pi}{2} - |\alpha_{fl}|$  und  $\alpha_g = \text{sgn}(\alpha_{fl})\frac{\pi}{2} - \beta_2$

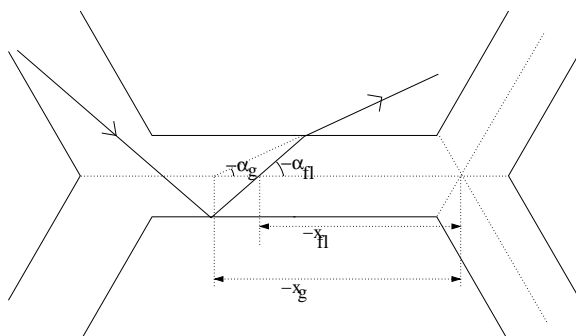


Abbildung 4.2: Beim Übergang eines Photons aus der Flüssigkeit in die Luft muss der Wert von  $x$  neu berechnet werden.

berechnet. Dabei ist  $\text{sgn}(\alpha_{fl})$  das Vorzeichen von  $\alpha_{fl}$ . Wegen der Brechung muss der Wert von  $x$  ebenfalls korrigiert werden (siehe Abbildung 4.2): Es ist  $x_g = x_{fl} + d/(2 \tan \alpha_{fl}) - d/(2 \tan \alpha_g)$ , wobei  $d$  die Dicke der Kanäle ist. Außerdem wird die Flugzeit von der Mittelparallelen bis zur Grenzfläche (mit Brechungsindex der Flüssigkeit) berechnet.

Für ein Photon in der Luft wird der Kanal berechnet, in dem es wieder eintreten wird, bzw. an dessen Grenzfläche es erneut reflektiert wird. Dazu wird aus der Position im alten Kanal, dem Winkel zum alten Kanal und dem Winkel zwischen den Kanälen mittels Sinussatz die Position  $x$  (noch ohne Brechung) in jedem möglichen neuen Kanal berechnet. Anschließend wird überprüft, welcher dieser Werte tatsächlich in Frage kommt, d.h. bei welchem Kanal die neu berechnete Position tatsächlich eine Position im Kanal angibt. Aus dem Sinussatz läßt sich auch die Flugzeit von Grenzfläche zu Grenzfläche berechnen (mit dem Brechungsindex des dünneren Mediums).

Zuletzt bestimmt der Zufallsgenerator mit den im vorherigen Abschnitt beschriebenen Wahrscheinlichkeiten, ob das Photon an der neuen Grenzfläche reflektiert wird und somit weiterhin in der Luft verbleibt, oder ob es in die Flüssigkeit eintritt. Wird das Photon reflektiert, so muss der  $x$ -Wert korrigiert werden (siehe Abbildung 4.3). Tritt das Photon erneut in die Flüssigkeit ein, so wird der wegen der Brechung korrigierte  $x$ -Wert, sowie der korrekte Winkel berechnet. Außerdem wird die Flugzeit zwischen Grenzfläche und Mittelparallelen addiert. Der nächste Schritt startet dann also entweder mit einem Photon in der Luft, für welches dann der neue Kanal gesucht wird, oder mit einem Photon in der Flüssigkeit, welches sich innerhalb des neuen Kanales bewegt, bis es an eine Verzweigung gelangt oder irgendwann nicht an der Grenzfläche reflektiert wird und somit erneut in die Luft übergeht.

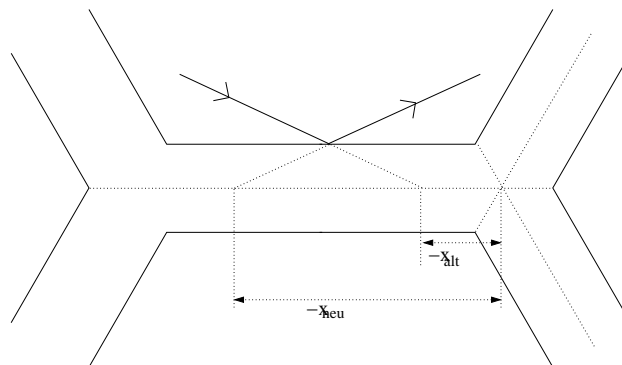


Abbildung 4.3: Wird ein Photon an der Grenzfläche von Luft zur Flüssigkeit reflektiert, so muss ein neuer Wert für die Position  $x$  berechnet werden.

## 4.2 Theoretische Überlegungen

In diesem Abschnitt werden einige Überlegungen vorgestellt, die es ermöglichen, die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Photons in der Flüssigkeit sowie die Diffusionskonstante der Photonenausbreitung grob abzuschätzen.

### 4.2.1 Die mittleren Transmissionswahrscheinlichkeiten

Zunächst wird der Quotient  $T_{fl \rightarrow g}/T_{g \rightarrow fl}$  aus der mittleren Transmissionswahrscheinlichkeit  $T_{fl \rightarrow g}$  für den Übergang eines Photons aus der Flüssigkeit in die Luft und dem entsprechenden Wert  $T_{g \rightarrow fl}$  für den Übergang aus der Luft in die Flüssigkeit bestimmt. Die Transmissionswahrscheinlichkeit  $T(\beta_1)$  für ein Photon, welches die Grenzfläche vom Medium 1 aus unter einem Winkel  $\beta_1$  trifft, lässt sich mit den Fresnel'schen Formeln (4.1) als  $T_{1 \rightarrow 2}(\beta_1) = 1 - R(\beta_1, \beta_2)$  berechnen. Dabei folgt  $\beta_2$  aus dem Brechungsgesetz (4.2). Da die Fresnel'schen Formeln bezüglich  $\beta_1$  und  $\beta_2$  symmetrisch sind, ergibt sich für ein Photon, welches aus Medium 2 unter dem Winkel  $\beta_2$  auf die Grenzfläche trifft, die gleiche Wahrscheinlichkeit  $T_{2 \rightarrow 1}(\beta_2) = T_{1 \rightarrow 2}(\beta_1)$  für eine Transmission in das Medium 1. Somit gibt es für alle Photonen, die die Grenzfläche aus der Flüssigkeit heraus mit Winkeln oberhalb des Grenzwinkels der Totalreflektion ( $\beta^* = \arcsin(n_g/n_{fl})$ ) treffen, entsprechende Photonen, die aus der Luft kommend mit der gleichen Wahrscheinlichkeit transmittiert werden. Betrachtet man nun nur die Photonen, die in der Flüssigkeit keine Totalreflektion zeigen, so ergibt sich bei Mittelung über alle diese Photonen  $T_{fl \rightarrow g}^{(\beta_{fl} < \beta^*)}/T_{g \rightarrow fl}^{(\beta_{fl} < \beta^*)} = 1$ . Da Photonen mit  $\beta_{fl} > \beta^*$  die Flüssigkeit nicht verlassen, gilt für diese  $T_{fl \rightarrow g}^{(\beta_{fl} > \beta^*)} = 0$ . Um nun also  $T_{fl \rightarrow g}/T_{g \rightarrow fl}$  als Mittelwert über alle möglichen Photonen zu erhalten, muss der Häufigkeitsanteil  $n^{(\beta_{fl} < \beta^*)}$  der Grenzflächenkontakte von Photonen mit  $\beta_{fl} < \beta^*$  berechnet werden. Dann gilt nämlich:

$$\frac{T_{fl \rightarrow g}}{T_{g \rightarrow fl}} = 1 \cdot n^{(\beta_{fl} < \beta^*)} + 0 \cdot n^{(\beta_{fl} > \beta^*)} = n^{(\beta_{fl} < \beta^*)} \quad (4.3)$$

Im Folgenden wird vorausgesetzt, dass in der Flüssigkeit alle Winkel gleichwahrscheinlich sind. Dies liegt bei den betrachteten Simulationen nahe, da beim Start der Photonen in der Flüssigkeit alle Winkel gleichhäufig vorkommen. Bei anderen Startkonfigurationen sorgen Unregelmäßigkeiten im Gitter zumindest näherungsweise dafür, dass kein Winkel wesentlich wahrscheinlicher ist als ein anderer. Zu berechnen ist also nur noch die Häufigkeit der Grenzflächenkontakte: Ein Photon, welches sich in der Flüssigkeit mit dem Winkel  $\beta_{fl}$  zur nächsten Flächennormalen ausbreitet, kommt pro Fluglänge  $l$  im Schnitt  $l \cos \beta_{fl}/d/l = \cos \beta_{fl}/d$  mal an die Grenzfläche (siehe Abbildung 4.4).

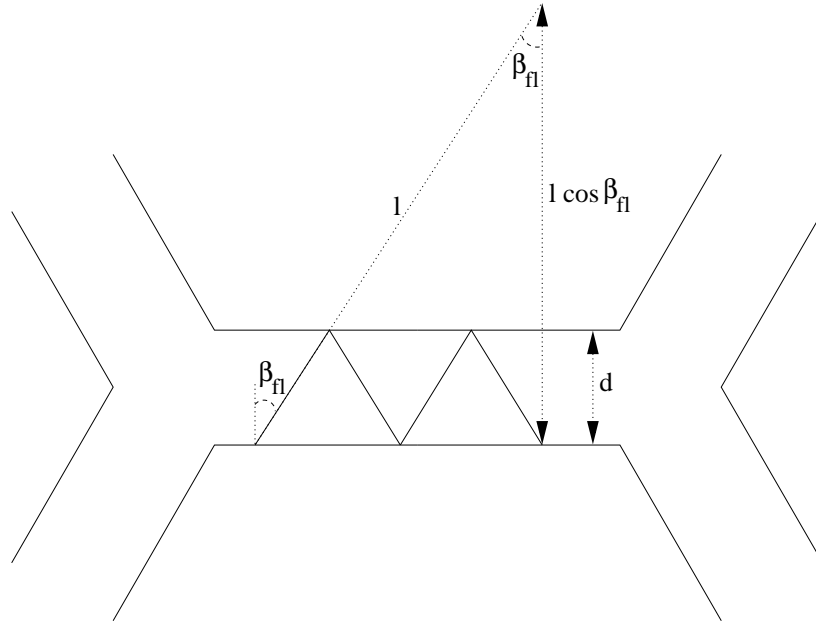


Abbildung 4.4: Ein Photon, das sich in der Flüssigkeit mit dem Winkel  $\beta_{fl}$  bezogen auf die Grenzflächennormale ausbreitet, bewegt sich bei einer zurückgelegten Strecke  $l$  um  $l \cos \beta_{fl}$  parallel zur Flächennormalen. Im Schnitt trifft dieses Photon somit  $l \cos \beta_{fl}/d$  mal die Grenzfläche. Es kommt also im Mittel zu  $\cos \beta_{fl}/d$  Grenzflächenkontakten pro zurückgelegter Strecke  $l$ .

Als Anteil  $n^{(\beta_{fl} < \beta^*)}$  der Grenzflächenkontakte von Photonen mit Winkeln unterhalb der Totalreflektionswinkels erhält man somit:

$$n^{(\beta_{fl} < \beta^*)} = \frac{\int_0^{\beta^*} \frac{\cos \beta_{fl}}{d} d\beta_{fl}}{\int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\cos \beta_{fl}}{d} d\beta_{fl}}$$

Mit  $\beta^* = \arcsin(n_g/n_{fl})$  und (4.3) ergibt sich schließlich:

$$\frac{T_{fl \rightarrow g}}{T_{g \rightarrow l}} = n^{(\beta_{fl} < \beta^*)} = \frac{n_g}{n_{fl}} \quad (4.4)$$

Dies ist genau die von Gittings, Bandyopadhyay und Durian in [4] auf Grund von Simulationen vermutete Beziehung (siehe Abschnitt 3.1.1, insbesondere (3.1)). Sie wurde hier exakt analytisch aus der Annahme hergeleitet, dass alle Winkel in der Flüssigkeit gleichwahrscheinlich auftreten.



