

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS  
INSTITUTO DE FÍSICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

JONATHAN ALVES REBOUÇAS

**SÉRIES DIVERGENTES, APROXIMANTES DE PADÉ E  
ESPALHAMENTO DA LUZ**

Maceió

2023

JONATHAN ALVES REBOUÇAS

**SÉRIES DIVERGENTES, APROXIMANTES DE PADÉ E  
ESPALHAMENTO DA LUZ**

Tese de doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Alagoas, como requisito para obtenção do grau de Doutor em Física.

Orientador: Prof. Dr. Paulo César Aguiar  
Brandão Filho

Maceió

2023

**Catálogo na fonte**  
**Universidade Federal de Alagoas**  
**Biblioteca Central**  
**Divisão de Tratamento Técnico**

Bibliotecária: Taciana Sousa dos Santos – CRB-4 – 2062

R292s Rebouças, Jonathan Alves.  
Séries divergentes, aproximantes de Padé e espalhamento da luz /  
Jonathan Alves Rebouças. – 2023.  
[130] f. : il. color.

Orientador: Paulo César Aguiar Brandão Filho.  
Tese (Doutorado em Física) – Universidade Federal de Alagoas.  
Instituto de Física. Maceió, 2023.

Bibliografia: f. 96-105.  
Apêndices: f. 107-[130].

1. Luz – Espalhamento. 2. Série de Born (Espalhamento). 3. Aproximantes de Padé. I. Título.

CDU: 535.3

## PARECER DA BANCA EXAMINADORA DE DEFESA DE TESE DE DOUTORADO

“Séries divergentes, aproximantes de Padé e espalhamento da luz”

por

Jonathan Alves Rebouças

A Banca Examinadora composta pelos professores Paulo César Aguiar Brandão Filho (orientador e presidente da banca), do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas; Guilherme Martins Alves de Almeida, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas; Solange Bessa Cavalcanti, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas; Felipe Arruda de Araujo Pinheiro, da Universidade Federal do Rio de Janeiro e Danilo Gomes Pires, da Duke University, consideram o candidato **aprovado com conceito “ A ”**.

Maceió, 31 de março de 2023.

Documento assinado digitalmente



PAULO CESAR AGUIAR BRANDAO FILHO  
Data: 03/04/2023 08:15:54-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Paulo César Aguiar Brandão Filho

Documento assinado digitalmente



GUILHERME MARTINS ALVES DE ALMEIDA  
Data: 03/04/2023 08:51:59-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Guilherme Martins Alves de Almeida

Documento assinado digitalmente



SOLANGE BESSA CAVALCANTI  
Data: 04/04/2023 13:45:49-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Solange Bessa Cavalcanti

Documento assinado digitalmente



FELIPE ARRUDA DE ARAUJO PINHEIRO  
Data: 03/04/2023 12:50:55-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Felipe Arruda de Araujo Pinheiro

Documento assinado digitalmente



DANILO GOMES PIRES  
Data: 03/04/2023 11:37:47-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Danilo Gomes Pires

*Dedico este trabalho ao meu pai, que enquanto vivo sempre sonhou em "ter um filho  
Doutor".*

## **Agradecimentos**

Agradeço, inicialmente, à minha esposa Soraia, grande incentivadora de sonhos e projetos. Também agradeço aos meus filhos que, mesmo ainda muito pequenos, sempre demonstraram compreensão às várias vezes que tivemos que mudar radicalmente o curso de nossas vidas. Ao meu orientador, prof. Dr. Paulo Brandão, pela paciência e serenidade durante o período que trabalhamos juntos. À profa. Dra. Solange Bessa, pelo entusiasmo e valiosos ensinamentos. À sala 04, pelas ajudas constantes nas dificuldades encontradas ao longo dessa caminhada. À FAPEAL, pela bolsa, que mesmo chegando no último ano de curso, foi fundamental para a conclusão da pesquisa. Ao Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, pela oportunidade. Por fim, agradeço ao Instituto Federal do Ceará pela possibilidade da realização de um sonho antigo.

*“It is sometimes quite mysterious how well this can work”*  
*Press, Teukolsky, Vetterling e Flannery, **Numerical recipes in C***

## RESUMO

O espalhamento de luz é um fenômeno físico muito importante quando o assunto é o estudo da interação radiação-matéria. Tal fenômeno pode ser abordado tanto para descobrir padrões de espalhamento de certos materiais, como a determinação da estrutura cristalina utilizando raios-X, quanto para produzir materiais com características específicas de espalhamento que produzam aplicações úteis, como os metamateriais. Do ponto de vista mais formal da teoria, as diversas equações nem sempre oferecem soluções analíticas e são, na maioria dos casos, bem intratáveis. Portanto, é comum recorrer a métodos de aproximação quando buscamos resolver problemas de espalhamento. Dentre eles, destaca-se o método perturbativo, que consiste em assumir que o campo espalhado pode ser escrito como uma série de potências infinita. O problema é então substituído por vários outros menores, presumivelmente mais tratáveis, que permitem encontrar soluções aproximadas para uma série de casos de interesse físico. A série de Born é a mais comumente utilizada para representar o campo espalhado nesses problemas. Para espalhamentos em que a luz interage fracamente com o material (espalhamento fraco), o truncamento dessa série infinita no primeiro termo com potência não nula (primeira aproximação de Born) já representa uma boa aproximação da solução do problema. Todavia, para espalhamentos onde a luz interage fortemente com o material (espalhamento forte), observamos que a primeira aproximação de Born falha em descrever o resultado. Essa fragilidade da aproximação de Born ocorre tanto em materiais hermitianos quanto não-hermitianos, sendo, algumas vezes, mais acentuado nesses últimos. Segue daí a necessidade de buscarmos métodos aproximativos que forneçam bons resultados tanto para espalhamentos fracos quanto para espalhamentos fortes, bem como para qualquer tipo de material. Os aproximantes de Padé surgem como uma ferramenta promissora para esse fim, uma vez que usualmente geram regiões de convergência maiores quando comparadas com a respectiva série de Born. Neste trabalho, aplicamos os aproximantes de Padé para uma série de problemas de interesse físico. Para certas escolhas de parâmetros, a substituição da solução analítica pela série de Born tende a divergir. A partir da análise realizada verificamos que os aproximantes de Padé são uma ferramenta extremamente útil para descrever o espalhamento de luz tanto em regimes fracos quanto em regimes fortes, bem como em materiais não-hermitianos.

**Palavras-chave:** Série de Born. Aproximante de Padé. Espalhamento de luz. Material Não-Hermitiano.

## ABSTRACT

Light scattering is a very important physical phenomenon when it comes to the study of radiation-matter interaction. This phenomenon can be approached to discover scattering patterns of certain materials, such as determining crystal structures using X-rays, or to produce materials with specific scattering characteristics that result in useful applications, such as metamaterials. From a more formal theoretical perspective, the various equations do not always offer analytical solutions and are, in most cases, quite intractable. Therefore, it is common to resort to approximation methods when seeking to solve scattering problems. Among them, the perturbative methods stands out, which consists of assuming that the scattered field can be written as an infinite power series. The problem is then replaced by several smaller ones, presumably more manageable, which allow finding approximate solutions for a series of physically interesting cases. The Born series is the most commonly used to represent the scattered field in these problems. For scatterings in which light interacts weakly with the material (weak scattering), truncating this infinite series at the first non-zero power term (first Born approximation) already represents a good approximation of the problem solution. However, for scatterings where light interacts strongly with the material (strong scattering), we observe that the first Born approximation fails to describe the result. This fragility of the Born approximation occurs in both Hermitian and non-Hermitian materials, sometimes being more pronounced in the latter. Hence, the need to seek approximate methods that provide good results for both weak and strong scatterings, as well as for any type of material. Padé approximants emerge as a promising tool for this purpose since they usually generate larger convergence regions when compared to the respective Born series. In this work, we apply Padé approximants to a series of physically interesting problems. For certain parameter choices, replacing the analytical solution with the Born series tends to diverge. From the analysis performed, we verify that Padé approximants are an extremely useful tool for describing light scattering in both weak and strong regimes, as well as in non-Hermitian materials.

**Palavras-chave:** Born series. Padé approximant. Light scattering. Non-hermitian material.

## LISTA DE FIGURAS

<p>Figura 1 – Curvas de <math>f(x)</math> (linha sólida preta), <math>P_1^0(x)</math> (linha pontilhada), <math>P_2^1(x)</math> (linha tracejada preta), <math>P_1^1(x)</math> (linha ponto-tracejada), <math>P_2^2(x)</math> (linha tracejada cinza) em função de <math>x</math>. . . . .</p>	31
<p>Figura 2 – Curvas de <math>e^{-x}</math> (linha sólida preta), (a) <math>S_3(x)</math> (linha pontilhada), <math>S_5(x)</math> (linha tracejada), <math>S_7(x)</math> (linha ponto-tracejada), <math>S_{15}(x)</math> (linha tracejada cinza), (b) <math>P_1^1(x)</math> (linha pontilhada), <math>P_2^2(x)</math> (linha tracejada preta) e <math>P_3^3(x)</math> (linha tracejada) em função de <math>x</math>. . . . .</p>	34
<p>Figura 3 – Geometria de espalhamento. A onda plana incidente é caracterizada pelo vetor de onda <math>\mathbf{k}</math> que faz um ângulo <math>\theta</math> com a interface localizada em <math>z = 0</math>. A componente paralela <math>k_x</math> à interface do dielétrico é dada por <math>k_x = -k \sin \theta</math>. . . . .</p>	43
<p>Figura 4 – Interpretação diagramática da série de Born para um campo <math>\psi</math> sob a ação de um potencial <math>V</math>. O propagador(função de Green) é representado pela letra <math>g</math>. . . . .</p>	46
<p>Figura 5 – Amplitudes da transmissão e reflexão para um material homogêneo <math>\xi(z) = b</math> como função de (a-c) <math>kL</math>, para <math>b = 4</math> e (d-f) <math>b</math>, para <math>kL = 1</math>. A linha preta contínua é a solução exata (módulo quadrado) para a amplitude transmitida e a linha cinza contínua é a solução exata para a amplitude quadrática refletida. As linhas tracejadas (ponto-tracejadas) são os aproximantes de Padé para as amplitudes transmitidas (refletidas) (a, d) <math> t_1^1 ^2</math> e <math> r_1^1 ^2</math>, (b, e) <math> t_3^3 ^2</math> e <math> r_3^3 ^2</math>, (c, f) <math> t_5^5 ^2</math> and <math> r_5^5 ^2</math>. Parâmetros usados: <math>\alpha = 1</math> e <math>\theta = 0</math>. . . . .</p>	51
<p>Figura 6 – Amplitudes de transmissão e reflexão para um material homogêneo com (a-c) <math>\xi(z) = 4 + i</math> e (d-f) <math>\xi(z) = 4 - i</math> como função de <math>kL</math>. A linha preta contínua é a solução exata (módulo quadrado) para a amplitude transmitida e a linha cinza contínua é a solução exata (módulo quadrado) para a amplitude refletida. As linhas tracejadas (ponto-tracejadas) são os aproximantes de Padé para as amplitudes transmitidas (refletidas). (a, d) <math> t_1^1 ^2</math> e <math> r_1^1 ^2</math>, (b, c) <math> t_3^3 ^2</math> e <math> r_3^3 ^2</math> e (c, f) <math> t_5^5 ^2</math> and <math> r_5^5 ^2</math>. Parâmetros usados: <math>\theta = 0</math> e <math>\alpha = 1</math>. . . . .</p>	54

Figura 7 – Amplitudes das somas parciais para transmissão e reflexão para um material homogêneo com  $\xi(z) = 4$  como função de  $kL$ . A linha preta contínua é o módulo quadrado da soma parcial dos dois primeiros termos da série de Born para a (a) transmissão e (b) reflexão. A linha cinza contínua é o módulo quadrado da soma parcial dos três primeiros termos da série de Born para a (a) transmissão e (b) reflexão. As linhas tracejadas (ponto-tracejadas) são os módulos quadrados das somas parciais dos quatro (cinco) primeiros termos da série de Born para a (a) transmissão e (b) reflexão. Parâmetros usados:  $\theta = 0$  e  $\alpha = 1$  . . . . . 55

Figura 8 – Amplitudes de transmissão e reflexão para um material linear com  $\xi(z) = 1 + gz$  como função de (a-c)  $kL$ , com  $g = 4$  e  $\theta = 0$  e de (d-f)  $g/k$ , com  $kL = 1$  e  $\theta = \pi/4$ . A linha preta contínua e a solução exata (módulo quadrado) para a amplitude transmitida e a linha contínua cinza é a solução exata (módulo quadrado) da amplitude refletida. As linhas tracejadas (ponto-tracejadas) são os aproximantes de Padé para as amplitudes transmitidas (refletidas). (a, d)  $|t_1^1|^2$  e  $|r_1^1|^2$ , (b, f)  $|t_3^3|^2$  e  $|r_3^3|^2$ , (c)  $|t_6^6|^2$  e  $|r_6^6|^2$  e (e)  $|t_2^2|^2$  e  $|r_2^2|^2$ . Parâmetros usados:  $\alpha = 1$ . . . . . 57

Figura 9 – Coeficiente de transmissão ( $T$ ) (painel esquerdo) e de reflexão à esquerda ( $R_L$ ) (painel direito) para um material periódico com  $\xi(z) = be^{idz}$  como função de  $\theta$ . Parâmetros usados:  $\alpha = 1$ ,  $d = \frac{2\pi}{0.42}$ ,  $k = \frac{2\pi\sqrt{2.4}}{0.633}$ ,  $b = 0.02$  e  $L = 8.4$  . . . . . 59

Figura 10 – Amplitudes transmitidas e refletidas dos aproximantes de Padé para um material periódico com  $\xi(z) = be^{idz}$  como função de  $\theta$ . (a)  $|t_2^2|^2$ , (b)  $|r_2^2|^2$ , (c)  $|t_4^4|^2$  e (d)  $|r_4^4|^2$ . Parâmetros usados:  $\alpha = 1$ ,  $d = \frac{2\pi}{0.42}$ ,  $k = \frac{2\pi\sqrt{2.4}}{0.633}$  (a, b)  $b = 0.02$ ,  $L = 8.4$ , (c,d)  $b = 1$  e  $L = 1.68$ . . . . . 61

- Figura 11 – Amplitudes transmitidas e refletidas para o material não-homogêneo  $\xi(z) = \Gamma z + \sigma \cos(dz)$  como função de (a-c)  $kL$ , com  $\sigma = 2$ ,  $\theta = 0$ , (d-f)  $\sigma$ ,  $kL = 1/2$  e  $\theta = \pi/4$ . As linhas contínuas pretas (cinzas) são os aproximantes de Padé para transmissão  $|t_N^N|^2$  (reflexão  $|r_N^N|^2$ ). A linha tracejada é a energia total. (a) e (d)  $N = 1$  (b) e (e)  $N = 2$  e (c) e (f)  $N = 3$ . Parâmetros usados em todos os gráficos:  $\alpha = 1$ ,  $d = 50$  e  $\Gamma = 20$ . As séries de Born correspondentes divergem para este conjunto de parâmetros. A linha fina contínua preta marca a unidade. . . . . 63
- Figura 12 – Sistema espalhador. Uma onda plana monocromática de frequência  $\omega$  viajando na direção de  $\hat{a}$ , interage com um espalhador composto por duas partículas com ganho e perda (dipolo  $\mathcal{PT}$ -simétrico). A posição da partícula com perda(ganho) é  $+\mathbf{r}_0$  ( $-\mathbf{r}_0$ ). . . . . 68
- Figura 13 – Amplitude do campo espalhado como função de  $\sigma$ . Primeira aproximação de Born (linha tracejada)  $|S_1(\mathbf{r})|$ , soma dos cinco (linha pontilhada) e dos trinta (linha sólida cinza) primeiros termos da série,  $|S_5(\mathbf{r})|$  e  $|S_{30}(\mathbf{r})|$ , respectivamente, aproximantes de Padé de 1<sup>a</sup>, 2<sup>a</sup> e 3<sup>a</sup> ordem (linha preta sólida),  $|\tilde{P}_N^N(\mathbf{r})|$  ( $N = 1, 2, 3$ ), e a solução aproximada  $|\tilde{u}_s(\mathbf{r})|$ . As últimas quatro linhas são indistinguíveis na escala utilizada. Parâmetros utilizados:  $\theta = \frac{\pi}{2}$ ,  $\phi = 0$ ,  $k = 1$ ,  $x_0 = \frac{1}{2}$  e  $\gamma = 0$ . . . . . 74
- Figura 14 – Amplitude do campo espalhado como função de  $\theta$ . Primeira aproximação de Born (linha tracejada)  $|S_1(\mathbf{r})|$ , soma dos dois (linha pontilhada) e dos três (linha sólida cinza) primeiros termos da série de Born,  $|S_2(\mathbf{r})|$  e  $|S_3(\mathbf{r})|$ , respectivamente, aproximantes de Padé de 1<sup>a</sup>, 2<sup>a</sup> e 3<sup>a</sup> ordem (linha preta sólida),  $|\tilde{P}_N^N(\mathbf{r})|$  ( $N = 1, 2, 3$ ) e a solução aproximada  $|\tilde{u}_s(\mathbf{r})|$ . As últimas quatro linhas são indistinguíveis para a escala adotada. Parâmetro utilizado:  $\phi = 0$ ,  $k = 1$ ,  $x_0 = \frac{1}{2}$ ,  $\sigma = 5$  e  $\gamma = 0$ . . . . . 78
- Figura 15 – (a) Mesmo que na Figura 13 com  $\gamma = 1$  e (b)  $|\tilde{u}_s(\mathbf{r})|$ ,  $|S_1(\mathbf{r})|$ ,  $|S_5(\mathbf{r})|$ ,  $|S_{30}(\mathbf{r})|$ ,  $|\tilde{P}_1^1(\mathbf{r})|$  e  $|\tilde{P}_N^N(\mathbf{r})|$  ( $N = 2, 3$ ) como função de  $\gamma$  com  $\sigma = 1$ . Parâmetros utilizados:  $\theta = \frac{\pi}{2}$ ,  $\phi = 0$ ,  $k = 1$  e  $x_0 = \frac{1}{2}$ . As curvas de  $|\tilde{P}_2^2(\mathbf{r})|$  e  $|\tilde{P}_3^3(\mathbf{r})|$  são indistinguíveis da linha que representa a solução aproximada. . . . . 80

Figura 16 – (a) Mesmo que na Figura 14 com $\sigma = 5$ , $\gamma = 1$ e (b) $\gamma = 5$ . Para $ \tilde{u}_s(\mathbf{r}) $ , $ S_1(\mathbf{r}) $ , $ S_2(\mathbf{r}) $ , $ S_3(\mathbf{r}) $ , $ \tilde{P}_1^1(\mathbf{r}) $ e $ \tilde{P}_N^N(\mathbf{r}) $ ( $N = 2, 3$ ) como função de $\theta$ . Parâmetros utilizados: $\phi = 0$ , $k = 1$ e $x_0 = \frac{1}{2}$ . As curvas de $ \tilde{P}_2^2(\mathbf{r}) $ e $ \tilde{P}_3^3(\mathbf{r}) $ são indistinguíveis da linha que representa a solução aproximada.	85
Figura 17 – Ilustração do processo produção de um $\mathcal{PT}$ -CPA laser a partir de um material $\mathcal{PT}$ simétrico.	88
Figura 18 – Placa de tamanho $L$ com incidência por ambos os lados.	89
Figura 19 – Resultados de $1/ t_L(kL) $ para $\xi(z) = 4$ no plano complexo de $kL$ .	93
Figura 20 – Resultados de $1/ t_L(kL) $ para $\xi(z) = 4 - i$ no plano complexo de $kL$ .	93
Figura 21 – Resultados de $1/ t_L(kL) $ para $\xi(z) = 4 + i$ no plano complexo de $kL$ .	93
Figura 22 – Resultados de $1/ t_L(kL) $ para $\xi(z) = 1 + gz$ , com $g = 4$ , no plano complexo de $kL$ .	95
Figura 23 – Resultados de (a) $1/ t_1^1(kL) $ , (b) $1/ t_2^2(kL) $ (c) $1/ t_3^3(kL) $ e (d) $1/ t_4^4(kL) $ para $\xi(z) = 4$ no plano complexo de $kL$ .	112
Figura 24 – Resultados de (a) $1/ t_1^1(kL) $ , (b) $1/ t_2^2(kL) $ (c) $1/ t_3^3(kL) $ e (d) $1/ t_4^4(kL) $ para $\xi(z) = 4 + i$ no plano complexo de $kL$ .	113
Figura 25 – Resultados de (a) $1/ t_1^1(kL) $ , (b) $1/ t_2^2(kL) $ (c) $1/ t_3^3(kL) $ e (d) $1/ t_4^4(kL) $ para $\xi(z) = 4 - i$ no plano complexo de $kL$ .	114
Figura 26 – Resultados de (a) $1/ t_1^1(kL) $ , (b) $1/ t_2^2(kL) $ (c) $1/ t_3^3(kL) $ e (d) $1/ t_4^4(kL) $ para $\xi(z) = 1 + gz$ , com $g = 4$ , no plano complexo de $kL$ .	115

## Lista de abreviaturas e siglas

c.d. *campo distante.*

CPA *Coherent Perfect Absorber.*

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	16
1.1	<i>Estrutura da tese</i>	19
<b>2</b>	<b>OS APROXIMANTES DE PADÉ</b>	21
2.1	<i>Contextualização histórica</i>	21
2.2	<i>Os aproximantes de Padé e as séries de potências</i>	23
2.2.1	Série de Taylor de $f(x) = \frac{1}{(1-x)^2}$	23
2.2.2	Definição dos aproximantes de Padé	24
2.2.3	Aproximantes de Padé da função $f(x) = \frac{1}{(1-x)^2}$	27
2.2.4	Aproximantes de Padé de $f(x) = x^{-1} \ln(1+x)$	29
2.2.5	Aproximantes de Padé de $f(x) = e^{-x}$	32
2.2.6	Aproximantes de Padé de $f(x) = (x+10)/(1-x^2)$	34
2.3	<i>A Tabela de Padé</i>	35
2.4	<i>Convergência dos aproximantes de Padé</i>	37
2.5	<i>Conclusões</i>	38
<b>3</b>	<b>ESPALHAMENTO ELETROMAGNÉTICO EM MEIOS UNIDIMENSIONAIS, COMPLEXOS E NÃO HOMOGÊNEOS</b>	39
3.1	<i>Propagação de Ondas eletromagnéticas</i>	39
3.2	<i>Espalhamento de luz em meios unidimensionais finitos</i>	42
3.3	<i>Representação do campo espalhado em termos da série de Born</i>	44
3.4	<i>Aproximantes de Padé para o campo espalhado</i>	46
3.5	<i>Aplicações</i>	48
3.5.1	Material dielétrico homogêneo	49
3.5.2	Material linear	55
3.5.3	Material periódico $\mathcal{PT}$ -simétrico no ponto de quebra de simetria	58
3.5.4	Material linear-periódico (tipo Bloch)	62
3.6	<i>Conclusões</i>	64

<b>4</b>	<b>ESPALHAMENTO ELETROMAGNÉTICO EM MEIOS TRIDIMENSIONAIS</b>	<b>65</b>
4.1	<i>Espalhamento de luz em meios tridimensionais</i>	65
4.2	<i>O dipolo <math>\mathcal{PT}</math>-simétrico</i>	67
4.2.1	Aproximantes de Padé de ordem $N$	71
4.3	<i>Aplicações</i>	73
4.3.1	Espalhamento de luz em um meio hermitiano	73
4.3.2	Espalhamento de luz em um meio Não-Hermitiano	78
4.4	<i>Conclusões</i>	86
<b>5</b>	<b>CPA laser e os aproximantes de Padé</b>	<b>87</b>
5.1	<i>Introdução ao CPA laser</i>	87
5.2	<i>Matriz de transferência e CPA laser</i>	88
5.3	<i>Aproximantes de Padé e o CPA laser</i>	91
5.4	<i>Resultados</i>	92
5.4.1	Material homogêneo	92
5.4.2	Material linear	94
5.5	<i>Conclusões</i>	95
<b>6</b>	<b>Conclusões e Perspectivas</b>	<b>96</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>98</b>
	<b>APÊNDICES</b>	<b>108</b>
	<b>A – Solução exata para o material finito homogêneo</b>	<b>109</b>
	<b>B – Solução exata para o material finito linear</b>	<b>110</b>
	<b>ANEXOS</b>	<b>111</b>
	<b>A – Figuras dos aproximantes de Padé para o CPA</b>	<b>112</b>
	<b>B – Artigos publicados</b>	<b>116</b>

## INTRODUÇÃO

O espalhamento de luz é um importante fenômeno estudado quando desejamos conhecer a estrutura de diferentes materiais. Existem duas formas de abordá-lo: quando conhecemos a estrutura do material e desejamos saber o comportamento da luz espalhada [1–10], ou quando conhecemos o comportamento da luz espalhada e estamos interessados em descobrir características do material espalhador [11]. Ambos os problemas possuem diferentes características e técnicas para solução. Neste trabalho discutiremos apenas a primeira abordagem.

Saber o comportamento da luz espalhada, mesmo quando já conhecemos a estrutura do material, nos permite entender diversos padrões de espalhamento, a fim de comparar diferentes materiais de forma não invasiva, bem como prever a estrutura de novos a partir dos padrões de espalhamento já conhecidos. Segue daí a necessidade de estudar exaustivamente uma gama de materiais teóricos [2, 6, 10, 12]. Esses materiais teorizados nos permitem montar uma extensa biblioteca de padrões de modo a reconhecer novas estruturas que possam surgir [13]. Dentre essas novas estruturas, destacam-se os materiais não-hermitianos. Devido à analogia entre ótica e mecânica, é possível construir materiais com índices de refração baseados em diferentes categorias de potenciais. Portanto, podemos separar os índices de refração (ou potenciais) dos materiais em hermitianos e não-hermitianos. Nessa última categoria, destacam-se os potenciais  $\mathcal{PT}$ -simétricos [14, 15]. Introduzidos no trabalho seminal de Bender e Boettcher [16], esses potenciais, apesar de não-hermitianos, possuem autovalores reais. Tal característica fez essas estruturas ganharem muita notoriedade nas últimas décadas [14, 17, 18, 18–23].

Mas afinal, o que é um material  $\mathcal{PT}$ -simétrico? Enquanto um hamiltoniano não-hermitiano tem como característica fundamental não ter, obrigatoriamente, autovalores

reais, os materiais  $\mathcal{PT}$ -simétricos devem ser invariantes sob uma transformação paridade-tempo. Ou seja, quando aplicamos o operador reversão temporal  $\mathcal{T}$  em conjunto com o operador paridade  $\mathcal{P}$ , o hamiltoniano  $\hat{H}$  do sistema não deve sofrer qualquer alteração:  $(\mathcal{PT})^{-1}\hat{H}(\mathcal{PT}) = \hat{H}$ . Em ótica, isso significa que o índice de refração  $n(\mathbf{r})$  da estrutura deve ser tal que  $n(-\mathbf{r}) = n^*(\mathbf{r})$ , ou seja, a parte real do índice de refração é par e a parte imaginária ímpar sob inversão espacial,  $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ . Note que estamos falando agora de índices de refração complexos, onde a parte real representa a refringência do material e a parte imaginária está relacionada ao seu coeficiente de absorção. A teoria  $\mathcal{PT}$ -simétrica trouxe a possibilidade de construirmos materiais teóricos possuindo uma distribuição não-homogênea de ganho e perda na mesma estrutura. Essa nova visão, que ganhou força com o advento da teoria  $\mathcal{PT}$ -simétrica, jogou luz não somente sobre estruturas teóricas, mas também sobre estruturas reais. Por exemplo, em 2009, Mykola Kulishov e colaboradores previram um material  $\mathcal{PT}$ -simétrico com invisibilidade unidirecional [24]. Note aqui que, em termos gerais, espalhamentos de luz em potenciais periódicos complexos são assimétricos, podendo sumir completamente em determinadas direções dependendo das condições do espalhamento, [25]. Isso significa que podemos ter luz transmitida integralmente quando esta incide por um lado do material, e o mesmo não ocorrer quando a incidência ocorre do lado oposto. Também é conhecido que materiais  $\mathcal{PT}$ -simétricos podem sofrer transição de fase, chamada quebra da simetria  $\mathcal{PT}$ . Nesse processo, os autovalores deixam de ser reais e passam a ser complexos [16, 26, 27]. Os pontos onde essa transição acontece são chamados excepcionais [28–30]. A invisibilidade unidirecional ocorre exatamente próximo a esses pontos, [31]. Esse fenômeno foi demonstrado experimentalmente em 2013 utilizando um cristal complexo baseado em guias de onda de silício [32]. Esses são apenas alguns dos avanços recentes da teoria dentro da fotônica. Também podemos citar dispositivos laser-absorvedor [18, 33, 34], emissões de laser monomodo [35, 36], sensores óticos [37], dentre outras áreas emergentes como a simetria  $\mathcal{PT}$  em sistemas óticos não-lineares [38, 39] e metamateriais [21, 32, 40–43].

Visto que conhecemos os objetivos do estudo sobre o espalhamento de luz e os novos tipos de materiais que podemos trabalhar, bem como seus potenciais no campo experimental, resta-nos elencar as técnicas disponíveis para o cálculo do campo espalhado. Apesar da teoria de espalhamento ter raízes bem sólidas na literatura [44, 45], é comum surgirem potenciais para os quais ainda não dispomos de soluções analíticas. É nesse momento que

lançamos mão de técnicas aproximativas, onde se destaca o método perturbativo. Esse método consiste em expandir o campo espalhado em uma série infinita de potências de algum parâmetro, tal que, se fizermos esse parâmetro nulo, retornamos para o problema original não-perturbado. Apesar de ser possível utilizarmos diferentes tipos de séries para esse propósito [46], a série de Born, ou série de Taylor, é a mais comumente utilizada [1, 47–49]. Os motivos são óbvios: facilidade no cálculo e teoria bem estabelecida. Além disso, para espalhamentos onde a luz interage fracamente com o material (espalhamento fraco), o parâmetro utilizado na expansão é pequeno de tal forma que podemos negligenciar todos os termos da série após o primeiro de potência não nula (primeira aproximação de Born). Essa facilidade no cálculo aproximado do campo espalhado, utilizando a primeira aproximação de Born, faz com que se despreze toda uma gama de problemas onde a luz interage fortemente com o material (espalhamento forte). Nesses problemas, o parâmetro de expansão não pode ser desprezado e a série de Born, geralmente, falha na busca de uma solução aproximada, divergindo na maioria das vezes [7]. Essa limitação da série de Born demanda que busquemos opções viáveis para o cálculo aproximado do campo. Dentre as inúmeras possibilidades existentes, são os aproximantes de Padé que, atualmente, têm demonstrado resultados melhores quando comparados com a série de Born [1, 7, 50–56].

Os aproximantes de Padé são conhecidos de longa data [50, 51] e vêm ganhando um novo fôlego nos últimos anos em publicações recentes [1, 7, 52–54, 57, 58]. Mas, no que consiste essa técnica aproximativa? Em linhas gerais, os aproximantes de Padé são compostos por uma razão de polinômios que reorganizam os termos da série de Born, podendo ampliar sua região de convergência. Chamamos essa propriedade de continuação analítica. Recentemente, Van der Sijs *et al.* [1] aplicou os aproximantes de Padé em um problema de transmissão de luz por uma camada com índice de refração complexo. Inicialmente, os autores verificaram que para valores maiores que 1 do parâmetro de expansão, a série de Born divergia. Eles também perceberam que os aproximantes de Padé possuíam uma região de convergência maior quando comparada com a série de Born, além de fornecer um resultado aproximado do problema com um erro na faixa de 0,003%. Além dos ganhos evidentes descritos acima, os aproximantes de Padé representaram uma economia computacional em velocidade e armazenamento de dados. Uma das fragilidades dessa técnica é que a teoria sobre a convergência dos aproximantes de Padé ainda não está fechada [50, 59, 60]. Ou seja, os aproximantes de Padé só garantem a convergência e

unicidade para um grupo específico de funções conhecidas como Stieltjes, [50, 59, 60]. Logo, para os demais problemas, a teoria está aberta, justificando nosso trabalho em buscar seu comportamento em problemas de interesse físico.

Este trabalho pretende tensionar os limites dos aproximantes de Padé em problemas óticos de interesse físico, comparando suas soluções analíticas, e resultados obtidos pela aplicação direta da série de Born, com os resultados produzidos pelos aproximantes de Padé.

### 1.1 ESTRUTURA DA TESE

O primeiro capítulo deste trabalho foi dedicado a uma introdução, com um breve estado da arte, de temas importantes que serão discutidos ao longo de todo o texto. No segundo capítulo discutiremos formalmente a definição dos aproximantes de Padé e suas principais propriedades. A fim de ilustrar essas propriedades, traremos exemplos diretos de aplicação dessa ferramenta em problemas matemáticos simples.

No terceiro capítulo discutiremos os resultados do segundo artigo publicado pelo autor desta tese [52]. Onde foram considerados problemas unidimensionais e que já possuem solução analítica bem estabelecida na literatura. Foram escolhidos quatro tipos de materiais que pudessem representar, com grande abrangência, a maioria dos índices de refração trabalhados no contexto ótico. São eles: material finito, homogêneo, hermitiano e não-hermitiano; material com índice de refração variando linearmente; material finito, com índice de refração periódico, simetria  $\mathcal{PT}$  e no ponto da quebra de simetria; e, por fim, um material que possui um índice de refração com uma parcela linear e uma parcela periódica, apelidado de material tipo Bloch. Esses materiais serviram como aplicação de uma nova abordagem, baseada em teoria da perturbação, que usa os aproximantes de Padé para somar séries de Born que divergem em regiões de interesse físico.

No quarto capítulo, partimos para o estudo de um problema tridimensional. O problema abordado trata-se de um dipolo  $\mathcal{PT}$ -simétrico composto por duas deltas de Dirac, uma representando perda e a outra ganho. Este problema já foi abordado nos trabalhos Ref.[9] e Ref.[6]. Esse capítulo traz os resultados do primeiro artigo publicado, fruto dos estudos iniciais sobre o tema [7].

