



ΕΘΝΙΚΟ & ΚΑΠΟΔΙΣΤΡΙΑΚΟ  
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΘΗΝΩΝ

Τμήμα Φυσικής

ΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

**Μελέτη ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων σε μη  
γραμμικά μέσα με την μέθοδο των πεπερασμέ-  
νων διαφορών στο πεδίο του χρόνου**

Γεώργιος Κ. Σιμόπουλος

Αθήνα 2022



## Περίληψη

Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιείται η μέθοδος FDTD προκειμένου να προσομοιωθούν ηλεκτρομαγνητικά κύματα σε διάφορα είδη υλικών στην μία και στις δύο χωρικές διαστάσεις. Τα προγράμματα *hifftmethod* και *Material\_and\_pulse*, πληροφορίες για τα οποία αναγράφονται στο παράρτημα, σε συνδυασμό με τον κώδικα σε περιβάλλον Matlab που παρατίθεται σε κάθε υποενότητα συντελούν στην δημιουργία των προσομοιώσεων. Αρχικά γίνεται συζήτηση σχετικά με την θεωρία που χρησιμοποιείται σε όλη την έκταση της εργασίας, η οποία περιλαμβάνει τις εξισώσεις Maxwell και την σύνδεσή τους με την μέθοδο FDTD. Όλα τα υπόλοιπα κεφάλαια ακολουθούν την ίδια δομή, δηλαδή αρχικά περιγράφονται οι ιδιαιτερότητες κάθε υλικού και ηλεκτρομαγνητικού παλμού που χρησιμοποιούνται, έπειτα αναδεικνύεται η εφαρμογή της μεθόδου FDTD και στο τέλος κάθε υποενότητας παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων.

## Abstract

In the current dissertation FDTD method is used to simulate electromagnetic waves at several kinds of materials in one and in two dimensions. The programs *hifftmethod* and *Material\_and\_pulse*, more information of which is given in the appendix, in combination with the Matlab code written in each subsection both result in the production of the simulations. Initially, the theory used in every part of the dissertation is discussed, which contains Maxwell equations and their connection with FDTD method. The rest of the chapters follow the same format, beginning with the description of the particularities of each used material and electromagnetic pulse, afterwards the implementation of the FDTD method is illustrated and at the end of each subsection the results of the simulations are illustrated.



*Στους γονείς μου*

*για την θερμή υποστήριξή τους σε όλη μου την ακαδημαϊκή και μη πορεία*



# Περιεχόμενα

<b>1</b>	<b>Μέθοδος πεπερασμένων διαφορών στο πεδίο του χρόνου (FDTD)</b>	<b>9</b>
1	Ηλεκτρομαγνητικά κύματα και ύλη	9
1.1	Maxwell	9
1.2	Διάδοση στην ύλη	11
1.3	Αναγωγή στις 3D, 2D και 1D	13
2	Φορμαλισμός πεπερασμένων διαφορών	14
2.1	Μετασχηματισμός πρώτης παραγώγου	14
2.2	Μετασχηματισμός δεύτερης παραγώγου	16
3	Αλγόριθμος Yee	16
<b>2</b>	<b>Μονοδιάστατη προσομοίωση (1D) με την χρήση της FDTD</b>	<b>20</b>
1	Είδη παλμών	20
2	Προσομοίωση στο κενό	21
2.1	FDTD φορμαλισμός	21
2.2	Αποτελέσματα προσομοιώσεων	22
3	Προσομοίωση σε διηλεκτρικό μέσο	25
3.1	FDTD φορμαλισμός	25
3.2	Αποτελέσματα προσομοιώσεων	26
4	Προσομοίωση σε διηλεκτρικό μέσο και απώλειες	31
4.1	FDTD φορμαλισμός	31
4.2	Αποτελέσματα προσομοιώσεων	33
<b>3</b>	<b>Μονοδιάστατη προσομοίωση (1D) σε υλικά με διασπορά με την χρήση της FDTD</b>	<b>39</b>
1	Debye	39
1.1	Ιδέα για την προέλευση εξίσωσης διηλεκτρικής σταθεράς	39
1.2	FDTD φορμαλισμός	40
1.3	Αποτελέσματα προσομοιώσεων	42
2	Drude	47
2.1	Μιγαδική διηλεκτρική σταθερά	47
2.2	FDTD φορμαλισμός	48
2.3	Αποτελέσματα προσομοιώσεων	50
3	Γραμμικά Lorentz	54

3.1	Μοντέλο του Lorentz . . . . .	54
3.2	FDTD φορμαλισμός . . . . .	56
3.3	Αποτελέσματα προσομοιώσεων . . . . .	58
4	Μη-γραμμικά Lorentz . . . . .	63
4.1	Πόλωση Kerr . . . . .	63
4.2	FDTD φορμαλισμός . . . . .	65
4.3	Αποτελέσματα προσομοιώσεων . . . . .	67
<b>4</b>	<b>Δισδιάστατη προσομοίωση (2D) με την χρήση της FDTD . . . . .</b>	<b>70</b>
1	Φορμαλισμός πεπερασμένων διαφορών (FDTD) σε 2D . . . . .	70
2	Διάδοση στο κενό . . . . .	71
3	Διάδοση στο κενό με συνοριακή συνθήκη Mur . . . . .	75
3.1	Enquist-Majda . . . . .	75
3.2	Συνοριακή συνθήκη Mur . . . . .	76
<b>5</b>	<b>Συμπεράσματα . . . . .</b>	<b>80</b>
	<b>Βιβλιογραφία . . . . .</b>	<b>81</b>
	<b>A' Μετασχηματισμός Fourier . . . . .</b>	<b>82</b>
	<b>B' Προγράμματα για τις υπολογιστικές προσομοιώσεις σε περιβάλλον Matlab . . . . .</b>	<b>84</b>
1	hifftmethod . . . . .	84
2	Material_and_pulse . . . . .	87





# Κεφάλαιο 1

## Μέθοδος πεπερασμένων διαφορών στο πεδίο του χρόνου (FDTD)

### 1 Ηλεκτρομαγνητικά κύματα και ύλη

#### 1.1 Maxwell

Όπως γνωρίζουμε από την ηλεκτρομαγνητική θεωρία οι εξισώσεις που περιγράφουν την διάδοση κυμάτων είναι εκείνες του Maxwell. Σε αυτό σημαντικότατο ρόλο είχε η προσθήκη του όρου  $\frac{\partial \vec{D}}{\partial t}$  στην εξίσωση του Ampère.

Θεωρώντας χώρο στον οποίο  $\rho = 0$ :

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho = 0 \quad (1.1)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (1.2)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (1.3)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{j} \quad (1.4)$$

Με

$$\vec{H} = \frac{\vec{B}}{\mu_0} - \vec{M} \quad \vec{D} = \epsilon_0 \epsilon_\infty \vec{E} + \vec{P}$$

$$\vec{j}_{tot} = \vec{j} + \frac{\partial \vec{P}}{\partial t} + \nabla \times \vec{M} = \vec{j} + \vec{j}_p + \vec{j}_M = \vec{j} + \vec{j}_b \quad \rho_{tot} = \rho - \nabla \cdot \vec{P}$$

Και αυτά για να ισχύει η εξίσωση συνέχειας:

$$\nabla \cdot \vec{j}_{tot} + \frac{\partial \rho_{tot}}{\partial t} = 0$$

Αν θεωρήσουμε ότι δεν υπάρχει μαγνήτιση, δηλαδή  $\vec{j}_M = \nabla \times \vec{M} = 0$  τότε:

$$(1.4) \rightarrow \nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{j} = \epsilon_0 \epsilon_\infty \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \vec{j}_p + \vec{j} \quad (1.5)$$

Αυτή θα είναι η γενική περίπτωση που θα χρησιμοποιούμε για τον νόμο Ampère, δηλαδή θα θεωρούμε ότι αντιμετωπίζουμε υλικά τα οποία δεν είναι μαγνητικά, ωστόσο μπορούν να παρουσιάσουν ρεύματα πόλωσης. Μπορούμε να κάνουμε τις εξής γενικές παρατηρήσεις.

- ▶ Τα ελεύθερα ρεύματα  $j$  συνήθως περιγράφονται από τον νόμο του Ωμ:  $\vec{j} = \sigma \vec{E}$ . Ωστόσο υπάρχουν και περιπτώσεις όπου τα ρεύματα είναι τόσο υψηλά που τότε παρουσιάζονται φαινόμενα κορεσμού, διότι υπάρχει υπερβολικός αριθμός φωνονίων που έχουν διεγερθεί στο πλέγμα και συνεπώς η ταχύτητα των ηλεκτρονίων μειώνεται (φαινόμενο Gunn). Στις περιπτώσεις που θα μελετηθούν στην παρούσα εργασία δεν συμπεριλαμβάνονται τέτοια φαινόμενα, παρά μόνο ο νόμος του Ωμ, διότι θεωρούμε λογικές τιμές ρευμάτων.
- ▶ Τα δεσμευμένα ρεύματα είναι στην ουσία ρεύματα λόγω χρονικής μεταβολής της πόλωσης:  $\vec{j}_p = \frac{\partial \vec{P}}{\partial t}$ . Όμως το μέτρο της πόλωσης στην γενική περίπτωση είναι:

$$\vec{P}(t) = \epsilon_0 \left( \sum_{n=1}^{n_{max}} \chi^{(n)}(t) \vec{E}^n(t) \right) \quad (1.6)$$

Για την περίπτωση που  $n_{max} = 1$  τότε η πόλωση είναι ανάλογη του πεδίου, δηλαδή η σχέση (1.5) για  $\vec{j} = 0$  παραμένει γραμμική. Στην περίπτωση που  $n_{max} > 1$  η πόλωση εξαρτάται από διαφορετική δύναμη από το πεδίο, δηλαδή η (1.5) δημιουργεί όρους μη γραμμικούς, δηλαδή ένας γραμμικός συνδυασμός λύσεων δεν αποτελεί λύση της (1.5). Επομένως τότε γίνεται μη γραμμική.

## 1.2 Διάδοση στην ύλη

Παρακάτω θα μιλήσουμε για τις γραμμικές περιπτώσεις.

- ▶ Στην περίπτωση του αέρα, όπου θεωρούμε την διάδοση κύματος παρόμοια με εκείνη στο κενό, προφανώς δεν θεωρούμε ύπαρξη υλικού, επομένως  $\vec{j}_p = 0$ , ενώ ταυτόχρονα δεν υπάρχουν ελεύθερα ρεύματα, δηλαδή κίνηση φορέων, άρα  $\vec{j} = 0$ .

$$(1.5) \rightarrow \nabla \times \vec{H} = \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (1.7)$$

- ▶ Στην περίπτωση ύπαρξης υλικού χωρίς απώλειες, παρά μόνο να έχει μεγαλύτερη διηλεκτρική σταθερά από εκείνη του κενού, τότε η ταχύτητα του κύματος μειώνεται ενώ η πόλωση του υλικού αυξάνεται. Επομένως θα έχουμε πόλωση της μορφής  $\vec{P} = \epsilon_0 \chi \vec{E}$ , επομένως:

$$(1.5) \rightarrow \nabla \times \vec{H} = \epsilon_0 (\epsilon_\infty + \chi) \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \epsilon_0 \epsilon_r \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \epsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (1.8)$$

- ▶ Στην περίπτωση ύπαρξης υλικού με απώλειες χωρίς συχνοτική εξάρτηση, θα πρέπει να λάβουμε υπόψη τα ρεύματα λόγω κίνησης φορέων (ωμικά), δηλαδή  $\vec{j} = \sigma \vec{E}$ , ενώ ταυτόχρονα διατηρούμε το  $\epsilon = \epsilon_r \epsilon_0$  (δηλαδή την ίδια γραμμική πόλωση), επομένως:

$$(1.5) \rightarrow \nabla \times \vec{H} = \epsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \vec{j} = \epsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \sigma \vec{E} \quad (1.9)$$

- ▶ Στην περίπτωση που το υλικό παρουσιάζει απώλειες με συχνοτική εξάρτηση της διηλεκτρικής σταθεράς

Θέλοντας να μελετήσουμε την γραμμική περίπτωση, ισοτροπικών υλικών τότε αν αγνοήσουμε την ύπαρξη σχετικής μαγνητικής διαπερατότητας ( $\mu_r = 1$ ):

$$\vec{D} = \epsilon(\omega) \vec{E} = \epsilon_r(\omega) \epsilon_0 \vec{E} \quad \vec{B} = \mu \vec{H} = \mu_r \mu_0 \vec{H} = \mu_0 \vec{H}$$

Η διηλεκτρική σταθερά με την εισαγωγή του φορμαλισμού με την ηλεκτρική μετατόπιση  $\vec{D}$  μπορεί να είναι μιγαδική. Τότε ουσιαστικά είναι διηλεκτρική

συνάρτηση και όχι σταθερά. Αυτό φαίνεται όταν μεταβούμε στον αντίστροφο χώρο (των συχνοτήτων) μέσω του μετασχηματισμού Fourier.

Για τις γραμμικές περιπτώσεις υλικών, δηλαδή  $\vec{P}(t) = \vec{P}^L = \epsilon_0 \chi_e^{(1)}(t) \vec{E}(t)$  (δηλαδή  $n_{max} = 1$  στην σχέση ( 1.6)):

$$( 1.5) \rightarrow \nabla \times \vec{H} = \epsilon_0 \epsilon_\infty \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \sigma \vec{E} + \epsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \left( \chi_e^{(1)}(t) \vec{E} \right) \quad (1.10)$$

Αν θέλαμε να βρούμε ποιά είναι η  $\chi_e^{(1)}(t)$  θα μπορούσαμε να το κάνουμε απλώς με τη χρήση του μετασχηματισμού Fourier εφόσον γνωρίζουμε την μορφή της  $\chi^{(1)}(\omega)$ . Η τελευταία συσχετίζεται με τη διηλεκτρική συνάρτηση  $\epsilon_r(\omega)$ :

$$\chi^{(1)}(\omega) = \epsilon_r(\omega) - \epsilon_\infty \quad (1.11)$$

Ωστόσο η μορφή της ( 1.10) είναι αρκετά πεπλεγμένη για να λυθεί στο πεδίο του χρόνου. Γενικώς δεν θα προσπαθούμε να επιλύσουμε την εξίσωση ( 1.10) στην μορφή που την βλέπουμε, αλλά θα δούμε ότι η FDTD μπορεί να εφαρμοστεί στην μετασχηματισμένη μέσω αντίστροφου μετασχηματισμού Fourier εξίσωση που προκύπτει από την γνωστή μορφή της πόλωσης  $\vec{P}(\omega)$ . Συνεπώς δεν χρειάζεται να γνωρίζουμε την μορφή της  $\chi_e^{(1)}(t)$  εφόσον θέλουμε να λύσουμε την διαφορική, αλλά αντί αυτής είναι σημαντική η  $\chi^{(1)}(\omega)$ .

- Τέλος, μπορεί να υπάρχει κάποια μη γραμμικότητα στην πόλωση, δηλαδή η διηλεκτρική συνάρτηση  $\epsilon(\omega)$  να εξαρτάται και από το πλάτος του ηλεκτρικού πεδίου σε διαφορετική δύναμη από την 1η:

$$\vec{D} = \epsilon_0 \epsilon_\infty \vec{E} + \vec{P}^L + \vec{P}^{NL} \quad (1.12)$$

Δηλαδή όλοι οι όροι της ( 1.6) με  $n > 1$  για  $n_{nmax} > 1$  περιέχονται στον μη γραμμικό όρο πόλωσης  $\vec{P}^{NL}$ . Θα δείξουμε αργότερα στο αντίστοιχο κεφάλαιο ότι με την χρήση αυτής της σχέσης μπορούμε να βρούμε την διηλεκτρική μετατόπιση, άρα και την χρονική της παράγωγο, δηλαδή τον στροβιλισμό του μαγνητικού πεδίου, όπως ακριβώς κάναμε για την σχέση ( 1.10). Θα χρησιμοποιήσουμε, λοιπόν, την ακόλουθη σχέση για το αντίστοιχο ρεύμα πόλωσης που θα προκύψει μετά τις πεπερασμένες διαφορές που και αυτές θα αναλύσουμε παραπάτω. Επίσης  $\sigma \approx 0$ :

$$( 1.5) \rightarrow \nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{j} = \epsilon_0 \epsilon_\infty \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \vec{j}_p \quad (1.13)$$

### 1.3 Αναγωγή στις 3D, 2D και 1D

- Σε 3D: Θεωρούμε ότι  $\rho = 0$ , ενώ ότι τα  $\vec{j}$  και  $\vec{M}$  λειτουργούν ως ανεξάρτητες πηγές ενέργειας ΗΜ πεδίων ( $\vec{j}_{source}, \vec{M}_{source}$ ). Ακόμη, θεωρούμε ότι οι απώλειες είναι ωμικές, δηλαδή έχουμε θερμικές απώλειες μόνο, άρα μπορούμε να τα γράψουμε με την παρακάτω μορφή:

$$\vec{j} = \vec{j}_{source} + \sigma \vec{E} \quad \vec{M} = \vec{M}_{source} + \sigma^* \vec{H}$$

Επομένως σε ιστροπικά υλικά χωρίς διασπορά με απώλειες λαμβάνουμε το σετ εξισώσεων:

$$(1.3) \rightarrow \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \nabla \times \vec{E} - \frac{1}{\mu} (\vec{M}_{source} + \sigma^* \vec{H}) \quad (1.14)$$

$$(1.5) \rightarrow \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \nabla \times \vec{H} - \frac{1}{\epsilon} (\vec{j}_{source} + \sigma \vec{E}) \quad (1.15)$$

Οι οποίες εξισώσεις για μη ύπαρξη πηγών ρευμάτων και μαγνήτισης, θα μας οδηγήσουν στις παρακάτω:

$$(1.3) \rightarrow \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \nabla \times \vec{E} - \frac{1}{\mu} \sigma^* \vec{H} \quad (1.16)$$

$$(1.5) \rightarrow \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \nabla \times \vec{H} - \frac{1}{\epsilon} \sigma \vec{E} \quad (1.17)$$

- Σε 2D: Η υπόθεση είναι ότι έχουμε ομοιόμορφο κύμα στην z τουλάχιστον διεύθυνση. Αυτό σημαίνει ότι:

$$\frac{\partial u_i}{\partial z} = 0$$

με  $u_i = \{E_i, H_i\}$  και  $i = \{x, y, z\}$ . Συνεπώς περιορίζονται οι όροι που προκύπτουν από τις εξισώσεις (1.16) και (1.17), οι οποίες είναι συνολικά 6, δηλαδή το σύνολο των συνδυασμών των A και i που ορίσαμε παραπάνω.

Εμείς, όμως, θα ασχοληθούμε με εκείνες για τις οποίες έχουμε πόλωση κύματος EM ( $TM_z$ ), οπότε  $H_z = 0$ , άρα οι τιμές του  $u_i$  περιορίζονται στις  $H_x, H_y, E_z$ . Επομένως:

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left( -\frac{\partial E_z}{\partial y} - \sigma^* H_x \right) \quad (1.18)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left( \frac{\partial E_z}{\partial x} - \sigma^* H_y \right) \quad (1.19)$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \left( \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} - \sigma E_z \right) \quad (1.20)$$

- Σε 1D: Η υπόθεση είναι ότι έχουμε ομοιόμορφο κύμα στον  $y$  και στον  $z$  άξονα. Οπότε:

$$\frac{\partial u_i}{\partial z} = 0 \qquad \frac{\partial u_i}{\partial y} = 0$$

Εμείς θα ασχοληθούμε μόνο με την EM ( $TM_z$ ) περίπτωση, συνεπώς:

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{1}{\mu} (-\sigma^* H_x) \quad (1.21)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left( \frac{\partial E_z}{\partial x} - \sigma^* H_y \right) \quad (1.22)$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \left( \frac{\partial H_y}{\partial x} - \sigma E_z \right) \quad (1.23)$$

## 2 Φορμαλισμός πεπερασμένων διαφορών

### 2.1 Μετασχηματισμός πρώτης παραγώγου

Θεωρούμε την σειρά Taylor της  $u = u(x_i, t_n)$ , με  $n$  το χρονικό βήμα και  $i$ -οστή θέση η οποία αντιπροσωπεύει ΗΜ πεδίο όπως παραπάνω. Σε διακριτοποιημένη μορφή θα είναι  $t_n = n\Delta t$  ενώ  $x_i = i\Delta x$ . Για μικρή μετακίνηση κατά  $\pm\Delta x$  από την θέση  $x_i$  την στιγμή  $t_n$ . Τότε:

$$u(x_i \pm \Delta x) \Big|_{t_n} = u(x_i) \Big|_{t_n} \pm \Delta x \frac{\partial u(x_i)}{\partial x} \Big|_{t_n} + \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2 u(x_i)}{\partial x^2} \Big|_{t_n} + O((\Delta x)^3) \quad (1.24)$$

Αφαιρώντας τις 2 σχέσεις που υπάρχουν στην (1.24) προκύπτει η πρώτη παράγωγος:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u(x_i + \Delta x) \Big|_{t_n} - u(x_i - \Delta x) \Big|_{t_n}}{2\Delta x} \equiv \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x} \quad (1.25)$$

Σε πλήρη αναλογία, για μικρή μετακίνηση κατά  $\pm\Delta t$  από την στιγμή  $t_n$  στην θέση  $x_i$  και πάλι αφαιρώντας τις 2 σχέσεις που θα προκύψουν:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u(t_n + \Delta t)|_{x_i} - u(t_n - \Delta t)|_{x_i}}{2\Delta t} \equiv \frac{u_i^{n+1} - u_i^{n-1}}{2\Delta t} \quad (1.26)$$

Οι σχέσεις (1.25) και (1.26) στην ουσία περιγράφουν σε πρώτη προσέγγιση τον φορμαλισμό που χρησιμοποιεί ο Yee για τον υπολογισμό ποσοτήτων με την χρήση χρονικών και χωρικών διακριτών βημάτων. Ο Yee έκανε αυτήν την απλή παρατήρηση, δηλαδή το γεγονός ότι μας δίνεται η δυνατότητα να διακριτοποιήσουμε τα χωρικά και χρονικά βήματα. Αυτό αποδείχθηκε σημαντικό διότι ο προγραμματισμός των προσομοιώσεων βασίζεται σε χρήση διακριτών ποσοτήτων. Στις συγκεκριμένες περιπτώσεις η διαφορά χωρικών βημάτων είναι  $i + 1 - (i - 1) = 2$  ανά  $2\Delta x$ , ενώ η διαφορά χρονικών βημάτων είναι  $n + 1 - (n - 1) = 2$  ανά  $2\Delta t$ . Επομένως μπορούμε να τροποποιήσουμε τις παραπάνω σχέσεις για την περίπτωση του ενός μόνο χωρικού και χρονικού βήματος αντίστοιχα:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\Delta x} \quad (1.27)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} \quad (1.28)$$

Αυτές οι εξισώσεις θα φανούν χρήσιμες για την γραφή των εξισώσεων με τρόπο διακριτό προκειμένου να γραφούν σε υπολογιστικό περιβάλλον, όπως θα δούμε παρακάτω στον αλγόριθμο του Yee.

Είναι αναγκαίο να επισημανθεί η εξής παρατήρηση. Ανάλογα με το ποιο χρονικό βήμα θέλουμε να περιγράψουμε θα πρέπει οι δείκτες στα δεξιά μέλη των εξισώσεων αθροιζόμενοι να δίνουν το ίδιο αποτέλεσμα με εκείνο των δεικτών στα αριστερά μέλη. Με αυτόν τον τρόπο καταφέρνουμε να "κεντράρουμε" το δεξί μέλος σε ένα επιθυμητό βήμα. Αυτό ταυτόχρονα αποτελεί και έλεγχο για το αν έχουμε εκτελέσει σωστά τις πράξεις κατά την διακριτοποίηση που κάνουμε. Τα παραπάνω είναι αποτελέσματα του αλγορίθμου του Yee, τον οποίο θα αναλύσουμε στο αμέσως επόμενο κεφάλαιο.

Ας δούμε ένα παράδειγμα. Έστω ότι θέλουμε η ανανέωση των (1.27) και (1.28) να γίνει το χωρικό βήμα  $i$  ή το χρονικό βήμα  $n$  αντίστοιχα. Όμως σύμφωνα με όσα ειπώθηκαν νωρίτερα η ανανέωση αφορά τα  $i + \frac{1}{2}$  και  $n + \frac{1}{2}$  βήματα αντίστοιχα και όχι τα  $i$  και  $n$ . Άρα βλέπουμε ότι χρειάζεται η εισαγωγή ενός ενδιάμεσου βήματος.



Συνεπώς θα είναι πιο χρήσιμο να γράψουμε τις ( 1.27) και ( 1.28) ως εξής:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u_{i+\frac{1}{2}}^n - u_{i-\frac{1}{2}}^n}{\Delta x} \quad (1.29)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u_i^{n+\frac{1}{2}} - u_i^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t} \quad (1.30)$$

## 2.2 Μετασχηματισμός δεύτερης παραγώγου

Τις σχέσεις ( 1.24) αν τις προσθέσουμε μεταξύ τους αντί να τις αφαιρέσουμε βλέπουμε ότι προκύπτει (εντελώς ανάλογα με την εύρεση των σχέσεων ( 1.25) και ( 1.26)):

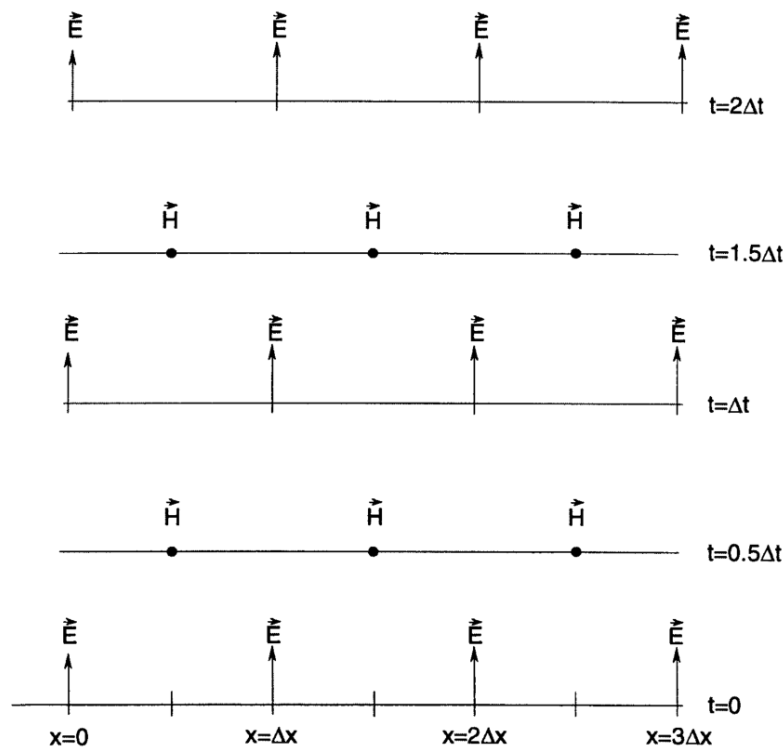
$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{x_i, t_n} = \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} + O((\Delta x)^2) \quad (1.31)$$

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{x_i, t_n} = \frac{u_i^{n+1} - 2u_i^n + u_i^{n-1}}{(\Delta t)^2} + O((\Delta t)^2) \quad (1.32)$$

## 3 Αλγόριθμος Yee

Ο αλγόριθμος του Yee επιδιώκει στην επίλυση των εξισώσεων του Maxwell ( 1.16) και ( 1.17) για  $\sigma^* = 0$ . Συγκεκριμένα, η λύση αφορά και το ηλεκτρικό και το μαγνητικό πεδίο σε αντίθεση με την συνήθη μέθοδο κατά την οποία προσπαθούμε να προσδιορίσουμε κυματικές λύσεις χωριστά για το κάθε πεδίο.

Η έννοια του μισού χρονικού διαστήματος που χρησιμοποιήσαμε στις σχέσεις ( 1.29) και ( 1.30) προγραμματιστικά σημαίνει ότι στον ίδιο επαναληπτικό χρονικό βρόχο (άρα αλλαγή στον χρόνο  $n$ ) βρίσκονται και τα δύο στοιχεία της  $u$  (δηλαδή  $E$  και  $H$ ) και τα στοιχεία του ενός ανανεώνουν το άλλο (άρα αλλαγή στον χώρο  $i$ ). Συνεπώς, σύμφωνα με τον αλγόριθμο του Yee, θα πρέπει η ανανέωση της ποσότητας  $u$  να γίνεται με τον σχηματικό τρόπο του σχήματος ( 1.1) [6].



*Σχήμα 1.1: Διάγραμμα  $(x,t)$  που δείχνει ένα παράδειγμα διάδοσης κύματος με τη χρήση του "μισού" βήματος στον χώρο και στον χρόνο.*

Συνεπώς δύο διαδοχικές ανανεώσεις του ηλεκτρικού πεδίου απέχουν  $\Delta t$  μεταξύ τους ενώ η νέα τιμή του εξαρτάται από την τιμή του μαγνητικού στο ενδιάμεσο βήμα χρόνου. Η λογική αυτή δεν είναι παράλογη διότι με αυτόν τον τρόπο μπορούμε να φανταστούμε την κίνηση του ηλεκτρομαγνητικού κύματος στον πραγματικό χώρο. Οι εξισώσεις του Maxwell περιγράφουν ακριβώς αυτήν την λογική, δηλαδή πως ένα μεταβαλλόμενο ηλεκτρικό πεδίο δημιουργεί ένα μαγνητικό πεδίο και αντίστροφα. Θυμόμαστε, ωστόσο, το γεγονός ότι το ηλεκτρομαγνητικό κύμα κινείται στον χώρο και πως σε χρόνο  $\Delta t$  διανύει απόσταση  $\Delta x$ . Το γεγονός ότι η συνάρτηση που περιγράφει το κύμα θεωρείται συνεχής απαιτεί απειροστή ανανέωση του ενός και του άλλου πεδίου.

Η διακριτοποίηση, λοιπόν, των μεγεθών αυτών βοηθάει στην προσαρμογή όλων των εννοιών που περιγράφουν αυτή τη διαταραχή στον χώρο και στον χρόνο σε υπολογιστικό περιβάλλον. Μπορούμε να συζητάμε για τον χρόνο  $dt$  που χρειάζεται το κύμα να διανύσει ένα υπολογιστικό κελί μήκους  $dx$  και η συσχέτισή τους να ορίζε-

ται από την συνθήκη Courant:

$$dt = \frac{dx}{\sqrt{mc_0}}$$

, όπου  $m$  η διάσταση του χωρικού πλέγματος της προσομοίωσης. Έτσι μπορούμε να δούμε ότι ο ελάχιστος χρόνος  $dt$  που χρειάζεται για να διανύσει το κύμα ένα κελί στην μία διάσταση είναι  $dt = \frac{dx}{c_0}$ , όπου  $c_0$  η ταχύτητα του φωτός στο κενό. Για παράδειγμα, χρησιμοποιώντας ένα τετραγωνικό πλέγμα σημείων στον χώρο αν προσπαθήσουμε να εφαρμόσουμε την συμμετρία μεταφοράς (δηλαδή να φανεί η ίδια εικόνα με μετάβαση στην κοντινότερη μοναδιαία κυψελίδα) τότε η απόσταση των γειτονικών κυψελίδων θα μετριέται από το γνωστό Πυθαγόρειο θεώρημα, λόγω του συγκεκριμένου τετραγωνικού πλέγματος.