### 4.2.2 Weg- und Zeitanteil einer Bahn in der Flüssigkeit

Für die Wahrscheinlichkeiten  $p_g$  bzw.  $p_{fl}$  dafür, dass ein Photon sich in der Luft oder in der Flüssigkeit befindet, gilt wegen (4.4):

$$\frac{p_g}{p_{fl}} = \frac{T_{fl \rightarrow g}}{T_{g \rightarrow l}} = n^{(\beta_{fl} < \beta^*)} = \frac{n_g}{n_{fl}}$$

Außerdem muss  $p_g + p_{fl} = 1$  gelten. Aus diesen beiden Bedingungen ergeben sich die folgenden Gleichungen:

$$p_g = \frac{n_g}{n_{fl} + n_g} \quad (4.5)$$

$$p_{fl} = \frac{n_{fl}}{n_{fl} + n_g} \quad (4.6)$$

In Abhängigkeit von der mittleren Sechseckkantenlänge des Gitters  $l_0$  und der Kanaldicke  $d$  ergibt sich der Flächenanteil  $\epsilon$  der Flüssigkeit an der Gesamtfläche wie folgt (siehe Abbildung 4.5):

$$\epsilon = \frac{A_{fl}}{A_{ges}} = \frac{\frac{d}{2} \left( \frac{l_0}{2} - \frac{\sqrt{3}}{12} d \right)}{\frac{1}{2} \frac{l_0}{2} \frac{\sqrt{3}}{2} l_0} = \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{d}{l_0} \left( 1 - \frac{1}{2\sqrt{3}} \frac{d^2}{l_0^2} \right) \quad (4.7)$$

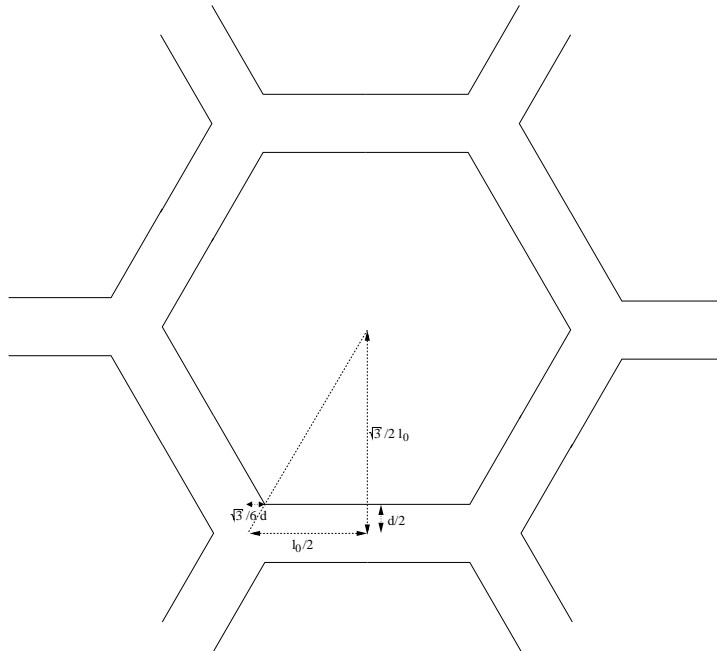


Abbildung 4.5: Um den Flächenanteil, den die Flüssigkeit einnimmt, zu bestimmen, reicht es aus Symmetriegründen aus, diesen für das gestrichelt gezeichnete Dreieck zu berechnen. Der Flächenanteil ergibt sich also als Quotient der Fläche des unteren Trapezes geteilt durch den Inhalt des gesamten Dreieckes.

Die von einem Photon im Mittel in der Flüssigkeit zurückgelegte Strecke  $s_{fl}$  in Abhängigkeit von der Gesamtstrecke  $s_{ges}$  lässt sich nun durch Gewichtung der Flächenanteile mit den Wahrscheinlichkeiten aus den Gleichungen (4.5) und (4.6) abschätzen:

$$\frac{s_{fl}}{s_{ges}} = \frac{p_{fl}A_{fl}}{p_{fl}A_{fl} + p_gA_g} = \frac{n_{fl}}{n_{fl} + n_g \frac{A_g}{A_{fl}}} = \frac{n_{fl}}{n_{fl} + \frac{n_g}{\epsilon} - n_g} \quad (4.8)$$

Die in [4] verwendeten Größen (siehe Abbildung 3.2) hängen folgendermaßen mit den Größen hier zusammen:

$$\frac{l_a}{l_a^{soln}} = \frac{s_{ges}}{s_{fl}}$$

Dabei war  $l_a^{soln}$  die Absorptionslänge in der Flüssigkeit und  $l_a$  die im Schaum. Man erhält somit:

$$\frac{l_a}{l_a^{soln}} = \frac{s_{ges}}{s_{fl}} = 1 + \frac{n_g}{n_{fl}} \left( \frac{1}{\epsilon} - 1 \right) \quad (4.9)$$

Dies entspricht dem von Gittings, Bandyopadhyay und Durian mit Simulationen in [4] erhaltenen Ergebnis (gestrichelte Linie in Abbildung 3.2. Hier wurde diese Formel nicht aus Simulationsergebnissen entnommen, sondern exakt analytisch hergeleitet. In Abschnitt 4.3.1 wird (4.9) genauer betrachtet und mit Simulationen verglichen.

Um (4.8) mit den bei den Simulationen verwendeten Größen auszudrücken kann man Gleichung (4.7) einsetzen:

$$\frac{s_{fl}}{s_{ges}} = \frac{n_{fl}}{n_{fl} - n_g + \frac{n_g}{\frac{2}{\sqrt{3}} \frac{d}{t_0} - \frac{1}{3} \frac{d^2}{t_0^2}}}. \quad (4.10)$$

Der Anteil an der Zeit, den die Photonen im Mittel in der Flüssigkeit verbringen, läßt sich ähnlich wie der Weganteil berechnen, mit dem einzigen Unterschied, dass die unterschiedlichen Geschwindigkeiten in Luft und in Wasser berücksichtigt werden müssen. Man erhält so:

$$\frac{t_{fl}}{t_{ges}} = \frac{p_{fl}A_{fl}n_{fl}}{p_{fl}A_{fl}n_{fl} + p_gA_gn_g} = \frac{n_{fl}^2}{n_{fl}^2 - n_g^2 + \frac{n_g^2}{\epsilon}} \quad (4.11)$$

Die Gleichungen (4.10) und (4.11) werden im nächsten Abschnitt benötigt.

### 4.2.3 Abschätzung der allgemeinen Diffusionskonstanten

In diesem Abschnitt wird berechnet, wie man die Diffusionskonstante  $D$  für das erweiterte Modell mit Photonenausbreitung in beiden Medien aus den effektiven Weglängen  $l_{fl}^*$  bzw.  $l_g^*$  für separate Ausbreitung in der Flüssigkeit bzw. in der Luft abschätzt. Die effektive freie Weglänge in der Flüssigkeit kann dafür wie in Kapitel 3 berechnet werden; für die Länge in Luft wird am Ende dieses Abschnittes eine grobe Abschätzung gegeben (man könnte auch Ergebnisse aus [2] bzw. [3] verwenden).

Einfachheitshalber wird hier davon ausgegangen, dass das Photon mit einer Wahrscheinlichkeit  $P_{fl}$  einen Schritt der Länge  $l_{fl}^*$  in der Flüssigkeit und mit der Wahrscheinlichkeit  $P_g$  einen Schritt der Länge  $l_g^*$  in der Luft zurücklegt, wobei die Streuwinkel vollkommen beliebig sind.  $P_{fl}$  und  $P_g = 1 - P_{fl}$  erhält man, wenn man berücksichtigt, dass für die in Luft bzw. in Flüssigkeit zurückgelegten Strecken  $s_g$  bzw.  $s_{fl}$  (4.10) gelten muss, d.h. es ergibt sich:

$$\frac{s_{fl}}{s_g} = \frac{P_{fl}l_{fl}^*}{P_g l_g^*}.$$

Somit ist:

$$P_{fl} = 1 - P_g = \frac{s_{fl}l_{fl}^*}{s_g l_g^* + s_{fl}l_{fl}^*}. \quad (4.12)$$

Nach Gleichung (3.14) gilt für die Diffusionskonstante  $D$  bei Photonenausbreitung in Luft und Flüssigkeit

$$\sigma^2 = n \langle l^2 \rangle + 2n \langle l \rangle^2 \frac{\langle \cos \theta \rangle}{\langle 1 - \cos \theta \rangle}.$$

Da die Streuwinkel zwischen den Schritten rein zufällig sind, ist  $\langle \cos \theta \rangle = 0$  und man erhält

$$\sigma^2 = n \langle l^2 \rangle,$$

wobei der Mittelwert  $\langle l^2 \rangle$  aus der Schrittlängenverteilung  $P(l)$  folgt:

$$\langle l^2 \rangle = \int_0^\infty l^2 P(l) dl$$

Da nur die Schrittlängen  $l_{fl}^*$  und  $l_g^*$  mit den Wahrscheinlichkeiten  $P_{fl}$  und  $P_g$  vorkommen, gilt für die Schrittlängenverteilung:

$$P(l) = P_{fl} \delta(l - l_{fl}^*) + P_g \delta(l - l_g^*)$$

Somit folgt:

$$\sigma^2 = n \langle l^2 \rangle = n P_{fl} (l_{fl}^*)^2 + n P_g (l_g^*)^2 = 4Dt$$

Die Diffusionskonstante  $D$  bei Photonenausbreitung in Luft und Flüssigkeit ist also:

$$D = \frac{n}{4t} \left( P_{fl} (l_{fl}^*)^2 + P_g (l_g^*)^2 \right)$$

Bei der Bestimmung von  $\frac{n}{t}$  muss berücksichtigt werden, dass ein Schritt in der Flüssigkeit die Zeit  $l_{fl}^*/c_{eff,fl} = n_{fl}l_{fl}^*/c_{eff}$  mit  $c_{eff}$  aus (3.26) braucht, ein Schritt in der Luft hingegen  $l_g^*/c_g = n_g l_g^*/c_0$ . Im Mittel ist dann:

$$\frac{n}{t} = \frac{t_{fl}}{t_{ges}} \frac{c_{eff}}{n_{fl}l_{fl}^*} + \frac{t_g}{t_{ges}} \frac{c_0}{n_g l_g^*}$$

mit  $t_{fl}$  aus (4.11) und  $t_g = t_{ges} - t_{fl}$ . Insgesamt erhält man:

$$D = \frac{1}{4} \left( P_{fl} (l_{fl}^*)^2 + P_g (l_g^*)^2 \right) \left( \frac{t_{fl}}{t_{ges}} \frac{c_{eff}}{n_{fl}l_{fl}^*} + \frac{t_g}{t_{ges}} \frac{c_0}{n_g l_g^*} \right) \quad (4.13)$$

Zur Berechnung von  $l_{fl}^*$  wird Gleichung (3.45) mit (3.46) verwendet, wobei  $l_{fl}^* = 2D_{fl}n_{fl}/c_{eff}$  ist. Im Falle besonders unregelmäßiger Gitter kann auch das Random-Walk Ergebnis (3.17) benutzt werden.  $l_g^*$  wird wie folgt bestimmt:

#### Effektive freie Weglänge der Photonenausbreitung in Luft:

Mit Hilfe von (3.14) läßt sich ein ungefährender Wert für die Diffusionskonstante ermitteln: Geht man davon aus, dass die Streuwinkel zwischen den Schritten rein zufällig sind, so ergibt sich aus (3.14) wegen  $\sigma^2 = 4Dt = 2cl^*t$  und  $n/t = c/\langle l \rangle$ :

$$l_g^* = \frac{n \langle l^2 \rangle}{2ct} = \frac{\langle l^2 \rangle}{2 \langle l \rangle}. \quad (4.14)$$

Die mittlere Weglänge  $\langle l \rangle$  und die mittlere quadratische Weglänge  $\langle l^2 \rangle$  erhält man folgendermaßen: Ist  $t_{gg}$  die Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein Photon aus der Luft kommend einen Flüssigkeitskanal durchquert ohne an einer der beiden Grenzflächen reflektiert zu werden, und ist  $s_0$  die typische Weglänge, die das Photon in der Luft von Kanal bis Kanal zurücklegt, so erhält man, da die Durchquerung der  $n$ -ten Luftblase mit der Wahrscheinlichkeit  $t_{gg}^{n-1}$  stattfindet:

$$\begin{aligned} \langle l \rangle &= \frac{\sum_{n=1}^{\infty} t_{gg}^{n-1} n s_0}{\sum_{n=1}^{\infty} t_{gg}^{n-1}} = \frac{s_0}{1 - t_{gg}} \\ \langle l^2 \rangle &= \frac{\sum_{n=1}^{\infty} t_{gg}^{n-1} n^2 s_0^2}{\sum_{n=1}^{\infty} t_{gg}^{n-1}} = \frac{s_0^2 (1 + t_{gg})}{(1 - t_{gg})^2} \end{aligned} \quad (4.15)$$

Als typische Weglänge in einer Luftblase kann man den Abstand zweier paralleler Kanäle nehmen:  $s_0 = \sqrt{3}l_0 - d$ . Die Wahrscheinlichkeit für die

Transmission durch einen Kanal ergibt sich als Produkt der Transmissionswahrscheinlichkeiten an den Einzelgrenzflächen:  $t_{gg} = t_{g \rightarrow fl} t_{fl \rightarrow g}$ . Dabei ergibt sich die Transmissionswahrscheinlichkeit an einer Einzelgrenzfläche aus den Fresnel'schen Formeln (4.1) mit  $t_{g \rightarrow fl}(\beta_{fl}) = t_{fl \rightarrow g}(\beta_{fl})$ . Um einen winkelunabhängigen Mittelwert zu erhalten, wird über alle möglichen Winkel gemittelt; gemessen in der Flüssigkeit treten sie von 0 bis zum Winkel  $\beta^*$  der Totalreflektion gleichhäufig auf. Somit ist also:

$$\begin{aligned} \text{senkrecht polarisiert:} \quad t_{g \rightarrow fl} &= \frac{1}{\beta^*} \int_0^{\beta^*} \left( 1 - \left( \frac{\sin(\beta_{fl} - \beta_g)}{\sin(\beta_{fl} + \beta_g)} \right)^2 \right) d\beta_{fl} \\ \text{parallel polarisiert:} \quad t_{g \rightarrow fl} &= \frac{1}{\beta^*} \int_0^{\beta^*} \left( 1 - \left( \frac{\tan(\beta_{fl} - \beta_g)}{\tan(\beta_{fl} + \beta_g)} \right)^2 \right) d\beta_{fl} \end{aligned}$$

Dabei ist  $\beta^* = \arcsin(n_g/n_{fl})$  und  $\beta_g = \arcsin(n_{fl}/n_g \cdot \sin \beta_{fl})$ . Setzt man diese Werte in (4.15) und anschließend in (4.14) ein, wobei  $t_{gg} = t_{g \rightarrow fl}^2$  ist, so erhält man einen groben Näherungswert für die effektive freie Weglänge bei Ausbreitung durch die Luft.