---

O quinto capítulo desta tese é dedicado aos resultados iniciais de um trabalho em construção sobre uma intrigante propriedade dos materiais  $\mathcal{PT}$  simétricos, o CPA laser. A sigla CPA vem de *coherent perfect absorber*, e a associação ao termo laser indica que certos materiais  $\mathcal{PT}$  simétricos podem se comportar como laser e absorvedor perfeito para uma mesma frequência [18, 33]. Neste capítulo discutiremos de forma qualitativa os resultados obtidos pelo uso dos aproximantes de Padé nesse problema. O sexto capítulo traz uma conclusão geral e novas perspectivas de trabalhos. Os trabalhos publicados, oriundos desta tese, se encontram no Anexo B.

## OS APROXIMANTES DE PADÉ

Neste capítulo, introduziremos os aproximantes de Padé. Faremos uma rápida digressão histórica sobre o tema, apontando a evolução da teoria ao longo dos anos e a situando historicamente. Em seguida, discutiremos a relação entre os aproximantes e a série de Taylor, utilizando alguns exemplos, e as principais características dos aproximantes. Ainda nesta seção, definiremos formalmente os aproximantes de Padé. Após isso, mostraremos a Tabela de Padé e algumas de suas características mais relevantes. Por fim, discutiremos a existência, unicidade e convergência dos aproximantes de Padé.

### 2.1 CONTEXTUALIZAÇÃO HISTÓRICA

Os aproximantes de Padé foram idealizados no século XVIII por Johan Heinrich Lambert (1728-1777) e Joseph Luis Lagrange (1736-1813). O primeiro foi responsável, em 1758, por definir os aproximantes como uma função racional capaz de representar séries de potências, enquanto o segundo, em 1776, idealizou os aproximantes como uma razão entre dois polinômios que servia para aumentar a velocidade de convergência dessas mesmas séries [51]. Essas duas definições são equivalentes, pois dizem que: dada uma série de potências infinita  $f(z)$ , é possível escrever uma função racional de grau  $(N, M)$  do tipo  $A_N(z)/B_M(z)$ , onde  $A_N(x)$  e  $B_M(x)$  são polinômios de grau  $N$  e  $M$ , respectivamente, tal que

$$f(z) - \frac{A_N(z)}{B_M(z)} = \mathcal{O}(z^{N+M+1}), \quad (z \rightarrow 0). \quad (1)$$

Já em 1845, Carl Gustav Jacob Jacobi (1804-1851) mostrou que os aproximantes podem ser escritos como uma razão de dois determinantes [51]. Porém, foi só em 1892 que o matemático francês, Henri Eugène Padé (1893-1963), organizou e sistematizou, em sua

tese de doutoramento, todo o conhecimento sobre os aproximantes. Na época, ele tinha como orientador o famoso algebrista Charles Hermite (1822-1901). Padé organizou seus aproximantes em uma tabela homônima (Tabela 1). Os elementos da tabela de Padé correspondem aos aproximantes de ordem  $(N, M)$ , que serão representados como  $P_M^N$ . Aqui, o índice  $N$  representa a linha em que se localiza o aproximante na tabela, enquanto  $M$  a coluna.

**Tabela 1** – Tabela de Padé.

$N \setminus M$	0	1	2	3
0	$P_0^0$	$P_1^0$	$P_2^0$	$P_3^0$
1	$P_0^1$	$P_1^1$	$P_2^1$	$P_3^1$
2	$P_0^2$	$P_1^2$	$P_2^2$	$P_3^2$
3	$P_0^3$	$P_1^3$	$P_2^3$	$P_3^3$

Fonte: AUTOR(2023)

Os aproximantes de Padé com  $N = M$  estão localizados na diagonal principal da tabela e por isso são chamados aproximantes diagonais. A tabela de Padé encerra uma série de propriedades que relacionam Padés de diferentes ordens. Posteriormente discutiremos com mais detalhes as propriedades dessa tabela.

Apesar de ter sido objeto de estudo de outros matemáticos como Jan Stieltjes (1856-1894) e Georg Cantor (1845-1918), os aproximantes de Padé passaram muito tempo esquecidos, residindo apenas em problemas de matemática pura. Foi somente após o fim da Segunda Guerra Mundial, e com o aparecimento dos primeiros computadores, que os aproximantes de Padé ganharam um novo fôlego na construção de aproximações de funções especiais, com Milton Abramowitz (1915-1958) e Irene A. Stegun (1919-2008). Os aproximantes de Padé seriam redescobertos na física só em 1960 por George Alan Baker, Jr [50, 61].

De forma otimista, podemos dizer que o interesse nos aproximantes de Padé surge da necessidade de buscarmos soluções analíticas para problemas das mais diversas áreas da ciência. Essa mesma necessidade também reside em outras técnicas de aproximação, como nas séries de potências. Essas séries, com a série de Taylor figurando dentre as suas mais conhecidas, são ferramentas úteis na representação aproximada de soluções dos mais diversos problemas de interesse físico. Associada às séries de potências, temos a teoria da perturbação. Esse método consiste em substituir um problema difícil por uma sequência de

outros presumivelmente mais fáceis, via truncamentos sucessivos de uma série de potências. Por outro lado, apesar de úteis, essas séries apresentam dificuldades intrínsecas. Dentre elas podemos destacar a convergência lenta para resultado e regiões limitadas de convergência. Um raio de convergência que não engloba uma região de interesse, torna a série de potências inútil para qualquer fim.

Os aproximantes de Padé conseguem retirar mais informações das séries de potências do que poderíamos retirar delas diretamente. Isso torna os aproximantes superiores aos métodos que envolvem o uso direto dessas séries. Inclusive, cabe destacar, que a série de Taylor é um caso particular dos aproximantes de Padé ( $M = 0$ ).

## 2.2 OS APROXIMANTES DE PADÉ E AS SÉRIES DE POTÊNCIAS

Para ilustrar as características dos aproximantes de Padé e como eles conseguem obter mais informações das séries de potências do que aplicações diretas destas, construiremos uma função  $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ , com sua expansão em série de Taylor em torno do ponto  $x = a$  dada por

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(a)}{n!} (x - a)^n, \quad (2)$$

onde  $f^{(n)}(a)$  é a  $n$ -ésima derivada de  $f$  no ponto  $a$ . Se fizermos  $x = 0$ , temos a fórmula dos termos da **série de Maclaurin**; isto é,

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} x^n, \quad (3)$$

### 2.2.1 SÉRIE DE TAYLOR DE $f(x) = \frac{1}{(1-x)^2}$

Para iniciar a discussão sobre as propriedades dos aproximantes de Padé e comparar essas características com as amplamente usadas séries de Taylor, tomaremos um exemplo de uma função do tipo

$$f(x) = \frac{1}{(1-x)^2}. \quad (4)$$

A série de Maclaurin para essa função é dada por

$$f(x) = 1 + 2x + 3x^2 + 4x^3 + 5x^4 + \mathcal{O}(x^5). \quad (5)$$

Por se tratar de uma série com um formato trivial, é fácil inferir que a equação para seus termos é dada por

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)x^n. \quad (6)$$

Para calcular o raio de convergência, podemos utilizar o teste da raiz. Seja  $\sum_{n=0}^{\infty} a_n$  uma série numérica e a constante  $k$  definida pelo limite,

$$k = \lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt[n]{|a_n|}, \quad (7)$$

então, se  $k < 1$ , a série converge; se  $k > 1$  ou  $k = 1^+$ , a série não converge; se  $k = 1^-$ , nada se pode concluir. Assim, sabendo que  $\lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt[n]{n+1} = 1$ , temos que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt[n]{|(n+1) \cdot x^n|} = \lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt[n]{|(n+1)| \cdot |x|^n} = |x|.$$

Dessa forma, para garantirmos convergência, precisamos que  $|x| < 1$ . Segue daí que o raio de convergência da nossa série é  $R = 1$ . Isso significa que essa soma de potências só converge no intervalo  $-1 < x < 1$ . Além disso, quando  $x \rightarrow \infty$ , a Eq.(4) converge para 0, algo que claramente não é observado na série (5).

Agora discutiremos os limites dos aproximantes de Padé para a função (4). Porém, antes, precisaremos definir de forma mais cuidadosa essa importante ferramenta matemática.

### 2.2.2 DEFINIÇÃO DOS APROXIMANTES DE PADÉ

Considere uma função  $f(x)$  representada por uma série de potências tal que

$$f(x) = \sum_{n=0}^L f_n x^n, \quad (8)$$

onde  $L$  não precisa ser necessariamente um número finito e  $f_n$  são os coeficientes da série. A variável  $x$ , muitas vezes, realiza o papel de parâmetro perturbativo. Esse parâmetro, na teoria da perturbação, é inserido de tal forma a produzir por meio de truncamentos sucessivos uma série de problemas mais tratáveis. Definimos os aproximantes de Padé como uma função racional formada pelo quociente de dois polinômios. O grau dos polinômios do numerador e denominador da razão comporão o grau misto do aproximante. Dessa forma, representamos um aproximante de Padé de grau  $(N, M)$  como  $P_M^N(x)$ , onde  $N$  e  $M$  são os graus dos polinômios do numerador e denominador, respectivamente. Ou seja,

$$P_M^N(x) = \frac{\mathcal{A}_N(x)}{\mathcal{B}_M(x)}, \quad N, M = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (9)$$

com  $\mathcal{A}_N(x)$  sendo um polinômio de grau  $N$ ,

$$\mathcal{A}_N(x) = A_0 + A_1x + A_2x^2 + \dots + A_Nx^N, \quad (10)$$

e  $\mathcal{B}_M(x)$  sendo um polinômio de grau  $M$ ,

$$\mathcal{B}_M(x) = B_0 + B_1x + B_2x^2 + \dots + B_Mx^M. \quad (11)$$

Ainda, sem perda de generalidade, podemos aplicar a condição de normalização de Baker [50] e considerar  $B_0 = 1$  em todos os casos.

Os aproximantes de Padé configuram uma estrutura dependente dos termos da série de potência. Isso significa que para ela ter propósito e aplicabilidade, é necessário estar associada a uma série de potências. É essa série que definirá os valores dos coeficientes  $A_n$  e  $B_m$ . A relação entre a série de potências (8) e o aproximante (9) é

$$f(x) - P_M^N(x) = \mathcal{O}(x^{N+M+1}). \quad (12)$$

A relação acima garante que  $f(x)$  e  $P_M^N(x)$  difiram apenas em termos da ordem de  $x^{N+M+1}$ . Ou seja, para que os coeficientes  $A_n$  e  $B_m$  estejam completamente definidos em termos dos coeficientes  $f_j$ , precisamos de  $N + M + 1$  termos da série (8).

Para calcular  $A_n$  e  $B_m$  reescrevemos (12) como

$$f(x) - \frac{\mathcal{A}_N(x)}{\mathcal{B}_M(x)} = \mathcal{O}(x^{N+M+1}), \quad (13)$$

donde segue que

$$\mathcal{A}_N(x) = f(x)\mathcal{B}_M(x) + \mathcal{O}(x^{N+M+1}), \quad (14)$$

com  $\mathcal{O}(x^{N+M+1})$  representando  $\mathcal{O}(x^{N+M+1})\mathcal{B}_M(x)$ , uma vez que são termos de mesma ordem. Reescrevendo os coeficientes dos polinômios de forma explícita, temos

$$\begin{aligned} A_0 + A_1x + A_2x^2 + \dots + A_Nx^N = \\ (f_0 + f_1x + f_2x^2 + \dots)(B_0 + B_1x + B_2x^2 + \dots + B_Mx^M) + \mathcal{O}(x^{N+M+1}). \end{aligned}$$

Omitindo os termos de ordem  $x^{N+M+1}$  e igualando os termos de mesma potência de  $x$ , chegamos no sistema

$$\begin{aligned}
A_0 &= f_0 \\
A_1 &= f_1 + f_0 B_1 \\
A_2 &= f_2 + f_1 B_1 + f_0 B_2 \\
&\vdots \\
A_N &= f_N + f_{N-1} B_1 + \dots + f_0 B_N \\
0 &= f_{N+1} + f_N B_1 + \dots + f_{N-M+1} B_M \\
0 &= f_{N+2} + f_{N+1} B_1 + \dots + f_{N-M+2} B_M \\
&\vdots \\
0 &= f_{N+M} + f_{N+M-1} B_1 + \dots + f_N B_M,
\end{aligned} \tag{15}$$

com  $f_n \equiv 0$  se  $n < 0$  e  $B_j \equiv 0$  se  $j > M$ . A estrutura do sistema (15) indica que, para encontrarmos os coeficientes  $A_n$  e  $B_m$ , é necessário apenas considerar as  $M$  últimas equações e as primeiras  $N + 1$ . Ou seja, para calcular, por exemplo,  $A_n$  e  $B_m$  para um aproximante de ordem  $(1, 1)$ , montaremos um sistema com as duas primeiras ( $N + 1$  equações, onde  $N = 1$ ) e a última equação ( $M$  equações, onde  $M = 1$ ) do sistema (15). Explicitamente,

$$\begin{cases}
A_0 = f_0, \\
A_1 = f_1 + f_0 B_1, \\
0 = f_2 + 2f_1 B_1.
\end{cases} \tag{16}$$

Segue imediatamente do sistema acima que

$$A_0 = f_0, \quad B_1 = -\frac{f_2}{2f_1} \quad \text{e} \quad A_1 = f_1 - f_0 \frac{f_2}{2f_1}. \tag{17}$$

Agora que definimos os aproximantes de Padé e mostramos como seus coeficientes se relacionam com os termos da série (8), retomaremos a Eq.(4) a fim de caracterizar seus aproximantes e contrastá-los com a série de potências associada (5).

2.2.3 APROXIMANTES DE PADÉ DA FUNÇÃO  $f(x) = \frac{1}{(1-x)^2}$ 

Para estudar o comportamento dos aproximantes de Padé para essa função, tomaremos nove aproximantes, com  $N$  e  $M$  variando de 0 a 2. O primeiro aproximante a ser calculado é o  $P_0^0(x)$ , que tem a forma

$$P_0^0(x) = A_0. \quad (18)$$

Utilizando o sistema (15) para a série (5), temos que  $A_0 = f_0 = 1$ . Logo,

$$P_0^0(x) = 1, \quad (19)$$

que, apesar de não possuir singularidades, não fornece nenhuma informação útil sobre o comportamento da função.

Algo importante a lembrar, e facilmente observável a partir da Eq.(9), é que os aproximantes de ordem  $(N, 0)$  correspondem a soma parcial até o elemento de ordem  $N$  da série de Taylor para a função (4). Logo,  $P_0^1(x) = f_0 + f_1x = 1 + 2x$  e  $P_0^2(x) = f_0 + f_1x + f_2x^2 = 1 + 2x + 3x^2$ . O que mostra que a série de Taylor é um caso particular dos aproximantes de Padé.

Para calcular os aproximantes  $P_1^0(x)$  e  $P_2^0(x)$  recorreremos ao sistema (15) para a série (5). Logo,

$$\begin{aligned} P_1^0(x) &= \frac{A_0}{1 + B_1x} = \frac{f_0}{1 - \frac{f_1}{f_0}x} = \frac{1}{1 - 2x}, \\ P_2^0(x) &= \frac{A_0}{1 + B_1x + B_2x^2} = \frac{f_0}{1 - \frac{f_1}{f_0}x + \frac{(f_1^2 - f_0f_2)}{f_0^2}x^2} = \frac{1}{1 - 2x + x^2}. \end{aligned} \quad (20)$$

Os dois aproximantes mostrados acima apresentam características bem distintas:  $P_1^0(x)$  tem um polo em  $x = 1/2$ , enquanto a função original (4) em  $x = 1$ . Já em  $P_2^0(x)$ , acontece algo curioso: o aproximante não só converge para os mesmos resultados que a Eq.(4), como para a mesma expressão analítica. Ou seja, reproduz exatamente a forma analítica da função original. Isso ocorre por conta do formato de (4), que já é um quociente de polinômios.

Agora, calcularemos os aproximantes de Padé diagonais,  $N = M$ . Esses aproximantes ganham esses nomes por se localizarem exatamente na diagonal principal da Tabela de

Padé, como mostrado na Tab.1. Uma vez que já conhecemos  $P_0^0(x)$ , procederemos com o cálculo apenas de  $P_1^1(x)$  e  $P_2^2(x)$ , que são dados por

$$\begin{aligned} P_1^1(x) &= \frac{A_0 + A_1x}{1 + B_1x} = \frac{f_0 + \frac{(f_1^2 - f_0f_2)}{f_1}x}{1 - \frac{f_2}{f_1}x} = \frac{2 + x}{2 - 3x}, \\ P_2^2(x) &= \frac{A_0 + A_1x + A_2x^2}{1 + B_1x + B_2x^2} = \frac{1}{1 - 2x + x^2}, \end{aligned} \quad (21)$$

onde foi omitida em  $P_2^2(x)$  a relação explícita entre os coeficientes dos aproximantes e os da série de Taylor por se tratar de uma expressão não tão simples. Contudo, como visto para  $P_2^0(x)$ ,  $P_2^2(x)$  reproduz novamente a forma analítica exata da Eq.(4).

Por fim, temos que os aproximantes  $P_1^2(x)$  e  $P_2^1(x)$ , para fechar todo o espectro de aproximantes até ordem 2, são dados por

$$\begin{aligned} P_1^2(x) &= \frac{A_0 + A_1x + A_2x^2}{1 + B_1x} = \frac{3 + 2x + x^2}{3 - 4x}, \\ P_2^1(x) &= \frac{A_0 + A_1x}{1 + B_1x + B_2x^2} = \frac{1}{1 - 2x + x^2}. \end{aligned} \quad (22)$$

O resultado mostrado para esses últimos aproximantes indica que, para ordens  $M = 2$ , independente da ordem de  $N$ , temos uma reprodução exata da solução analítica de Eq.(4).

O fato dos Aproximantes retornarem uma expressão analítica como resultado, mostram robustez na aplicação. Lembre que a série de Maclaurin (5) para a função (4), não só possui um raio de convergência finito ( $R = 1$ ), como fornece poucas informações sobre sua função original. Os aproximantes de Padé de ordem  $(N, 2)$ , com uma quantidade mínima de apenas três termos da série (5), conseguem, não só trazer resultados para além da região de convergência de (5), como retornam a função analítica exata do problema estudado. Sendo assim, para ter uma visão mais ampla de todos os aproximantes calculados, podemos montar uma tabela conforme mostrado em Tab.1.

**Tabela 2** – Tabela de Padé.

$N \setminus M$	0	1	2
0	1	$\frac{1}{1-2x}$	$\frac{1}{1-2x+x^2}$
1	$1 + 2x$	$\frac{2+x}{2-3x}$	$\frac{1}{1-2x+x^2}$
2	$1 + 2x + 3x^2$	$\frac{3+2x+x^2}{3-4x}$	$\frac{1}{1-2x+x^2}$

Fonte: AUTOR(2023)

A tabela de Padé, Tab. 2, é uma ferramenta útil para termos um panorama dos aproximantes não diagonais. Essa tabela possui uma série de propriedades úteis para momentos em que precisamos calcular aproximantes de ordens mais altas [50]. Instigaremos adiante algumas dessas propriedades. Contudo, apesar de útil, a tabela de Padé não precisa ser sempre calculada, uma vez que a convergência dos aproximantes de Padé acontecem, usualmente, mais rápido para os elementos na diagonal principal. Cabe destacar, ainda, que, apesar de não mostrado, os aproximantes diagonais com  $N \geq 2$  convergem integralmente para a solução analítica do problema.

#### 2.2.4 APROXIMANTES DE PADÉ DE $f(x) = x^{-1} \ln(1+x)$

Discutiremos agora um exemplo, retirado de Ref.[60], onde os aproximantes de Padé convergem fora da região de convergência da série de Taylor, contudo não reproduzem o mesmo formato analítico da função aproximada. Além disso, esse exemplo ilustra uma importante característica dos aproximantes; a rápida convergência de dois grupos de aproximantes,  $P_{N+1}^N$  e  $P_N^N$ , em detrimento dos demais.

Seja a função  $f(x) = x^{-1} \ln(1+x)$ , com os termos de sua série de potências, em torno de  $x = 0$ , dados por

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^{n+2} \frac{x^n}{n+1}. \quad (23)$$

Pelo Teorema de *Cauchy-Hadamard*, temos que o raio de convergência é dado por

$$R = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt[n]{|a_n|}}, \quad (24)$$

onde  $a_n$  é o coeficiente da série de potências. Nesse caso, temos que  $|a_n| = 1/(n+1)$ , então,

$$R = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt[n]{1/(n+1)}} = \lim_{n \rightarrow \infty} (n+1)^{1/n}. \quad (25)$$

Podemos reescrever  $(n+1)^{1/n}$  como  $e^{\ln(n+1)/n}$ , e então aplicar a regra de *L'Hôpital* para calcular o limite:

$$R = \lim_{n \rightarrow \infty} e^{\ln(n+1)/n} = \exp \left[ \lim_{n \rightarrow \infty} \ln(n+1)/n \right] = e^0 = 1. \quad (26)$$

Portanto, o raio de convergência da série de potência para  $x^{-1} \ln(1+x)$  é  $R = 1$ . Note que o intervalo de convergência é  $-1 < x < 1$ , pois a série diverge para  $x = -1$  e  $x = 1$ .

Para o cálculo dos aproximantes de Padé de  $f(x)$ , tomaremos como referência a Tabela de Padé mostrada em Tab.1. A fim de mostrar uma propriedade dos grupos compostos pela diagonal principal,  $P_N^N(x)$ , e pela subdiagonal superior,  $P_{N+1}^N(x)$ , calcularemos todos os aproximantes, com  $N = 1, 2, \dots, 8$ , para três pontos ao longo do eixo  $x = 0.5, 1, 2$ , dentro, no limite e fora da região de convergência da série (23). Para deixar ainda mais evidente essa propriedade, usaremos a subdiagonal inferior,  $P_N^{N+1}(x)$ , como contraste, dentro do mesmo intervalo de ordens e mesmos valores de  $x$ . Esses resultados são mostrados na tabela 3.

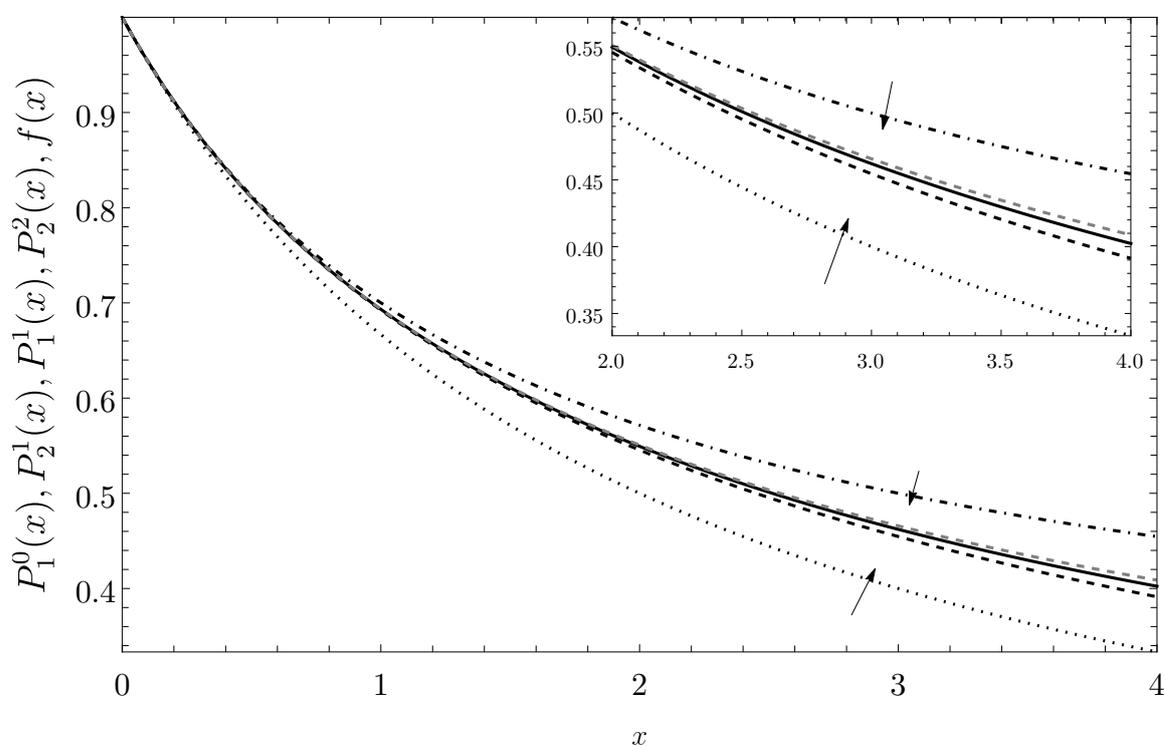
**Tabela 3** – Tabela de Padé.

$P_N^N(x)$			
$N$	$x = 0.5$	$x = 1$	$x = 2$
1	0.8125000000	0.7000000000	0.5714285714
2	0.8109452736	0.6933333333	0.5507246377
3	0.8109303653	0.6931524548	0.5494028230
4	0.8109302177	0.6931473324	0.5493128795
5	0.8109302162	0.6931471850	0.5493066184
6	0.8109302162	0.6931471807	0.5493061779
7	0.8109302162	0.6931471806	0.5493061467
8	0.8109302162	0.6931471806	0.5493061445
$P_{N+1}^N(x)$			
$N$	$x = 0.5$	$x = 1$	$x = 2$
1	0.8108108108	0.6923076923	0.5454545455
2	0.8109289617	0.6931216931	0.5490196078
3	0.8109302032	0.6931464174	0.5492851768
4	0.8109302161	0.6931471579	0.5493046209
5	0.8109302162	0.6931471799	0.5493060341
6	0.8109302162	0.6931471805	0.5493061364
7	0.8109302162	0.6931471806	0.5493061438
8	0.8109302162	0.6931471806	0.5493061443
$P_N^{N+1}(x)$			
$N$	$x = 0.5$	$x = 1$	$x = 2$
1	0.8106060606	0.6904761905	0.5333333333
2	0.8109276730	0.6930894309	0.5485232068
3	0.8109301937	0.6931457431	0.5492605233
4	0.8109302160	0.6931471425	0.5493032723
5	0.8109302162	0.6931471795	0.5493059559
6	0.8109302162	0.6931471805	0.5493061317
7	0.8109302162	0.6931471806	0.5493061435
8	0.8109302162	0.6931471806	0.5493061443

Fonte: Adaptado de Ref.[60]

A tabela 3 comparou o comportamento dos aproximantes de Padé ao longo de três regiões, representadas por  $P_N^N(x)$ ,  $P_{N+1}^N(x)$  e  $P_N^{N+1}(x)$ . Percebemos que para os elementos que estão na diagonal principal,  $P_N^N(x)$ , e os que estão fora dela,  $P_{N+1}^N(x)$  e  $P_N^{N+1}(x)$ , a convergência ocorre por lados diferentes, algo que pode ser percebido mais facilmente no limite,  $x = 1$ , e fora da região de convergência da série de Taylor,  $x = 2$ . Ou seja, enquanto o ajuste à curva  $f(x) = x^{-1} \ln(1+x)$  ocorre pela região superior do gráfico para  $P_N^N(x)$ , para  $P_{N+1}^N(x)$  e  $P_N^{N+1}(x)$  ocorre de baixo para cima. A Fig.1 mostra graficamente esse resultado, indicando a direção de convergência das curvas por meio de uma seta. Ainda na tabela 3, percebemos que a convergência para  $f(x)$  ocorre mais rapidamente para  $P_N^N(x)$  e  $P_{N+1}^N(x)$  do que para  $P_N^{N+1}(x)$ , apesar de diferenças muito pequenas entre as taxas de convergência entre esses dois últimos grupos. Essa taxa de convergência é tanto mais lenta quanto mais nos afastamos da diagonal principal em direção por meio das diagonais inferiores. Para exemplificar, o grupo  $P_N^{N+2}(x)$ , para  $x = 2$ , só converge para o valor esperado em  $P_9^{11}(x)$ .

**Figura 1** – Curvas de  $f(x)$  (linha sólida preta),  $P_1^0(x)$  (linha pontilhada),  $P_2^1(x)$  (linha tracejada preta),  $P_1^1(x)$  (linha ponto-tracejada),  $P_2^2(x)$  (linha tracejada cinza) em função de  $x$ .



Fonte: Autor(2023)

Esse comportamento de convergência por regiões diferentes, dependendo do grupo de aproximantes que se use, é bem conhecido e está relacionado diretamente à forma de convergência dos aproximantes de Padé de funções do tipo Stieljes, que voltarão a ser discutidas mais adiante. Por fim, fica evidente nesse exemplo a possibilidade de convergência dos aproximantes de Padé para regiões além do raio de convergência da série de Taylor, mesmo quando eles não reproduzem a forma analítica exata da função aproximada.

### 2.2.5 APROXIMANTES DE PADÉ DE $f(x) = e^{-x}$

Na seção onde discutimos os aproximantes de Padé da função (4), observamos que os aproximantes de Padé conseguem retornar resultados finitos mesmo fora da região de convergência da série de Taylor. Isso é algo impressionante, pois os aproximantes usam os próprios termos da série de Taylor para montar seu quociente de polinômios. Assim, verificamos a capacidade dos aproximantes de Padé em gerar aproximações que não só expandem a região de convergência, podem fazê-la tender ao infinito. Contudo, qual seria a utilidade dos aproximantes quando nos deparamos com uma série de Taylor que já possui raio de convergência infinito?

Para comparar como os aproximantes de Padé se comportam quando confrontados com séries de potências que possuem raio de convergência infinito, tomamos a função  $f(x) = e^{-x}$  e realizamos sua expansão em torno de  $x = 0$ . Por se tratar de uma série bem conhecida, podemos escrever diretamente a equação para seus termos, dada por:

$$e^{-x} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-x)^n}{n!}. \quad (27)$$

Usando novamente o Teorema de *Cauchy-Hadamard*, temos que o raio de convergência dessa série é dado por

$$R = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt[n]{|a_n|}}, \quad (28)$$

onde  $a_n$  é o coeficiente da série de potências, ou seja,  $a_n = \frac{(-1)^n}{n!}$ , que aplicado na equação acima retorna

$$\begin{aligned} R &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt[n]{\left| \frac{(-1)^n}{n!} \right|}} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n!}{\sqrt[n]{|(-1)^n|}} \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} n = \infty \end{aligned}$$

Portanto, a série converge para todo  $x \in \mathbb{R}$  finito e o raio de convergência é  $R = \infty$ .

Agora que mostramos que a série possui um raio de convergência infinito, procederemos com o cálculo dos aproximantes de Padé. Nos limitaremos aos aproximantes diagonais por praticidade e para otimizar o processo de convergência. O primeiro a ser calculado é o aproximante de Padé de primeira ordem,

$$P_1^1(x) = \frac{2-x}{x+2}, \quad (29)$$

seguinte do de segunda ordem,

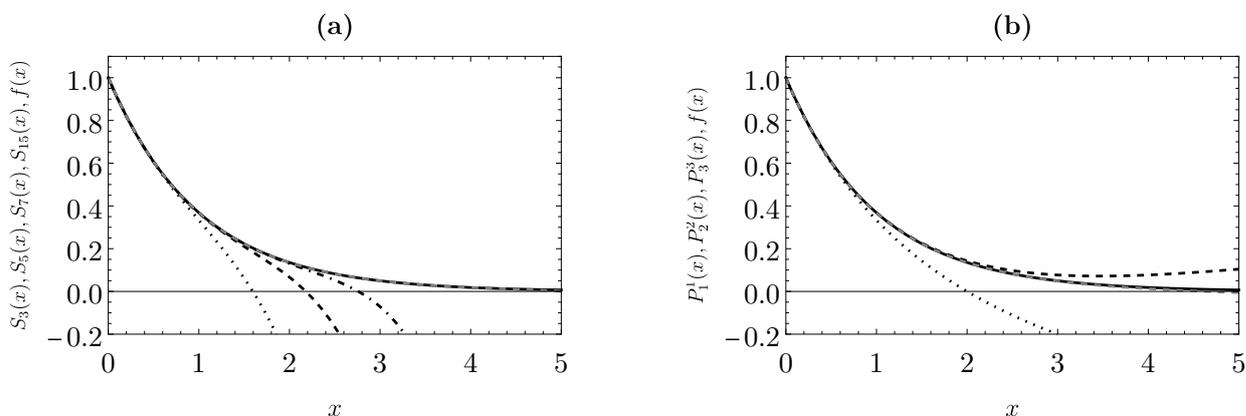
$$P_2^2(x) = \frac{x^2 - 6x + 12}{x^2 + 6x + 12}, \quad (30)$$

e finalizamos com o de terceira ordem,

$$P_3^3(x) = \frac{-x^3 + 12x^2 - 60x + 120}{x^3 + 12x^2 + 60x + 120}. \quad (31)$$

Comparamos na Fig.2 o comportamento das somas parciais da série de Taylor de  $e^{-x}$  com a função exata. As somas parciais foram representadas por  $S_n(x)$ , onde  $n$  representa o número de termos da série utilizados para compor a soma. A linha sólida preta representa  $e^{-x}$ , nas duas figuras. Na Fig.2(a) percebemos que à medida que usamos mais termos para compor a soma parcial da série Taylor, melhor é o ajuste à linha de referência (linha sólida preta), algo esperado uma vez que o raio de convergência dessa série é infinito. Para reproduzir o comportamento de  $e^{-x}$ , até  $x = 5$ , são necessários 15 termos da série de Taylor. O melhor ajuste, que acontece para  $S_{15}(x)$ , é representado por uma linha tracejada cinza que fica sobreposta à linha sólida preta. Porém, quando analisamos a Fig.2(b), que compara os aproximantes  $P_1^1(x)$  (linha pontilhada),  $P_2^2(x)$  (linha tracejada preta) e  $P_3^3(x)$  (linha tracejada cinza) com  $e^{-x}$ , percebemos que esse ajuste acontece já para o aproximante de ordem 3, representado por uma linha tracejada cinza. Ou seja, enquanto o ajuste na Fig.2(a) acontece para uma soma parcial com 15 termos da série, na Fig.2(b), esse mesmo ajuste, acontece para  $P_3^3(x)$ , que precisa de apenas 7 termos da série para ser construído. Menos da metade dos termos!

**Figura 2** – Curvas de  $e^{-x}$  (linha sólida preta), (a)  $S_3(x)$  (linha pontilhada),  $S_5(x)$  (linha tracejada),  $S_7(x)$  (linha ponto-tracejada),  $S_{15}(x)$  (linha tracejada cinza), (b)  $P_1^1(x)$  (linha pontilhada),  $P_2^2(x)$  (linha tracejada preta) e  $P_3^3(x)$  (linha tracejada) em função de  $x$ .



