



Τ.Ε.Ι. Κρήτης – Παράρτημα Χανίων

Τμήμα Ηλεκτρονικής

## Πτυχιακή εργασία

με θέμα

*Προσομοιώσεις Προβλημάτων*

*Διάδοσης και Σκέδασης Ηλεκτρομαγνητικών Κυμάτων  
σε Υλικά Μέσα με Τυχαία Χαρακτηριστικά και Διακριτή*

*Υφή*

από τον **Δημήτριο Τιάκα**,

Σπουδαστή του Τμήματος Ηλεκτρονικής του Τ.Ε.Ι. Κρήτης.

*Υπό την επίβλεψη του Δρ. **Ιωάννη Βαρδιάμπαση**, Επίκουρου Καθηγητή.*

Χανιά, Νοέμβριος 2003

## Πρόλογος

Θα ήθελα να εκφράσω τις θερμές μου ευχαριστίες στον καθηγητή κ. Ιωάννη Βαρδιάμπαση που μου πρότεινε την παρούσα εργασία καθώς και για την πολύτιμη βοήθεια του σε όλη την περίοδο προετοιμασίας της.

Ένα ευχαριστώ στον καθηγητή κ. Ιωάννη Μακρή για τον χρόνο που αφιέρωσε στην ανάγνωση της εργασίας μου και για την παρουσία του ως μέλος της επιτροπής.

Ακόμα ένα μεγάλο ευχαριστώ στη Στέλλα για την υπομονή και την κατανόηση της σε όλη τη διάρκεια των σπουδών μου.

Τέλος να ευχαριστήσω τους συγκατοίκους μου Κώστα και Σάκη τόσο για την συμπαράσταση τους όσο και για την βοήθεια τους για την ολοκλήρωση αυτής της εργασίας, καθώς επίσης τα αδέρφια μου και το Γιώργο για την συμπαράσταση τους.

*ΓΙΑ ΤΟΥΣ ΤΟΝΕΙΣ ΜΟΥ*

# Περιεχόμενα

<b>Εισαγωγή</b>	<b>1</b>
-----------------	----------

## Κεφάλαιο 1

### Προσομοίωση Monte Carlo σκεδαστών σημείου

1.1 Εισαγωγή	5
1.2 Ανάλυση του προβλήματος	5
1.3 Αριθμητικά αποτελέσματα	7

## Κεφάλαιο 2

### Κατανομή ζεύγους για συμπαγείς σφαίρες

Εισαγωγή	10
2.1 Η εξίσωση Percus-Yevick και συνάρτηση κατανομής ζεύγους	10
2.2 Προσομοίωση Monte Carlo συμπαγών σφαιρών	16

## Κεφάλαιο 3

### Ενεργή διηλεκτρική σταθερά βασισμένη στην QCA-CP

3.1 Εισαγωγή	23
3.2 QCA-CP	23
3.3 Αριθμητικά αποτελέσματα	25

## Κεφάλαιο 4

### Χαρακτηριστικά σκέδασης

4.1 Εισαγωγή	27
4.2 Ο νόμος του Lorentz-Lorenz και το θεώρημα του Ewald-Oseen	27
4.3 Συσχετισμός σκέδασης για φυσαλίδες	29

# Εισαγωγή

## Σκέδαση

Η άτακτη διανομή ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας κατά την πρόσπτωση σε υλικό εμπόδιο χαρακτηρίζει το φαινόμενο που υπονοείται με τον όρο σκέδαση[1]. Το στοιχείο αυτό αναφέρεται μόνο στη διεύθυνση διάδοσης της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας και επομένως δεν επαρκεί για τον καθορισμό του φαινομένου. Στην γενική περίπτωση όλα τα χαρακτηριστικά του προσπίπτοντος κύματος μεταβάλλονται κατά την αλληλεπίδραση με τον σκεδαστή. Το πρόβλημα της σκέδασης κυμάτων αφορά ακριβώς τον ακριβέστερο δυνατό καθορισμό των χαρακτηριστικών του κύματος, που εγκαταλείπει το υλικό εμπόδιο, με την προϋπόθεση ότι για το τελευταίο είναι γνωστά το σχήμα η κινητική κατάσταση και οι ηλεκτρικές ιδιότητες του.

Το προσπίπτων ηλεκτρομαγνητικό κύμα μπορεί να είναι από μια απλή κυματομορφή έως μια σύνθετη διαμορφωμένη παλμοσειρά. Σε κάθε περίπτωση η ανάλυση αφορά την επίλυση της εξίσωσης κύματος με οριακές συνθήκες. Το μέτωπο κύματος θεωρείται επίπεδο, αν η πηγή του προσπίπτοντος σήματος βρίσκεται σε πολύ μεγάλη απόσταση από την περιοχή του σκεδαστή-παρατηρητή, και η κάθετη προς αυτό καθορίζει την διεύθυνση πρόσπτωσης. Σε σχετικά μικρότερες αποστάσεις πηγής-σκεδαστή λαμβάνεται υπόψη η σφαιρικότητα του μετώπου κύματος.

Σκεδαστής θεωρείται κάθε υλικό σώμα, διαχωριστική επιφάνεια και μέσο, που παρεμβάλλεται στη διαδρομή του ηλεκτρομαγνητικού κύματος. Τα χαρακτηριστικά του σκεδαστή (σχήμα, κίνηση, ηλεκτρικές ιδιότητες) συνήθως μεταβάλλονται όχι μόνο με τη θέση αλλά και με το χρόνο προκαλώντας αντίστοιχη διακύμανση στο σκεδαζόμενο κύμα. Είναι φανερό για την περιγραφή του σκεδαστή και του σκεδαζόμενου κύματος απαιτούνται στοχαστικά μεγέθη, ενώ αντίθετα το προσπίπτων κύμα περιγράφεται με ντετερμινιστικά μεγέθη.

Με την εξέλιξη της τεχνολογίας αυξάνεται γρήγορα και το ενδιαφέρον για το φαινόμενο της σκέδασης κυμάτων. Τέτοια προβλήματα μετασχηματίζονται από αόριστα μαθηματικά σε περισσότερο προσιτή φυσική με εφαρμογές στις τηλεπικοινωνίες, την ραδιομετεωρολογία, την πλοήγηση μέσω οργάνων κ.α. Η σκέδαση κύματος από τεχνητούς (αεροσκάφη, πλοία, κτίρια κλπ) και φυσικούς (ατμοσφαιρικές προσπτώσεις, θάλασσα, αιμοσφαίρια, κλπ) σκεδαστές αποτελεί την αρχή λειτουργίας των συστημάτων radar,

sonar, lidar. Η κατανόηση του μηχανισμού σκέδασης είναι τα θεμέλια για την συμμετοχή σε πλήθος εφαρμογών και ερευνών.

## **Σκέδαση σε διακριτά τυχαία μέσα**

Αρκετά προβλήματα σχετίζονται με την σκέδαση των ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων σε διακριτά τυχαία μέσα [2]-[3]. Αυτά τα προβλήματα αντιμετωπίζονται με εφαρμογές της ενεργητικής ανίχνευσης από το περιβάλλον της γης. Οι διάφορες μεθοδολογίες, θεωρητικές και αριθμητικές, προσανατολίζουν και σκοπεύουν την βασική και φυσική κατανόηση της αλληλεπίδρασης των κυμάτων με την ύλη.

Ένα διακριτό τυχαίο μέσο αποτελείται από σκεδαστές απλών μορφών και οι κατάλληλες ιδιότητες είναι τυχαία διανεμημένες σε ένα ομοιογενή υπόβαθρο. Τα χαρακτηριστικά σκέδασης τέτοιων μέσων περιγράφονται γενικά από ένα σύνολο τιμών που έχουν την έννοια του μέσου όρου. Το διακριτό τυχαίο μέσο προβάλλει ένα κατάλληλο μοντέλο για μια ποικιλία από γεωφυσικά, βιολογικά και τεχνητά συστήματα.

Μπορούμε να κατατάξουμε ένα διακριτό τυχαίο μέσο σύμφωνα με τις ιδιότητες σκέδασης σε δυο κατηγορίες, αραιό και πυκνό. Σε ένα αραιό μέσο η σκέδαση είναι αμελητέα. Αυτό συμβαίνει επειδή 1) η συγκέντρωση σωματιδίων είναι χαμηλή έτσι ο κύριος διαχωρισμός των σκεδαστών είναι πολύ μεγαλύτερος από το μήκος κύματος, 2) η διαφορά με την ύλη είναι χαμηλή έτσι η ισχύς της σκέδασης σε κάθε σκεδαστή είναι αδύναμη, και 3) τα σκεδασμένα πεδία πέφτουν γρήγορα στο υπόβαθρο του μέσου. Για τον λόγο αυτό σε ένα αραιό μέσο, η ολική απόκριση είναι το άθροισμα των ατομικών αποκρίσεων από κάθε σκεδαστή σε απομόνωση. Σε αντίθεση σε ένα πυκνό μέσο οι σκεδαστές συμπεριφέρονται με αποτέλεσμα να επιφέρουν σημαντική σκέδαση. Έτσι οι επιδράσεις της σκέδασης πρέπει να συμπεριληφθούν κατάλληλα για να πάρουμε σωστά αποτελέσματα.

Για αραιά μέσα η απαίτηση είναι η επίλυση του προβλήματος σκέδασης σε απλά μόρια. Εκτός από ειδικές περιπτώσεις, όπως σφαιρικά αντικείμενα (Mie scattering) ή μικρά ελλειψοειδή μόρια (Rayleigh scattering), αυτό δεν είναι εύκολο πάντα να γίνει. Για πυκνά μέσα, αντιμετωπίζουμε την επιπλέον απαίτηση του συνδυασμού των σκεδασμένων πεδίων από όλα τα μόρια σε έναν shelf consistent manner. Κάποιο πρέπει να είναι ικανό για να πλησιάσει με λογικούς τρόπους να χαρακτηρίσει την πιθανότητα κατανομής των θέσεων των μορίων και άλλων πιθανών ιδιοτήτων.

Είναι σημαντικό να γνωρίζουμε ότι στη διάδοση και στη σκέδαση κυμάτων μέσω διακριτών τυχαίων μέσων υπάρχουν δυο διαβαθμίσεις επιφανειών σκέδασης. Η πρώτη αφορά την σκέδαση των πεδίων, είναι γνωστή ως συνεχή σκέδαση και χρησιμοποιείται για την κατάταξη των αραιών και πυκνών μέσων. Οι διαβαθμίσεις των επιπέδων της συνεχούς σκέδασης χαρακτηρίζονται από το μήκος κύματος  $\lambda$ . Η δεύτερη αφορά την σκέδαση των εντάσεων και είναι γνωστή ως ασυνεχή σκέδαση. Η διαβάθμιση επιφάνειας χαρακτηρίζεται από το κύριο ελεύθερο μονοπάτι (mean free path  $l_{mpf}$ ). Η ασυνεχή σκέδαση έχει αναπτυχθεί εκτενώς με την κλασική θεωρία μεταφοράς ακτινοβολίας. Η συνεχή σκέδαση είναι ένα θέμα για εκτεταμένες έρευνες. Στην περίπτωση όπου  $l_{mpf} \gg \lambda$ , όπως γίνεται στα περισσότερα γεωφυσικά remote sensing προβλήματα, και η συνεχή και η ασυνεχή σκέδαση μπορούν να συνδυαστούν με ένα κοινό τρόπο που αποκαλείται θεωρία μεταφοράς ακτινοβολίας σε πυκνά μέσα.

### Αριθμητικές μέθοδοι προσομοιώσεων

Τα προβλήματα σκέδασης σφαιρών έχουν μελετηθεί εκτενώς με διάφορες μεθόδους[2]-[5]. Τα σφαιροειδή εξασφαλίζουν ίσως το πιο απλό μοντέλο για την μελέτη της πολλαπλής σκέδασης. Υποθέτοντας ότι τα σφαιροειδή είναι μικρά σε σχέση με το μήκος κύματος έτσι ώστε η απλή σκέδαση να χαρακτηρίζεται από Rayleigh σκέδαση.

Στην παρούσα εργασία αντιμετωπίζουμε διάφορα προβλήματα τυχαίων μέσων με αριθμητικές μεθόδους προσομοίωσης. Μια από τις μεθόδους που χρησιμοποιούμε είναι η μέθοδος Monte Carlo. Εφαρμόζεται κυρίως σε πειράματα τύχης, των οποίων οι πιθανότητες των αποτελεσμάτων δεν μπορούν ή δύσκολα μπορούν να υπολογιστούν.

Στο πρώτο κεφάλαιο μελετάμε την προσομοίωση σκεδαστών σημείου με την μέθοδο Monte-Carlo[3]. Υπολογίζουμε τους συντελεστές εξάλειψης και τις συναρτήσεις φάσης για τις περιπτώσεις της ομοιόμορφης τυχαίας κατανομής και την περίπτωση των τυχαίων κατανομών δεσμών. Η προσομοίωση γίνεται σε δυο στάδια. Στο πρώτο στάδιο εισάγουμε τυχαία 250 σκεδαστές μέσα σε 1 δέσμη. Ενώ στο δεύτερο στάδιο, εισάγουμε τυχαία 10 σκεδαστές μέσα σε 25 δέσμες.

Στο δεύτερο κεφάλαιο εξετάζουμε τη σκέδαση σε συμπαγής σφαίρες με χρήση τόσο της μεθόδου κατανομής ζευγών Percus-Yevick όσο και της μεθόδου Monte Carlo[2]-[3]. Η συνάρτηση κατανομής ζευγών Percus-Yevick για συμπαγείς σφαίρες είναι η αλληλεπίδραση των σφαιρικών μορίων δια μέσου του δυναμικού των συμπαγών σφαιρών και προβάλλει ένα απλό τρόπο ενσωμάτωσης φυσικά ρεαλιστικού στατιστικού ζεύγους

μέσα σε μοντέλα σκέδασης. Η προσομοίωση Monte Carlo με χρήση της μεθόδου ανασχηματισμού Metropolis είναι συχνά ο καλύτερος τρόπος να υπολογίσουμε τις στατιστικές μηχανικές ιδιότητες των μορίων.