#### **Gültigkeit der Nahrungsformel für die Gesamtdiffusionskonstante:**

Gleichung (4.13) liefert nur einen sehr groben Schätzwert für die Gesamtdiffusionskonstante: Bei der Herleitung dieser Gleichung wurden die komplizierten Winkelbeziehungen zwischen den Schritten in Wasser und in Luft ignoriert und statt dessen angenommen, dass sich die Photonenausbreitung mit unabhängigen effektive Schrittlängen beschreiben lässt. Weiter wurde angenommen, dass für die effektive Weglänge in Luft das Durchqueren der Flüssigkeit keine großen Auswirkungen hat. Indem man die effektive freie Weglänge in der Flüssigkeit wie beim Photon-Channelling ansetzt, berücksichtigt man außerdem nicht, dass die Photonen im erweiterten Modell nicht immer totalreflektiert werden und die Kanäle mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit bei jedem Grenzflächenkontakt die Flüssigkeit verlassen können. Dass dies zu keinem allzu großen Fehler führt, liegt darin, dass der Winkel einer Photonenbahn nach dem Wiedereintritt in einen Kanal mit dem Winkel vor dem Durchqueren der Luft korreliert ist.

Insgesamt handelt sich es bei Gleichung (4.13) also um eine Formel, die es ermöglicht, Größenordnungen und Tendenzen abzuschätzen, den genauen Wert liefert sie nicht unbedingt. In Abschnitt 4.3.2 werden die Simulationsergebnisse für hinreichend unregelmäßige Gitter, in denen die Photonenausbreitung diffusiv ist, mit Gleichung (4.13) verglichen.

### 4.3 Ergebnisse der Simulationen

Im Folgenden sind die Simulationsergebnisse für das erweiterte Photon-Channelling-Modell zusammengestellt: In Abschnitt 4.3.1 werden Weganteile in der Flüssigkeit sowie das Verhältnis der mittleren Transmissionskoeffizienten aus den Simulationen bestimmt und mit den Ergebnissen der Theorie aus den Abschnitten 4.2.1 und 4.2.2 verglichen. Dies liefert die zweidimensionale Variante der experimentellen Ergebnisse von Gittings, Bandyopadhyay und Durian aus [4] (Abschnitt 3.1.1, insbesondere Abbildung 3.2). In Abschnitt 4.3.2 wird gezeigt, dass die Diffusionskonstante auch im erweiterten Modell von den Unregelmäßigkeiten abhängt. Abschnitt 4.3.3 verdeutlicht, dass die Superdiffusion im exakten Gitter immer noch vorkommt. In Abschnitt 4.3.4 werden schließlich die bei der Photonenausbreitung auftretenden Winkel untersucht: In Abhängigkeit der Startwinkel dargestellt ergeben sie nämlich sehr interessante Muster, die die Bedeutung des Brechungsindex der Flüssigkeit verdeutlichen.

Die Startbedingungen, die Photonenzahl und andere bei den Simulationen auftretende Parameter werden wie in Abschnitt 3.6.4 gewählt. Der Brechungsindex der Luft wird 1 gesetzt und nur der Brechungsindex der Flüssigkeit  $n = n_{fl}$  variiert.

#### 4.3.1 Weganteil der Photonenverteilung in der Flüssigkeit und Transmissionswahrscheinlichkeiten

In Abbildung 4.6 wird für die Ergebnisse dieser Arbeit dieselbe Darstellung wie in [4] (siehe Abbildung 3.2) gewählt. Dabei ist zu beachten, dass die gepunkteten Linien in Abbildung 3.2 aus [4] Simulationsergebnisse sind, während hier die durchgezogenen Linien den theoretisch hergeleiteten Beziehungen (4.9) und (4.4) entsprechen. In Übereinstimmung mit der Theorie sind die dargestellten Simulationsergebnisse unabhängig von der Unregelmäßigkeit der Gitter und von der verwendeten Polarisation.

Die experimentellen Ergebnisse aus [4] lagen allerdings nur in einem Bereich  $0,004 \leq \epsilon \leq 0,2$  unterhalb der Linien mit  $s_{ges}/s_{fl} = 1/\epsilon$  bzw.  $T_{fl \rightarrow g}/T_{g \rightarrow fl} = 1$ . Ein solcher Bereich folgt hier weder aus den Simulationen noch aus der Theorie. Nach dem erweiterten Photon-Channelling-Modell ist die Photonenaufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte in der Flüssigkeit für alle  $\epsilon$  erhöht. Mögliche Gründe für einen solchen Unterschied zum Experiment werden in Abschnitt 4.4 besprochen.

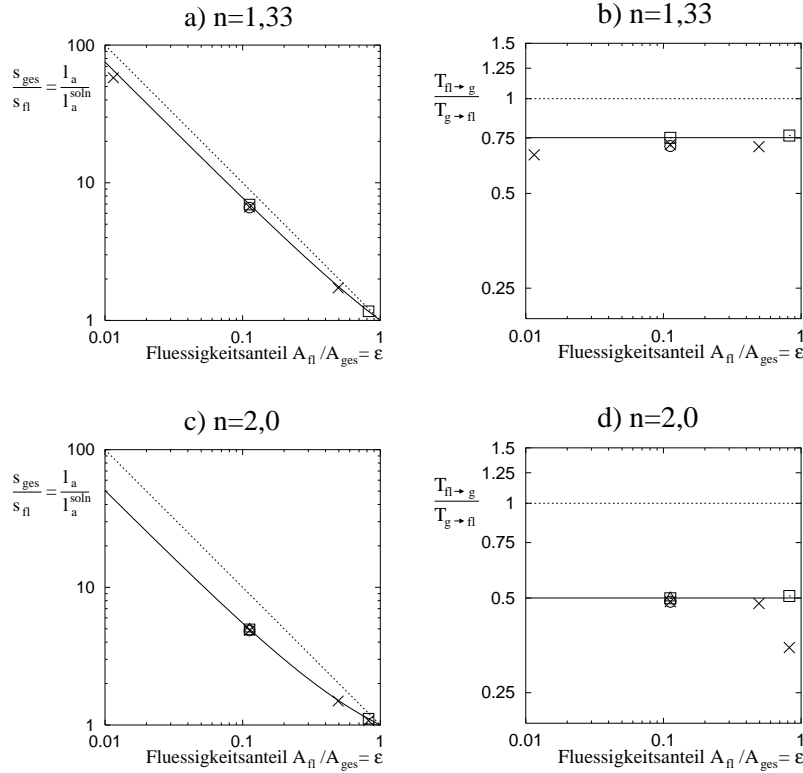


Abbildung 4.6: **a)** und **c)** Gesamtweg des Photons geteilt durch den Weg in der Flüssigkeit. **b)** und **d)** Quotient der Transmissionswahrscheinlichkeiten für den Übergang von der Flüssigkeit in die Luft ( $T_{fl \rightarrow g}$ ) bzw. umgekehrt ( $T_{g \rightarrow fl}$ ). Die Darstellung entspricht jener aus Abbildung 3.2. Die gestrichelten Linien stellen die Beziehungen  $s_{ges}/s_{fl} = 1/\epsilon$  und  $T_{fl \rightarrow g}/T_{g \rightarrow fl} = 1$  dar. Die durchgezogene Linie folgt aus den theoretisch hergeleiteten Gleichungen (4.9) und (4.4). Die Simulationsergebnisse stammen aus dem exakten Gitter bei senkrechter (Quadrate) und paralleler Polarisation (Dreieck), sowie aus einem unregelmäßigen Gitter mit  $\delta r = 0,3 l_0$  ebenfalls mit senkrechter (Kreuz) und paralleler Polarisation (Kreise). Der Flüssigkeitsanteil  $\epsilon$  wurde mit (4.7) aus  $d/l_0$  bestimmt.

### 4.3.2 Diffusion in unregelmäßigen Gittern

Abbildung 4.7 zeigt die Abhängigkeit der Diffusionskonstante von der Stärke der Unordnung: Auch im erweiterten Modell divergiert die Diffusionskonstante im Grenzfall verschwindender Störungen und wird konstant im Grenzfall großer Unregelmäßigkeiten. Die Abhängigkeit von den Gitterstörungen ist also noch vorhanden, allerdings, vor allem für kleine  $n$ , wesentlich schwächer als im strengen Photon-Channelling-Modell. Die theoretische Vergleichskurve, die nach (4.13) mit  $D_{fl}$  aus (3.45) bestimmt wurde, liefert das richtige Verhalten und die richtige Größenordnung aber erwartungsgemäß nicht unbedingt die exakten Werte.

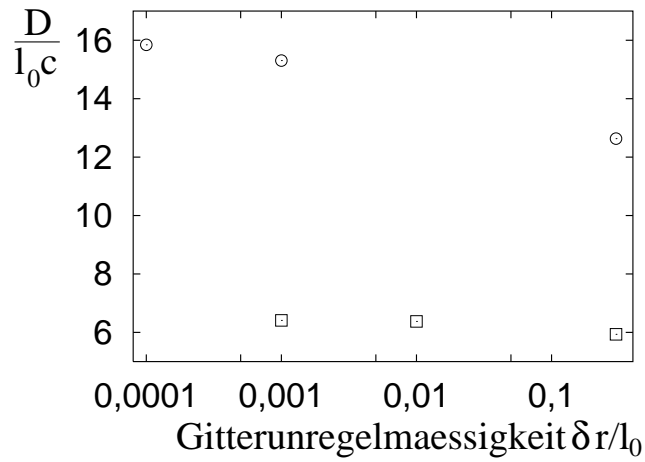
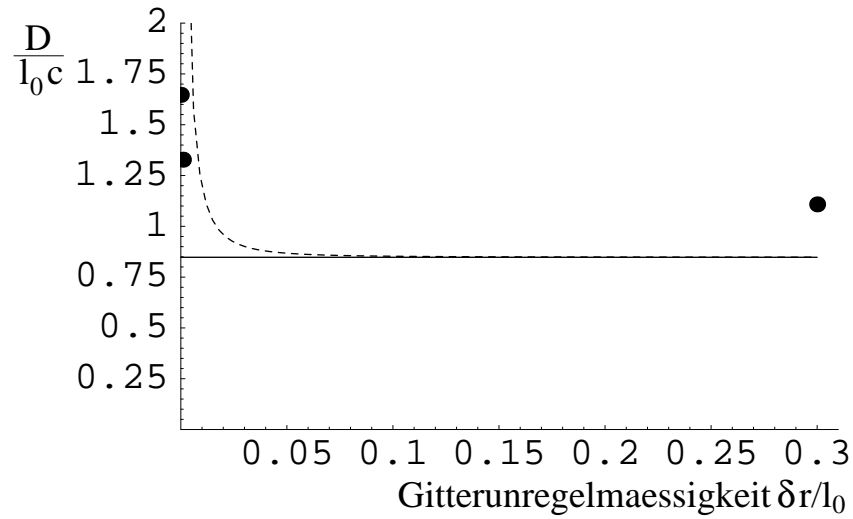


Abbildung 4.7: Diffusionskonstante in Abhängigkeit der Gitterunordnung  $\delta r$  in Gittern mit  $d/l_0 = 0,1$ . **Oben:** bei senkrechter Polarisation für  $n = 2,0$ . Die Kurven wurden mit (4.13) berechnet, wobei als Wert für  $D_{fl}$  bei der gestrichelten Kurve das Kombinationsmodell (3.45) und bei der durchgezogenen Linie das Random-Walk-Modell (3.17) verwendet wurde. **Unten:** für  $n = 1,33$  bei senkrechter (Quadrate) bzw. paralleler (Kreise) Polarisation. Aus Zeitgründen stammen die Werte für parallele Polarisation nur aus Simulationen bis  $t = 10000 l_0/c_0$  (statt üblicherweise  $t = 100000 l_0/c_0$ ). Die Theorie (4.13) würde hier ebenfalls das korrekte Verhalten, aber zu kleine Werte liefern (siehe auch Abbildung 4.8).