Fonte: Autor(2023)

Com todos os elementos discutidos acima, podemos construir uma resposta para a provocação feita no início desta seção: *contudo, qual seria a utilidade dos aproximantes quando nos deparamos com uma série de Taylor que já possui raio de convergência infinito?*. A resposta para esse questionamento é: *os aproximantes de Padé podem convergir mais rapidamente*. Na verdade, deveríamos dizer que, quando convergem, podem fazê-lo mais rápido que a série de potências (muita atenção para o termo "podem", pois há casos em que a série de Taylor converge mais rápido [60]). Os aproximantes de Padé mostram que, para muitos casos, simplesmente reorganizando os termos de uma série de Taylor, é possível expandir a região de convergência, para séries que possuem raios de convergência finitos, e aumentar a velocidade de convergência, para séries que possuem raio infinito. As utilidades dessa propriedade ficam evidentes quando estamos trabalhando em intervalos maiores, que muitas vezes demandam milhares de termos de uma série de potências para representar uma boa aproximação do resultado analítico. Para esses casos, os aproximantes podem economizar algumas horas preciosas de processamento de dados.

### 2.2.6 APROXIMANTES DE PADÉ DE $f(x) = (x + 10)/(1 - x^2)$

Na contramão do que foi mostrado até aqui, discutiremos um exemplo onde os aproximantes de Padé não convergem nem mesmo dentro da região de convergência da série de Taylor.

Em Ref.[60], Bender e Orszag discutiram um exemplo em que os aproximantes de Padé não convergem. Inicialmente eles consideram uma função

$$f(x) = (x + 10)/(1 - x^2), \quad (32)$$

com a série de Taylor dada por

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n, \quad (33)$$

onde  $a_{2n} = 10$  e  $a_{2n+1} = 1$ . Esta série possui raio de convergência  $R = 1$ .

O aproximante de Padé,  $P_1^N(x)$  é dado por

$$P_1^N(x) = \sum_{n=0}^{N-2} a_n x^n + \frac{a_{N-1} x^{N-1}}{1 - a_N x / a_{N-1}}. \quad (34)$$

Assim, se  $N$  é par,  $P_1^N(x)$  tem um polo em  $x = 1/10$ . Consequentemente, não converge para esse grupo de aproximantes, nem mesmo dentro da região de convergência da série de Taylor,  $|x| < 1$ .

Esse exemplo mostra que os aproximantes de Padé podem ir de exemplos empolgantes até problemas patológicos, como o visto aqui. Esses comportamentos, muitas vezes inesperados, dos aproximantes de Padé, mostram o quão importante é o estudo dessas estruturas para podermos entendê-las.

### 2.3 A TABELA DE PADÉ

A Tabela de Padé, que ganhou seu nome por questões históricas [50, 51, 62], é uma importante ferramenta para o cálculo de aproximantes de ordens mais altas ( $N = 100$ , por exemplo). Isso decorre das suas propriedades que envolvem tanto os termos da diagonal principal ( $N = M$ ) quanto aqueles fora dela ( $N \neq M$ ). Os termos da diagonal principal, junto aos da subdiagonal superior ( $N = M - 1$ ), compõem os termos de maior interesse prático [62].

Os aproximantes de Padé que ocupam a diagonal principal, e aqueles que ocupam a subdiagonal superior, se destacam por terem propriedades de invariância sob certos tipos de transformações. A primeira propriedade que envolve esses dois grupos diz que: seja  $P_N^N(x)$  um aproximante diagonal de uma função  $f(x)$  e  $Q_N^{N-J}(x)$  um aproximante na subdiagonal inferior de uma função  $g(x)$ . Se  $P_N^N(x) = Q_N^{N-J}(x)$ , então  $f(x) = x^J g(x)$ . Essa propriedade nos permite conhecer os aproximantes de uma função  $f(x)$  conhecendo os

aproximantes de outra  $g(x)$ . A segunda propriedade diz respeito apenas aos aproximantes diagonais, e também é uma relação de invariância: seja  $P_N^N(x)$  um aproximante de Padé situado na diagonal principal de uma função  $f(x)$ , então  $P_N^N(ax/(1+bx))$  é o aproximante diagonal de  $f(ax/(1+bx))$ . Essa propriedade tem seu apelo no fato de permitir que, do ponto de vista dos aproximantes diagonais, todos os pontos de origem da expansão sejam equivalentes. Dessa forma é possível mapear qualquer ponto fora da origem. Isso tem uma implicação direta no formato da região de convergência dos aproximantes, pois essa passa a depender da forma analítica de  $f(x)$ . Em termos da geometria da região de convergência, os aproximantes de Padé não estão mais limitados a um círculo, como nas séries de Taylor, mas a uma região que depende da forma de  $f(x)$ . Por fim, mais uma relação importante entre os elementos da Tabela de Padé está relacionada a inversão das ordens dos aproximantes: seja  $P_M^N(x)$  um aproximante em qualquer posição na tabela e  $f(x)$  sua função geradora, temos que  $1/f(x)$  produzirá o aproximante  $P_N^M(x)$ , desde que  $f(0) \neq 0$  [62].

Além das propriedades de invariância, os elementos da tabela de Padé possuem relações algébricas entre si [62]. A maioria delas foi descoberta por Frobenius (1881-1941). Além dessas, a que gerou um dos algoritmos mais conhecidos envolvendo os elementos da Tabela de Padé, o algoritmo  $\varepsilon$  de Wynn, só viria ser descoberto por Wynn [62, 63] em 1956. Essa propriedade algébrica relaciona os aproximantes que estão dispostos na tabela da seguinte forma:

**Tabela 4** – Elementos relacionáveis da Tabela de Padé.

	$P_M^{N-1}(x)$	
$P_{M-1}^N(x)$	$P_M^N(x)$	$P_{M+1}^N(x)$
	$P_M^{N+1}(x)$	

Fonte: AUTOR(2023)

por meio da equação

$$\frac{1}{P_M^{N+1}(x) - P_M^N(x)} + \frac{1}{P_M^{N-1}(x) - P_M^N(x)} = \frac{1}{P_{M-1}^N(x) - P_M^N(x)} + \frac{1}{P_{M+1}^N(x) - P_M^N(x)}. \quad (35)$$

A relação acima pode ser reorganizada a fim de isolarmos o termo  $P_{M+1}^N(x)$ . Assim, fazendo os elementos  $P_{M+1}^N(x) = \infty$  (corresponde a uma coluna, na forma de condição de contorno, localizada à esquerda da coluna  $P_0^N(x)$ ) e  $P_{-1}^N(x) = 0$  (corresponde a uma linha, na forma de condição de contorno, localizada acima da linha  $P_N^0(x)$ ), podemos

construir uma tabela de recursão para encontrar os aproximantes de Padé de qualquer ordem rapidamente, uma vez que a coluna  $P_0^N(x)$  é conhecida e corresponde a série de Taylor da função. Para um diagrama detalhado pode-se consultar Ref.[62].

Uma vez conhecidas as propriedades da Tabela de Padé e a forma que seus elementos se relacionam, é importante destacar que, apesar dessas propriedades serem robustas e facilitarem bastante o cálculo dos aproximantes, elas dependem que o aproximante  $P_M^N(x)$  exista na posição  $(N, M)$  e os denominadores da Eq.(35) não se anulem.

#### 2.4 CONVERGÊNCIA DOS APROXIMANTES DE PADÉ

Note que até agora nos esquivamos de tratar de forma mais rigorosa sobre a convergência dos aproximantes. Em alguns momentos, simplesmente declaramos que eles convergiriam para a função original; enquanto em outros, ficamos no cômodo lugar daqueles que já conhecem a forma original da função aproximada e por isso podem comparar com os resultados obtidos pelos aproximantes. Essa situação incômoda ocorre porque ainda não temos na literatura uma teoria geral da convergência dos aproximantes de Padé [60]. É uma questão em aberto! Porém, o que torna uma teoria geral da convergência dos aproximantes algo tão difícil a ser obtido? A dependência do formato da região de convergência dos aproximantes com a forma analítica da função geradora é sem dúvida algo relevante nesse problema [62]. Essa dependência impede que a teoria de convergência dos aproximantes seja apenas uma simples extensão da teoria de convergência da série de Taylor, que tem sempre uma região de convergência circular. Porém, essa é apenas uma questão: quais são as outras?

Bender e Orzag em Ref.[60] intuíram duas perguntas fundamentais que devem ser respondidas para podermos entender melhor o processo de convergência dos aproximantes de Padé. A primeira pergunta é: por que e como os aproximantes convergem tão rapidamente? Bender e Orzag [60] respondem essa primeira pergunta dizendo que deve-se garantir que tanto os zeros como os polos dos aproximantes saiam da região de convergência considerada. Essa conclusão é válida para qualquer tipo de função aproximada. Porém, isso levanta outro problema ainda mais fundamental: se um aproximante converge, qual a relação entre este limite alcançado e a série de potências que originou o aproximante, uma vez que várias funções podem ter o mesmo comportamento quando vão para o infinito? Como o

aproximante escolhe essa função? Para essa questão, Bender e Orzag [60] não possuem uma resposta geral, mas apenas para uma classe especial de funções; as funções do tipo Stieljes. Para essas funções, Bender e Orzag [60] demonstram haver uma teoria da convergência dos aproximantes de Padé "relativamente completa e elegante". Inclusive, uma espécie de *Teorema do sanduíche* para a convergência dos aproximantes de Padé para esse grupo de funções é provado. Ou seja,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P_{N+1}^N \leq F(x) \leq \lim_{N \rightarrow \infty} P_N^N,$$

onde  $F(x)$  é uma função do tipo Stieljes e  $P_{N+1}^N$  e  $P_N^N$  correspondem aos elementos da diagonal principal e da subdiagonal superior, respectivamente. Esse teorema foi ilustrado na Seção 2.2.4 e é válido para toda função do tipo Stieljes (mas não só para elas).

Apesar de ser completa, uma descrição detalhada da teoria da convergência dos aproximantes de Padé para as funções Stieljes demandaria digressões extensas sobre séries de Stieljes e frações contínuas, que foge totalmente ao objetivo deste trabalho, que tem como foco a aplicação direta dos aproximantes para problemas de interesse físico.

## 2.5 CONCLUSÕES

Mostramos que os aproximantes de Padé são uma ferramenta robusta na busca por resultados finitos para séries potências, dentro e fora da região de convergência da série. A velocidade de convergência dos aproximantes e sua fácil implementação computacional, fazem dos aproximantes um instrumento importante na extrapolação para problemas de natureza física. A existência de uma teoria da convergência dos aproximantes de Padé para apenas uma classe de funções, as funções Stieljes, figura como ponto negativo para essa ferramenta matemática. Contudo, a possibilidade de aplicação, mesmo sem uma teoria geral da convergência, fazem essa área uma ferramenta fecunda para novos estudos.

## ESPALHAMENTO ELETROMAGNÉTICO EM MEIOS UNIDIMENSIONAIS, COMPLEXOS E NÃO HOMOGÊNEOS

Neste capítulo desenvolveremos uma metodologia geral, baseada num método perturbativo, para calcular o campo espalhado por um material de tamanho finito  $L$  e constante dielétrica  $\varepsilon(z)$ . Abordaremos tanto espalhamentos fortes quanto fracos. Para o tratamento dos termos divergentes da série de Born, utilizaremos os aproximantes de Padé como ferramenta para garantir a convergência da série. Em seguida, mostraremos os resultados obtidos após o uso dos aproximantes de Padé em um conjunto de quatro problemas unidimensionais de interesse físico. A maioria dos materiais que serão abordados neste capítulo já foram amplamente discutidos na literatura, só que sob outros aspectos [24, 64–68]. Os resultados mostrados neste capítulo foram publicados e podem ser vistos na Ref. [52].

### 3.1 PROPAGAÇÃO DE ONDAS ELETROMAGNÉTICAS

Para entendermos o comportamento da luz espalhada por algum material, primeiro precisamos saber como essas ondas se propagam. Ou seja, precisamos de uma equação de propagação para ondas eletromagnéticas. Tendo em mãos essa equação, poderemos inferir o comportamento do campo dentro ou fora do material. Além disso, conhecendo as condições de contorno do problema, poderemos calcular a direção da onda espalhada por qualquer material.

As equações de Maxwell na matéria, dadas por

$$\begin{aligned}
 \vec{\nabla} \cdot \vec{D} &= \rho, \\
 \vec{\nabla} \cdot \vec{B} &= 0, \\
 \vec{\nabla} \times \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \\
 \vec{\nabla} \times \vec{H} &= \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t},
 \end{aligned} \tag{36}$$

com  $\vec{D}$  sendo o vetor deslocamento elétrico,  $\rho$  a densidade de carga,  $\vec{B}$  o vetor indução magnética,  $\vec{J}$  a densidade de corrente,  $\vec{E}$  o vetor campo elétrico e  $\vec{H}$  o vetor campo magnético, compõem as leis fundamentais do eletromagnetismo clássico que, quando combinadas, dão origem à equação de propagação para ondas eletromagnéticas.

Os vetores  $\vec{D}$  e  $\vec{H}$  são grandezas que encerram características tanto da onda incidente quanto da resposta do meio à interação com esse campo. O vetor deslocamento elétrico é tal que  $\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}$ , onde  $\epsilon_0$  é a permissividade elétrica do vácuo e  $\vec{P}$  a polarização do meio induzida pelo campo. Já o campo magnético pode ser escrito como  $\vec{H} = \vec{B}/\mu_0 - \vec{M}$ , onde  $\mu_0$  é a permeabilidade do vácuo e  $\vec{M}$  a magnetização induzida no meio. Apesar de simples, essas expressões para  $\vec{D}$  e  $\vec{H}$  geram dificuldades adicionais ao problema, uma vez que incluem novas variáveis ao problema,  $\vec{P}$  e  $\vec{M}$ . Logo, se não sabemos como  $\vec{P}$  e  $\vec{M}$  se relacionam com o campo incidente, teremos equações de onda que não dependem apenas do campo eletromagnético. Para resolver esse impasse, lançamos mão de hipóteses simplificadoras, ou relações constitutivas. Essas hipóteses colocam  $\vec{P}$ ,  $\vec{M}$  e  $\vec{J}$  como variáveis proporcionais ao campo incidente, nas formas:  $\vec{P} = \epsilon_0 \chi \vec{E}$ ,  $\vec{M} = \chi_m \vec{H}$  e  $\vec{J} = \sigma \vec{E}$ , com  $\chi$  sendo a susceptibilidade elétrica,  $\chi_m$  a susceptibilidade magnética e  $\sigma$  a condutividade elétrica do meio. Note que, aqui,  $\chi$  trata-se de uma escalar. Porém, em muitos casos, essa variável pode vir na forma de um tensor. A natureza tensorial de  $\chi$  permite que apliquemos um campo elétrico em uma direção e produzamos polarização em outra. Todavia, para meios isotrópicos, que serão os tratados aqui, não precisamos nos preocupar com a natureza tensorial de  $\chi$ . O que foi discutido acima também vale para  $\chi_m$  e  $\sigma$ . Agora que conhecemos a dependência de  $\vec{P}$  e  $\vec{M}$  com os respectivos campos, podemos reescrever o vetor deslocamento elétrico como  $\vec{D} = \epsilon \vec{E}$ , com  $\epsilon = \epsilon_0(1 + \chi)$ , e  $\vec{B} = \mu \vec{H}$ , com  $\mu = \mu_0(1 + \chi_m)$ , onde  $\epsilon$  e  $\mu$  são permissividade elétrica e permeabilidade magnética do meio, respectivamente. Por fim, podemos definir as grandezas  $\epsilon \equiv \epsilon/\epsilon_0$  e  $\kappa_m \equiv \mu/\mu_0$  como

a permissividade relativa (constante dielétrica) e a permeabilidade relativa (constante magnética) do meio, respectivamente.

Tendo montado todas as relações de dependência necessárias, podemos agora deduzir a equação de onda para os campos eletromagnéticos que se propagam num material. Para fins práticos, consideraremos um meio sem cargas e correntes livres,  $\rho = |\vec{J}| = 0$ . Além disso, as dependências espaciais e temporais serão omitidas para fins de economia de notação. Assim, partindo da Lei de Faraday,

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (37)$$

e aplicando rotacional em ambos os lados, temos

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

onde podemos trocar a ordem do rotacional e da derivada, uma vez que posição e tempo são variáveis independentes. Logo, fazendo  $\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu(\vec{\nabla} \times \vec{H})$ , podemos reescrever a relação acima como

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{E}) = -\mu \frac{\partial (\vec{\nabla} \times \vec{H})}{\partial t}.$$

Usando a Lei de Ampère,

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}, \quad (38)$$

reescrevemos a relação anterior como

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{E}) = -\mu \frac{\partial^2 \vec{D}}{\partial t^2}.$$

Por fim, aplicando a identidade  $\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{E}) = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{E}) - \vec{\nabla}^2 \vec{E}$  e a Lei de Gauss para ausência de cargas,  $\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0$ , encontramos a equação de onda para o campo elétrico,

$$\nabla^2 \vec{E} = \mu\epsilon \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}. \quad (39)$$

Seguindo os mesmos procedimentos acima, podemos encontrar facilmente uma equação para  $\vec{B}$ .

Para o caso de uma propagação unidimensional no eixo  $z$ , a Eq.39 torna-se

$$\frac{\partial^2 E}{\partial z^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2}, \quad (40)$$

onde  $v = 1/\sqrt{\mu\epsilon}$  é a velocidade de propagação da onda no meio. Sendo  $\epsilon \equiv \epsilon/\epsilon_0$  e  $\kappa_m \equiv \mu/\mu_0$ , podemos reescrever a velocidade como  $v = c/\sqrt{\epsilon\kappa_m}$ , com  $c$  sendo a velocidade

da luz no vácuo e dada por  $c = 1/\sqrt{\mu_0\epsilon_0}$ . Para meios não magnéticos temos  $\kappa_m = 1$ . Assim, a velocidade de propagação da onda eletromagnética no meio material, para materiais não magnéticos, é dada por

$$v = \frac{c}{\sqrt{\epsilon}}. \quad (41)$$

Logo, uma vez que a velocidade da onda no meio pode ser escrita como  $v = c/n$ , com  $n$  sendo o índice de refração do material, temos que  $n = \sqrt{\epsilon}$ , ou  $n = \sqrt{1 + \chi}$ . Portanto, se conhecemos  $\chi$ , também conhecemos o comportamento de  $n$ . Conhecer a susceptibilidade de um material significa saber o quão ele é susceptível à polarização quando sob o efeito de um campo externo. Ou seja, materiais com altas susceptibilidades geram polarizações intensas mesmo sob efeitos de campos fracos.

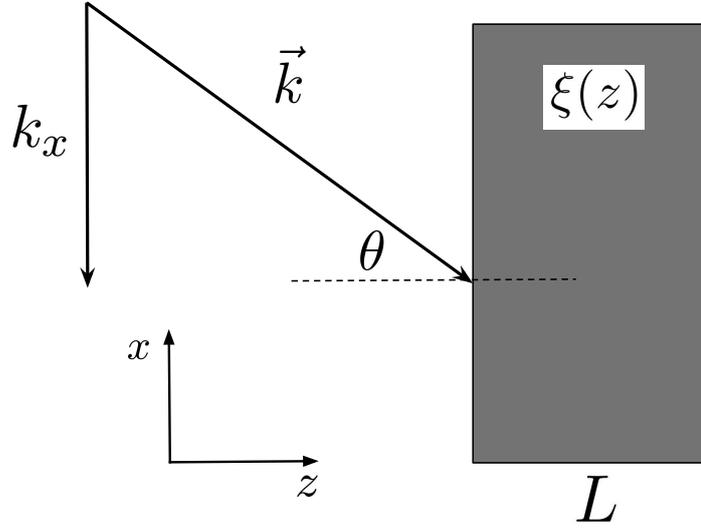
### 3.2 ESPALHAMENTO DE LUZ EM MEIOS UNIDIMENSIONAIS FINITOS

Considerando uma componente monocromática  $E(x, z; \omega)$  do campo elétrico polarizado em  $\hat{\mathbf{y}}$ , ou seja,  $\mathbf{E}(x, z, t) = \text{Re}[E(x, z; \omega)e^{-i\omega t}]\hat{\mathbf{y}}$ , e aplicando diretamente em Eq.(39), obtemos a equação de Helmholtz, que pode ser escrita como

$$\frac{\partial^2 E}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} + k^2\epsilon(z)E = 0, \quad (42)$$

com  $k = \omega/c$ ,  $c$  a velocidade da luz no vácuo,  $\omega$  a frequência angular,  $\epsilon(z) = 1 + \alpha\chi(z)$  a permissividade elétrica relativa,  $\chi(z)$  a susceptibilidade elétrica linear do meio e  $\alpha$  o parâmetro perturbativo. O material teorizado deve ser o mais genérico possível, bem como limitado no espaço. Ou seja, nosso material está confinado entre 0 e  $L > 0$ , ao longo do eixo  $z$ , conforme idealizado na Fig.3. Definimos nossa susceptibilidade linear como  $\chi(z) = \Theta_L(z)\xi(z)$ , onde  $\Theta_L(z)$  é uma função do tipo *Heaviside*, com  $\Theta_L(z) = 1$ , se  $z \in [0, L]$ , e  $\Theta_L(z) = 0$ , se  $z \notin [0, L]$ . Dessa forma, limitamos nosso material no espaço, que passa a ter um tamanho fixo  $L$ . Após a redefinição de  $\chi(z)$ ,  $\xi(z)$  passa a encerrar todas as características do material. Portanto, para caracterizar um material, basta atribuir a ele uma expressão para  $\xi(z)$ , que pode ser complexa ou real.

**Figura 3** – Geometria de espalhamento. A onda plana incidente é caracterizada pelo vetor de onda  $\vec{k}$  que faz um ângulo  $\theta$  com a interface localizada em  $z = 0$ . A componente paralela  $k_x$  à interface do dielétrico é dada por  $k_x = -k \sin \theta$ .



Fonte: Ref.[52]

Uma vez que também estamos interessados em incidências oblíquas, como já sugere a Fig. 3, representaremos o campo como

$$E(x, z) = \psi(z)e^{ik_x x}, \quad (43)$$

onde  $\psi(z)$  é a amplitude do campo na direção  $z$  e  $k_x$  a componente do vetor de onda na direção  $x$ , perpendicular à direção de propagação da onda. Uma vez que  $\theta \in (-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$  corresponde ao ângulo formado entre o vetor de onda e o eixo de propagação  $z$ , a componente  $x$  do vetor de onda é tal que  $k_x = -k \sin \theta$ . Desta forma, substituindo (43) na equação original de Helmholtz, e tomando  $\varepsilon(z) = 1 + \alpha\chi(z)$ , podemos reescrever (42) como

$$\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + k^2\psi(z)\cos^2\theta = -k^2\alpha\chi(z)\psi(z). \quad (44)$$

A equação acima pode ser reescrita numa forma integral utilizando a função de Green adequada. Sendo nosso problema unidimensional, a função de Green mais adequada para a propagação em espaço livre é dada por

$$G(z, z') = \frac{e^{ik \cos \theta |z-z'|}}{2ik \cos \theta}. \quad (45)$$

Desta feita, a Eq.(44) pode ser reescrita na forma de uma equação integral do tipo Fredholm

$$\begin{aligned} \psi(z) &= e^{ikz \cos \theta} - \alpha k^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dz' G(z, z') \chi(z') \psi(z') \\ &= e^{ikz \cos \theta} - \alpha k^2 \int_0^L dz' G(z, z') \xi(z') \psi(z'), \end{aligned} \quad (46)$$

onde o primeiro termo do lado direito da equação acima corresponde a onda incidente para o caso de ausência de material espalhador ( $\alpha = 0$ ). Note ainda que, da primeira para a segunda linha, utilizamos a função de *Heaviside* para delimitar o espaço ocupado pelo material,  $[0, L]$ , modificando os limites de integração.

### 3.3 REPRESENTAÇÃO DO CAMPO ESPALHADO EM TERMOS DA SÉRIE DE BORN

Uma das formas de resolver a Eq.(46) é assumindo que o campo  $\psi(z)$  pode ser escrito como uma série de potências de  $\alpha$ , sendo este o parâmetro perturbativo do sistema.

Desta forma, temos

$$\psi(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(z) \alpha^n, \quad (47)$$

com  $\psi_0(z) = e^{ikz \cos \theta}$  sendo a solução para o problema não perturbado com  $\alpha = 0$ . Aplicando a série de potências acima em (46), obtemos, para  $n \geq 1$ , uma relação recursiva dada por

$$\psi_n(z) = -k^2 \int_0^L dz' G(z, z') \xi(z') \psi_{n-1}(z'). \quad (48)$$

Segue daí que, aplicando diretamente a função de Green na relação recursiva mostrada acima, podemos dividi-la em dois termos:

$$\psi_n(z) = P_n(z) e^{ikz \cos \theta} + N_n(z) e^{-ikz \cos \theta}. \quad (49)$$

Note que os termos recursivos  $P_n(z)$  e  $N_n(z)$ , dados por

$$P_n(z) = \frac{ik}{2 \cos \theta} \int_0^z ds \xi(s) P_{n-1}(s) + \frac{ik}{2 \cos \theta} \int_0^z ds \xi(s) N_{n-1}(s) e^{-2iks \cos \theta} \quad (50)$$

e

$$N_n(z) = \frac{ik}{2 \cos \theta} \int_z^L ds \xi(s) P_{n-1}(s) e^{2iks \cos \theta} + \frac{ik}{2 \cos \theta} \int_z^L ds \xi(s) N_{n-1}(s), \quad (51)$$

válidos para a região  $0 \leq z \leq L$ , descrevem as sucessivas transmissões e reflexões ocorridas dentro do material. Note ainda que essas sucessivas reflexões e transmissões fazem com que as Eqs. (50) e (51) formem um sistema de equações recursivas acopladas. Para o caso não perturbado (propagação do campo sem meio espalhador) temos  $P_0 = 1$  e  $N_0 = 0$ , conforme também pode ser observado no sistema acima.

Aplicando novamente a equação de Green em (48), só que para o caso  $z > L$ , podemos escrever uma relação de recursão para os termos da transmissão à direita do material,

$$\psi_n(z) = t_n e^{ikz \cos \theta} \quad (z > L), \quad (52)$$

onde  $t_n$ , conhecida como amplitude de espalhamento de ordem  $n$ , é dada por

$$t_n = \frac{ik}{2 \cos \theta} \left[ \int_0^L ds \xi(s) P_{n-1}(s) + \int_0^L ds \xi(s) N_{n-1}(s) e^{-2iks \cos \theta} \right]. \quad (53)$$

Da mesma forma que foi feito para a transmissão à direita do material,  $z > L$ , podemos utilizar a função de Green para escrever uma expressão para o campo refletido a partir do seu lado esquerdo,  $z < 0$ ,

$$\psi_n(z) = r_n e^{-ikz \cos \theta} \quad (z < 0), \quad (54)$$

com  $r_n$ , conhecida como amplitude de reflexão de ordem  $n$ , dada por

$$r_n = \frac{ik}{2 \cos \theta} \left[ \int_0^L ds \xi(s) P_{n-1}(s) e^{2iks \cos \theta} + \int_0^L ds \xi(s) N_{n-1}(s) \right]. \quad (55)$$

Uma vez que conhecemos as expressões recursivas para a transmissão e reflexão do material, podemos reescrever a série de Born como um somatório desses termos,

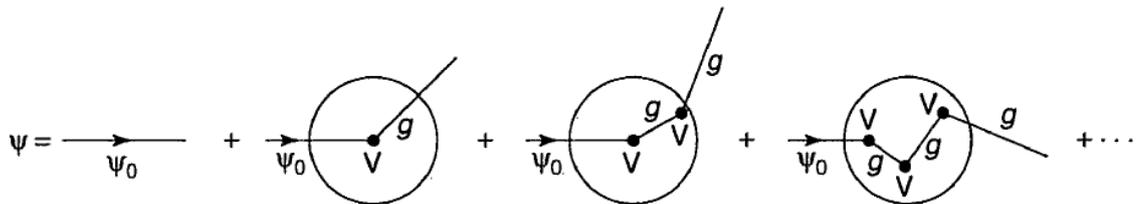
$$\begin{aligned} t &= \sum_{n=0}^{\infty} t_n \alpha^n = 1 + t_1 \alpha + t_2 \alpha^2 + \dots, \\ r &= \sum_{n=0}^{\infty} r_n \alpha^n = 0 + r_1 \alpha + r_2 \alpha^2 + \dots, \end{aligned} \quad (56)$$

com  $t_0 = 1$  e  $r_0 = 0$  sendo as soluções para o problema não perturbado. Para os problemas propostos neste trabalho faremos  $\alpha = 1$ . A amplitude  $t(r)$  é, portanto, a transmissão (reflexão) total, isto é, a amplitude da onda transmitida (refletida).

Por fim, note que o uso de uma série infinita como solução da equação de Helmholtz, além de distribuir o problema em outros menores, possui grande apelo físico. Os termos da série de Born são fundamentais para o entendimento correto do processo de espalhamento de luz por meios materiais. Cada termo da série representa um novo espalhamento, que depende do anterior. A Fig.4 mostra de forma didática os espalhamentos consecutivos que ocorrem pelo material espalhador. Essa sequência de espalhamentos secundários traz para o centro do debate a problemática da *força* do espalhamento. Ou seja, quanto mais interações ocorrem entre o material espalhador e o campo elétrico, mais *forte* é o espalhamento. Isso significa que, quanto mais complexo é o espalhamento que ocorre naquele material, mais

termos da série de Born são necessários para representá-lo. No caso contrário, quando temos espalhamentos menos complexos, são necessários poucos termos para caracterizar tal espalhamento. Neste caso, dizemos que o espalhamento é *fraco*. O espalhamento *fraco* é o mais discutido na literatura, [1, 47–49]. Isso ocorre por esse tipo de problema precisar da superposição de apenas dois termos, o termo trivial (parcela que representa a solução do problema não perturbado) e o termo de potência 1, para garantir uma boa representação do campo espalhado. A esse truncamento da série damos o nome de *primeira aproximação de Born*. Assim, sabendo do sentido físico que os termos da série de Born possuem, e dos seus usos conforme a *força* do espalhamento, resta-nos atacar o problema dos termos divergentes que podem aparecer nessa série quando estamos trabalhando problemas onde a luz interage fortemente com o material estudado. Para isso, iremos lançar mão dos aproximantes de Padé como instrumento matemático capaz de reorganizar os termos divergentes a fim de encontrar uma solução finita para o problema.

**Figura 4** – Interpretação diagramática da série de Born para um campo  $\psi$  sob a ação de um potencial  $V$ . O propagador(função de Green) é representado pela letra  $g$ .



Fonte: Ref.[69]

### 3.4 APROXIMANTES DE PADÉ PARA O CAMPO ESPALHADO

Como exposto anteriormente, os aproximantes de Padé, representados aqui como  $P_N^M$ , correspondem a uma razão de polinômios de ordem  $[N, M]$ . O par  $[N, M]$  é formado pela ordem do polinômio do denominador e numerador, respectivamente. Esses polinômios são potências do mesmo parâmetro utilizado para expandir a série de Born,  $\alpha$ . Além disso, para fins de cálculo, é possível fazer  $B_0 = 1$ , sem perda de generalidade. Segue daí que um aproximante de Padé de ordem  $[N, M]$  é dado por

$$P_N^M = \frac{\sum_{n=0}^M A_n \alpha^n}{\sum_{n=0}^N B_n \alpha^n} = \frac{A_0 + A_1 \alpha + A_2 \alpha^2 + \dots + A_M \alpha^M}{1 + B_1 \alpha + \dots + B_N \alpha^N}, \quad (57)$$

onde  $A_n$  e  $B_n$  são os coeficientes desse aproximante. Lembremos ainda que, uma vez conhecidos os termos da série divergente, precisamos de  $N + M + 1$  termos dessa série para encontrar todos os coeficientes do aproximante de ordem  $[N, M]$ . Isso pode ser facilmente exemplificado para o caso de um aproximante de ordem 1 ( $N = M = 1$ ) e uma série infinita do tipo  $\sum_{n=0}^{\infty} a_n \alpha^n$ . Para esse caso, o aproximante de primeira ordem fica

$$P_1^1 = \frac{A_0 + A_1 \alpha}{1 + B_1 \alpha} = a_0 + \frac{a_1^2 \alpha}{a_1 - a_2 \alpha}. \quad (58)$$

Fazendo  $\alpha = 1$ , temos uma expressão para o aproximante de Padé de primeira ordem. Outro aspecto importante que deve ser notado aqui é o tipo de aproximante utilizado. Por critérios de velocidade de convergência, nos deteremos apenas nos aproximantes diagonais. Isso significa que utilizaremos apenas aproximantes compostos por polinômios de mesmo grau,  $N = M$ . Outro ponto a favor do uso dos aproximantes diagonais é a sua facilidade de implementação computacional, uma vez que podemos representá-los como um quociente de determinantes de duas matrizes  $(N + 1) \times (N + 1)$ ,  $\mathbf{Q}$  e  $\mathbf{L}$ , escritas como

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_{N+1} \\ a_2 & a_3 & \cdots & a_{N+2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_N & a_{N+1} & \cdots & a_{2N} \\ a_0 \alpha^N & a_0 \alpha^{N-1} + a_1 \alpha^N & \cdots & \sum_{j=0}^N a_j \alpha^j \end{pmatrix}, \quad (59)$$

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_{N+1} \\ a_2 & a_3 & \cdots & a_{N+2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_N & a_{N+1} & \cdots & a_{2N} \\ \alpha^N & \alpha^{N-1} & \cdots & 1 \end{pmatrix}.$$

Segue daí que o aproximante diagonal de Padé é tal que  $P_N^N = \det \mathbf{Q} / \det \mathbf{L}$ . Após essa rápida digressão, podemos escrever as expressões para os aproximantes de Padé para as amplitudes de espalhamento transmitida e refletida pelo nosso material como

$$t_M^M = \frac{\sum_{n=0}^M \mathcal{A}_n \alpha^n}{1 + \sum_{n=1}^M \mathcal{B}_n \alpha^n} \quad (60)$$

e

$$r_M^M = \frac{\sum_{n=0}^M \mathcal{C}_n \alpha^n}{1 + \sum_{n=1}^M \mathcal{D}_n \alpha^n}, \quad (61)$$

onde  $\mathcal{A}_n, \mathcal{B}_n, \mathcal{C}_n$  e  $\mathcal{D}_n$  são os coeficientes que serão determinados pelo equacionamento dos aproximantes de Padé, mostrados acima, com as séries de Born definidas em (56).