Σημαντική διαφορά σχετικά με την ανανέωση των τιμών πεδίου στον πραγματικό χώρο και στον υπολογιστικό είναι πως στον τελευταίο η ανανέωση του ενός πεδίου γίνεται διαδοχικά του άλλου στο "ενδιάμεσο" βήμα το οποίο προστέθηκε προκειμένου να εξυπηρετήσει το ταυτόχρονο εφόσον η προσαύξηση βήματος είναι  $\Delta t$  και το ενδιάμεσο βήμα βρίσκεται στο  $\frac{\Delta t}{2} < \Delta t$ . Ο λόγος που βρίσκεται ακριβώς στην μέση της χρονικής προσαύξησης είναι ότι θεωρήσαμε πως ο υπολογιστικός χώρος είναι καρτεσιανός, επομένως αν έχουμε 2 πεδία που χρειάζεται να τα ανανεώσουμε τότε το ενδιάμεσο βήμα θα είναι ακριβώς στη μέση, διότι σε 2 τέτοια χρονικά βήματα  $\frac{\Delta t}{2}$  συμπληρώθηκε ένα  $\Delta x$  στην μία διάσταση κίνησης. Για απλότητα, λοιπόν, στις πράξεις αλλά και για να τηρούμε το άνω φράγμα χρόνου  $dt$  που ορίζεται από την συνθήκη Courant στην ακρίβεια της προσομοίωσης μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την παρακάτω σχέση:

$$dt = \frac{dx}{2c_0} \quad (1.33)$$

Η σχέση ( 1.33) απαιτεί να γνωρίζουμε το  $dx$ . Αυτό πρέπει να είναι μικρότερο τουλάχιστον κατά μία τάξη μεγέθους σε σχέση με το ελάχιστο μήκος κύματος του παλμού, διότι αν ήταν μεγαλύτερο τότε θα χανόταν χρήσιμη πληροφορία του κύματος. Συνεπώς:

$$dx = \frac{\lambda_{min}}{10} \quad (1.34)$$

Η σχέση ( 1.34) με τη σειρά της απαιτεί να γνωρίζουμε το  $\lambda_{min}$ . Αυτό μπορούμε να το βρούμε με την βοήθεια της σχέσης ( 1.35):

$$\lambda_{min} = \frac{c_0}{f_{max}} \quad (1.35)$$

Οπότε χρειάζεται να εντοπίσουμε την μέγιστη συχνότητα του παλμού ( $f_{max}$ ). Αυτό το πετυχαίνουμε με το εξωτερικό πρόγραμμα "hifftmethod". Πρόκειται για

ένα πρόγραμμα που δέχεται σαν είσοδο το είδος του παλμού και χρησιμοποιεί την μετασχηματισμένη κατά Fourier μορφή του, η οποία μπορεί να βρεθεί με FFT μέθοδο, προκειμένου να "δει" την συχνότητα κατά την οποία ο παλμός έχει "σβήσει", δηλαδή να βρεθεί η μέγιστη συχνότητα που περιλαμβάνει ο παλμός. Πρακτικά αυτό το κάνω με τη χρήση data wrangling, διαδικασία που περιγράφεται στο παράρτημα.

## Κεφάλαιο 2

# Μονοδιάστατη προσομοίωση (1D) με την χρήση της FDTD

### 1 Είδη παλμών

Οι προσομοιώσεις κυμάτων που πραγματοποιούνται παρακάτω χρησιμοποιούν όλες κυματομορφές που περιγράφονται από την εξίσωση:

$$E(n) = \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{n * dt - t_0}{spread}\right)^2\right) \sin(2\pi freq * n * dt) \quad (2.1)$$

- ▶ Το  $t_0$  περιγράφει την χρονική στιγμή που το χρονικό βήμα  $n$  είναι τέτοιο ώστε ο παλμός να είναι κεντραρισμένος στο  $t_0$ .
- ▶ Το  $spread$  περιγράφει το εύρος του παλμού στο πεδίο του χρόνου.

Η παραπάνω περιγράφει κυματοπακέτα, ωστόσο μπορούμε να ρυθμίσουμε κατάλληλα τις τιμές των  $t_0$  και  $spread$  ώστε τελικά να δημιουργήσουμε τον επιθυμητό παλμό. Κάθε ένας έχει δημιουργηθεί από τον κατάλληλο λόγο  $\frac{t_0}{spread}$ . Σε κάθε προσομοίωση αναγράφεται ο παλμός στο πεδίο του χρόνου και των συχνοτήτων.

## 2 Προσομοίωση στο κενό

Επιλέγουμε κατάλληλα τις συνιστώσες στις οποίες μηδενίζεται το μαγνητικό πεδίο στην διεύθυνση διάδοσης του κύματος  $z$ . Τότε εφόσον βρισκόμαστε σε κενό θα είναι  $\epsilon = \epsilon_0$  και επιπλέον έχουμε  $j = 0$ . Έτσι η εξίσωση ( 1.5):

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = -\frac{1}{\epsilon_0} \frac{\partial H_y}{\partial z} \quad (2.2)$$

Αν θεωρήσουμε ότι δεν υπάρχει μαγνήτιση του υλικού, ή αλλιώς  $M \approx 0$  (υπόθεση που σε όλη την εργασία θεωρούμε πως ισχύει), τότε:

$$( 1.3) \rightarrow \nabla \times \vec{E} = -\mu_0 \frac{\partial \vec{H}}{\partial t}$$

Άρα για το μονοδιάστατο πρόβλημα προκύπτει:

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = -\frac{1}{\mu_0} \frac{\partial E_x}{\partial z} \quad (2.3)$$

### 2.1 FDTD φορμαλισμός

Αναπτύσσουμε κατά πεπερασμένες διαφορές τις εξισώσεις (2.2) και (2.3). Προκύπτει το ακόλουθο σύστημα εφόσον λύσουμε ως προς τις  $n + \frac{1}{2}$  τιμές των πεδίων:

$$\begin{aligned} E_x^{n+\frac{1}{2}}(k) &= E_x^{n-\frac{1}{2}}(k) - \frac{\Delta t}{\epsilon_0 \Delta x} \left( H_y^n(k + \frac{1}{2}) - H_y^n(k - \frac{1}{2}) \right) \\ H_y^{n+1}(k + \frac{1}{2}) &= H_y^n(k + \frac{1}{2}) - \frac{\Delta t}{\mu_0 \Delta x} \left( E_x^{n+\frac{1}{2}}(k + 1) - E_x^{n+\frac{1}{2}}(k) \right) \end{aligned}$$

Σύμφωνα με τον Sullivan [1], μπορούμε να κάνουμε την παρακάτω αλλαγή μεταβλητών  $E \rightarrow \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} E$  οπότε το σύστημα γίνεται:

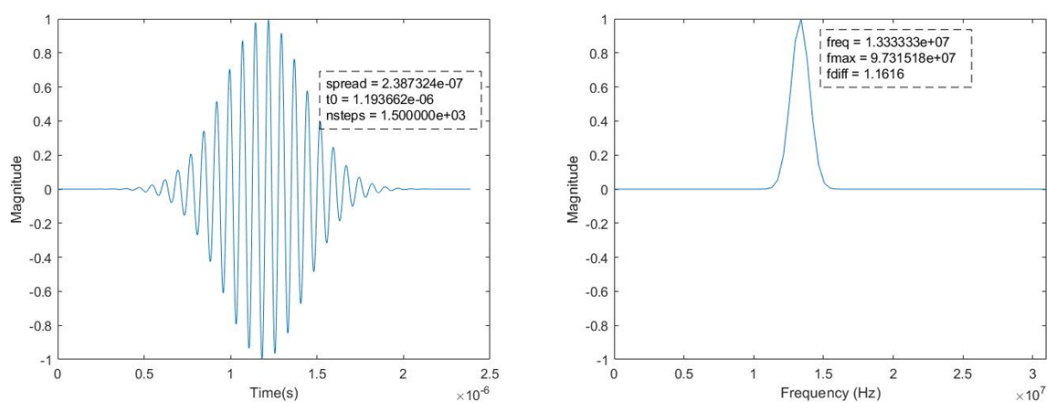
$$\begin{aligned} E_x^{n+\frac{1}{2}}(k) &= E_x^{n-\frac{1}{2}}(k) - \frac{\Delta t}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0} \Delta x} \left( H_y^n(k + \frac{1}{2}) - H_y^n(k - \frac{1}{2}) \right) \\ H_y^{n+1}(k + \frac{1}{2}) &= H_y^n(k + \frac{1}{2}) - \frac{\Delta t}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0} \Delta x} \left( E_x^{n+\frac{1}{2}}(k + 1) - E_x^{n+\frac{1}{2}}(k) \right) \end{aligned}$$

Τότε ορίζουμε την ποσότητα:

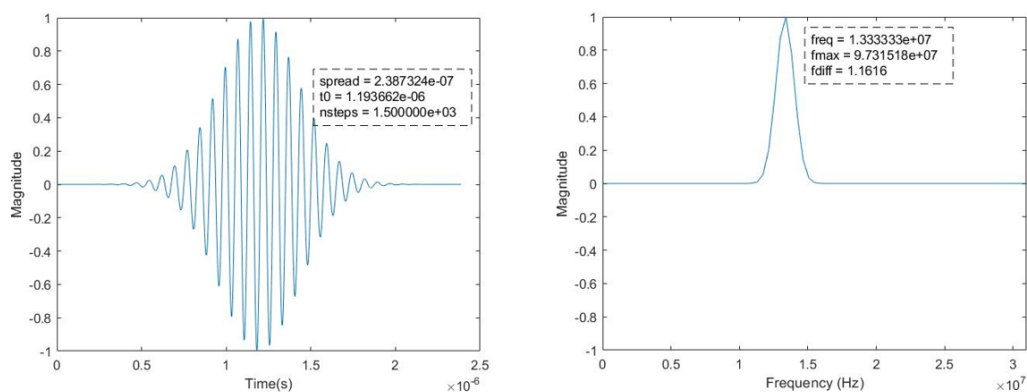
$$cc = \frac{\Delta t}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0} \Delta x} = c_0 \frac{\Delta t}{\Delta x} \stackrel{(1.33)}{=} \frac{1}{2}$$

## 2.2 Αποτελέσματα προσομοιώσεων

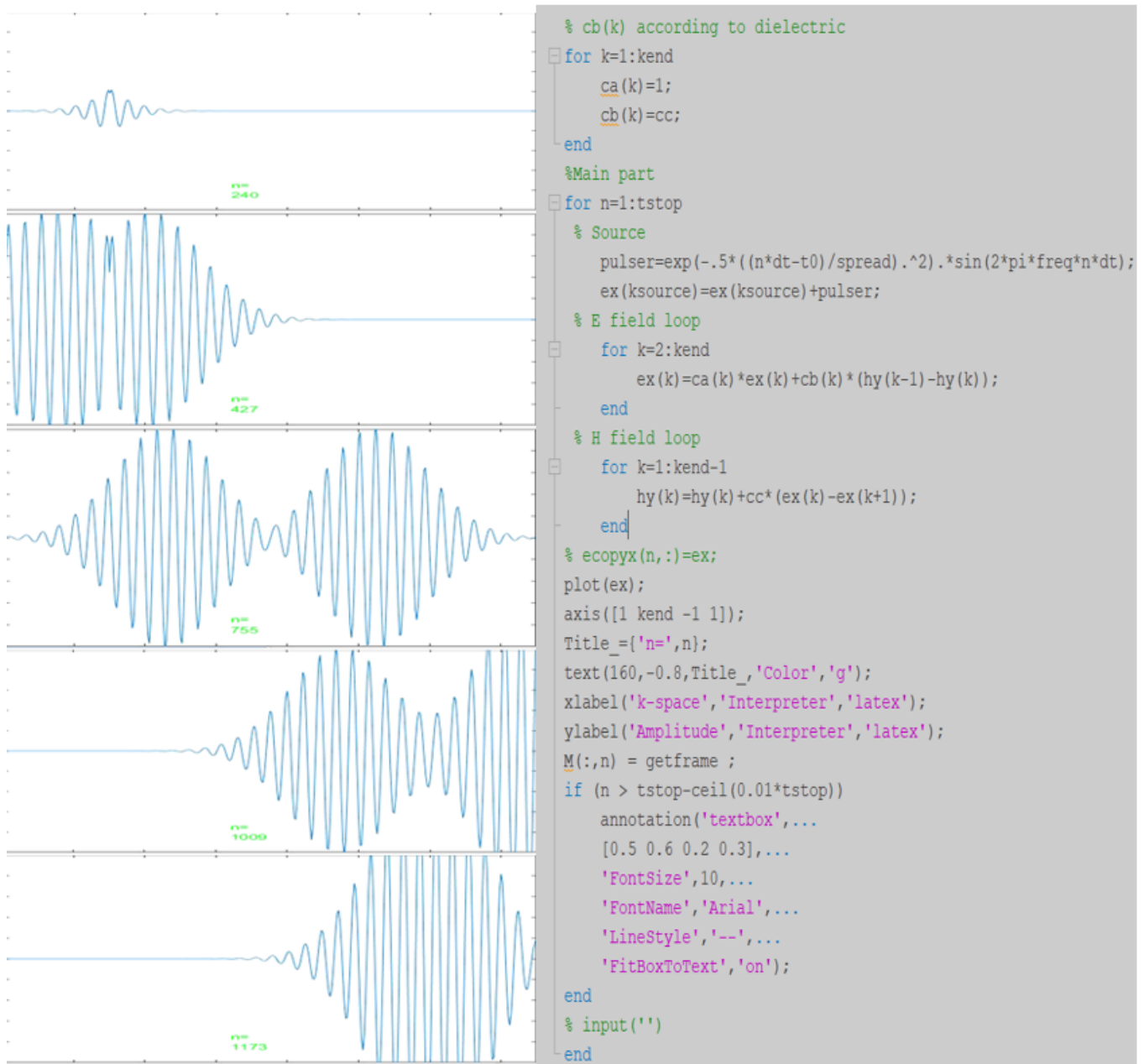
Στις προσομοιώσεις μας αυτό που θα παρατηρήσουμε είναι ότι ο ηλεκτρομαγνητικός παλμός διαδίδεται στο κενό με την ταχύτητα  $c_0$  και παραμένει αυτούσιος ως προς την μορφή κατά την πάροδο του χρόνου. Για να επιβεβαιώσουμε και την λειτουργία των προγραμμάτων hifftmethod και Materials and pulse κάνουμε προσομοιώσεις με την χρήση της Matlab και χρησιμοποιούμε τους ακόλουθους παλμούς:



**Σχήμα 2.1:** Κυματοπακέτο τύπου 2 συχνότητας της τάξεως των MHz στον κενό χώρο χωρίς απορροφητικές συνοριακές συνθήκες στο πεδίο του χρόνου και των συχνοτήτων αντίστοιχα.

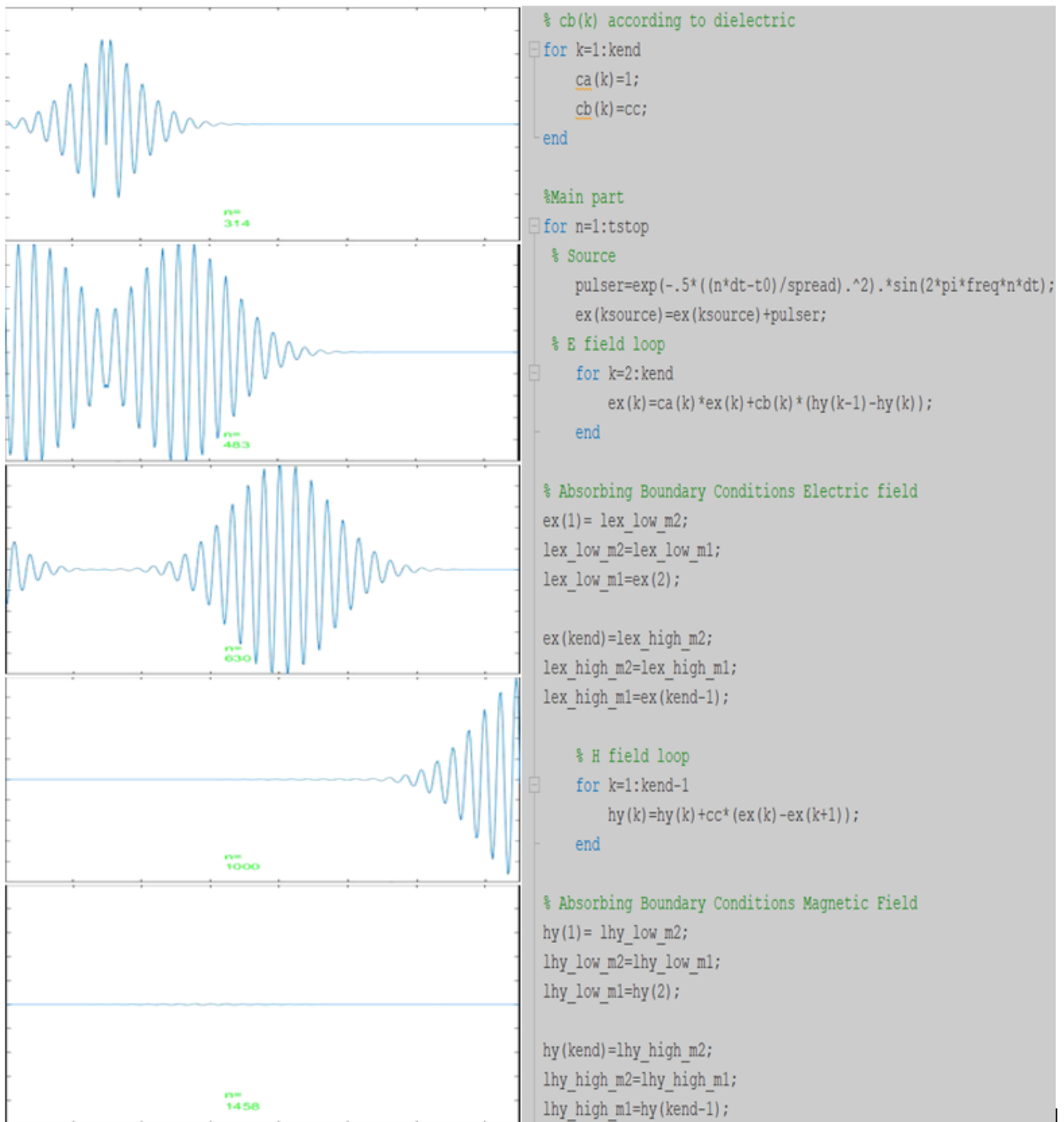


**Σχήμα 2.2:** Κυματοπακέτο τύπου 2 συχνότητας της τάξεως των MHz στον κενό χώρο με απορροφητικές συνοριακές συνθήκες στο πεδίο του χρόνου και των συχνοτήτων αντίστοιχα.



Σχήμα 2.3: Χωρίς συνοριακές συνθήκες





Σχήμα 2.4: Με συνοριακές συνθήκες

### 3 Προσομοίωση σε διηλεκτρικό μέσο

Το γεγονός ότι προστίθεται διηλεκτρικό μέσο στη διαδρομή που ακολουθεί το ηλεκτρομαγνητικό κύμα σημαίνει ότι προσθέτουμε υλικό, το οποίο αποτελείται από άτομα και ηλεκτρόνια των οποίων η κατανομή περιγράφεται από την εκάστοτε δομή του κρυστάλλου. Το ηλεκτρικό πεδίο διεγείρει τα ηλεκτρόνια του κρυστάλλου και εκείνα με την σειρά τους αποκρίνονται στην αλλαγή. Όμως αυτό συνεπάγεται δημιουργία νέου πεδίου διότι έχουμε κίνηση/ταλάντωση φορτίων. Το συνολικό πεδίο είναι το άθροισμα του επαγόμενου και του εξωτερικού πεδίου.

Μπορούμε να μεταβούμε στην σχέση (1.8) και να παρατηρήσουμε το εξής. Η πόλωση θα είναι εκείνη η ποσότητα που όσο πιο ισχυρή είναι τόσο πιο μικρός θα είναι ο ρυθμός που το μαγνητικό πεδίο θα αλλάζει το ηλεκτρικό πεδίο κατά την πάροδο του χρόνου. Η διηλεκτρική σταθερά είναι, λοιπόν, η ποσότητα που δείχνει κατά πόσο το υλικό "αντιστέκεται" στο εξωτερικό πεδίο [2]. Άρα αν λάβει μεγάλη τιμή τότε έχουμε μεγάλη πόλωση που συνεπάγεται μείωση της ταχύτητας του κύματος.

Επιπλέον της μείωσης της ταχύτητας θα έχουμε και μεγάλη ανάκλαση στην περίπτωση πρόσπτωσης από υλικό μικρότερης διηλεκτρικής σταθεράς σε μεγαλύτερης [8]. Άρα θα δούμε ότι για μεγάλες διηλεκτρικές σταθερές έχουμε αργή διάδοση στο υλικό και κύμα σε μικρότερο πλάτος από το αρχικό.

#### 3.1 FDTD φορμαλισμός

Μέσω της σχέσης (1.8) προκύπτει:

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = -\frac{1}{\epsilon_r \epsilon_0} \frac{\partial H_y}{\partial z} \quad (2.4)$$

Η εξίσωση Faraday (2.3), όμως, δεν μεταβάλλεται με την αλλαγή που κάναμε στη διηλεκτρική σταθερά:

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = -\frac{1}{\mu_0} \frac{\partial E_x}{\partial z} \quad (2.5)$$

Κάνοντας τα ίδια βήματα με την προηγούμενη περίπτωση (του κενού) και έχοντας εφαρμόσει την αλλαγή μεταβλητής για το ηλεκτρικό πεδίο [1], προκύπτει:

$$E_x^{n+\frac{1}{2}}(k) = E_x^{n-\frac{1}{2}}(k) - \frac{cc}{\epsilon_r} \left( H_y^n(k + \frac{1}{2}) - H_y^n(k - \frac{1}{2}) \right)$$

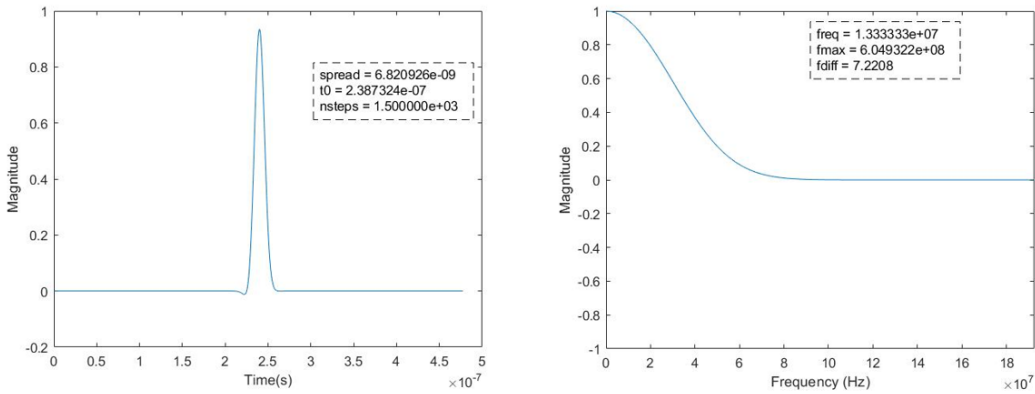
$$H_y^{n+1}(k + \frac{1}{2}) = H_y^n(k + \frac{1}{2}) - cc \left( E_x^{n+\frac{1}{2}}(k + 1) - E_x^{n+\frac{1}{2}}(k) \right)$$

Τότε ορίζουμε την ποσότητα:

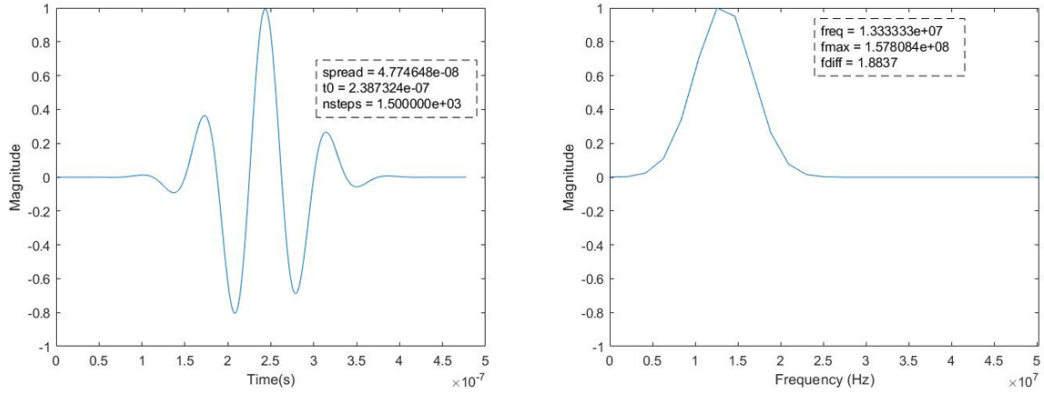
$$cb(k) = \frac{cc}{\epsilon_r}$$

### 3.2 Αποτελέσματα προσομοιώσεων

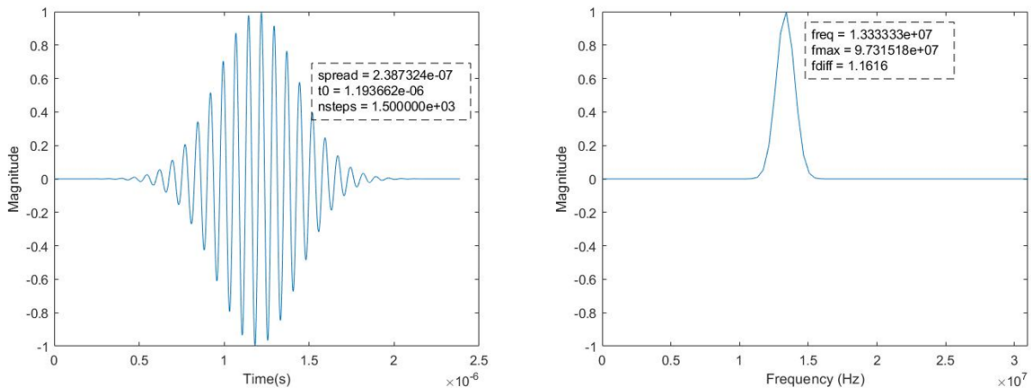
Όταν προστίθεται διηλεκτρικό στη διαδρομή που ακολουθεί ο παλμός παρατηρούμε και μέσω των προσομοιώσεων το φαινόμενο της ανάκλασης, η οποία είναι μεγαλύτερη για μεγαλύτερες τιμές της διηλεκτρικής σταθεράς. Τότε το πλάτος διάχυσης είναι μικρότερο από το αρχικό, ενώ η ταχύτητα είναι επίσης μειωμένη σε σχέση με εκείνη στο κενό. Χρησιμοποιούμε τους ακόλουθους παλμούς:



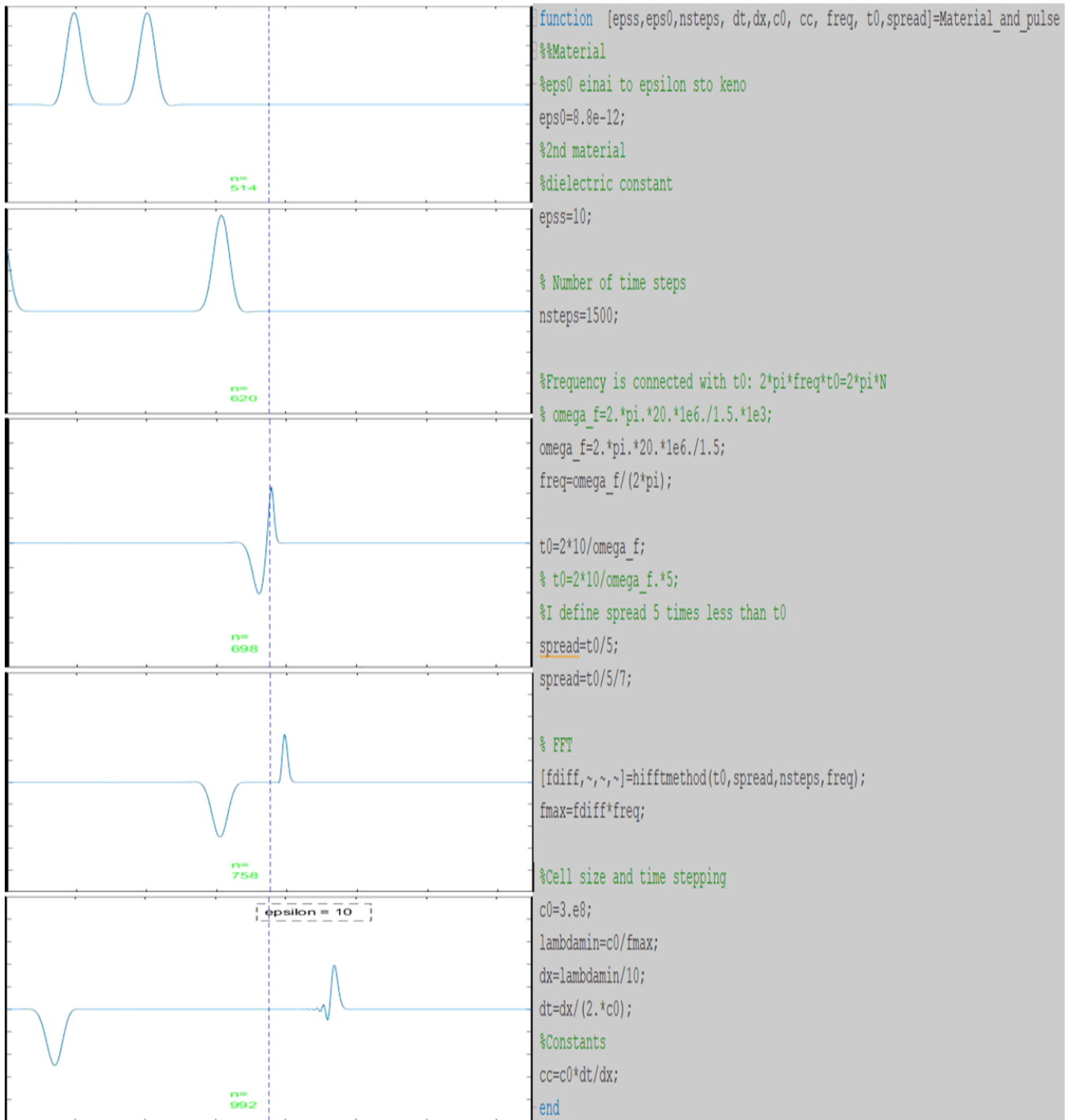
**Σχήμα 2.5:** Γκαουσιανό κυματοπακέτο συχνότητας της τάξεως των MHz σε διηλεκτρικό μέσο  $\epsilon_r = 10$  με απορροφητικές συνοριακές συνθήκες στο πεδίο του χρόνου και των συχνοτήτων αντίστοιχα.