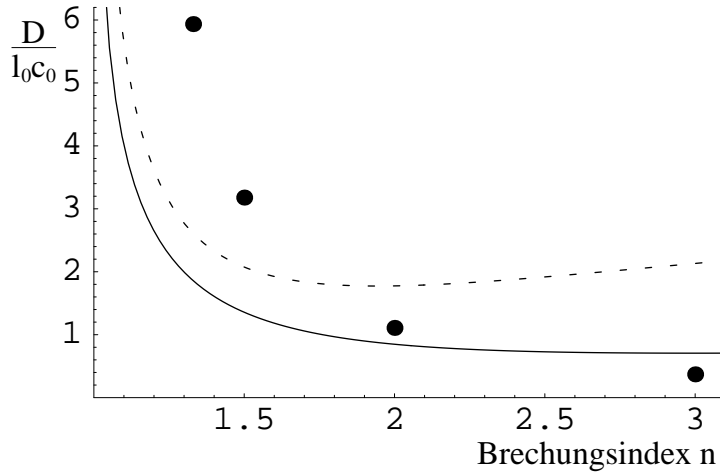


Abbildung 4.8: Diffusionskonstante bei senkrechter Polarisation im unregelmäßigen Gitter (Punkte und durchgezogene Linie:  $\delta r = 0,3l_0$ , gestrichelte Linie:  $\delta r = 0,005l_0$ ) mit  $d/l_0 = 0,1$  in Abhängigkeit des Brechungsindex  $n$  der Flüssigkeit. Die Linien wurde nach (4.13) mit  $D_{fl}$  aus dem Kombinationsmodell (3.45) berechnet (die durchgezogene Linie erhält man übrigens auch, wenn man  $D_{fl}$  aus dem Random-Walk-Modell mit zufälligen Kanalwechsellern nach (3.17) verwendet).

Die Abhängigkeit der Diffusionskonstante vom Brechungsindex  $n$  ist in Abbildung 4.8 für ein unregelmäßiges Gitter mit  $\delta r = 0,3l_0$  und  $d/l_0 = 0,1$  dargestellt (Punkte und durchgezogene Linie). Auch hier liefert die Theorie zwar nicht die exakten Werte aber immerhin die richtigen Tendenzen: Mit abnehmendem Brechungsindex wächst die Diffusionskonstante an, weil sich die Photonen in Medien mit niedrigerem Brechungsindex häufiger durch die Luft bewegen und zudem noch in der Flüssigkeit schneller ausbreiten als bei einem höherem Index. Erhöhte Diffusionskonstanten durch Photon-Channelling mit weitreichenden Korrelationen kommen im stark unregelmäßigen Gitter auch für große  $n$  nicht vor. Dies überrascht nicht, da nicht einmal im strengen Photon-Channelling-Fall für  $\delta r = 0,3l_0$  die Diffusionskonstante größer als im Random-Walk-Grenzfall (siehe Abschnitt 3.7.5) war. Erst wenn die Gitterunregelmäßigkeiten klein werden (Bedingung aus Abschnitt 3.7.5:  $\delta r < 0,37l_0$ ) nimmt die Diffusionskonstante auf Grund weitreichender Korrelationen zu. Im hier untersuchten erweiterten Modell macht sich diese Zunahme zunächst für große  $n$  bemerkbar: Dann gibt es Photonen, die die Flüssigkeit nur selten verlassen und somit dem strengen Photon-Channelling-Modell nahekommen. Für schwach gestörte Gitter besitzt die Diffusionskonstante als Funktion von  $n$  daher ein Minimum. Die gestrichelte Theoriekurve in Abbildung 4.8 [berechnet aus (4.13) mit  $D_{fl}$  aus (3.45)] verdeutlicht den Sachverhalt für ein Gitter mit  $\delta r = 0,005l_0$ .

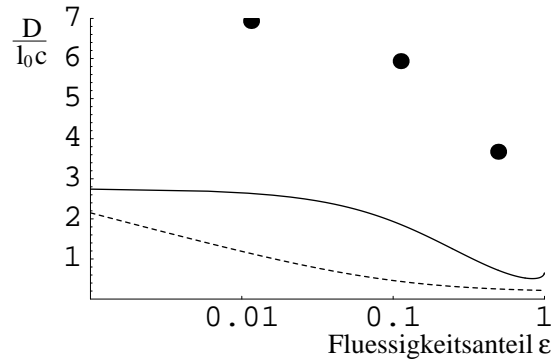


Abbildung 4.9: Diffusionskonstante bei senkrechter Polarisierung in einem unregelmäßigen Gitter ( $\delta r = 0,3l_0$ ) mit  $n = 1,33$  in Abhängigkeit des Flüssigkeitsanteils  $\epsilon$ , der mit (4.7) aus  $d/l_0$  bestimmt wurde. Die durchgezogene Kurve wurde mit (4.13) mit  $D_{fl}$  aus (3.45) bestimmt. Die gestrichelte Linie ist  $D/(l_0c_0) = 1,5 + 0,14/\epsilon$ , also eine durch Messungen motivierte Beziehung aus [1] (siehe auch Abbildung 3.1, strenggenommen müsste noch ein Vorfaktor, der die effektive Transportgeschwindigkeit im Schaum enthält, berücksichtigt werden). Die Simulationsergebnisse sind alle um einen Faktor 2 größer als die theoretischen Vorhersagen. Die Tendenz ist jedoch die gleiche.

Abbildung 4.9 zeigt die Diffusionskonstante  $D$  in einem unregelmäßigen Gitter in Abhängigkeit vom Flüssigkeitsanteil  $\epsilon$ . Interessanterweise verhält sich  $D$  nur für  $\epsilon \approx 1$  (durchgezogene Theoriekurve) wie im strengen Photon-Channelling-Modell (Abschnitt 3.7.4, insbesondere Abbildung 3.41): Dort stieg  $D$  mit steigendem  $\epsilon$  an. Dass hier  $D$  sich anders verhält, hat folgenden Grund: Photonen bewegen sich in der Luft schneller fort als in der Flüssigkeit. Solange das Gitter unregelmäßig genug ist, so dass weitreichende Korrelationen keine Rolle spielen, ist die Diffusionskonstante in der Luft  $D_g$  größer als die in der Flüssigkeit  $D_{fl}$  (entsprechend gilt  $l_g^* > l_{fl}^*$ ). Bei kleinem  $\epsilon$  liegt ein großer Teil einer Photonenbahn in der Luft, d.h. es ist  $s_g \gg s_{fl}$  und  $t_g \gg t_{fl}$ . In diesem Grenzfall ergibt sich aus (4.13)  $D \propto l_g^*$  (unabhängig von  $l_{fl}^*$ ). Für große  $\epsilon$  erhält man dagegen  $D \propto l_{fl}^*$ . Wegen  $l_g^* > l_{fl}^*$  steigt also die Diffusionskonstante für abnehmendes  $\epsilon$  an, was dem experimentellen Verhalten entspricht, welches durch die gestrichelte Linie in Abbildung 4.9 nach [1] repräsentiert wird (siehe auch Abbildung 3.1). Die Experimente deuten allerdings darauf hin, dass  $D$  für  $\epsilon \rightarrow 0$  unbeschränkt wächst. In der hier verwendeten Abschätzung wird  $D$  durch die Diffusionskonstante in der Luft beschränkt, die nach (4.14) nicht von  $\epsilon$  abhängt. In der Theorie strebt  $D$  also gegen eine Konstante für  $\epsilon \rightarrow 0$ . Dies könnte darauf hindeuten, dass für kleine  $\epsilon$  das verwendete Modell, bei dem nur die Grenzflächen als mögliche Streuer betrachtet wurden, nicht mehr gültig ist: Insbesondere in drei Dimensionen spielen für kleine  $\epsilon$  wahrscheinlich eher die Kanten der Flüssigkeitswände sowie deren Verzweigungspunkte die Hauptrolle als Streuer (siehe dazu auch Abschnitt 4.4). Eine andere Möglichkeit ist,

dass bei immer dünner werdenden Flüssigkeitswänden Interferenzeffekte für Photonen, die den Film aus der Luft kommend durchqueren, eine Rolle spielen. In [3] wurden solche Interferenzeffekte berücksichtigt und damit für die Flüssigkeitsfilme effektive Transmissionswahrscheinlichkeiten bestimmt; sie führen zu einer Diffusionskonstanten, die für  $d/\lambda \rightarrow 0$  divergiert. Mit der Diffusionskonstanten aus [3] als Grundlage für  $l_g^*$  in (4.13) könnte man also die Unbeschränktheit von  $D$  für  $\epsilon \rightarrow 0$  erklären. Allerdings ist fraglich, ob  $\epsilon \rightarrow 0$  wirklich  $d/\lambda \rightarrow 0$  zur Folge hat. Die Filmstärke in einem Schaum könnte nämlich eventuell auch nur durch die molekularen Kräfte zwischen den Molekülen an den Grenzschichten und somit unabhängig vom Flüssigkeitsanteil gegeben sein (siehe Abschnitt 4.4).

### 4.3.3 Superdiffusion im exakten Gitter

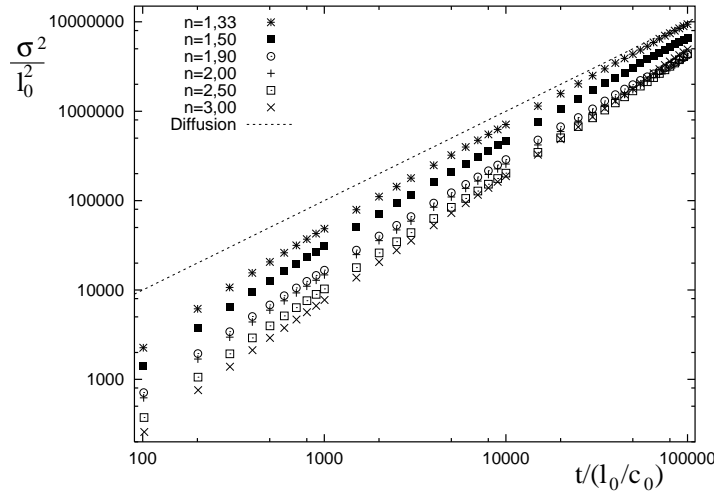


Abbildung 4.10: Mittleres Abstandsquadrat  $\sigma^2 = \langle |\vec{r}|^2 \rangle$  in Abhängigkeit von der Zeit  $t$  für verschiedene Brechungsindizes  $n$  der Flüssigkeit im exakten Sechseckgitter mit  $d/l_0 = 1$  für senkrecht polarisiertes Licht. Die gepunktete Linie entspricht einem Diffusionsprozess.

Im exakten Sechseckgitter erhält man auch bei der Ausbreitung in Flüssigkeit und Luft Superdiffusion. Allerdings unterscheidet sich das Ausbreitungsverhalten von dem beim reinen Photon-Channelling beobachteten: In Abbildung 4.10 ist die Zeitabhängigkeit des mittleren Abstandsquadrates  $\sigma^2 = \langle |\vec{r}|^2 \rangle$  für verschiedene Brechungsindizes dargestellt. In allen Fällen ist die Photonausbreitung für kurze Zeiten ( $t < 5000 / l_0 / c_0$ ) deutlich superdiffusiv mit Exponenten  $m$  aus  $\sigma^2 \propto t^m$  zwischen 1,5 und 1,6. Für lange Zeiten allerdings wird die Superdiffusion schwächer. Bei kleinen Indizes wird die Ausbreitung fast diffusiv (zur Orientierung wurde eine gepunktete Linie eingezeichnet, die einem Diffusionsprozess entspricht). Der Exponent  $m$  ist

für  $n = 1,33$  ungefähr 1,1. Bei großen Indizes jedoch bleibt die Superdiffusion fast in voller Stärke erhalten: Für  $n = 3,0$  ist für große Zeiten  $m \approx 1,4$ . Das mittlere Abstandsquadrat  $\sigma^2$  ist für kleine  $n$  größer als für große  $n$  (zumindest für kurze Zeiten), weil mit steigendem Brechungsindex die Photonenwahrscheinlichkeit in der Flüssigkeit zunimmt, die Ausbreitung in einer Flüssigkeit mit hohem Index allerdings gleichzeitig langsamer ist als in der Luft oder in einer Flüssigkeit mit kleinem Brechungsindex.