Tendo definido os aproximante de Padé para a transmissão, Eqs.(60), e reflexão, (61), utilizamos a série de Born, Eq.(56), para calcular os coeficientes  $\mathcal{A}_n, \mathcal{B}_n, \mathcal{C}_n$  e  $\mathcal{D}_n$ . Além disso, esperamos que, uma vez definidos os aproximantes para cada problema proposto, esses sejam convergentes para a solução exata quando  $N \rightarrow \infty$ . A convergência dos aproximantes para um único valor, bem como sua validação por meio da comparação com uma possível solução analítica, são armas poderosas para entendermos como essas ferramentas se comportam para diferentes funções de interesse físico. Isso ocorre porque os aproximantes de Padé tem sua convergência garantida, como dito anteriormente, apenas para a classe das funções do tipo Stieljes, apesar de evidências que também possam convergir para outros tipos específicos de funções [59, 60]. Logo, ainda são necessárias mais pesquisas sobre a unicidade e convergência dos aproximantes de Padé para podermos entender o alcance do seu espectro de aplicações.

### 3.5 APLICAÇÕES

Nas subsecções seguintes abordaremos os resultados das aplicações dos aproximantes de Padé em quatro problemas distintos; cada um correspondendo a um tipo de material diferente. O primeiro problema trata-se de um material dielétrico homogêneo. Esse material é bem conhecido na literatura por possuir solução analítica bem estabelecida [45]. A metodologia utilizada para a validação dos aproximantes de Padé, para esse material e os demais, consiste em comparar a solução analítica com aproximantes de diferentes ordens, observando a concordância gradual entre as curvas. Essa metodologia, como dito acima, será aplicada em mais três problemas, a saber: material linear, que consiste em uma estrutura com  $\xi(z)$  variando linearmente ao longo do eixo  $z$ , material periódico  $\mathcal{PT}$ -simétrico, que possui uma solução bem estabelecida mostrada em Ref. [64], e um material que combina características de uma estrutura linear com uma periódica, chamado, aqui, de material tipo Bloch. O último material elencado não possui solução na literatura, portanto, seguimos, para a validação dos aproximantes de Padé, neste caso, com o critério de convergência dos aproximantes.

## 3.5.1 MATERIAL DIELÉTRICO HOMOGÊNEO

O material dielétrico homogêneo é caracterizado por uma suscetibilidade elétrica dada por  $\xi(z) = b$ , onde  $b$  é um número que pode ser real ou complexo, independente de  $z$ , e um tamanho finito igual a  $L$ . A caracterização interna do material é feita pelo cálculo dos termos das Eqs.(51) e (50), onde

$$\begin{aligned} P_1(z) &= \frac{ibkz}{2 \cos \theta}, \\ N_1(z) &= b \frac{e^{2ikL \cos \theta} - e^{2ikz \cos \theta}}{4 \cos^2 \theta}. \end{aligned} \quad (62)$$

Segue daí que, pelas Eqs.(53) e (55), calculamos os dois primeiros termos da série de Born para a transmissão,

$$\begin{aligned} t_1 &= \frac{ikbL}{2 \cos \theta}, \\ t_2 &= \frac{ikb^2}{8 \cos^2 \theta} \left[ ikL^2 - \frac{L}{\cos \theta} + \frac{(e^{2ikL \cos \theta} - 1)}{2ik \cos^2 \theta} \right], \end{aligned} \quad (63)$$

e para reflexão,

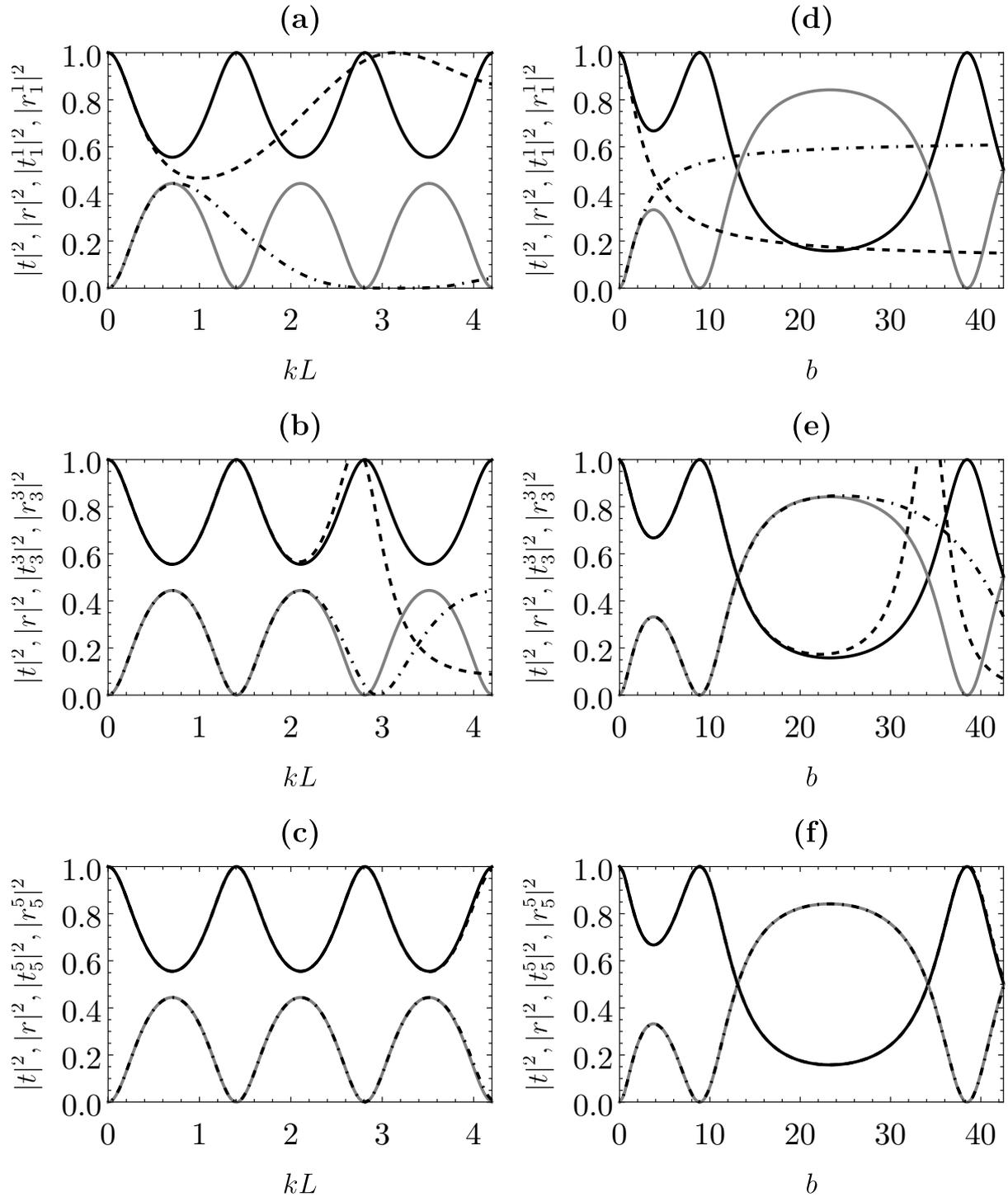
$$\begin{aligned} r_1 &= \frac{b}{4 \cos^2 \theta} (e^{2ikL \cos \theta} - 1), \\ r_2 &= \frac{b^2}{8 \cos^4 \theta} [e^{2ikL \cos \theta} (2ikL \cos \theta - 1) + 1]. \end{aligned} \quad (64)$$

Os dois pares de equações acima representam, respectivamente, os dois primeiros termos da série de Born para a transmissão e para a reflexão. Foram escolhidos apenas os dois primeiros termos para ilustrar a série de potências por se tratarem de equações curtas e fáceis de analisar. Sendo assim, uma rápida análise dos termos acima mostra que  $b$ , por assumir o papel de elemento perturbativo quando fazemos  $\alpha = 1$ , aumenta seu expoente a medida que os índices dos termos da série aumentam. Isso indica que, dependendo dos parâmetros escolhidos para caracterizar nosso problema, podemos ter uma série divergente.

O primeiro resultado da eficiência dos aproximantes de Padé é mostrado na Fig.5. Nessa figura comparamos o quadrado da amplitude da solução analítica do material dielétrico homogêneo com o quadrado da amplitude dos aproximantes de Padé,  $|t_N^N|^2$  e  $|r_N^N|^2$ , de diferentes ordens,  $N = 1, 2$  e  $3$ . Algo importante a se destacar é que a necessidade de aproximantes de ordens cada vez maiores durante o ajuste das curvas significa que a solução analítica do problema do material dielétrico homogêneo (veja Apêndice A) não corresponde a um quociente de polinômios [7]. Logo, os aproximantes de Padé,

para esse caso, nunca poderão fornecer a solução exata do problema, mas somente uma aproximação, embora de precisão arbitrária. Sendo essa precisão consequência da forma analítica da aproximação; um contraste evidente com aproximações numéricas [70–72]. Dito isso, podemos observar na Fig.5 um ajuste gradual das amplitudes quadráticas dos aproximantes, representadas pelas linhas tracejadas e ponto-tracejadas, às curvas das soluções analíticas, representadas pelas linhas sólidas. Nos itens (a-c) da Fig.5 mostramos a evolução dos quadrados das amplitudes dos aproximantes de Padé em função da variável adimensional  $kL$ , para  $\xi(z) = 4$ .

**Figura 5** – Amplitudes da transmissão e reflexão para um material homogêneo  $\xi(z) = b$  como função de (a-c)  $kL$ , para  $b = 4$  e (d-f)  $b$ , para  $kL = 1$ . A linha preta contínua é a solução exata (módulo quadrado) para a amplitude transmitida e a linha cinza contínua é a solução exata para a amplitude quadrática refletida. As linhas tracejadas (ponto-tracejadas) são os aproximantes de Padé para as amplitudes transmitidas (refletidas) (a, d)  $|t_1^1|^2$  e  $|r_1^1|^2$ , (b, e)  $|t_3^3|^2$  e  $|r_3^3|^2$ , (c, f)  $|t_5^5|^2$  and  $|r_5^5|^2$ . Parâmetros usados:  $\alpha = 1$  e  $\theta = 0$ .



Fonte: Ref.[52]

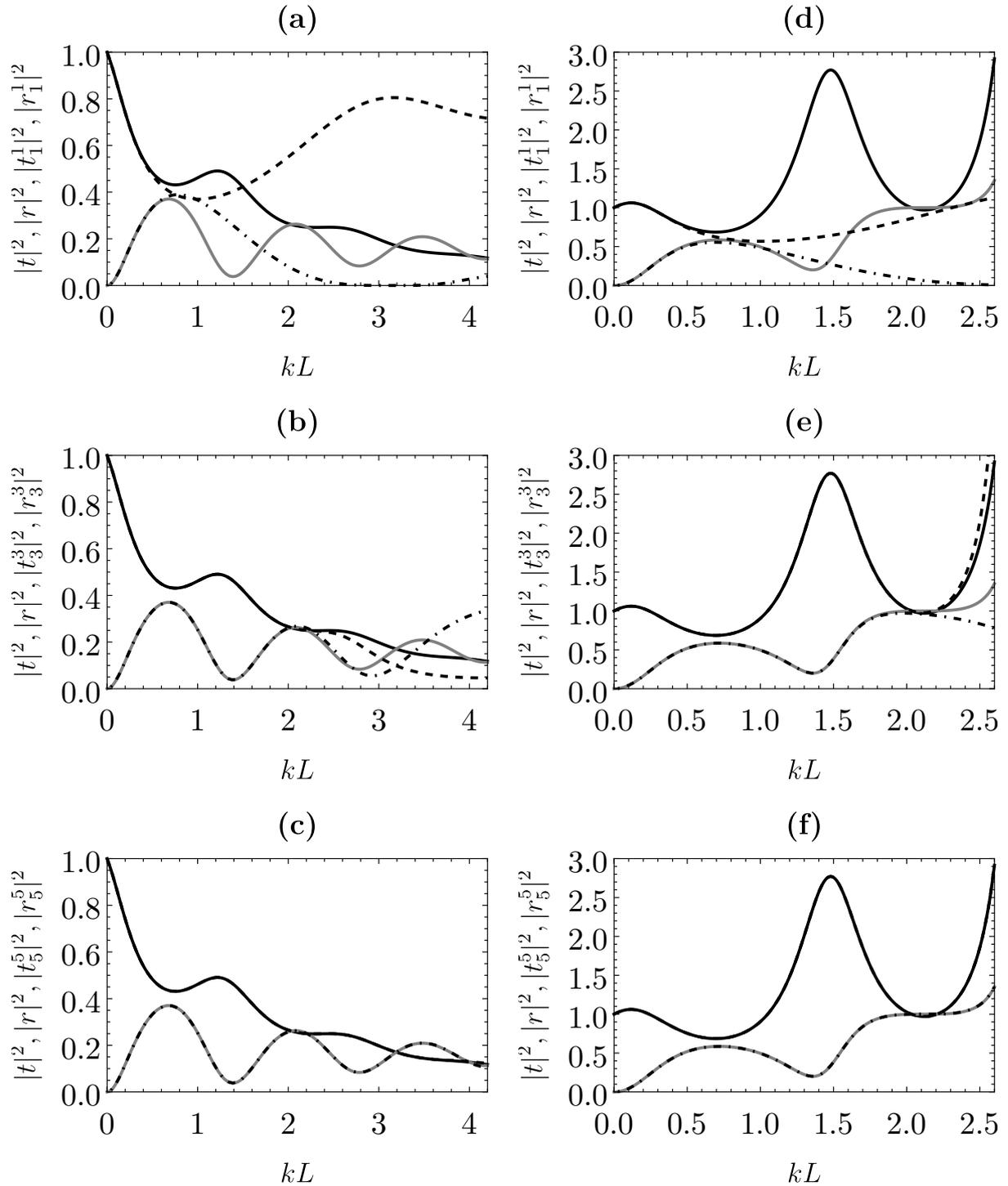
A análise realizada em função de  $kL$  permite observarmos o comportamento dos aproximantes para materiais de qualquer escala, a medida que aumentamos o tamanho da estrutura. A solução analítica mostra um comportamento já conhecido de máximos e mínimos [45], com pontos de ressonância ocorrendo para certos valores de  $kL$ . Nesses pontos a luz incidente é totalmente transmitida e a reflexão vai a zero. Percebemos ainda na Fig.5(a) que, para  $b = 4$ , os aproximantes de Padé de primeira ordem,  $|t_1^1|^2$  e  $|r_1^1|^2$ , não conseguem reproduzir esses pontos de ressonância. Desta forma, precisamos de um aproximante de Padé de ordem maior para reproduzir esses pontos. Na Fig.5(b) os aproximantes de Padé de terceira ordem mostram um ajuste melhor em relação aos aproximantes de ordem inferior, o que já é esperado. Desta forma, a Fig.5(c), por fim, mostra que, para a escala escolhida, não conseguimos distinguir a curva formada pelos aproximantes de Padé e a solução analítica. Já nos itens (d-f) da Fig.5, mostramos o ajuste das curvas das mesmas amplitudes quadráticas discutidas acima, só que desta vez em função  $b$  e para um  $kL = 1$ . Esta análise é necessária, pois  $b$  é um parâmetro de *força* do espalhamento, portanto, decisivo nas características de divergência da série de Born. Os ótimos ajustes apresentados nesses itens dão indícios que, para materiais homogêneos, os aproximantes de Padé são uma boa ferramenta para reproduzir resultados finitos em espalhamentos *fortes* ou *fracos*. Por fim, apesar dos resultados mostrados na Fig.5 serem para uma incidência do tipo normal,  $\theta = 0$ , a mesma qualidade dos ajustes foi encontrada para incidências oblíquas. Desta forma, figuras que mostram incidências oblíquas são redundantes e não trariam informações novas/relevantes para o problema; por isso não as colocamos.

A susceptibilidade elétrica  $\xi(z)$  para a Fig.5 corresponde a um número real. Já na Fig.6 mostramos novamente um material dielétrico homogêneo, agora com  $\xi(z)$  complexo. Uma vez que é muito comum encontrarmos na literatura materiais formados por dois blocos acoplados, homogêneos e finitos, onde um possui ganho, e o outro, perda [73–76], convém estudarmos a aplicabilidade dos aproximantes de Padé para esses casos, mesmo que desacoplados. Nos itens (a-c) da Fig.6 mostramos o comportamento dos aproximantes de Padé para um material com  $\xi(z) = 4 + i$ , que corresponde a um material com perda. O comportamento de perda, com a ausência dos pontos de ressonância e queda na amplitude do campo, é reproduzido pelos aproximantes da mesma forma que aconteceu na Fig.5. Quanto maiores os valores de  $kL$ , maior a ordem dos aproximantes necessários

para reproduzir a solução exata. Nos itens (d-f) da Fig.6, a solução do material com comportamento de ganho, caracterizado por  $\xi(z) = 4 - i$ , é comparado com os aproximantes de Padé de ordens  $N = 1, 3$  e  $5$ , para diferentes valores de  $kL$ . Da mesma forma que ocorreu para os demais valores de  $\xi(z)$ , temos uma progressão do ajuste das curvas com o aumento da ordem do aproximante. Essa progressão na concordância dos gráficos sugere que para trabalhar com valores de  $kL$  maiores, é necessário apenas aumentar a ordem do aproximante.

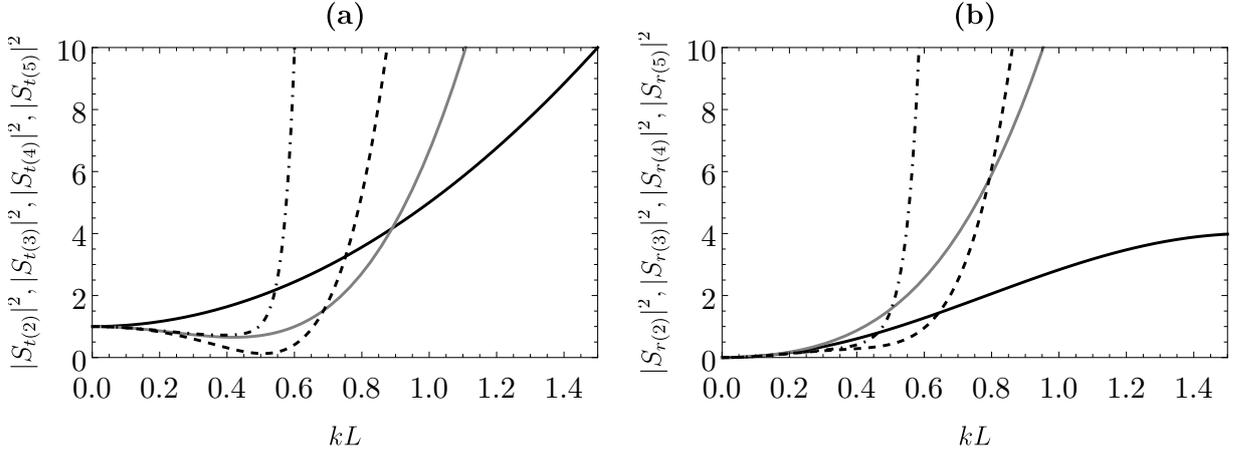
Para finalizar a discussão sobre o material dielétrico homogêneo, construímos a Fig.7. Nela mostramos como a série de Born diverge para os parâmetros utilizados. Na Fig.7(a) mostramos o comportamento da amplitude quadrática das somas parciais dos termos da série de Born para a transmissão a medida que  $kL$  varia, com  $b = 4$ . As somas parciais são representadas pela letra  $S_{x(n)}$ , com um índice  $x$  identificando transmissão,  $S_{t(n)}$ , e reflexão,  $S_{r(n)}$ . O índice  $n$ , dentro dos parênteses, representa o número de termos da série usados para compor a soma parcial. Logo,  $S_{t(n)} = \sum_{i=0}^n t_i$  representa a soma dos primeiros  $n$  termos da série de Born para a transmissão. Para  $S_{r(n)} = \sum_{i=0}^n r_i$  temos o mesmo, só que para reflexão. O comportamento em ambos os itens da Fig.7 mostra os termos da série de Born divergindo, com a linha sólida preta representando a soma parcial dos dois primeiros termos (primeira aproximação de Born), e a linha ponto tracejada a soma parcial dos cinco primeiros. Percebemos, a partir da Fig.7, que a inclusão de novos termos da série de Born faz com que a série divirja mais rapidamente. Uma vez que utilizamos  $b = 4$ , infere-se imediatamente que para  $b \geq 4$  a série também divergirá, uma vez que a série é muito sensível a esse parâmetro. Destacamos ainda que, para valores de  $kL$  muito próximos de zero, a primeira aproximação de Born é suficiente para descrever o sistema, o que já era esperado, dado o aumento da potência de  $kL$  para os termos de ordens maiores.

**Figura 6** – Amplitudes de transmissão e reflexão para um material homogêneo com (a-c)  $\xi(z) = 4+i$  e (d-f)  $\xi(z) = 4-i$  como função de  $kL$ . A linha preta contínua é a solução exata (módulo quadrado) para a amplitude transmitida e a linha cinza contínua é a solução exata (módulo quadrado) para a amplitude refletida. As linhas tracejadas (ponto-tracejadas) são os aproximantes de Padé para as amplitudes transmitidas (refletidas). (a, d)  $|t_1^1|^2$  e  $|r_1^1|^2$ , (b, c)  $|t_3^3|^2$  e  $|r_3^3|^2$  e (c, f)  $|t_5^5|^2$  and  $|r_5^5|^2$ . Parâmetros usados:  $\theta = 0$  e  $\alpha = 1$



Fonte: Ref. [52]

**Figura 7** – Amplitudes das somas parciais para transmissão e reflexão para um material homogêneo com  $\xi(z) = 4$  como função de  $kL$ . A linha preta contínua é o módulo quadrado da soma parcial dos dois primeiros termos da série de Born para a (a) transmissão e (b) reflexão. A linha cinza contínua é o módulo quadrado da soma parcial dos três primeiros termos da série de Born para a (a) transmissão e (b) reflexão. As linhas tracejadas (ponto-tracejadas) são os módulos quadrados das somas parciais dos quatro (cinco) primeiros termos da série de Born para a (a) transmissão e (b) reflexão. Parâmetros usados:  $\theta = 0$  e  $\alpha = 1$



Fonte: Autor(2023)

### 3.5.2 MATERIAL LINEAR

O próximo material que será discutido é do tipo  $\xi(z) = 1 + gz$ , sendo  $g$  uma constante. Diferente do material homogêneo, esse apresenta uma variação linear com  $z$  no seu índice de refração. Portanto, para esse caso, a equação de Helmholtz torna-se em uma equação de Airy do tipo  $d^2\psi_2(u)/du^2 = u\psi_2(u)$ , cuja solução geral é apresentada no Apêndice B.

O procedimento seguido nesta seção segue o modelo de análise feito para o material dielétrico homogêneo. Portanto, os termos  $P_1(z)$  e  $N_1(z)$ , que representam o comportamento do campo dentro do material, são dados por

$$\begin{aligned}
 P_1(z) &= \frac{ikz}{4 \cos \theta} (2 + gz), \\
 N_1(z) &= \frac{1}{8k \cos^2 \theta} \left\{ e^{2ikL \cos \theta} \left[ \frac{ig}{\cos \theta} + 2k(1 + gL) \right] - e^{2ikz \cos \theta} \left[ \frac{ig}{\cos \theta} + 2k(1 + gz) \right] \right\},
 \end{aligned} \tag{65}$$

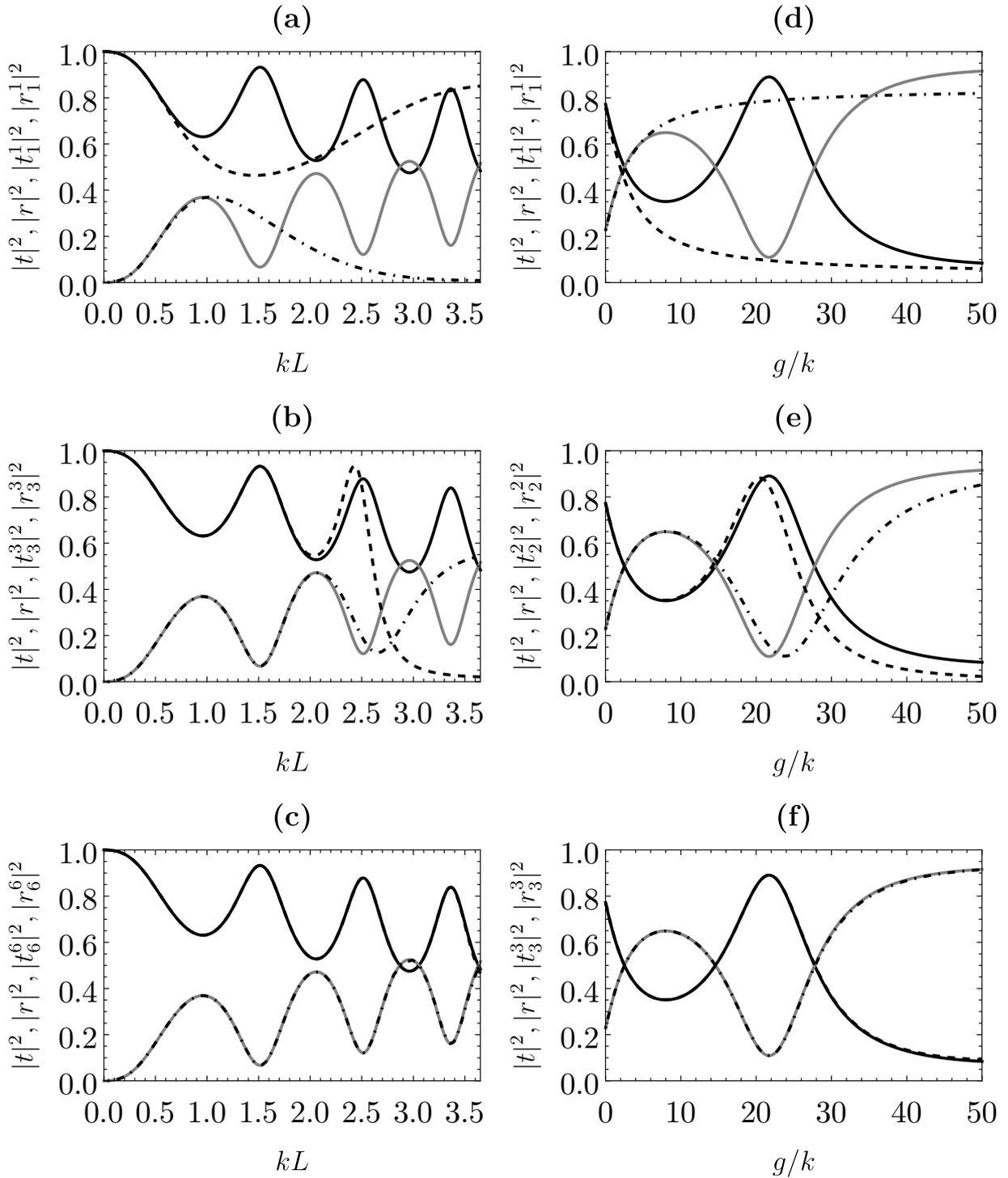
com os primeiros termos da série de Born para transmissão e reflexão dados por

$$\begin{aligned} t_1 &= \frac{ikL}{4 \cos \theta} (2 + gL), \\ r_1 &= \frac{1}{8k \cos^2 \theta} \left\{ e^{2ikL \cos \theta} \left[ \frac{ig}{\cos \theta} + 2k(1 + gL) \right] - 2k - \frac{ig}{\cos \theta} \right\}. \end{aligned} \quad (66)$$

Diferente do que foi feito para o material homogêneo, aqui não foi possível escrever  $t_2$  e  $r_2$ . Isso decorre do tamanho das expressões produzidas para esses termos. Porém, mesmo com a ausência desses elementos, ainda é possível perceber o papel do parâmetro  $g$  nos primeiros termos da série. Assim, quando fazemos  $g = 0$  em (65), de forma mais evidente em  $P_1(z)$ , retornamos para a Eq. (62).

Na Fig. 8 estudamos o comportamento dos aproximantes de Padé para o material linear. Diferente do material homogêneo, optamos aqui por uma incidência normal,  $\theta = 0$ , nas Figs. 8(a)-8(c), e uma incidência oblíqua, com  $\theta = \pi/4$ , nas Figs. 8(d)-8(f). Nos itens (a-c) de Fig. 8 comparamos os aproximantes de Padé com a solução exata do problema quando  $kL$  variava e  $g = 4$ . O mesmo comportamento de concordância entre as curvas observado para o caso homogêneo foi observado aqui. Porém, para o material linear, o intervalo dos valores de  $kL$  foi menor do que para o caso homogêneo, bem como a ordem mais alta do aproximante utilizado para fechar o ajuste das curvas,  $N = 6$ . Para o caso homogêneo, Fig. 7, para valores até próximos de  $kL = 4.5$ , bastava um aproximante de Padé de ordem  $N = 5$  para representar com precisão arbitrária a solução exata do problema. Contudo, para o caso linear, para um  $kL = 3.6$  é necessário um aproximante de  $N = 6$ . Esse comportamento era esperado, já que o material linear exhibe complexidades que o material homogêneo não possui. Nos itens (d-f) da Fig. 8 mostramos o comportamento dos aproximantes para o caso de incidência oblíqua e  $kL = 1$ . Realizamos a comparação entre os aproximantes e a solução exata em função da variável adimensional  $g/k$ . Da mesma forma que  $b$ , para o caso homogêneo,  $g/k$  está relacionado a *força* do espalhamento. Indo mais além,  $g/k$  é importante para a *linearidade* do material. Ou seja, quanto maior seu valor, maior o efeito do tamanho do material no espalhamento. Assim, os aproximantes de Padé se mostraram capazes de representar, para o material linear, situações com materiais de qualquer tamanho e em regimes de espalhamentos *fortes* ou *fracos*. Por fim, note que, apesar de não mostrado, o comportamento apresentado dos aproximantes de Padé para os demais ângulos de incidência mantém a mesma qualidade dos resultados mostrados na Fig. 7. Logo, mostrar uma análise para outros ângulos não traria novos elementos para o resultado.

**Figura 8** – Amplitudes de transmissão e reflexão para um material linear com  $\xi(z) = 1 + gz$  como função de (a-c)  $kL$ , com  $g = 4$  e  $\theta = 0$  e de (d-f)  $g/k$ , com  $kL = 1$  e  $\theta = \pi/4$ . A linha preta contínua e a solução exata (módulo quadrado) para a amplitude transmitida e a linha contínua cinza é a solução exata (módulo quadrado) da amplitude refletida. As linhas tracejadas (ponto-tracejadas) são os aproximantes de Padé para as amplitudes transmitidas (refletidas). (a, d)  $|t_1^1|^2$  e  $|r_1^1|^2$ , (b, f)  $|t_3^3|^2$  e  $|r_3^3|^2$ , (c)  $|t_6^6|^2$  e  $|r_6^6|^2$  e (e)  $|t_2^2|^2$  e  $|r_2^2|^2$ . Parâmetros usados:  $\alpha = 1$ .



Fonte: Ref.[52]

### 3.5.3 MATERIAL PERIÓDICO $\mathcal{PT}$ -SIMÉTRICO NO PONTO DE QUEBRA DE SIMETRIA

Agora discutiremos um material de amplo interesse teórico e experimental [18, 21, 32–37, 40–43], o material periódico  $\mathcal{PT}$ -simétrico. Esse material foi estudado anteriormente em Ref.[64]. Lá, são demonstrados diversos aspectos dessa estrutura, bem como a solução analítica do campo espalhado por esse material.

Os potenciais  $\mathcal{PT}$ -simétricos foram introduzidos em 1998 pelo trabalho seminal de Bender e Boettcher [16]. Nesse trabalho, os autores sugeriram que Hamiltonianos não-hermitianos poderiam ter espectros reais, desde que obedecessem às condições de simetria  $\mathcal{PT}$ . Isso significa que tais Hamiltonianos deveriam ser invariantes sob uma transformação  $\mathcal{PT}$ , onde  $\mathcal{P}$  é o operador paridade que, em uma dimensão, age sobre  $z$ , e um momento arbitrário  $p$ , invertendo seus sinais:

$$\begin{aligned}\mathcal{P}z\mathcal{P}^{-1} &= -z, \\ \mathcal{P}p\mathcal{P}^{-1} &= -p.\end{aligned}\tag{67}$$

Ou seja, o operador  $\mathcal{P}$  age como um operador reflexão. Já  $\mathcal{T}$  é chamado de operador reversão temporal. Esse operador age invertendo o sentido natural do movimento,

$$\begin{aligned}\mathcal{T}z\mathcal{T}^{-1} &= z, \\ \mathcal{T}p\mathcal{T}^{-1} &= -p,\end{aligned}\tag{68}$$

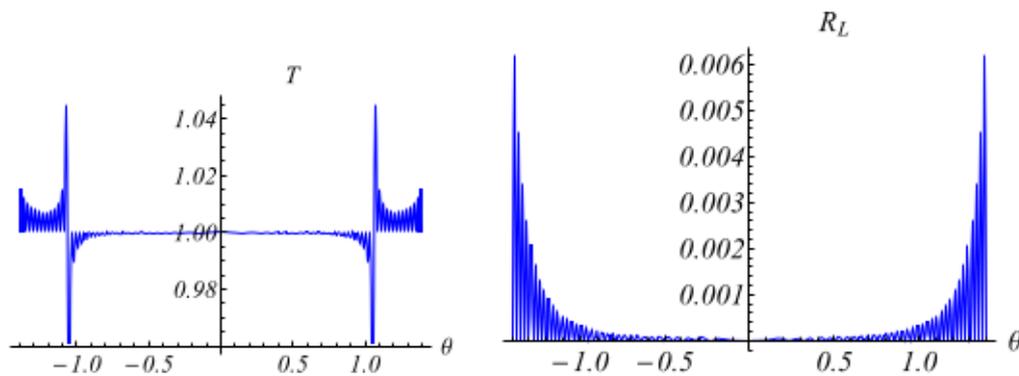
sem alterar o sinal de  $z$ . Além disso,  $\mathcal{T}$  é um operador antilinear. Logo, sob uma transformação  $\mathcal{T}$ , temos  $i \rightarrow -i$ . Assim, a ação conjunta desses operadores produz  $z \rightarrow -z$  e  $i \rightarrow -i$ . Segue daí que, um Hamiltoniano,  $H$ , é dito  $\mathcal{PT}$  simétrico quando

$$(\mathcal{PT})H(\mathcal{PT})^{-1} = H.\tag{69}$$

Contudo, apesar de Hamiltonianos invariantes sob simetria  $\mathcal{PT}$  poderem ter autovalores reais, essa condição sozinha não é suficiente. Em alguns casos, quando os Hamiltonianos dependem de algum parâmetro  $\alpha$ , é possível haver um valor crítico,  $\alpha_c$ , tal que, para  $\alpha < \alpha_c$ , os autovalores do hamiltoniano são reais, e para  $\alpha > \alpha_c$ , são complexos. Esses parâmetros identificam os pontos excepcionais, que delimitam as regiões de quebra de simetria [28–30]. Além disso, são nas proximidades desses pontos que acontecem uma série de fenômenos de interesse físico.