Στο τρίτο κεφάλαιο μελετάμε την ενεργή διηλεκτρική σταθερά ενός μέσου που αποτελείται από μικρά διηλεκτρικά μόρια με την χρήση της Quasi Crystalline προσέγγισης με συνεχή διάλυμα (QCA-CP) [2]-[4] .

Στο τέταρτο κεφάλαιο παρουσιάζουμε τα χαρακτηριστικά της σκέδασης σε όρους τις κανονικοποιημένης ταχύτητας φάσης και των απωλειών εφαπτομένης με βάση την Quasi Crystalline προσέγγιση (QCA) [3],[5].



# ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

## Προσομοίωση Monte Carlo Σκεδαστών Σημείου

### 1.1 Εισαγωγή

Σε αυτήν την ενότητα παρουσιάζουμε τις προσομοιώσεις Monte Carlo σκέδασης σκεδαστών σημείου. Υπολογίζουμε τους συντελεστές εξάλειψης και τις συναρτήσεις φάσης για τις περιπτώσεις της ομοιόμορφης τυχαίας κατανομής και την περίπτωση των τυχαίων κατανομών συστοιχιών.

Τα μη προσροφητικά σωματίδια είναι ομοιόμορφα και τυχαία κατανεμημένα σε ένα κυβικό κουτί μεγέθους  $L^3$ . Ο ίδιος αριθμός σωματιδίων κατανέμεται σε συστοιχίες μέσα στο κυβικό κουτί μεγέθους  $L^3$ . Οι συστοιχίες περιέχουν  $N_s$  σωματίδια η κάθε μία. Σε κάθε συστοιχία τα σωματίδια κατανέμονται τυχαία σε κυβικό όγκο μεγέθους  $\ell_c^3$ . Όλες οι διαστάσεις απόστασης είναι σε μήκη κύματος ( $\lambda$ ). Το κυβικό κουτί είναι όγκου  $V$  και το μήκος κάθε πλευράς  $L$  είναι  $50 \lambda$ . Ένα κύμα βαθμωτού επιπέδου είναι προσπίπτον σε  $\theta_i=45^\circ$  και  $\phi_i=0^\circ$ . Οι συναφής γωνίες και οι γωνίες σκέδασης ορίζονται έτσι ώστε η κατεύθυνση επανασκέδασης είναι  $\theta_s=\theta_i$  και  $\phi_s = \pi+\phi_i$ . Οι θέσεις  $250^{ov}$  σκεδαστών δημιουργούνται τυχαία. Για την περίπτωση τυχαίας ομοιόμορφης κατανομής,  $N=250$  κεντρικές θέσεις δημιουργούνται τυχαία μέσα στο κυβικό κουτί μήκους πλευράς  $L$ . Για την περίπτωση τυχαίας κατανομής σε συστοιχίες,  $N=250$  θέσεις σωματιδίων εισάγονται σε δύο στάδια. Στο πρώτο στάδιο οι 250 σκεδαστές είναι σε 1 δέσμη που περιέχει 250 σκεδαστές. Ο όγκος της συστοιχίας είναι ένας κύβος με μήκος  $\ell_c$ . Αρχικά δημιουργούνται 50 κεντρικές θέσεις μέσα στον κύβο μήκους  $L$  και επιλέγονται τυχαία, με τον περιορισμό ότι δεν υπάρχει διείσδυση των διαφόρων κύβων των συστοιχιών. Στη συνέχεια, στο δεύτερο στάδιο, εισάγουμε τυχαία 10 σωματίδια μέσα σε 25 δέσμες όγκου  $\ell_c^3$ . Τα αποτελέσματα πραγματοποιούνται για 100 πραγματοποιήσεις.

### 1.2 Ανάλυση του προβλήματος

Θεωρήστε ένα προσπίπτον κύμα να προσκρούει σε  $N$  σκεδαστές

$$E_{inc}(\tilde{\mathbf{r}}) = e^{i\tilde{\mathbf{k}}_i \cdot \tilde{\mathbf{r}}} \quad (1.2.1)$$

όπου

$$\tilde{\mathbf{k}}_i = k(\sin \theta_i \cos \varphi_i \bar{\mathbf{x}} + \sin \theta_i \sin \varphi_i \bar{\mathbf{y}} + \cos \theta_i \bar{\mathbf{z}}) \quad (1.2.2)$$

Ξεκινάμε τοποθετώντας  $N$  σωματίδια σε ένα κυβικό κουτί μεγέθους  $V = L^3$ . Οι συντεταγμένες  $\bar{\mathbf{r}}_j = (x_j, y_j, z_j)$ ,  $j = 1, 2, \dots, N$ , προσδιορίζονται επιλέγοντας τρεις τυχαίους αριθμούς ανάμεσα στο 0 και στο 1 και μετά πολλαπλασιάζοντας τους επί  $L$ . Μόλις δοθούν οι θέσεις των  $N$  σωματιδίων μπορούμε να επιλύσουμε τις Foldy–Lax πολλαπλές εξισώσεις σκέδασης

$$E_{ex}^j = E_{inc}(\bar{\mathbf{r}}_j) + \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq j}}^N f \frac{\exp(i\mathbf{k}|\bar{\mathbf{r}}_j - \bar{\mathbf{r}}_l|)}{|\bar{\mathbf{r}}_j - \bar{\mathbf{r}}_l|} E_{ex}^l(\bar{\mathbf{r}}_l) \quad (1.2.3)$$

$$j = 1, 2, \dots, N.$$

Μόλις το υπάρχον πεδίο  $E_{ex}^j(\bar{\mathbf{r}}_j)$  υπολογιστεί, το «τελικό» σκεδαζόμενο πεδίο μπορεί να υπολογιστεί στην απομακρυσμένη από το πεδίο περιοχή. Έστω ότι

$$\bar{\mathbf{k}}_s = k(\sin \theta_s \cos \varphi_s \bar{\mathbf{x}} + \sin \theta_s \sin \varphi_s \bar{\mathbf{y}} + \cos \theta_s \bar{\mathbf{z}}) \quad (1.2.4)$$

είναι η κατεύθυνση παρατήρησης του σκέδασης πεδίου. Ως εκ τούτου,

$$E_s(\bar{\mathbf{r}}) = \frac{e^{i\mathbf{k}_s \cdot \bar{\mathbf{r}}}}{r} F_N(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) \quad (1.2.5)$$

όπου

$$F_N(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) = \sum_{l=1}^N f \exp(-i\bar{\mathbf{k}}_s \cdot \bar{\mathbf{r}}_l) E_{ex}^l(\bar{\mathbf{r}}_l) \quad (1.2.6)$$

είναι το πλάτος σκέδασης των  $N$  σωματιδίων. Αυτό μπορεί να υπολογιστεί για πολλές πραγματοποιήσεις. Μπορούμε στη συνέχεια να υπολογίσουμε τους μέσους όρους των πραγματοποιήσεων. Έστω ότι η γωνιώδης παρένθεση  $\langle \rangle$  δηλώνει το μέσο όρο της πραγματοποίησης.

Το συμφασικό πλάτος σκέδασης είναι

$$\langle F_N(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) \rangle = \frac{1}{N_r} \sum_{r=1}^{N_r} F_N^r(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) \quad (1.2.7)$$

όπου  $r$  είναι ο δείκτης της πραγματοποίησης και  $N_r$  είναι ο αριθμός των πραγματοποιήσεων. Το μη συμφασικό πλάτος σκέδασης για κάθε πραγματοποίηση είναι

$$\mathfrak{F}_N^r(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) = F_N^r(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) - \langle F_N(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) \rangle \quad (1.2.8)$$

Η συνάρτηση φάσης υπολογίζεται από

$$P(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) = \frac{\langle |\mathfrak{F}_N^r(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i)|^2 \rangle}{V} = \frac{1}{N_r V} \sum_{r=1}^{N_r} |\mathfrak{F}_N^r(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i)|^2 \quad (1.2.9)$$

Ο συντελεστής εξάλειψης υπολογίζεται από

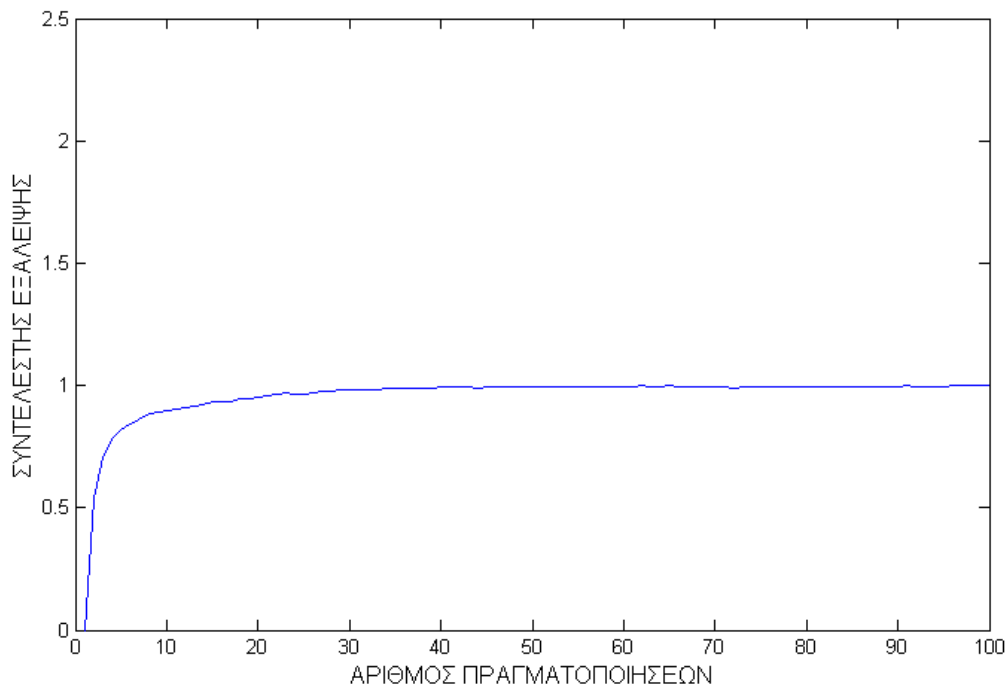
$$k_e = \int_0^\pi d\theta_s \sin \theta_s \int_0^{2\pi} d\phi_s P(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) \quad (1.2.10)$$

### 1.3 Αριθμητικά αποτελέσματα

Στις προσομοιώσεις Monte Carlo, είναι σημαντικό να επιδείξουμε σύγκληση σε σχέση με τον αριθμό των σωματιδίων  $N$  στο κυβικό κουτί και τον αριθμό των πραγματοποιήσεων  $N_r$  για μια σταθερή πυκνότητα αριθμού σωματιδίων  $n_0$ . Παρουσιάζουμε πρώτα τη σύγκληση των συντελεστών εξάλειψης, ενώ αυξάνουμε τον αριθμό των πραγματοποιήσεων και τον αριθμό των σωματιδίων στο σχήμα 1.3.1.

Οι παράμετροι της προσομοίωσης που χρησιμοποιήσαμε είναι

- δέσμη : 1.
- σκεδαστές σημείου σε κάθε δέσμη : 250
- μήκος κύματος : 0.02m
- το μέγεθος του κυβικού κουτιού : 50λ
- το μέγεθος της δέσμης : 50λ
- πραγματικό μέρος του πλάτους σκέδασης : 0.008905
- πολική γωνία πρόσπτωσης :  $45^0$
- αζιμουθιακή γωνία πρόσπτωσης:  $0^0$
- αριθμός πραγματοποιήσεων : 100



**Σχήμα 1.3.1** τεστ σύγκλισης για προσομοίωση Monte Carlo.  $L=50$   $N=250$

Τα αποτελέσματα στο σχήμα 1.3.1 είναι για την περίπτωση της ομοιόμορφης τυχαίας κατανομής. Η ανεξάρτητη σκέδαση προβλέπει ότι η  $\kappa_{ei} = 4.0 \times 10^{-6} \lambda^{-1}$ , ενώ στις προσομοιώσεις Monte Carlo παίρνουμε  $\kappa_e = 3.958 \times 10^{-6} \lambda^{-1}$  μετά από 100 πραγματοποιήσεις. Όλα τα Monte Carlo αποτελέσματα που παρουσιάζονται δίνονται για  $N=250$  σωματίδια με  $L=50\lambda$ ,  $\theta_i=45^\circ$ , και  $\phi_i=0^\circ$ .