Abbildung 4.11 zeigt das mittlere Abstandsquadrat für die Photonen ausbreitung in exakten Gittern mit unterschiedlichen  $d/l_0$ . Man erkennt deutlich, dass vor allem im Grenzfall langer Zeiten die Superdiffusion für kleine  $d/l_0$  fast in Diffusion übergeht.

Superdiffusion lässt sich also vor allem bei den Simulationen in Gittern mit großem  $d/l_0$  (dies entspricht einem möglichst nassen Schaum) und hohem Brechungsindex beobachten und dort am besten für kurze Zeiten (kleiner als  $5000 l_0/c_0$ ). Dies kann man auch an den Photonenverteilungen erkennen (siehe Abbildung 4.12): Die Sternform ist für kleine  $d/l_0$  und kleine  $n$  nicht mehr zu erkennen; bei großen  $d/l_0$  oder großen  $n$  jedoch zeichnet sich immer noch eine bevorzugte Photonen ausbreitung entlang der Gitterhauptlinien ab. Für  $n > 2$  gibt es sogar immer Photonen, die wie in Kapitel 3 die Flüssigkeit nie verlassen und somit zu einem stark superdiffusiven Anteil führen (siehe auch Abschnitt 4.3.4).

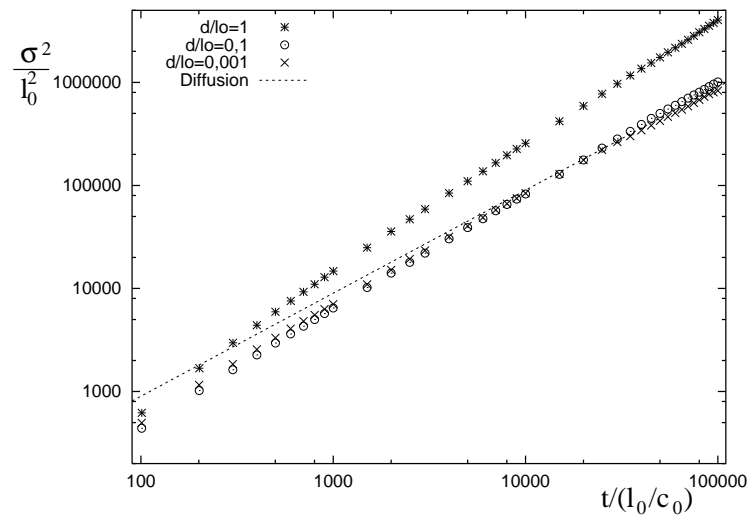


Abbildung 4.11: Mittleres Abstandsquadrat  $\sigma^2 = \langle |\vec{r}|^2 \rangle$  in Abhängigkeit von der Zeit  $t$  für  $n = 2,0$  im exakten Sechseckgitter mit verschiedenen  $d/l_0$  für senkrecht polarisiertes Licht. Die gepunktete Linie entspricht einem Diffusionsprozess.

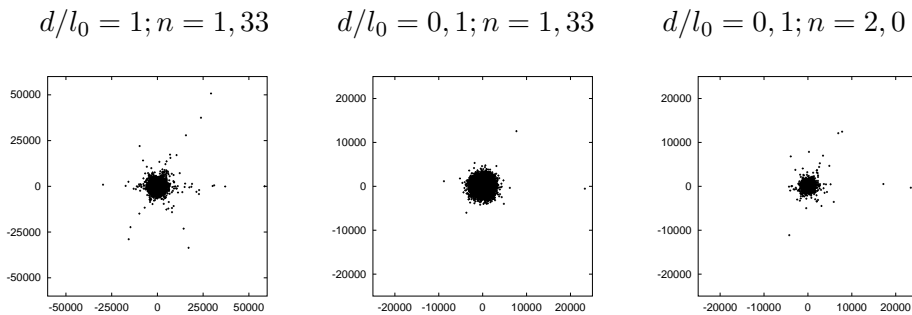


Abbildung 4.12: Photonenverteilungen im exakten Sechseckgitter nach der Zeit  $t = 100000 l_0/c_0$  bei senkrechter Polarisierung (Längen in Einheiten von  $l_0$ ). Die Sternform ist ausgeprägter für große  $d/l_0$  und große  $n$ .

Eine Momentenanalyse wie in Abschnitt 3.7.3 zeigt, dass die Ausbreitung nach dem erweiterten Modell keinem einfachen Skalengesetz der Form (3.59) gehorcht (siehe Abbildung 4.13): Die niedrigen Momente verhalten sich fast wie bei einem Diffusionsprozess ( $\langle |\vec{r}(t)|^q \rangle \propto t^{q/2}$ ), die höheren Momente weisen jedoch eindeutig auf anomale Diffusion hin.

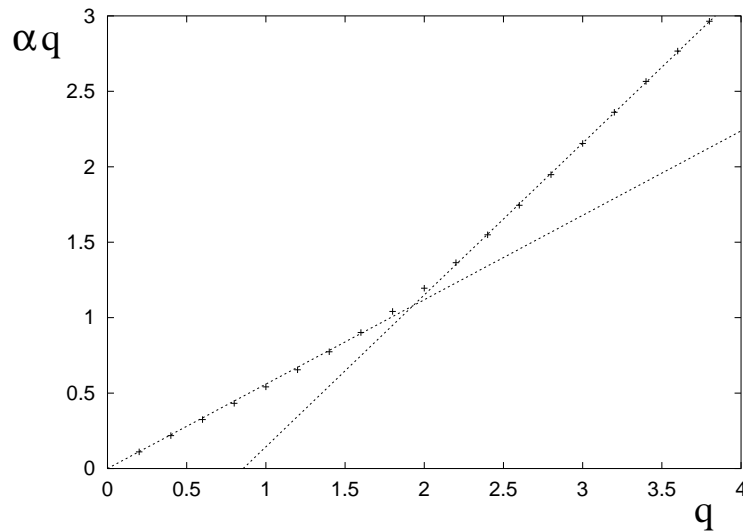


Abbildung 4.13: Momentenanalyse (wie in Abschnitt 3.7.3:  $\langle |\vec{r}(t)|^q \rangle \propto t^{\alpha_q}$ ) für die Ausbreitung im exakten Gitter mit  $d/l_0 = 1$  für  $n = 2$  und senkrechte Polarisierung. Die Fitgerade für  $q < 2$  hat die Steigung 0,56, die für  $q > 2$  die Steigung 1,01.

#### 4.3.4 Untersuchung der erlaubten Winkel

Beim in Kapitel 3 verwendeten Modell mit grundsätzlicher Reflektion haben bei der Ausbreitung im exakten Gitter die Winkel eine große Rolle gespielt. Insbesondere traten dort im Verlaufe einer Bahn nie mehr als drei verschiedene Winkel (betragsmäßig) auf (siehe Abschnitt 3.2.1). Auch wenn man keine ständige Totalreflektion fordert, sind die beobachteten Winkel im allgemeinen nicht vollkommen beliebig. Abbildung 4.14 zeigt die im Laufe einer Simulation im exakten Gitter vorkommenden Winkel in Abhängigkeit des jeweiligen Startwinkels (dies entspricht Abbildung 3.44). Man sieht, dass die Anzahl der auftretenden Winkel stark vom Brechungsindex  $n$  der Flüssigkeit abhängt. Für  $n < 2$  liegen die Winkel beliebig dicht. Bei  $n = 1,33$  sieht man deutlich, dass im Laufe einer Photonenbahn fast alle Winkel vorkommen. Bei  $n = 1,5$  wäre dies wahrscheinlich auch der Fall, wenn man die Simulation länger laufen lassen würde (die dargestellte Simulation lief bis  $t = 100000l_0/c_0$ ). Ein vollkommen anderes Bild ergibt sich für  $n \geq 2$ : es können dann maximal 12 (betragsmäßig) verschiedene Winkel im Laufe einer Bahn auftreten. Die theoretisch möglichen Winkel ergeben sich aus der Berücksichtigung aller möglichen Kanalwechsel und dem mehrfachen Anwenden des Brechungsgesetzes. Im Falle  $n < 2$  ergeben sich dabei immer

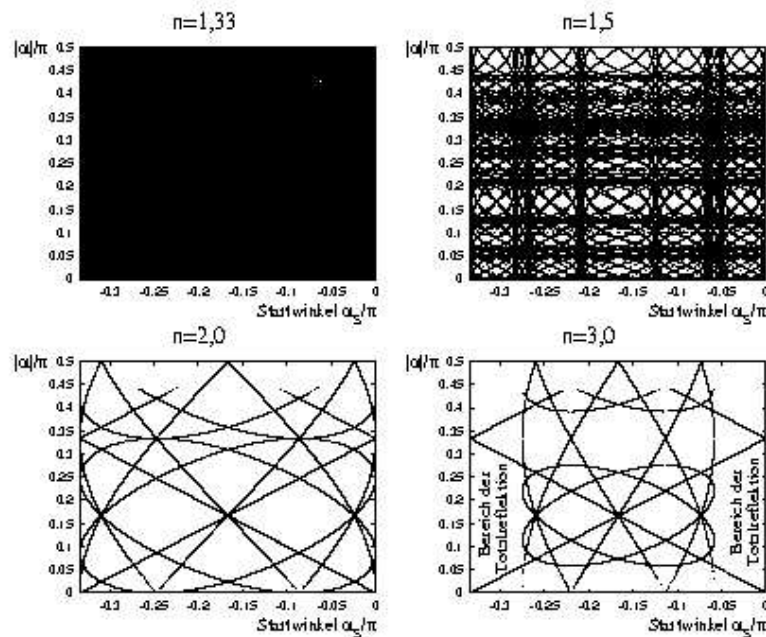


Abbildung 4.14: Bei der Simulation im exakten Gitter auftretende Winkel in Abhängigkeit des jeweiligen Startwinkels. Im verwendeten Gitter galt  $d/l_0 = 1$  und es wurde senkrechte Polarisation angenommen.

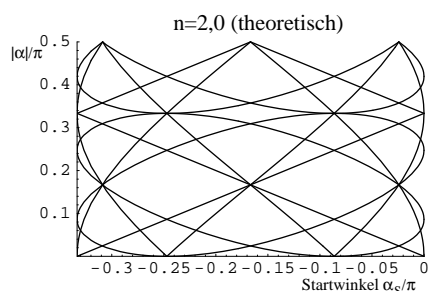


Abbildung 4.15: Winkel, die theoretisch bei einem bestimmten Startwinkel  $\alpha_S$  im Laufe einer Photonenbahn auftreten können.

neue Winkel, für  $n \geq 2$  führt ein erneuter Kanalwechsel oder das Anwenden des Brechungsgesetzes jedoch immer wieder auf bereits bekannte Winkel, von denen es maximal 12 gibt (siehe Abbildung 4.16). Abbildung 4.15 zeigt alle für  $n = 2,0$  theoretisch gefundenen Winkel. Die Abbildung stimmt mit den Simulationsergebnissen überein. Bei  $n > 2$  tritt noch ein zusätzlicher Effekt auf: Für Startwinkel nahe bei 0 oder  $-\frac{\pi}{3}$  gibt es die drei erlaubte Winkel, die bereits im Modell mit ständiger Totalreflektion auftraten. Da der Winkel  $\alpha^*$  für die Totalreflektion dann nämlich größer als  $\frac{\pi}{3}$  ist, gibt es Photonen, die im Laufe ihrer Bahn nur Winkel kleiner als  $\alpha^*$  haben und die Flüssigkeit nie verlassen: Für die Startwinkelbereiche von  $-\frac{\pi}{3}$  bis  $-\frac{2\pi}{3} + \alpha^*$  und  $-\alpha^* + \frac{\pi}{3}$  bis 0 bleiben die möglichen Winkel immer kleiner als  $\alpha^*$ ; die entsprechenden Photonen bleiben also in der Flüssigkeit und unterscheiden sich somit im Ausbreitungsverhalten nicht von den Photonen aus Kapitel 3. Damit ist die deutlichere Superdiffusion als für größere  $n$  erklärt.