Discutiremos agora o comportamento dos aproximantes de Padé para o espalhamento provocado por uma estrutura do tipo  $\xi(z) \propto \cos(dz) + i\lambda \sin(dz)$ , discutida inicialmente em Ref.[25]. O parâmetro  $\lambda$  define o ponto de quebra de simetria. Logo, para  $\lambda < 1$ , nosso material se encontra na região onde a simetria  $\mathcal{PT}$  é preservada. Ou seja, para essa região temos autovalores reais. Conseqüentemente, para  $\lambda \geq 1$  há uma quebra na simetria. Já, com  $\lambda = 1$ , nos situamos exatamente no ponto de quebra da simetria  $\mathcal{PT}$ . Para esse valor de  $\lambda$  podemos reescrever a susceptibilidade como uma exponencial, tal que  $\xi(z) = be^{idz}$ , com  $b$  e  $d$  sendo números positivos. Esse material é particularmente interessante, pois Kulishov *et al.* [24] mostrou que no ponto da quebra de simetria essa estrutura apresenta invisibilidade unidirecional, com a luz incidente totalmente transmitida a partir de incidências à esquerda ou à direita e zero reflexão a partir da esquerda. Mais tarde, Feng *et al.* [32] mostra, experimentalmente, esse fenômeno para um material com potencial semelhante ao estudado aqui. Mas, foi só em 2016 que Jones e Kulishov, em Ref.[64], desenvolveram uma solução analítica exata para esse problema. Na solução de Jones e Kulishov [64] são consideradas incidências pela direita e pela esquerda; diferente do proposto neste trabalho, onde a incidência ocorre exclusivamente pela esquerda. Os resultados que servirão para validar os aproximantes de Padé para esse material foram retirados diretamente de Ref.[64], sendo reproduzidos na Fig.9.

**Figura 9** – Coeficiente de transmissão ( $T$ ) (painel esquerdo) e de reflexão à esquerda ( $R_L$ ) (painel direito) para um material periódico com  $\xi(z) = be^{idz}$  como função de  $\theta$ . Parâmetros usados:  $\alpha = 1$ ,  $d = \frac{2\pi}{0.42}$ ,  $k = \frac{2\pi\sqrt{2.4}}{0.633^2}$ ,  $b = 0.02$  e  $L = 8.4$



Fonte: Ref.[64]

Na Fig.9, no painel esquerdo, mostramos o coeficiente de transmissão ( $T$ ) em função do ângulo de incidência  $\theta$ . Para esse caso,  $T$  é o mesmo independente do lado do material que sofre incidência do campo. A solução analítica mostra que a invisibilidade unidirecional

se mantêm para o intervalo  $-0,9 \leq \theta \leq 0,9$ , sofrendo uma violação para regiões fora desse intervalo. Além disso, é importante destacar que a transição de  $T < 1$  para  $T > 1$  ocorre próximo ao ângulo de Bragg ( $\theta_B$ ), o qual é aproximadamente 1,06, como indicado em Ref.[64]. O painel direito da Fig.9 mostra a reflexão do lado esquerdo do material ( $R_L$ ) em função de  $\theta$ . Da mesma forma que observado para  $T$ , o ângulo de transição indicado para  $R_L$  é próximo de  $\theta_B$ . Em Ref.[64] são discutidos apenas resultados para  $b$  da ordem de 0,02, apesar dos autores afirmarem expressamente que a solução elaborada também serve para espalhamentos de ordens maiores.

Os aproximantes de Padé foram construídos para reproduzir os resultados mostrados em Fig.9. Dessa forma, seguindo os procedimentos dos demais materiais, temos que os dois primeiros termos da série de Born para a transmissão,  $t$ , e reflexão,  $r$ , são dados por

$$t_1 = \frac{kb}{2d \cos \theta} (e^{iLd} - 1),$$

$$t_2 = \frac{k^2 b^2}{8d \cos^2 \theta} \left[ \frac{d(e^{2iLd} - 2e^{iL(d+2k \cos \theta)} + 1)}{(d - 2k \cos \theta)(d + 2k \cos \theta)} + \frac{2k(e^{2iLd} - 1) \cos \theta}{(d - 2k \cos \theta)(d + 2k \cos \theta)} + \frac{(e^{iLd} - 1)^2}{d} \right]$$
(70)

e

$$r_1 = \frac{kb}{2 \cos \theta} \left[ \frac{e^{iL(d+2k \cos \theta)} - 1}{d + 2k \cos \theta} \right],$$

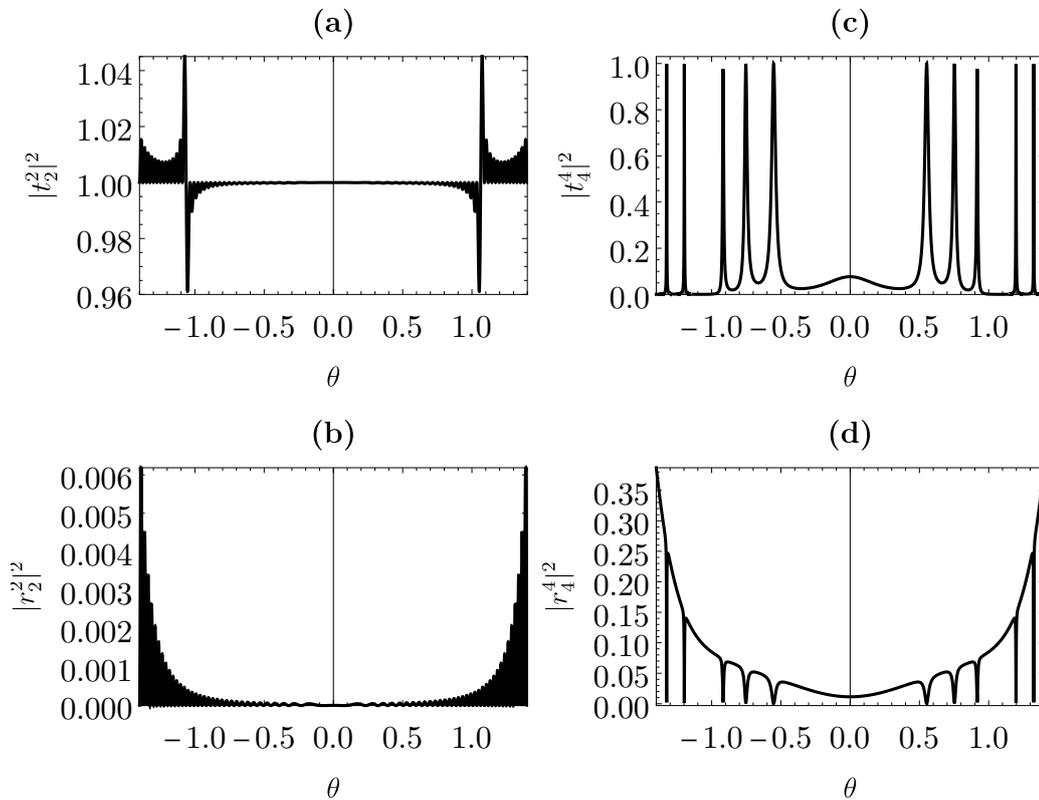
$$r_2 = \frac{k^2 b^2}{4d \cos^2 \theta} \left[ \frac{e^{2iL(d+k \cos \theta)}}{d + k \cos \theta} - \frac{e^{2iL(d+2k \cos \theta)}}{d + 2k \cos \theta} + \frac{d}{(d + k \cos \theta)(d + 2k \cos \theta)} \right].$$
(71)

Calculados os termos da série, reproduzimos na Fig.10 as amplitudes quadráticas dos aproximantes de segunda ordem, Fig.10(a) e Fig.10(b), e de quarta ordem, Fig.10(c) e Fig.10(d), como função dos ângulos de incidência  $\theta$ . Os parâmetros utilizados foram retirados de Ref.[64] a fim de reproduzir os resultados mostrados na Fig.9. Note ainda que, aqui, não foi possível realizar o ajuste progressivo entre as curvas da solução analítica e dos aproximantes de Padé, como feito para outros materiais. Essa impossibilidade decorre da alta frequência de oscilação das curvas. Contudo, uma rápida apreciação entre as Figs.9 e 10, já mostra que os aproximantes de Padé conseguem reproduzir as rápidas oscilações do comportamento de espalhamento da luz pelo material periódico  $\mathcal{PT}$ -simétrico, bem como os pontos de transição para o regime sem a invisibilidade unidirecional. Esse resultado se reproduz de forma evidente nos itens (a-b) da Fig.10.

Os resultados apresentados em Ref.[64] tratam apenas de regimes com espalhamento *fraco*. Dessa forma, os resultados mostrados nos itens (a-b) da Fig.10 também

são reproduzidos pela soma dos três primeiros termos da série de Born. Isso indica que  $b = 0,02$  produz um espalhamento que ocorre dentro da região de convergência da série de Born. Portanto, para podermos tensionar os limites dos aproximantes de Padé, precisamos de um espalhamento que ocorra fora dessa região, uma vez que já constatamos que dentro os aproximantes também convergem. Para obtermos uma série de Born divergente, fizemos  $b = 1$ . Constatamos que para essa amplitude  $\xi(z)$ , a série de Born diverge. Além disso, para evitar oscilações rápidas nas curvas plotadas, fizemos  $L = 1,68$ . Esse valor para  $L$  permitiu uma curva com menos flutuações. O resultado da aplicação dos aproximantes para esses parâmetros é mostrado nos itens (c-d) da Fig.10. Nele vemos que o perfil de invisibilidade unidirecional some, dando lugar a pequenos pontos de ressonância para ângulos de incidência maiores que 0,5. Note ainda que, diferente do caso para  $b = 0,02$ , o espalhamento com  $b = 1$  só apresentou convergência entre os aproximantes a partir da quarta ordem ( $N = 4$ ). Ou seja, os aproximantes de Padé removeram a divergência da série e conseguiram representar o resultado com apenas nove termos.

**Figura 10** – Amplitudes transmitidas e refletidas dos aproximantes de Padé para um material periódico com  $\xi(z) = be^{idz}$  como função de  $\theta$ . (a)  $|t_2^2|^2$ , (b)  $|r_2^2|^2$ , (c)  $|t_4^4|^2$  e (d)  $|r_4^4|^2$ . Parâmetros usados:  $\alpha = 1$ ,  $d = \frac{2\pi}{0.42}$ ,  $k = \frac{2\pi\sqrt{2.4}}{0.633}$  (a, b)  $b = 0.02$ ,  $L = 8.4$ , (c,d)  $b = 1$  e  $L = 1.68$ .



Fonte: Ref.[52]

## 3.5.4 MATERIAL LINEAR-PERIÓDICO (TIPO BLOCH)

O material que será discutido nesta seção reúne características de um material linear com um material periódico. Salvo melhor juízo, não há solução analítica para o espalhamento produzido por esta estrutura. Sua susceptibilidade é dada por  $\xi(z) = \Lambda z + \sigma \cos(dz)$ , com  $\sigma$  e  $\Lambda$  sendo constantes reais. Cunhou-se para essa estrutura o termo *material tipo Bloch*, devido sua semelhança com potenciais da equação de Schrodinger que produzem oscilações do tipo Bloch. Na literatura, esse potencial é conhecido como *washboard* (tábua de lavar) [68]. Esse tipo de potencial tem seu apelo, principalmente, em problemas envolvendo mecânica quântica, difusão de partículas e movimento Browniano [65–68]. Logo, esperamos que esse tipo de material também possa ter relevância para futuros trabalhos envolvendo ótica.

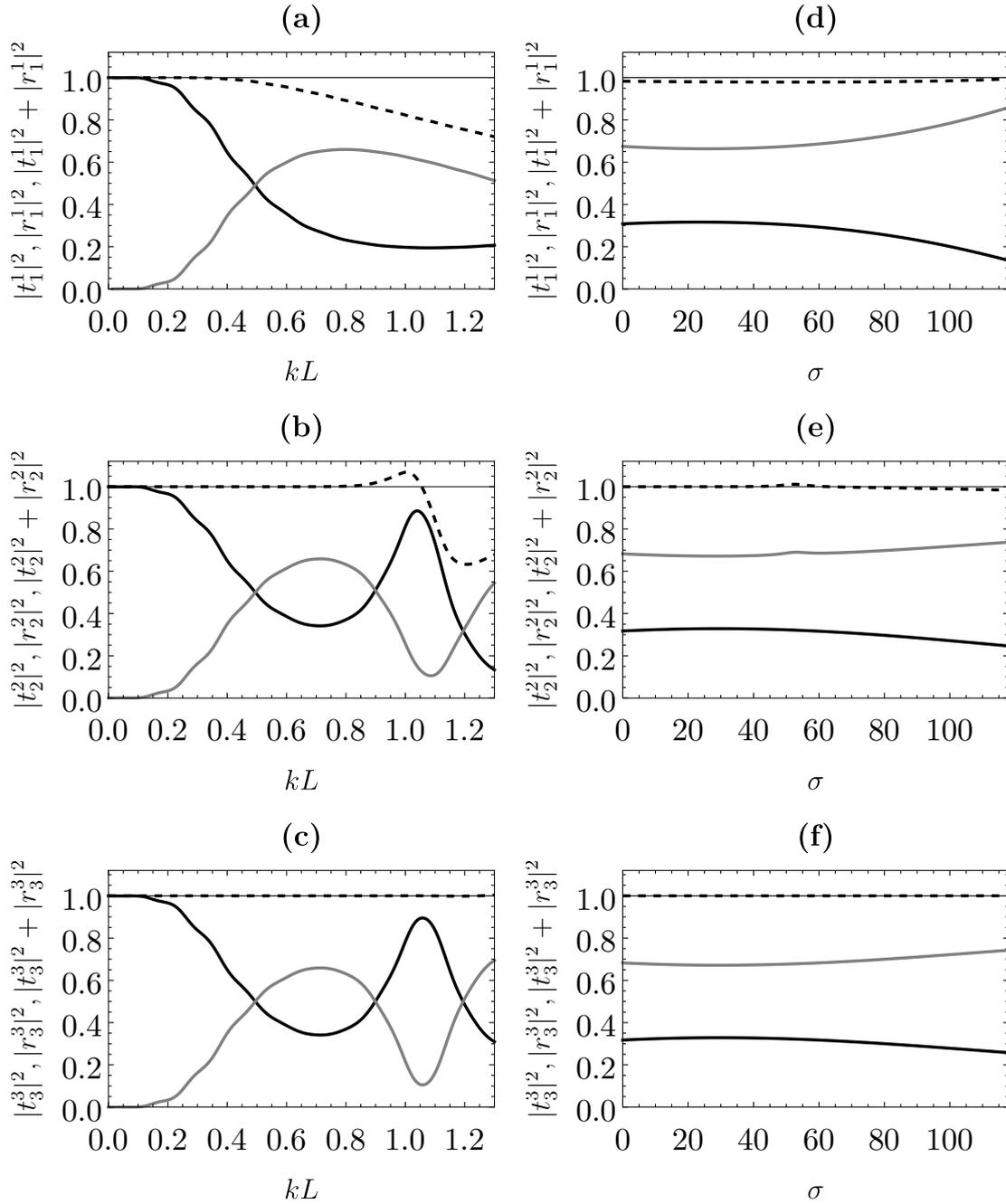
Para estudar o comportamento dos aproximantes de Padé para esse material, uma vez que não dispomos de sua solução analítica, recorreremos à relação de normalização (conservação de energia),  $|t|^2 + |r|^2 = 1$ , validando a solução disponibilizada pelos aproximantes. Além disso, também usaremos o critério de convergência. Logo, o aproximante de Padé mostrado no último resultado tratar-se-á do primeiro na linha de convergência. Sendo assim, seguindo o modelo das seções anteriores, temos que a primeira aproximação de Born para as amplitudes transmitidas e refletidas são

$$\begin{aligned} t_1 &= \frac{1}{2} ik \sec \theta \left[ \frac{\Gamma L^2}{2} + \frac{\sigma \sin(Ld)}{d} \right], \\ r_1 &= \frac{1}{2} ik \sec \theta \left\{ \frac{\Gamma \sec^2 \theta [(1 - 2ikL \cos \theta) e^{2ikL \cos \theta} - 1]}{4k^2} \right. \\ &\quad \left. + \frac{[d \sin(Ld) + 2ik \cos(Ld) \cos \theta] \sigma e^{2ikL \cos \theta} - 2i\sigma k \cos \theta}{d^2 - 4k^2 \cos^2 \theta} \right\}. \end{aligned} \quad (72)$$

Na Fig.11(a-c) plotamos o comportamento das amplitudes quadráticas dos aproximantes de Padé para a transmissão e reflexão em função de  $kL$ . Com uma incidência normal,  $\theta = 0$ , escolhemos  $\sigma$  e  $\Lambda$  de tal forma que nosso sistema estivesse fora da região de convergência da série de Born. No intervalo de  $kL$  escolhido, foi necessário até o Padé de terceira ordem para que a condição de normalização fosse respeitada integralmente. O comportamento apresentado pela amplitude de espalhamento foi de *rampa*, característico do material. Já nos itens (d-f) da Fig.11, plotamos as mesmas amplitudes quadráticas, só que em função de  $\sigma$ . Agora, para uma incidência oblíqua,  $\theta = \pi/4$ , vemos comportamento

semelhante para os aproximantes até ordem  $N = 3$ , com a condição de normalização integralmente respeitada.

**Figura 11** – Amplitudes transmitidas e refletidas para o material não-homogêneo  $\xi(z) = \Gamma z + \sigma \cos(dz)$  como função de (a-c)  $kL$ , com  $\sigma = 2$ ,  $\theta = 0$ , (d-f)  $\sigma$ ,  $kL = 1/2$  e  $\theta = \pi/4$ . As linhas contínuas pretas (cinzas) são os aproximantes de Padé para transmissão  $|t_N^N|^2$  (reflexão  $|r_N^N|^2$ ). A linha tracejada é a energia total. (a) e (d)  $N = 1$  (b) e (e)  $N = 2$  e (c) e (f)  $N = 3$ . Parâmetros usados em todos os gráficos:  $\alpha = 1$ ,  $d = 50$  e  $\Gamma = 20$ . As séries de Born correspondentes divergem para este conjunto de parâmetros. A linha fina contínua preta marca a unidade.



Fonte: Ref. [52]

### 3.6 CONCLUSÕES

Os aproximantes de Padé conseguiram remover as divergências oriundas do uso da série de Born, com parâmetros que produzem amplitudes de espalhamento fora da região de convergência dessas séries. Além disso, por se tratarem de aproximações analíticas, não sofrem com a dependência de discretizações do material, como ocorre com soluções numéricas. Essas discretizações trazem erros intrínsecos que se acumulam quanto mais complicado é o material. Dessa forma, soluções numéricas são preteridas em relação às analíticas, e os aproximantes de Padé fornecem uma maneira de obtê-las. Assim, neste capítulo, mostramos que, para problemas lineares envolvendo ondas planas espalhadas por meios complexos não-homogêneos, os aproximantes de Padé se mostraram uma ferramenta poderosa para o cálculo da amplitude espalhada por materiais que interagem fortemente com o campo. Isso justifica o interesse crescente nessa forma de aproximação analítica [1, 7, 52]. Por fim, verificamos que o formalismo baseado na teoria perturbativa, e nos aproximantes de Padé, se configura como uma metodologia válida para materiais lineares, arbitrários, não homogêneos, e incidências oblíquas, sendo, inclusive, facilmente generalizado para mais dimensões; como será mostrado no capítulo seguinte.

## ESPALHAMENTO ELETROMAGNÉTICO EM MEIOS TRIDIMENSIONAIS

Neste capítulo mostraremos os resultados obtidos após a aplicação dos aproximantes de Padé em um sistema tridimensional formado por um dipolo  $\mathcal{PT}$ -simétrico, definido por um par de deltas de Dirac representando dois materiais espalhadores pontuais possuindo ganho e perda. Trabalharemos com os aproximantes de Padé dentro e fora da região de convergência da série de Born. Compararemos os resultados obtidos pelos aproximantes com os obtidos pelo uso direto da série de Born e uma solução aproximada para a região de campo distante. O material estudado neste capítulo foi e ainda é objeto de ampla discussão na literatura [6, 7, 9, 72, 77–79]. Os resultados discutidos neste capítulo foram publicados em 2021 na Physical Review A [7].

### 4.1 ESPALHAMENTO DE LUZ EM MEIOS TRIDIMENSIONAIS

Seja um campo escalar monocromático de frequência  $\omega$  representado por um sinal ótico complexo  $u(\mathbf{r}, \omega)$  satisfazendo a equação de Helmholtz

$$\nabla^2 u(\mathbf{r}, \omega) + k^2 \varepsilon(\mathbf{r}, \omega) u(\mathbf{r}, \omega) = 0, \quad (73)$$

sendo  $k = \omega/c$  o número de onda,  $c$  a velocidade da luz no vácuo e  $\varepsilon(\mathbf{r}, \omega)$  a permissividade elétrica relativa. Podemos reescrever a permissividade elétrica relativa como

$$\varepsilon(\mathbf{r}, \omega) = 1 + \alpha \chi(\mathbf{r}, \omega), \quad (74)$$

onde  $\chi(\mathbf{r}, \omega)$  é a susceptibilidade elétrica linear do meio e  $\alpha$  um parâmetro perturbativo. Substituindo (74) em (73), temos

$$\nabla^2 u(\mathbf{r}, \omega) + k^2 u(\mathbf{r}, \omega) = -\alpha k^2 \chi(\mathbf{r}, \omega) u(\mathbf{r}, \omega). \quad (75)$$

Para  $\alpha = 0$  retornamos a um problema sem objeto espalhador. Note que o parâmetro  $\alpha$  foi introduzido para gerar a série de Born, portanto, ao final de tudo, colocaremos  $\alpha = 1$  para obter a resposta do problema original (que não possui  $\alpha$ ),  $\varepsilon(\mathbf{r}, \omega) = 1 + \chi(\mathbf{r}, \omega)$ .

A forma integral da equação de Helmholtz inhomogênea, Eq. (75), é obtida definindo uma função de Green  $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ , tal que

$$\nabla^2 G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + k^2 G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (76)$$

A forma integral da Eq.(75) é uma equação integral do tipo Fredholm, escrita como

$$u(\mathbf{r}) = u_0(\mathbf{r}) + \alpha k^2 \int_{\mathbf{r}'} \chi(\mathbf{r}') u(\mathbf{r}') G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^3 r', \quad (77)$$

com  $u_0(\mathbf{r})$  sendo a solução da equação de Helmholtz homogênea, sem objeto espalhador. A função de Green adequada aos nossos problemas tridimensionais é dada por

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (78)$$

Considerando o campo como uma série de potências em  $\alpha$ ,

$$u(\mathbf{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} u_n(\mathbf{r}) \alpha^n, \quad (79)$$

podemos transformar (77) em uma equação de recorrência do tipo

$$u_n(\mathbf{r}) = k^2 \int_{\mathbf{r}'} \chi(\mathbf{r}') G(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) u_{n-1}(\mathbf{r}') d^3 r' \quad (n \geq 1), \quad (80)$$

simplesmente substituindo (79) em (77). No que segue, utilizamos uma aproximação de campo distante, tal que a função de Green passa a ser expressa como

$$\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \sim \frac{e^{ikr}}{4\pi r} e^{-ik\hat{s}\cdot\mathbf{r}'} \quad (r \gg r'), \quad (81)$$

com  $\hat{s} = \mathbf{r}/r$  sendo o vetor unitário na direção observação do campo e  $r = |\mathbf{r}|$ . Para este problema assumimos que a onda incidente é do tipo plana e representada, por

$$u_0(\mathbf{r}) = e^{ik\hat{a}\cdot\mathbf{r}}, \quad (82)$$

onde  $\hat{a}$  é um vetor unitário na direção do eixo de propagação.

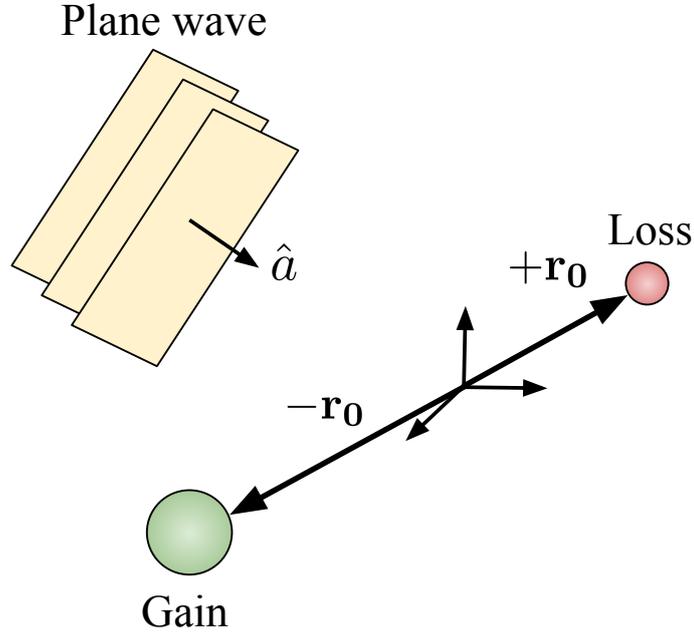
## 4.2 O DIPOLO $\mathcal{PT}$ -SIMÉTRICO

O material considerado é um dipolo, Fig. 12, formado por potenciais singulares do tipo delta de Dirac, onde a susceptibilidade elétrica linear é dada por

$$\chi(\mathbf{r}, \omega) = (\sigma + i\gamma)\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) + (\sigma - i\gamma)\delta(\mathbf{r} + \mathbf{r}_0), \quad (83)$$

com  $\sigma$  e  $\gamma$  sendo parâmetros reais positivos e  $+\mathbf{r}_0$  e  $-\mathbf{r}_0$  as posições dos espalhadores com perda e ganho, respectivamente. Em 2017, Staliunas *et al.* [9] discutiram o comportamento de uma onda plana espalhada por essa estrutura. Os autores buscaram uma solução analítica para o campo espalhado utilizando a primeira aproximação de Born. Em seguida, compararam os resultados obtidos com aproximações numéricas. A solução numérica confirmou a validade da aproximação de Born para espalhamentos *fracos*. Já para espalhamentos *fortes*, a aproximação de Born mostrou desvios significativos da solução numérica. Em 2019, Brandão e Cavalcanti [6] voltaram a discutir o problema do dipolo  $\mathcal{PT}$ -simétrico, estudando o espalhamento de luz parcialmente coerente produzido por esse material. Nesse trabalho, os autores mantêm a primeira aproximação de Born para inferir seus resultados, limitando-se, dessa forma, a espalhamentos *fracos*. O problema em trabalhar para além da primeira aproximação de Born com potenciais do tipo delta, reside nas singularidades que ocorrem nos termos seguintes da série. Esse é um problema antigo e a única solução analítica consolidada envolve técnicas de renormalização [80]; apesar de esforços recentes na busca de soluções livres de singularidades e que não envolvam renormalização [72, 78, 79]. Além disso, técnicas de renormalização em processos de interesse físico ainda necessitam de mais estudos que viabilizem seus reais impactos na interpretação dos novos parâmetros gerados no processo de remoção artificial das singularidades [81], o que torna esse tema um assunto ainda em aberto.

**Figura 12** – Sistema espalhador. Uma onda plana monocromática de frequência  $\omega$  viajando na direção de  $\hat{a}$ , interage com um espalhador composto por duas partículas com ganho e perda (dipolo  $\mathcal{PT}$ -simétrico). A posição da partícula com perda(ganho) é  $+\mathbf{r}_0$  ( $-\mathbf{r}_0$ ).



Fonte: Ref. [7]

O objetivo desta secção será encontrar uma solução analítica aproximada e baseada na aproximação de campo distante. Nessa aproximação faremos  $u_n(\mathbf{r}) \sim u_n^{c.d.}(\mathbf{r})$ , onde *c.d.* é a abreviação para *campo distante*. Essa solução nos permite utilizar a função de Green na aproximação de campo distante para encontrar todos os termos da série. Acreditamos na razoabilidade dessa aproximação, pois, apesar de estarmos trabalhando com  $r \rightarrow \infty$ , do ponto de vista experimental, isso pode se tratar de milímetros, sendo, inclusive, intensificado por um potencial com um raio que tende a zero. Porém, é evidente que reconhecemos as óbvias limitações dessa aproximação e entendemos que serão necessários trabalhos futuros para a melhor compreensão física dela. Contudo, para a análise do comportamento dos aproximantes de Padé para potenciais em discussão, essa aproximação cumpre seu propósito ao viabilizar a construção dos aproximantes, dentro e fora da região de convergência da série de Born. Assim, essa solução aproximada será comparada com os resultados obtidos pelos aproximantes de Padé e pela série de Born. Para isso, procedemos substituindo as Eqs.(81) e (83) em (80), obtendo:

$$u_n(\mathbf{r}) = \frac{k^2}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \left[ (\sigma + i\gamma) u_{n-1}(\mathbf{r}_0) e^{-ik\hat{s}\cdot\mathbf{r}_0} + (\sigma - i\gamma) u_{n-1}(-\mathbf{r}_0) e^{ik\hat{s}\cdot\mathbf{r}_0} \right] \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (84)$$

Para encontrar nossa solução analítica aproximada, seguimos com um processo de indução, calculando cada um dos termos da série de Born. Substituindo (82) em (84), temos que os três primeiros termos da série de Born são dados por:

$$u_1(\mathbf{r}) = \frac{k^2}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} [P_0 e^{-ik\hat{\mathbf{s}}\cdot\mathbf{r}_0} + Q_0 e^{ik\hat{\mathbf{s}}\cdot\mathbf{r}_0}], \quad (85)$$

onde  $P_0 = (\sigma + i\gamma)e^{ik\hat{\mathbf{a}}\cdot\mathbf{r}_0}$  e  $Q_0 = (\sigma - i\gamma)e^{-ik\hat{\mathbf{a}}\cdot\mathbf{r}_0}$ ,

$$u_2(\mathbf{r}) = \left(\frac{k^2}{4\pi}\right)^2 \frac{e^{ikr}}{r} [P_1 e^{-ik\hat{\mathbf{s}}\cdot\mathbf{r}_0} + Q_1 e^{ik\hat{\mathbf{s}}\cdot\mathbf{r}_0}], \quad (86)$$

onde  $P_1 \equiv (\sigma + i\gamma)(P_0 + Q_0 e^{2ikr_0})/r_0$  e  $Q_1 \equiv (\sigma - i\gamma)(P_0 e^{2ikr_0} + Q_0)/r_0$ ; e

$$u_3(\mathbf{r}) = \left(\frac{k^2}{4\pi}\right)^3 \frac{e^{ikr}}{r} [P_2 e^{-ik\hat{\mathbf{s}}\cdot\mathbf{r}_0} + Q_2 e^{ik\hat{\mathbf{s}}\cdot\mathbf{r}_0}], \quad (87)$$

onde  $P_2 \equiv (\sigma + i\gamma)(P_1 + Q_1 e^{2ikr_0})/r_0$  e  $Q_2 \equiv (\sigma - i\gamma)(P_1 e^{2ikr_0} + Q_1)/r_0$ . Claramente é possível observar um padrão nas Eqs. (85), (86) e (87). Esse padrão persiste de tal forma que podemos escrever uma equação de  $u_n$ , com

$$u_n(\mathbf{r}) = \left(\frac{k^2}{4\pi}\right)^n \frac{e^{ikr}}{r} [P_{n-1} e^{-ik\hat{\mathbf{s}}\cdot\mathbf{r}_0} + Q_{n-1} e^{ik\hat{\mathbf{s}}\cdot\mathbf{r}_0}] \quad (n \geq 1), \quad (88)$$

onde

$$\begin{aligned} P_n &= D_1 P_{n-1} + D_2 Q_{n-1} \\ Q_n &= D_3 P_{n-1} + D_4 Q_{n-1}, \end{aligned} \quad (89)$$

com  $D_1 = (\sigma + i\gamma)/r_0$ ,  $D_2 = (\sigma + i\gamma)e^{2ikr_0}/r_0$ ,  $D_3 = (\sigma - i\gamma)e^{2ikr_0}/r_0$  e  $D_4 = (\sigma - i\gamma)/r_0$ . Note que o sistema (89) é recursivo e acoplado com coeficientes constantes e condições iniciais dadas por  $P_0 = (\sigma + i\gamma)e^{ik\hat{\mathbf{a}}\cdot\mathbf{r}_0}$  e  $Q_0 = (\sigma - i\gamma)e^{-ik\hat{\mathbf{a}}\cdot\mathbf{r}_0}$ . Portanto, para encontrarmos uma solução para a Eq. (88) é necessário resolver o sistema (89).