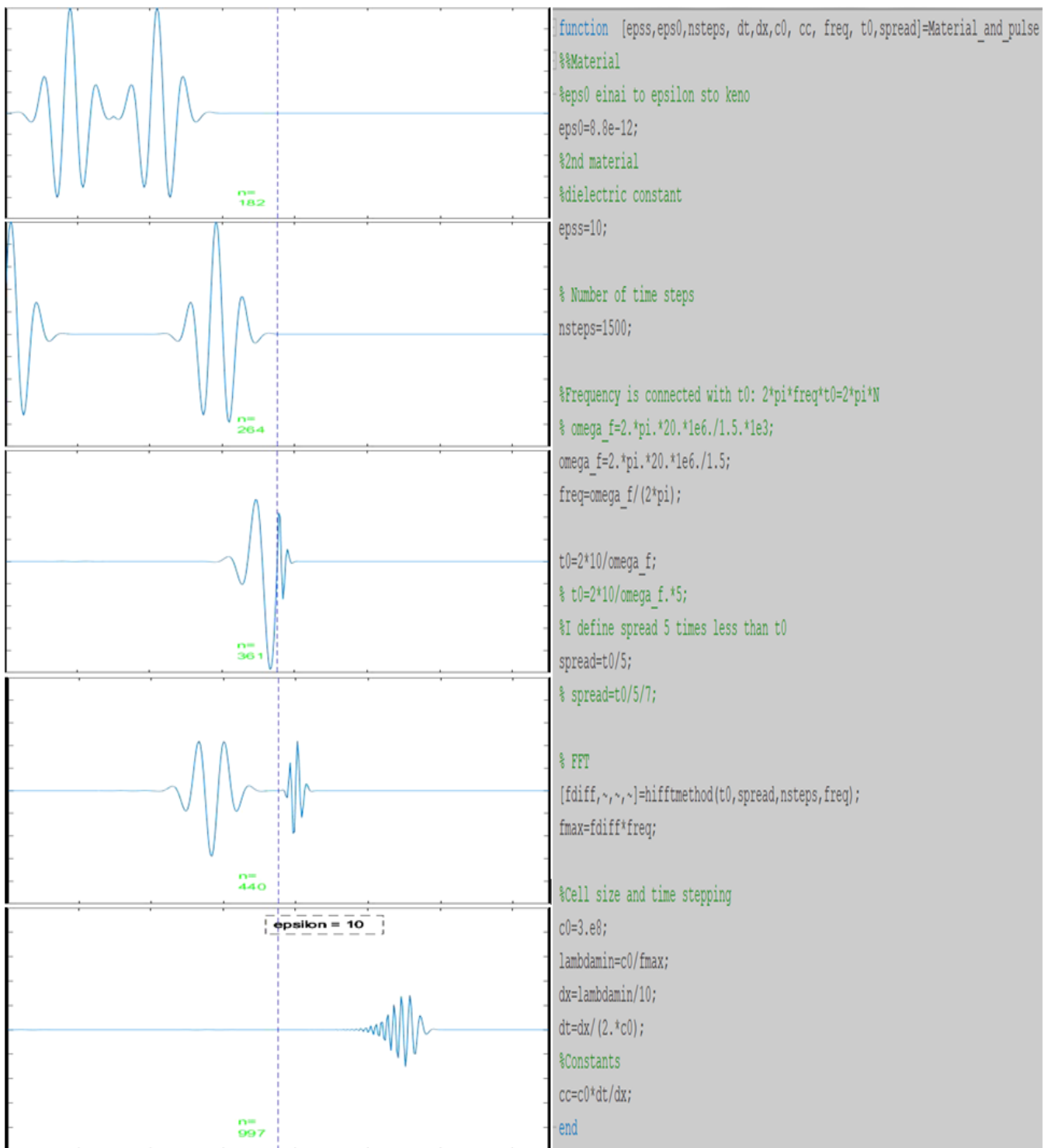
**Σχήμα 2.6:** Κυματοπακέτο τύπου 1 συχνότητας της τάξεως των MHz σε διηλεκτρικό μέσο  $\epsilon_r = 10$  με απορροφητικές συνοριακές συνθήκες στο πεδίο του χρόνου και των συχνοτήτων αντίστοιχα.



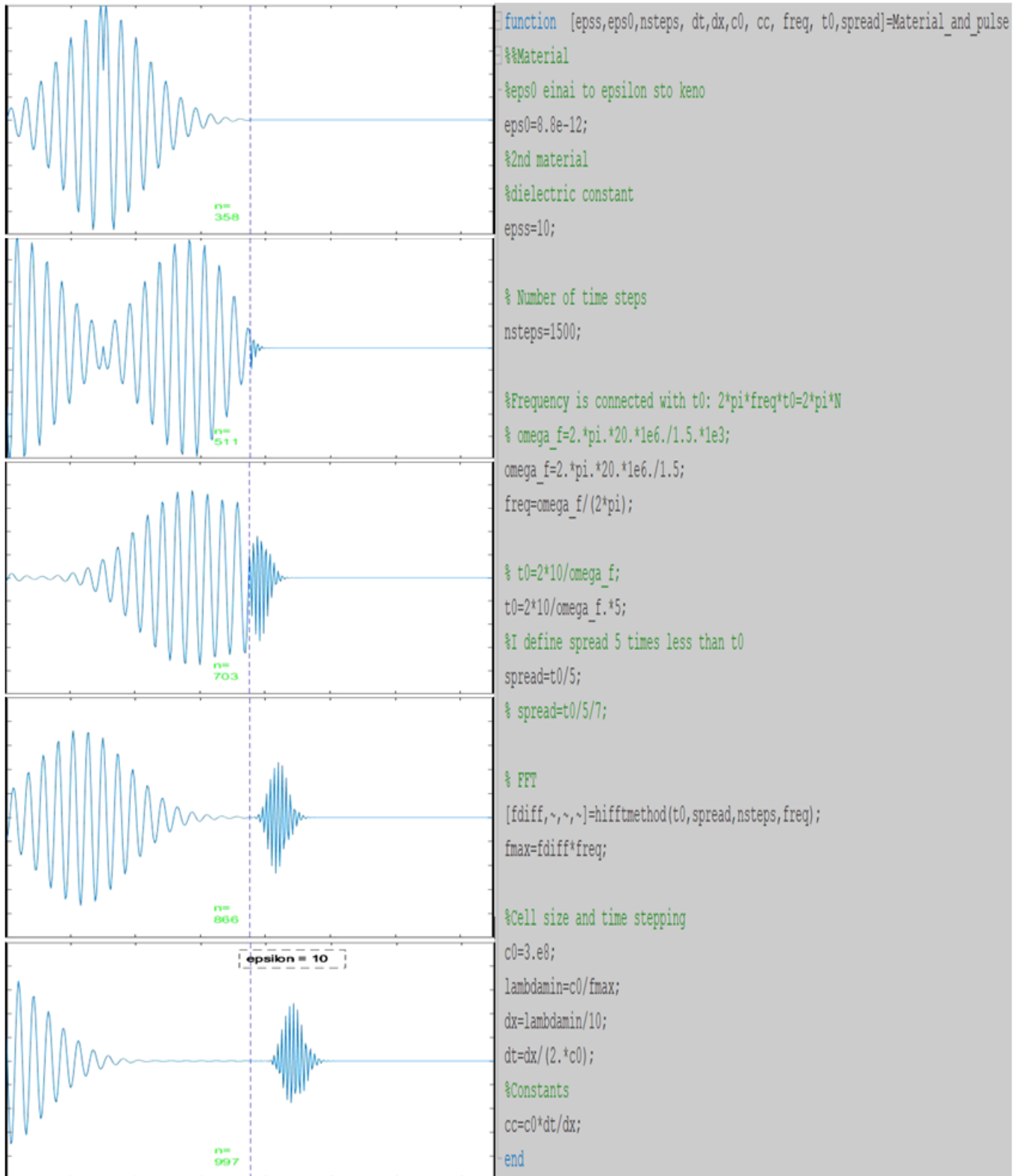
**Σχήμα 2.7:** Κυματοπακέτο τύπου 2 συχνότητας της τάξεως των MHz σε διηλεκτρικό μέσο  $\epsilon_r = 10$  με απορροφητικές συνοριακές συνθήκες στο πεδίο του χρόνου και των συχνοτήτων αντίστοιχα.



Σχήμα 2.8: Gaussian κομποπακέτο τάξεως MHz. Σημειώνουμε ότι εδώ  $\epsilon_r = 10$ .



Σχήμα 2.9: Κυματοπακέτο τύπου 1 "ολίγων κύκλων" τάξεως MHz. Σημειώνουμε ότι εδώ  $\epsilon_r = 10$ .



Σχήμα 2.10: Κυματοπακέτο τύπου 2: "πολλών κύκλων" τάξεως MHz. Σημειώνουμε ότι εδώ  $\epsilon_r = 10$ .

## 4 Προσομοίωση σε διηλεκτρικό μέσο και απώλειες

Οι απώλειες προκύπτουν λόγω του παράγοντα  $\sigma$ . Πρόκειται για την αγωγιμότητα, η οποία αναπτύσσεται διότι το επαγόμενο πεδίο μπορεί να υστερεί ως προς την απόκριση σε σχέση με το εξωτερικό πεδίο, δηλαδή λόγω διαφοράς φάσης μεταξύ του επαγόμενου και του εξωτερικού πεδίου. Επομένως υπάρχουν επιπλέον αλληλεπιδράσεις μεταξύ των πεδίων οι οποίες μεταφράζονται σε ωμικές απώλειες. Αυτό όμως σημαίνει κίνηση φορέων, και επειδή είναι προσανατολισμένη λόγω εφαρμογής πεδίου τότε έχουμε αγωγιμότητα. Επομένως, αυτό που αναμένουμε είναι για μεγάλη αγωγιμότητα να μειώνεται το πλάτος του κύματος κατά τη διέλευσή του στο υλικό αυτό. Το κύμα τότε θα απορροφάται από το υλικό.

### 4.1 FDTD φορμαλισμός

Για την εξίσωση του Ampère, κάνουμε αναγωγή στην μία διάσταση και έτσι προκύπτει:

$$(1.9) \rightarrow \frac{\partial E_x}{\partial t} = -\frac{1}{\epsilon_r \epsilon_0} \frac{\partial H_y}{\partial z} - \frac{\sigma}{\epsilon_r \epsilon_0} E_x \quad (2.6)$$

Ενώ του Faraday παραμένει ακριβώς η ίδια:

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = -\frac{1}{\mu_0} \frac{\partial E_x}{\partial z} \quad (2.7)$$

Εφαρμόζουμε την αλλαγή μεταβλητής ( $E \rightarrow \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} E$ ) [1] για το ηλεκτρικό πεδίο, οπότε διακριτοποιώντας και λύνοντας ως προς τα ανανεωμένα πεδία προκύπτει το σύστημα εξισώσεων:

$$E_x^{n+\frac{1}{2}}(k) = \frac{1 - \frac{\sigma dt}{2\epsilon_r \epsilon_0}}{1 + \frac{\sigma dt}{2\epsilon_r \epsilon_0}} E_x^{n-\frac{1}{2}}(k) - \frac{cc}{\epsilon_r \left(1 + \frac{\sigma dt}{2\epsilon_r \epsilon_0}\right)} \left( H_y^n(k + \frac{1}{2}) - H_y^n(k - \frac{1}{2}) \right)$$

$$H_y^{n+1}(k + \frac{1}{2}) = H_y^n(k + \frac{1}{2}) - cc \left( E_x^{n+\frac{1}{2}}(k + 1) - E_x^{n+\frac{1}{2}}(k) \right)$$

Επομένως, ο κώδικας που δημιουργούμε είναι ο εξής:



```

%constants
eaf=dt*sigma/(2*eps0*epss);
% cb(k) according to dielectric
for k=1:kend
    ca(k)=1;
    cb(k)=cc;
end
for k=kstart:kend
    ca(k)=(1-eaf)/(1+eaf);
    cb(k)=cc/(epss*(1+eaf));
end

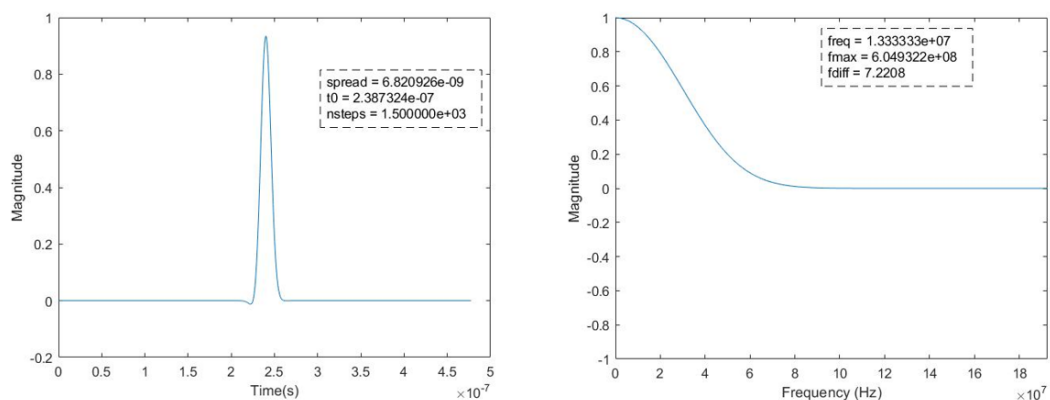
%Main part
for n=1:tstop
    % Source
    pulser=exp(-.5*((n*dt-t0)/spread).^2).*sin(2*pi*freq*n*dt);
    ex(ksource)=ex(ksource)+pulser;
    % E field loop
    for k=2:kend-1
        ex(k)=ca(k)*ex(k)+cb(k)*(hy(k-1)-hy(k));
    end
end

```

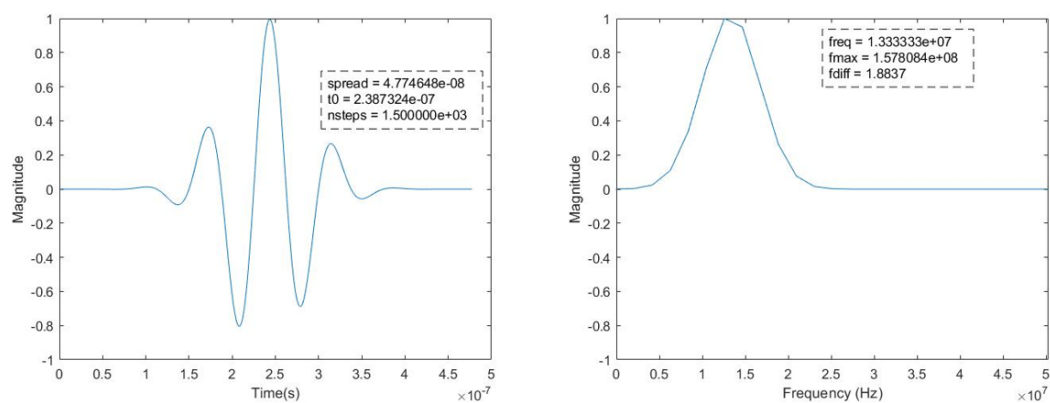
**Σχήμα 2.11:** Κώδικας FDTD σε Matlab για διηλεκτρικό μέσο με απώλειες

## 4.2 Αποτελέσματα προσομοιώσεων

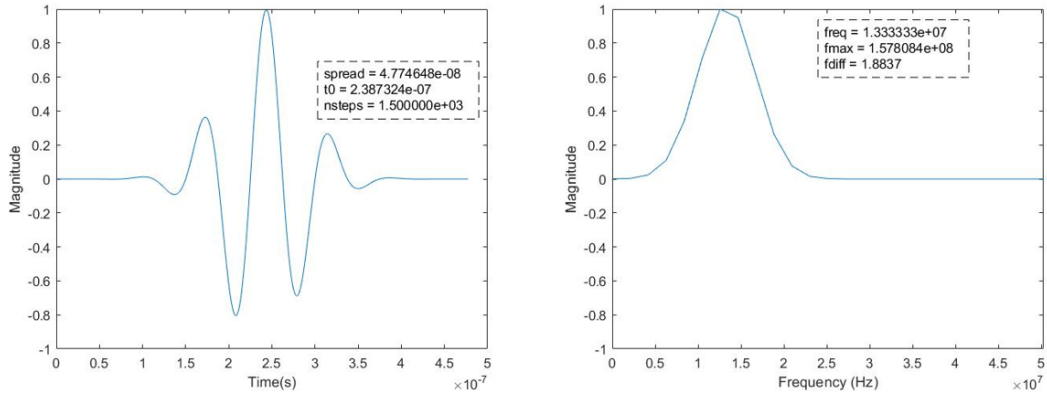
Η προσθήκη υλικού με απώλειες σημαίνει πως ο παλμός μετατρέπεται σε αγωγιμότητα στο υλικό, επομένως απορροφάται κατά τη διέλευσή του μέσω αυτού. Δοκιμάζουμε παλμούς σε MHz και σε GHz και παρατηρούμε το εξής φαινόμενο: Ο συγκεκριμένος παλμός στα MHz απορροφάται πιο εύκολα σε υλικό με απώλειες λόγω αγωγιμότητας από εκείνον στα GHz. Αυτός θα είναι και ο λόγος που όταν χρησιμοποιούμε παλμούς της τάξης των GHz θα αγνοούμε τους όρους ρευμάτων, εφόσον αυτοί δεν θα συνεισφέρουν πολύ στην απορρόφηση. Χρησιμοποιούμε τους ακόλουθους παλμούς:



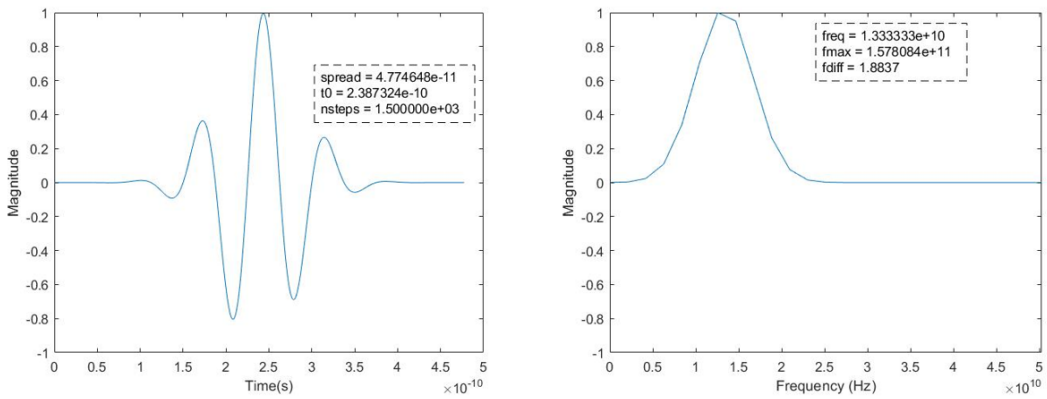
**Σχήμα 2.12:** Γκαουσιανό κυματοπακέτο συχνότητας της τάξεως των MHz σε διηλεκτρικό μέσο  $\epsilon_r = 3$  με απώλειες με απορροφητικές συνοριακές συνθήκες στο πεδίο του χρόνου και των συχνοτήτων αντίστοιχα.



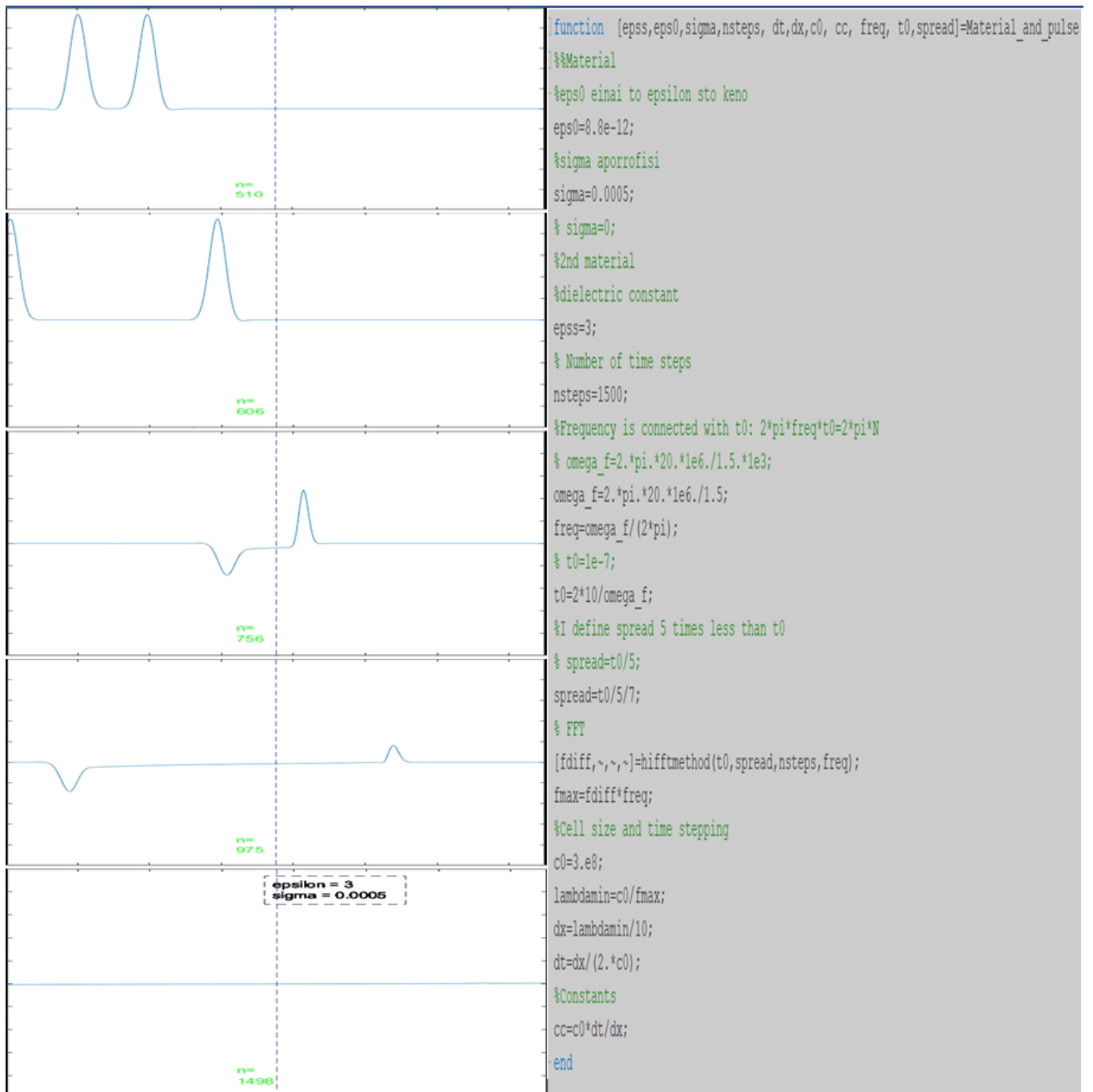
**Σχήμα 2.13:** Κυματοπακέτο τύπου 1 συχνότητας της τάξεως των MHz σε διηλεκτρικό μέσο  $\epsilon_r = 3$  με απώλειες με απορροφητικές συνοριακές συνθήκες στο πεδίο του χρόνου και των συχνοτήτων αντίστοιχα.



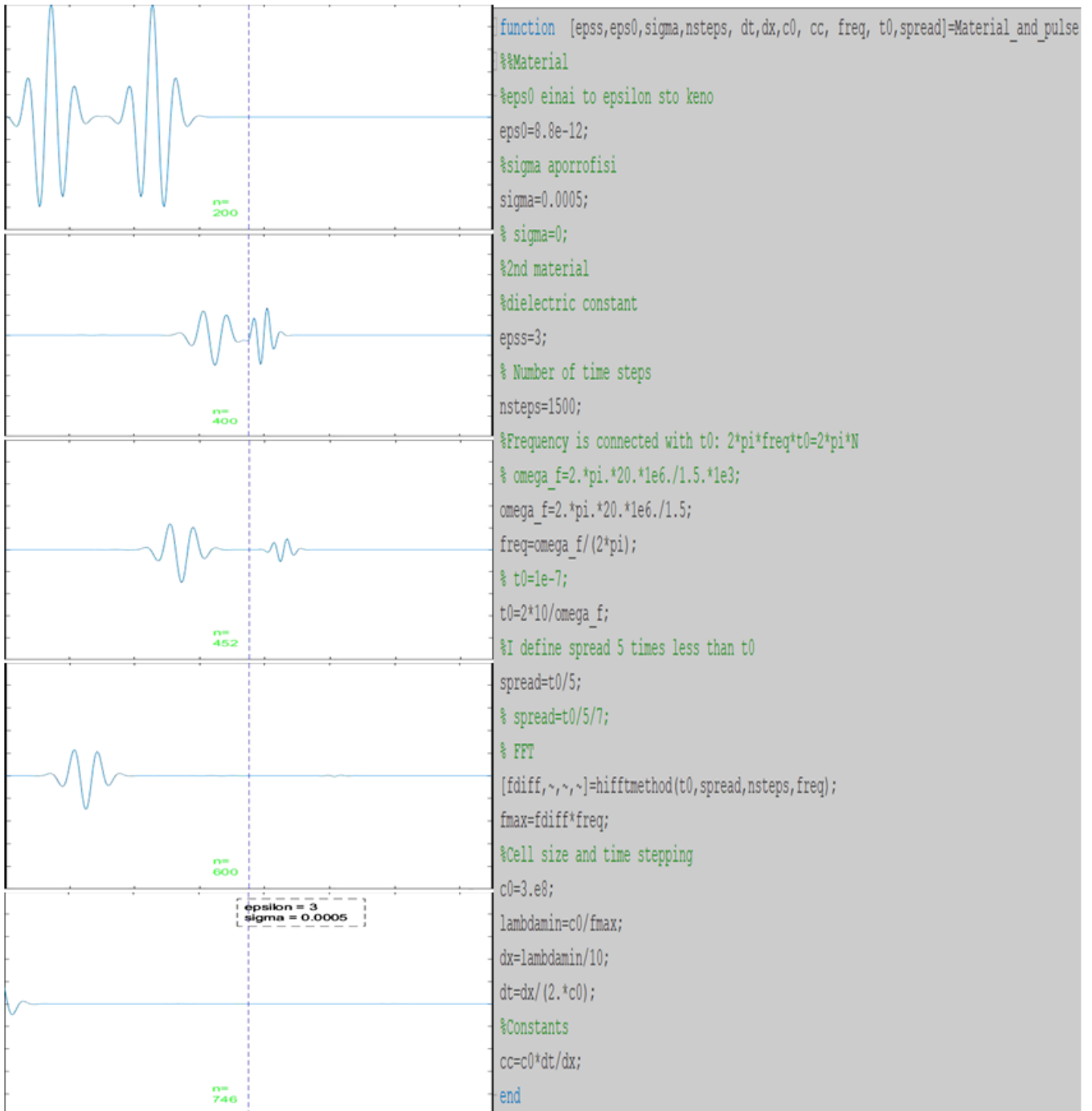
**Σχήμα 2.14:** Κυματοπακέτο τύπου 1 συχνότητας της τάξεως των MHz σε διηλεκτρικό μέσο  $\epsilon_r = 3$  χωρίς απώλειες με απορροφητικές συνοριακές συνθήκες στο πεδίο του χρόνου και των συχνοτήτων αντίστοιχα.



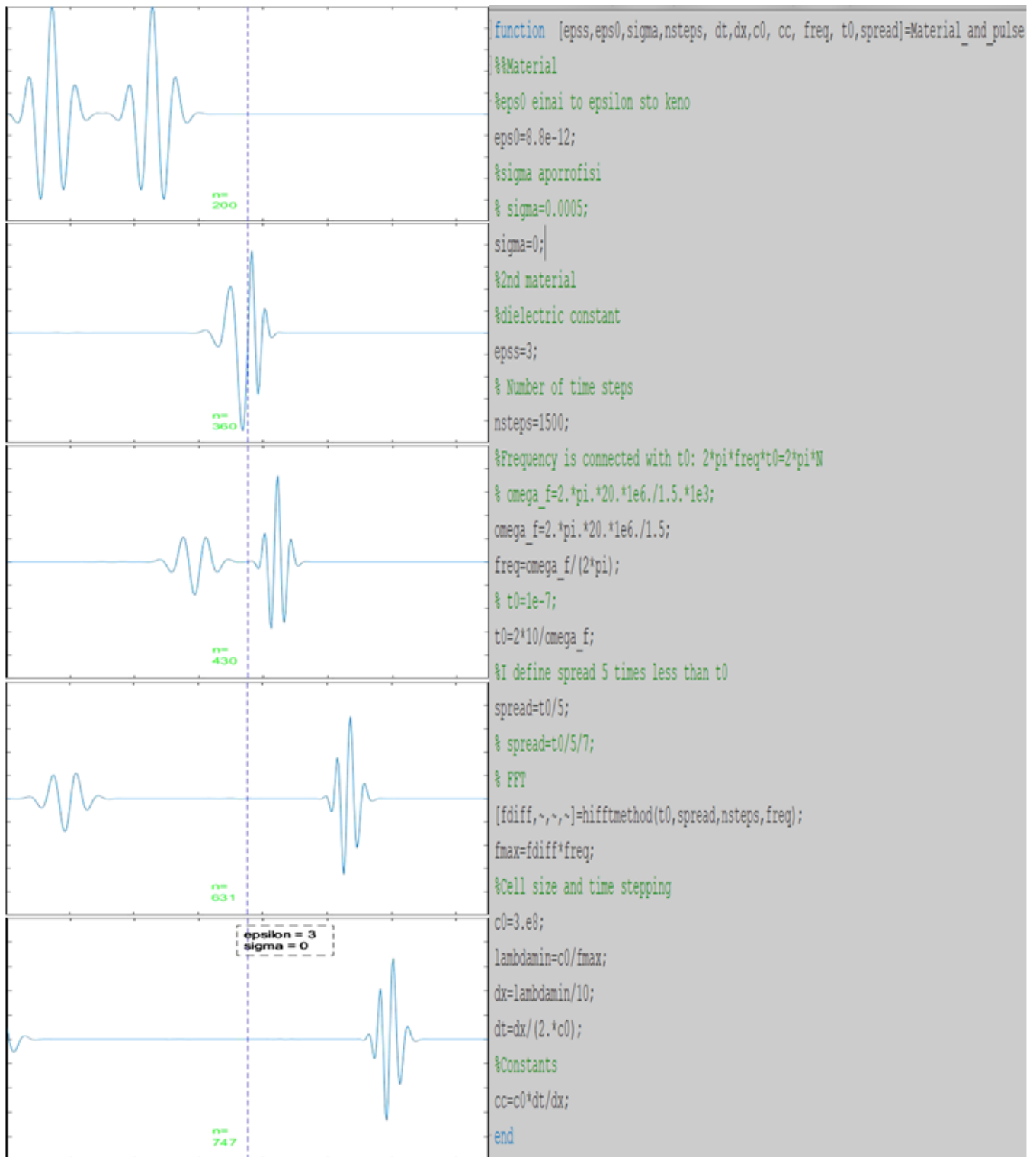
**Σχήμα 2.15:** Κυματοπακέτο τύπου 1 συχνότητας της τάξεως των GHz σε διηλεκτρικό μέσο  $\epsilon_r = 3$  με απώλειες με απορροφητικές συνοριακές συνθήκες στο πεδίο του χρόνου και των συχνοτήτων αντίστοιχα.



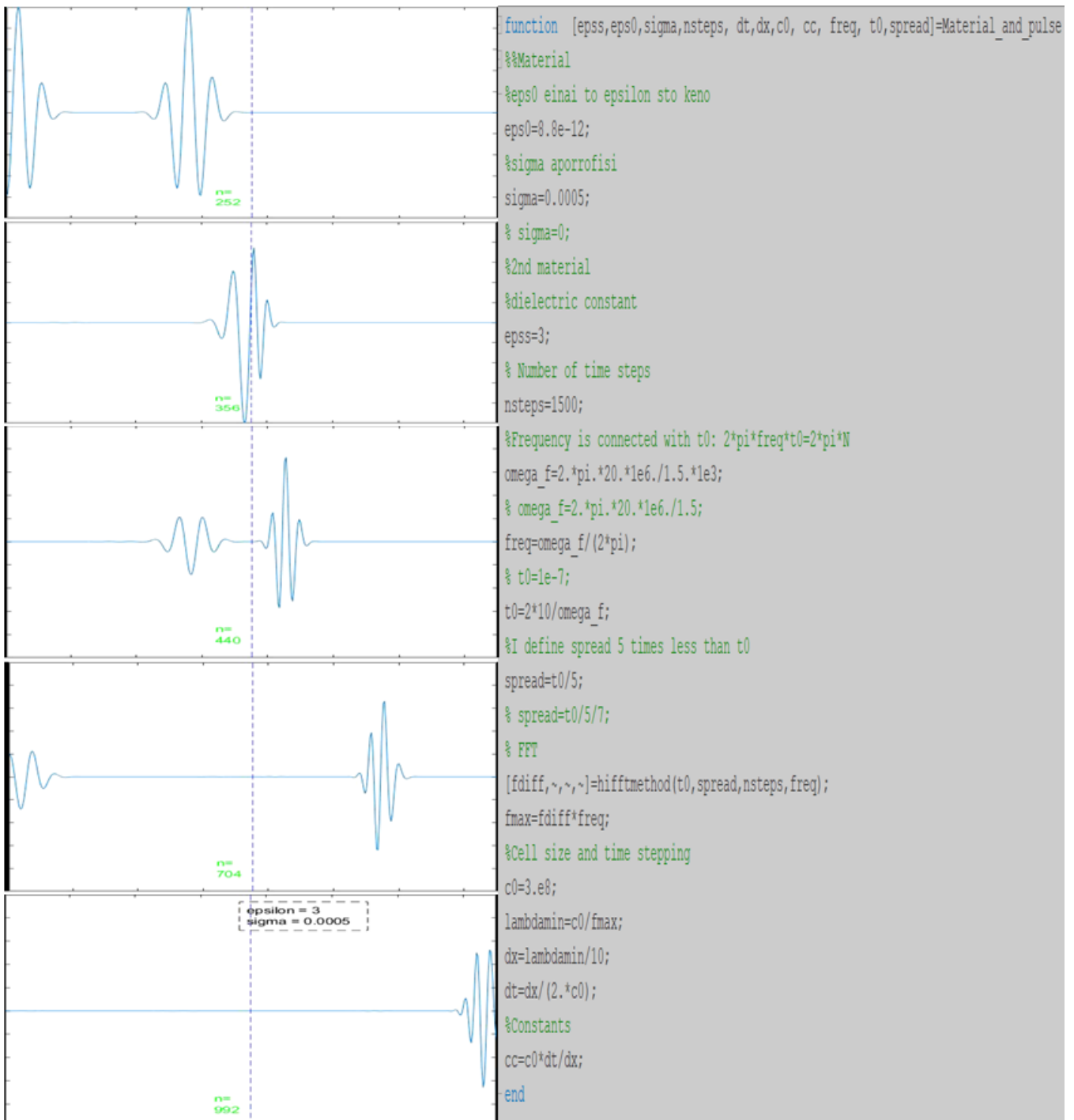
Σχήμα 2.16: Gaussian κυματοπακέτο τάξεως MHz. Σημειώνουμε ότι εδώ  $\epsilon_r = 3$ .