Es stellt sich natürlich die Frage, wie die Photonen, die für  $n > 2$  die Flüssigkeit nie verlassen, überhaupt in die Flüssigkeit gelangen können, wenn man die Photonen in der Luft startet. Ein realer Schaum weist in der Nähe der Verzweigungen keine scharfen Ecken der Begrenzungslinien auf, vielmehr geht eine Begrenzungslinie glatt in die benachbarte über. An solchen Stellen können auch die Photonen in die Flüssigkeit gelangen, die nach in dem hier betrachteten idealen Schaummodell nie zwischen Flüssigkeit und Luft wechseln würden. Außerdem kommt bei einem realen Schaum hinzu, dass die Struktur am Rand des Schaumes deutlich von der idealen Struktur im Innern abweicht. Wird Licht vom Rand des Schaumes eingestrahlt, so kann ein großer Teil davon in die Flüssigkeit gelangen und zwar unabhängig davon, ob dies bei der exakten Schaumstruktur im Inneren auch möglich wäre. Die hier betrachtete Photonenausbreitung bezieht sich also immer auf die Ausbreitung im Inneren eines Schaumes und zwar nach einer Zeit, zu der bereits ausreichend viele Photonen von der Luft in die Flüssigkeit und umgekehrt gewechselt haben. Dann kommen zumindest näherungsweise in den Kanälen alle Winkel gleichhäufig vor.

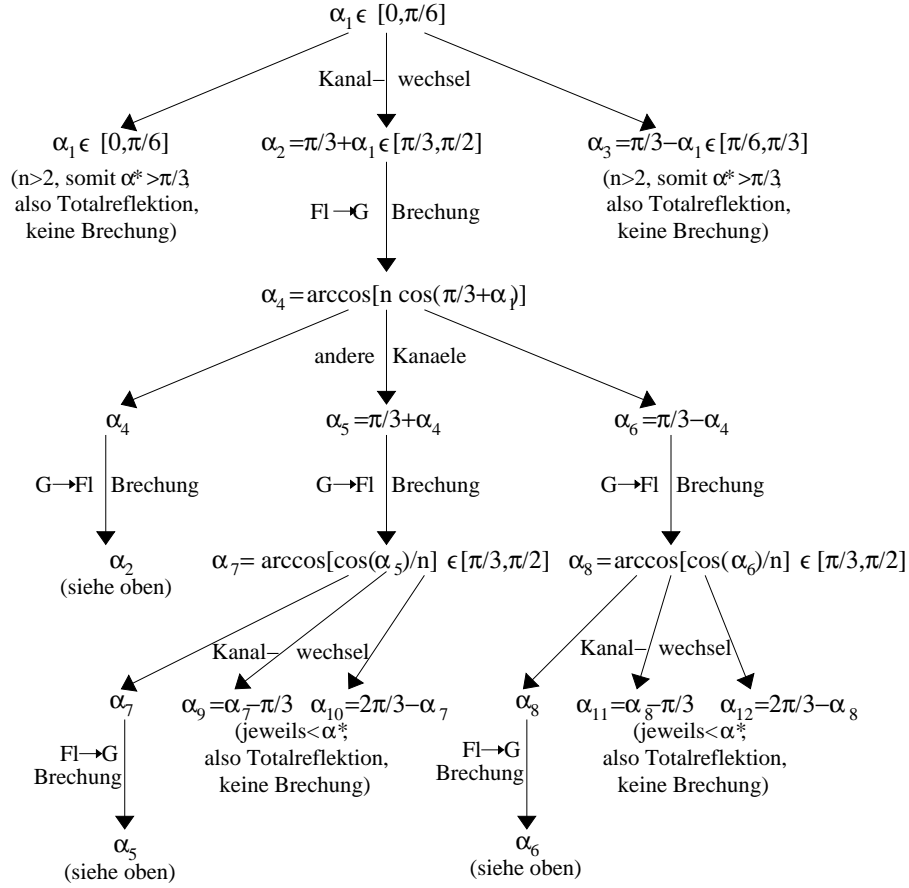


Abbildung 4.16: Berechnung der 12 Winkel, die theoretisch im Laufe einer Photonenbahn auftreten können, falls der Brechungsindex  $n$  größer als 2 ist (der Winkel der Totalreflektion  $\alpha^*$  ist dann größer als  $\frac{\pi}{3}$ ).

#### 4.4 Gültigkeitsbereich und Interferenzeffekte beim erweiterten Photon-Channelling-Modell

Die Ergebnisse zum Verhältnis der Transmissionkoeffizienten und zum Weganteil in der Flüssigkeit in Abschnitt 4.3.1 entsprechen den Simulationen von Gittings, Bandyopadhyay und Durian aus [4]. Alle diese Simulationen und die Theorie können allerdings nicht erklären, warum im Experiment nur in einem bestimmten Bereich (für  $0,004 \leq \epsilon \leq 0,2$ ) die Photonenauflösungsdichte in der Flüssigkeit erhöht ist (siehe [4] bzw. Abbildung 3.2). Offensichtlich hat auch das erweiterte Photon-Channelling-Modell seine Grenzen.



Bei steigendem Flüssigkeitsanteil werden die Luftblasen des Schaumes immer kreisförmiger. Für besonders feuchte Schäume gilt das Modell der Kanäle entlang der Linien eines Sechseckgitters dann nicht mehr (siehe Abschnitt 3.8). Kleine Abrundungen hingegen haben keinen Einfluß auf die Photonenauflaufdichte in der Flüssigkeit oder im Schaum: Bei den Simulationen von Gittings, Bandyopadhyay und Durian in [4] waren die Begrenzungslinien nahe der Verzweigungen abgerundet. Das Photon-Channelling-Modell ist bei steigendem Flüssigkeitsanteil noch so lange gültig, wie es Kanäle mit parallelen Begrenzungen gibt und die Abrundungen nur einen im Vergleich zur Kanallänge kleinen Bereich einnehmen.

Bei zu niedrigem Flüssigkeitsanteil weichen die experimentellen Ergebnisse ebenfalls von den theoretischen ab. Dies liegt wahrscheinlich daran, dass in der Theorie nur zweidimensionale Strukturen betrachtet wurden. In zwei Dimensionen kommen nur die Flüssigkeitskanäle und deren Verzweigungspunkte als Streuer in Frage. In dreidimensionalen Strukturen kann es noch andere Streumechanismen geben: Neben den Kanalwänden können auch die Kanten (Plateau-Border) oder die Verzweigungen der Kanten als Streuer wirken. Vielleicht werden die Flüssigkeitswände in einem sehr trockenen Schaum so dünn, dass ihre Bedeutung als Streuer im Vergleich zu den Kanten abnimmt. Andererseits hängt die Filmdicke in einem dreidimensionalen Schaum nicht unbedingt vom Flüssigkeitsanteil ab. Ist die Filmdicke konstant (z.B. festgelegt durch die Abstoßung der Tenside an den Grenzflächen), so verändert sich mit dem Flüssigkeitsanteil nur die Ausdehnung der Kanten und deren Verzweigungspunkte. Man könnte solche Kanten als Lichtleiter ansehen, die in zu trockenen Schäumen verschwinden. Zur genaueren Klärung wären Strukturanalysen und die Kenntnis über die jeweilige Bedeutung der Flächen, Kanten und Verzweigungspunkte als Streuer notwendig.

#### **Die Bedeutung von Interferenzeffekten:**

In dieser Arbeit wurden Interferenzeffekte vollständig vernachlässigt. Folgende Interferenzeffekte können bei der Lichtausbreitung in Schäumen auftreten:

- Interferenzen bei der Transmission oder Reflektion an einem dünnen Film: Durchquert ein Photon aus der Luft kommend einen Kanal oder wird an ihm reflektiert, so treten die für dünne Filme mit zwei Grenzflächen typischen Interferenzerscheinungen auf. In [3] wurden solche Interferenzen berücksichtigt und eine effektive Reflektionswahrscheinlichkeit für eine Flüssigkeitswand angenommen. Typische Interferenzerscheinungen wie z.B. eine beim Verändern der Kanaldicke oszillierende Diffusionskonstante traten nur dann auf, wenn die Abweichun-

gen von einer einheitlichen Wanddicke sehr klein waren. Variiert jedoch die Wanddicke innerhalb des Schaumes, so kommen die Interferenzerscheinungen nicht mehr vor. Desweiteren verliert sich der Kontrast der Interferenzerscheinungen an dünnen Filmen, wenn die Wanddicke groß im Vergleich zur Wellenlänge wird. Eine Bedeutung können Interferenzerscheinungen dennoch bei der Berechnung der Transmissionswahrscheinlichkeit und somit bei der Abschätzung der Diffusionskonstanten in Luft in (4.15) haben (siehe Abschnitt 4.3.2).

- Interferenzen in exakten Gittern: Photonen auf einer geschlossenen Kreisbahn im exakten Gitter bilden ein regelmässiges, statisches Interferenzmuster (stehende Welle), wenn die Länge der Kreisbahn ein Vielfaches der Wellenlänge ist. Desweiteren treten bei der Streuung an einem exakten Gitter Bragg-Reflektionen auf. Solche strukturabhängige Interferenzeffekte erfordern aber ein sehr exaktes Gitter. In Gittern, deren Störungen groß im Vergleich zur Wellenlänge sind, bleiben nur scheinbar zufällige Interferenzmuster übrig, die sich bei der Mittelung über alle möglichen unregelmäßigen Strukturen (Ensemble-Mittel) wegheben (siehe auch nächster Punkt).
- Interferenzeffekte, die immer bei Vielfachstreuung an ungeordneten Medien auftreten: Hierzu gehört der Rückstreueneffekt, der auf der Zeitumkehr-Symmetrie beruht, und Speckle-Muster. Diese Effekte hängen zwar mit allgemeinen Eigenschaften des vielfachstreuenden Mediums zusammen (also z.B. der mittleren effektiven freien Weglänge  $l^*$  bzw. der Diffusionskonstanten  $D$ ); es lässt sich aber nicht direkt auf die Struktur des Mediums, also z.B. auf die Stärke der Unregelmäßigkeiten, rückschließen. Um die Ergebnisse dieser Arbeit mit einem Experiment vergleichen zu können, muss im Experiment über die Intensitäten des Speckle-Musters gemittelt werden, z.B. indem die Probe während der Messung gedreht wird. Dies entspricht der Bildung des Ensemble-Mittels über alle möglichen ungeordneten Strukturen.

In einem sehr perfekten Schaum, bei dem alle Abweichungen vom exakten Sechseckgitter klein im Vergleich zur Wellenlänge sind, kann es also zu Interferenzeffekten kommen, die sich nicht wegmitteln lassen. Ein solcher perfekter Schaum wird allerdings experimentell sehr schwer herzustellen sein. Sobald der Schaum nicht mehr einem exakten Gitter entspricht, heben sich die Interferenzeffekte im Ensemble-Mittel auf.

## Kapitel 5

# Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit untersuchte die Lichtausbreitung in zweidimensionalen Schäumen bzw. zellulären Strukturen. Es zeigte sich, dass nicht nur der Flüssigkeitsanteil oder die durchschnittliche Größe der Luftblasen einen Einfluß auf die Lichtausbreitung haben, sondern auch, dass die Stärke der Unregelmäßigkeiten eine entscheidende Rolle spielt.

### Idee und Modelle:

Als Modell eines zweidimensionalen Schaumes dienten Sechseckgitter, deren Linien durch Flüssigkeitswände bzw. Kanäle ersetzt wurden. Das Licht breitete sich gemäß rein geometrischer Strahlenoptik aus.

Ein Experiment von Gittings, Bandyopadhyay und Durian legt nahe, dass zumindest für Schäume mit einem Flüssigkeits-Volumenanteil  $\epsilon$  zwischen 0,004 und 0,2 die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte von Photonen in der Flüssigkeit höher ist als in der Luft [4] (siehe auch Abschnitt 3.1). Deshalb betrachtete diese Arbeit zunächst das sogenannte Photon-Channelling-Modell, bei dem die Photonen an jeder Grenzfläche zwischen Flüssigkeit und Luft reflektiert werden und sich somit ausschließlich in den Flüssigkeitskanälen ausbreiten (Kapitel 3). In einem erweiterten Modell konnten Photonen in Kapitel 4 an den Grenzflächen sowohl reflektiert als auch transmittiert werden; die Wahrscheinlichkeiten dafür ergaben sich aus den Fresnel'schen Formeln.

Die Ausbreitung zumindest im Photon-Channelling-Fall ist streng deterministisch. Mittelwerte wurden daher immer über viele mit unterschiedlichen Winkeln gestartete Photonen gebildet. Abschnitt 3.7.1 zeigte darüber hinaus, dass die Mittelwerte nahezu unabhängig von den gewählten Startwinkeln sind, wenn diese in ausreichender Anzahl zufällig gewählt werden oder ein ganzer (möglicherweise auch sehr kleiner) Winkelbereich abgedeckt wird.