Inicialmente escreveremos o sistema (89) em sua forma matricial:

$$\begin{bmatrix} P_n \\ Q_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_1 & D_2 \\ D_3 & D_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P_{n-1} \\ Q_{n-1} \end{bmatrix}. \quad (90)$$

Aplicando as condições iniciais  $P_0$  e  $Q_0$  no sistema (90), de forma recursiva, podemos reescrevê-lo como:

$$\begin{bmatrix} P_n \\ Q_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_1 & D_2 \\ D_3 & D_4 \end{bmatrix}^n \begin{bmatrix} P_0 \\ Q_0 \end{bmatrix} = \mathbf{D}^n \begin{bmatrix} P_0 \\ Q_0 \end{bmatrix}, \quad (91)$$

onde  $\mathbf{D}$  é uma matriz  $2 \times 2$  com coeficientes  $D_j$ . Aplicando o teorema de Cayley-Hamilton [82], com os procedimentos descritos em [83], podemos reescrever  $D^n$  como:

$$\mathbf{D}^n = \frac{\lambda_1^n - \lambda_2^n}{\lambda_1 - \lambda_2} \mathbf{D} - \lambda_1 \lambda_2 \frac{\lambda_1^{n-1} - \lambda_2^{n-1}}{\lambda_1 - \lambda_2} \mathbf{1}, \quad (92)$$

onde  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$  são os autovalores de  $\mathbf{D}$  e  $\mathbf{1}$  é a matriz identidade. Temos, então, soluções gerais para  $P_n$  e  $Q_n$ , dadas por:

$$\begin{aligned} P_n = & \frac{2^{-n-1}}{\sqrt{(D_1 - D_4)^2 + 4D_2D_3}} \times \left\{ \left( D_1P_0 + 2D_2Q_0 - D_4P_0 \right) \right. \\ & \times \left[ \left( \sqrt{(D_1 - D_4)^2 + 4D_2D_3} + D_1 + D_4 \right)^n - \left( -\sqrt{(D_1 - D_4)^2 + 4D_2D_3} + D_1 + D_4 \right)^n \right] \\ & + P_0 \sqrt{(D_1 - D_4)^2 + 4D_2D_3} \times \left[ \left( -\sqrt{(D_1 - D_4)^2 + 4D_2D_3} + D_1 + D_4 \right)^n \right. \\ & \left. \left. + \left( \sqrt{(D_1 - D_4)^2 + 4D_2D_3} + D_1 + D_4 \right)^n \right] \right\}, \end{aligned} \quad (93)$$

$$\begin{aligned} Q_n = & \frac{2^{-n-1}}{\sqrt{(D_1 - D_4)^2 + 4D_2D_3}} \times \left\{ \left( D_4Q_0 + 2D_3P_0 - D_1Q_0 \right) \right. \\ & \times \left[ \left( \sqrt{(D_1 - D_4)^2 + 4D_2D_3} + D_1 + D_4 \right)^n - \left( -\sqrt{(D_1 - D_4)^2 + 4D_2D_3} + D_1 + D_4 \right)^n \right] \\ & + Q_0 \sqrt{(D_1 - D_4)^2 + 4D_2D_3} \times \left[ \left( -\sqrt{(D_1 - D_4)^2 + 4D_2D_3} + D_1 + D_4 \right)^n \right. \\ & \left. \left. + \left( \sqrt{(D_1 - D_4)^2 + 4D_2D_3} + D_1 + D_4 \right)^n \right] \right\}. \end{aligned} \quad (94)$$

As expressões (93), (94) e (88), juntas, compõem a solução geral para os termos com  $n \geq 1$  da série de Born.

O campo total para  $\alpha = 1$  é dado por

$$u(\mathbf{r}) = u_0(\mathbf{r}) + \sum_{n=1}^{\infty} u_n(\mathbf{r}). \quad (95)$$

Substituindo (88) na expressão acima, temos

$$u(\mathbf{r}) = u_0(\mathbf{r}) + \frac{e^{ikr}}{r} \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{k^2}{4\pi} \right)^n \left( P_{n-1} e^{-ik\hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{r}_0} + Q_{n-1} e^{ik\hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{r}_0} \right). \quad (96)$$

Se olharmos com atenção as Eqs. (93), (94) e (96), é fácil perceber que os termos no somatório correspondem a uma série geométrica do tipo

$$\sum_{n=1}^{\infty} \zeta^n = \frac{\zeta}{1 - \zeta}, \quad (97)$$

com  $|\zeta| < 1$ .

Aplicando o resultado de (97) em (96), temos

$$u(\mathbf{r}) = u_0(\mathbf{r}) + \frac{e^{ikr}}{r} \tilde{u}_s(\mathbf{r}), \quad (98)$$

onde

$$\begin{aligned} \tilde{u}_s(\mathbf{r}) = & \frac{-D_2 k^4 Q_0 + D_4 k^4 P_0 - 4\pi k^2 P_0}{D_2 D_3 k^4 - (D_1 k^2 - 4\pi)(D_4 k^2 - 4\pi)} e^{-ik\hat{s}\cdot\mathbf{r}_0} \\ & + \frac{D_1 k^4 Q_0 - D_3 k^4 P_0 - 4\pi k^2 Q_0}{D_2 D_3 k^4 - (D_1 k^2 - 4\pi)(D_4 k^2 - 4\pi)} e^{ik\hat{s}\cdot\mathbf{r}_0}, \end{aligned} \quad (99)$$

onde  $\tilde{u}_s(\mathbf{r})$  corresponde a amplitude do campo espalhado. Existem ainda dois pontos importantes que devem ser discutidos: o primeiro é que, apesar de a expressão ter dois termos bem definidos, onde o primeiro está multiplicado por uma exponencial que vem de uma aplicação direta da delta de Dirac ligada ao parâmetro de perda e o outro está acompanhado por uma exponencial ligada ao parâmetro de ganho, os termos que multiplicam essas exponenciais estão acoplados. Ou seja, em ambas as parcelas aparecem parâmetros relacionados tanto ao ganho quanto à perda. O segundo ponto de destaque é que nosso sistema corresponde a um caso raro onde o  $n$ -ésimo termo da série de Born, bem como a forma geral do campo, podem ser escritas analiticamente.

Uma vez que iremos comparar os aproximantes de Padé e a série de Born com a solução analítica aproximada, cumpre destacar uma nova variável que irá auxiliar essa análise: a soma parcial dos  $N$  primeiros termos da série,  $S_N(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^N \tilde{u}_n(\mathbf{r})$ , com  $S_1(\mathbf{r})$  sendo a amplitude do espalhamento da primeira aproximação de Born. Nas secções seguintes faremos uma rápida digressão sobre os aproximantes de Padé, discutiremos a aplicação desses aproximantes para o caso do campo espalhado e, em seguida, discutiremos os resultados obtidos para o caso hermitiano ( $\gamma = 0$ ) e não-hermitiano ( $\gamma \neq 0$ ).

#### 4.2.1 APROXIMANTES DE PADÉ DE ORDEM $N$

Quanto maior a ordem do aproximante de Padé que precisamos para obter uma solução aproximada do problema, maior é o tamanho do sistema que precisaremos solucionar.

Embora haja métodos computacionais sofisticados para calcular aproximantes de Padé de ordens mais altas [50], é interessante que tenhamos soluções analíticas simples para trabalhar em casos específicos. Pensando nisso, Van de Sijs et al. [1] deduziu uma expressão geral, simples, para o cálculo dos aproximantes de Padé diagonais de ordem  $N$ ,

$$P_N^N(\alpha) = \sum_{l=0}^N u_l \alpha^l \frac{\Delta + \sum_{m=1}^{N-l} \Delta_m \alpha^m}{\Delta + \sum_{m=1}^N \Delta_m \alpha^m} \quad (100)$$

onde o termo  $\Delta$  corresponde ao determinante de uma matriz de ordem  $N$ , com lei de formação

$$[\Delta]_{ij} = \begin{cases} u_{N+i-j}, & \text{se } i > j \\ u_N, & \text{se } i = j, \\ u_{n-j+i}, & \text{se } i < j \end{cases} \quad (101)$$

onde  $N$  é a ordem do aproximante de Padé pretendido e  $i$  e  $j$  são as linhas e colunas da matriz, respectivamente. Já o termo  $\Delta_m$  corresponde ao determinante da matriz  $[\Delta]_{ij}$  com a coluna  $m$  substituída por um vetor coluna de  $N$  termos com lei de formação  $-u_{N+i}$ .

Os aproximantes de Padé estão na forma  $P_N^N(\mathbf{r}) = u_0(\mathbf{r}) + f_N[u_1(\mathbf{r}), u_2(\mathbf{r}), \dots]$ , com  $f_N$  sendo uma função independente de  $u_0(\mathbf{r})$ , e estamos interessados apenas nas propriedades de espalhamento do campo, todos os resultados que se seguirão serão da forma  $[P_N^N(\mathbf{r}) - u_0(\mathbf{r})]/(e^{ikr}/r) = \tilde{P}_N^N(\mathbf{r})$ , onde  $\tilde{P}_N^N(\mathbf{r})$  é o aproximante da amplitude do campo espalhado. Ou seja,

$$P_N^N(\mathbf{r}) = u_0(\mathbf{r}) + \frac{e^{ikr}}{r} \tilde{P}_N^N(\mathbf{r}), \quad (102)$$

onde  $\tilde{P}_N^N(\mathbf{r})$  é independente de  $r$ .

Para finalizar, é importante lembrar que a ordem do aproximante escolhido depende do problema que está sendo trabalhado. Ou seja, para um problema  $A$ , um aproximante de primeira ordem pode já ser suficiente e convergir para a resposta correta. Já para um problema  $B$ , pode ser necessário aproximantes de ordens superiores. Ou, na pior das hipóteses, pode ser que o aproximante nunca convirja para uma resposta correta, pois nada garante que, se o Padé de primeira ordem convergir para a resposta certa, os de ordens superiores também o convergirão. Lembremos que, infelizmente, a teoria dos aproximantes de Padé só garantem a convergência de aproximantes de ordens superiores para um grupo específico de funções, chamadas Stieltjes. Apesar de desanimador, isso é mais um motivo para aplicarmos os aproximantes a um número crescente de problemas de modo a entendermos melhor seu comportamento.

### 4.3 APLICAÇÕES

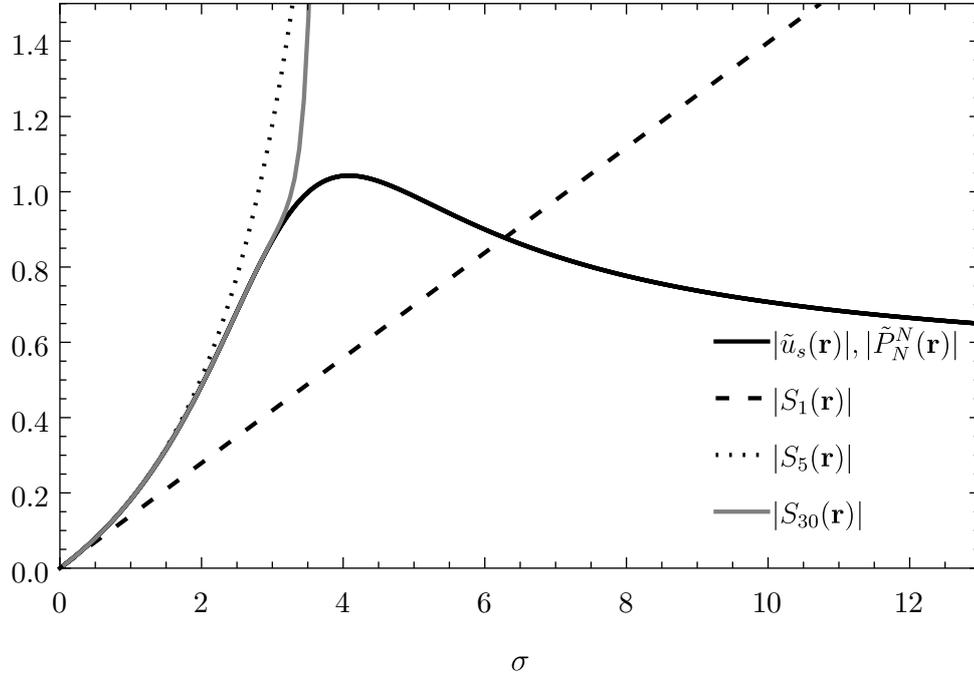
Nesta seção discutiremos o comportamento dos aproximantes de Padé quando aplicados ao problema do dipolo  $\mathcal{PT}$ -simétrico. Inicialmente discutiremos esse problema para o caso onde  $\gamma = 0$ . Isso significa que nosso dipolo será composto apenas por duas deltas de Dirac idênticas, sem ganho ou perda. Em seguida, discutiremos o comportamento dos aproximantes para o problema do dipolo com simetria  $\mathcal{PT}$ . Ou seja, teremos dois objetos pontuais, um com ganho e outro com perda,  $\gamma \neq 0$ , representados por deltas de Dirac.

#### 4.3.1 ESPALHAMENTO DE LUZ EM UM MEIO HERMITIANO

Na situação a seguir trabalharemos com o caso hermitiano, i.e.,  $\gamma = 0$ . Dado que o dipolo escolhido é uma estrutura que possui simetria rotacional ao longo do eixo que passa pelas duas partículas, podemos fixar o ângulo  $\phi = 0$  (considerando coordenadas esféricas) com a certeza que não perderemos informação. Dessa forma, o sistema está configurado com a linha que liga as partículas do dipolo paralela ao eixo  $x$ , com o eixo  $y$  saindo do papel. A distância entre as partículas é  $x_0 = 1$  e o centro do dipolo encontra-se na origem do sistema de coordenadas. Por comodidade escolhemos  $k = 1$  e um sistema de medidas arbitrário. A onda incidente está na direção  $\hat{z}$ .

A Fig. 13 mostra o comportamento das amplitudes da solução aproximada (linha preta sólida), dos aproximantes de Padé de primeira, segunda e terceira ordem (linha preta sólida), da primeira aproximação de Born (linha tracejada), e do somatório dos cinco (linha pontilhada) e dos trinta primeiros (linha sólida cinza) termos dessa série.

**Figura 13** – Amplitude do campo espalhado como função de  $\sigma$ . Primeira aproximação de Born (linha tracejada)  $|S_1(\mathbf{r})|$ , soma dos cinco (linha pontilhada) e dos trinta (linha sólida cinza) primeiros termos da série,  $|S_5(\mathbf{r})|$  e  $|S_{30}(\mathbf{r})|$ , respectivamente, aproximantes de Padé de 1<sup>a</sup>, 2<sup>a</sup> e 3<sup>a</sup> ordem (linha preta sólida),  $|\tilde{P}_N^N(\mathbf{r})|$  ( $N = 1, 2, 3$ ), e a solução aproximada  $|\tilde{u}_s(\mathbf{r})|$ . As últimas quatro linhas são indistinguíveis na escala utilizada. Parâmetros utilizados:  $\theta = \frac{\pi}{2}$ ,  $\phi = 0$ ,  $k = 1$ ,  $x_0 = \frac{1}{2}$  e  $\gamma = 0$ .



Fonte:Ref. [7]

O comportamento linear da primeira aproximação de Born já era esperado, visto que o primeiro termo da série é proporcional a  $\sigma$ ,

$$S_1(\mathbf{r}) = \tilde{u}_1(\mathbf{r}) = \sigma \frac{k^2}{2\pi} \cos \left[ k\mathbf{r}_0 \cdot (\hat{\mathbf{a}} - \hat{\mathbf{s}}) \right]. \quad (103)$$

Percebemos ainda que essa aproximação só é válida para valores de  $\sigma$  muito pequenos. Para valores maiores desse parâmetro,  $\sigma \rightarrow \infty$ , a amplitude do campo tende ao infinito, o que é um resultado não físico. A medida que aumentamos a quantidade de termos da série de Born, a aderência à curva que representa a solução aproximada (linha preta sólida) vai aumentando, como podemos observar para as curvas  $S_5(\mathbf{r})$  e  $S_{30}(\mathbf{r})$ . Contudo, essa aderência esbarra no raio de convergência da própria série de Born que, para  $\alpha = 1$ , é aproximadamente 3,6, conforme podemos observar mais adiante na tabela 5. Já os aproximantes de Padé, desde os de primeira ordem, demonstraram alta aderência à curva da nossa solução aproximada, não sendo possível, na escala adotada, diferenciá-los. Note ainda que a aderência persistiu a medida que as ordens dos aproximantes cresciam. Algo

importante, e que deve ser destacado, é a capacidade dos aproximantes em emular o comportamento do sistema mesmo quando este satura, o que ocorre para  $\sigma \rightarrow \infty$ .

**Tabela 5** – Raio de convergência  $R_\alpha$  no plano complexo de  $\alpha$  para a série de Taylor  $\sum_n u_n \alpha^n$  para vários valores de  $\sigma$ . Parâmetros utilizados:  $\phi = 0$ ,  $\theta = \frac{\pi}{2}$ ,  $k = 1$ ,  $x_0 = \frac{1}{2}$  e  $\gamma = 0$ .

$\sigma$	$R_\alpha$
1	3,57983
2	1,78991
3	1,19328
4	0,894956
5	0,715965
6	0,596638
7	0,511404
8	0,447478
9	0,397758
10	0,357983

Fonte:Ref. [7]

A tabela 5 mostra como o raio de convergência da série de Born muda a medida que aumentamos os valores de  $\sigma$ . Observamos ainda que, a medida que  $\sigma$  aumenta, o raio de convergência no plano complexo diminui. Ou seja, para valores crescentes de  $\sigma$ , a eficiência da série de Born fica cada vez mais limitada. Isso também pode ser explicado de outra forma: dado que cada termo da série de Born é proporcional a  $\sigma$  elevado a potência de ordem igual ao termo da expansão que a ele está ligado ( $\tilde{u}_1(\mathbf{r})$  é proporcional a  $\sigma$ ,  $\tilde{u}_2(\mathbf{r})$  proporcional a  $\sigma^2$ ,  $\tilde{u}_3(\mathbf{r})$  proporcional a  $\sigma^3$  e assim por diante), quando somamos esses termos retomamos um somatório de potências que precisaria de um  $\sigma \rightarrow 0$  para não divergir.

Para uma comparação entre a série de Born e os aproximantes de Padé, foi montado a tabela 6. Nessa tabela fizemos  $\sigma = 1$  e variamos os valores de  $\alpha$ . Em seguida comparamos a solução aproximada, para cada  $\alpha$ , com os dois primeiros aproximantes de Padé,  $|P_1^1|$  e  $|P_2^2|$ , e com a série de Born. Todos os cálculos foram realizados dentro do raio de convergência da série de Born para ser possível verificar a eficiência da série e dos aproximantes. O que se observou foi que, quanto mais próximo das bordas do círculo de convergência da série Born, mais termos são necessários para a série convergir para a solução aproximada, o que já era esperado. Contudo, quando analisamos os aproximantes de Padé, percebemos que eles convergem para nossa solução já a partir da primeira ordem, concordando até a décima quarta casa decimal. Isso significa que todas as informações físicas necessárias

---

para modelar o sistema estão contidas em apenas dois termos da série de Born (note que excluimos  $u_0$  pois estamos tratando apenas do campo espalhado).

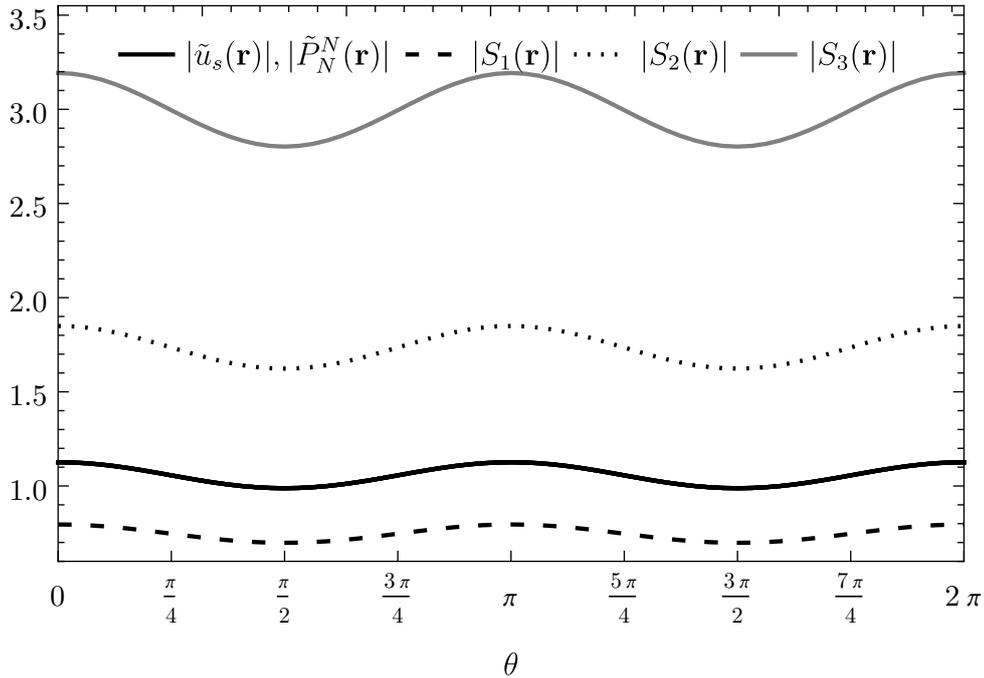
**Tabela 6** – Comparação entre a solução analítica  $\tilde{u}_s$  para a amplitude do campo espalhado e sua série de Taylor  $S_N$  e os aproximantes de Padé  $\tilde{P}_N^N$ . Parâmetros utilizados:  $\gamma = 0$ ,  $k = 1$ ,  $x_0 = \frac{1}{2}$ ,  $\phi = 0$  e  $\theta = \frac{\pi}{2}$ . Todos os valores de  $\alpha$  estão dentro do raio de convergência.

$\sigma = 1$				
$\alpha$	Solução analítica	$ S_N  (N)$	$ \tilde{P}_1^1 $	$ \tilde{P}_2^2 $
3,57	1,0090898257861656	1,0090877280387027(4000)	1,0090898257861698	1,009089825786168
1,79	0,40969141139798726	0,40969141139798715(100)	0,4096914113979872	0,40969141139798704
0,895	0,15828711442382187	0,15828711442382182(30)	0,15828711442382185	0,1582871144238218
0,447	0,06995869702491307	0,06995869702491307(20)	0,06995869702491307	0,0699586970249131
0,0357	0,0050302415730227356	0,005030241573022735(10)	0,0050302415730227356	0,005030241573022735

Fonte:Ref. [7]

Para encerrar a análise do caso hermitiano, estudamos o comportamento do espalhamento ao longo do eixo  $x$ , variando o ângulo polar  $\theta$ , conforme mostrado na Fig. 14. Para podermos observar o comportamento divergente da série de Born escolhemos  $\sigma = 5$ , valor fora do raio de convergência da série. Com isso, observamos, novamente, a série de Born alcançando valores crescentes a medida que acrescentamos termos. Note que com apenas três termos (linha sólida cinza) já é possível observar o distanciamento da nossa solução (linha sólida preta). A variação ao longo de  $\theta$  nos permite observar a série divergindo em toda a região espalhada, considerando a simetria do sistema. Por fim, observamos, ainda, a alta aderência dos aproximantes de Padé à nossa solução, estando as curvas totalmente sobrepostas, para a escala utilizada.

**Figura 14** – Amplitude do campo espalhado como função de  $\theta$ . Primeira aproximação de Born (linha tracejada)  $|S_1(\mathbf{r})|$ , soma dos dois (linha pontilhada) e dos três (linha sólida cinza) primeiros termos da série de Born,  $|S_2(\mathbf{r})|$  e  $|S_3(\mathbf{r})|$ , respectivamente, aproximantes de Padé de 1ª, 2ª e 3ª ordem (linha preta sólida),  $|\tilde{P}_N^N(\mathbf{r})|(N = 1, 2, 3)$  e a solução aproximada  $|\tilde{u}_s(\mathbf{r})|$ . As últimas quatro linhas são indistinguíveis para a escala adotada. Parâmetro utilizado:  $\phi = 0$ ,  $k = 1$ ,  $x_0 = \frac{1}{2}$ ,  $\sigma = 5$  e  $\gamma = 0$ .



Fonte:Ref. [7]

#### 4.3.2 ESPALHAMENTO DE LUZ EM UM MEIO NÃO-HERMITIANO

Consideraremos agora um sistema não-hermitiano,  $\mathcal{PT}$ -Simétrico, com ganho e perda ( $\gamma \neq 0$ ) balanceados. Inicialmente, precisamos justificar o uso de  $\alpha$  como parâmetro

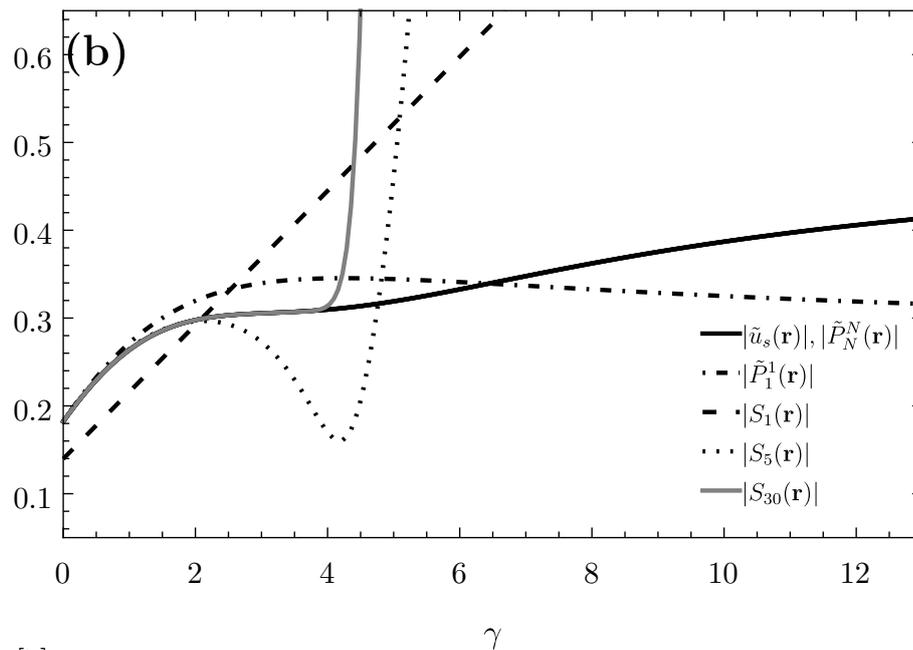
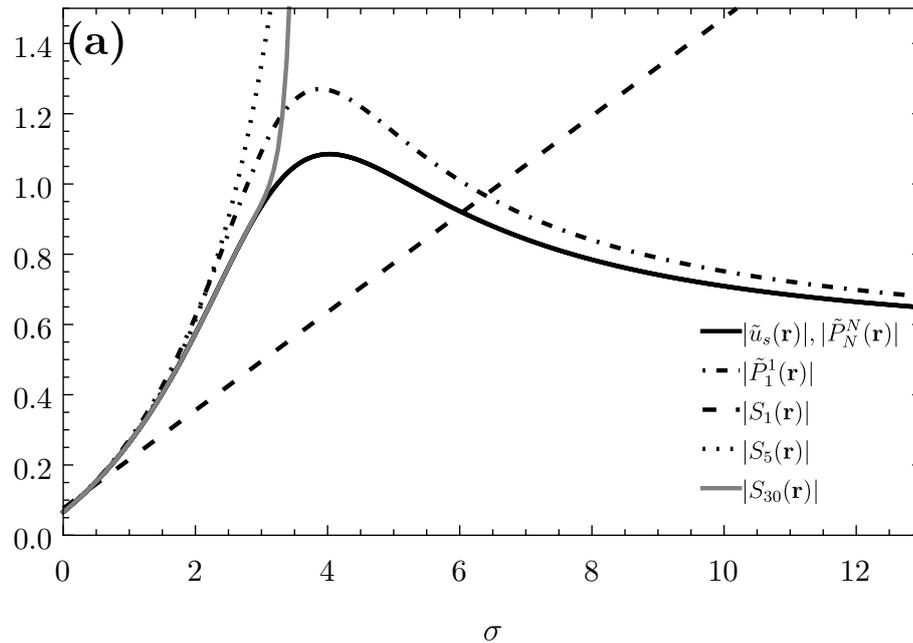
perturbativo, pois, diferente do caso hermitiano, para o caso não-hermitiano não há uma equivalência entre  $\sigma$  e  $\alpha$ . Para o caso hermitiano, se fizéssemos  $\sigma = 0$ , retomariamos o caso não perturbado (sem objeto espalhador). Daí surge a equivalência entre  $\alpha$  e  $\sigma$ . Já para o caso não-hermitiano, se fizermos  $\gamma = 0$  ou  $\sigma = 0$ , ainda temos um objeto espalhador, como podemos verificar em (83). Dessa forma, não poderíamos utilizar nenhum desses dois parâmetros para expandir nossa série. Surge dessa problemática a necessidade de escrevermos (74) como o fizemos.

Como feito para o caso hermitiano, procedemos analisando o comportamento do campo espalhado calculado pelos diferentes métodos (solução aproximada, série de Born e aproximantes de Padé) a medida que variamos  $\sigma$  e  $\gamma$ , Fig. 15. Em seguida, calculamos o raio de convergência da série de Born para diferentes valores de  $\sigma$  e  $\gamma$ , como mostrado na tabela 7. Por fim, analisamos o comportamento do campo espalhado ao longo de  $\theta$ , Fig. 16, para diferentes valores de  $\gamma$ .

A Fig. 15 mostra a amplitude do campo espalhado em função de  $\sigma$  no item (a), e em função de  $\gamma$  no item (b). Algo que notamos de imediato é que para os casos  $\sigma = 0$  e  $\gamma = 0$  o campo nunca vai a zero, para nenhum dos métodos calculados. Isso se deve a independência entre esses parâmetros, pois, uma vez que  $\sigma = 0$ , ainda temos  $\gamma \neq 0$  e vice-versa. Note ainda que, da mesma forma que ocorreu para o caso hermitiano, a primeira aproximação de Born (linha tracejada) traz uma representação pobre do sistema. O mesmo comportamento do caso hermitiano também se repete nas séries de ordem mais alta (linha pontilhada e linha cinza sólida), ou seja, o aumento de termos causa maior aderência das curvas até próximo o raio de convergência, após isso a série diverge. A novidade na análise do caso não-hermitiano está na ordem do aproximante de Padé que melhor representa a solução analítica. Enquanto para o caso hermitiano o aproximante de Padé de primeira ordem (linha traço-ponto) era suficiente para uma boa aproximação da nossa solução, para o caso não-hermitiano esse aproximante só se torna uma opção viável para valores de  $\gamma$  e  $\sigma$  menores que 1. Visto que o aproximante de primeira ordem não oferece um resultado adequado ao problema, partimos para o aproximante de Padé de segunda ordem. Após o cálculo desse aproximante foi observado uma alta aderência entre a curva da solução aproximada (linha sólida preta) e as curvas que representam os aproximantes de segunda e terceira ordem. Esses resultados concordaram de forma que não é possível distinguir, para a escala utilizada, as três curvas. A concordância entre

os aproximantes de ordem  $N \geq 2$  sugere que os aproximantes alcançaram uma ordem a partir da qual qualquer aproximante irá convergir para o mesmo resultado. Isso implica que não é necessário calcular aproximantes de ordens superiores à segunda, apesar de termos calculado para verificar tal suposição.

**Figura 15** – (a) Mesmo que na Figura 13 com  $\gamma = 1$  e (b)  $|\tilde{u}_s(\mathbf{r})|$ ,  $|S_1(\mathbf{r})|$ ,  $|S_5(\mathbf{r})|$ ,  $|S_{30}(\mathbf{r})|$ ,  $|\tilde{P}_1^1(\mathbf{r})|$  e  $|\tilde{P}_N^N(\mathbf{r})|$  ( $N = 2, 3$ ) como função de  $\gamma$  com  $\sigma = 1$ . Parâmetros utilizados:  $\theta = \frac{\pi}{2}$ ,  $\phi = 0$ ,  $k = 1$  e  $x_0 = \frac{1}{2}$ . As curvas de  $|\tilde{P}_2^2(\mathbf{r})|$  e  $|\tilde{P}_3^3(\mathbf{r})|$  são indistinguíveis da linha que representa a solução aproximada.



Fonte:Ref. [7]

Após analisar o comportamento do campo espalhado em função dos parâmetros  $\sigma$  e  $\gamma$ , estudaremos a influência deste último no raio de convergência da série de Born. A tabela 7 mostra um encurtamento do raio de convergência no plano complexo a medida que  $\gamma$  cresce. Essa diminuição do raio de convergência indica uma inadequação da série de Born para modelar sistemas com espalhamento forte. Essa aproximação pobre é tanto pior quanto maior o par  $(\sigma, \gamma)$ .

**Tabela 7** – Raio de convergência no plano complexo de  $\alpha$  para a série de Taylor  $\sum_n u_n \alpha^n$  para vários valores de  $\sigma$  e  $\gamma$ . Parâmetros utilizados:  $\phi = 0$ ,  $\theta = \pi/2$ ,  $k = 1$  and  $x_0 = 0.5$ .

$\sigma$	$R_\alpha(\gamma = 1)$	$R_\alpha(\gamma = 5)$	$R_\alpha(\gamma = 10)$
1	2,86615	0,909877	0,471608
2	1,68626	0,827169	0,454939
3	1,1624	0,736475	0,435248
4	0,881973	0,64986	0,413585
5	0,709336	0,57323	0,39096
6	0,592808	0,508002	0,368237
7	0,508995	0,453362	0,346077
8	0,445866	0,407738	0,32493
9	0,396627	0,369507	0,305066
10	0,357158	0,337251	0,286615

Fonte:Ref. [7]

Demonstrar a impossibilidade da série de Born em modelar sistemas com espalhamento forte é uma tarefa importante, visto que nos incentiva a buscar novas ferramentas aproximativas. Contudo, muitas vezes, também é necessário estudar como a série de Born se comporta dentro de seu raio de convergência. Na tabela 8 comparamos a nossa solução do problema com a série de Born e os aproximantes de Padé, na região de convergência da série. Como esperado, verificamos que, quanto mais próximo do limite da região de convergência, pior o desempenho da série de Born. Para um  $\alpha = 2,86$  foram necessários 3000 termos para uma aproximação razoável. Já os aproximantes de Padé, a partir da segunda ordem, mostraram um resultado concordando até a 13<sup>a</sup> casa decimal. O aproximante de segunda ordem precisa de apenas quatro termos da série de Born para ser montado, o que já configura uma economia gigantesca no uso computacional. Outro ponto importante que deve ser destacado é o papel do aproximante de primeira ordem no caso  $\mathcal{PT}$ -simétrico. Apesar dele não conseguir modelar o sistema para regiões próximas ao limite de convergência da série de Born, seja dentro ou fora dessa região, para  $\alpha < 1$  começamos a observar uma convergência desse aproximante. Isso ocorre, pois, a medida

---

que  $\alpha$  diminui, a série de Born passa a necessitar de cada vez menos termos para fornecer um resultado preciso. Sendo assim, os termos maiores da série passam a não ter tanta relevância para o resultado, impactando diretamente na ordem do aproximante de Padé que convergirá primeiro.