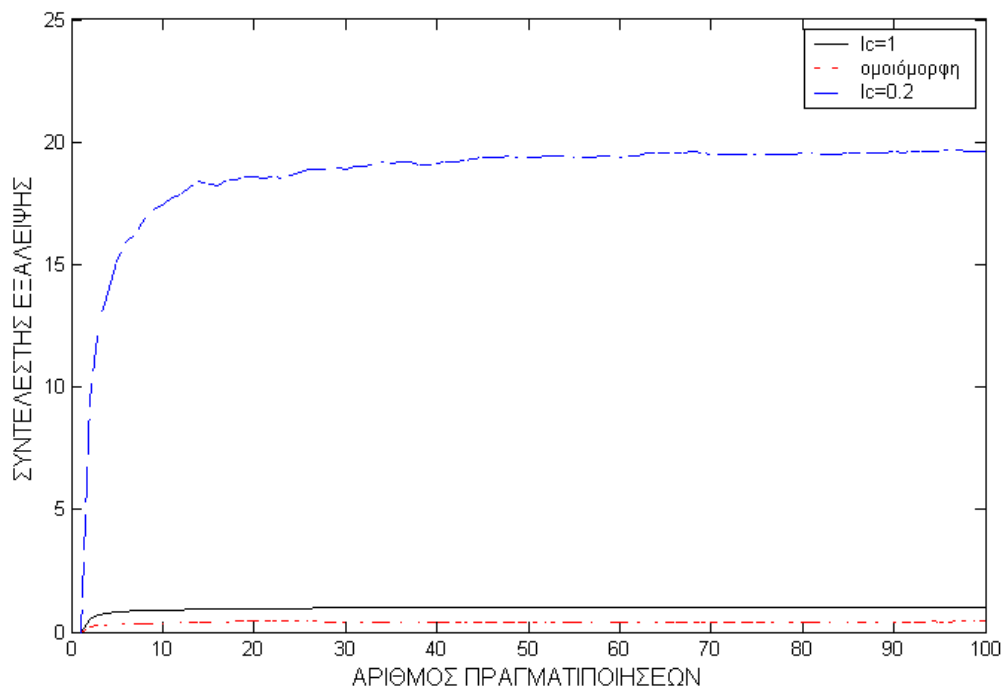
Στη συνέχεια, θεωρούμε την περίπτωση της τυχαίας κατανομής σε δέσμες με 10 σωματίδια σε κάθε συστοιχία. Το σχήμα 1.3.2 δείχνει τη σύγκλιση των συντελεστών εξάλειψης σε αντιδιαστολή με τις πραγματοποιήσεις. Ο συντελεστής σχετικής εξάλειψης ( $\kappa_{re}$ ) είναι ο συλλογικός συντελεστής εξάλειψης διαιρεμένος με εκείνον της ανεξάρτητης σκέδασης ( $\kappa_{re} = \kappa_e/\kappa_{ei}$  με  $\kappa_{ei} = 4.0 \times 10^{-6} \lambda^{-1}$ ).

Υπάρχουν 25 δέσμες, που η κάθε μία περιείχε 10 σκεδαστές σε όλα τα διαγράμματα που δόθηκαν. Το κυβικό μέγεθος της συστοιχίας  $\ell_c$  ποικίλουν από 1.0λ μέχρι 0.2λ. Για το κυβικό κουτί μεγέθους 1.0λ υπάρχει πολύ μικρή διαφορά ανάμεσα στην ομοιόμορφη και την σε συστοιχίες κατανομή όπως μπορεί να φανεί από τη σταθερή καμπύλη στο σχήμα 1.3.2. Παρόλα αυτά, καθώς ο όγκος της συστοιχίας φτιάχνεται

μικρότερος από ένα μήκος κύματος, το  $\kappa_{re}$  μπορεί να γίνει μεγάλο. Βλέπουμε από το σχήμα 1.3.2 ότι το αποτέλεσμα του  $\kappa_{re}$  για την περίπτωση του  $\ell_c = 0.2\lambda$  είναι πολύ μεγαλύτερο από το  $\kappa_{re}$  για την περίπτωση του  $\ell_c = 1\lambda$ . Αυτό δείχνει ότι όταν μελετάμε τυχαία προβλήματα μέσω, η σημασία η σπουδαιότητα της γεωμετρίας των συστοιχιών πρέπει να ληφθεί υπ' όψιν.

Οι παράμετροι της προσομοίωσης που χρησιμοποιήσαμε είναι

- δέσμη : 25
- σκεδαστές σημείου σε κάθε δέσμη : 10
- μήκος κύματος : 0.02m
- το μέγεθος του κυβικού κουτιού : 50λ
- το μέγεθος της δέσμης : 1λ και 0.2λ
- πραγματικό μέρος του πλάτους σκέδασης : 0.008905
- πολική γωνία πρόσπτωσης :  $45^0$
- αζιμουθιακή γωνία πρόσπτωσης:  $0^0$
- αριθμός πραγματοποιήσεων : 100



Σχήμα 1.3.2 Monte Carlo προσομοίωση για δέσμη σκεδαστών

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

### Κατανομή ζεύγους για συμπαγείς σφαίρες

#### Εισαγωγή

Ένα από τα πιο σημαντικά επακόλουθα της σκέδασης σε διακριτά μέσα είναι ότι η σκέδαση και οι ιδιότητες απορρόφησης των μέσων είναι η πιθανότητα κατανομής θέσεων των σφαιρών. Συγκεκριμένα η συνάρτηση κατανομής ζεύγους, η οποία είναι ανάλογη της πιθανότητας κατανομής της ένωσης ζεύγους μορίων, απαιτείται σε πολλές θεωρίες σκέδασης. Στο παρόν κεφάλαιο εξετάζεται η σκέδαση σε συμπαγείς σφαίρες με χρήση τόσο της μεθόδου κατανομής ζευγών Percus-Yevick όσο και της μεθόδου Monte Carlo.

Η συνάρτηση κατανομής ζευγών μπορεί να βρεθεί λύνοντας την Percus-Yevick εξίσωση, η οποία είναι μια προσέγγιση για την Ornstein-Zernike εξίσωση. Η αλληλεπίδραση των σφαιρικών μορίων δια μέσου του δυναμικού των συμπαγών σφαιρών μπορεί να πετύχει μια close-form λύση. Αυτή είναι η γνωστή συνάρτηση κατανομής ζευγών Percus-Yevick για συμπαγείς σφαίρες και προβάλλει ένα απλό τρόπο ενσωμάτωσης φυσικά ρεαλιστικού στατιστικού ζεύγους μέσα σε μοντέλα σκέδασης. Δυστυχώς, για περισσότερο γενική δυναμική αλληλεπίδραση και μοριακή μορφή, η συνάρτηση κατανομής ζευγών Percus-Yevick δεν μπορεί να παραχθεί χωρίς να λυθεί η ολοκληρωμένη εξίσωση.

Η προσομοίωση Monte Carlo με χρήση της μεθόδου ανασχηματισμού Metropolis είναι συχνά ο καλύτερος τρόπος να υπολογίσουμε τις στατιστικές μηχανικές ιδιότητες των μορίων. Ωστόσο για υπολογισμούς σκέδασης, χρειαζόμαστε τον συντελεστή δομής ο οποίος σχετίζεται με τον μετασχηματισμό Fourier της συνάρτησης κατανομής ζεύγους. Λόγω του ότι η φύση της συνάρτησης κατανομής ζεύγους έχει μεγάλη διακύμανση, μπορεί να είναι δύσκολο να παραχθεί ένας ακριβής συντελεστής δομής με μεθόδους Monte Carlo.

#### 2.1 Η εξίσωση Percus–Yevick και συνάρτηση κατανομής ζεύγους

Μία συνολική επιρροή  $h$  ενός σωματιδίου 1 σε ένα άλλο σωματίδιο 2 μπορεί να οριστεί ως

$$h(\vec{r}_{12}) = g(\vec{r}_{12}) - 1 \quad (2.1.1)$$

Η συνολική επιρροή αποσυντίθεται σε ένα άθροισμα συναρτήσεων άμεσου και έμμεσου συσχετισμού. Η άμεσου συσχετισμού συνάρτηση ή η επιρροή υποδηλώνεται από  $c(\bar{r}_{12})$

$$h(\bar{r}_{12}) = c(\bar{r}_{12}) + \text{indirect} \quad (2.1.2)$$

Η συνάρτηση άμεσης συσχέτισης ορίζεται έτσι ώστε να ικανοποιεί την ακόλουθη εξίσωση ολοκληρώματος:

$$h(\bar{r}_{12}) = c(\bar{r}_{12}) + n_0 \int d\bar{r}_3 c(\bar{r}_{13}) h(\bar{r}_{32}) \quad (2.1.3\alpha)$$

Από τη σχέση (2.1.2.1)

$$h(\bar{r}_{12}) = c(\bar{r}_{12}) + n_0 \int d\bar{r}_3 c(\bar{r}_{13}) [g(\bar{r}_{32}) - 1] \quad (2.1.3\beta)$$

η οποία είναι γνωστή ως εξίσωση Ornstein – Zernike. Η φυσική έκφραση του δεύτερου όρου της σχέσης (2.1.3α), η οποία είναι η συνάρτηση έμμεσου συσχετισμού, είναι ότι η έμμεση επιρροή του σωματιδίου 1 στο σωματίδιο 2, είναι αποτέλεσμα του σωματιδίου 1 που ενεργεί άμεσα σε ένα σωματίδιο σε  $\bar{r}_3$ , το οποίο ασκεί στη συνέχεια συνολική επιρροή στο σωματίδιο 2. Η έμμεση επιρροή παίρνεται ως μέσος όρος από  $\bar{r}_3$  θέσεις σωματιδίων και σταθμίζεται από τον αριθμό των σωματιδίων ανά μονάδα όγκου  $n_0$  όπως δείχνεται στη σχέση (2.1.3α) και στην (2.1.3β).

Η εξίσωση Ornstein – Zernike αποτελείται από δύο αγνώστους  $c(\bar{r})$  και  $h(\bar{r})$  σε μία εξίσωση. Πρόκειται να γίνει μία προσέγγιση στη σχέση ανάμεσα στο  $c(\bar{r})$  και το  $h(\bar{r})$ , υποβιβάζοντας τη σχέση (2.1.3) σε μία εξίσωση και έναν άγνωστο. Η προσέγγιση Percus – Yevick μπορεί να εισαχθεί κατά τον ακόλουθο τρόπο εύρεσης.

Η δυναμική ενέργεια ανάμεσα σε δύο σωματίδια εξαρτάται από την  $u(\bar{r})$  όπου  $r$  είναι η διάκευξή τους. Για την περίπτωση δυναμικού συμπαγούς σφαίρας, έχουμε

$$u(\bar{r}) = \begin{cases} \infty & \text{for } r < b \\ 0 & \text{for } r \geq b \end{cases} \quad (2.1.4)$$

Η εξίσωση (2.1.4) λέει ότι απουσία άλλων σωματιδίων, η δυναμική ενέργεια ανάμεσα στα δύο σωματίδια είναι απεριόριστη όταν επικαλύπτουν το ένα το άλλο (άρα δεν επιτρέπουν διείσδυση) αλλιώς είναι μηδέν. Για αυτήν την περίπτωση, ορίζουμε  $y(\bar{r})$  έτσι ώστε

$$g(\bar{r}) = \begin{cases} 0 & \text{for } r < b \\ y(\bar{r}) & \text{for } r \geq b \end{cases} \quad (2.1.5)$$

Η συνάρτηση  $y(\bar{r})$  ορίζεται και για  $r < b$  και για  $r \geq b$ . Η εξίσωση (2.1.5) το ορίζει για  $r \geq b$ . Αργότερα θα το ορίσουμε για  $r < b$ .

Στην εξίσωση (2.1.5), έστω ότι  $g(\bar{r}) = y(\bar{r})$  για  $r \geq b$ . Τότε, για δυναμικό συμπαγούς σφαίρας, έχουμε

$$h(\bar{r}) = g(\bar{r}) - 1 = \begin{cases} -1 & \text{for } r < b \\ y(\bar{r}) - 1 & \text{for } r \geq b \end{cases} \quad (2.1.6)$$

Όταν  $y = 1$ , δεν υπάρχει έμμεση επιρροή. Ωστόσο  $y-1$  είναι ένα μέτρο της έμμεσης επιρροής. Επίσης  $h-c$  είναι ίσο με την έμμεση επιρροή. Η προσέγγιση Percus – Yevick αποτελείται από την εξίσωση του  $h-c$  με το  $y-1$  για όλα τα  $\bar{r}$

$$h(\bar{r}) - c(\bar{r}) = y(\bar{r}) - 1 \quad (2.1.7)$$

Αυτή η εξίσωση μετά διευρύνει τον ορισμό του  $y(\bar{r})$  στο  $r < b$ . Από την (2.1.6) την (2.1.9) και την (2.1.1) παίρνουμε

$$c(\bar{r}) = h(\bar{r}) + 1 - y(\bar{r}) = g(\bar{r}) - y(\bar{r}) \quad (2.1.8\alpha)$$

Από την (2.1.8α) και την (2.1.5) έχουμε

$$y(\bar{r}) = \begin{cases} -c(\bar{r}) & \text{for } r < b \\ g(\bar{r}) & \text{for } r \geq b \end{cases} \quad (2.1.8\beta)$$

Από την (2.1.8α) και την (2.1.8β) έχουμε

$$c(\bar{r}) = \begin{cases} -y(\bar{r}) & \text{for } r < b \\ 0 & \text{for } r \geq b \end{cases} \quad (2.1.8\gamma)$$

Έστω ότι

$$\bar{r}_{12} = \bar{r}_1 - \bar{r}_2 = \bar{r} \quad \bar{r}_{13} = \bar{r}_1 - \bar{r}_3 = \bar{r}'$$

έτσι ώστε

$$\bar{r}_{32} = \bar{r}_3 - \bar{r}_2 = \bar{r} - \bar{r}' \quad \text{στην (2.1.3β).}$$

Σημειώστε ότι από την (2.1.6) και την (2.1.8γ), έχουμε και το  $h$  και το  $c$  εκφρασμένο σε όρους του  $y$ . Ωστόσο εκφράζοντας την (2.1.3β) σε όρους του  $y$ , έχουμε

$$y(\bar{r}) = 1 - n_0 \int_{r' < b} d\bar{r}' y(\bar{r}') [g(\bar{r} - \bar{r}') - 1] \quad (2.1.9)$$

Επιπροσθέτως αποσυνθέτουμε το ολοκλήρωμα της (2.1.9) σε δύο τμήματα των

$$|\bar{r} - \bar{r}'| < b \quad \text{και} \quad |\bar{r} - \bar{r}'| \geq b.$$

Η εξίσωση ολοκληρώματος γίνεται



$$y(\bar{r}) = 1 + n_0 \int_{\substack{r' < b \\ |\bar{r} - \bar{r}'| < b}} d\bar{r}' y(\bar{r}') - n_0 \int_{\substack{r' < b \\ |\bar{r} - \bar{r}'| > b}} d\bar{r}' y(\bar{r}') [y(\bar{r} - \bar{r}') - 1] \quad (2.1.10)$$

Μία κλειστής φόρμας επίλυση μπορεί να αποκτηθεί για  $c(\bar{r})$  μέσω της εξίσωσης ολοκληρώματος (2.1.10). Η λύση δίνεται κάτωθεν. Έστω ότι η απόσταση κανονικοποιείται κατά  $b$ :

$$x = \frac{r}{b} \quad (2.1.11)$$

Η λύση για το  $c(\bar{r})$  είναι πολυωνυμική τρίτου βαθμού

$$-c(x) = \alpha + \beta x + \delta x^3 \quad (2.1.12)$$

Για  $x \leq 1$  και  $c(x) = 0$  για  $x > 1$ . Στην (2.1.12) έχουμε

$$\alpha = \frac{(1+2f)^2}{(1-f)^4} \quad (2.1.13)$$

$$\beta = -6f \frac{(1+f/2)^2}{(1-f)^4} \quad (2.1.14)$$

$$\delta = \frac{f(1+2f)^2}{2(1-f)^4} \quad (2.1.15)$$

$$f = \frac{n_0 \pi b^3}{6} \quad (2.1.16)$$

Για σφαίρες,  $b=2^a$  και το  $f$  που δίνεται στην (2.1.16) είναι ο κλασματικός όγκος των σφαιρικών σκεδαστών.