Σχήμα 2.17: Κυματοπακέτο τύπου 1 τάξεως MHz. Σημειώνουμε ότι εδώ  $\epsilon_r = 3$ .



Σχήμα 2.18: Κυματοπακέτο τύπου 1 τάξεως MHz χωρίς απώλειες. Σημειώνουμε ότι εδώ  $\epsilon_r = 3$ .



Σχήμα 2.19: Κομποπακέτο τύπου 1 τάξεως GHz. Σημειώνουμε ότι εδώ  $\epsilon_r = 3$ .

## Κεφάλαιο 3

# Μονοδιάστατη προσομοίωση (1D) σε υλικά με διασπορά με την χρήση της FDTD

### 1 Debye

#### 1.1 Ιδέα για την προέλευση εξίσωσης διηλεκτρικής σταθεράς

Η πόλωση κατά Mossotti, μία από τις πρώτες προσεγγίσεις της πολωσιμότητας των ατόμων, ήταν σημαντική για την ανάδειξη του γνωστού τύπου Clausius-Mossotti, ή αλλιώς Lorentz-Lorenz για εφαρμογές στην οπτική:

$$\chi = \frac{N\alpha}{\epsilon_0} = 3 \left( \frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2} \right)$$

Με την παραπάνω σχέση κατέστη δυνατός ο υπολογισμός της επιδεκτικότητας  $\chi$  μέσω της ατομικής πολωσιμότητας  $\alpha$ , δηλαδή η μετάβαση από ένα μικροσκοπικό σε ένα μακροσκοπικό μέγεθος. Ο Debye έκανε την επιπλέον υπόθεση ότι ένα μόριο χαρακτηρίζεται από μία πολωσιμότητα λόγω παραμόρφωσης  $\alpha_0$  και μία λόγω κατευθυντικότητας  $\alpha_1$ , και έπειτα έκανε την σύνδεση με τα  $\epsilon_0$  και  $\epsilon_r$  αντίστοιχα μέσω της σχέσης Clausius-Mossotti [5].

Επιπλέον, θεώρησε περιοδικό το πεδίο που επιδρά στα άτομα και έκανε χρήση της κατάλληλης συνάρτησης κατανομής ( $f = A \left( 1 + \frac{1}{1+i\omega\tau} \frac{\mu F}{kT} \cos\theta \right)$ ) ώστε να λύσει την διαφορική εξίσωση που απέδειξε ο ίδιος ο Debye (χρειάστηκε να κάνει επέ-



κταση εκείνης του Boltzmann σε μία που να μην αφορά μόνο περιπτώσεις ισορροπίας):

$$2\tau \frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin\theta \left( \frac{\partial f}{\partial \theta} - \frac{fM}{kT} \right) \right)$$

με  $M$  ροπή μορίου  $= -\mu_{moment} F$ , με  $\mu_{moment}$  μαγνητική διπολική ροπή,  $\tau$  χρόνος εφυσήχασμού. Με αυτόν τον τρόπο έδειξε ότι για να βρούμε το  $\epsilon$  θέτουμε στην Clausius-Mossotti  $\alpha$  της μορφής:  $\alpha = \alpha_0 + \alpha_1 \propto 1 + \frac{1}{1+i\omega\tau}$  Τέλος, χρησιμοποίησε το γεγονός ότι  $\epsilon = \epsilon_{real} - i\epsilon_{imag}$  και τελικά απέδειξε ότι για 1 πόλο μόνο:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\epsilon_s - \epsilon_\infty}{1 + i\omega\tau} \quad (3.1)$$

## 1.2 FDTD φορμαλισμός

Θα μπορούσαμε στην προκειμένη περίπτωση να ακολουθήσουμε την λογική των προηγούμενων απλούστερων ειδών υλικών, ωστόσο θα ήταν αξιόλογο να δούμε ότι υπάρχει και μία ακόμη διαφορετική προσέγγιση που μπορούμε να ακολουθήσουμε για τα υλικά που παρουσιάζουν ρεύμα πόλωσης [6].

Ειδικότερα, μεταβαίνουμε στην σχέση (1.5), στην οποία υπάρχει ο όρος ρεύματος πόλωσης. Σε αυτόν τον όρο εφαρμόζουμε μετασχηματισμό Fourier:

$$\vec{j}_p = \epsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \left( \chi_e^D(t) \vec{E}(t) \right) \xrightarrow{\mathcal{F}} \vec{j}_p = \epsilon_0 i\omega \chi^D(\omega) \vec{E}(\omega)$$

$$\vec{j}_p = \epsilon_0 \Delta\epsilon \left( \frac{i\omega}{1 + i\omega\tau} \right) \vec{E}$$

Πολλαπλασιάζουμε με τον παρονομαστή του κλάσματος και εφαρμόζουμε τον αντίστροφο μετασχηματισμό Fourier και στα δύο μέλη της παραπάνω σχέσης, οπότε προκύπτει:

$$\vec{j}_p + \tau \frac{\partial \vec{j}_p}{\partial t} = \epsilon_0 \Delta\epsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

Η παραπάνω ADE μπορεί να μετατραπεί στην μορφή πεπερασμένων διαφορών σύμφωνα με τις σχέσεις 1.30 και 1.32. Προτιμούμε να κεντράρουμε στο βήμα  $n + \frac{1}{2}$  διότι περιλαμβάνονται μόνο πρώτες παράγωγοι. Επομένως:

$$\frac{J^{n+1} + J^n}{2} + \tau \frac{J^{n+1} - J^n}{dt} = \epsilon_0 \Delta\epsilon \frac{E^{n+1} - E^n}{dt}$$

Οπότε λύνοντας ως προς το  $J^{n+1}$  βρίσκουμε πώς ανανεώνεται αυτή η Auxiliary παράμετρος:

$$J^{n+1} = kJ^n + \beta \frac{E^{n+1} - E^n}{dt} \quad (3.2)$$

με

$$k = \frac{1 - \frac{dt}{2\tau}}{1 + \frac{dt}{2\tau}} \quad \beta = \frac{\epsilon_0 \Delta \epsilon \frac{dt}{2\tau}}{1 + \frac{dt}{2\tau}}$$

Για να βρεθεί όμως η νέα τιμή του ρεύματος πόλωσης στην (3.2) χρειάζεται να γνωρίζουμε την νέα τιμή του ηλεκτρικού πεδίου. Οπότε εισάγουμε ένα ενδιάμεσο βήμα  $n + \frac{1}{2}$  με σκοπό να λύσουμε την σχέση (1.10), εφόσον πρώτα την γράψουμε σε μορφή πεπερασμένων διαφορών, ως προς  $E^{n+1}$ . Σημειώνεται ότι επειδή οι συχνότητες που θα χρησιμοποιήσουμε είναι πολύ μεγάλες σε σχέση με το 0 ώστε να αναπτυχθούν ρεύματα ωμικά, είναι  $\sigma \approx 0$ .

Στο ενδιάμεσο βήμα το ρεύμα γράφεται:

$$J^{n+\frac{1}{2}} = \frac{J^{n+1} + J^n}{2}$$

Επομένως στο ενδιάμεσο βήμα:

$$\nabla \times H^{n+\frac{1}{2}} = \epsilon_0 \epsilon_\infty \left( \frac{E^{n+1} - E^{n-1}}{dt} \right) + \left( \frac{J^{n+1} + J^n}{2} \right) \quad (3.3)$$

Λύνουμε την (3.3) ως προς  $E^{n+1}$  έχοντας πρώτα αντικαταστήσει την τιμή του  $J^{n+1}$  σύμφωνα με την σχέση (3.2):

$$E^{n+1} = c_1 E^n + c_2 \left( \nabla \times H^{n+\frac{1}{2}} - \frac{1}{2}(1+k)J^n \right) \quad (3.4)$$

με

$$c_1 = 1 \quad c_2 = \frac{dt}{\epsilon_0 \epsilon_\infty + \frac{\beta}{2}}$$

## Κώδικας:

```
%constants
k= (1 - dt./(2.*tau))./(1 + dt./(2.*tau));
beta= eps0 .* (epss-eps0).*dt./tau ./(1 + dt./(2.*tau));

c1 = 1;
c2= dt ./ (eps0 .* epsinf + beta./2);

%Main part
for n=1:tstop

    JJ = zeros(1,kend);
    JJ = JJ + (1+k)*jx;
    % for vacuum media
    ex_p(2:kstart-1) = ex(2:kstart-1) - dt/(dx*eps0*mu0) * (by(2:kstart-1)-by(1:kstart-2));
    % for Lorentz media
    ex_p(kstart-1:kstop) = c1*ex(kstart-1:kstop) ...
        + c2*( -1.0/(mu0*dx) * (by(kstart-1:kstop)-by(kstart-2:kstop-1)) -0.5*JJ(kstart-1:kstop) );
    % Source
    pulser=exp(-.5*((n*dt-t0)/spread).^2).*sin(2*pi*freq*n*dt);
    ex_p(ksource)=ex_p(ksource)+pulser;

    jx_p(2:kend) = k*jx(2:kend) + beta.*(ex_p(2:kend)-ex(2:kend))./dt;

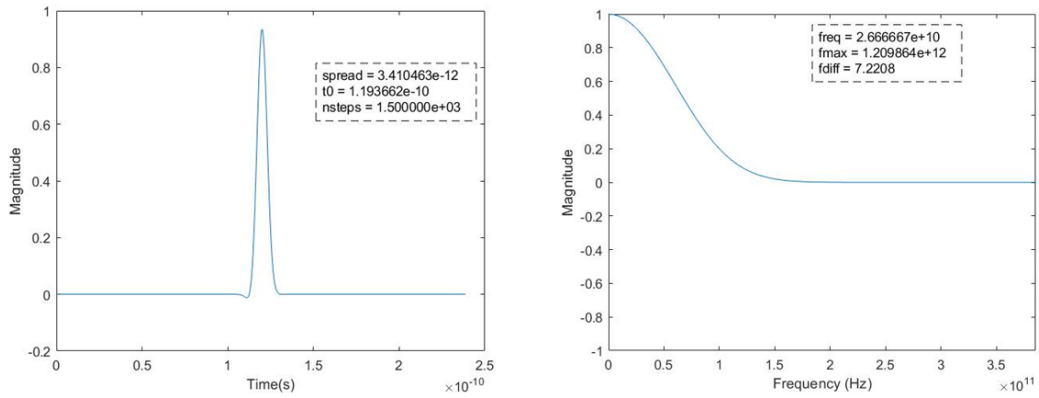
    jx(2:kend) = jx_p(2:kend);

    ex = ex_p;
```

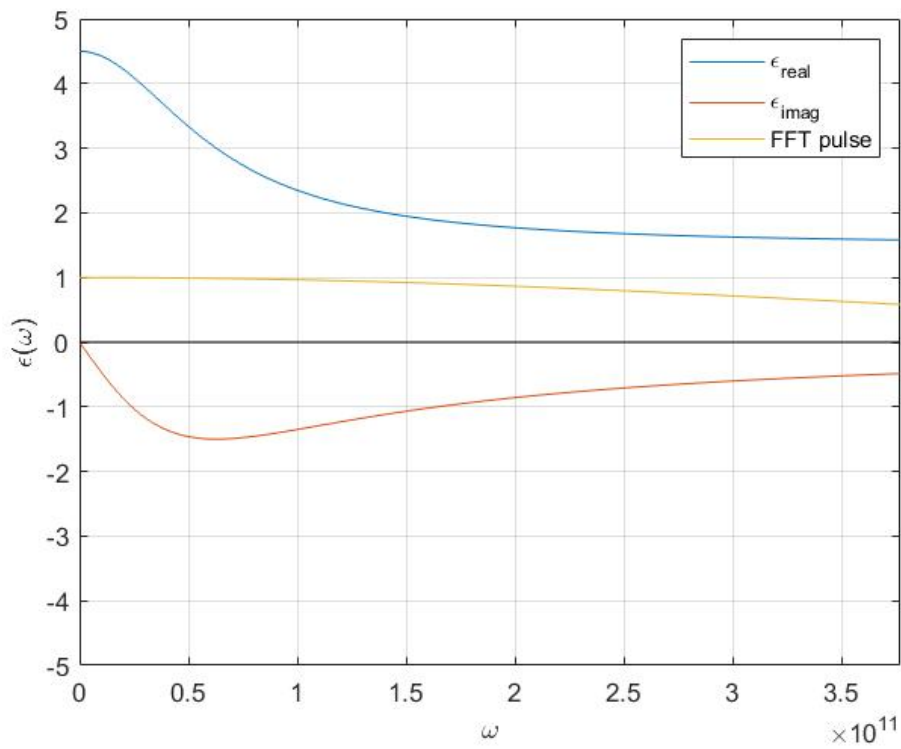
*Σχήμα 3.1: Κώδικας FDTD σε Matlab για διασπορά σε μέσο debye*

### 1.3 Αποτελέσματα προσομοιώσεων

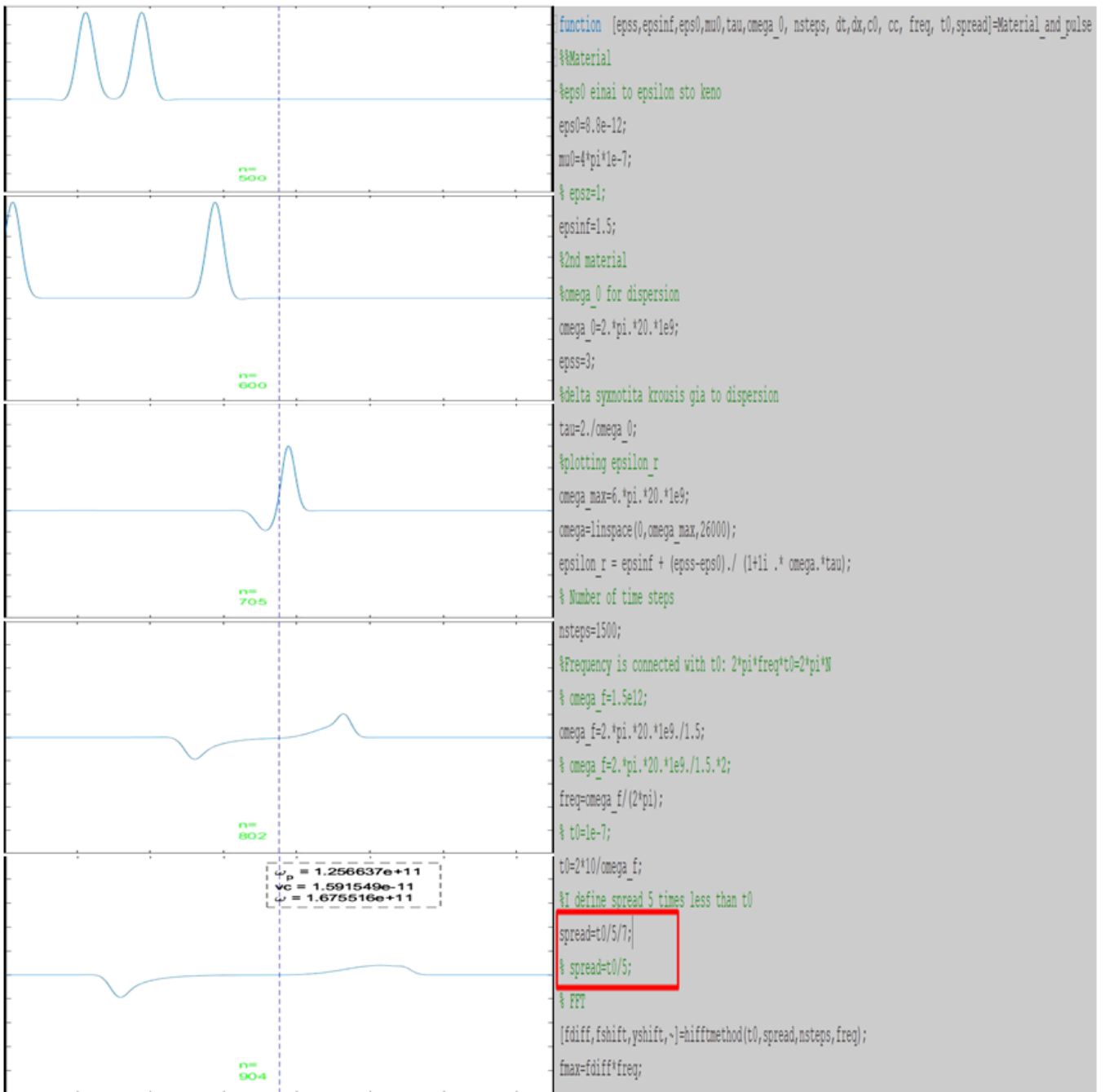
Η διασπορά λόγω debye οφείλεται στο γεγονός ότι πολώνονται τα άτομα κατά τη διέλευση πεδίου στο υλικό. Θα δούμε στις προσομοιώσεις ότι αν διαλέξουμε παλμό που καλύπτει πολλές συχνότητες στο υλικό (όπως ένας Gaussian), παρατηρούμε ότι κάθε συχνότητα ακολουθεί διαφορετική ταχύτητα λόγω της διασποράς. Αυτό σημαίνει ότι ο παλμός φαίνεται να "ανοίγει" κατά την πάροδο του χρόνου. Το γεγονός αυτό ισχύει διότι η σχέση διασποράς είναι τέτοια ώστε η συχνότητα να εξαρτάται από τον κυματαριθμό, ο οποίος με τη σειρά του εξαρτάται από τη συχνότητα.



**Σχήμα 3.2:** Γκαουσιανό κυματοπακέτο συχνότητας της τάξεως των GHz σε μέσο με διασπορά Debye με απορροφητικές συνοριακές συνθήκες στο πεδίο του χρόνου και των συχνοτήτων αντίστοιχα.

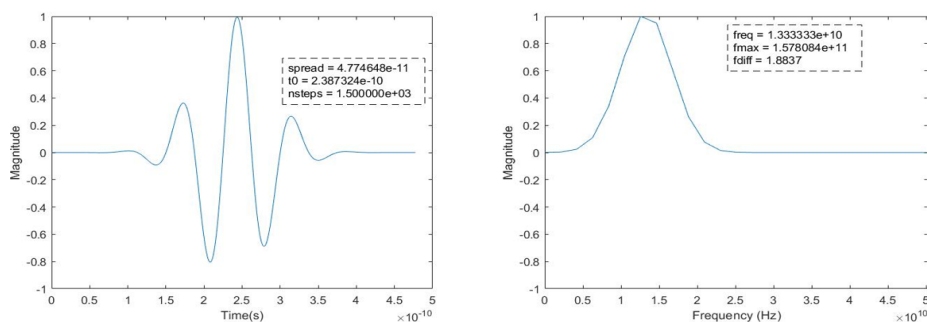


**Σχήμα 3.3:** Φάσμα συχνοτήτων Gaussian κυματοπακέτου για υλικά debye

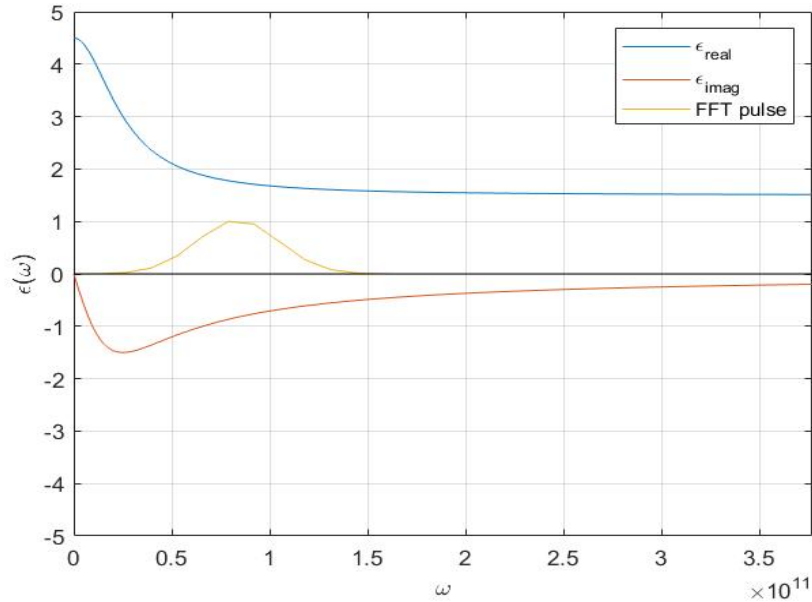


Σχήμα 3.4: Gaussian κυματοπακέτο τάξεως GHz

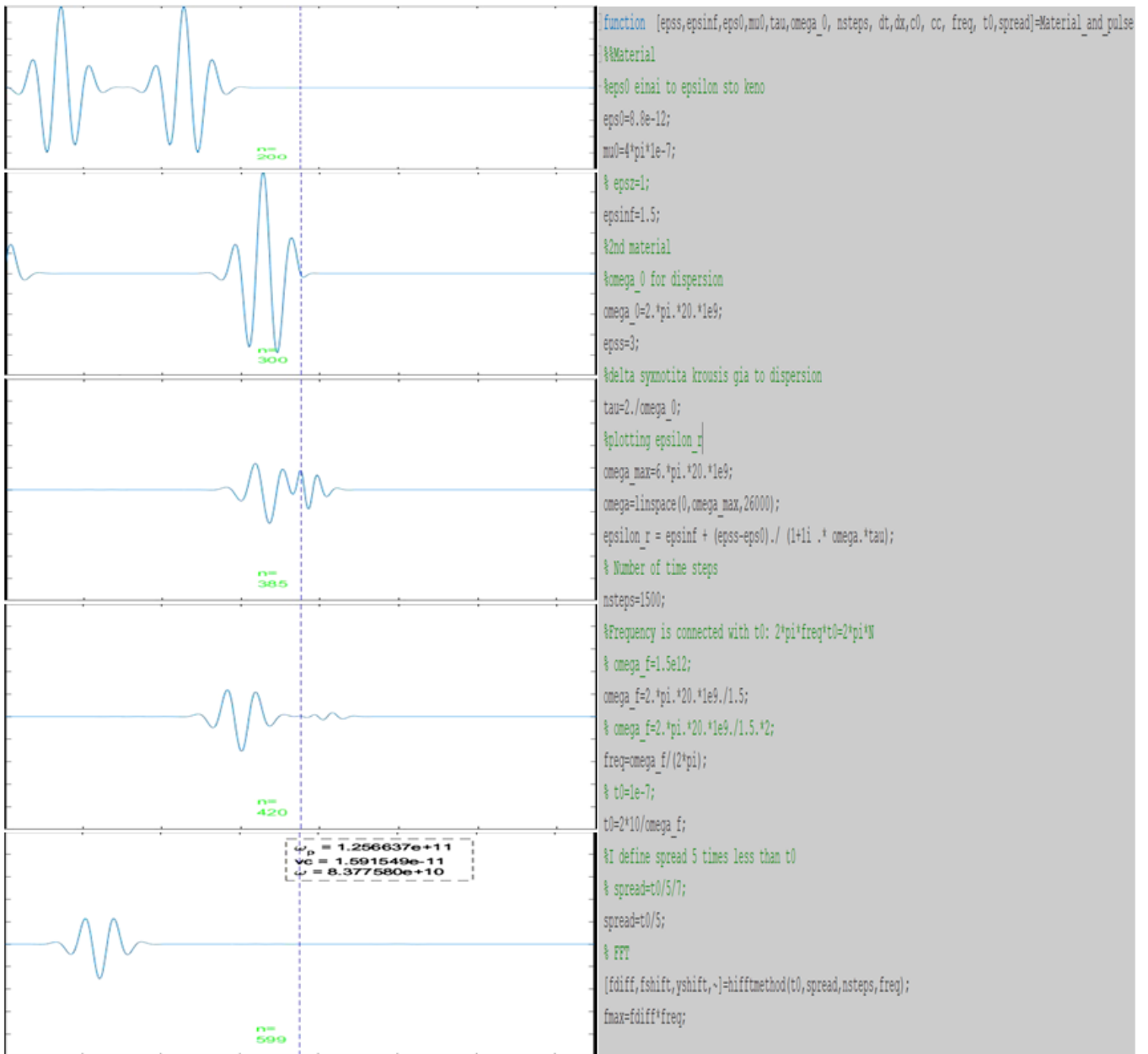
Χρησιμοποιούμε, επιπλέον, ένα κυματοπακέτο τύπου 1 για να δούμε την διαφορά σε σχέση με τον Γκαουσιανό παλμό. Παρατηρούμε ότι το κυματοπακέτο τύπου 1 δεν καλύπτει ολόκληρο το φάσμα του υλικού στο διάγραμμα (3.6), ωστόσο σκοπός ήταν να πετύχουμε δημιουργία παλμού στην περιοχή συχνοτήτων όπου το πραγματικό μέρος της διηλεκτρικής συνάρτησης μεταβάλλεται εμφανώς, διότι τότε είναι που οι διάφορες συχνότητες κινούνται με διαφορετική ταχύτητα. Ωστόσο, υπάρχει μεγάλη τιμή του φανταστικού μέρους της διηλεκτρικής συνάρτησης στο εύρος συχνοτήτων που μεταβάλλεται το πραγματικό μέρος, επομένως έχουμε και μεγάλη απορρόφηση.



**Σχήμα 3.5:** Κυματοπακέτο τύπου 1 συχνότητας της τάξεως των GHz σε μέσο με διασπορά Debye με απορροφητικές συνοριακές συνθήκες στο πεδίο του χρόνου και των συχνοτήτων αντίστοιχα.



**Σχήμα 3.6:** Φάσμα συχνοτήτων κυματοπακέτου τύπου 1 για υλικά debye



Σχήμα 3.7: Κυματοπακέτο τύπου 1 τάξεως GHz

## 2 Drude

### 2.1 Μιγαδική διηλεκτρική σταθερά

Στο μοντέλο του Drude θεωρούμε ότι τα περισσότερα ηλεκτρόνια είναι ελεύθερα να κινηθούν στο πλέγμα και δεν έχουν πολλές αλληλεπιδράσεις με τα ιόντα του κρυστάλλου. Ο Drude συνδύασε τον νόμο του Ωμ και το γεγονός ότι υπάρχει ένας χρόνος εφησυχασμού  $\tau$  κατά τον οποίο δεν γίνονται συγκρούσεις του ηλεκτρονίου με τα ιόντα του πλέγματος ώστε να δείξει την ισχύ της σχέσης για την αγωγιμότητα στην DC περίπτωση (δηλαδή  $\omega = 0$ ) [2]:

$$\left. \begin{aligned} \vec{j} &= \sigma_0 \vec{E} \rightarrow -\frac{ne\vec{p}}{m^*} = \sigma_0 \vec{E} \\ e\vec{E} &= \frac{d\vec{p}(t)}{dt} = -\frac{\vec{p}(t)}{\tau} \end{aligned} \right\} \sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m^*}$$

όπου  $e$  το φορτίο του ηλεκτρονίου,  $n$  συγκέντρωση ανά όγκο,  $m^*$  η ενεργός μάζα του ηλεκτρονίου στον κρύσταλλο.

Όταν όμως το ηλεκτρικό πεδίο που χρησιμοποιούμε είναι χρονικά εξαρτώμενο, τότε βρισκόμαστε σε AC περίπτωση, δηλαδή  $\omega \neq 0$  εφόσον το πεδίο στην πιο απλή περίπτωση θα είναι της μορφής:

$$\vec{E}(t) = \text{Re} \left( \vec{E}(\omega) e^{i\omega t} \right)$$

Ενώ η σχέση από την οποία προέρχεται ο χρόνος  $\tau$ :

$$\frac{d\vec{p}(t)}{dt} = -\frac{\vec{p}(t)}{\tau} + \vec{f}(t) = -\frac{\vec{p}(t)}{\tau} - e\vec{E}$$

η οποία με εφαρμογή μετασχηματισμού Fourier:

$$i\omega\vec{p}(\omega) = -\frac{\vec{p}(\omega)}{\tau} - e\vec{E}(\omega)$$

Όμως  $\vec{j}(\omega) = -\frac{ne\vec{p}(\omega)}{m^*}$ , επομένως:

$$\vec{j}(\omega) = \sigma(\omega)\vec{E}(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 + i\omega\tau}\vec{E}(\omega)$$

Οπότε προβαίνουμε στην εύρεση της διηλεκτρικής σταθεράς  $\epsilon(\omega)$ . Αυτό θα γίνει μέσω της εξίσωσης ( 1.4) και με την βοήθεια της παρακάτω ταυτότητας:

$$\nabla \times \nabla \times \vec{E} = \nabla(\nabla \cdot \vec{E}) - \nabla^2 \vec{E} = -\nabla^2 \vec{E}$$



Επομένως:

$$(1.4) \frac{(1.3)}{\nabla \times} \nabla^2 \vec{E} = \frac{\omega^2}{c^2} \left( 1 - \frac{4\pi i \sigma}{\omega} \right) \vec{E}$$

Και συνεπώς:

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{4\pi i \sigma}{\omega} = 1 - \frac{4\pi i \sigma_0}{\omega + i\omega^2 \tau} = 1 - \frac{\frac{4\pi \sigma_0}{\tau}}{\omega^2 - i\frac{\omega}{\tau}} \equiv 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - i\omega v_c} \quad (3.5)$$

Μπορούμε να κάνουμε περαιτέρω διερεύνηση σχετικά με την συχνότητα πλάσματος  $\omega_p$ . Στην συχνότητα αυτή τείνουν να ταλαντωθούν τα ζεύγη ηλεκτρονίων-ιόντων στο υλικό με το μέγιστο πλάτος αφήνοντάς τα για ελεύθερη ταλάντωση μετά από εφαρμογή πεδίου συχνότητας  $\omega$ . Ωστόσο, τα υλικά Drude περιγράφουν σχετικά καλά, μεν, τις ταλαντώσεις αυτές, ωστόσο έχουν ένα μειονέκτημα. Μεταξύ των ιόντων και ηλεκτρονίων που γίνεται η ταλάντωση προφανώς υπάρχει ένα ηλεκτρικό πεδίο που αναπτύσσεται. Αυτό δεν είναι στατικό, άρα αναμένουμε να είναι πιο ισχυρό στο ιόν από ότι στο ηλεκτρόνιο και μάλιστα αλλάζει γραμμικά. Επομένως θα δούμε πως αυτό το διορθώνουμε στα υλικά Lorentz, στα οποία λαμβάνουμε υπόψη αυτήν την αντίστοιχη δύναμη επαναφοράς.