**Tabela 8** – Comparação entre a solução aproximada  $\tilde{u}_s$  para o campo espalhado e sua série de Taylor  $S_N$  e o aproximante de Padé  $\tilde{P}_N^N$ .  $k = 1$ ,  $x_0 = \frac{1}{2}$ ,  $\phi = 0$  e  $\theta = \frac{\pi}{2}$ . Todos os valores de  $\alpha$  estão dentro do raio de convergência.

$\sigma = 1, \gamma = 1$					
$\alpha$	Solução analítica	$ S_N $ (N)	$ \tilde{P}_1^1 $	$ \tilde{P}_2^2 $	$ \tilde{P}_3^3 $
2.86	0,7033410417066716	0,7043237092362864(3000)	1,008376895441823	0,7033410417066689	0,7049399474872458
1,43	0,3980343662336995	0,3980343662336992(100)	0,42667412501982227	0,3980343662336992	0,39814262254852434
0,725	0,18228544344617278	0,18228544344617276(30)	0,1848242433424334	0,18228544344617276	0,18229087198641047
0,0725	0,015913207781144273	0,01591320778114422(10)	0,015914968978725994	0,015913207781144276	0,0159132081952227

Fonte:Ref. [7]

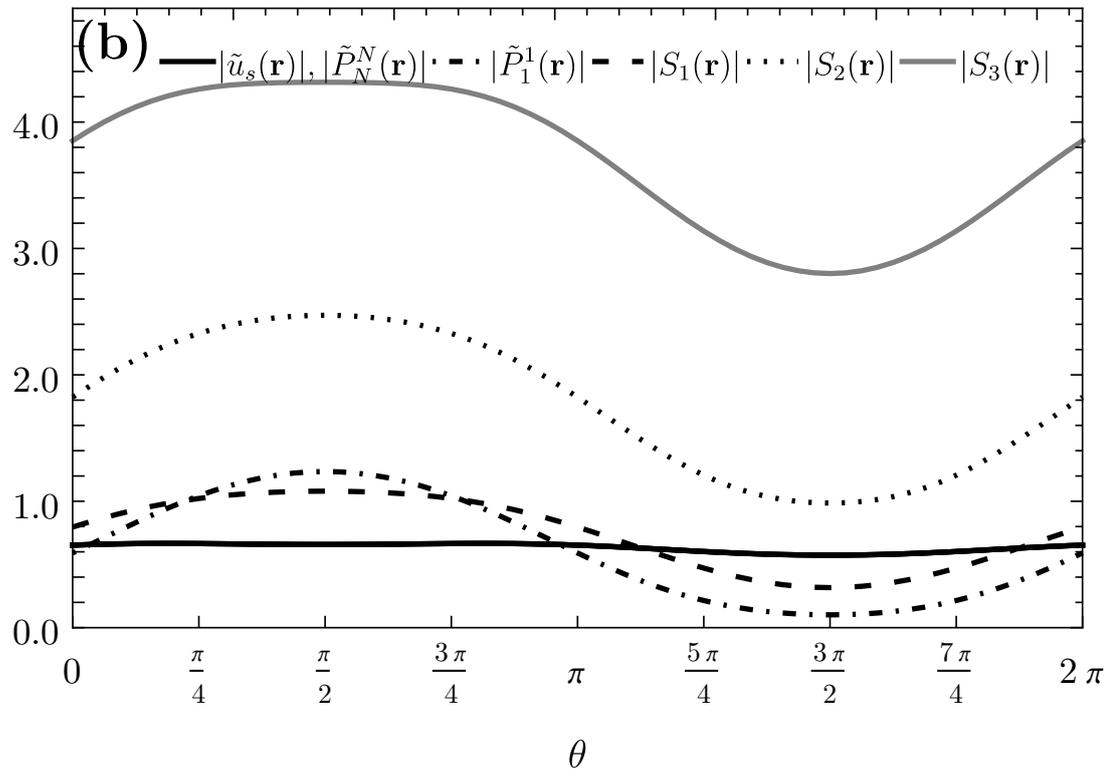
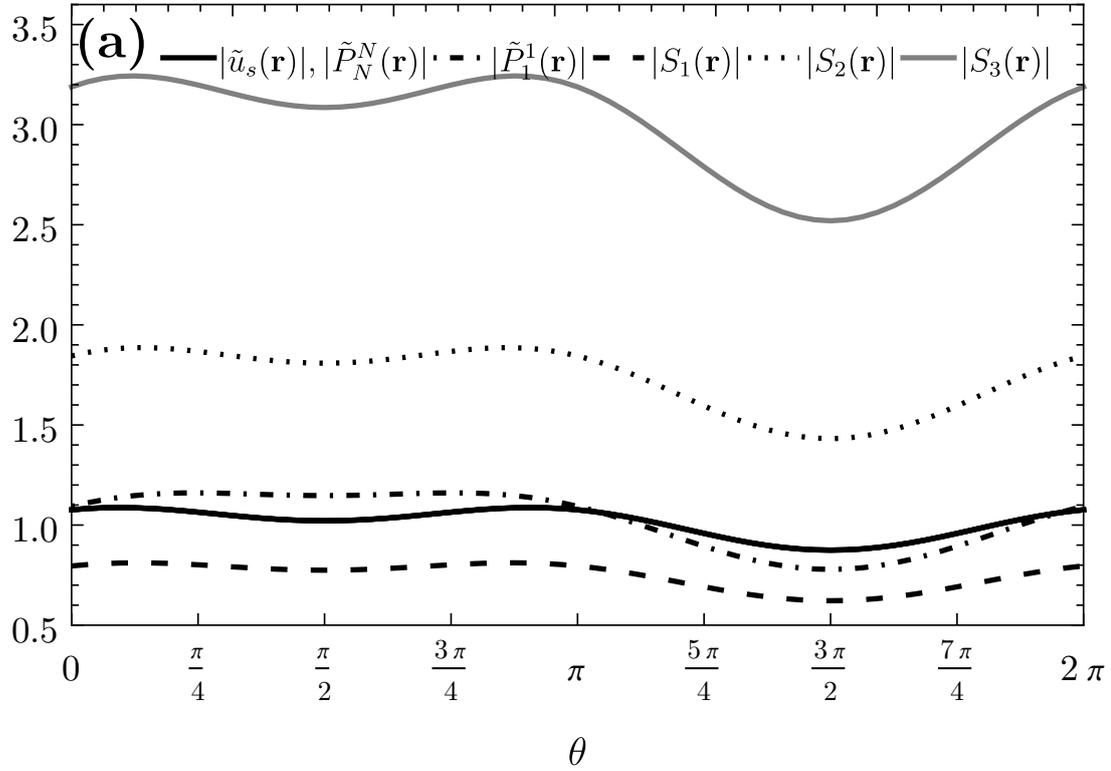
Como feito para o caso hermitiano, procedemos com uma análise ao longo do ângulo polar  $\theta$ . A Fig. 16 mostra uma característica marcante dos potenciais não hermitianos, a assimetria no espalhamento. A partir dessa figura percebemos uma região de perda acentuada em  $\pi/2$  e uma região de ganho acentuado em  $3\pi/2$ , localização dos espalhadores com perda e ganho, respectivamente. Além disso, visto que temos dois parâmetros para serem analisados,  $\sigma$  e  $\gamma$ , podemos aumentar os valores desse último para observar o que acontece com a simetria do problema. Em Fig. 16(b) percebemos que o aumento de  $\gamma$  produz uma diminuição na assimetria. Isso fica mais evidente quando tomamos a expressão assintótica do campo para  $\gamma \rightarrow \infty$ ,

$$\tilde{u}_s(\mathbf{r}) \sim r_0 \cos(kr_0 \sin \theta) \left[ i \tan(kr_0) - 1 \right], \quad (104)$$

que mostra o campo independente tanto de  $\sigma$  quanto de  $\gamma$ . Outro ponto relevante é a alta aderência dos aproximantes de Padé à nossa solução (linha sólida preta). Da mesma forma que ocorreu para o caso hermitiano, a linha que representa os aproximantes de Padé, para a escala escolhida, mostrou-se indistinguível da nossa solução. Já os termos da série de Born, novamente, divergiram muito da solução correta.

Por fim, apesar dos aproximantes de Padé representarem um avanço para problemas de espalhamento forte, como mostrado nos resultados acima, ainda não podemos garantir que ele seja adequado para os demais problemas. Inclusive, ainda persiste o problema de sua convergência [50]. Apesar de termos verificado que para aproximantes de Padé de ordem  $N = 2, 3$  ocorre convergência entre eles e para a nossa solução, não podemos garantir que isso ocorrerá para  $N \rightarrow \infty$ . Neste momento cabe lembrar que ainda não há uma teoria fechada sobre os aproximantes de Padé no que tange a sua convergência, exceto para um grupo muito específico de funções: as funções de classe Stieltjes, como mencionado anteriormente. Contudo, esse trabalho traz uma pista sobre esse problema da convergência, visto que, se olharmos atentamente para a equação (99), percebemos que ela corresponde a uma equação racional, com polinômios de ordem 2, tanto no numerador, quanto no denominador. Acreditamos que esse formato "Paderizado" da nossa solução seja uma das razões do "bom comportamento" dos aproximantes de Padé nesse problema.

**Figura 16** – (a) Mesmo que na Figura 14 com  $\sigma = 5$ ,  $\gamma = 1$  e (b)  $\gamma = 5$ . Para  $|\tilde{u}_s(\mathbf{r})|$ ,  $|S_1(\mathbf{r})|$ ,  $|S_2(\mathbf{r})|$ ,  $|S_3(\mathbf{r})|$ ,  $|\tilde{P}_1^1(\mathbf{r})|$  e  $|\tilde{P}_N^N(\mathbf{r})|$  ( $N = 2, 3$ ) como função de  $\theta$ . Parâmetros utilizados:  $\phi = 0$ ,  $k = 1$  e  $x_0 = \frac{1}{2}$ . As curvas de  $|\tilde{P}_2^2(\mathbf{r})|$  e  $|\tilde{P}_3^3(\mathbf{r})|$  são indistinguíveis da linha que representa a solução aproximada.



#### 4.4 CONCLUSÕES

Durante o estudo do campo espalhado por um dipolo  $\mathcal{PT}$ -simétrico em três dimensões, mostramos o comportamento dos aproximantes de Padé para regiões além do raio de convergência da série de Born. Para a validação desses aproximantes, obtivemos uma solução construída a partir da aproximação de campo distante da função de Green para todos os termos de recorrência da equação de Lippmann–Schwinger. Os aproximantes de Padé se mostraram eficientes, e uma alternativa viável, para a representação em regimes de espalhamentos fortes e fracos. Isso implica que os aproximantes de Padé se destacam enquanto ferramenta de substituição de séries divergentes, bem como de otimização de séries com convergência lenta. Logo, estudos que tensionem os limites dos aproximantes de Padé em diversas situações de interesse físico são de extrema importância para a melhor compreensão da ferramenta. Por fim, cabe destacar, que a solução aproximada para o campo distante viabilizou uma aproximação sem necessidade do uso de processos de renormalização. Contudo, ainda são necessários esforços na direção de uma melhor compreensão das implicações físicas dessa solução aproximada.

## CPA laser e os aproximantes de Padé

Neste capítulo, discutiremos mais uma possibilidade de aplicação dos aproximantes de Padé em ótica. Por se tratar de uma pesquisa ainda em desenvolvimento, faremos uma breve discussão sobre suas bases teóricas e as potencialidades dos aproximantes de Padé; focando sempre em questões práticas e de aplicação direta.

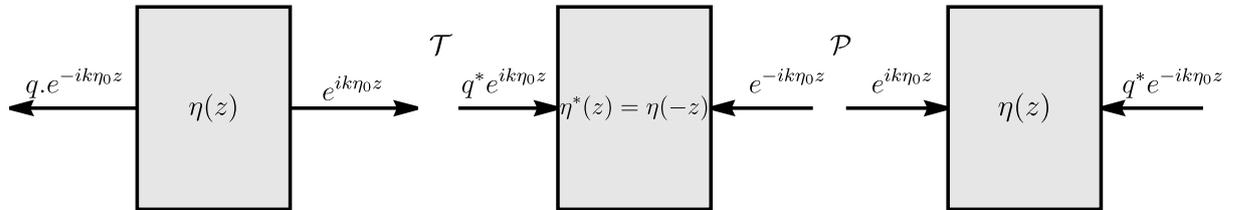
### 5.1 INTRODUÇÃO AO CPA LASER

A ideia do *coherent perfect absorber* (CPA) é recente, datando de 2010. Foram Chong *et al.*, em Ref.[33], que propuseram a ideia de um absorvedor perfeito como a contraparte, sob reversão temporal, de um laser. Ou seja, o meio ótico que produz o CPA é obtido pela transformação desse meio com ganho para outro que apenas absorve radiação, com zero reflexão. Ainda no mesmo ano, S. Longhi [18] cunhou o conceito de  $\mathcal{PT}$ -CPA laser. Em seu artigo, S. Longhi mostrou que um meio com simetria  $\mathcal{PT}$  pode comportar-se, simultaneamente, como laser e absorvedor. Ou seja, a mesma frequência  $\omega_0$  que gera um laser, pode gerar, simultaneamente, um absorvedor, desde que as ondas incidentes tenham amplitude e fase apropriadas. É certo que isso trata-se de algo inovador, pois, em geral, meios laser e meios absorvedores não acontecem juntos. Apesar de concebidos teoricamente, os CPA laser já possuem avanços significativos na área experimental [84–89]

Para ilustrar como a simetria  $\mathcal{PT}$  de um material produz um  $\mathcal{PT}$ -CPA laser, tomaremos um meio laser linear, finito, com tamanho  $L$ , e índice de refração complexo  $\eta(z)$ . Sendo o material um oscilador laser sem sinal injetado, com o campo para  $z > L/2$  dado por  $E_0(z) = e^{ik\eta_0 z}$ , onde  $\eta_0$  é o índice de refração do meio externo ao material e  $k = \omega/c_0$ , com  $\omega$  sendo a frequência da onda emitida pelo material, e  $E_0(z) = qe^{-ik\eta_0 z}$ , com  $q$  sendo

uma constante que descreve o desequilíbrio entre as duas ondas que saem pelos dois lados da cavidade ótica, para  $z < -L/2$ . Aplicando o operador reversão temporal  $\mathcal{T}$  ao sistema, e em seguida o operador paridade  $\mathcal{P}$ , produzimos uma nova solução para o sistema, com  $E_1(z) = q^* e^{-ik\eta_0 z}$  para  $z > L/2$  e  $E_1(z) = e^{ik\eta_0 z}$  para  $z < -L/2$ . Note aqui que, por se tratar de um material  $\mathcal{PT}$  simétrico, temos que  $\eta(-z) = \eta^*(z)$ . Isso faz com que  $E_1(z)$  também seja uma solução da mesma equação de Helmholtz que produz  $E_0(z)$ . Por fim, note que a solução possui a mesma frequência de saída  $\omega$ ; o que significa que, uma vez que o material satisfaz as condições de simetria  $\mathcal{PT}$ , ele pode produzir para a mesma frequência (simultaneamente) um meio laser e um absorvedor perfeito. A Fig.17 ilustra os conceitos descritos acima.

**Figura 17** – Ilustração do processo produção de um  $\mathcal{PT}$ -CPA laser a partir de um material  $\mathcal{PT}$  simétrico.



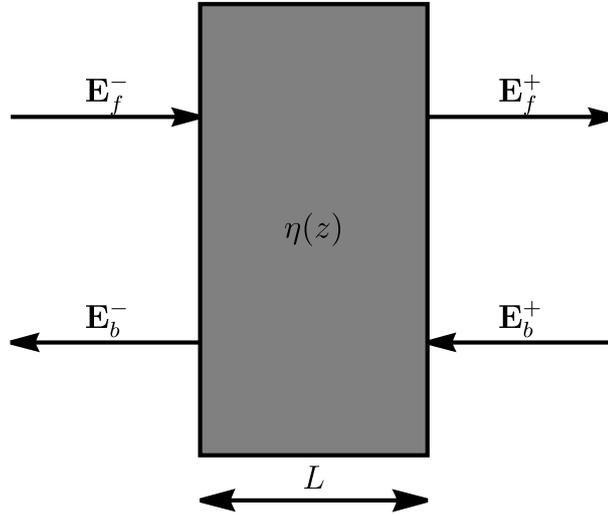
Fonte: AUTOR(2023)

## 5.2 MATRIZ DE TRANSFERÊNCIA E CPA LASER

Para podermos discutir formalmente o CPA laser, precisamos entender o conceito de matriz de transferência. Para isso, consideremos um material linear, finito, de tamanho  $L$ , e índice de refração  $\eta(z)$ . O ponto zero do eixo  $z$  se encontra exatamente no meio do material. O material possui campos, todos paralelos ao eixo  $z$ , entrando e saindo por ambas as faces, conforme mostrado na Fig. 18. Para os campos que apontam para o sentido positivo de  $z$  utilizamos o subíndice  $f$ , significando *forward*, e para os campos que apontam para o sentido negativo de  $z$  utilizamos o subíndice  $b$ , significando *backward*. Já para os campos na região  $z < -L/2$  utilizamos o subíndice superior  $'-'$ , e para os campos na região  $z > L/2$  utilizamos  $'+'$ . Dessa forma, temos os campos  $E_b^-$ , campo para a esquerda em  $z < -L/2$ ,  $E_f^-$ , campo para a direita em  $z < -L/2$ ,  $E_b^+$ , campo para a esquerda

em  $z > L/2$ ,  $E_f^+$ , campo para a direita em  $z > L/2$ . Essa notação se mostrará muito importante quando implementarmos a matriz de transferência.

**Figura 18** – Placa de tamanho  $L$  com incidência por ambos os lados.



Fonte: AUTOR(2023)

Sendo o campo  $E$  linearmente polarizado na direção  $y$ , tal que suas componentes  $x$  e  $z$  sejam nulas, e sua componente monocromática,  $E(z; k)$ , obedeça à equação de Helmholtz,

$$\frac{d^2 E(z; k)}{dz^2} + \frac{\eta(z)^2 \omega}{c^2} E(z; k) = 0, \quad (105)$$

onde  $c$  é a velocidade da luz no vácuo e  $\omega = ck$ , com  $k$  sendo o vetor de onda, podemos escrever as equações para as três regiões da Fig.18, tal que

$$\begin{aligned} E(z; k) &= E_f^- e^{ikz} + E_b^- e^{-ikz} && ; z \leq -L/2 \\ &= C_1 f(z; k) + C_2 g(z; k) && ; |z| \leq L/2 \\ &= E_f^+ e^{ikz} + E_b^+ e^{-ikz} && ; z \geq L/2, \end{aligned} \quad (106)$$

onde  $f(z; k)$  e  $g(z; k)$  são soluções da equação de Helmholtz (105) para dentro do material.

Sendo o campo e sua derivada contínuos nas interfaces do material,  $z = -L/2$  e  $z = L/2$ , podemos igualar os termos do sistema (106), e suas derivadas, para eliminar diretamente as constantes  $C_1$  e  $C_2$ , de modo a reescrevermos esse sistema como

$$\begin{pmatrix} E_f^+ \\ E_b^+ \end{pmatrix} = M(k) \begin{pmatrix} E_f^- \\ E_b^- \end{pmatrix}, \quad (107)$$

onde  $M(k)$  é chamada matriz de transferência, sendo dada por

$$M(k) = \begin{pmatrix} e^{ik\frac{L}{2}} & e^{-ik\frac{L}{2}} \\ ik e^{ik\frac{L}{2}} & -ik e^{-ik\frac{L}{2}} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} f(\frac{L}{2}; k) & g(\frac{L}{2}; k) \\ f'(\frac{L}{2}; k) & g'(\frac{L}{2}; k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f(-\frac{L}{2}; k) & g(-\frac{L}{2}; k) \\ f'(-\frac{L}{2}; k) & g'(-\frac{L}{2}; k) \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} e^{-ik\frac{L}{2}} & e^{ik\frac{L}{2}} \\ ik e^{-ik\frac{L}{2}} & -ik e^{ik\frac{L}{2}} \end{pmatrix}, \quad (108)$$

onde  $f'(z; k)$  e  $g'(z; k)$  representam as derivadas de  $f(z; k)$  e  $g(z; k)$ , respectivamente.

Se considerarmos agora uma incidência pela esquerda,  $E_b^+ = 0$ , podemos definir duas quantidades úteis: a transmissão,

$$t_L \equiv \frac{E_f^+}{E_f^-}, \quad (109)$$

e a reflexão complexa,

$$r_L \equiv \frac{E_b^-}{E_f^-}. \quad (110)$$

Assim, a transmitância e reflectância, para incidências pela esquerda, são dadas por  $T_L = |t_L|^2$  e  $R_L = |r_L|^2$ , respectivamente. Substituindo  $E_b^+ = 0$  em (107), e resolvendo para  $t_L$  e  $r_L$  [90], temos que

$$t_L = \frac{\det(M)}{M_{22}}, \quad (111)$$

e

$$r_L = -\frac{M_{21}}{M_{22}}, \quad (112)$$

onde  $\det(M)$  é o determinante da matriz de transferência,  $M(k)$ .

Da mesma forma que foi feito para uma incidência pela esquerda, podemos encontrar relações para a incidência pela direita,  $E_f^- = 0$ . Logo, definindo a transmissão pela direita como  $t_R \equiv \frac{E_b^-}{E_b^+}$ , e a reflexão pela direita como  $r_R \equiv \frac{E_f^+}{E_b^+}$ , temos

$$t_R = \frac{1}{M_{22}}, \quad (113)$$

e

$$r_R = -\frac{M_{12}}{M_{22}}. \quad (114)$$

Neste ponto é importante destacar que, sempre, para meios dielétricos lineares, independente de possuírem perda ou ganho, o determinante da matriz  $M(k)$  é igual a 1, fazendo que a transmissão seja recíproca ( $t_L = t_R$ ) [18].

Retomando neste ponto o conceito de CPA laser, temos que o modelo da Eq.(106), matematicamente, permite um sinal puramente de saída em frequência particular  $\omega_0 = ck_0$ . Assim, para um laser, temos  $E_b^+ = E_f^- = 0$ , enquanto  $E_b^-, E_f^+ \neq 0$ . Logo, pela definição de

$t_L$ , Eq.(111), e lembrando que para meios lineares  $\det(M) = 1$ , temos que a emissão laser acontece para  $M_{22}(k_0) = 0$ . Devido à relação entre  $M_{22}(k)$  e  $t_L$ , podemos reescrever isso como

$$\lim_{M_{22}(k_0) \rightarrow 0} t_L = \infty. \quad (115)$$

Já, para o absorvedor perfeito, temos que  $M_{11}(k) = 0$ . Note que, em geral,  $M_{11}$  e  $M_{22}$  não são simultaneamente iguais a zero para a mesma frequência. Contudo, já que para um material  $\mathcal{PT}$  simétrico temos  $M^*(k) = M^{-1}(k)$  [18], segue que  $M_{22}(k) = M_{11}^*(k)$ . Isso implica que se  $M_{22}(k_0) = 0$ ,  $M_{11}(k_0) = 0$ . Dessa forma, retomamos o resultado obtido por S. Longhi[18], que afirma que um material  $\mathcal{PT}$  simétrico pode agir como laser e absorvedor perfeito para uma mesma frequência  $\omega_0$ .

### 5.3 APROXIMANTES DE PADÉ E O CPA LASER

Para o cálculo dos aproximantes de Padé usaremos a metodologia mostrada no Cap.3, uma vez que nossos meios são todos lineares. Para calcular a frequência  $\omega_0$  do CPA laser usaremos a Eq.(115), com  $t_L$  sendo substituído pelo aproximante de Padé correspondente,

$$\lim_{M_{22}(k_0) \rightarrow 0} t_N^N = \infty, \quad (116)$$

onde  $t_N^N$  é o aproximante de Padé de ordem  $N$  para a transmissão. Indo a transmissão para o infinito, temos que  $(1/|t_N^N|) \rightarrow 0$ . Assim, plotamos  $1/|t_N^N|$  sobre o plano complexo e buscamos os pontos onde essa razão vai a zero. Quando esses zeros estiverem todos situados abaixo do eixo real,  $\Im(\omega) < 0$ , dizemos que o laser está abaixo do limite de disparo, significando que não temos uma frequência  $\omega_0$  onde ocorre o CPA laser. Contudo, quando esses zeros começam a aparecer acima do eixo real, observamos o fenômeno de CPA laser, para materiais  $\mathcal{PT}$ -simétricos ou simplesmente com ganho. Pretendemos estudar, com isso, como os aproximantes de Padé reproduzem essas singularidades a medida que a ordem  $N$  do aproximante aumenta.

Para fins de comparação com os resultados obtidos pelos aproximantes de Padé, usaremos as soluções analíticas para os materiais e/ou a convergência dos aproximantes. Oferecendo bons resultados, os aproximantes de Padé tem larga vantagem, quando comparado com as matrizes de transferência, por poderem trabalhar livremente com meios contínuos, sem a necessidade de discretizações que atribuem erros intrínsecos ao processo.

## 5.4 RESULTADOS

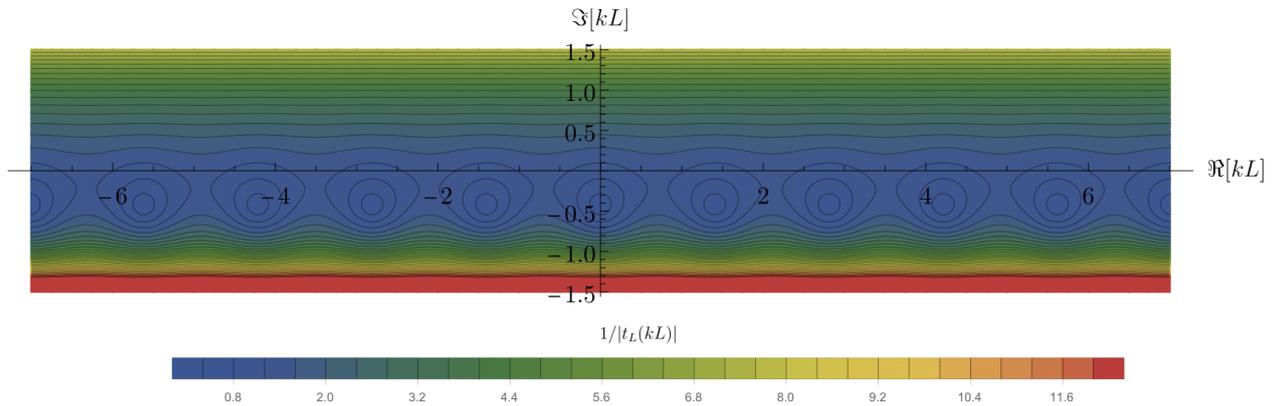
Nesta seção faremos uma discussão inicial sobre a aplicação dos aproximantes de Padé, como ferramenta, para o cálculo da frequência de aparecimento do comportamento de CPA laser para um material homogêneo e outro com dependência linear em  $z$ . Utilizando a notação do Capítulo 3, e lembrando que  $\eta(z) = \sqrt{1 + \chi(z)}$  para meios não magnéticos, e que para um meio finito fizemos  $\chi(z) \rightarrow \xi(z)$ , temos que o material homogêneo será caracterizado por  $\xi(z) = b$ , onde  $b$  pode ser real ou complexo, e o material com dependência linear por  $\xi(z) = 1 + gz$ , onde  $g$  pode ser real ou complexo. Dessa forma, trazemos alguns problemas do Capítulo 3 para serem trabalhados aqui. Lembramos ainda que a forma geral para a transmissão e reflexão desses materiais se encontram nos Apêndices A e B. Por fim, cabe destacar que, no corpo deste capítulo, serão mostrados apenas os gráficos para os resultados analíticos desses materiais, ficando as figuras para os aproximantes de Padé no Anexo A. Fizemos isso para fins de organização do texto.

### 5.4.1 MATERIAL HOMOGENEO

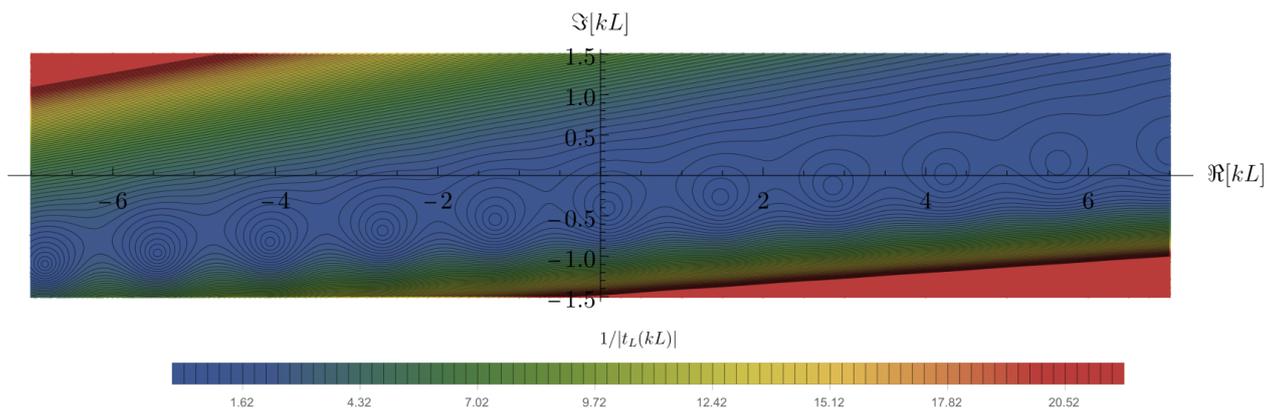
Para estudar o comportamento dos casos onde  $M_{22}(k_0) = 0$  para o material homogêneo, plotamos os resultados de  $1/|t_L(kL)|$  sobre o plano complexo. Usamos  $kL$ , ao invés de apenas  $k$ , para que a análise seja independente do tamanho do sistema. Utilizando a notação do Capítulo 3 para a susceptibilidade elétrica, montamos o primeiro gráfico para um material com  $\xi(z) = 4$ , Fig.19. Por se tratar de um material homogêneo sem ganho e/ou perda, não há frequência real para o aparecimento do fenômeno CPA laser. Logo, todos os zeros, ficam localizados na região  $\Im(kL) < 0$ . A frequência do CPA<sup>1</sup> laser só aparece para o material com ganho,  $\xi(z) = 4 - i$ , Fig.20, onde os zeros que se encontravam abaixo do eixo real para o caso de um material sem ganho e/ou perda tem, agora, uma parte real positiva. Quando passamos para um material com perda,  $\xi(z) = 4 + i$ , Fig.21, apesar de termos zeros acima do eixo real, não aparece nenhuma frequência real positiva. Para examinar se esse material pode se comportar como um CPA<sup>2</sup>, devemos fazer  $M_{11}(k) = 0$ , como dito anteriormente. Contudo, agora, essa análise foge do escopo desse trabalho.

<sup>1</sup> De forma rigorosa, não deveríamos usar o termo CPA laser para este caso, pois não se trata de um material  $\mathcal{PT}$  simétrico. Contudo, uma vez que podemos generalizar esse procedimento acoplado um termo de perda a esse material, manteremos a notação.

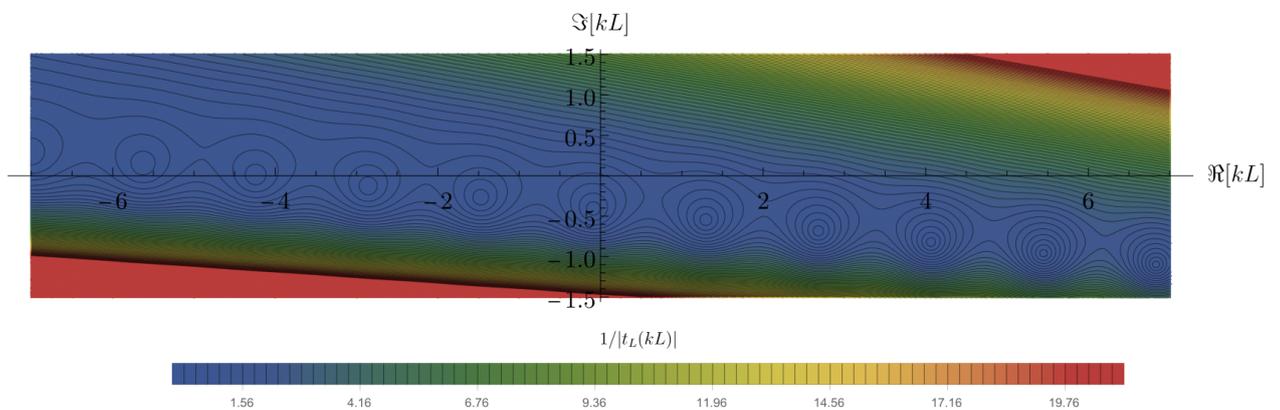
<sup>2</sup> Lembre que CPA é diferente de CPA laser.

**Figura 19** – Resultados de  $1/|t_L(kL)|$  para  $\xi(z) = 4$  no plano complexo de  $kL$ .

Fonte: AUTOR(2023)

**Figura 20** – Resultados de  $1/|t_L(kL)|$  para  $\xi(z) = 4 - i$  no plano complexo de  $kL$ .

Fonte: AUTOR(2023)

**Figura 21** – Resultados de  $1/|t_L(kL)|$  para  $\xi(z) = 4 + i$  no plano complexo de  $kL$ .

Fonte: AUTOR(2023)

Os aproximantes de Padé, mostrados no Anexo A, reproduzem os zeros para o caso do material sem perda e/ou ganho, Fig.23, para o material com perda, Fig.24, e para o material com ganho, Fig.25. Para todos os três casos, observamos o aparecimento gradual dos zeros, ao longo de uma linha, a medida que a ordem dos aproximantes diagonais aumentavam. Para os três casos, seguindo o resultado da solução analítica, os aproximantes de Padé reproduziram os zeros no plano complexo conforme a equação

$$\Xi(N) = N + 2, \quad (117)$$

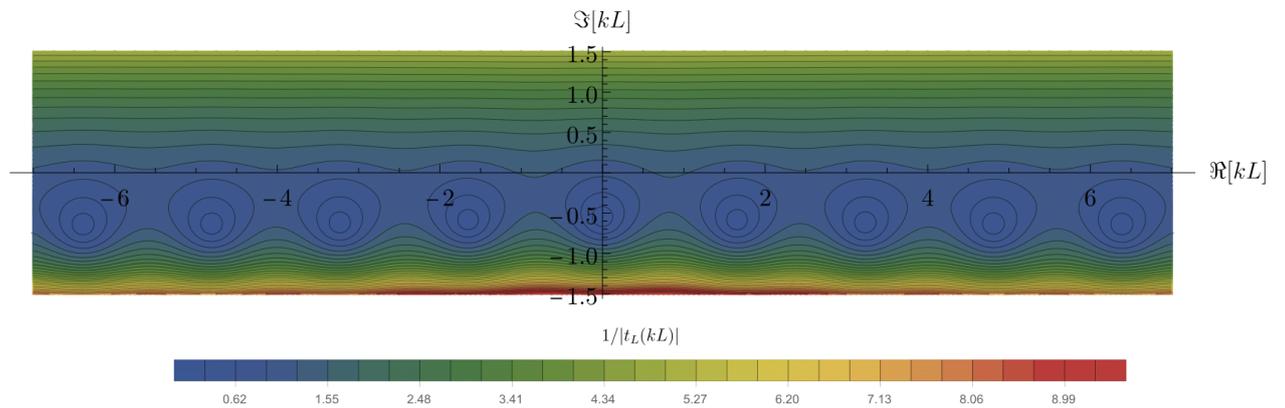
onde  $\Xi(N)$  corresponde ao número de zeros ao longo da linha da solução analítica e  $N$  a ordem do aproximante diagonal. Esse padrão é observado para todos os casos. Contudo, além desses pontos que aparecem ao longo de uma reta, horizontal para o caso do material sem ganho e/ou perda e inclinada para os demais, há uma série de zeros que aparecem em regiões mais distantes e que não reproduzem as soluções analíticas do problema. Não foram testados aproximantes de Padé fora da diagonal principal.