## Υπολογισμός του συντελεστή δομής και της συνάρτησης κατανομής ζεύγους

Η προσέγγιση Born και η στρεβλή προσέγγιση Born δίνει ένα διστατικό διαγώνιο τμήμα σκέδασης που είναι ανάλογο του συντελεστή δομής. Ο συντελεστής δομής σχετίζεται με το μετασχηματισμό Fourier της συνολικής συνάρτησης συσχετισμού.

Καθορίζουμε το μετασχηματισμό Fourier της συνολικής συνάρτησης συσχετισμού ως

$$H(\bar{p}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{r} e^{i\bar{p}\cdot\bar{r}} h(\bar{r}) \quad (2.1.17)$$

και ορίζουμε  $C(\bar{p})$  να δείχνει το μετασχηματισμό Fourier της άμεσης συνάρτησης συσχετισμού  $c(\bar{r})$

$$C(\bar{p}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{r} e^{i\bar{p}\cdot\bar{r}} c(\bar{r}) \quad (2.1.18)$$

Το ολοκλήρωμα στην εξίσωση Ornstein–Zernike της (2.1.3) είναι ένα ολοκλήρωμα περιελίξεων. Ωστόσο, στο πεδίο ορισμού του μετασχηματισμού Fourier, το ολοκλήρωμα στην εξίσωση Ornstein–Zernike είναι ανάλογο ως προς το προϊόν του  $C(\bar{p})$  και  $H(\bar{p})$ . Επιλύοντας την εξίσωση δίνει

$$H(\bar{p}) = \frac{C(\bar{p})}{1 - n_0(2\pi)^3 C(\bar{p})} \quad (2.1.19)$$

Ο συντελεστής δομής  $S(\bar{p})$  καθορίζεται ως

$$S(\bar{p}) = 1 + n_0(2\pi)^3 H(\bar{p}) \quad (2.1.20)$$

### Αριθμητικά αποτελέσματα

Η κλειστού τύπου λύση για την άμεση συνάρτηση συσχετισμού των Percus – Yevick για συμπαγείς σφαίρες δίνεται στην (2.1.12) διαμέσου της (2.1.16). Ο μετασχηματισμός Fourier  $C(\bar{p})$  μπορεί να υπολογιστεί ήδη και είναι μόνο μία συνάρτηση των  $pb$ ,  $b$ , και  $f$ :

$$C(\bar{p}) = C_{PY}(pb, b, f) \quad (2.1.21)$$

με

$$(2\pi)^3 n_0 C_{PY}(pb, b, f) = 24f \left\{ \frac{(\alpha + \beta + \delta)}{u^2} \cos u - \frac{(\alpha + 2\beta + 4\delta)}{u^3} \sin u - \frac{2(\beta + 6\delta)}{u^4} \cos u + \frac{2\beta}{u^4} + \frac{24\delta}{u^5} \sin u + \frac{24\delta}{u^6} (\cos u - 1) \right\} \quad (2.1.22)$$

όπου  $u = pb$  και τα  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\delta$ , δίνονται στην (2.1.13) διαμέσου της (2.1.15). Η κλειστού τύπου λύση του  $H(\bar{p} = 0)$  αποκτάται ορίζοντας  $p = 0$  στην (2.1.19), την (2.1.21) και την (2.1.22). Παίρνουμε

$$n_0(2\pi)^3 H(\bar{p} = 0) = n_0 \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{r} [g(\bar{r}) - 1] = -1 + \frac{(1-f)^4}{(1+2f)^2} \quad (2.1.23)$$

Για να υπολογίσουμε αριθμητικά τη συνάρτηση κατανομής ζεύγους, ακολουθούνται τα παρακάτω βήματα.

Βήμα 1: χρησιμοποιούμε την (2.1.22) για να υπολογίσουμε την  $C(\bar{p})$ . Εξαιτίας της σφαιρικής συμμετρίας, αυτή είναι μία συνάρτηση του  $p = |\bar{p}|$  μόνο.

Βήμα 2: χρησιμοποιούμε την (2.1.19) για να υπολογίσουμε  $H(\bar{p}) = H(p)$ .

Βήμα 3: παίρνουμε τον αντίστροφο μετασχηματισμό Fourier της  $H(\bar{p})$  για να υπολογίσουμε το  $h(\bar{r})$  σύμφωνα με τη σχέση (2.1.17). Εξαιτίας της σφαιρικής συμμετρίας, απλά χρειάζεται να πραγματοποιήσουμε ένα μονοδιάστατο ολοκλήρωμα

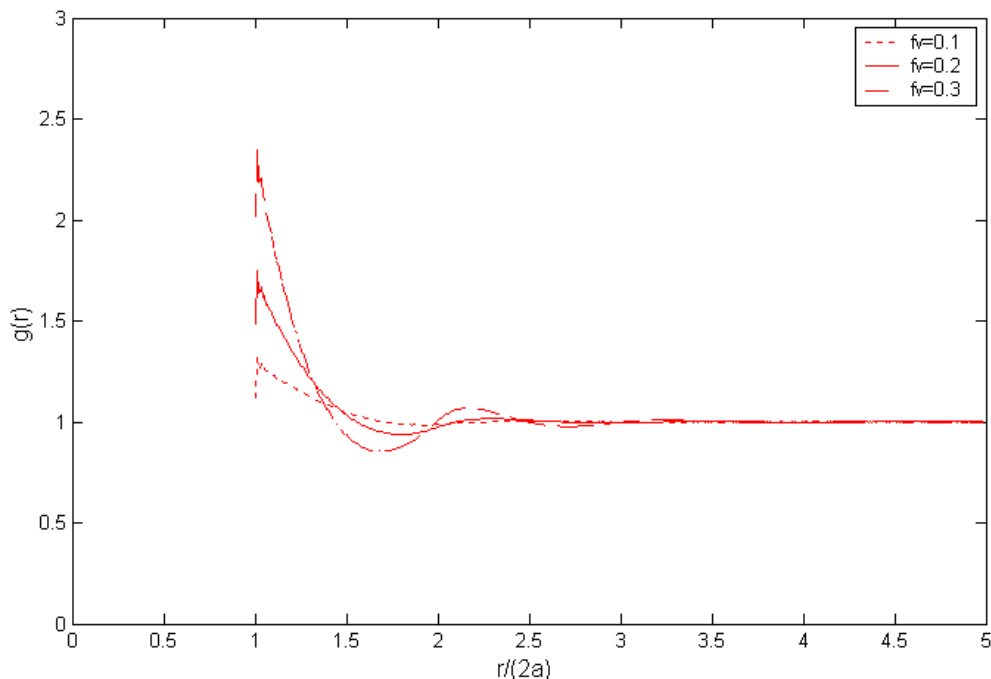
$$\begin{aligned} h(\bar{r}) = h(r) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{p} e^{i\bar{p}\bar{r}} H(\bar{p}) = 2\pi \int_0^{\pi} d\theta_p \sin \theta_p \int_0^{\infty} dp p^2 e^{ipr \cos \theta_p} H(p) \\ &= 4\pi \int_0^{\infty} dp p^2 \left( \frac{\sin pr}{pr} \right) H(p) \end{aligned} \quad (2.1.24)$$

Βήμα 4: η συνάρτηση ζεύγους είναι  $g(r) = h(r) + 1$ .

Στο σχήμα 2.1.1 σχεδιάζουμε το  $g(\bar{r})$  για συμπαγείς σφαίρες για  $f_v = 0.1, 0.2, 0.3$ . Υποθέτουν μέγιστες τιμές για  $r = b$ . Όσο το  $r$  αυξάνεται διακυμαίνονται και ασυμπτωτικά προσεγγίζουν τη μονάδα. Η περίπτωση με μεγαλύτερο  $f$  διακυμαίνονται περισσότερο. Αν θεωρήσουμε  $g=1$  μπορούμε να δούμε ότι οι θέσεις είναι λιγότερο ανεξάρτητες όσο το  $f$  αυξάνεται.

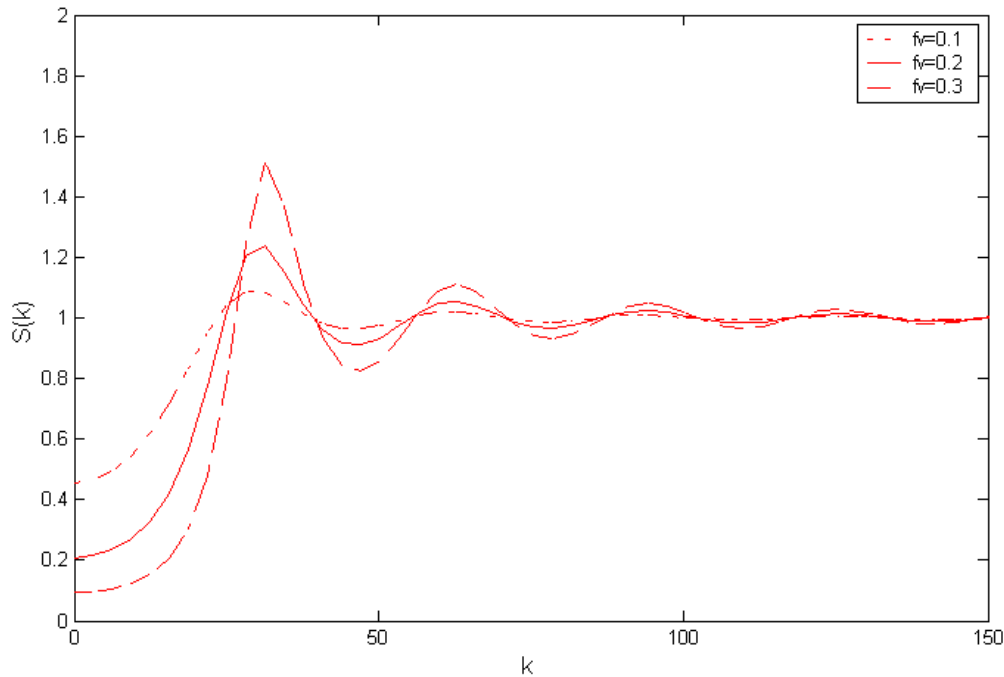
Οι παράμετροι που χρησιμοποιήσαμε είναι

- Κλασματική ποσότητα: 0.1, 0.2, 0.3
- Διάμετρος σφαιρών : 0.2



**Σχ. 2.1.1 Η Percus-Yevick συνάρτηση ζεύγους  $g(r)$  για συμπαγείς σφαίρες με κανονικοποιημένη απόσταση από την διάμετρο των σφαιρών.**

Στο σχ. 2.1.2 σχεδιάζουμε τον συντελεστή δομής για συμπαγείς σφαίρες με παραμέτρους ίδιες με αυτές του σχ. 2.1.1. Όσο αυξάνεται το  $k$  οι τιμές του συντελεστή δομής διακυμαίνονται και προσεγγίζουν την μονάδα. Όσο αυξάνεται το  $f$  τόσο περισσότερο διακυμαίνονται



Σχ. 2.1.2 συντελεστής δομής συναρτήσει του  $k$

## 2.2 Προσομοίωση Μόντε Κάρλο συμπαγών σφαιρών

Σε αυτή την ενότητα περιγράφουμε τις προσομοιώσεις Μόντε Κάρλο της συνάρτησης κατανομής ζεύγους από διακριτά πυκνά τυχαία σε συμπαγείς σφαίρες. Η μέθοδος που χρησιμοποιείται συνήθως είναι η τεχνική Monte-Carlo Metropolis. Οι συμπαγείς σφαίρες δημιουργούνται τυχαία σε ένα κυβικό κουτί. Ο αριθμός των σφαιρών που χρησιμοποιείται είναι 200. Στην τεχνική Μόντε Κάρλο Metropolis οι σφαίρες στη συνέχεια ανακατεύονται για να δημιουργήσουν τυχαίες πραγματοποιήσεις. Στην τοποθέτηση των σωματιδίων, υποθέτουμε ότι δεν υπάρχουν διασωματιδιακές δυνάμεις, εκτός από το ότι η διείσδυση δεν επιτρέπεται. Χρησιμοποιούνται πολλές πραγματοποιήσεις. Χρησιμοποιήσαμε 30 πραγματοποιήσεις και 100 περάσματα για κάθε πραγματοποίηση. Οι συναρτήσεις κατανομής ζεύγους υπολογίζονται χρησιμοποιώντας τον

ορισμό των συναρτήσεων πιθανής πυκνότητας με τυχαίες μεταβλητές και μετρώντας την εμφάνιση διάζευξης ζεύγους των σωματιδίων σαν μία συνάρτηση απόστασης διάζευξης. Η μέτρηση λαμβάνεται ως μέσος όρος αυτών των πραγματοποιήσεων. Οι επιδράσεις των άκρων του κυβικού κουτιού λαμβάνονται υπ' όψιν υιοθετώντας τις συνθήκες περιοδικών ορίων. Τα Monte-Carlo αποτελέσματα για τη συνάρτηση κατανομής ζεύγους δείχνονται και συγκρίνονται με τα αποτελέσματα της προσέγγισης Percus–Yevick για την περίπτωση ενός μεγέθους. Βρίσκονται να είναι σε καλή συμφωνία. Οι προσομοιώσεις Monte-Carlo δείχνουν ότι οι προσεγγίσεις Percus–Yevick ενός μεγέθους μπορούν να χρησιμοποιηθούν για μακροσκοπικά αντικείμενα όπως σωματίδια σε γεωφυσικό ανάγλυφο έδαφος και σύνθετα υλικά.