## 2.2 FDTD φορμαλισμός

Όπως και στα υλικά Debye μπορούμε να ακολουθήσουμε τον φορμαλισμό με τα ρεύματα πόλωσης [6]. Πιο συγκεκριμένα, εφαρμόζουμε στον όρο ρεύματος πόλωσης μετασχηματισμό Fourier, οπότε έχουμε:

$$\begin{aligned} \vec{j}_p &= \epsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \left( \chi_e^{Dr}(t) \vec{E}(t) \right) \xrightarrow{F} \vec{j}_p = \epsilon_0 i \omega \chi^{Dr}(\omega) \vec{E}(\omega) \\ \vec{j}_p &= \epsilon_0 (-i\omega) \left( \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - i\omega v_c} \right) \vec{E} \end{aligned}$$

Όπως και στα υλικά Debye, εφαρμόζουμε αντίστροφο μετασχηματισμό Fourier έχοντας πρώτα πολλαπλασιάσει με τον παρονομαστή, οπότε έχουμε:

$$\frac{\partial^2 \vec{j}_p}{\partial t^2} + v_c \frac{\partial \vec{j}_p}{\partial t} = \epsilon_0 \omega_p^2 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

Ολοκληρώνουμε και αγνοούμε την σταθερά χρόνου που προκύπτει διότι διατηρούμε την συμμετρία χρόνου (όποια χρονική στιγμή και να κινηθεί το κύμα θα έχουμε το ίδιο effect). Τότε:

$$\frac{\partial \vec{j}_p}{\partial t} + v_c \vec{j}_p = \epsilon_0 \omega_p^2 \vec{E}$$

Μετατρέπουμε, λοιπόν, την παραπάνω ADE με την μέθοδο πεπερασμένων διαφορών ως εξής στο βήμα  $n + \frac{1}{2}$  και έπειτα λύνουμε ως προς  $J^{n+1}$ :

$$\frac{J^{n+1} - J^n}{dt} + v_c \frac{J^{n+1} + J^n}{2} = \epsilon_0 \omega_p^2 \frac{E^{n+1} + E^n}{2}$$

$$J^{n+1} = kJ^n + \beta (E^{n+1} + E^n) \quad (3.6)$$

$$\text{με} \quad k = \frac{1 - v_c \frac{dt}{2}}{1 + v_c \frac{dt}{2}} \quad \text{και} \quad \beta = \frac{\epsilon_0 \omega_p^2 \frac{dt}{2}}{1 + v_c \frac{dt}{2}}$$

Γράφουμε την μορφή της ( 1.10) στο ενδιάμεσο βήμα:

$$\nabla \times H^{n+\frac{1}{2}} = \epsilon_0 \epsilon_\infty \left( \frac{E^{n+1} - E^{n-1}}{dt} \right) + \left( \frac{J^{n+1} + J^n}{2} \right) \quad (3.7)$$

Λύνουμε, όπως πριν, την (3.7) ως προς  $E^{n+1}$  έχοντας πάλι αντικαταστήσει σε αυτήν την σχέση ( 3.6):

$$E^{n+1} = c_1 E^n + c_2 \left( \nabla \times H^{n+\frac{1}{2}} - \frac{1}{2}(1+k)J^n \right) \quad (3.8)$$

$$\text{με} \quad c_1 = \frac{\epsilon_0 \epsilon_\infty - \beta \frac{dt}{2}}{\epsilon_0 \epsilon_\infty + \beta \frac{dt}{2}} \quad \text{και} \quad c_2 = \frac{dt}{\epsilon_0 \epsilon_\infty + \beta \frac{dt}{2}}$$

```
%constants
k= (1 - dt.*vc./2)/(1 + dt.*vc./2);
beta= eps0 .* dt .*omega_0.^2 ./(1 + dt.*vc./2);

c1 = (eps0 .* epsinf - beta*dt./2)/(eps0 .* epsinf + beta*dt./2);
c2= dt ./ (eps0 .* epsinf + beta*dt./2);

%Main part
for n=1:tstop

    JJ = zeros(1,kend);
    JJ = JJ + (1+k)*jx;
    % for vacuum media
    ex_p(2:kstart-1) = ex(2:kstart-1) - dt/(dx*eps0*mu0) * (by(2:kstart-1)-by(1:kstart-2));
    % for Lorentz media
    ex_p(kstart-1:kstop) = c1*ex(kstart-1:kstop) + c2*( -1.0/(mu0*dx) * (by(kstart-1:kstop)-by(kstart-2:kstop-1)) -0.5*JJ(kstart-1:kstop) );
    % Source
    pulser=exp(-.5*(n*dt-t0)/spread).^2 .*sin(2*pi*freq*n*dt);
    ex_p(ksource)=ex_p(ksource)+pulser;

    jx_p(2:kend) = k*jx(2:kend) + beta.*(ex_p(2:kend)+ex(2:kend));

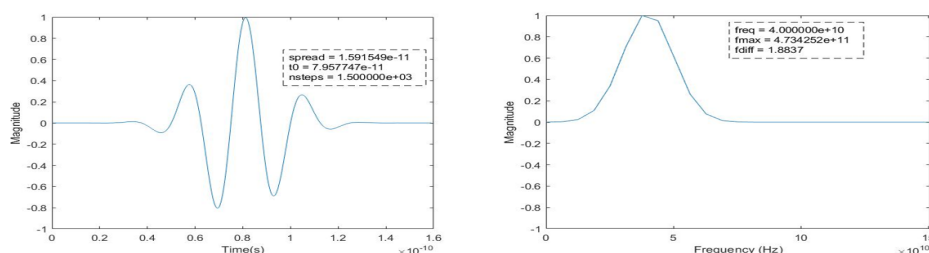
    jx(2:kend) = jx_p(2:kend);

    ex = ex_p;
```

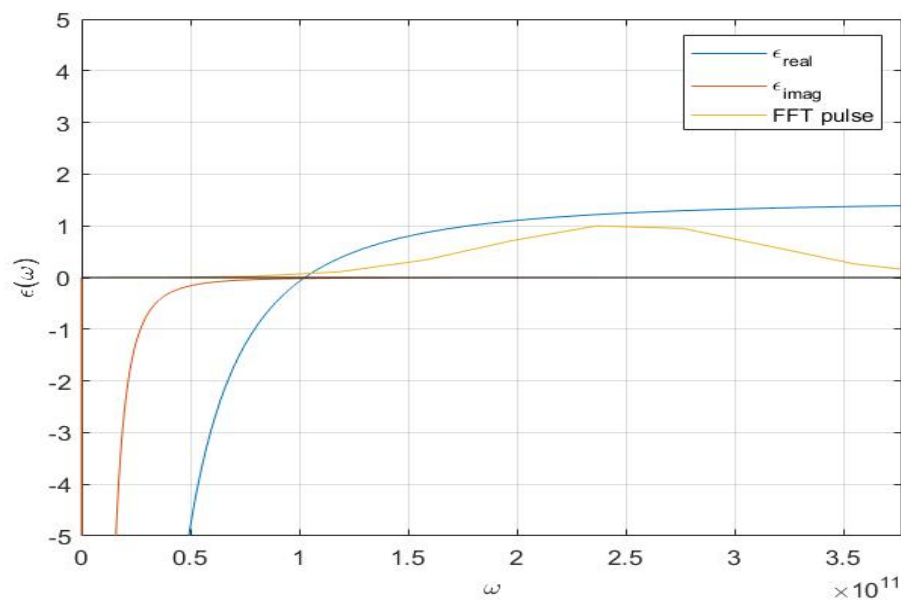
**Σχήμα 3.8:** Κώδικας FDTD σε Matlab για διασπορά σε μέσο drude

### 2.3 Αποτελέσματα προσομοιώσεων

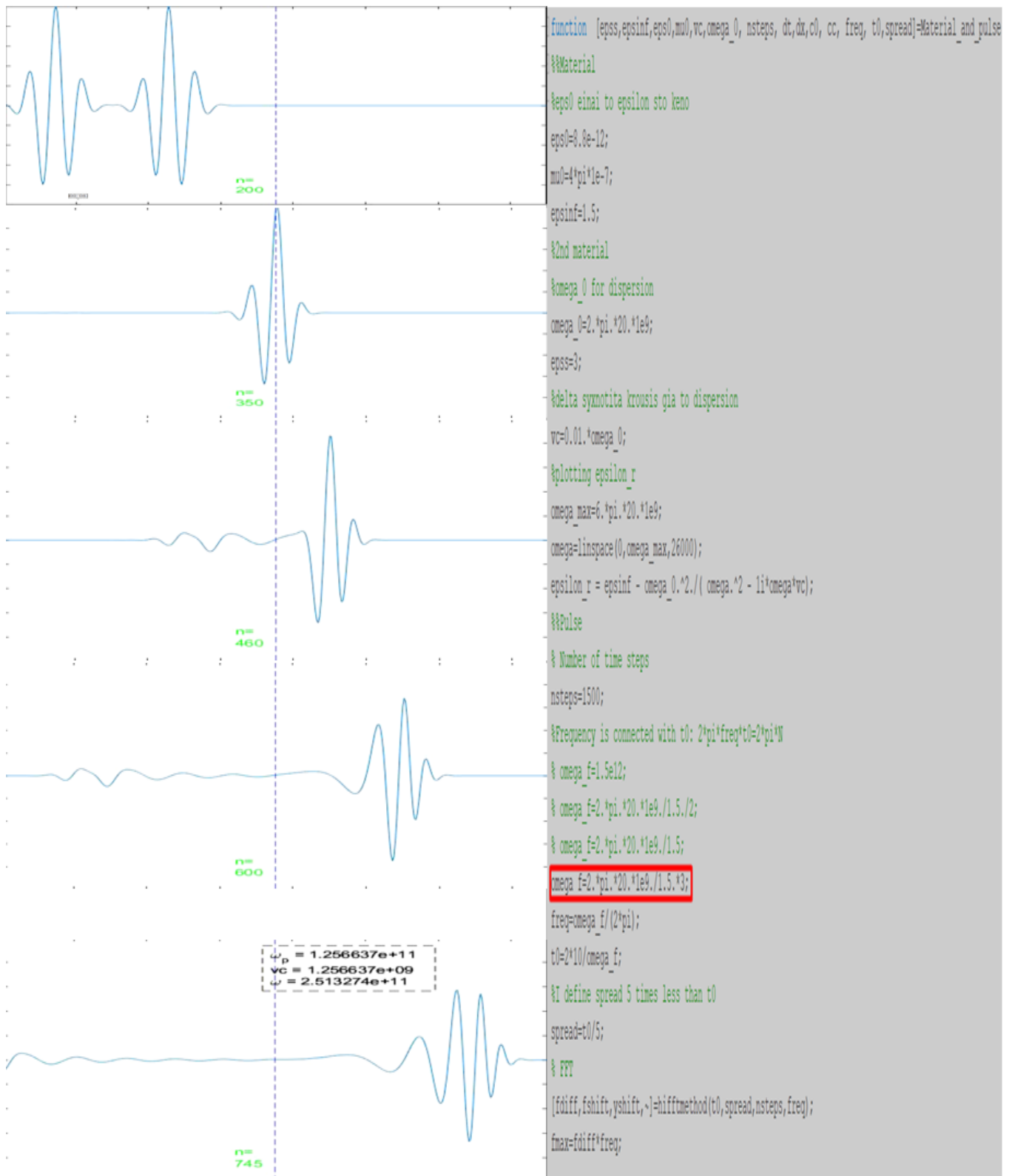
Στα υλικά Drude παρατηρούμε και μέσω των προσομοιώσεων ότι η συμπεριφορά εξαρτάται από την περιοχή συχνοτήτων. Αν προσδιορίσουμε κυματομορφή που αποτελείται από συχνότητες που καλύπτουν την περιοχή συχνοτήτων των θετικών τιμών του πραγματικού μέρους της διηλεκτρικής συνάρτησης βλέπουμε ότι δεν υπάρχουν απορροφήσεις και ταυτόχρονα μεταβάλλεται η ταχύτητα για κάθε τέτοια συχνότητα του κύματος. Επομένως σε αυτήν την περιοχή βλέπουμε διάδοση του παλμού χωρίς απώλειες και παρατηρούμε διαφορετική ταχύτητα φάσης και ομάδας στον παλμό.



**Σχήμα 3.9:** Κυματοπακέτο τύπου 1 συχνότητας της τάξεως των GHz και θετικής διηλεκτρικής συνάρτησης σε μέσο με διασπορά Drude με απορροφητικές συνοριακές συνθήκες στο πεδίο του χρόνου και των συχνοτήτων αντίστοιχα.

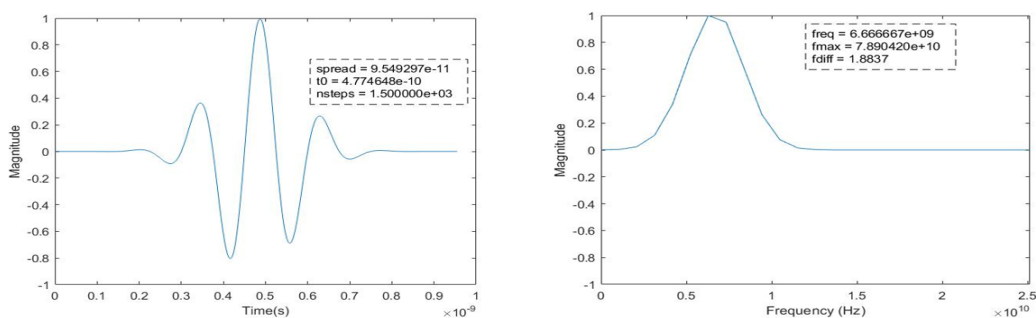


**Σχήμα 3.10:** Φάσμα συχνοτήτων κυματοπακέτου τύπου 1 με θετική διηλεκτρική σταθερά για υλικά drude

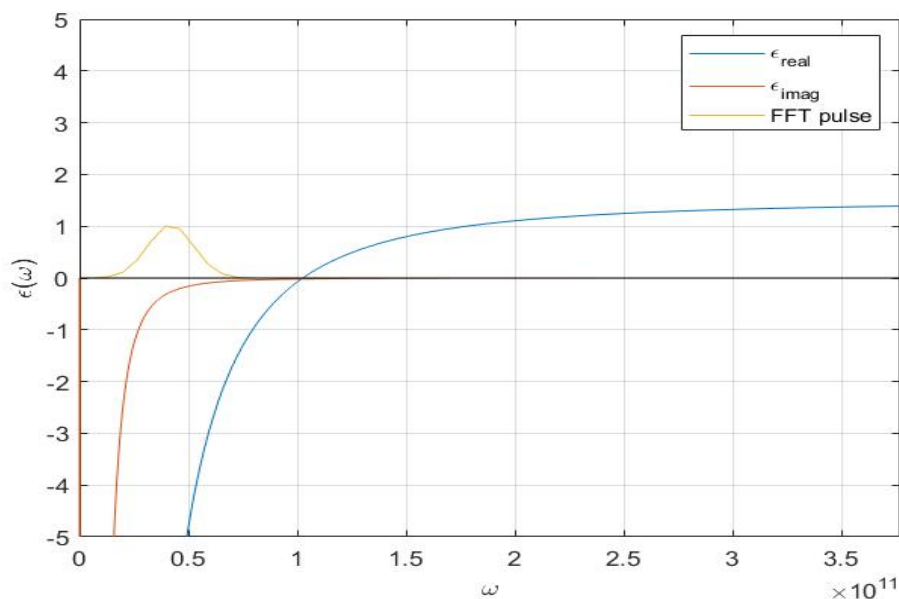


Σχήμα 3.11: Κομματοπακέτο τύπου 1 τάξεως GHz με  $\Re\{\epsilon_r\} > 0$

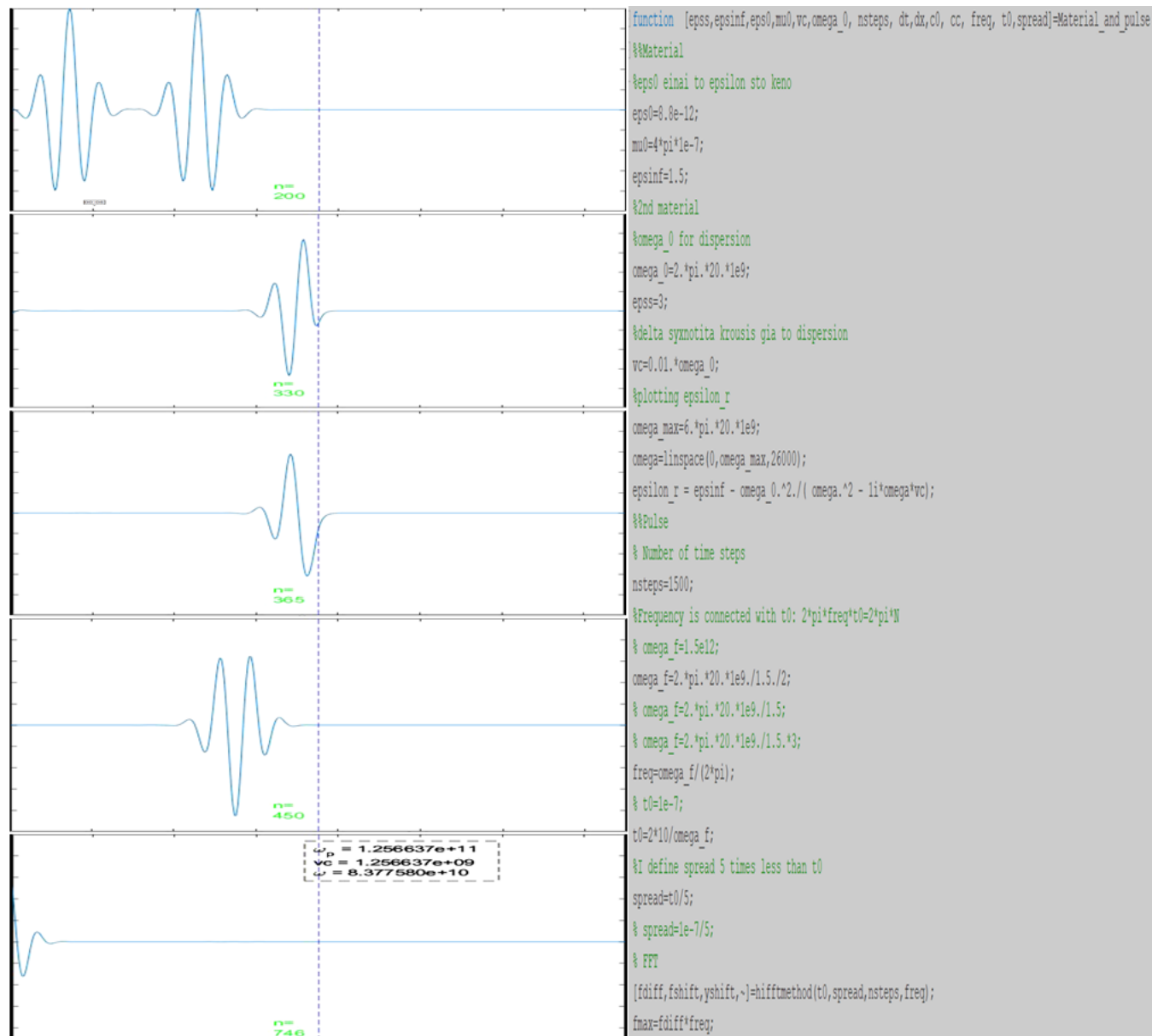
Θέλουμε, επιπλέον, να μελετήσουμε την περίπτωση χαμηλότερων συχνοτήτων παλμού από την κρίσιμη συχνότητα  $\omega_0$  διότι σε αυτήν την περιοχή συχνοτήτων η διηλεκτρική συνάρτηση είναι αρνητική. Αυτό σημαίνει πως το επαγόμενο και το εξωτερικό πεδίο βρίσκονται σε αντίθεση φάσης. Η συμπεριφορά του κύματος στο υλικό θυμίζει μεταλλική, διότι υπάρχει πλήρης ανάκλαση. Σε αυτήν την κατηγορία υλικών (Drude) ανήκουν και τα μεταλλικά τα οποία χαρακτηρίζονται για την αρνητικότητα της διηλεκτρικής σταθεράς.



**Σχήμα 3.12:** Κυματοπακέτο τύπου 1 συχνότητας της τάξεως των GHz και αρνητικής διηλεκτρικής συνάρτησης σε μέσο με διασπορά Drude με απορροφητικές συνοριακές συνθήκες στο πεδίο του χρόνου και των συχνοτήτων αντίστοιχα.



**Σχήμα 3.13:** Φάσμα συχνοτήτων κυματοπακέτου τύπου 1 με αρνητική διηλεκτρική σταθερά για υλικά drude



Σχήμα 3.14: Κυματοπακέτο τύπου 1 τάξεως GHz με  $\Re\{\epsilon_r\} < 0$

## 3 Γραμμικά Lorentz

### 3.1 Μοντέλο του Lorentz

Θα ήταν χρήσιμο πριν αναφερθούμε στο μοντέλο του Lorentz να ερευνήσουμε την ακόλουθη μαθηματική περιγραφή της κίνησης ενός ηλεκτρονίου στην ύλη. Ένα προσπίπτον ηλεκτρομαγνητικό κύμα σε ένα υλικό προκαλεί κίνηση στα υπάρχοντα ελεύθερα ηλεκτρόνια, αλλά και ρεύματα πόλωσης λόγω απορρόφησης, όπως έχουμε ήδη δει στην θεωρία. Επομένως κρίνεται αναγκαίο να αναπτύξουμε την αντίστοιχη εξίσωση κίνησης. Η πιο απλή προσέγγιση είναι εκείνη της χρήσης του νόμου του Νεύτωνα.

$$m \frac{d^2 \vec{r}_j}{dt^2} = -e \vec{E} - e \frac{d\vec{r}_j}{dt} \times \vec{B} - m\gamma_j \frac{d\vec{r}}{dt} - m\omega_j^2 \vec{r}_j$$

Ο πρώτος όρος του δεξιού μέλους είναι λόγω δύναμης από το πεδίο. Ο δεύτερος είναι η δύναμη Lorentz, ωστόσο εδώ είναι αμελητέα λόγω τάξης μεγέθους του  $B$  και  $E$ . Ο τρίτος όρος αφορά την δύναμη λόγω κάποιου παράγοντα που αντιτίθεται στην κίνηση, όπως για παράδειγμα αντίσταση  $\Omega\mu$ . Ο τέταρτος όρος αφορά την δύναμη επαναφοράς στη θέση ισορροπίας και εμφανίζεται μόνο όταν ο εισερχόμενος ηλεκτρομαγνητικός παλμός χαρακτηρίζεται από κάποια συχνότητα.

Η συνεισφορά του τέταρτου όρου υποδεικνύει πως θεωρούμε την περίπτωση όπου το διηλεκτρικό παρουσιάζει συμπεριφορά τέτοια ώστε τα ηλεκτρόνια να αλληλεπιδρούν με τα θετικά ιόντα μέσω ενός δυναμικού αρμονικού ταλαντωτή:  $V(r) = \frac{1}{2} m\omega^2 r^2$ . Αυτό αποτελεί την συνήθη αρμονική προσέγγιση που είναι αρκετά ακριβής για πολύ μικρές μετατοπίσεις γύρω του  $r_0$ , τις οποίες εφαρμόζουμε στο δυναμικό που περιγράφει τον κρυσταλλικό δεσμό, όπως εκείνο ενός συστήματος δύο ατόμων:

$$V(r) = V_{repulsive}(r) + V_{attractive}(r) = \frac{B}{r^m} - \frac{A}{r^n} \quad m > n$$

με

$$\left. \frac{dV}{dr} \right|_{r_0} = 0 \rightarrow r_0^{m-n} = \frac{mB}{nA}$$

Το μοντέλο του Lorentz θεωρεί πως τα ηλεκτρόνια δεν είναι πλήρως ελεύθερα να κινηθούν διότι υπάρχει αυτό το δυναμικό  $V$ , το οποίο λειτουργεί ως δυναμικό

αρμονικού ταλαντωτή. Επομένως αναμένουμε να υπάρχει μία συχνότητα  $\omega_0$ , η φυσική συχνότητα κατά την οποία μεγιστοποιείται η επιδεκτικότητα και η διηλεκτρική σταθερά.

Μετά την παράλειψη του όρου δύναμης Lorentz η εξίσωση κίνησης ανάγεται στην ακόλουθη συνήθη διαφορική εξίσωση για τον  $j$  πόλο:

$$m \frac{d^2 \vec{r}_j}{dt^2} + m\gamma_j \frac{d\vec{r}_j}{dt} + m\omega_j^2 \vec{r}_j = q\vec{E}$$

Δηλαδή, για έναν πόλο, θα προκύψει μόνο μία συχνότητα  $\omega_0$  που εκφράζεται μέσω του συντελεστή δύναμης επαναφοράς. Η παραπάνω γίνεται:

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} + m\gamma \frac{d\vec{r}}{dt} + m\omega_0^2 \vec{r} = q\vec{E} \quad (3.9)$$

Επομένως, εφαρμόζοντας μετασχηματισμό Fourier προκύπτει:

$$\vec{r}(\omega) = \frac{\frac{q}{m}}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\omega\gamma} \vec{E}(\omega)$$

$$\vec{P} = N\vec{p} = -Ne\vec{r} = \chi\epsilon_0\vec{E}$$

Οπότε η επιδεκτικότητα:

$$\chi^{(1)}(\omega) = \frac{\frac{Nq^2}{m\epsilon_0}}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\omega\gamma} = \frac{\frac{Ne^2}{\epsilon_0 m}}{D} \quad (3.10)$$

Έχοντας ταυτόχρονα ορίσει την ποσότητα  $D \equiv \omega_0^2 - \omega^2 + i\omega\gamma$ . Αξίζει να σημειώσουμε ότι το μέτρο της ποσότητας αυτής είναι της τάξης του  $\omega_0^2$ , δηλαδή  $|D| \approx \omega_0^2 = 10^{32} [Hz]^2$

Και έτσι προκύπτει η διηλεκτρική σταθερά:

$$\epsilon_r = \frac{\epsilon}{\epsilon_0} = \epsilon_\infty + \chi = \epsilon_\infty + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\omega\gamma} \quad \omega_p^2 \equiv \frac{Nq^2}{m\epsilon_0} \quad (3.11)$$

Να σημειωθεί ότι το μοντέλο του Lorentz οδηγεί στο μοντέλο του Drude αν  $\omega_0 = 0$ , δηλαδή αν θεωρήσουμε ότι η δύναμη επαναφοράς είναι αμελητέα, με συνέπεια να μην υπάρχει φυσική συχνότητα.

Ωστόσο, μπορούμε να παρατηρήσουμε τα εξής:



- ▶ ( 3.11)  $\xrightarrow{\omega \rightarrow \infty} \epsilon_r = \epsilon_\infty$  Η περίπτωση αυτή ποιοτικά σημαίνει πως το πεδίο που εφαρμόζουμε είναι αρκετά μεγαλύτερης συχνότητας από εκείνη που θα ταλαντώνονταν τα ηλεκτρόνια και τα ιόντα αν αφήνονταν ελεύθερα ως σύστημα ( $\omega \gg \omega_0$ ). Τότε τα ιόντα δεν έχουν μεγάλη απόκριση στην γρήγορη αυτή μεταβολή (δεν "προλαβαίνουν" να ακολουθήσουν το πεδίο), επομένως εκτελούν την κίνηση που επιβάλλεται από το δυναμικό Yukawa. Αυτό γίνεται γιατί υπάρχει το φαινόμενο της ηλεκτροστατικής θωράκισης το οποίο είναι κυρίαρχο στην περίπτωση αυτή.
- ▶ ( 3.11)  $\xrightarrow{\omega \rightarrow 0} \epsilon_r = \epsilon_\infty + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2} \epsilon_s$  Για την περίπτωση που το πεδίο έχει πολύ μικρή συχνότητα όχι μόνο δεν έχουμε μεγάλη απόκριση, αλλά επιπλέον δεν υπάρχει λόγος να υπάρξει ηλεκτροστατική θωράκιση, εφόσον, βέβαια, πρώτα είχαμε ήδη ουδετερότητα φορτίου συνολικά.

Άρα μπορούμε να ορίσουμε  $\Delta\epsilon = \epsilon_s - \epsilon_\infty$  και να δουλέψουμε μόνο με την  $\omega_0$ . Συνεπώς, την σχέση ( 3.11) μπορούμε να την μετασχηματίσουμε στην παρακάτω (για 1 πόλο):

$$\epsilon_r = \epsilon_\infty + \frac{(\Delta\epsilon)\omega_0^2}{\omega_0^2 + 2i\omega\delta - \omega^2} \quad \delta = \frac{\gamma}{2} \quad (3.12)$$

### 3.2 FDTD φορμαλισμός

Συγκεκριμένα, στα υλικά Lorentz χρησιμοποιούμε την ίδια λογική με τα υλικά Debye και Drude όσον αφορά τις εξισώσεις που χρησιμοποιούμε [6].