### Simulationen und Ergebnisse:

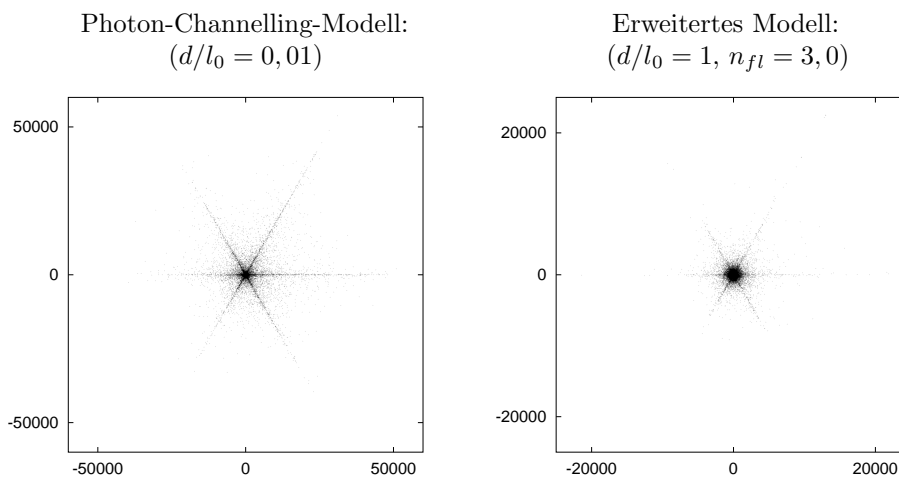


Abbildung 5.1: Photonverteilung im exakten Sechseckgitter nach der Zeit  $t = 100000 l_0/c_0$ .

Für beide Modelle wurde die Photonenausbreitung simuliert (Abschnitte 3.6 und 4.1). Wesentliches Ergebnis der Simulationen war, dass bei beiden Modellen die Photonen sich in einem exakten Sechseckgitter superdiffusiv ausbreiten, wohingegen in unregelmäßigen Schäumen nur Diffusion vorliegt (siehe auch Abschnitte 3.7 und 4.3). Dies kann man bereits an der Photonverteilung erkennen: In unregelmäßigen Gittern ist sie gaußförmig, während sie in exakten Gittern eine sternförmige Gestalt annimmt (siehe Abbildung 5.1). Dort breiten sich die Photonen nämlich bevorzugt entlang der Gitterhaupttrichtungen aus. Das quadratische Mittel der Photonpositionen  $\langle r^2 \rangle$  nimmt im unregelmäßigen Gitter, wie für die Diffusion üblich, linear mit der Zeit  $t$  zu; im perfekten Schaum gehorcht es einem Potenzgesetz  $\langle r^2 \rangle \propto t^\nu$ , wobei der Exponenten  $\nu \approx 1,72 \pm 0,02$  unabhängig vom Verhältnis der Kanaldicke zur Kanallänge zu sein scheint.

Sogar in sehr schwach gestörten Gittern ist die Photonenausbreitung für große Zeiten immer diffusiv. Allerdings ist die Diffusionskonstante dann wesentlich größer als für Gitter mit großen Unregelmäßigkeiten. Es gibt somit eine Abhängigkeit der Diffusionskonstanten von der Stärke der Störungen (siehe Abbildung 5.2). Die Abhängigkeit ist bei der Ausbreitung gemäß dem Photon-Channelling-Modell sehr stark; beim erweiterten Modell ist sie vor allem bei einem kleinem Brechungsindex der Flüssigkeit schwächer.

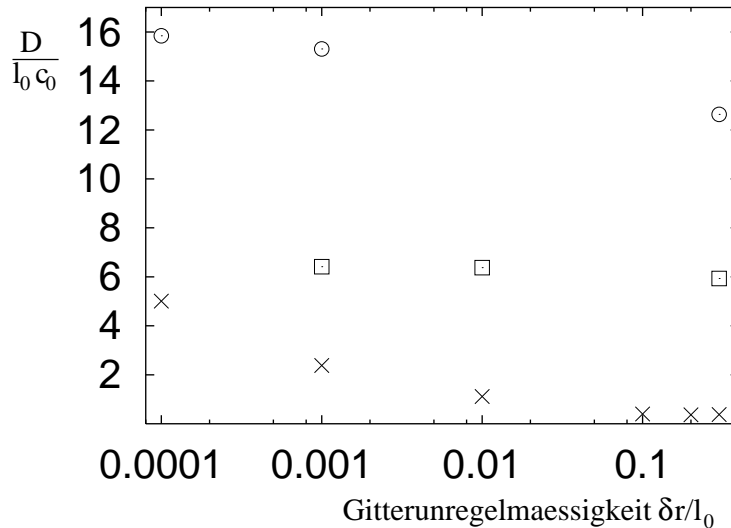


Abbildung 5.2: Abhängigkeit der Diffusionskonstanten von der Unregelmäßigkeit der Gitter. Alle Daten stammen von Simulationen in Gittern mit  $d/l_0 = 0, 1$ . Die Kreuze wurden nach dem Photon-Channelling-Modell simuliert. Die Ergebnisse des erweiterten Modells mit  $n_{fl} = 1, 33$  sind als Quadrate (senkrechte Polarisation) und Kreis (parallele Polarisation) eingezeichnet.

### Theorie des Photon-Channelling:

Für das Photon-Channelling-Modell wurden mehrere theoretische Modelle untersucht. Eine Übersicht über die Ergebnisse dieser Modelle und ein Vergleich mit den Simulationsdaten ist in Abbildung 5.3 dargestellt.

Die theoretischen Modelle betrachteten nur die Positionen der durchquerten Kanäle und vernachlässigten den genauen Ort eines Photons innerhalb eines Kanals. Abschnitt 3.3 ging zunächst von rein zufälligen Kanalwechseln aus. Dies entspricht einem Random-Walk mit Schritten der Länge eines Kanals, wobei man am Ende jedes Schrittes entweder  $60^\circ$  nach links oder  $60^\circ$  nach rechts abbiegt. Ein solcher Random-Walk ist ein ausgezeichnetes Modell für die Lichtausbreitung in ausreichend ungeordneten Sechseckgittern. Sind die Unordnungen nämlich so groß, dass jeder Kanalwechsel unabhängig von den vorherigen stattfindet, so liegt ein Random-Walk mit zufälligen Kanalwechseln vor.

Um weitreichende Korrelationen zu berücksichtigen, wurde in Abschnitt 3.4 ein Lévy-Walk-Modell entwickelt. Es beruht auf der Beobachtung, dass es ausreicht, nur zwei Arten von effektiven Schritten zu betrachten: Entweder ein Photon macht einen sehr langen geraden Schritt entlang einer Gitter-

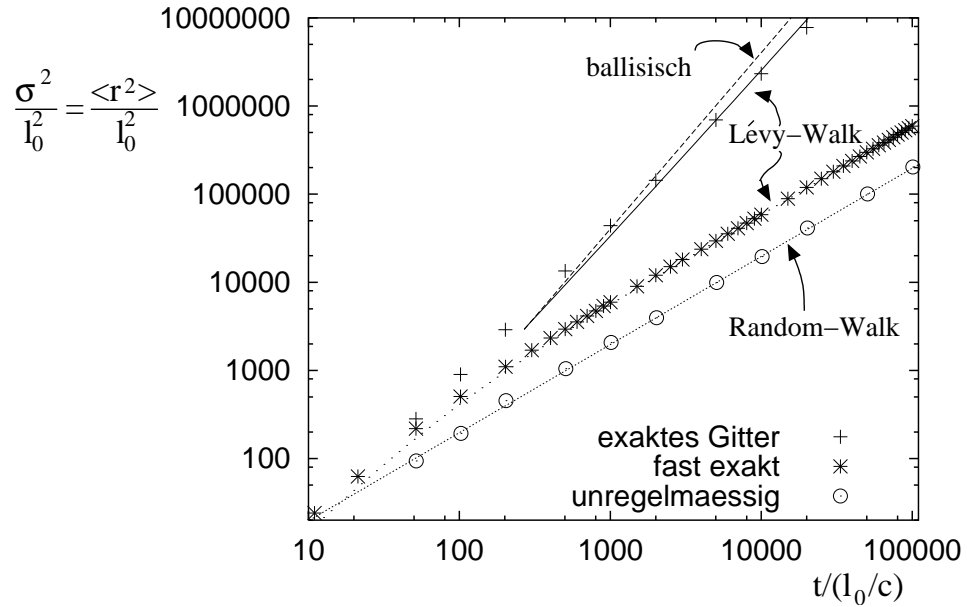


Abbildung 5.3: Mittleres Abstansquadrat  $\sigma^2$  in Abhängigkeit von der Zeit für Gitter mit  $d/l_0 = 0,1$  und verschieden starker Unregelmäßigkeit. Die Simulationsergebnisse nach dem Photon-Channelling-Modell aus Kapitel 3 sind durch Kreuze (exaktes Gitter), Sterne (schwach unregelmäßiges Gitter mit  $\delta r = 0,01 l_0$ ) und Kreise (stark unregelmäßiges Gitter mit  $\delta r = 0,3 l_0$ ) dargestellt. Zum Vergleich ist für das exakte Gitter die ballistische Näherung (3.19) als gestrichelte Linie und das Lévy-Walk-Ergebnis (3.40) als durchgezogene Kurve (beide ohne Fitparameter) eingezeichnet. Als Vergleich für die Ergebnisse im fast exakten Gitter dient das Resultat des Lévy-Walk-Modell mit Exponentialfaktor in der Schrittlängenverteilung (siehe auch Abbildung 3.23), eingetragen als dünn gepunktete Linie (ein Vorfaktor wurde dabei angefitet). Für das unregelmäßigen Gitter stimmt  $\sigma^2$  hervorragend und ohne Fitparameter mit dem Ergebnis (3.17) des Random-Walk-Modells mit zufälligen Kanalwechseln überein (dicht gepunktete Linie).

haupttrichtung oder es bleibt für eine lange Wartezeit auf der Stelle stehen (bzw. läuft lange auf einer Kreisbahn mit vernachlässigbar kleinem Radius). Geht man in gröbster Näherung davon aus, dass diese Schritte unendlich lange dauern, dass also ein Teil der Photonen immer geradeaus und ein anderer Teil immer im Kreis läuft, so ergibt sich ballistisches Ausbreitungsverhalten mit  $\langle r^2 \rangle \propto t^2$  (siehe auch Gleichung (3.19)). Über genauere Winkelbetrachtungen läßt sich eine realistischere Schrittdauerverteilung  $\propto \frac{1}{t^2+1}$  herleiten. Wie für einen superdiffusiven Prozess notwendig divergieren das erste und zweite Moment dieser Verteilung. Mit Hilfe des Formalismus für den Continuous-Time-Random-Walk lässt sich das mittlere Abstansquadrat genauer berechnen: Man erhält ein fast ballistisches Verhalten (siehe (3.40):  $\langle r^2 \rangle \propto t^2 / \ln(t)$ ). Zudem liefert das Modell die Sternform der Photonenverteilung. Die Ausbreitung in schwach gestörten Gittern lässt sich

ebenfalls als Lévy-Walk beschreiben. Da die Korrelationen in einem unregelmäßigen Gitter von Schritt zu Schritt exponentiell abnehmen, wird dazu an die Schrittdauerverteilung ein Exponentialfaktor multipliziert. Diese ist dann also proportional zu  $\frac{1}{t^2+1} \exp[t/t(n = j_0)]$  (mit  $t(n = j_0)$  aus (3.7) und (3.42)). Der Formalismus des Continuous-Time-Random-Walks liefert für die neuen Schrittdauerverteilung ein Ausbreitungsverhalten, welches (in Übereinstimmung mit den Simulationen) für  $t < t(n = j_0)$  superdiffusiv und für  $t > t(n = j_0)$  diffusiv ist.

Im Gegensatz zu den eben besprochenen Theoriemodellen liefert die Simulation für exakte Sechseckgitter ein Potenzgesetz für die mittlere quadratische Abweichung. Wie in Abschnitt 3.4.4 gezeigt, lässt es sich ebenfalls aus einem Lévy-Walk ableiten, indem man eine selbstähnliche Schrittlängenverteilung konstruiert. Sie führt auf einen Exponenten 1,74, der dem Wert der Simulationen (1,72) erstaunlich nahe kommt.

In Abschnitt 3.5 wurden die Modelle des Random-Walks mit zufälligen Kanalwechsellern und des Lévy-Walks in schwach gestörten Gittern kombiniert. Damit kann man die Abhängigkeit der Diffusionskonstante von der Stärke der Unregelmäßigkeit berechnen (siehe Abbildung 5.2). Insbesondere lässt sich abschätzen, dass in einem Schaum  $\delta r < 0,037 d$  gelten muss, damit die Diffusionskonstante mehr als 10% über dem Ergebnis des Random-Walk-Modells mit zufälligen Kanalwechsellern liegt. Die Abhängigkeit der Diffusionskonstante von den Gitterstörungen lässt sich also vor allem in Schäumen mit hohem Wasseranteil (großem  $d/l_0$ ) beobachten.