Τα πειράματα υπολογιστών διεξάγονται σε ένα σύστημα με  $N$  αριθμό σωματιδίων. Αυτές οι  $N$  σφαίρες με διαφορετικά μεγέθη τοποθετούνται σε ένα κυβικό κελί μήκους πλευράς  $\ell$ . Έστω  $N_i$  ο αριθμός των σωματιδίων ακτίνας  $a_i$ . Στη συνέχεια, ο αριθμός πυκνότητας  $n_i$  και ο κλασματικός όγκος  $f_i$  για τα σωματίδια ακτίνας  $a_i$  δίνονται από τις σχέσεις

$$n_i = \frac{N_i}{\ell^3} \quad (2.2.1)$$

$$f_i = n_i \frac{4\pi}{3} a_i^3 \quad (2.2.2)$$

$$N = \sum_{i=1}^L N_i \quad (2.2.3)$$

$$f = \sum_{i=1}^L f_i \quad (2.2.4)$$

όπου  $f$  είναι ο συνολικός κλασματικός όγκος που καταλαμβάνεται από τις σφαίρες.

Σημειώνουμε ότι η συνάρτηση ζεύγους κατανομής  $g_{ij}(\bar{r})$  τείνει προς τη μονάδα όσο η  $\bar{r}$  μεγαλώνει, που σημαίνει ότι οι θέσεις των σφαιρών είναι ανεξάρτητες αν είναι απομακρυσμένα. Για έναν κλασματικό όγκο μικρότερο από 40%, οι συναρτήσεις κατανομής ζεύγους είναι πρακτικά ίσες με τη μονάδα για διαζεύξεις ζεύγους μεγαλύτερες από πέντε διαμέτρους. Επομένως, παίρνοντας  $N=200$  είναι αρκετό για να προσομοιώσουμε τη συνάρτηση κατανομής ζεύγους. Στις προσομοιώσεις, επιστρατεύονται οι συνθήκες περιοδικών ορίων. Τα  $N$  σωματίδια που μας ενδιαφέρουν, τοποθετούνται μέσα σε ένα κεντρικό κελί και αυτό το κεντρικό κελί θεωρείται ότι περιβάλλεται από περιοδικές αναπαραστάσεις του ίδιου. Το κάθε κελί των

αναπαραστάσεων, περιέχει  $N$  σφαίρες με ακριβώς την ίδια γεωμετρική διάταξη όπως εκείνη του αρχικού κεντρικού κελιού.

## Η Τεχνική Metropolis Monte-Carlo

Χρησιμοποιούμε την τεχνική Metropolis και θεωρούμε ένα κυβικό κουτί που περιείχε  $N$  σφαίρες. Αρχικά, οι  $N$  σφαίρες τοποθετούνται τυχαία μέσα στο αρχικό κελί χωρίς επικάλυψη. Για να εισάγουμε νέες πραγματοποιήσεις, τα σωματίδια ανακατεύονται ως ακολούθως. Σε κάθε κύκλο το κάθε σωματίδιο υπόκειται σε τυχαία εκτόπιση μία φορά. Η αποδοχή της νέας του θέσεως εξαρτάται από το αν επικαλύπτει άλλη σφαίρα ή όχι. Η εκτόπιση είναι τυχαία και δεν ελέγχεται από κάποια διασωματιδιακή δύναμη εκτός από το ότι δεν μπορεί να διαπεράσει άλλα σωματίδια. Πρέπει να σημειώσουμε ότι η εκτόπιση των σφαιρών που εισάγεται στην προσομοίωση γίνεται με σκοπό τη δημιουργία νέων σχηματισμών και πραγματοποιήσεων. Δε σημαίνει ότι οι σφαίρες κινούνται φυσικά. Τα βήματα είναι ως ακολούθως.

Βήμα 1: θέτουμε έναν αρχικό σχηματισμό του συστήματος. Ο αρχικός σχηματισμός μπορεί να παραχθεί με τον προσδιορισμό των συντεταγμένων των σφαιρών μέσα στο κελί. Όλες οι συντεταγμένες των σφαιρών είναι σε κλίμακα  $[0, \ell]$ . Ο αρχικός σχηματισμός μπορεί να αποκτηθεί τοποθετώντας όλα τα σωματίδια σε μία περιοδική χωροταξική συνάρτηση στο κουτί.

Βήμα 2: αλλάζουμε το σχηματισμό του συστήματος με τυχαία εκτόπιση των σωματιδίων. Τα σωματίδια εκτοπίζονται διαδοχικά στην προσομοίωση. Η εκτόπιση ενός σωματιδίου σε μία νέα θέση δοκιμής καθορίζονται σύμφωνα με την ακόλουθη διαδικασία.

$$\begin{aligned}x &\rightarrow x + \Delta n_1 & y &\rightarrow y + \Delta n_2 & z &\rightarrow z + \Delta n_3\end{aligned}\tag{2.2.5}$$

όπου  $x$ ,  $y$  και  $z$  είναι οι συντεταγμένες των σφαιρών και  $\Delta$  είναι η μέγιστη εκτόπιση που επιτρέπεται σε κάθε κίνηση. Τα  $n_i$ ,  $i = 1, 2, 3$ , είναι ανεξάρτητα τυχαία νούμερα που κατανέμονται ομοιόμορφα στην κλίμακα  $[-\ell, \ell]$ . Έτσι, μετά από μία εκτόπιση, η συμπαγής σφαίρα είναι εξίσου πιθανό να βρίσκεται οπουδήποτε σε ένα μικρό κύβο πλευράς  $2\ell\Delta$ , σε ακτίνα γύρω από την αρχική του θέση. Ο τρόπος εκτόπισης μιας σφαίρας που δίνεται από την (2.2.5), πρέπει να ικανοποιεί τις συνθήκες περιοδικών ορίων. Αυτό σημαίνει ότι αν μια σφαίρα εκτοπιστεί πέρα από το κελί σε μία πλευρά κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης, στην πραγματικότητα επανέρχεται στο κελί από την αντίθετη πλευρά. Για παράδειγμα, αν το κέντρο μιας σφαίρας αλλάξει σε μία νέα θέση  $(x', y', z')$ ,

σε αυτό το βήμα, και αν  $x' > \ell$ , ή  $x' < 0$ , τότε η νέα του  $x$  συντεταγμένη θα είναι  $x' - \ell$ , ή  $x' + \ell$ , αντιστοίχως. Το ίδιο ισχύει και για τις  $y$ - και  $z$ - συντεταγμένες. Αν το  $\Delta$  είναι πολύ μικρό, οι εκτοπίσεις γίνονται συνήθως αποδεκτές. Αν το  $\Delta$  είναι πολύ μεγάλο, οι περισσότερες εκτοπίσεις θα απορριφθούν.

Βήμα 3: ελέγχουμε αν οι εκτοπίσεις γίνονται αποδεκτές. Είναι πιθανό ότι η νέα θέση των εκτοπισμένων συμπαγών σφαιρών μπορεί να υπερκαλύπτει μια από τις άλλες σφαίρες στο σύστημα. Αν όχι, δεχόμαστε την εκτόπιση και αναβαθμίζουμε τις συντεταγμένες της εκτοπισμένης σφαίρας. Αλλιώς, απορρίπτουμε τη μετατόπιση και επιστρέφουμε τη συμπαγή σφαίρα στην αρχική του θέση. Η τιμή της μέγιστης μετατόπισης  $\Delta$ , επηρεάζει το ποσοστό αποδοχής των νέων θέσεων. Παρόλο που ο έλεγχος της επικάλυψης των σφαιρών είναι άμεσος, πρέπει να δοθεί προσοχή σε περιπτώσεις που ένα ζεύγος σφαιρών δεν επικαλύπτει στο κεντρικό κουτί, αλλά εκεί όπου το ομοίωμα ενός από αυτά στο επόμενο κελί είναι μέσα στην απαγορευμένη περιοχή του άλλου.

Αναβαθμίζουμε τον αριθμό των σχηματισμών που δημιουργήθηκαν. Προσθέτουμε ένα στον αριθμό των σχηματισμών που καταμετρήθηκαν. Θα έπρεπε να δοθεί έμφαση στο ότι ακόμα και αν η εκτόπιση του σωματιδίου σε ένα συγκεκριμένο στάδιο του βήματος 2 δεν επιτρέπεται, ακόμα θεωρούμε ότι βρισκόμαστε σε ένα νέο σχηματισμό. Ένας νέος σχηματισμός σημαίνει ότι κάθε συμπαγής σφαίρα πρέπει να υπόκειται σε μία μόνο προσπάθεια εκτόπισης ακόμα και αν κάποιες από τις εκτοπίσεις δεν επιτρέπονται. Πρέπει να διαφοροποιήσουμε τους σχηματισμούς από τις πραγματοποιήσεις. Κάθε  $N_c$  σχηματισμός ονομάζεται πραγματοποίηση. Ωστόσο ανάμεσα σε δύο πραγματοποιήσεις, κάθε συμπαγής σφαίρα έχει εκτοπιστεί κατά μέσο όρο  $N_c A_c$  φορές όπου  $A_c$  το ποσοστό αποδοχής.

Βήμα 5: μετράμε την συχνότητα που έγιναν διαφορετικές διαξέυξεις ζεύγους. Για κάθε σχηματισμό που προσεγγίστηκε έτσι, θα μετρήσουμε το  $C_{ij}''(r)$ , τον αριθμό των συμπαγών σφαιρών μεγέθους  $\alpha_j$  που τα κέντρα τους εδρεύουν σε ένα σφαιρικό περίβλημα με εσωτερική ακτίνα  $r$  και εξώτερη ακτίνα  $r+dr$ , όπου η  $r$  μετράται από μια προσαρτημένη συμπαγής σφαίρας  $I$  μεγέθους  $\alpha_i$  κατά τη διάρκεια του κύκλου προσομοίωσης της πραγματοποίησης  $t$ . Οι δείκτες  $i$  και  $j$  είναι ενδεικτικοί των μεγεθών των σφαιρών, ο εκθέτης  $I$  είναι για τον προσδιορισμό των σφαιρών, και ο εκθέτης  $t$  είναι ο δείκτης της πραγματοποίησης. Αυτές οι ταξινομήσεις διεξάγονται για έναν αριθμό υποδιαίρέσεων του  $r$  ανάμεσα στο  $R_{ij}$  και  $5R_{ij}$ , όπου  $R_{ij} = \alpha_i + \alpha_j$ . Η πυκνότητα του σφαιρικού περιβλήματος

$dr$  θα είναι τότε το μικρότερο μήκος πάνω στο οποίο οι συναρτήσεις ζεύγους κατανομής επιλύονται.

Η παραπάνω διαδικασία επαναλαμβάνεται κατά ένα μεγάλο αριθμό φορών για να δημιουργήσει πολλές διαφορετικές πραγματοποιήσεις και να καταγράψει τη συχνότητα που θα συμβούν διαφορετικές διαζεύξεις ζεύγους. Έτσι, ο μέσος αριθμός των σωματιδίων μεγέθους  $\alpha_j$  που περιέχεται σε ένα σφαιρικό περίβλημα πυκνότητας  $dr$  σε μία απόσταση  $r$  από ένα σωματίδιο μεγέθους  $\alpha_i$  και συνολικά  $T$  πραγματοποιήσεις, μπορεί να εκφραστεί ως

$$\langle C_{ij}(r) \rangle = \frac{1}{T} \frac{1}{N_i} \sum_{t=1}^T \sum_{l=1}^{N_i} C_{ij}^{lt}(r) \quad (2.2.6)$$

Από την άλλη πλευρά, αν τα σωματίδια είναι εντελώς μη συσχετισμένα, ο μέσος αριθμός σφαιρών μεγέθους  $\alpha_j$  στο σφαιρικό περίβλημα που περιβάλλει μια σφαίρα μεγέθους  $\alpha_i$  σε μία απόσταση  $r$  μακριά, θα είναι

$$\langle C_{ij}(r) \rangle_{unc} = \frac{n_j(N_j - \delta_{ij})}{N_j} 4\pi r^2 dr \quad (2.2.7)$$

όπου unc σημαίνει μη συσχετισμένα,  $4\pi r^2 dr$  είναι ο όγκος του σφαιρικού περιβλήματος πυκνότητας  $dr$ , και  $\delta_{ij}$  είναι η συνάρτηση Kronecker delta που διορθώνει την αδυναμία της προσαρτημένης σφαίρας να είναι μέσα στο σφαιρικό περίβλημα. Οι συναρτήσεις ζεύγους κατανομής  $g_{ij}(r)$  στη συνέχεια υπολογίζονται από τη σχέση (2.2.6) και την (2.2.7) με τη βοήθεια της σχέσης

$$g_{ij}(r) = \frac{\langle C_{ij}(r) \rangle}{\langle C_{ij}(r) \rangle_{unc}} = \frac{N_j}{TN_i n_j (N_j - \delta_{ij}) (4\pi r^2 dr)} \sum_{t=1}^T \sum_{l=1}^{N_i} C_{ij}^{lt} \quad (2.2.8)$$

Γενικά, ένα ζεύγος σωματιδίων θεωρείται ως μη συσχετισμένο, όταν η διάζευξή τους είναι μεγαλύτερη από  $5R_{ij}$ , και οι τιμές των συναρτήσεων κατανομής ζεύγους  $g_{ij}(r)$  λαμβάνονται ως ίσες με τη μονάδα για  $r > 5R_{ij}$ . Οι συναρτήσεις κατανομής ζεύγους μηδενίζονται,  $g_{ij}(r) = 0$  για  $r < 5R_{ij}$ , χάρη στο χαρακτηριστικό των μακροσκοπικών σφαιρών να μην είναι διεισδύσιμες.