Αρχικά ξεκινώντας από την σχέση (1.10) αν επικεντρωθούμε στον όρο του ρεύματος πόλωσης χρησιμοποιήσουμε τον μετασχηματισμό Fourier, τότε:

$$\vec{j}_p = \epsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \left( \chi_e^L(t) \vec{E}(t) \right) \xrightarrow{\mathcal{F}} \vec{j}_p = \epsilon_0 i\omega \chi^L(\omega) \vec{E}(\omega)$$

$$\vec{j}_p = \epsilon_0 \Delta\epsilon \omega_0^2 \left( \frac{i\omega}{\omega_0^2 + 2i\omega\delta - \omega^2} \right) \vec{E}$$

Πολλαπλασιάζουμε με τον παρονομαστή του κλάσματος και εφαρμόζουμε τον αντίστροφο μετασχηματισμό Fourier και στα δύο μέλη της παραπάνω σχέσης. Τότε

προκύπτει:

$$\omega_0^2 \vec{J} + 2\delta \frac{\partial \vec{J}}{\partial t} + \frac{\partial^2 \vec{J}}{\partial t^2} = \epsilon_0 \Delta \epsilon \omega_0^2 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (3.13)$$

Η παραπάνω ADE μπορεί να μετατραπεί στην μορφή πεπερασμένων διαφορών σύμφωνα με τις σχέσεις 1.30 και 1.32, επομένως:

$$\omega_0^2 J^n + 2\delta \frac{J^{n+1} - J^{n-1}}{2dt} + \frac{J^{n+1} - 2J^n + J^{n-1}}{(dt)^2} = \epsilon_0 \Delta \epsilon \omega_0^2 \frac{E^{n+1} - E^{n-1}}{2dt}$$

Οπότε λύνοντας ως προς το  $J^{n+1}$  βρίσκουμε πώς ανανεώνεται αυτή η Auxiliary παράμετρος:

$$J^{n+1} = aJ^n + \xi J^{n-1} + \gamma \frac{E^{n+1} - E^{n-1}}{2dt} \quad (3.14)$$

με

$$a = \frac{2 - \omega_0^2 (dt)^2}{1 + \delta dt} \quad \xi = -\frac{1 - \delta dt}{1 + \delta dt} \quad \gamma = \frac{\epsilon_0 \Delta \epsilon \omega_0^2 (dt)^2}{1 + \delta dt}$$

Για να βρεθεί όμως η νέα τιμή του ρεύματος πόλωσης στην (3.14) χρειάζεται να γνωρίζουμε την νέα τιμή του ηλεκτρικού πεδίου. Οπότε εισάγουμε ένα ενδιάμεσο βήμα  $n + \frac{1}{2}$  με σκοπό να λύσουμε την σχέση (1.10), εφόσον πρώτα την γράψουμε σε μορφή πεπερασμένων διαφορών, ως προς  $E^{n+1}$ . Σημειώνεται ότι επειδή οι συχρότητες που θα χρησιμοποιήσουμε είναι πολύ μεγάλες σε σχέση με το 0 ώστε να αναπτυχθούν ρεύματα ωμικά, είναι  $\sigma \approx 0$ .

$$\nabla \times H^{n+\frac{1}{2}} = \epsilon_0 \epsilon_\infty \left( \frac{E^{n+1} - E^{n-1}}{dt} \right) + \left( \frac{J^{n+1} + J^n}{2} \right) \quad (3.15)$$

Λύνοντας την (3.15) ως προς  $E^{n+1}$ :

$$E^{n+1} = c_1 E^{n-1} + c_2 E^n + c_3 \left( \nabla \times H^{n+\frac{1}{2}} - \frac{1}{2}(1+a)J^n - \frac{1}{2}\xi J^{n-1} \right) \quad (3.16)$$

με

$$c_1 = \frac{\gamma}{4\epsilon_0\epsilon_\infty + \frac{\gamma}{4}} \quad c_2 = \frac{\epsilon_0\epsilon_\infty}{\epsilon_0\epsilon_\infty + \frac{\gamma}{4}} \quad c_3 = \frac{dt}{4\epsilon_0\epsilon_\infty + \frac{\gamma}{4}}$$

Ο κώδικας, συνεπώς, θα είναι ο εξής:

```
%constants
a=(2-dt.^2.*omega_0.^2)./(1 + dt.*delta);
xi= -(1 - dt.*delta)./(1 + dt.*delta);
gamma= eps0 .* dt.^2 .*omega_0.^2 .* (epss-epsinf)./(1 + dt.*delta);

c1= gamma ./ (4.* eps0 .* epsinf + gamma);
c2 = (4.* eps0 .* epsinf)./(4.* eps0 .* epsinf + gamma);
c3= 4.*dt ./ (4.* eps0 .* epsinf + gamma);

%Main part
for n=1:tstop
    JJ = zeros(1,kend);
    JJ = JJ + (1+a)*jx + xi*jx_m;
    % for vacuum media
    ex_p(2:kstart-1) = ex(2:kstart-1) - dt/(dx*eps0*mu0) * (by(2:kstart-1)-by(1:kstart-2));
    % for Lorentz media
    ex_p(kstart-1:kstop) = c1*ex_m(kstart-1:kstop) + c2*ex(kstart-1:kstop) ...
        + c3*( -1.0/(mu0*dx) * (by(kstart-1:kstop)-by(kstart-2:kstop-1)) -0.5*JJ(kstart-1:kstop) );
    % Source
    pulser=exp(-.5*( (n*dt-t0)/spread).^2) .*sin(2*pi*freq*n*dt);
    ex_p(ksource)=ex_p(ksource)+pulser;

    jx_p(2:kend) = a*jx(2:kend) + xi*jx_m(2:kend) + gamma.*(ex_p(2:kend)-ex_m(2:kend))/(2*dt);

    jx_m(2:kend) = jx(2:kend);
    jx(2:kend) = jx_p(2:kend);

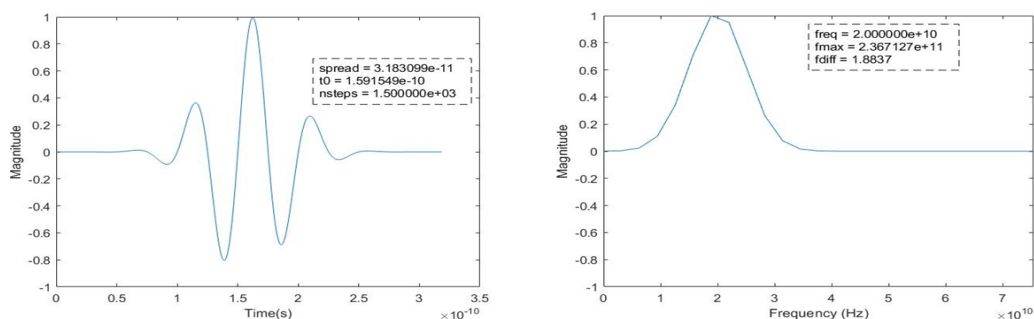
    ex_m = ex;
    ex = ex_p;
```

Σχήμα 3.15: Κώδικας FDTD σε Matlab για διασπορά σε μέσο lorentz

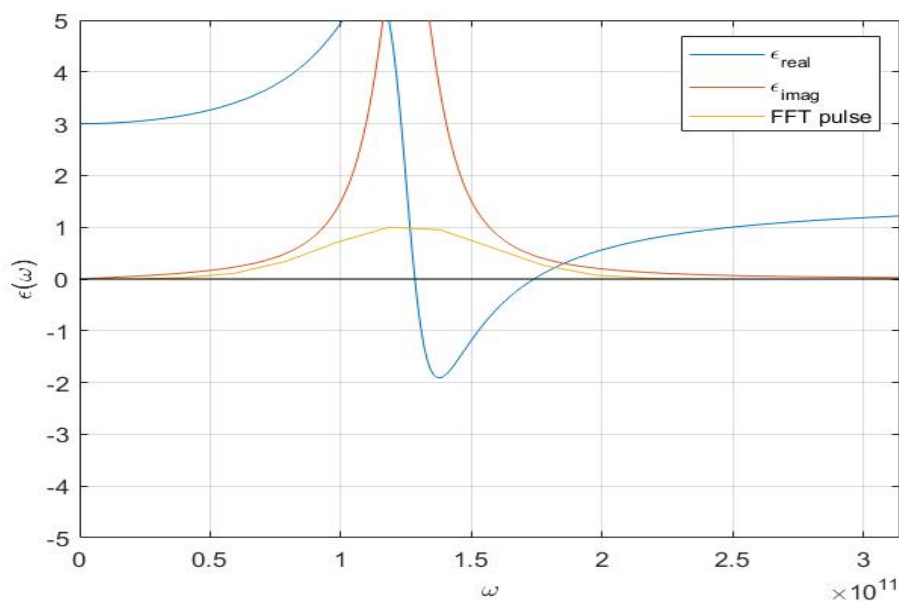
### 3.3 Αποτελέσματα προσομοιώσεων

Τα υλικά Lorentz έχουν ένα ιδιαίτερο χαρακτηριστικό. Η μορφή του πραγματικού μέρους της διηλεκτρικής συνάρτησης αποτελείται από δύο είδη περιοχών, εκείνες που είναι αύξουσα με το  $\omega$  και η περιοχή στην οποία είναι φθίνουσα με το  $\omega$ , δηλαδή τις περιοχές ομαλού διασκεδασμού και την περιοχή ανώμαλου διασκεδασμού αντίστοιχα. Στην περιοχή ανώμαλου διασκεδασμού βρίσκεται και η  $\omega_0$ , όπου ταυτόχρονα υπάρχει και η μέγιστη απορρόφηση, η οποία φαίνεται λόγω του μεγίστου που παρουσιάζει το μιγαδικό κομμάτι της διηλεκτρικής σταθεράς. Επομένως

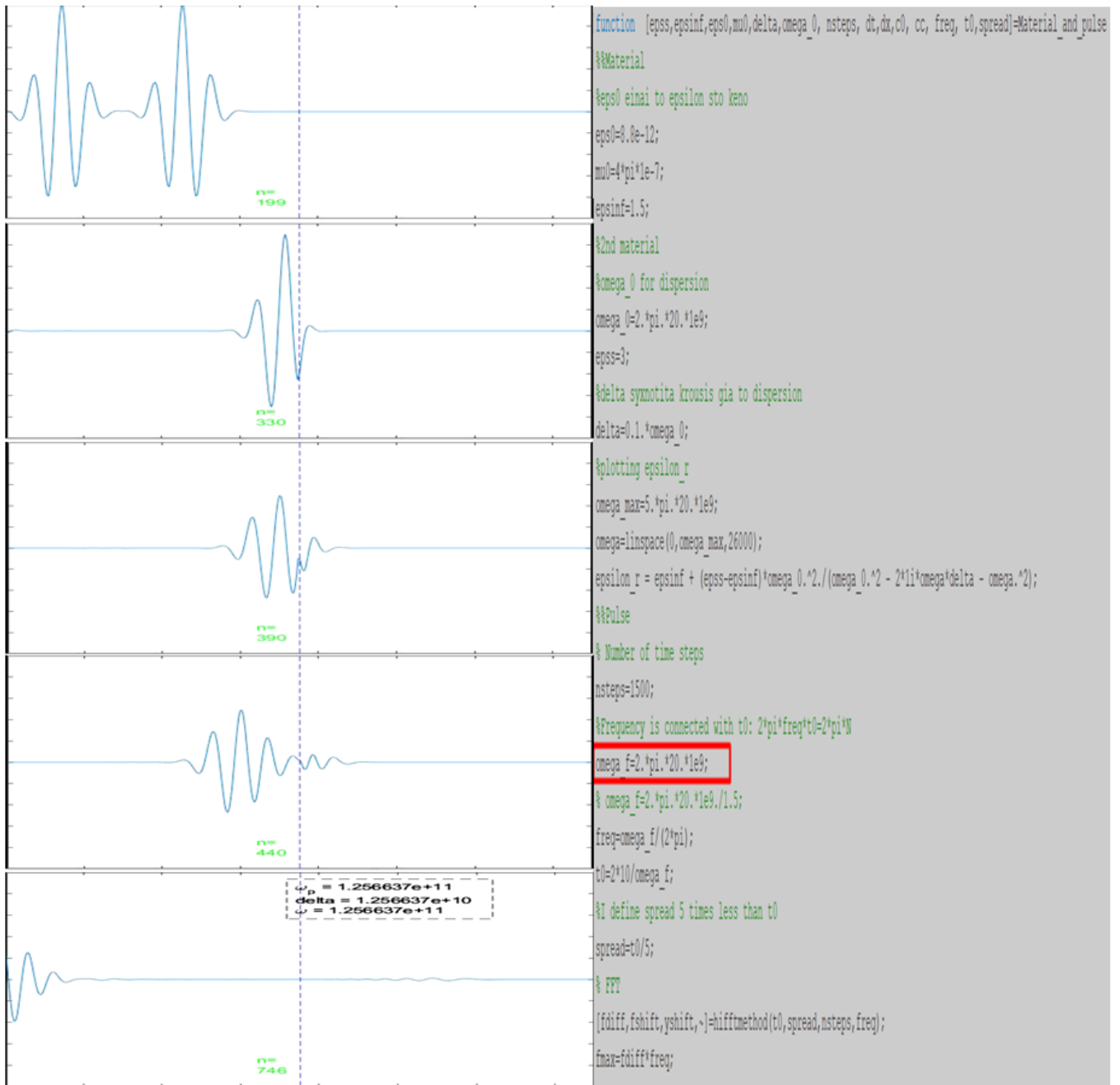
μπορούμε να δημιουργήσουμε παλμό του οποίου το εύρος συχνοτήτων βρίσκεται ως επί το πλείστον στην περιοχή ανώμαλου διασκεδασμού, αλλά σημαντικό ποσοστό να βρίσκεται και στις περιοχές ομαλού διασκεδασμού ώστε να δούμε διπλό φαινόμενο.



**Σχήμα 3.16:** Κυματοπακέτο τύπου 1 συχνότητας της τάξεως των GHz με  $\omega = \omega_0$  σε μέσο με διασπορά Lorentz με απορροφητικές συνοριακές συνθήκες στο πεδίο του χρόνου και των συχνοτήτων αντίστοιχα.

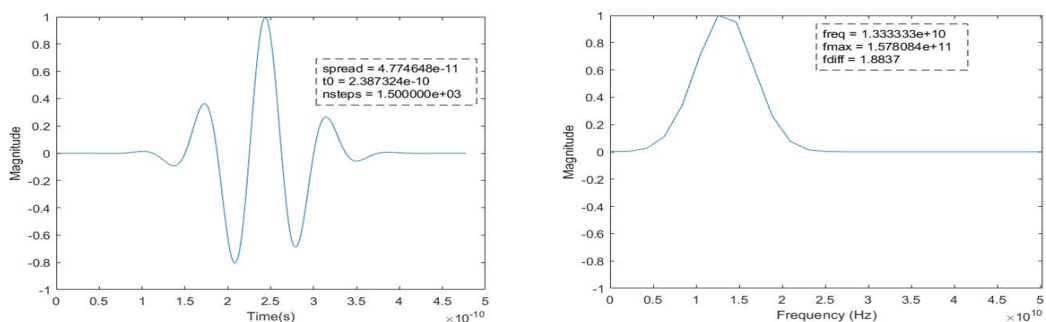


**Σχήμα 3.17:** Φάσμα συχνοτήτων κυματοπακέτου τύπου 1 με κεντραρισμένη διηλεκτρική σταθερά  $\omega = \omega_0$  για υλικά Lorentz

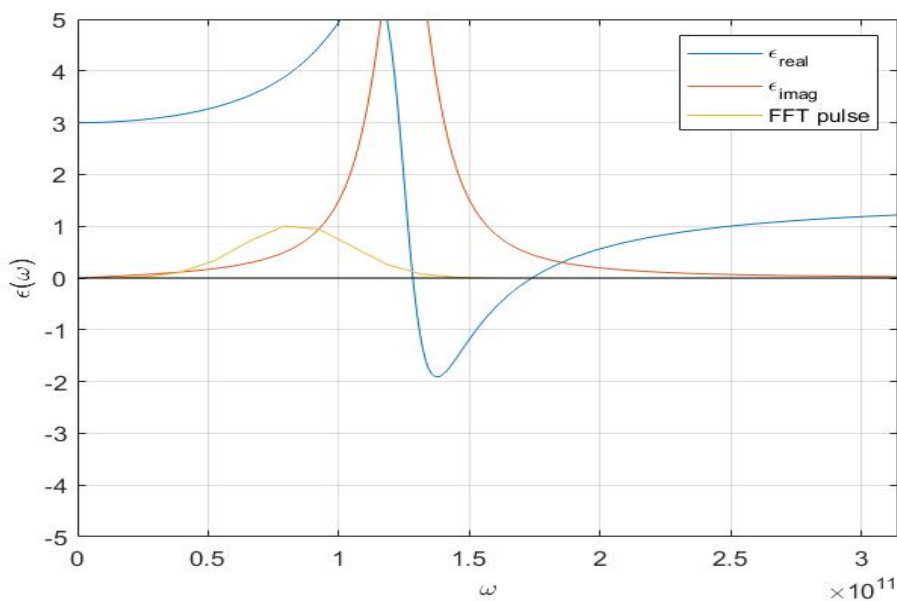


Σχήμα 3.18: Κυματοπακέτο τύπου 1 τάξεως GHz με  $\omega = \omega_0$

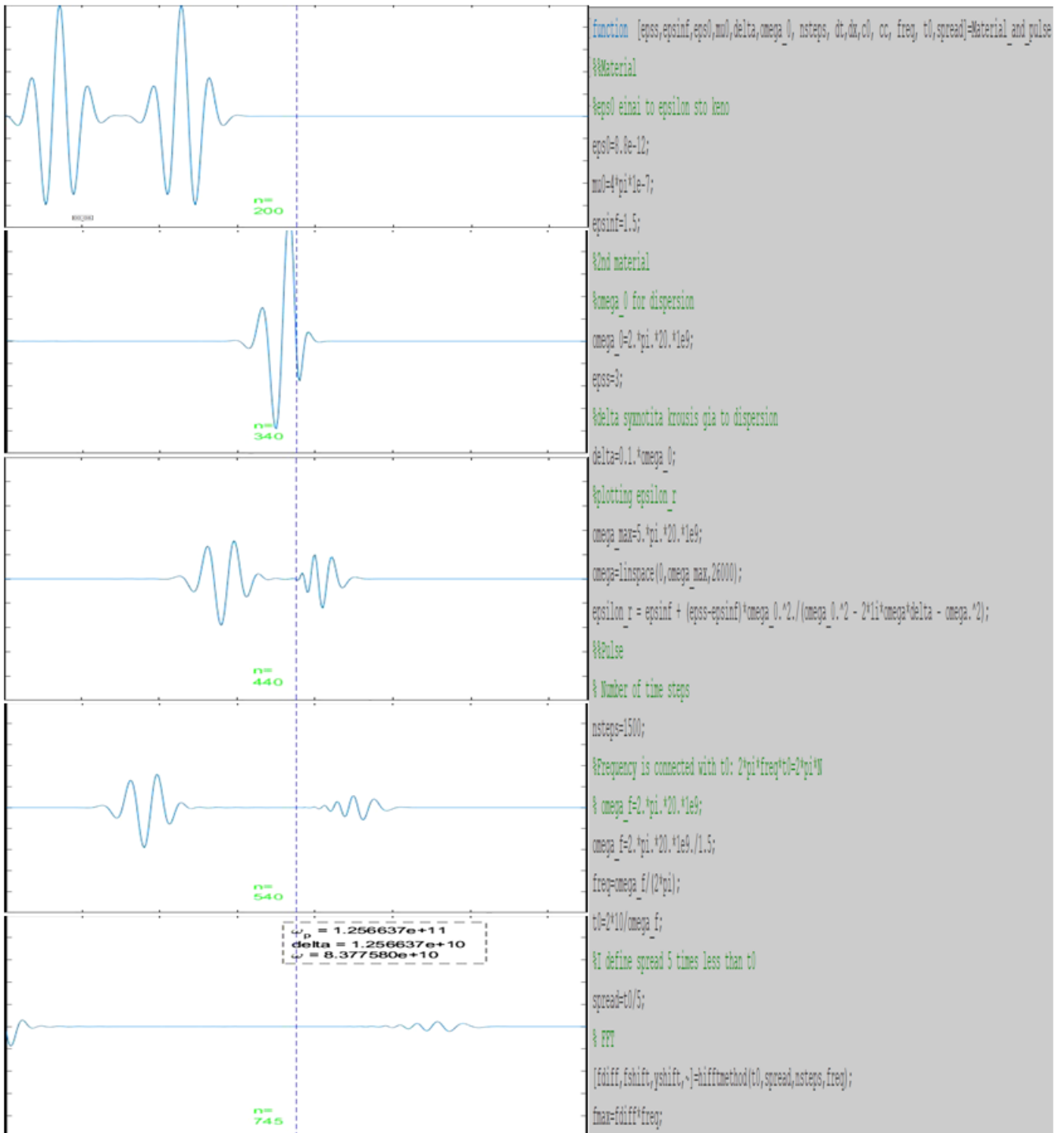
Όπως είδαμε για την περίπτωση του "κεντραρισμένου" παλμού, ο τελευταίος συναντά δύο είδη διασκεδασμού. Ωστόσο υπάρχουν περιπτώσεις που θέλουμε να δούμε διασπορά και ταυτόχρονα να έχουμε μεγάλη ανάκλαση. Μπορούμε, λοιπόν, να μετακινήσουμε την περιοχή συχνοτήτων του παλμού σε εκείνες κάτω της κρίσιμης  $\omega_0$  ώστε να μην έχουμε μεγάλη απορρόφηση και ταυτόχρονα ο παλμός να "βλέπει" πολύ περισσότερο ομαλό διασκεδασμό από ανώμαλο και μεγάλη τιμή του πραγματικού μέρους της διηλεκτρικής συνάρτησης.



**Σχήμα 3.19:** Κυματοπακέτο τύπου 1 συχνότητας της τάξεως των GHz με  $\omega < \omega_0$  σε μέσο με διασπορά Lorentz με απορροφητικές συνοριακές συνθήκες στο πεδίο του χρόνου και των συχνοτήτων αντίστοιχα.



**Σχήμα 3.20:** Φάσμα συχνοτήτων κυματοπακέτου τύπου 1 με  $\omega < \omega_0$  για υλικά Lorentz



Σχήμα 3.21: Κυματοπακέτο τύπου 1 τάξεως GHz με  $\omega < \omega_0$

## 4 Μη-γραμμικά Lorentz

### 4.1 Πόλωση Kerr

Η κύρια διαφορά των μη γραμμικών υλικών σε σχέση με τα γραμμικά (όπως εκείνα που είδαμε παραπάνω) είναι το γεγονός ότι η πόλωση εξαρτάται από όρους ανώτερης της πρώτης τάξης από το ηλεκτρικό πεδίο. Αυτή η διαφορά έχει αρκετές συνέπειες στην συμπεριφορά των λύσεων των διαφορικών εξισώσεων που περιγράφουν το κύμα. Μία από τις γνωστότερες τέτοιες συμπεριφορές παρουσιάζεται στο πρόβλημα γνωστό ως FPUT (Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou)[3]. Σύμφωνα με αυτό, έχουμε ένα μονοδιάστατο διακριτό πλέγμα αποτελείται από ένα άτομο στην κάθε θεμελιώδη κυψελίδα. Σε αυτά τα άτομα υπάρχει μόνο μεταξύ πρώτων γειτόνων αλληλεπίδραση, με δύναμη ανάλογη της απομάκρυνσης στην γραμμική περίπτωση, ενώ με δύναμη (επιπλέον της γραμμικής περίπτωσης) ανάλογη του τετραγώνου της απομάκρυνσης στην μη γραμμική περίπτωση. Μεταβαίνοντας από την διακριτή κυματική εξίσωση που προκύπτει με αυτήν την αντικατάσταση στο συνεχές όριο όπου η απόσταση των ατόμων είναι μικρή σε σχέση με το εύρος που εκτείνονται οι λύσεις (πχ: η λύση για το σωματίδιο στην θέση  $n$  διαφέρει ελάχιστα από εκείνη στην θέση  $n-1$ ) [7] παρατηρούμε τα εξής σημαντικά γεγονότα. Λαμβάνοντας υπόψη μόνο τον γραμμικό όρο παρουσιάζεται όρος διασποράς στην διαφορική εξίσωση, ενώ αν θεωρήσουμε ταυτόχρονα και τον μη γραμμικό όρο τότε εκείνος ο όρος θα δρα με τέτοιο τρόπο στην διαφορική εξίσωση που προκύπτει (στην περίπτωση αυτή, την εξίσωση Boussinesq (1871)) που τελικά προσπαθεί να αναιρέσει την συμβολή του όρου διασποράς. Η λύση επομένως της διαφορικής εξίσωσης Boussinesq λέμε ότι αφορά σολιτόνια, δηλαδή διαταραχές (κύματα στην περίπτωσή μας) που διαδίδονται αναλλοίωτα στο μη γραμμικό αυτό πλέγμα.

Απολύτως ανάλογα εργαζόμαστε προκειμένου να βρούμε λύσεις σολιτονίων στην διαφορική εξίσωση που θα προκύψει αν θεωρήσουμε υλικά τα οποία χαρακτηρίζονται από διασπορά και έναν αντίστοιχο μη γραμμικό όρο. Στην συγκεκριμένη περίπτωση θέλουμε να εργαστούμε με την πόλωση Kerr στα υλικά Lorentz. Αυτή απευθύνεται στην εξάρτηση της πόλωσης από την τρίτη δύναμη του ηλεκτρικού πεδίου. Στο γενικότερο πλαίσιο αναφερόμαστε σε περιπτώσεις κεντροσυμμετρικών υλικών και θεωρούμε την δύναμη επαναφοράς να είναι της παρακάτω μορφής αντί για εκείνη του τελευταίου όρου του αριστερού μέλους στην σχέση (3.9):

$$F_{\text{επ}} = -m\omega_j^2 \vec{r}_j + mbr_j^3$$

Τότε η (3.9) γίνεται:

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} + m\gamma \frac{d\vec{r}}{dt} + m\omega_0^2 \vec{r} - mbr^3 = q\vec{E} \quad (3.17)$$



Θα χρησιμοποιήσουμε ένα τέχνασμα [4]. Θεωρούμε μία παράμετρο  $\lambda$ , λειτουργεί ως βάρος στην ακόλουθη γραφή της απόστασης από τη θέση ισορροπίας (γενικός τρόπος αντιμετώπισης μη γραμμικών προβλημάτων με διαταραχές):

$$\vec{r}(t) = \vec{r} = \sum_{\mu=1}^{\infty} \lambda^{\mu} \vec{r}^{(\mu)} \quad (3.18)$$

Αντικαθιστούμε την (3.18) στην (3.17) και κάνουμε την κατάλληλη αντιστοίχιση όρων. Αν επιπλέον θέσουμε  $\delta = \frac{\gamma}{2}$  προκύπτουν οι 3 εξισώσεις, μία για κάθε διόρθωση μέχρι και τρίτης τάξης που εμείς χρειαζόμαστε:

$$\frac{d^2 \vec{r}^{(1)}}{dt^2} + 2\delta \frac{d\vec{r}^{(1)}}{dt} + \omega_0^2 \vec{r}^{(1)} = \frac{q\vec{E}(t)}{m} \quad (3.19)$$

$$\frac{d^2 \vec{r}^{(2)}}{dt^2} + 2\delta \frac{d\vec{r}^{(2)}}{dt} + \omega_0^2 \vec{r}^{(2)} = 0 \quad (3.20)$$

$$\frac{d^2 \vec{r}^{(3)}}{dt^2} + 2\delta \frac{d\vec{r}^{(3)}}{dt} + \omega_0^2 \vec{r}^{(3)} - b(\vec{r}^{(1)} \vec{r}^{(1)}) = 0 \quad (3.21)$$

Μπορούμε να παρατηρήσουμε, λοιπόν, πώς κάθε εξίσωση συμβάλλει στην αντίστοιχης τάξης επιδεκτικότητα:

- Η εξίσωση (3.19) έχει λυθεί στην γραμμική περίπτωση των υλικών Lorentz. Χρησιμοποιούμε την διηλεκτρική συνάρτηση της σχέσης (3.11) και βρίσκουμε μέσω της (1.11) (ορίζουμε πάλι  $D \equiv \omega_0^2 - \omega^2 + i\omega\gamma$ ):

$$\chi^{(1)}(\omega) = \frac{Ne^2}{\epsilon_0 m D}$$

- Η εξίσωση (3.20) πρόκειται για εξίσωση με αναλωτικούς όρους. Αυτό σημαίνει ότι "σβήνει" με αποτέλεσμα να μηδενίζεται η λύση, επομένως δεν ασχολούμαστε με αυτή:

$$\vec{r}^{(2)} = 0$$

- Η εξίσωση (3.21) περιγράφει την τρίτη διόρθωση. Φαίνεται να ακολουθεί παρόμοια μορφή με εκείνη της (3.17) χωρίς, όμως, τον όρο με το ηλεκτρικό πεδίο.

Προσπαθούμε να αντικαταστήσουμε την πρώτη τάξης εξίσωση στην τρίτης τάξης εξίσωση. Όμως αυτό είναι πιο εύκολο αν μεταβούμε στον αντίστροφο χώρο μέσω Fourier. Τότε σχέση (3.19):

$$(3.19) \xrightarrow{\mathcal{F}} \vec{r}(\omega) = \frac{-e\vec{E}(\omega)}{mD} \quad (3.22)$$

Συνεπώς, αντικαθιστούμε στην (3.21):

$$(3.21) \xrightarrow{(3.22)} D\vec{r}^{(3)} + \frac{be^3\vec{E}^3}{m^3|D|^3} = 0 \rightarrow \vec{r}^{(3)}(\omega) = \frac{be^3\vec{E}^3(\omega)}{m^3|D|^3} \frac{1}{D}$$

Αναζητούμε την επιδεκτικότητα τρίτης διόρθωσης σε σχέση με την πρώτη διόρθωση (3.10). Από τον ορισμό της επιδεκτικότητας στην σχέση πόλωσης (1.6) μπορούμε να κάνουμε την σύγκριση όρων και επομένως να συμπεράνουμε ότι δίνεται από την παρακάτω σχέση:

$$\chi^{(3)}(\omega) = \frac{Ne^2}{D} \left(\frac{e}{m}\right)^2 \frac{b}{|D|^3} = 10^{-8}\chi^{(1)}(\omega) = A\chi^{(1)}(\omega)$$

Συνεπώς η διηλεκτρική συνάρτηση τελικά προκύπτει:

$$\epsilon_r = \epsilon_\infty + \frac{A(\Delta\epsilon)\omega_0^2}{\omega_0^2 + 2i\omega\delta - \omega^2} \quad \delta = \frac{\gamma}{2} \quad (3.23)$$

## 4.2 FDTD φορμαλισμός

Οπότε μπορούμε να βρούμε την πόλωση (παρατηρούμε ότι εξαρτάται από την τρίτη δύναμη του ηλεκτρικού πεδίου, άρα έχουμε πόλωση Kerr):

$$\vec{P}(t) = \epsilon_0\chi_e^{(3)}(t) * \vec{E}^3(t) \quad (3.24)$$

Στην συνέχεια βρίσκουμε το ρεύμα πόλωσης, όπως ακριβώς κάναμε και στα γραμμικά Lorentz υλικά. Τα μόνα που θα αλλάξουν είναι ο παράγοντας μη γραμμικότητας A και το πώς θα αντιμετωπίσουμε το ηλεκτρικό πεδίο που τώρα έχει εξάρτηση τρίτης δύναμης. Ωστόσο πρώτα πρέπει να κάνουμε μετασχηματισμό Fourier στην παραπάνω σχέση. Προηγείται, όμως, η παράγωγος ως προς τον χρόνο, η οποία δρώντας στο ηλεκτρικό πεδίο αφήνει  $E^2$ . Οπότε ακολουθούμε την εξής διαδικασία:

$$\chi_e(t) * E^2(t) \leftrightarrow \chi(\omega)\tilde{E}^2(\omega)$$

Το ρεύμα πόλωσης, λοιπόν, το αντιμετωπίζουμε ως εξής:

$$\vec{j}_p = \epsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \left( \chi_e^{NL}(t)\vec{E}^2(t) \right) \xrightarrow{\mathcal{F}\{x(t)\}} \vec{j}_p = \epsilon_0 i\omega \chi^{NL}(\omega) \mathcal{F}\{\vec{E}^2(t)\}$$

Προφανώς εδώ ο μη γραμμικός όρος της επιδεκτικότητας αφορά την  $\chi^{\text{NL}}(\omega) = \chi^{(3)}(\omega)$ . Συνεπώς, τελικά καλατήγουμε στο ρεύμα πόλωσης γραμμένο στον χώρο Fourier:

$$\vec{j}_p = \epsilon_0 A \Delta \epsilon \omega_0^2 \left( \frac{i\omega}{\omega_0^2 + 2i\omega\delta - \omega^2} \right) \mathcal{F}\{\vec{E}^2(t)\}$$

Όπως και στα απλά υλικά Lorentz, πολλαπλασιάζουμε τον παρονομαστή του δεξιού μέλους και τα δύο μέλη, οπότε εφαρμόζοντας ταυτόχρονα τον αντίστροφο μετασχηματισμό Fourier:

$$\begin{aligned} \omega_0^2 \vec{j} + 2\delta \frac{\partial \vec{j}}{\partial t} + \frac{\partial^2 \vec{j}}{\partial t^2} &= \epsilon_0 A \Delta \epsilon \omega_0^2 \frac{\partial}{\partial t} \left( \vec{E}(t) \right)^2 \\ \omega_0^2 \vec{j} + 2\delta \frac{\partial \vec{j}}{\partial t} + \frac{\partial^2 \vec{j}}{\partial t^2} &= \epsilon_0 A \Delta \epsilon \omega_0^2 \vec{E}(t) \frac{\partial}{\partial t} \vec{E}(t) \end{aligned} \quad (3.25)$$

Όπως και στα υλικά Lorentz, είναι  $|\vec{E}| = E_z = E$ . Η ADE που μόλις γράψαμε μετατρέπεται σε πεπερασμένες διαφορές με τον παρακάτω τρόπο:

$$\omega_0^2 J^n + 2\delta \frac{J^{n+1} - J^{n-1}}{2dt} + \frac{J^{n+1} - 2J^n + J^{n-1}}{(dt)^2} = 2\epsilon_0 A \Delta \epsilon \omega_0^2 E^n \left( \frac{E^{n+1} - E^{n-1}}{2dt} \right)$$