Die Zeitabhängigkeit für alle diese Modelle ergibt sich mit Hilfe einer Beziehung zwischen Zeit und Schrittzahl. Sie wurde zu Beginn des Theorieteils aus einfachen Überlegungen zu erlaubten Winkeln und möglichen Kanalwechsellern hergeleitet (siehe Abschnitt 3.2).

### Photonenausbreitung in Flüssigkeit und Luft:

Kapitel 4 behandelte das erweiterte Modell, bei dem Photonen sich sowohl in der Flüssigkeit als auch in der Luft ausbreiten können. Theoretische Überlegungen liefern insbesondere das Verhältnis der mittleren Transmissionswahrscheinlichkeiten  $T_{fl \rightarrow g}/T_{g \rightarrow fl}$ . Dabei ist  $T_{fl \rightarrow g}$  die mittlere Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein Photon an einer Grenzschicht von der Flüssigkeit zur Luft transmittiert wird,  $T_{g \rightarrow fl}$  die entsprechende Wahrscheinlichkeit für den Übergang aus der Luft in die Flüssigkeit. Gittings, Bandyopadhyay und Durian haben bereits in [4] auf Grund ihrer Simulationsergebnisse vermutet, dass  $T_{fl \rightarrow g}/T_{g \rightarrow fl} = n_g/n_{fl}$  ist (wobei  $n_g$  und  $n_{fl}$  die Brechungsindizes von Luft und Flüssigkeit sind). In Kapitel 4 wurde dies nicht nur durch die Si-

mulationen zum erweiterten Modell bestätigt sondern auch theoretisch aus der Annahme hergeleitet, dass alle Winkel in der Flüssigkeit gleichwahrscheinlich auftreten (Abschnitt 4.2). Desweiteren konnte eine Abschätzung für die Diffusionskonstante hergeleitet werden. Danach dominiert für einen hohen Flüssigkeitsanteil (großes  $d/l_0$ ) die Ausbreitung in der Flüssigkeit und damit das Photon-Channelling, wohingegen für einen geringen Flüssigkeitsanteil das Photon-Channelling kaum mehr eine Rolle spielt. Dieses Verhalten ergibt sich auch, wenn man die Simulationsergebnisse für das erweiterte Modell untersucht (Abschnitt 4.3): Superdiffusion und die charakteristische Sternenform treten vor allem in exakten Gittern mit großem  $d/l_0$  und großem Brechungsindex der Flüssigkeit  $n_{fl}$  auf (siehe z.B. Abbildung 5.1). Bei  $n_{fl} > 2$  gibt es sogar einen Photonenanteil, der nie die Flüssigkeit verläßt und sich somit wie im Photon-Channelling-Modell ausbreitet (siehe Abschnitt 4.3.4). Für kleine  $d/l_0$  und kleine  $n_{fl}$  ist keine Sternenform mehr erkennbar und die Superdiffusion geht beinahe in gewöhnliche Diffusion über (zumindest im Langzeitlimes). Die Momentenanalyse zeigt jedoch nach wie vor eindeutig anomale Diffusion (siehe Abbildung 4.13). Auch die Diffusionskonstanten hängen immer noch von der Stärke der Unordnung im Gitter ab (siehe Abbildung 5.2).

### Ausblick:

In dieser Arbeit wurde das Photon-Channelling in zweidimensionalen Strukturen untersucht. In ungeordneten dreidimensionalen Schäumen ergibt sich wahrscheinlich ein ähnliches Verhalten. Interessant wäre es herauszufinden, ob es Superdiffusion oder zumindest erhöhte Diffusionskonstanten in (fast) regelmäßigen dreidimensionalen Strukturen gibt, wie z.B. in einer Struktur aus (eventuell leicht deformierten) Kelvin-Zellen. Dabei ist allerdings noch immer die Frage unbeantwortet, welche Mechanismen überhaupt zur Streuung in Schäumen führen. Im Zweidimensionalen gibt es nur die Flüssigkeitskanäle und deren Verzweigungen; in drei Dimensionen kommen die Flüssigkeitswände, die Kanten (Plateau-Border genannt) und die Verzweigungspunkte der Kanten als Streuer in Frage. Auch in Bezug auf das Photon-Channelling ist unklar, ob eher die Wände oder die Kanten als Lichtleiter in Frage kämen.

Für zweidimensionale Systeme ist die interessanteste Frage natürlich, ob sich Superdiffusion oder eine Abhängigkeit der Diffusionskonstanten von Gitterstörungen im Experiment messen lassen können. Dazu wären fast perfekte zweidimensionale Schäume (z.B. an Flüssigkeitsoberflächen oder zwischen zwei Begrenzungsplatten) notwendig. Allerdings spielen in einem zu perfekten Gitter wahrscheinlich hier nicht betrachtete Interferenzeffekte eine Rolle (siehe Abschnitt 4.4). Außerdem zerstören bereits kleinste Unord-



nungen die Superdiffusion. Die superdiffusive Ausbreitung wird daher sehr schwer zu beobachten sein. Ein Einfluss von Unregelmäßigkeiten auf Diffusionskonstanten sollte sich leichter feststellen lassen. Die Ergebnisse dieser Arbeit sprechen dafür, dass dazu vor allem Schäume mit hohem Flüssigkeitsanteil und hohem Brechungsindex geeignet sind. Der Flüssigkeitsanteil darf allerdings nur so groß sein, dass man noch Kanäle mit nahezu parallelen Grenzflächen hat (siehe Abschnitt 3.8). Darüberhinaus wäre es sehr interessant im Experiment herauszufinden, ob, wie in der hier entwickelten Theorie vorhergesagt, die Regelmäßigkeit eines Schaumes Einfluss auf das Ausbreitungsverhalten von Licht hat.



# Literaturverzeichnis

- [1] M.U. Vera, A. Saint-Jalmes, D.J. Durian: *Scattering optics of foams*, Applied Optics, Vol. **40** (2001), pp. 4210-4214
- [2] MF. Miri, H. Stark: *Persistent random walk in a honeycomb structure: Light transport in foams*, Physical Review E, Vol. **68** (2003), pp. 31102-1-8
- [3] MF. Miri, H. Stark: *The role of geometrical optics for light transport in dry foams*, Europhysics Letters **64** (2004), pp. 567-573
- [4] A.S. Gittings, R. Bandyopadhyay, D.J. Durian: *Photon Channelling in Foams*, Europhysics Letters **65** (2004), pp. 414-419
- [5] D. Weaire, S. Hutzler: *The Physics of Foams*, Oxford University Press, Oxford, New York (1999)
- [6] A. Schuster: *Radiation through a foggy Atmosphere*, The Astrophysical Journal, Vol. **21** (1905), pp. 1-22
- [7] D.A. Weitz, D.J. Pine: *Diffusing-wave spectroscopy in Dynamic Light Scattering: The Method and Some Applications*, herausgegeben von W. Brown, Oxford University Press, Oxford, New York (1993)
- [8] P.-E. Wolf, G. Maret: *Weak Localisation and Coherent Backscattering of Photons in Disordered Media*, Physical Review Letters, Vol. **55** (1985), pp. 2696-2699
- [9] E. Akkermans, P.E. Wolf, R. Maynard, G. Maret: *Theoretical study of the coherent backscattering of light by disordered media*, Journal de Physique, Vol. **49** (1988), pp. 77-98
- [10] G. Maret, P.E. Wolf: *Static and dynamic multiple scattering of light*, Physica A, Vol. **157** (1989), pp. 293-300
- [11] G. Maret, P.E. Wolf: *Multiple Light scattering from Disordered Media. The Effect of Brownian Motion of Scatterers*, Zeitschrift für Physik B-Condensed Matter, Vol. **65** (1987), pp. 409-413

- [12] M. Heckmeier, G. Maret: *Visualization of flow in multiple-scattering liquids*, Europhysics Letters, Vol. **34** (1996), pp. 257-262
- [13] D.J. Durian, D.A. Weitz, D.J. Pine: *Multiple Light-Scattering Probes of Foam structure and Dynamics*, Science, Vol. **252** (1991), pp. 686-688
- [14] I.N. Bronstein, K.A. Semendjew, G. Musiol, H. Mühlig: *Taschenbuch der Mathematik*, 5. Aufl., Verlag Harri Deutsch, Thun, Frankfurt a. M. (2000)
- [15] R. Tweer: *Vielfachstreuung von Licht in Systemen dicht gepackter Mie-Streuer: Auf dem Weg zur Anderson-Lokalisierung?*, Dissertation, Universität Konstanz (2002)
- [16] E.W. Montroll, G.H. Weiss: *Random Walks on Lattices. II*, Journal of Mathematical Physics, Vol. **6** (1965), pp. 167-181
- [17] B.D. Hughes: *Random Walks and Random Environments, Volume 1: Random Walks*, Oxford University Press, Oxford (1995)
- [18] M.F. Shlesinger, J. Klafter, B.J. West: *Lévy Walks with applications to turbulence and chaos*, Physica, Vol. **140A** (1986), pp. 212-218
- [19] J. Klafter, A. Blumen, M.F. Shlesinger: *Stochastic pathway to anomalous diffusion*, Physical Review A, Vol. **35** (1987), pp. 3081-3085
- [20] A. Blumen, G. Zumofen, J. Klafter: *Transport aspects in anomalous diffusion: Lévy walks*, Physical Review A, Vol. **40** (1989), pp. 3964-3973
- [21] J. Klafter, A. Blumen, G. Zumofen, M.F. Shlesinger: *Lévy Walk approach to anomalous diffusion*, Physica A, Vol. **168** (1990), pp. 637-645
- [22] G. Zumofen, J. Klafter: *Scale-invariant motion in intermittent chaotic systems*, Physical Review E, Vol. **47** (1993), pp. 851-863
- [23] G. Zumofen, J. Klafter, A. Blumen: *Lévy walks and propagators in intermittent chaotic systems*, Physical Review E, Vol. **47** (1993), pp. 2183-2186
- [24] G. Zumofen, J. Klafter, M.F. Shlesinger: *Lévy Flights and Lévy Walks Revisited in Anomalous Diffusion. From Basics to Applications*, herausgegeben von A. Pękałski, K. Sznajd-Weron, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (1999)
- [25] W. Paul, J. Baschnagel: *Stochastic Processes. From Physics to Finance*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (1999)

- [26] G. Doetsch: *Tabellen zur Laplace-Transformation und Anleitung zum Gebrauch*, Springer-Verlag, Berlin, Göttingen (1947)
- [27] A. Erdélyi, W. Magnus, F. Oberhettinger, F.G. Tricomi: *Tables of Integral Transforms*, Vol. 1, McGraw-Hill Book Company, New York (1954)
- [28] J.R. Shewchuk: <http://www-2.cs.cmu.edu/~quake/triangle.html>
- [29] D.N. Armstead, B.R. Hunt, E. Ott: *Anomalous diffusion in infinite horizon billiards*, Physical Review E, Vol. **67** (2003), pp. 021110-1-7
- [30] J. Machta, R. Zwanzig: *Diffusion in a Periodic Lorentz Gas*, Physical Review Letters, Vol. **50** (1983), pp. 1959-1962
- [31] W. Demtröder: *Experimentalphysik 2: Elektrizität und Optik*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (1999)



# Danksagung

An erster Stelle möchte ich mich bei PD Dr. Holger Stark für die hervorragende Betreuung, die ununterbrochene Erreichbarkeit bei allen Fragen sowie die zahlreichen Ideen, Tipps und Hinweise bedanken. Vielen Dank auch an Prof. Dr. Georg Maret, der sich bereit erklärt hat, das Zweitgutachten zu dieser Arbeit anzufertigen.

Bei meinem Zimmerkollegen Michael Reichert möchte ich mich vor allem für die stets sehr schnelle und gute Hilfe bei allen Computerproblemen bedanken. MirFaetz Miri danke ich für eine Reihe nützlicher Literaturhinweise und für die vielen interessanten Diskussionen. Prof. Dr. Jörg Baschnagel verdanke ich einen Hinweis auf die selbstähnlichen Lévy-Walks.

Meinen Kommilitonen möchte ich dafür danken, dass sie unter anderem dafür gesorgt haben, dass das Studium auch Spaß und Freude gemacht hat und dass so manche Prüfungsvorbereitungen durch gemeinsames Lernen wesentlich vereinfacht worden sind.

Besonderer Dank gilt meinen Eltern, die mich zu jeder Zeit und in jeder Hinsicht unterstützen.