## Αριθμητικά Αποτελέσματα

Οι τεχνικές Monte-Carlo χρησιμοποιούνται για να δημιουργήσουν τη τυχαία κατανομή των σωματιδίων πολλαπλών μεγεθών και να αποκτηθούν οι συναρτήσεις

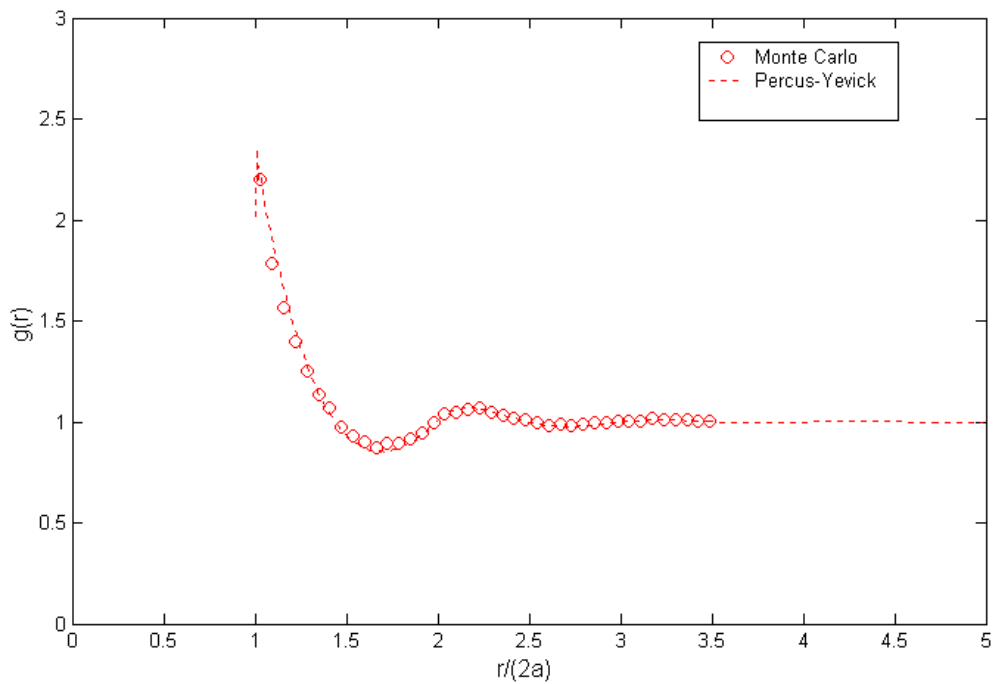


κατανομής ζεύγους  $g_{ij}(r)$  από τα δείγματα που εισήχθησαν από τον υπολογιστή. Τα αποτελέσματα των Monte-Carlo προσομοιώσεων των συναρτήσεων κατανομής ζεύγους συγκρίνονται με εκείνα που πήραμε με τη προσέγγιση Percus–Yevick. Για τα πειραματικά αποτελέσματα του υπολογιστή που δείχνονται πιο κάτω, μια μονάδα κελιού,  $\ell=1$ , που περιείχε σφαίρες με διαφορετικά μεγέθη επιλέχθηκε σαν πρότυπο σύστημα. Η επιλογή της μέγιστης εκτόπισης  $\Delta$  στην τεχνική Metropolis για κάθε μετακίνηση θα επηρεάσει το ποσοστό των αποδεκτών εκτοπίσεων. Αν η  $\Delta$  είναι υπερβολικά μεγάλη, σχεδόν όλες οι εκτοπίσεις θα απορριφθούν, έτσι ώστε το σύνολο των πραγματοποιήσεων του συστήματος θα αποτελείται από σχεδόν τους ίδιους σχηματισμούς επαναλαμβανόμενους πολλές φορές και θα παρέχει πολύ λίγες νέες πληροφορίες σε κάθε βήμα. Από την άλλη πλευρά, αν η  $\Delta$  είναι υπερβολικά μικρή, η εκτόπιση μιας σφαίρας είναι πάντα αποδεκτή, αλλά ο σχηματισμός αλλάζει πολύ αργά και δίνει ανεπαρκή δειγματοληψία στο χώρο σχηματισμού.

Στο σχήμα 2.2.1 δείχνονται οι συναρτήσεις κατανομής ζεύγους για συστήματα με συμπαγής σφαίρες πανομοιότυπου μεγέθους για την περίπτωση:  $f_v=0.3$ ,  $N=200$ . Η συνάρτηση κατανομής ζεύγους  $g(r)$  είναι στο μέγιστό του στη διάζευξη ίση με μία διάμετρο της σφαίρας, που δείχνει ισχυρή πιθανότητα ότι τα σωματίδια θα συσσωματωθούν σε ένα πυκνό μέσο.

Οι παράμετροι που χρησιμοποιήσαμε είναι

- Αριθμός σφαιρών : 200
- Κλασματική ποσότητα : 0.3
- Μέγιστο εκτόπισμα : 0.35
- Αριθμός περασμάτων για κάθε πραγματοποίηση : 100
- Αριθμός πραγματοποιήσεων : 30



**Σχ. 2.2.1 Σύγκριση αποτελεσμάτων της Metropolis Monte-Carlo προσομοίωσης με την εξίσωση Percus-Yevick**

Η συνάρτηση κατανομής ζεύγους συμπεριφέρεται πιο ταλαντωτικά και έχει υψηλότερες κορυφές στην περίπτωση της μεγαλύτερης συγκέντρωσης σωματιδίων. Το αποτέλεσμα επίσης δείχνει ότι η συνάρτηση κατανομής ζεύγους τείνει ασύμπτωτα στη μονάδα καθώς η διασωματιδιακή απόσταση αυξάνει. Συγκρίνοντας τα αποτελέσματα PY με τις προσομοιώσεις Monte Carlo παρατηρούμε ότι είναι σε καλή συμφωνία.

## Κεφάλαιο 3

### Ενεργή διηλεκτρική σταθερά βασισμένη στη QCA\_CP

#### 3.1 Εισαγωγή

Υπάρχουν πολλοί τρόποι οι οποίοι επιτρέπουν την μελέτη της ενεργής διηλεκτρικής σταθεράς ενός μέσου που αποτελείται από μικρά διηλεκτρικά μόρια. Τα σφαιροειδή προβάλλουν ένα τρόπο για την κατασκευή ενός ομοαξονικού μέσου από μικρά μόρια. Η ενεργή διηλεκτρική σταθερά εξαρτάται από την μορφή, από την διηλεκτρική σταθερά των μορίων και από την κλασματική ποσότητα αλλά όχι από την συχνότητα. Τα αποτελέσματα συνοψίζονται παρακάτω.

#### 3.2 QCA\_CP

Ο τροποποιημένος τελεστής μετάπτωσης ικανοποιεί την εξίσωση

$$\bar{\bar{t}} = \bar{\bar{U}} + \bar{\bar{U}}E(\bar{\bar{G}})\bar{\bar{t}} \quad (3.2.1)$$

το  $E(\bar{\bar{G}})$  είναι ο μέσος όρος της συνάρτησης Green. Ο μέσος όρος της συνάρτησης Green ανταποκρίνεται από ένα ομοαξονικό μέσο με φασματική αναπαράσταση η οποία δίνεται από

$$\bar{\bar{G}}^{-1}(\bar{p}) = p^2 \bar{\bar{I}} - \bar{p}\bar{p} - k^2 \bar{\bar{\epsilon}}^{(eff)} \quad (3.2.2)$$

όπου

$$\bar{\bar{\epsilon}}^{(eff)} = \epsilon_a \bar{\bar{X}}\bar{\bar{X}} + \epsilon_a \bar{\bar{Y}}\bar{\bar{Y}} + \epsilon_c \bar{\bar{Z}}\bar{\bar{Z}}$$

η ομοαξονική συνάρτηση Green δίνεται από

$$\bar{\bar{G}}(\bar{r}, \bar{r}') = -\bar{\bar{K}}^2 \bar{\bar{N}}\delta(\bar{r} - \bar{r}') + \frac{i}{6\pi} \frac{\bar{\bar{K}}\bar{\bar{M}}}{\bar{\bar{K}}\bar{\bar{M}}} \quad (3.2.3)$$

όπου

$$\bar{\bar{K}} = k^2 \sqrt{\bar{\bar{\epsilon}}^{eff}} \quad (3.2.4)$$

τα M και N εξαρτώνται από τον λόγο του αξονικού και της κάθετης συνιστώσας της ενεργής διηλεκτρικής σταθεράς.

$$\alpha = \frac{\epsilon_c}{\epsilon_a} \quad (3.2.5)$$

Ο τροποποιημένος τελεστής μετάπτωσης σε χαμηλή συχνότητα είναι

$$\bar{\bar{t}}(\bar{p}, \bar{p}') = u\bar{\bar{t}}_0 \quad (3.2.6)$$

με

$$\bar{\bar{t}}_0 = \left[ \left( \frac{1}{k_s^2 - k^2} \bar{\bar{I}} + \bar{\bar{K}}^{-2} \bar{\bar{N}} \right) - \frac{i\mathbf{u}}{6\pi} \bar{\bar{K}} \bar{\bar{M}} \right]^{-1} \quad (3.2.7)$$

Κρατώντας τα πραγματικά και φανταστικά μέρη έχουμε

$$\bar{\bar{t}}_0 = 3\bar{\bar{K}}^2 \bar{\bar{\eta}} \left[ \bar{\bar{I}} + \frac{i\mathbf{u}}{2\pi} \bar{\bar{K}}^2 \bar{\bar{\eta}} \right] \quad (3.2.8)$$

όπου

$$\bar{\bar{\eta}}_0 = \frac{1}{3} (k_s^2 - k^2) \left[ \bar{\bar{K}}^2 + (k_s^2 - k^2) \bar{\bar{N}} \right]^{-1} \quad (3.2.9)$$

από [4] παίρνουμε

$$\bar{\bar{C}}_0 = \left\{ \bar{\bar{I}} - f_v \bar{\bar{t}}_0 \left[ \bar{\bar{K}}^{-2} \bar{\bar{N}} + \bar{\bar{K}} \bar{\bar{M}} \frac{i}{6\pi} \mathbf{H}_0 \right] \right\}^{-1} \mathbf{u} \bar{\bar{t}}_0 \quad (3.2.10)$$

Κρατώντας τα πραγματικά και φανταστικά μέρη παίρνουμε

$$\bar{\bar{C}}_0 = 3\mathbf{v} \bar{\bar{K}}^2 \bar{\bar{D}} \bar{\bar{\eta}} \left\{ \bar{\bar{I}} + i \bar{\bar{D}} \bar{\bar{\eta}} \bar{\bar{M}} \bar{\bar{K}}^3 \frac{\mathbf{v}}{2\pi} \mathbf{S}_0 \right\} \quad (3.2.11)$$

όπου

$$\bar{\bar{D}} = \left[ \bar{\bar{I}} - 3f_v \bar{\bar{\eta}} \bar{\bar{N}} \right]^{-1} \quad (3.2.12)$$

Παίρνοντας μια σχετική διηλεκτρική σταθερά

$$\begin{aligned} \bar{\bar{\epsilon}}^{(\text{eff})} &= \bar{\bar{I}} + \frac{1}{k^2} \mathbf{n}_0 \bar{\bar{C}}_0 \\ &= \left\{ \bar{\bar{I}} + 3f_v \bar{\bar{\epsilon}}^{(\text{eff})} \bar{\bar{D}} \bar{\bar{\eta}} \right\} + i \frac{3f_v k^3 \mathbf{v}}{2\pi} (\bar{\bar{\epsilon}}^{(\text{eff})})^{5/2} \left( \bar{\bar{D}} \bar{\bar{\eta}} \right)^2 \bar{\bar{M}} \mathbf{S}_0 \end{aligned} \quad (3.2.13)$$

και έστω ότι  $\bar{\bar{\epsilon}}^{(\text{eff})} = \bar{\bar{\epsilon}}^{(\text{eff})\prime} + i\bar{\bar{\epsilon}}^{(\text{eff})\prime\prime}$ . Τότε

$$\bar{\bar{\epsilon}}_{\mu}^{(\text{eff})\prime} = 1 + \frac{\epsilon_{\mu}^{\text{eff}} f_v (\epsilon_s - 1)}{\bar{\bar{\epsilon}}_{\mu}^{(\text{eff})} + (1 - f_v)(\epsilon_s - 1) N_{\mu}} \quad (3.2.14)$$

$$\bar{\bar{\epsilon}}_{\mu}^{(\text{eff})\prime\prime} = \frac{k^3 \mathbf{v}}{6\pi} \mathbf{S}_0 M_{\mu} (\bar{\bar{\epsilon}}_{\mu}^{(\text{eff})})^{5/2} \frac{f_v (\epsilon_s - 1)^2}{[\bar{\bar{\epsilon}}_{\mu}^{(\text{eff})} + (1 - f_v)(\epsilon_s - 1) N_{\mu}]^2} \quad (3.2.15)$$