Λύνουμε ως προς  $J^{n+1}$  και προκύπτει:

$$J^{n+1} = \alpha J^n + \xi J^{n-1} + \frac{A\gamma}{dt} E^n (E^{n+1} - E^{n-1}) \quad (3.26)$$

με

$$\alpha = \frac{2 - \omega_0^2 (dt)^2}{1 + \delta dt} \quad \xi = -\frac{1 - \delta dt}{1 + \delta dt} \quad \gamma = \frac{\epsilon_0 \Delta \epsilon \omega_0^2 (dt)^2}{1 + \delta dt}$$

Λύνουμε, λοιπόν, την ( 1.13) με την εισαγωγή του ενδιάμεσου βήματος, όπως ακριβώς έγινε και στα απλά υλικά Lorentz, οπότε προκύπτει η ίδια σχέση:

$$\nabla \times H^{n+\frac{1}{2}} = \epsilon_0 \epsilon_\infty \left( \frac{E^{n+1} - E^{n-1}}{dt} \right) + \left( \frac{J^{n+1} + J^n}{2} \right) \quad (3.27)$$

Λύνοντας την (3.27) ως προς  $E^{n+1}$ :

$$E^{n+1} = c_1 E^{n-1} + c_2 E^n + c_3 \left( \nabla \times H^{n+\frac{1}{2}} - \frac{1}{2}(1+a)J^n - \frac{1}{2}\xi J^{n-1} \right) \quad (3.28)$$

με

$$c_1 = \frac{\gamma}{4\epsilon_0\epsilon_\infty + \frac{\gamma}{4}} \quad c_2 = \frac{\epsilon_0\epsilon_\infty}{\epsilon_0\epsilon_\infty + \frac{\gamma}{4}} \quad c_3 = \frac{dt}{4\epsilon_0\epsilon_\infty + \frac{\gamma}{4}}$$

Επομένως, στον κώδικα για την προσομοίωση το μόνο που αλλάζουμε είναι η σχέση που αναφέρεται στην ανανέωση του ρεύματος (3.26), οπότε:

```
%constants
a=(2-dt.*2.*omega_0.^2)./(1+dt.*delta);
xi= -(1 - dt.*delta)./(1 + dt.*delta);
gamma= eps0 .* dt.^2 .*omega_0.^2 .* (eps0-epsinf)./(1 + dt.*delta);

c4=1./((2.*eps0.*epsinf)+(gamma./2));
c3=2.*dt.*c4;
c2=2.*eps0.*epsinf.*c4;
c1=gamma./2.*c4;

%Main part

for n=1:tstop

    JJ = zeros(1,kend);
    JJ = JJ + (1+a)*jx + xi*jx_m;
    % for vacuum media
    ex_p(2:kstart-1) = ex(2:kstart-1) - dt/(dx*eps0*mu0) .* (hy(2:kstart-1)-hy(1:kstart-2));
    % for Lorentz media
    ex_p(kstart-1:kstop) = c1.*ex_m(kstart-1:kstop) + c2.*ex(kstart-1:kstop) +c3.* (-1.0/(mu0*dx) .* (hy(kstart-1:kstop)-hy(kstart-2:kstop-1)) -0.5*JJ(kstart-1:kstop) );
    % Source
    pulser=exp(-.5*((n*dt-t0)/spread).^2).*sin(2*pi*freq*n*dt);
    ex_p(ksource)=ex_p(ksource)+pulser;

    jx_p(2:kend) = a*jx(2:kend) + xi*jx_m(2:kend) + A.*gamma.*ex(2:kend) .* (ex_p(2:kend)-ex_m(2:kend))/(dt);

    jx_m(2:kend) = jx(2:kend);
    jx(2:kend) = jx_p(2:kend);

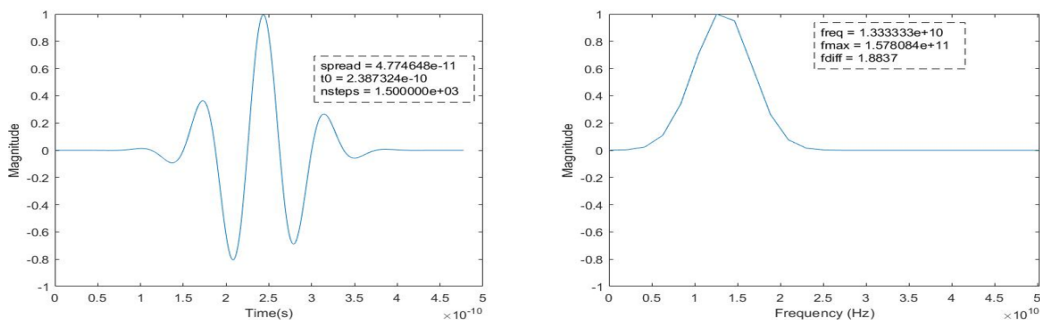
    ex_m = ex;
    ex = ex_p;
```

Σχήμα 3.22: Κώδικας FDTD σε Matlab για διασπορά σε μη γραμμικό μέσο lorentz

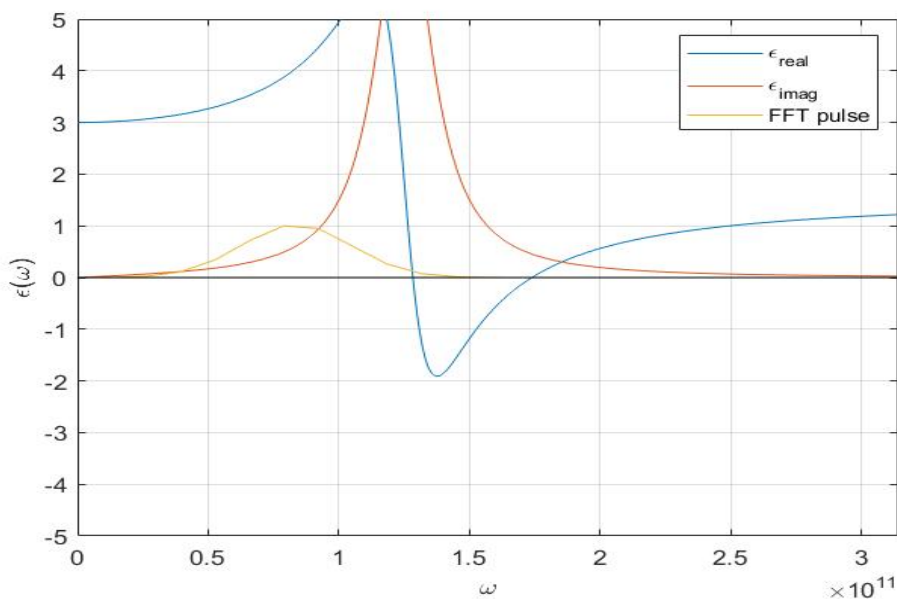
### 4.3 Αποτελέσματα προσομοιώσεων

Η προσομοίωση για το μη γραμμικό υλικό Lorentz μπορεί να γίνει με τον παλμό που είχαμε εξετάσει στα υλικά Lorentz για  $\omega < \omega_0$ . Μπορούμε να αξιοποιήσουμε το πλεονέκτημα αυτού του παλμού να παρουσιάζει διασπορά με θετικό πραγματικό μέρος διηλεκτρικής σταθεράς και να προσπαθήσουμε με την προσθήκη της μη γραμμικότητας να δημιουργήσουμε μία κατάσταση κατά την οποία να αναιρείται η διασπορά κατά τη διάδοση στο υλικό. Αυτό το αντικείμενο αποτελεί λύση της διαφορικής εξίσωσης που είδαμε στη θεωρία (3.27) και καλείται σολιτόνιο. Πρόκειται για εντοπισμένη μορφή που διαδίδεται στον χώρο αναλώιωτα. Ενώ θα έπρεπε,

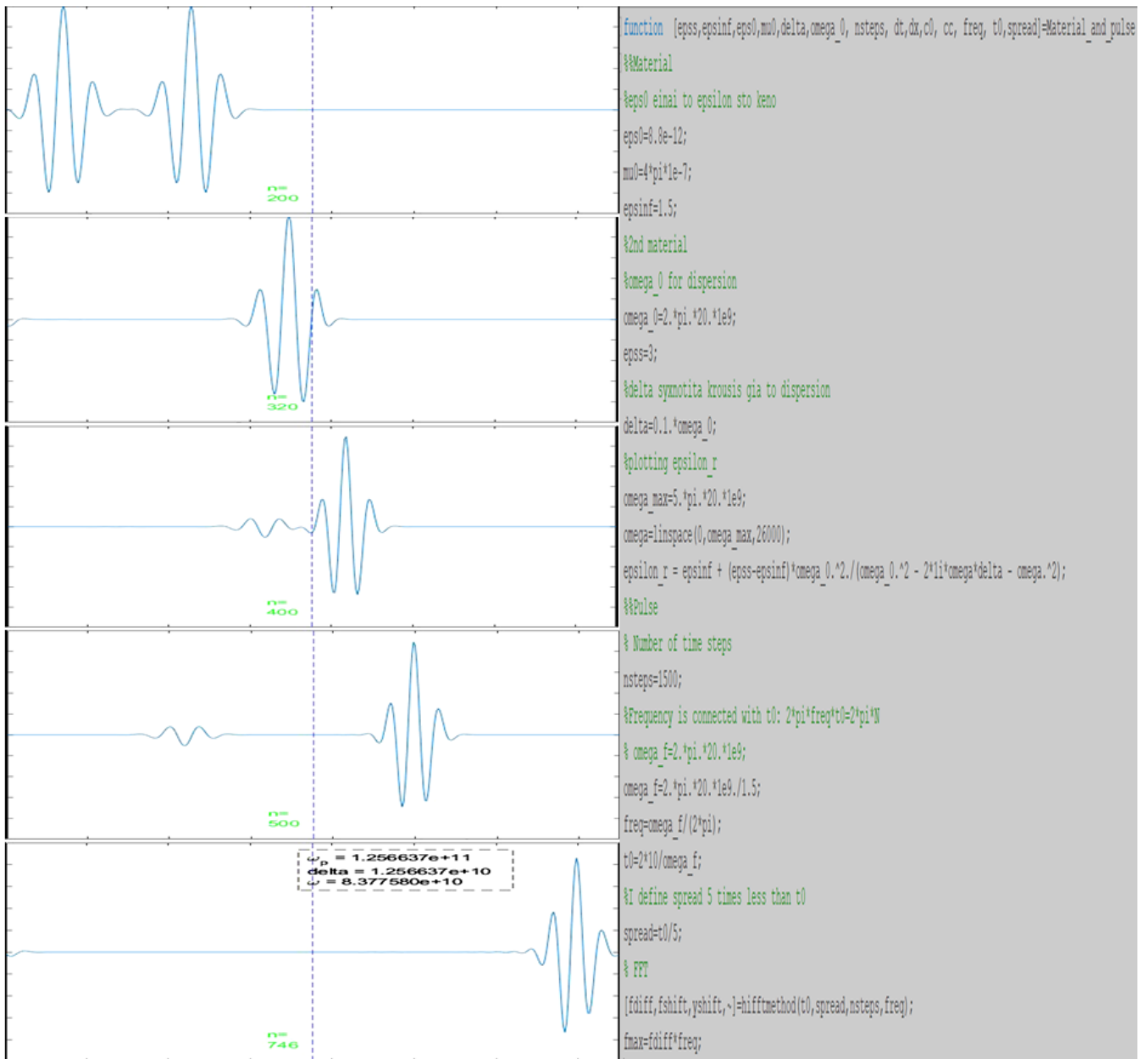
δηλαδή, με την διασπορά η κάθε συχνότητα να έχει συγκεκριμένη ταχύτητα, η μη γραμμικότητα δίνει την κατάλληλη εξάρτηση του πλάτους του με την ταχύτητα, προκειμένου να "ακολουθήσουν" όλες οι συχνότητες του παλμού τελικά την ίδια ταχύτητα!



**Σχήμα 3.23:** Κυματοπακέτο τύπου 1 συχνότητας της τάξεως των GHz με  $\omega < \omega_0$  σε μη γραμμικό μέσο με διασπορά Lorentz με απορροφητικές συννοριακές συνθήκες στο πεδίο του χρόνου και των συχνοτήτων αντίστοιχα.



**Σχήμα 3.24:** Φάσμα συχνοτήτων κυματοπακέτου τύπου 1 με  $\omega < \omega_0$  για μη γραμμικά υλικά Lorentz

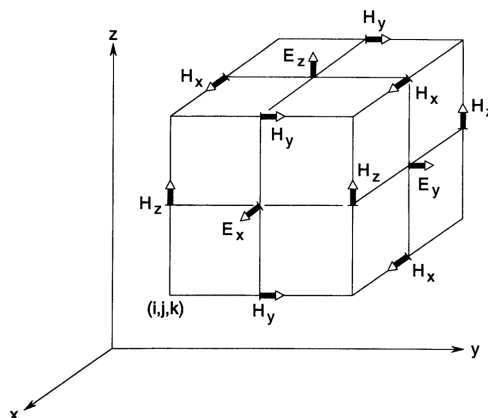


Σχήμα 3.25: Κυματοπακέτο τύπου 1 τάξεως GHz με  $\omega < \omega_0$  σε μη γραμμικό Lorentz

## Κεφάλαιο 4

# Δισδιάστατη προσομοίωση (2D) με την χρήση της FDTD

### 1 Φορμαλισμός πεπερασμένων διαφορών (FDTD) σε 2D



**Σχήμα 4.1:** Διάγραμμα  $(x,t)$  που δείχνει ένα παράδειγμα διάδοσης κύματος με τη χρήση του ενδιάμεσου βήματος στον χώρο και στον χρόνο σε 3D. Κάθε συνιστώσα ενός πεδίου περικυκλώνεται από 4 συνιστώσες του άλλου πεδίου [6].

Σε δύο διαστάσεις είχαμε μελετήσει πώς διαμορφώνονται οι εξισώσεις που προκύπτουν από Faraday και Ampère. Τα ηλεκτρικά και τα μαγνητικά πεδία, αν  $r = \{x, y, z\}$  μπορούμε να τα συμβολίσουμε με

$$\{E_r, H_r\} = u_r = u_r(x_i, y_j, t_n) = u_r(i\Delta x, j\Delta y, n\Delta t)$$

διότι με αυτόν τον τρόπο μπορούμε να εκφραστούμε στις δύο διαστάσεις. Οι διαφορές με την μία διάσταση φαίνονται και στο σχήμα (4.1), όπου η κάθε συνιστώσα πε-

δίου περικυκλώνεται από άλλες 4 για τις 3 διαστάσεις. Όμως εδώ, όπως είχαμε δείξει στο πρώτο κεφάλαιο για την περίπτωση των 2 διαστάσεων πρέπει  $\frac{\partial u_i}{\partial z} = 0$ . Επειδή ταυτόχρονα λειτουργούμε με εγκάρσια μαγνητική πόλωση κύματος το σχήμα (4.1) αντιπροσωπεύει τις 2 διαστάσεις εφόσον μηδενίσουμε τις συνιστώσες μαγνητικού πεδίου στον z άξονα:  $H_z = 0$ . Δείξαμε, λοιπόν ότι ισχύουν οι εξισώσεις Ampère (1.20), και και Faraday (1.18),(1.19).

## 2 Διάδοση στο κενό

Για το κενό απλοποιούμε τις εξισώσεις Ampère (1.20), και Faraday (1.18),(1.19), διότι είναι  $\epsilon = \epsilon_0$ ,  $\mu = \mu_0$ ,  $\sigma = 0$ . Τότε:

$$\begin{aligned}\frac{\partial E_z}{\partial t} &= \frac{1}{\epsilon_0} \left( \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \\ \frac{\partial H_x}{\partial t} &= -\frac{1}{\mu_0} \frac{\partial E_z}{\partial y} \\ \frac{\partial H_y}{\partial t} &= \frac{1}{\mu_0} \frac{\partial E_z}{\partial x}\end{aligned}$$

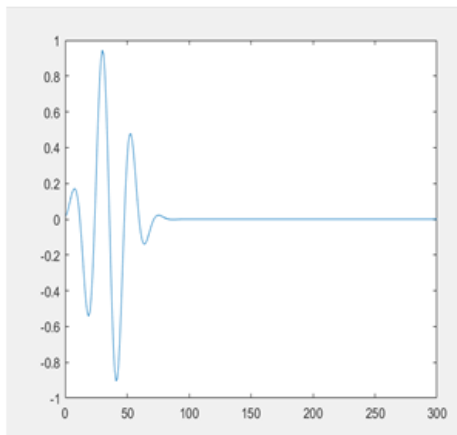
Θεωρούμε κυβικό πλέγμα, δηλαδή θεωρούμε πως είναι  $\Delta x = \Delta y$ . Αυτό μας επιτρέπει να βγάλουμε κοινό παράγοντα την ποσότητα αυτή από τους όρους των παραγώγων ως προς τη θέση. Επομένως, ο FDTD φορμαλισμός των παραπάνω εξισώσεων κάνοντας ταυτόχρονα και αλλαγή μεταβλητής του ηλεκτρικού πεδίου ( $E \rightarrow \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} E$ ) [6] δίνει το σύστημα:

$$\begin{aligned}E_z^{n+\frac{1}{2}}(i - \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}) &= E_z^{n-\frac{1}{2}}(i - \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}) \\ + cc \left( H_y^n(i, j + \frac{1}{2}) - H_y^n(i - 1, j + \frac{1}{2}) - H_x^n(i - \frac{1}{2}, j + 1) + H_x^n(i - \frac{1}{2}, j) \right)\end{aligned}$$

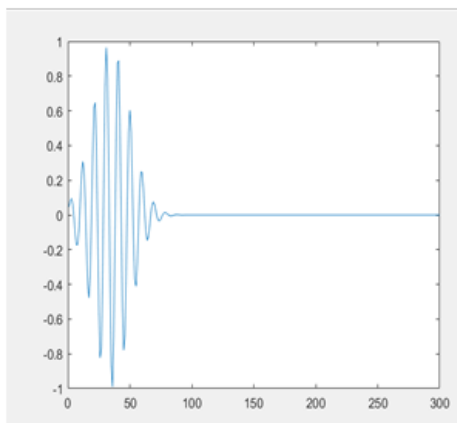
$$\begin{aligned}H_x^{n+1}(i - \frac{1}{2}, j + 1) &= H_x^n(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}) \\ + cc \left( E_z^{n+\frac{1}{2}}(i - \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}) - E_z^{n+\frac{1}{2}}(i - \frac{1}{2}, j + \frac{3}{2}) \right)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}H_y^{n+1}(i, j + \frac{1}{2}) &= H_y^n(i, j + \frac{1}{2}) \\ + cc \left( E_z^{n+\frac{1}{2}}(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}) - E_z^{n+\frac{1}{2}}(i - \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}) \right)\end{aligned}$$





Κυματοπακέτο  $N=2$  κανονικοποιημένης συχνότητας στον κενό χώρο χωρίς απορροφητικές συνοριακές συνθήκες στο πεδίο του χρόνου



Κυματοπακέτο  $N=5$  κανονικοποιημένης συχνότητας στον κενό χώρο χωρίς απορροφητικές συνοριακές συνθήκες στο πεδίο του χρόνου

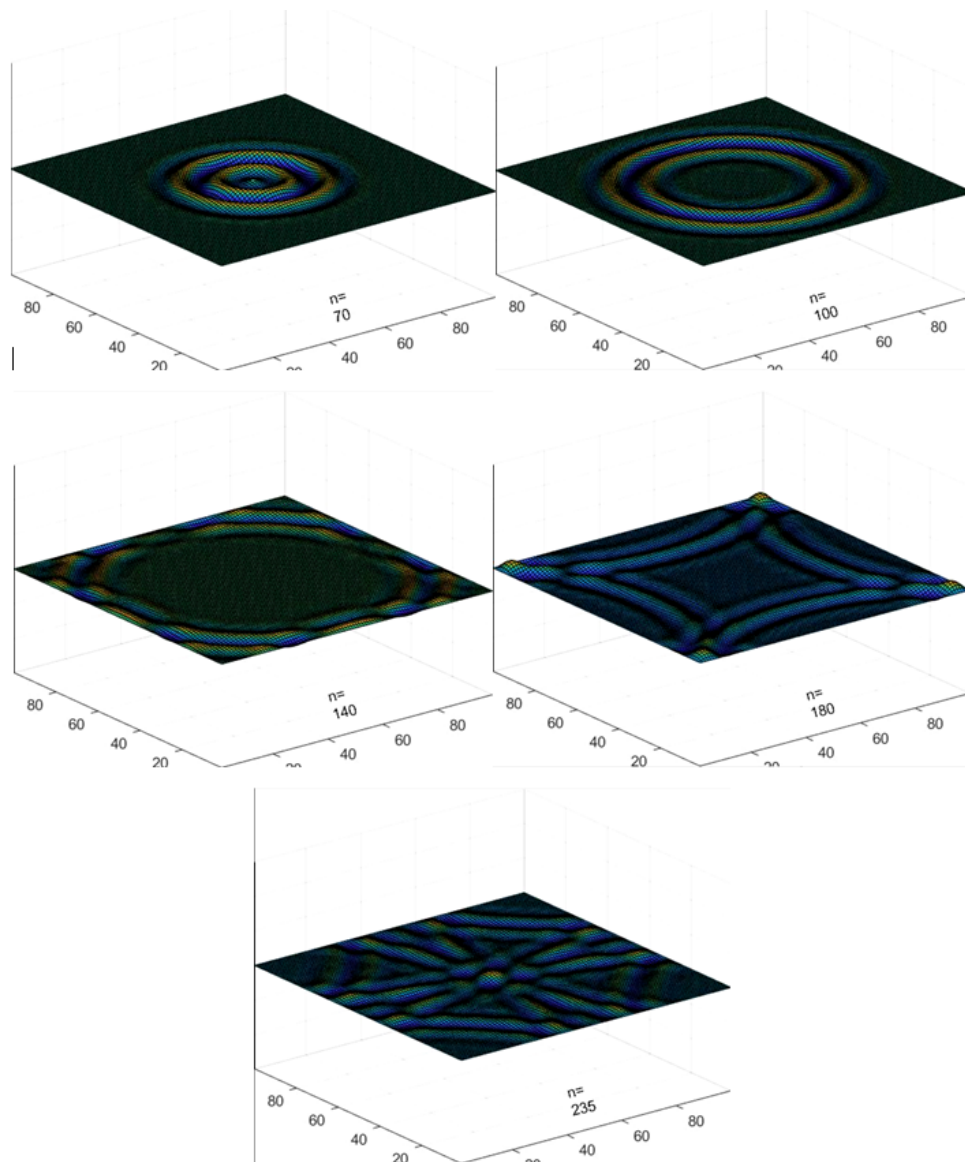
```
% This is a 1D FDTD simulation with pulse
% It displays a "movie" of the signal
% Size of the FDTD space
clear;
%i ends at ie
ie=100;
% Position of the source axis i
is=50;
%j ends at je
je=100;
% Position of the source axis j
js=50;
%i,j-space
% Number of time steps
nsteps=300;
%N number of circles
N=5;
% Gaussian pulse
t0=35;
spread=15;
%COMMENT FOR TESTING
Ts = 1;
T=nsteps;
fs = 1/Ts; % Sampling frequency
t = 1:Ts:T; % Time vector
freq_in=2*pi*N/T;
% Cell size and time stepping
%after fftshift: paratirw oti to >1.5 einai kalo
fmax=hifftmethod(t0,spread,N,nsteps);
% fmax=freq_in*fdiff;
% END OF COMMENT FOR TESTING

c0=3.e8;
lambdamin=c0/fmax;
ddx=lambdamin/10;
dt=ddx/(2*c0);

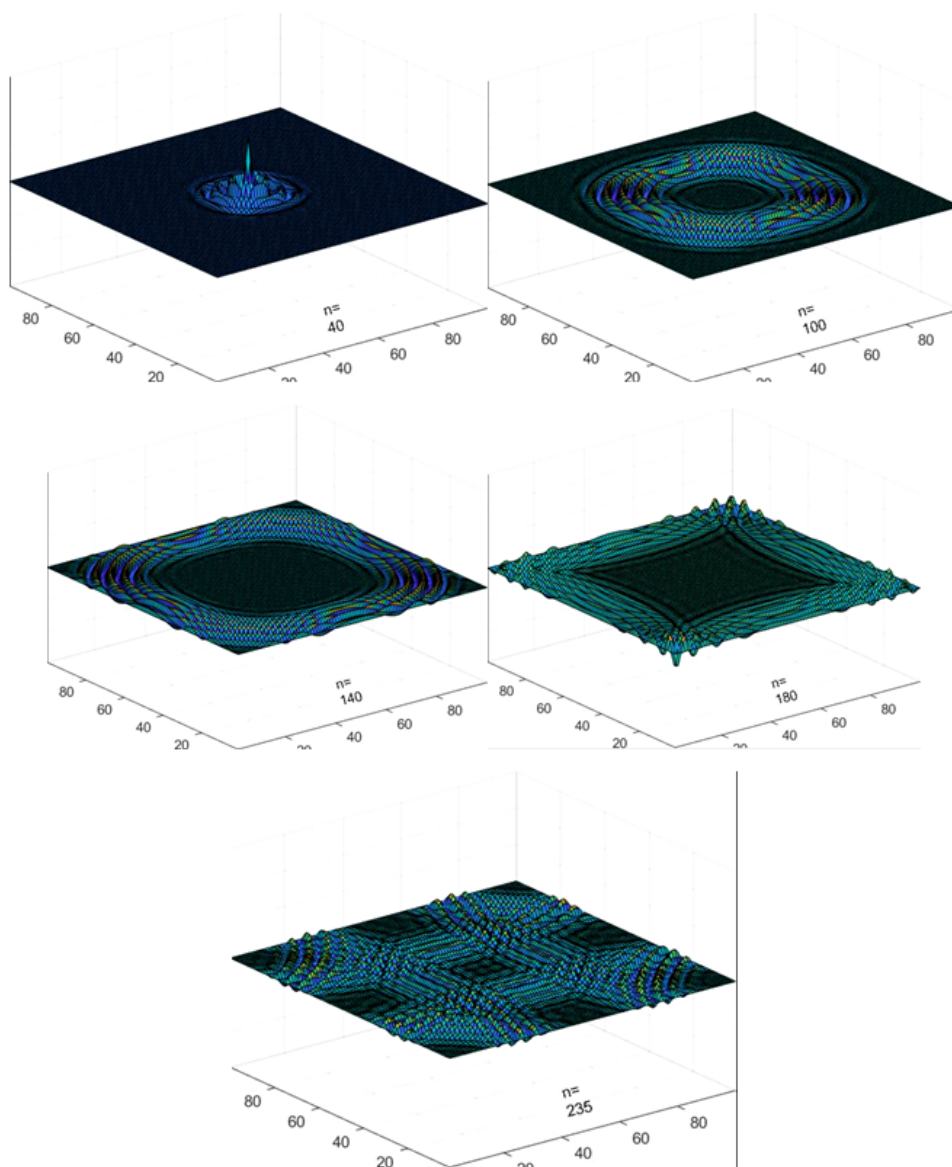
% Constants
cc=c0*dt/ddx;
epsilon=1;
sigma=0;
% Initialize vectors
ez=zeros(ie,je);
hx=zeros(ie,je);
hy=zeros(ie,je);
% Absorbing conditions initialisation
c1=(cc-1)/(cc+1);
c2= 2/(cc+1);
c3= cc^2/(2*(cc+1));

% Create and open the video object
vidObj = VideoWriter('2D_boundary_mur.avi');
open(vidObj);
for n=1:nsteps
% Source
pulsar=exp(-.5*((n-t0)/spread).^2)*sin(2*pi*freq_in*n);
ez(is,js)=ez(is,js)+pulsar;
% E field loop
for j=2:je-1
for i=2:ie-1
ez(i,j)=ez(i,j)+cc*(hy(i,j)-hy(i-1,j))-hx(i,j)+hx(i,j-1));
end
end
% H field loops
for j=1:je-1
for i=1:ie-1
hx(i,j)=hx(i,j)+cc*(ez(i,j)-ez(i,j+1));
end
end
for j=1:je-1
for i=1:ie-1
hy(i,j)=hy(i,j)+cc*(ez(i+1,j)-ez(i,j));
end
end
end
```

Σχήμα 4.2: Κώδικας χωρίς ΣΣ



**Σχήμα 4.3:** Προσομοίωση σε κυματοπακέτο τύπου I κανονικοποιημένης συχνότητας στον κενό χώρο στο πεδίο του χρόνου.



*Σχήμα 4.4:* Προσομοίωση σε κυματοπακέτο τύπου 2 κανονικοποιημένης συχνότητας στον κενό χώρο στο πεδίο του χρόνου.