όπου  $\mu=\alpha, \epsilon$ . Οι εξισώσεις (3.2.14) και (3.2.15) προβάλλουν ένα σύνολο συνδεδεμένων μη γραμμικών εξισώσεων με τις οποίες λύνονται τα άγνωστα  $\epsilon_{\alpha}^{(eff)}$  και  $\epsilon_{\epsilon}^{(eff)}$ . Αφού  $\epsilon_{\mu}^{(eff)'} \gg \epsilon_{\mu}^{(eff)''}$  μπορούμε να θέσουμε  $\epsilon_{\mu}^{(eff)} = \epsilon_{\mu}^{(eff)'}$  οπότε

$$\epsilon_{\mu}^{(eff)'} = 1 + \frac{\epsilon_{\mu}^{(eff)'} f_v (\epsilon_s - 1)}{\epsilon_{\mu}^{(eff)'} + (1 - f_v)(\epsilon_s - 1)N_{\mu}} \quad (3.2.16)$$

$$\epsilon_{\mu}^{(eff)''} = \frac{k^3 v}{6\pi} S_0 M_{\mu} (\epsilon_{\mu}^{(eff)'})^{5/2} \frac{f_v (\epsilon_s - 1)^2}{[\epsilon_{\mu}^{(eff)'} + (1 - f_v)(\epsilon_s - 1)N_{\mu}]^2} \quad (3.2.17)$$

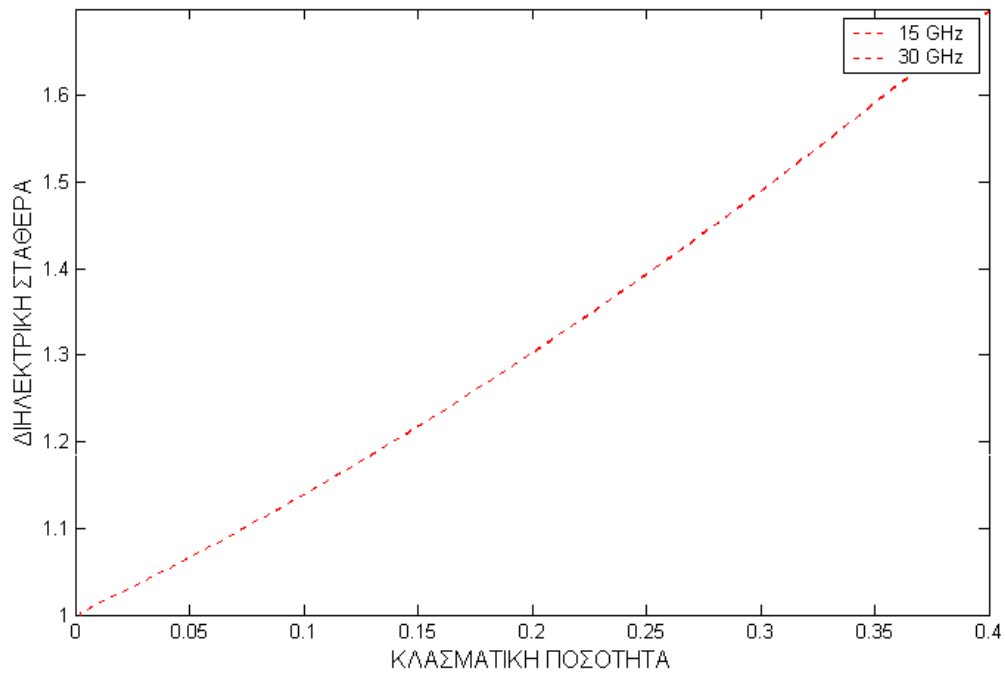
### 3.3 Αριθμητικά αποτελέσματα

Θεωρούμε τις απώλειες των σφαιροειδών με διηλεκτρική σταθερά  $\epsilon_s=3.2$ . Στο σχήμα 3.3.1 δείχνουμε την ενεργή διηλεκτρική σταθερά σαν μια συνάρτηση της κλασματικής ποσότητας.

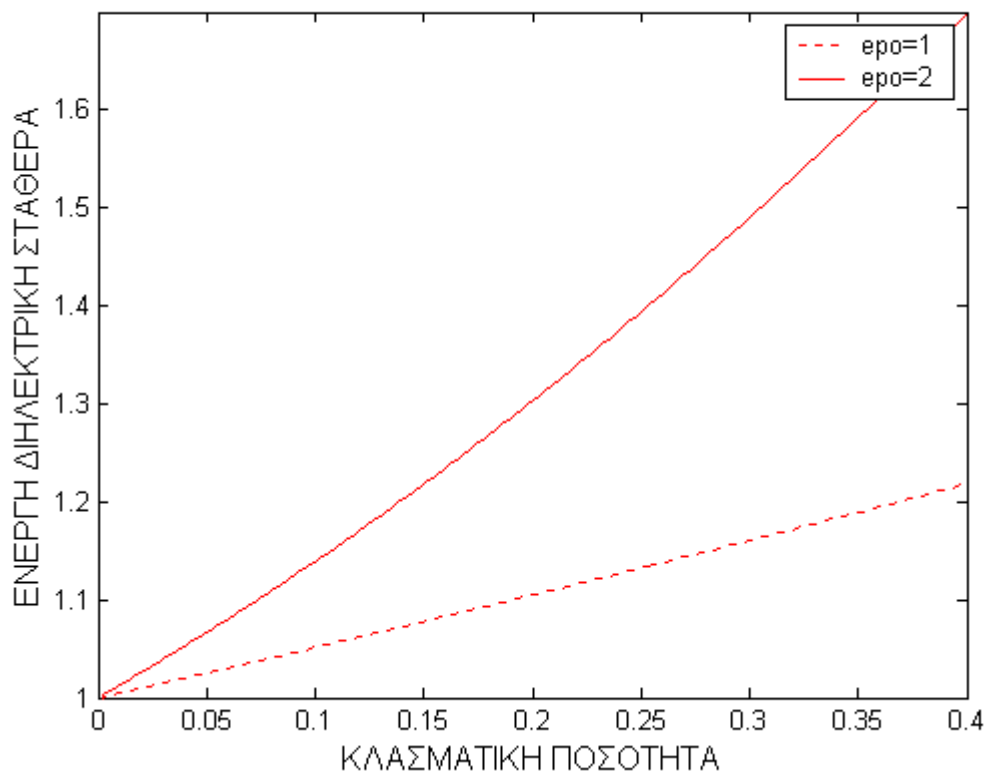
Οι παράμετροι που χρησιμοποιήσαμε είναι :

- Συχνότητα : 15 και 30 GHz
- Ενεργή διηλεκτρική σταθερά του υπόβαθρου : 1 και 2
- Ενεργή διηλεκτρική σταθερά του σκεδαστή : 3.2

Παρατηρούμε ότι σχετική ενεργή διηλεκτρική σταθερά αυξάνεται για  $f_v$  από 0 έως 4. Επιπλέον με την χρήση συνεχούς διανύσματος, η depolarization tensor αντιστοιχεί σε ένα λεπτό επιπεδοποιημένο σφαιροειδή. Γι' αυτό το λόγο η αξονική συνιστώσα καταπιέζεται όσον αφορά την κάθετη συνιστώσα. Επίσης ότι αλλάζοντας την συχνότητα, η διηλεκτρική σταθερά παραμένει ίδια. Η ενεργή διηλεκτρική σταθερά εξαρτάται από την μορφή, από την διηλεκτρική σταθερά των μορίων και από την κλασματική ποσότητα. Ενώ αλλάζοντας μια άλλη παράμετρο όπως την διηλεκτρική σταθερά των μορίων η ενεργή διηλεκτρική σταθερά αλλάζει. Σχ. 3.3.2



**Σχ. 3.3.1 ενεργή διηλεκτρική σταθερά σε συνάρτηση με την κλασματική ποσότητα.**



**Σχ. 3.3.2 ενεργή διηλεκτρική σταθερά σε συνάρτηση με την κλασματική ποσότητα**

## Κεφάλαιο 4

### Χαρακτηριστικά σκέδασης

#### 4.1 Εισαγωγή

Σε πολλές εφαρμογές το μέγεθος σωματιδίου δεν είναι μικρό σε σύγκριση με το μήκος κύματος έτσι ο τύπος χαμηλής συχνότητας δεν μπορεί να είναι εφαρμόσιμος. Η ανάπτυξη QCA για την μετρίαση του μεγέθους των μορίων, είναι η πιο κατάλληλη να τυποποιήσουμε το πρόβλημα σκέδασης σ'έναν πιο κομψό διαφορετικό τρόπο με τη χρήση των εξισώσεων σκέδασης Foldy-Lax με τους συντελεστές T-matrix. Για σφαιρικούς σκεδαστές οι συντελεστές T-matrix δίνουν τον τρόπο λύσης της σκέδασης, σε κάθε περίπτωση αυτή η τυποποίηση είναι γνωστή ως θεωρία QCA-Mie. Η θεωρία QCA-Mie έχει εφαρμοστεί σε διηλεκτρικές σφαίρες και σε επικαλυμμένες σφαίρες. Οι πιο πρόσφατες προορίζονται για τις φυσαλίδες. Συνοψίζουμε τα αποτελέσματα παρακάτω.

#### 4.2 Ο νόμος του Lorentz-Lorenz και το θεώρημα του Ewald-Oseen

Μελετάμε ένα προσπίπτων κύμα πάνω σε ένα σφαιρικό σκεδαστή μισού διαστήματος. Οι σφαιρικοί σκεδαστές μπορεί να είναι ετερογενείς. Π.χ. με πολυστρωματική δομή.

$$\bar{E}_{inc}(\bar{r}) = \bar{e}_i e^{i\bar{k}_i \bar{r}} \quad (4.2.1)$$

όπου

$$\bar{k}_i = k(\sin \theta_i \cos \varphi_i \bar{x} + \sin \theta_i \sin \varphi_i \bar{y} - \cos \theta_i \bar{z}) \quad (4.2.2)$$

Ένα μεταδιδόμενο πεδίο  $\langle \bar{E}_t \rangle$  διαδίδεται προς τα κάτω με διάνυσμα κύματος

$$\bar{K} = K(\sin \theta_t \cos \varphi_t \bar{x} + \sin \theta_t \sin \varphi_t \bar{y} - \cos \theta_t \bar{z}) \quad (4.2.3)$$

όπου  $\varphi_t = \varphi_i$  και  $K \sin \theta_t = k \sin \theta_i$ . Το αποτελεσματικό wavenumber  $K$  πρόκειται να καθοριστεί.

Ως αποτέλεσμα της σκέδασης, το τελικό πεδίο διέγερσης σε κάθε σκεδαστή είναι διαφορετικός από το προσπίπτων πεδίο. Οι Foldy-Lax εξισώσεις σκέδασης συσχετίζουν τα πεδία διέγερσης από όλους τους σκεδαστές. Στη διατύπωση T-matrix, τα πεδία διέγερσης διασπώνται σε όρους από σφαιρικά διανύσματα συνάρτησης κύματος. Η εφαρμογή QCA

στις Foldy-Lax εξισώσεις προκαλεί δύο σύνολα εξισώσεων για τους άγνωστους συντελεστές διέγερσης πεδίου  $Y_n^{(M)}$  και  $Y_n^{(N)}$ , όπου το  $n$  είναι ο σφαιρικός δείκτης κυμάτων του πολύπολου (για  $n=1$  δηλώνει δίπολο, το  $n=2$  δηλώνει τετράπολο κ.ο.κ.) και  $(M), (N)$  ορίζουν τις δυο πολωμένες καταστάσεις του σφαιρικού διανύσματος κυμάτων. Τα δυο ζεύγη εξισώσεων είναι γενικευμένες εκδόσεις του νόμου του Lorentz-Lorenz και του θεωρήματος του Ewald-Oseen παραγόμενες για σημείο διπόλου.

Ο νόμος του Lorentz-Lorenz είναι

$$Y_n^{(M)} = 4\pi n_0 \sum_{v=1}^{\infty} \sum_{p=1}^{\infty} S_p(K) \left\{ -T_v^{(M)} Y_v^{(M)} A_c(v, n, p) + T_v^{(N)} Y_v^{(N)} A_x(v, n, p) \right\} \quad (4.2.4)$$

$$Y_n^{(N)} = 4\pi n_0 \sum_{v=1}^{\infty} \sum_{p=1}^{\infty} S_p(K) \left\{ T_v^{(M)} Y_v^{(M)} A_x(v, n, p) - T_v^{(N)} Y_v^{(N)} A_c(v, n, p) \right\} \quad (4.2.5)$$

όπου  $n_0$  είναι ο βαθμός πυκνότητας των σκεδαστών

$$A_c(v, n, p) = \frac{(2v+1) n(n+1)}{v(v+1) (2n+1)} i^{v-n-p} \alpha(1, v|-1, n|p) a(v, n, p) \quad (4.2.6)$$

$$A_x(v, n, p) = \frac{(2v+1) n(n+1)}{v(v+1) (2n+1)} i^{v-n-p} \alpha(1, v|-1, n|p, p-1) b(v, n, p) \quad (4.2.7)$$

Ο νόμος του Lorentz-Lorenz δίνει ένα ομοιογενή σύστημα εξισώσεων για  $Y_n^{(M)}$  και  $Y_n^{(N)}$ . Μη μηδενικές λύσεις υπάρχουν μόνο όταν η ορίζουσα των πινάκων είναι μηδέν. Αυτό επιβάλλει μια συνθήκη στο  $K$  που ορίζει την σχέση σκέδασης και των χαρακτηριστικών κυμάτων στα ενεργά μέσα. Δυο κύρια χαρακτηριστικά χρειάζονται στις εξισώσεις (4.2.4) και (4.2.5). Το πρώτο είναι οι συντελεστές  $T_v^{(M)}$  και  $T_v^{(N)}$  του T-Matrix που χαρακτηρίζει την σκέδαση από ένα απλό σφαιρικό σκεδαστή. Το δεύτερο είναι η συνάρτηση  $S_p(K)$ , από τον συνδυασμό της κατανομής της συνάρτησης  $g(r)$  και γι' αυτό το λόγο ο συσχετισμός των θέσεων των σκεδαστών. Ωστόσο, ο νόμος Lorentz-Lorenz είναι ανεξάρτητος από τις προσπίπτουσες γωνίες ή την πόλωση.

Το πλάτος διέγερσης για τα χαρακτηριστικά κύματα μπορούμε να το πετύχουμε χρησιμοποιώντας το θεώρημα του Ewald-Oseen, το οποίο δίνεται από

$$-\frac{(K_z - k_{iz}) k_{iz} k}{2\pi} = -in_0 \sum_{v=1}^{\infty} T_v^{(M)} Y_v^{(M)} B_v^{(M)}(\theta_i, \theta_r) + in_0 \sum_{v=1}^{\infty} T_v^{(N)} Y_v^{(N)} B_v^{(N)}(\theta_i, \theta_r) \quad (4.2.8)$$

όπου



$$B_v^{(M)}(\theta_i, \theta_t) = \frac{2v+1}{v(v+1)} \frac{P_v^1(\cos(\theta_i - \theta_t))}{|\sin(\theta_i - \theta_t)|} \quad (4.2.9)$$

$$B_v^{(M)}(\theta_i, \theta_t) = \frac{2v+1}{v(v+1)} \left\{ \frac{\cos(\theta_i - \theta_t)}{|\sin(\theta_i - \theta_t)|} P_v^1(\cos(\theta_i - \theta_t)) + v(v+1) P_v(\cos(\theta_i - \theta_t)) \right\} \quad (4.2.10)$$

με  $P_v$  και  $P_v^1$  να είναι οι συναρτήσεις Legendre

### 4.3 Συσχετισμός σκέδασης για φυσαλίδες

Ο συσχετισμός σκέδασης για πυκνά μέσα από σφαιρικούς σκεδαστές καθορίζεται από τον νόμο του Lorentz-Lorenz. Σ' αυτή την παράγραφο επιλύουμε τις εξισώσεις (4.2.4) και (4.2.5) για bubbles σκεδαστές όπου χρησιμεύουν στο να μοντελοποιήσουν τον αφρό. Υποθέτουμε ότι οι σκεδαστές είναι μη διεισδυτικοί αλλά διαφορετικά μη αλληλεπιδραστικοί έτσι η συνάρτηση κατανομής ζεύγους Percus-Yevick για σκληρές σφαίρες μπορεί να χρησιμοποιηθεί. Τα πολύπολα περικόπτονται για  $N_{\max}=4$ .

Ο σκεδαστής bubble είναι μια ειδική περίπτωση μιας δυο διαδοχικών επιπέδων διηλεκτρικής σφαίρας. Τα στοιχεία T-matrix για μιας διηλεκτρικής σφαίρας δυο διαδοχικών επιπέδων είναι γνωστά. Έστω  $a$  να είναι η εξωτερική ακτίνα,  $k_a$  να είναι το wavenumber του εξωτερικού επιπέδου, το  $b$  να είναι η εξωτερική ακτίνα και το  $k_b$  να είναι το wavenumber του εσωτερικού επιπέδου.

$$T_n^{(M)} = \frac{[\rho j_n(\rho)]' [j_n(\zeta) + B_n y_n(\zeta)] - \{[\zeta j_n(\zeta)]' + B_n [\zeta y_n(\zeta)]\} j_n(\rho)}{[\rho h_n(\rho)]' [j_n(\zeta) + B_n y_n(\zeta)] - [\zeta j_n(\zeta)]' + B_n \{[\zeta y_n(\zeta)]\} h_n(\rho)} \quad (4.3.1)$$

$$T_n^{(N)} = - \frac{[\rho j_n(\rho)]' \zeta^2 [j_n(\zeta) + A_n y_n(\zeta)] - \{[\zeta j_n(\zeta)]' + B_n [\zeta y_n(\zeta)]\} \rho^2 j_n(\rho)}{[\rho h_n(\rho)]' \zeta^2 [j_n(\zeta) + A_n y_n(\zeta)] - \{[\zeta j_n(\zeta)]' + B_n [\zeta y_n(\zeta)]\} \rho^2 h_n(\rho)} \quad (4.3.2)$$

όπου

$$\rho = k_a a, \quad \zeta = k_a \alpha, \quad \xi = k_a b, \quad \eta = k_b b \quad (4.3.3)$$

Οι συναρτήσεις  $j_n$  και  $y_n$  είναι οι σφαιρικές συναρτήσεις Bessel και Neuman αντίστοιχα. Η  $[xf(x)]'$  δηλώνει την παράγωγο του  $xf(x)$

$$A_n = - \frac{[\xi j_n(\xi)]' \eta^2 j_n(\eta) - [\eta j_n(\eta)]' \xi^2 j_n(\xi)}{[\xi y_n(\xi)]' \eta^2 j_n(\eta) - [\eta j_n(\eta)]' \xi^2 y_n(\xi)} \quad (4.3.4)$$

$$B_n = - \frac{[\xi j_n(\xi)]' j_n(\eta) - [\eta j_n(\eta)]' j_n(\xi)}{[\xi y_n(\xi)]' j_n(\eta) - [\eta j_n(\eta)]' y_n(\xi)} \quad (4.3.5)$$

Για την ειδική περίπτωση των φουσαλίδων,  $b=\alpha-\delta$ ,  $k_a=k_s$  και  $k_b=k$ . Εφοδιάζουμε την QCA-Mie λύση η οποία είναι κατάλληλη για μεγάλα μόρια, είναι ενδιαφέρον να τη συγκρίνουμε με τα αποτελέσματα της χαμηλής συχνότητας QCA λύσης. Η προσέγγιση χαμηλής συχνότητας δίνει την ακόλουθη σχέση για τον ενεργό κυματικό αριθμό  $K$ .

$$K^2 = k^2 + \frac{3k^2 f_u \eta}{1 - f_u \eta} \left\{ 1 + i \frac{2k^3 \alpha^3 y}{3(1 - f_u \eta)} S_0 \right\} \quad (4.3.6)$$

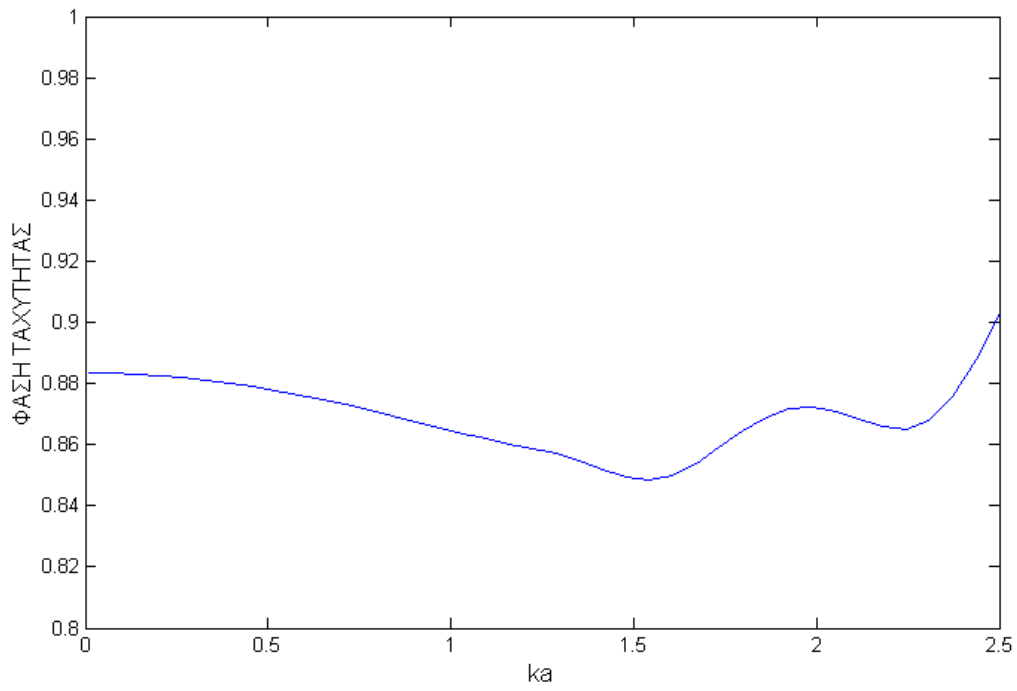
Όπου

$$\eta = \frac{(\epsilon_s - 1)(2\epsilon_s + 1)(1 - q^3)}{(\epsilon_s + 2)(2\epsilon_s + 1) - 2q^3(\epsilon_s - 1)^2} \quad (4.3.7)$$

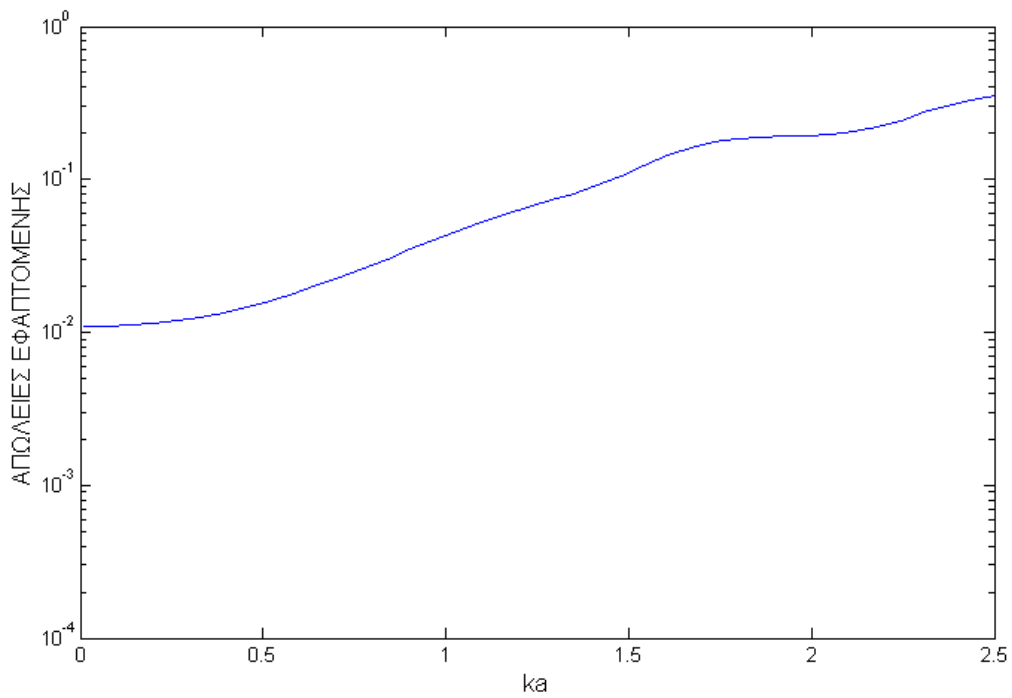
με  $q=1-(\delta/\alpha)$ .

Οι παράμετροι που χρησιμοποιήσαμε είναι:

- Συχνότητα : 37 GHz
- Διηλεκτρική σταθερά μορίου : 3.2
- Κλασματική ποσότητα : 0.2
- Μέγιστη περικοπή πολύπολων : 4



Σχ. 4.3.1 κανονικοποιημένη φάση ταχύτητας  $k/K_r$



Σχ. 4.3.2 απώλειες εφαιπτομένης  $2K_i/K_r$

Το  $K_r$  και  $K_i$  είναι το πραγματικό και το φανταστικό μέρος του  $K$  αντίστοιχα. Τα χαρακτηριστικά σκέδασης θα παρουσιαστούν σε όρους τις κανονικοποιημένης ταχύτητας φάσης  $u_p=k/K_r$  και απώλειες εφαιτομένης  $L=2K_i/K_r$ . Στα σχήματα 4.3.1 και 4.3.2 φαίνονται τα χαρακτηριστικά σκέδασης για σκεδαστές με χαμηλές απώλειες ( $\epsilon_s=3.2$ ,  $f_v=0.2$ ). Η πυκνότητα του φλοιού είναι  $\delta=0.03a$ . Τα χαμηλής συχνότητας αποτελέσματα συμφωνούν με την λύση QCA-Mie για  $ka \leq 0.5$  και πράγματι παράγουν μια καλή και λογική προσέγγιση μέχρι  $ka \approx 1$ . Ωστόσο, όσο το  $ka$  αυξάνεται, η λύση QCA-Mie εκδηλώνει ταλαντώσεις λόγω του ότι **συντονίζεται η σκέδαση**, το οποίο δεν συλλαμβάνεται στην προσέγγιση της χαμηλής συχνότητας.

## Βιβλιογραφία – Αναφορές

- [1] Δ.Π Χρυσουλίδης, Εισαγωγή Στη Θεωρία Σκέδασης, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Μάρτιος 1991-1992.
- [2] Chi On Ao, Electromagnetic Wave Theory By Discrete Random Media With Remote Sensing Applications, Ph.D thesis, Massachusetts Institute Of Technology, June 2001.
- [3] L. Tsang, J.A. Kong, K.H. Ding Scattering of Electromagnetic Waves, Volume II: Numerical Simulation, John Wiley & Sons, 2001.
- [4] Benjamin E. Barrowes, Chin On Ao, Fernando L. Teixeira, Jin A. Kong, Leung Tsang, Monte Carlo Simulation of Electromagnetic Wave Propagation in Dense Random Media with Dielectric Spheroids, Ieee Trans. Electron., Vol.83-C, No. 12 December 2000.
- [5] Chi On Ao, Analytical Approximation In Multiple Scattering Of Electromagnetic Waves By Aligned Dielectric Spheroid, J. Opt. Soc. Am. A., Vol. 19, No. 6.