### 3 Διάδοση στο κενό με συνοριακή συνθήκη Mur

#### 3.1 Enquist-Majda

Όπως γνωρίζουμε οι λύσεις των εξισώσεων Maxwell είναι κύματα. Επομένως, αν  $U$  το κάθε πεδίο, αυτά περιγράφονται από την κυματική εξίσωση [6]:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} - \frac{1}{c_0^2} \frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = 0 \equiv (D_x^2 + D_y^2 - \frac{1}{c_0^2} D_t^2)U = GU = 0$$

Οι Enquist και Majda παρατήρησαν ότι μπορούμε να ορίσουμε τους τελεστές, με τρόπο ώστε  $G = G^+ G^-$

$$G^\pm = D_x \pm \frac{D_t}{c_0} \sqrt{1 - s^2}$$

, με  $s = \frac{c_0 D_y}{D_t}$  προκειμένου η δράση τους να θυμίζει τελεστές ανάβασης και κατάβασης στην κβαντομηχανική, ωστόσο εδώ να δρουν στα όρια του πλέγματος και να μηδενίζουν το πεδίο σε αυτά:

$$G^+ U \Big|_{x=0} = 0 \qquad G^- U \Big|_{x=h} = 0$$

Προσεγγίζοντας κατά Taylor την ρίζα μέχρι και τον όρο 2ης τάξης προκύπτουν οι νέες μορφές των  $G^\pm$ . Αυτές τις εφαρμόζουμε στην αρχική κυματική εξίσωση και κάθε ένα από τα όρια του τετραγωνικού πλέγματος και προκύπτουν οι δ.ε:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x \partial t} - \frac{1}{c_0} \frac{\partial^2 U}{\partial t^2} + \frac{c_0}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} = 0 \qquad x = 0 \qquad (4.1)$$

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x \partial t} + \frac{1}{c_0} \frac{\partial^2 U}{\partial t^2} - \frac{c_0}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} = 0 \qquad x = h \qquad (4.2)$$

$$\frac{\partial^2 U}{\partial y \partial t} - \frac{1}{c_0} \frac{\partial^2 U}{\partial t^2} + \frac{c_0}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} = 0 \qquad y = 0 \qquad (4.3)$$

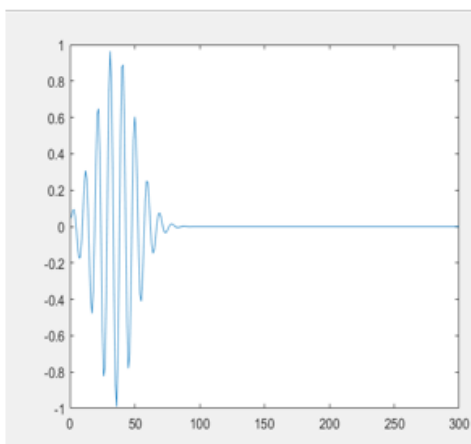
$$\frac{\partial^2 U}{\partial y \partial t} + \frac{1}{c_0} \frac{\partial^2 U}{\partial t^2} - \frac{c_0}{2} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} = 0 \qquad y = h \qquad (4.4)$$

### 3.2 Συνοριακή συνθήκη Mur

Προκειμένου ο ηλεκτρομαγνητικός παλμός να απορροφηθεί στα άκρα του υπολογιστικού πλέγματος χρειάζεται να εφαρμόσουμε μία συνοριακή συνθήκη στα άκρα. Ο Mur παρατήρησε ότι είναι εφικτό να χρησιμοποιήσουμε τις (4.1),(4.2),(4.3),(4.4) με τη μέθοδο της FDTD και να προκύψει η ανανεωμένη μορφή του πεδίου στα αντίστοιχα όρια της κάθε εξίσωσης. Λόγω έκτασης, παρατίθεται η λύση μόνο για  $x = 0$ , ενώ οι υπόλοιπες παρουσιάζονται εκτενώς στον κώδικα που παρατίθεται παρακάτω.

$$U|_{0,j}^{n+1} = -U|_{1,j}^{n-1} + \frac{cc-1}{cc+1} (U|_{1,j}^{n+1} + U|_{0,j}^{n-1}) + \frac{2}{cc+1} (U|_{0,j}^n + U|_{1,j}^n) + \frac{cc^2}{2(cc+1)} (U|_{1,j}^{n+1} - 2U|_{1,j}^{n+1} + U|_{1,j}^{n+1} + U|_{1,j}^{n+1} - 2U|_{1,j}^{n+1} + U|_{1,j}^{n+1})$$

με  $cc = \frac{\Delta t}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0} \Delta x} = c_0 \frac{\Delta t}{\Delta x} \stackrel{(1.33)}{=} \frac{1}{2}$



*Κυματοπακέτο N=5 κανονικοποιημένης συχνότητας στον κενό χώρο με απορροφητικές συνοριακές συνθήκες mur στο πεδίο του χρόνου*

```
c0=3.e8;
lambdamin=c0/fmax;
ddx=lambdamin/10;
dt=ddx/(2*c0);

% Constants
cc=c0*dt/ddx;
epsilon=1;
sigma=0;
% Initialize vectors
ez=zeros(ie,je);
hx=zeros(ie,je);
hy=zeros(ie,je);
% Absorbing conditions initialisation
c1=(cc-1)/(cc+1);
c2= 2/(cc+1);
c3= cc^2/(2*(cc+1));
prev_xfor=zeros(1,je);
prev_x_minus_1for=zeros(1,je);
prev_yfor=zeros(ie,1);
prev_y_minus_1for=zeros(ie,1);
prev_xrev=zeros(1,je);
prev_x_minus_1rev=zeros(1,je);
prev_yrev=zeros(ie,1);
prev_y_minus_1rev=zeros(ie,1);
```

```

% Absorbing Boundary Conditions MUR
%Mur's abc conditions obtained from Mur's difference equation for
%forward boundary
if n>=ie-2-is
ez(ie-2,3:1:je-3)=c1*(ez(ie-3,3:1:je-3)+prev_prev_xfor(1,3:1:je-3))-
prev_prev_x_minus_lfor(1,3:1:je-3)+c2*(prev_xfor(1,3:1:je-
3)+prev_x_minus_lfor(1,3:1:je-3))+c3*(prev_x_minus_lfor(1,2:1:je-4)-
2*prev_x_minus_lfor(1,3:1:je-3)+prev_x_minus_lfor(1,4:1:je-
2))+prev_xfor(1,2:1:je-4)-2*prev_xfor(1,3:1:je-3)+prev_xfor(1,4:1:je-2));
end
%Storage vectors for boundary and boundary-1 values of previous and its
%previous time steps updated at forward boundary
prev_prev_xfor=prev_xfor;
prev_prev_x_minus_lfor=prev_x_minus_lfor;
prev_xfor(1,1:1:je)=ez(ie-2,1:1:je);
prev_x_minus_lfor(1,1:1:je)=ez(ie-3,1:1:je);

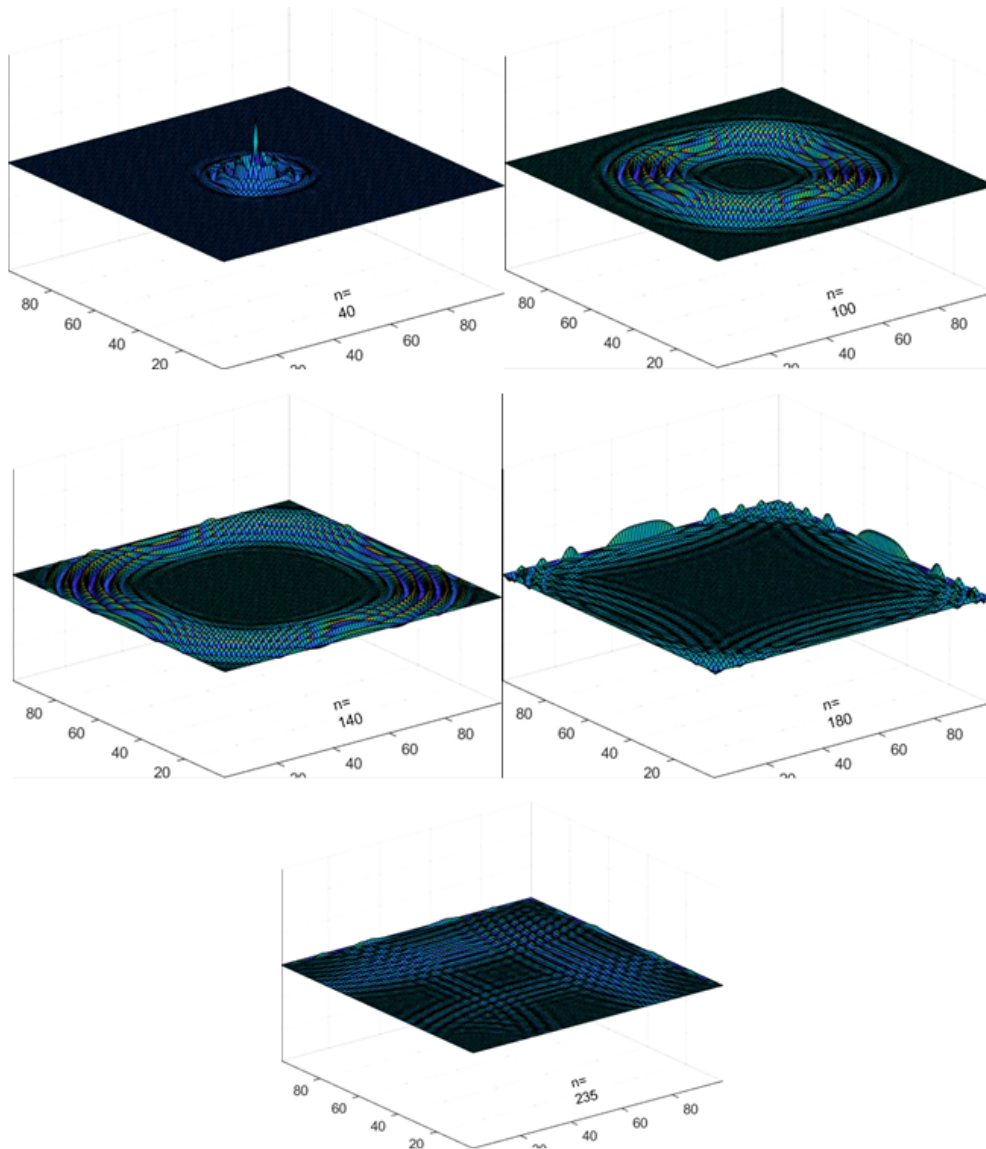
%Mur's abc conditions obtained from Mur's difference equation for
%backward boundary
if n>=is-3
ez(2,3:1:je-3)= -prev_prev_xrev(1,3:1:je-3)+c1*(ez(3,3:1:je-
3)+prev_prev_x_minus_lrev(1,3:1:je-3))+c2*(prev_xrev(1,3:1:je-
3)+prev_x_minus_lrev(1,3:1:je-3))+c3*(prev_x_minus_lrev(1,2:1:je-4)-
2*prev_x_minus_lrev(1,3:1:je-3)+prev_x_minus_lrev(1,4:1:je-
2))+prev_xrev(1,2:1:je-4)-2*prev_xrev(1,3:1:je-3)+prev_xrev(1,4:1:je-2));
end
%Storage vectors for boundary and boundary-1 values of previous and its
%previous time steps updated at backward boundary
prev_prev_xrev=prev_xrev;
prev_prev_x_minus_lrev=prev_x_minus_lrev;
prev_xrev(1,1:1:je)=ez(3,1:1:je);
prev_x_minus_lrev(1,1:1:je)=ez(2,1:1:je);

%Mur's abc conditions obtained from Mur's difference equation for
%upward boundary
if n>=je-2-js
ez(3:1:ie-3,ie-2)=c1*(ez(3:1:ie-3,je-3)+prev_prev_yfor(3:1:ie-3,1))-
prev_prev_y_minus_lfor(3:1:ie-3,1)+c2*(prev_yfor(3:1:ie-
3,1)+prev_y_minus_lfor(3:1:ie-3,1))+c3*(prev_y_minus_lfor(2:1:ie-4,1)-
2*prev_y_minus_lfor(3:1:ie-3,1)+prev_y_minus_lfor(4:1:ie-
2,1))+prev_yfor(2:1:ie-4,1)-2*prev_yfor(3:1:ie-3,1)+prev_yfor(4:1:ie-2,1));
end
%Storage vectors for boundary and boundary-1 values of previous and its
%previous time steps updated at upward boundary
prev_prev_yfor=prev_yfor;
prev_prev_y_minus_lfor=prev_y_minus_lfor;
prev_yfor(1:1:ie,1)=ez(1:1:ie,je-2);
prev_y_minus_lfor(1:1:ie,1)=ez(1:1:ie,je-3);

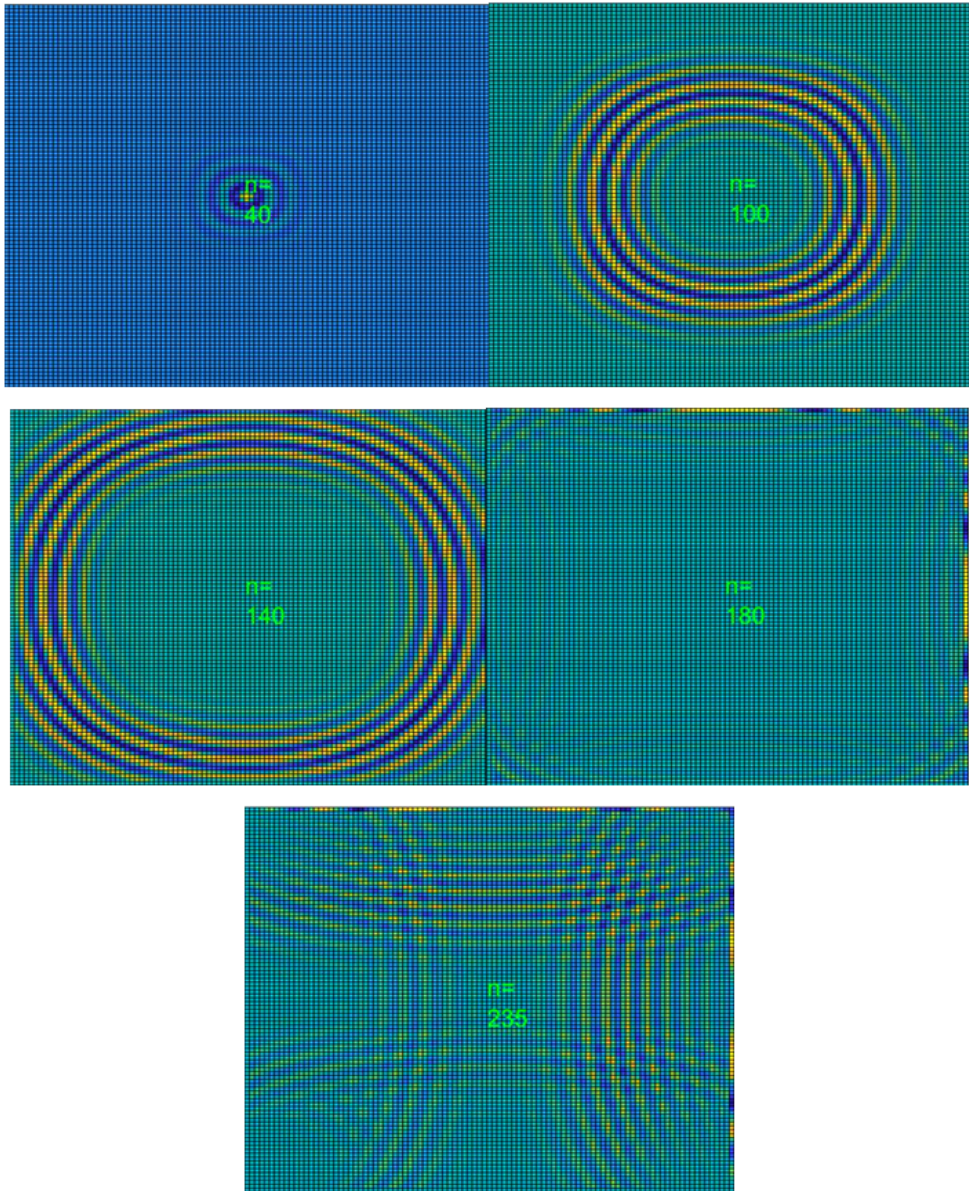
%Mur's abc conditions obtained from Mur's difference equation for
%downward boundary
if n>=js-3
ez(3:1:ie-3,2)=-prev_prev_yrev(3:1:ie-3,1)+c1*(ez(3:1:ie-
3,3)+prev_prev_y_minus_lrev(3:1:ie-3,1))+c2*(prev_yrev(3:1:ie-
3,1)+prev_y_minus_lrev(3:1:ie-3,1))+c3*(prev_y_minus_lrev(2:1:ie-4,1)-
2*prev_y_minus_lrev(3:1:ie-3,1)+prev_y_minus_lrev(4:1:ie-
2,1))+prev_yrev(2:1:ie-4,1)-2*prev_yrev(3:1:ie-3,1)+prev_yrev(4:1:ie-2,1));
end
%Storage vectors for boundary and boundary-1 values of previous and its
%previous time steps updated at downward boundary
prev_prev_yrev=prev_yrev;
prev_prev_y_minus_lrev=prev_y_minus_lrev;
prev_yrev(1:1:ie,1)=ez(1:1:ie,3);
prev_y_minus_lrev(1:1:ie,1)=ez(1:1:ie,2);

%Mirroring of corner values taking the fact that corners are reached by the
fields from the previous corners
%in two time steps as S=1/sqrt(2) viz. sqrt(2)*delta(distance between two
corners) is reached in 2 time steps
ez(2,2)=prev_prev_xrev(3);
ez(2,je-2)=prev_prev_xrev(je-3);
ez(ie-2,2)=prev_prev_x_minus_lfor(3);
ez(ie-2,je-2)=prev_prev_x_minus_lfor(je-3);

```



*Σχήμα 4.5: Προσομοίωση σε κυματοπακέτο τύπου 2 κανονικοποιημένης συχνότητας στον κενό χώρο με απορροφητικές συνοριακές συνθήκες Mur στο πεδίο του χρόνου.*



*Σχήμα 4.6: Προσομοίωση σε κυματοπακέτο τύπου 2 κανονικοποιημένης συχνότητας στον κενό χώρο με απορροφητικές συνοριακές συνθήκες  $\mu_{\text{in}}$  στο πεδίο του χρόνου-topdown view.*



## Κεφάλαιο 5

### Συμπεράσματα

Οι εξισώσεις του Maxwell όπως έχουμε δει είναι δυνατό να τις επιλύσουμε μέσω της μεθόδου FDTD. Ο αλγόριθμος που δημιουργείται για κάθε είδος υλικού που αντιμετωπίζουμε κάθε φορά μας δίνει ακριβείς προσομοιώσεις εφόσον καθορίσουμε αρχικά τα κατάλληλα χρονικά και χωρικά βήματα. Μπορούμε να εξάγουμε τις εξής παρατηρήσεις, λοιπόν, για τα διάφορα υλικά τα οποία αντιμετωπίσαμε.

Αρχικά αντιμετωπίσαμε την διάδοση διαφόρων ειδών παλμών στο κενό, σε διηλεκτρικά μέσα και σε διηλεκτρικά μέσα με απώλειες. Προέκυψε ότι όσο μεγαλύτερη η διηλεκτρική σταθερά τόσο αργά διαδίδεται το κύμα, ενώ αν ταυτόχρονα εμφανίζονται ρεύματα αγωγιμότητας τότε το κύμα αυτό απορροφάται, με συνέπεια να έχουμε απώλειες.

Η μεταβολή του πεδίου σε διηλεκτρικά μέσα των οποίων η διηλεκτρική συνάρτηση εξαρτάται από την συχνότητα του προσπίπτοντος κύματος είναι τέτοια ώστε να εμφανίζεται το φαινόμενο της χρωματικής διασποράς. Στα υλικά Debye, Drude, Lorentz που μελετήθηκαν υπάρχει διαφορετική συμπεριφορά για τις διάφορες συχνότητες του προσπίπτοντος κύματος όσον αφορά την διασπορά.

Στα υλικά Lorentz όμως εξετάστηκε και η περίπτωση προσθήκης ενός μη γραμμικού όρου στην εξίσωση που περιγράφει την δυναμική τους, ο οποίος εν τέλει δημιουργεί μία μορφή λύσης η οποία φαίνεται να είναι αναλοιώτη στον χρόνο, δηλαδή ένα σολιτόνιο.

Τέλος, εξετάζουμε την μέθοδο FDTD σε δισδιάστατο τετραγωνικό πλέγμα και συγκεκριμένα διαπιστώσαμε την σημασία των συνοριακών συνθηκών Mur ώστε να απορροφηθεί το κύμα που διαδίδεται στον υπολογιστικό χώρο.

# Βιβλιογραφία

- [1] *One-Dimensional Simulation with the FDTD Method*, chapter 1, pages 1–19. John Wiley & Sons, Ltd, 2013.
- [2] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin. *Solid State Physics*. Holt-Saunders, 1976.
- [3] G. P. Berman and F. M. Izrailev. The fermi–pasta–ulam problem: Fifty years of progress. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 15(1):015104, mar 2005.
- [4] Robert W. Boyd. *Nonlinear Optics, Third Edition*. Academic Press, Inc., USA, 3rd edition, 2008.
- [5] Debye. Polar Molecules polar liquids under the influence of high frequencies, 1929.
- [6] Allen Taflove and S. Hagness. *Computational electrodynamics: the finite-difference time-domain method. 2nd ed*, volume 67–106. 06 2000.
- [7] N. J. Zabusky and M. D. Kruskal. Interaction of "solitons" in a collisionless plasma and the recurrence of initial states. *Phys. Rev. Lett.*, 15:240–243, Aug 1965.
- [8] Radim Zajicek and Jan Vrba. *Broadband Complex Permittivity Determination for Biomedical Applications*. 04 2010.

# Παράρτημα Α΄

## Μετασχηματισμός Fourier

► **Ο συνεχής MX Fourier συνεχούς χρόνου**

Ο ευθύς μετασχηματισμός Fourier ενός συνεχούς σήματος  $x(t)$ , τον οποίο θα συμβολίζουμε με  $\mathcal{F}\{x(t)\}$ , δίνεται ως εξής:

$$\tilde{x}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} x(t)e^{-i\omega t} dt$$

και επειδή μεταβαίνουμε από το πεδίο του χρόνου στο πεδίο της συχνότητας θα γράφουμε:  $x(t) \rightarrow \tilde{x}(\omega)$ .

Μία πολύ σημαντική ιδιότητα που προκύπτει είναι η παρακάτω. Αν έχουμε ένα δεύτερο σήμα  $y(t) = \frac{d^n x(t)}{dt^n}$  τότε αν  $x(t) \rightarrow \tilde{x}(\omega)$  θα είναι  $y(t) \rightarrow \tilde{y}(\omega) = (i\omega)^n \tilde{x}(\omega)$ . Συνεπώς:

$$\frac{d^n}{dt^n} \leftrightarrow (i\omega)^n$$

Ο αντίστροφος μετασχηματισμός Fourier ενός σήματος στο πεδίο των συχνοτήτων συμβολίζεται με  $\mathcal{F}^{-1}\{x(t)\}$  και δίνεται ως:

$$x(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{x}(\omega)e^{i\omega t} d\omega \quad \tilde{x}(\omega) \rightarrow x(t)$$

Αρκετά μεγάλης σημασίας είναι και η ιδιότητα της συνέλιξης δύο σημάτων  $x(t)$  και  $y(t)$ , η οποία ορίζεται ως το ολοκλήρωμα:

$$x(t) * y(t) = \int_{-\infty}^{\infty} x(\tau)y(\tau - t) d\tau$$

. Η συνέλιξη είναι πολύ πιο χρήσιμη στον χώρο των συχνοτήτων, διότι τότε τα δύο σήματα δημιουργούν ένα νέο μέσω ενός απλού γινομένου μεταξύ τους:

$$x(t) * y(t) \leftrightarrow \tilde{x}(\omega)\tilde{y}(\omega)$$

Στις περιπτώσεις της παρούσας εργασίας τα δύο αυτά σήματα συνήθως αντιπροσωπεύουν ποσότητες εξαρτημένες από την συχνότητα, όπως η διηλεκτρική σταθερά, το ηλεκτρικό πεδίο και το ρεύμα πόλωσης.

► **Ο διακριτός MX Fourier διακριτού χρόνου**

Ο μετασχηματισμός αυτός (DFT) διαφέρει σε σχέση με τον συνεχή MX στο γεγονός ότι θεωρούμε πεπερασμένη ακολουθία  $x(n)$  μήκους , δηλαδή αποτελείται από στοιχεία (χρονικά βήματα) και ταυτόχρονα  $N$  διακριτές συχνότητες.

$$\tilde{x} \left( \Omega \equiv k \frac{2\pi}{N} \right) = \sum_{n=0}^{N-1} x(n) e^{-ik \frac{2\pi}{N} n}$$

$$x(n) = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \tilde{x}(k) e^{in \frac{2\pi}{N} k}$$

Το παραπάνω χρησιμεύει στην παρούσα εργασία στην εύρεση στο πεδίο των συχνοτήτων του φάσματος του παλμού που διαθέτουμε. Πιο συγκεκριμένα, γίνεται εφαρμογή μίας γρήγορης και αποτελεσματικής μορφής της DFT, η οποία ονομάζεται FFT (fast fourier transform). Η FFT μειώνει την πολυπλοκότητα των σημείων που χρειάζεται να δημιουργηθούν κατά τον υπολογισμό των όρων από όρους τάξης  $N^2$  σε  $N \log N$  και για αυτό υπολογιστικά είναι πιο γρήγορη.

# Παράρτημα Β΄

## Προγράμματα για τις υπολογιστικές προσομοιώσεις σε περιβάλλον Matlab

### 1 hifftmethod

Εδώ θα αναφερθεί περιγραφή στο εξωτερικό πρόγραμμα που δημιούργησα προκειμένου να βρίσκει αυτόματα την μέγιστη συχνότητα του εκάστοτε παλμού.

Το πρόγραμμα hifftmethod είναι αποτέλεσμα της προσπάθειας εύρεσης ενός αυτοματοποιημένου τρόπου για τον προσδιορισμό της μέγιστης συχνότητας  $f_{max}$  στο φάσμα του παλμού που μας δίνεται στο πεδίο των συχνοτήτων. Χρησιμοποιείται η λογική της FDTD για την εύρεση των παραγώγων που χρειάζονται για την εύρεση του σημείου καμπής κάθε παλμού, άρα και ο προσδιορισμός του ποσοστού κατά το οποίο έχει μειωθεί σε πλάτος στο πεδίο των συχνοτήτων ο παλμός.

Το πρόγραμμα hifftmethod είναι ανεξάρτητο των υπολοίπων και η λειτουργία του είναι να δέχεται ως είσοδο τα στοιχεία του παλμού με τον τρόπο που περιγράφονται από την εξίσωση (2.1), ενώ ως έξοδο δίνει την μέγιστη συχνότητα κατά την οποία ο παλμός έχει πολύ μικρή επίδραση (έχει σχεδόν "σβήσει") και συγκεκριμένα τον λόγο:

$$f_{diff} = \frac{f_{max}}{freq}$$

Αυτός ο λόγος πρέπει προφανώς να είναι μεγαλύτερος της μονάδας και να μην λαμβάνει πολύ μεγάλες τιμές. Δείχνει την διαφορά τάξης μεγέθους μεταξύ της συχνό-

τητας κατά την οποία ο παλμός είναι "κεντραρισμένος" και της συχνότητας κατά την οποία ο παλμός "σβήνει".

```
function [fdiff,fshift,yshift,yf]=hifftmethod(t0,spread,nsteps,freq)
Ts=1;
n = 1:Ts:nsteps; % Time vector

%t gia na to ferw sthn ta3h megethous tou t0 me synoriakes:
% % t(nmax/2)=t0 kai t(1)=0
% t=2*t0/(nsteps-2)*(n-1);
t=linspace(0,2*t0,nsteps);
% t0->kati*t0, allazontas thn prwti synoriaki ousiastika
% times=8;
% t=t*times;
% fs_time einai to sampling frequency
fs_time=1/t(2);
%pulse plot time domain
pulse=exp(-.5*((t-t0)/spread).^2).*sin(2*pi*freq*t);
x=pulse;
figure;
plot(t,x)
xlabel('Time (s)')
ylabel('Magnitude');
annotation('textbox',...
    [0.6 0.5 0.2 0.3],...
    'String',[['spread = ' num2str(spread, '%e' )],...
    ['t0 = ' num2str(t0, '%e' )],['nsteps = ' num2str(nsteps, '%e' )]],...
    'FontSize',10,...
    'FontName','Arial',...
    'LineStyle','--',...
    'FitBoxToText','on');
figure;

% fft transform
y = fft(x)/sqrt(nsteps)./max(fft(x)/sqrt(nsteps));
f = (0:length(y)-1)*fs_time/length(y);
length(y)
% plot(f,abs(y));
% figure;
% zero-centered, circular shift on the transform
n = length(x);
fshift = (-n/2:n/2-1)*(fs_time/n);
yshift = fftshift(y);
plot(fshift,abs(yshift))
xlabel('Frequency (Hz)')
ylabel('Magnitude');
% axis([0 ceil(abs(max(fshift))) -ceil(abs(max(yshift)))
ceil(abs(max(yshift)))]);

% algorithm for gaussian/sinusoidal pulses. Completed, only bugs could ruin
my enthusiasm.
yshift_diff(length(yshift))=0;
fshift_diff(length(fshift))=0;
yshift_diff_perc(length(yshift))=0;
%for the diff
for i=(length(yshift)/2+ mod(length(yshift)./2,2)+1):length(yshift)-1
    yshift_diff(i)=abs(abs(yshift(i+1))-abs(yshift(i)));
    fshift_diff(i)=fshift(i+1)-fshift(i);
end
```

```

% for the diff of the diff
yshift_diff_perc(length(yshift))=0;
for j=(length(yshift)/2+ mod(length(yshift)./2,2)+1):length(yshift)-1
    yshift_diff_perc(j)=abs(abs(yshift_diff(j+1))-abs(yshift_diff(j)));
end
yshift_diff_perc(isinf(yshift_diff_perc)|isnan(yshift_diff_perc)) = 0;
%yf:index of highest chance in curve
maxer=max(yshift_diff_perc);
finder=find(sort(yshift_diff_perc)==maxer)-1;
yf=max(find(yshift_diff_perc==maxer));
lowerfinder=sort(yshift_diff_perc);
    %to 0.1*max(abs((yshift))) einai ena orio apla gia na brw kamyplotita
    %me elaxisto kai oxi me megisto
    %to finder briskei to index tou enos mikroterou stoiceiou toy sorted
    %yshift_diff_perc
    %to lowerfinder briskei thn timh toy yshift_diff_perc
    % aristera thelw na einai mikrotero tou 50% enw de3ia thelw na eimai se
    % syxnotites megalytes apo thn deyteri kampana
while (abs(yshift(find(yshift_diff_perc==maxer)))>= 0.01*max(abs((yshift))))
|| ((yf>(floor(length(fshift)*0.96)) || (yf<ceil(length(fshift)*0.04)))
    finder=find(sort(yshift_diff_perc)==maxer)-1;
    maxer=lowerfinder(finder);
    yf=max(find(yshift_diff_perc==maxer));
    yf
end
fmax=abs(fshift(yf));
if fmax<freq
    fmax=abs(freq-fmax)+freq;
end
yf=max(find(abs(fshift)<fmax));
yf
if yf>=length(yshift)
    fmax2=fmax;
else
    fmax2= abs(fshift(max(find(abs(yshift)>0.1*abs(yshift(yf))))));
end
fdiff=(abs(fmax2-freq)/freq+1);
fdiff
fmax=freq*fdiff;
fmax
axis([0 2*fmax -ceil(abs(max(yshift))) ceil(abs(max(yshift)))]);
    annotation('textbox',...
[0.5 0.6 0.2 0.3],...
    'String',{['freq = ' num2str(freq,'%e')],['fmax = '
num2str(fmax*2*pi,'%e')],['fdiff = ' num2str(fdiff)]},...
    'FontSize',10,...
    'FontName','Arial',...
    'LineStyle','--',...
    'FitBoxToText','on');
end

```

## 2 Material\_and\_pulse

Εδώ ορίζεται το υλικό υπό επεξεργασία, οι παράμετροί του και τα διαγράμματα παλμού-υλικού, δηλαδή τα φάσματα παλμών και διηλεκτρικής συνάρτησης. Είναι χρήσιμο να επισημάνουμε κάτι το οποίο χρησιμοποιείται σε όλη την εργασία και είναι ο τρόπος με τον οποίο κατανοούμε πώς συμπεριφέρεται το υλικό ανάλογα με το ηλεκτρομαγνητικό κύμα που αλληλεπιδρά με αυτό.

Ο ηλεκτρομαγνητικός παλμός χαρακτηρίζεται από κάποια κεντρική συχνότητα  $f_{\text{freq}}$ , στην οποία μπορούμε να λέμε ότι ο παλμός είναι "κεντραρισμένος". Επιπλέον το κυματοπακέτο αυτό εκτείνεται στον χρόνο σαν μια συνάρτηση που προφανώς δεν είναι της μορφής της  $\delta(x)$ . Επομένως όταν αναπτυχθεί κατά Fourier στον χώρο των συχνοτήτων λαμβάνουμε την συνεισφορά κάθε συχνότητας στο τελικό κύμα. Επιπλέον αυτών, όμως, το υλικό που χρησιμοποιούμε έχει συγκεκριμένη απόκριση στο εξωτερικό πεδίο, επομένως συγκεκριμένη διηλεκτρική συνάρτηση που το περιγράφει. Αυτό σημαίνει ότι η απόκριση του υλικού είναι τέτοια ώστε να υπακούει στις συχνότητες που χαρακτηρίζουν τον παλμό, δηλαδή ανάλογα με την τιμή της διηλεκτρικής συνάρτησης σε εκείνες τις συχνότητες θα λέμε ότι ο παλμός "βλέπει" το μέσο όταν το φάσμα του έχει επικάλυψη με το φάσμα του μέσου.

Επιπλέον, έχοντας το αποτέλεσμα της hifftmethod βρίσκει κανείς στον προσδιορισμό του ελαχίστου  $\lambda$ , έτσι του ελαχίστου  $dx$ , άρα και του μεγίστου  $dt$  όπως ακριβώς φαίνεται στην θεωρία του πρώτου κεφαλαίου. Το πρόγραμμα Material and pulse έχει μόνο έξοδο και όχι είσοδο δεδομένων γιατί εκεί ορίζονται τα στοιχεία που χαρακτηρίζουν τον παλμό σύμφωνα με την σχέση (2.1). Επιπλέον των παραμέτρων της σχέσης αυτής ορίζονται και οι εξής ποσότητες:  $\mu_0, \epsilon_0, \epsilon_r$ , ενώ για τα υλικά με διασπορά ορίζονται τα  $\omega_0, \delta$  για τα Lorentz,  $v_c$  συχνότητα κρούσης για τα Drude και  $\tau$  για τα Debye.