#### 5.4.2 MATERIAL LINEAR

Para o material linear, diferente do que foi feito para o homogêneo, não utilizaremos variações com ganho e/ou perda. Nosso objetivo aqui é mostrar que os aproximantes de Padé conseguem reproduzir os zeros para materiais não homogêneos. Essa resposta é importante, pois, uma vez que a série de Born diverge na nossa região de interesse, e a matriz de transferência possui erros acumulativos intrínsecos à sua estrutura, quando tenta reproduzir meios não homogêneos por meio de discretizações, os aproximantes de Padé despontam como grandes favoritos para ocupar esse vazio. Portanto, os aproximantes de Padé, conseguindo reproduzir bem os zeros no plano complexo, para um meio não homogêneo, abre espaço para análises para materiais mais complexos.

Na Fig. 22, como esperado, percebemos que todos os zeros estão abaixo do eixo real,  $\Im(kL) < 0$ , indicando ausência do fenômeno de CPA laser. Mais uma vez, isso ocorre por se tratar de um material sem ganho e/ou perda. Quando analisamos os aproximantes de Padé para esse material, Fig.26, percebemos o mesmo comportamento no surgimento dos zeros com o aumento da ordem do Padé, observado para o material homogêneo. Ou seja, a relação da Eq.(117) se mantém. Além disso, o surgimento de zeros fora da linha da solução analítica também foi observado para esse material.

**Figura 22** – Resultados de  $1/|t_L(kL)|$  para  $\xi(z) = 1 + gz$ , com  $g = 4$ , no plano complexo de  $kL$ .



Fonte: AUTOR(2023)

## 5.5 CONCLUSÕES

Neste capítulo mostramos a possibilidade do uso dos aproximantes de Padé para o cálculo da frequência de surgimento de uma intrigante propriedade dos materiais  $\mathcal{PT}$  simétricos, o CPA laser. Os resultados mostrados nessa seção fazem parte de um esforço inicial e, por isso, tem caráter qualitativo. Logo, é necessário um esforço na direção da consolidação numérica desses resultados, bem como a investigação do comportamento dos aproximantes fora da diagonal principal.

## Conclusões e Perspectivas

Nesta tese estudamos o comportamento dos aproximantes de Padé aplicados a problemas de espalhamento em materiais uni e tridimensionais. Os aproximantes foram utilizados dentro e fora da região de convergência da série de Born. Quando dentro dessa região, eles se mostraram capazes de acelerar a velocidade de convergência da série. A capacidade dos aproximantes de aumentar a velocidade de convergência de uma série é bem conhecida [50, 59, 60]. Já, quando os parâmetros de interesse do problema se encontravam fora da região de convergência da série de Born, os aproximantes de Padé demonstraram uma de suas mais importantes características, a continuação analítica. Apesar dos aproximantes de Padé não possuírem uma teoria geral de convergência e unicidade, eles tem demonstrado bons resultados quando aplicados a problemas de interesse físico [1, 7, 52–54, 57, 58].

Junto a aplicação dos aproximantes de Padé, foi elaborada uma nova abordagem, baseada na teoria da perturbação, para o cálculo do espalhamento de luz. Essa nova metodologia é particularmente importante, pois surge como uma alternativa às matrizes de transferência. Essas matrizes, apesar de bem estabelecidas na literatura [70], apresentam erros intrínsecos e acumulativos quando tratam de meios não homogêneos. Esses erros aparecem devido ao intenso processo de discretização do material, que pode comprometer muito o resultado dependendo da complexidade do índice de refração do material. Os aproximantes de Padé, associados a essa abordagem, conseguem trazer soluções analíticas para os problemas trabalhados. Ou seja, a metodologia aplicada consegue fornecer resultados com precisão arbitrária.

Os materiais utilizados para estudar o comportamento dos aproximantes de Padé compõem uma biblioteca diversa. Foram estudados materiais hermitianos e não-hermitianos. Dentre esses últimos, destacamos os materiais  $\mathcal{PT}$  simétricos. Devido suas intrigantes

---

propriedades, eles foram objetos de análise nos Capítulos 3, 4 e 5. Em todas as análises, os aproximantes de Padé mostraram conseguir reproduzir o comportamento do campo espalhado, dentro e fora da região de convergência da série de Born. Observamos ainda que, quando incluíamos a simetria  $\mathcal{PT}$  no material, a ordem dos aproximantes de Padé necessária para reproduzir a solução analítica do problema aumentava.

Como último exemplo, no Capítulo 5, estudamos a possibilidade de aplicação dos aproximantes de Padé para problemas envolvendo CPA laser; essa característica dos materiais  $\mathcal{PT}$  simétricos de produzir um material que se comporte como laser e absorvedor para uma mesma frequência. Apesar dos resultados mostrados serem qualitativos, os aproximantes de Padé se mostraram capazes de reproduzir os zeros que indicam o aparecimento da frequência de CPA laser. Observamos que a medida que a ordem dos aproximantes diagonais aumentava, o número de zero no plano complexo também aumentava, na relação  $N + 2$ , é a ordem do aproximante diagonal. Esse resultado mostra o potencial dos aproximantes de Padé para essa aplicação, indicando a necessidade da consolidação numérica dessa análise.

Por fim, como sugestão de futuros trabalhos, sugerimos a generalização da abordagem apresentada nessa tese para problemas não lineares e o aprofundamento da análise sobre o CPA laser.

## Referências

- 1 SIJS, T. A. V. D.; GAWHARY, O. E.; URBACH, H. P. Electromagnetic scattering beyond the weak regime: Solving the problem of divergent born perturbation series by padé approximants. *Physical Review Research*, American Physical Society, v. 2, 3 2020. ISSN 26431564. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prresearch/abstract/10.1103/PhysRevResearch.2.013308>>.
- 2 LAPIDUS, I. R. Scattering by two-dimensional circular barrier, hard circle, and delta function ring potentials. *American Journal of Physics*, American Association of Physics TeachersAAPT, v. 54, p. 459, 7 1998. ISSN 0002-9505. Disponível em: <<https://aapt.scitation.org/doi/abs/10.1119/1.14585>>.
- 3 LAPIDUS, I. R. Interaction of a charge and an electric dipole in one dimension. *American Journal of Physics*, American Association of Physics TeachersAAPT, v. 48, p. 51, 6 1998. ISSN 0002-9505. Disponível em: <<https://aapt.scitation.org/doi/abs/10.1119/1.12240>>.
- 4 LAPIDUS, I. Bound states and scattering from a one-dimensional hydrogen atom at a boundary. *American Journal of Physics*, American Association of Physics TeachersAAPT, v. 51, p. 1137, 6 1998. ISSN 0002-9505. Disponível em: <<https://aapt.scitation.org/doi/abs/10.1119/1.13330>>.
- 5 LAPIDUS, I. R. Quantum-mechanical scattering in two dimensions. *American Journal of Physics*, American Association of Physics TeachersAAPT, v. 50, p. 45, 6 1998. ISSN 0002-9505. Disponível em: <<https://aapt.scitation.org/doi/abs/10.1119/1.13004>>.
- 6 BRANDÃO, P. A.; CAVALCANTI, S. B. Scattering of partially coherent radiation by non-hermitian localized structures having parity-time symmetry. *Physical Review A*, American Physical Society, v. 100, p. 043822, 10 2019. ISSN 24699934. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prare/abstract/10.1103/PhysRevA.100.043822>>.
- 7 REBOUÇAS, J. A.; BRANDÃO, P. A. Scattering of light by a parity-time-symmetric dipole beyond the first born approximation. *Physical Review A*, American Physical Society, v. 104, p. 063514, 12 2021. ISSN 24699934. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prare/abstract/10.1103/PhysRevA.104.063514>>.
- 8 JONES, H. F. Scattering from localized non-hermitian potentials. *Physical Review D - Particles, Fields, Gravitation and Cosmology*, American Physical

- Society, v. 76, p. 125003, 12 2007. ISSN 15507998. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prd/abstract/10.1103/PhysRevD.76.125003>>.
- 9 STALIUNAS, K.; MARKOŠ, P.; KUZMIAK, V. Scattering properties of a  $\mathcal{PT}$  dipole. *Physical Review A*, American Physical Society, v. 96, p. 043852, 10 2017. ISSN 24699934. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prd/abstract/10.1103/PhysRevA.96.043852>>.
- 10 BEREZA, A. S.; NEMYKIN, A. V.; PERMINOV, S. V.; FRUMIN, L. L.; SHAPIRO, D. A. Light scattering by dielectric bodies in the born approximation. *Physical Review A*, American Physical Society, v. 95, p. 063839, 6 2017. ISSN 24699934. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prd/abstract/10.1103/PhysRevA.95.063839>>.
- 11 COLTON, D.; KRESS, R. Inverse acoustic and electromagnetic scattering theory. Springer International Publishing, v. 93, 2019. Disponível em: <<http://link.springer.com/10.1007/978-3-030-30351-8>>.
- 12 ZHANG, X.; CHEN, Y.; WANG, F.; CAI, Y. Scattering of partially coherent vector beams by a deterministic medium having parity-time symmetry. *Photonics 2022, Vol. 9, Page 140*, Multidisciplinary Digital Publishing Institute, v. 9, p. 140, 2 2022. ISSN 2304-6732. Disponível em: <<https://www.mdpi.com/2304-6732/9/3/140/html>>.
- 13 TURDUEV, M.; BOTEY, M.; GIDEN, I.; HERRERO, R.; KURT, H.; OZBAY, E.; STALIUNAS, K. Two-dimensional complex parity-time-symmetric photonic structures. *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, American Physical Society, v. 91, p. 023825, 2 2015. ISSN 10941622. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prd/abstract/10.1103/PhysRevA.91.023825>>.
- 14 MAKRIS, K. G.; EL-GANAINY, R.; CHRISTODOULIDES, D. N.; MUSSLIMANI, Z. H. Beam dynamics in  $\mathcal{PT}$  symmetric optical lattices. *Phys. Rev. Lett.*, v. 100, p. 103904, 3 2008. ISSN 00319007. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.100.103904>>.
- 15 BENDER, C. M.  $\mathcal{PT}$  symmetry in quantum physics: From a mathematical curiosity to optical experiments. *Europhys. News*, EDP Sciences, v. 47, p. 17, 4 2016. ISSN 14321092. Disponível em: <<https://www.europhysicsnews.org/articles/eprn/abs/2016/02/eprn2016472p17/eprn2016472p17.html>>.
- 16 BENDER, C. M.; BOETTCHER, S. Real spectra in non-hermitian hamiltonians having  $\mathcal{PT}$  symmetry. *Phys. Rev. Lett.*, v. 80, p. 5243, 1998. ISSN 10797114. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.80.5243>>.
- 17 LONGHI, S. Bloch oscillations in complex crystals with  $\mathcal{PT}$  symmetry. *Phys. Rev. Lett.*, v. 103, p. 123601, 9 2009. ISSN 00319007. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.103.123601>>.
- 18 LONGHI, S.  $\mathcal{PT}$ -symmetric laser absorber. *Phys. Rev. A*, v. 82, p. 031801(R), 9 2010. ISSN 10502947. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prd/abstract/10.1103/PhysRevA.82.031801>>.
- 19 LONGHI, S. Invisibility in  $\mathcal{PT}$ -symmetric complex crystals. *J. Phys. A*, v. 44, p. 485302, 2011. ISSN 17518113. Disponível em: <<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8113/44/48/485302/meta>>.

- 20 ZHU, X.; FENG, L.; ZHANG, P.; YIN, X.; ZHANG, X. One-way invisible cloak using parity-time symmetric transformation optics. *Opt. Lett.*, The Optical Society, v. 38, p. 2821, 8 2013. ISSN 0146-9592. Disponível em: <<https://opg.optica.org/ol/abstract.cfm?uri=ol-38-15-2821>>.
- 21 CASTALDI, G.; SAVOIA, S.; GALDI, V.; ALÙ, A.; ENGHETA, N.  $\mathcal{PT}$  metamaterials via complex-coordinate transformation optics. *Phys. Rev. Lett.*, v. 110, p. 173901, 4 2013. ISSN 00319007. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.110.173901>>.
- 22 CHONG, Y. D.; GE, L.; STONE, A. D.  $\mathcal{PT}$ -symmetry breaking and laser-absorber modes in optical scattering systems. *Phys. Rev. Lett.*, v. 106, p. 093902, 3 2011. ISSN 00319007. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.106.093902>>.
- 23 WONG, Z. J.; XU, Y. L.; KIM, J.; O'BRIEN, K.; WANG, Y.; FENG, L.; ZHANG, X. Lasing and anti-lasing in a single cavity. *Nat. Photon.*, Nature Publishing Group, v. 10, p. 796, 11 2016. ISSN 17494893. Disponível em: <<https://www.nature.com/articles/nphoton.2016.216>>.
- 24 KULISHOV, M.; LANIEL, J. M.; BÉLANGER, N.; AZAÑA, J.; PLANT, D. V. Nonreciprocal waveguide bragg gratings. *Opt. Express*, The Optical Society, v. 13, p. 3068, 2005. ISSN 1094-4087. Disponível em: <<https://opg.optica.org/oe/abstract.cfm?uri=OE-13-8-3068>>.
- 25 LIN, Z.; RAMEZANI, H.; EICHELKRAUT, T.; KOTTOS, T.; CAO, H.; CHRISTODOULIDES, D. N. Unidirectional invisibility induced by  $\mathcal{PT}$ -symmetric periodic structures. *Phys. Rev. Lett.*, v. 106, p. 213901, 5 2011. ISSN 00319007. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.106.213901>>.
- 26 GRAEFE, E. M.; JONES, H. F.  $\mathcal{PT}$ -symmetric sinusoidal optical lattices at the symmetry-breaking threshold. *Phys. Rev. A*, v. 84, p. 013818, 7 2010. ISSN 10502947. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevA.84.013818>>.
- 27 GUO, A.; SALAMO, G. J.; DUCHESNE, D.; MORANDOTTI, R.; VOLATIER-RAVAT, M.; AIMEZ, V.; SIVILOGLOU, G. A.; CHRISTODOULIDES, D. N. Observation of  $\mathcal{PT}$ -symmetry breaking in complex optical potentials. *Phys. Rev. Lett.*, v. 103, p. 093902, 8 2009. ISSN 00319007. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.103.093902>>.
- 28 LONGHI, S.; VALLE, G. D. Non-hermitian time-dependent perturbation theory: Asymmetric transitions and transitionless interactions. *Ann. Phys.*, Academic Press Inc., v. 385, p. 744, 10 2017. ISSN 1096035X. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0003491617302579>>.
- 29 BERRY, M. V. Physics of nonhermitian degeneracies. *Czech. J. Phys.*, v. 54, p. 1039, 10 2004. ISSN 00114626. Disponível em: <<https://link.springer.com/article/10.1023/B:CJOP.0000044002.05657.04>>.
- 30 DEMBOWSKI, C.; GRÄF, H. D.; HARNEY, H. L.; HEINE, A.; HEISS, W. D.; REHFELD, H.; RICHTER, A. Experimental observation of the topological structure of exceptional points. *Phys. Rev. Lett.*, American Inst of Physics, v. 86, p. 787, 1 2001. ISSN

00319007. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.86.787>>.

31 LONGHI, S.; FENG, L. Unidirectional lasing in semiconductor microring lasers at an exceptional point [invited]. *Photon. Res.*, The Optical Society, v. 5, p. B1, 12 2017. ISSN 23279125. Disponível em: <<https://opg.optica.org/prj/abstract.cfm?uri=prj-5-6-b1>>.

32 FENG, L.; XU, Y. L.; FEGADOLLI, W. S.; LU, M. H.; OLIVEIRA, J. E.; ALMEIDA, V. R.; CHEN, Y. F.; SCHERER, A. Experimental demonstration of a unidirectional reflectionless parity-time metamaterial at optical frequencies. *Nat. Mater.*, Nature Publishing Group, v. 12, p. 108, 2013. ISSN 14764660. Disponível em: <<https://www.nature.com/articles/nmat3495>>.

33 CHONG, Y. D.; GE, L.; CAO, H.; STONE, A. D. Coherent perfect absorbers: Time-reversed lasers. *Phys. Rev. Lett.*, v. 105, p. 053901, 7 2010. ISSN 00319007. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.105.053901>>.

34 LONGHI, S.; VALLE, G. D. Coherent perfect absorbers for transient, periodic, or chaotic optical fields: Time-reversed lasers beyond threshold. *Phys. Rev. A*, v. 85, p. 053838, 5 2012. ISSN 10502947. Disponível em: <<https://journals.aps.org/pra/abstract/10.1103/PhysRevA.85.053838>>.

35 HODAEI, H.; MIRI, M. A.; HASSAN, A. U.; HAYENGA, W. E.; HEINRICH, M.; CHRISTODOULIDES, D. N.; KHAJAVIKHAN, M. Single mode lasing in transversely multi-moded  $\mathcal{PT}$ -symmetric microring resonators. *Laser Photon. Rev.*, Wiley-VCH Verlag, v. 10, p. 494, 5 2016. ISSN 18638899. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/lpor.201500292>>.

36 FENG, L.; WONG, Z. J.; MA, R. M.; WANG, Y.; ZHANG, X. Single-mode laser by parity-time symmetry breaking. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 346, p. 972, 11 2014. ISSN 10959203. Disponível em: <<https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.1258479>>.

37 CHEN, W.; ÖZDEMİR Şahin K.; ZHAO, G.; WIERSIG, J.; YANG, L. Exceptional points enhance sensing in an optical microcavity. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 548, p. 192, 8 2017. ISSN 14764687. Disponível em: <<https://www.nature.com/articles/nature23281>>.

38 KONOTOP, V. V.; YANG, J.; ZEZYULIN, D. A. Nonlinear waves in  $\mathcal{PT}$ -symmetric systems. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 88, p. 035002, 7 2016. ISSN 15390756. Disponível em: <<https://journals.aps.org/rmp/abstract/10.1103/RevModPhys.88.035002>>.

39 SUCHKOV, S. V.; SUKHORUKOV, A. A.; HUANG, J.; DMITRIEV, S. V.; LEE, C.; KIVSHAR, Y. S. Nonlinear switching and solitons in  $\mathcal{PT}$ -symmetric photonic systems. *Laser Photon. Rev.*, Wiley-VCH Verlag, v. 10, p. 177, 3 2016. ISSN 18638899. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/lpor.201500227>>.

40 SAVOIA, S.; CASTALDI, G.; GALDI, V. Complex-coordinate non-hermitian transformation optics. *J. Opt.*, IOP Publishing Ltd, v. 18, p. 044027, 4 2016. ISSN 20408986. Disponível em: <<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/2040-8978/18/4/044027/meta>>.

- 41 JIANG, W.; MA, Y.; YUAN, J.; YIN, G.; WU, W.; HE, S. Deformable broadband metamaterial absorbers engineered with an analytical spatial kramers-kronig permittivity profile. *Laser Photon. Rev.*, Wiley-VCH Verlag, v. 11, p. 1600253, 1 2017. ISSN 18638899. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/lpor.201600253>>.
- 42 ALAEIAN, H.; DIONNE, J. A. Parity-time-symmetric plasmonic metamaterials. *Phys. Rev. A*, v. 89, p. 033829, 3 2014. ISSN 10502947. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevA.89.033829>>.
- 43 SAVOIA, S.; CASTALDI, G.; GALDI, V.; ALÙ, A.; ENGHETA, N.  $\mathcal{PT}$ -symmetry-induced wave confinement and guiding in  $\epsilon$ -near-zero metamaterials. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 91, p. 115114, 3 2015. ISSN 1550235X. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.91.115114>>.
- 44 BORN, M.; WOLF, E. *Principles of optics: electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light*. Elsevier, 2013. Disponível em: <[https://books.google.com.br/books?hl=pt-BR&lr=&id=HY-GDAAAQBAJ&oi=fnd&pg=PP1&dq=Principles+of+optics:+electromagnetic+theory+of+propagation,+interference+and+diffraction+of+light&ots=4taoyamAFD&sig=c83i5mFaMMZYbmZmzW\\_u3DH4DBk#v=onepage&q=Principles\%20of\%20optics\%3A\%20electromagnetic\%20theory\%20of\%20propagation\%2C\%20interference\%20and\%20diffraction\%20of\%20light&f=false](https://books.google.com.br/books?hl=pt-BR&lr=&id=HY-GDAAAQBAJ&oi=fnd&pg=PP1&dq=Principles+of+optics:+electromagnetic+theory+of+propagation,+interference+and+diffraction+of+light&ots=4taoyamAFD&sig=c83i5mFaMMZYbmZmzW_u3DH4DBk#v=onepage&q=Principles\%20of\%20optics\%3A\%20electromagnetic\%20theory\%20of\%20propagation\%2C\%20interference\%20and\%20diffraction\%20of\%20light&f=false)>.
- 45 JACKSON, J. D. *Classical electrodynamics*. Wiley, 1977. Disponível em: <<https://www.maths.tcd.ie/~parnachev/enmsyll.pdf>>.
- 46 CAIRNS, B.; WOLF, E. Comparison of the born and the rytov approximations for scattering on quasi-homogeneous media. *Optics communications*, Elsevier, v. 74, n. 5, p. 284–289, 1990. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0030401890903846>>.
- 47 ROACH, G. F.; BERG, P. M. van den; KLEINMAN, R. E. Convergent born series for large refractive indices. *JOSA A, Vol. 7, Issue 5, pp. 890-897*, Optica Publishing Group, v. 7, p. 890–897, 5 1990. ISSN 1520-8532. Disponível em: <<https://opg.optica.org/viewmedia.cfm?uri=josaa-7-5-890&seq=0&html=truehttps://opg.optica.org/abstract.cfm?uri=josaa-7-5-890https://opg.optica.org/josaa/abstract.cfm?uri=josaa-7-5-890>>.
- 48 LAPIDUS, I. R. Born series for scattering by a one-dimensional delta-function potential. *American Journal of Physics*, American Association of Physics TeachersAAPT, v. 37, p. 1064, 7 2005. ISSN 0002-9505. Disponível em: <<https://aapt.scitation.org/doi/abs/10.1119/1.1975196>>.
- 49 SHIRAI, T.; ASAKURA, T. Multiple light scattering from spatially random media under the second-order born approximation. *Optics Communications*, North-Holland, v. 123, p. 234–249, 1 1996. ISSN 0030-4018. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/0030401895005080>>.
- 50 BAKER, G. A. J. *Essentials of Padé Approximants*. Elsevier, 1975. Disponível em: <[https://books.google.com.br/books?hl=pt-BR&lr=&id=LFCzdo4\\_20EC&oi=fnd&pg=PP1&dq=essentials+of+Padé\%C3%A9+approximants+\(elsevier\)+&ots=](https://books.google.com.br/books?hl=pt-BR&lr=&id=LFCzdo4_20EC&oi=fnd&pg=PP1&dq=essentials+of+Padé\%C3%A9+approximants+(elsevier)+&ots=)

DzBHDUFa9r&sig=i3s3I5Z85xoOWYGDXkBEz\_L4x3c#v=onepage&q=essentials\%20of\%20Pad\%C3\%A9\%20approximants\%20(elsevier)&f=false>.

51 BREZINSKI, C. Extrapolation algorithms and padé approximations: a historical survey. *Applied Numerical Mathematics*, North-Holland, v. 20, p. 299–318, 3 1996. ISSN 0168-9274. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0168927495001107>>.

52 REBOUÇAS, J.; BRANDÃO, P. Born-padé approach to electromagnetic scattering in complex one-dimensional inhomogeneous slabs. *Physical Review A*, APS, v. 106, n. 4, p. 043503, 2022. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prabstract/10.1103/PhysRevA.106.043503>>.

53 SIJS, T. van der; GAWHARY, O. E.; URBACH, P. Padé resummation of divergent born series and its motivation by analysis of poles. *EPJ Web of Conferences*, EDP Sciences, v. 266, p. 13035, 2022. ISSN 2100-014X. Disponível em: <[https://www.epj-conferences.org/articles/epjconf/abs/2022/10/epjconf\\_eosam2022\\_13035/epjconf\\_eosam2022\\_13035.html](https://www.epj-conferences.org/articles/epjconf/abs/2022/10/epjconf_eosam2022_13035/epjconf_eosam2022_13035.html)>.

54 TZAROUCHIS, D.; SIHVOLA, A. Light scattering by a dielectric sphere: Perspectives on the mie resonances. *Applied Sciences*, Multidisciplinary Digital Publishing Institute, v. 8, n. 2, p. 184, 2018. Disponível em: <<https://www.mdpi.com/2076-3417/8/2/184>>.

55 LE, K. Q. Complex padé approximant operators for wide-angle beam propagation. *Optics Communications*, North-Holland, v. 282, p. 1252–1254, 4 2009. ISSN 0030-4018.

56 AMIRANASHVILI, S.; BANDELOW, U.; MIELKE, A. Padé approximant for refractive index and nonlocal envelope equations. *Optics Communications*, North-Holland, v. 283, p. 480–485, 2 2010. ISSN 0030-4018.

57 ANDRIANOV, I.; SHATROV, A. Padé approximants, their properties, and applications to hydrodynamic problems. *Symmetry*, Multidisciplinary Digital Publishing Institute, v. 13, n. 10, p. 1869, 2021. Disponível em: <<https://www.mdpi.com/2073-8994/13/10/1869>>.

58 SUETIN, S. P. Padé approximants and efficient analytic continuation of a power series. *Russian Mathematical Surveys*, IOP Publishing, v. 57, n. 1, p. 43, 2002. Disponível em: <<https://iopscience.iop.org/article/10.1070/RM2002v057n01ABEH000475/meta>>.

59 BAKER, G. A.; JR, G. A. B.; GRAVES-MORRIS, P.; BAKER, G.; BAKER, S. S. *Padé Approximants: Encyclopedia of Mathematics and Its Applications, Vol. 59 George A. Baker, Jr., Peter Graves-Morris*. Cambridge University Press, 1996. v. 59. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?hl=pt-BR&lr=&id=Vkk4JNLKbLoC&oi=fnd&pg=PP1&dq=Padé+Approximants:+Encyclopedia+of+Mathematics+and+It's+Applications&ots=kUZnOpSmO1&sig=BlatS8XiooXldUIFHd4dpE2-Xlw#v=onepage&q=Padé\%20Approximants\%3A\%20Encyclopedia\%20of\%20Mathematics\%20and\%20It's\%20Applications&f=false>>.

60 BENDER, C. M.; ORSZAG, S.; ORSZAG, S. A. *Advanced mathematical methods for scientists and engineers I: Asymptotic methods and perturbation theory*. Springer Science & Business Media, 1999. v. 1. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?hl=pt-BR&lr=&id=-yQXwhE6iWMC&oi=fnd&pg=PR13&dq=Advanced+mathematical+methods+for+scientists+and+engineers+I>>.

- +Asymptotic+methods+and+perturbation+theory&ots=NemZTudM4j&sig=2LQe4Xnkit4XFEnyONPTagXC3A8#v=onepage&q=Advanced\%20mathematical\%20methods\%20for\%20scientists\%20and\%20engineers\%20I\%3A\%20Asymptotic\%20methods\%20and\%20perturbation\%20theory&f=false>.
- 61 JR, G. A. B. Application of the padé approximant method to the investigation of some magnetic properties of the ising model. *Physical Review*, APS, v. 124, n. 3, p. 768, 1961. Disponível em: <<https://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRev.124.768>>.
- 62 COELHO, L. A. B. Aproximantes de Padé na estimação de parâmetros modais em estruturas de grande porte. 2008. Disponível em: <<https://www.teses.usp.br/teses/disponiveis/3/3142/tde-14052009-150010/publico/Tese.pdf>>.
- 63 WYNN, P. On a device for computing the  $e_m(S_n)$  transformation. *Mathematical Tables and Other Aids to Computation*, JSTOR, v. 10, p. 91, 4 1956. ISSN 08916837. Disponível em: <<https://www.jstor.org/stable/2002183>>.
- 64 JONES, H.; OPTICS, M. K. J. of; 2016 undefined. Extension of analytic results for a  $\mathcal{PT}$ -symmetric structure. *iopscience.iop.org*, 2016. Disponível em: <<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/2040-8978/18/5/055101/meta>>.
- 65 COSTANTINI, G.; MARCHESONI, F. Threshold diffusion in a tilted washboard potential. *Europhysics Letters*, IOP Publishing, v. 48, p. 491, 12 1999. ISSN 0295-5075. Disponível em: <<https://iopscience-iop.ez9.periodicos.capes.gov.br/article/10.1209/epl/i1999-00510-7https://iopscience-iop.ez9.periodicos.capes.gov.br/article/10.1209/epl/i1999-00510-7/meta>>.
- 66 TULLY, J. C. Washboard model of gas-surface scattering. *The Journal of Chemical Physics*, American Institute of PhysicsAIP, v. 92, p. 680, 8 1998. ISSN 0021-9606. Disponível em: <<https://aip-scitation-org.ez9.periodicos.capes.gov.br/doi/abs/10.1063/1.458421>>.
- 67 CASADO, J. M. Coherence resonance in a washboard potential. *Physics Letters A*, North-Holland, v. 291, p. 82–86, 12 2001. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0375960101007277>>.
- 68 TATARKOVA, S. A.; SIBBETT, W.; DHOLAKIA, K. Brownian particle in an optical potential of the washboard type. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 91, p. 038101, 7 2003. ISSN 10797114. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.91.038101>>.
- 69 GRIFFITHS, D. J. *Mecânica Quântica*. 2. ed. [s.n.], 2013. Único. Disponível em: <[https://books.google.com.br/books/about/Mec{\%C3\%A2nica\\_qu\%C3\%A2ntica}.htm](https://books.google.com.br/books/about/Mec{\%C3\%A2nica_qu\%C3\%A2ntica}.htm)>.
- 70 MOSTAFAZADEH, A. Transfer matrix in scattering theory: A survey of basic properties and recent developments. *Turkish Journal of Physics*, TUBITAK, v. 44, p. 472–527, 9 2020. ISSN 13036122. Disponível em: <<https://arxiv.org/abs/2009.10507v1>>.
- 71 LORAN, F.; MOSTAFAZADEH, A. Fundamental transfer matrix and dynamical formulation of stationary scattering in two and three dimensions. *Physical Review A*, American Physical Society, v. 104, p. 032222, 9 2021. ISSN 24699934. Disponível em: <<https://journals.aps.org/pra/abstract/10.1103/PhysRevA.104.032222>>.

- 72 LORAN, F.; MOSTAFAZADEH, A. Fundamental transfer matrix for electromagnetic waves, scattering by a planar collection of point scatterers, and anti-  $\mathcal{PT}$  -symmetry. *Physical Review A*, American Physical Society, v. 107, p. 012203, 1 2023. ISSN 24699934. Disponível em: <<https://journals.aps.org/pra/abstract/10.1103/PhysRevA.107.012203>>.
- 73 BRANDÃO, P. A. Propagation of electromagnetic waves through very thin non-hermitian slabs. *Physics Letters A*, North-Holland, v. 384, p. 126759, 10 2020. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0375960120306265>>.
- 74 RÜTER, C. E.; MAKRIS, K. G.; EL-GANAINY, R.; CHRISTODOULIDES, D. N.; SEGEV, M.; 5, D. K. .; SCHINDLER, . J.; LIN, Z.; LEE, J. M.; RAMEZANI, H.; ELLIS, F. M.; 6, T. K. .; RAMEZANI, . H.; KOVANIS, V.; VITEBSKIY, I.; KOTTOS, T.; XU, Y. L.; NEZHAD, W. . M. P.; TETZ, K.; FAINMAN, Y. Anisotropic reflection oscillation in periodic multilayer structures of parity-time symmetry. *Optics Express*, Vol. 22, Issue 15, pp. 18401-18411, Optica Publishing Group, v. 22, p. 18401–18411, 7 2014. ISSN 1094-4087. Disponível em: <<https://opg.optica.org/viewmedia.cfm?uri=oe-22-15-18401&seq=0&html=truehttps://opg.optica.org/abstract.cfm?uri=oe-22-15-18401https://opg.optica.org/oe/abstract.cfm?uri=oe-22-15-18401>>.
- 75 NOVITSKY, D. V.; KARABCHEVSKY, A.; LAVRINENKO, A. V.; SHALIN, A. S.; NOVITSKY, A. V.  $\mathcal{PT}$  symmetry breaking in multilayers with resonant loss and gain locks light propagation direction. *Physical Review B*, American Physical Society, v. 98, p. 125102, 9 2018. ISSN 24699969. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.98.125102>>.
- 76 NOVITSKY, D. V. Cpa-laser effect and exceptional points in -symmetric multilayer structures. *Journal of Optics*, IOP Publishing, v. 21, p. 085101, 7 2019. ISSN 2040-8986. Disponível em: <<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/2040-8986/ab2a59https://iopscience.iop.org/article/10.1088/2040-8986/ab2a59/meta>>.
- 77 LORAN, F.; MOSTAFAZADEH, A.; SEYMEN, S.; TURGUT, O. T. Comment on “scattering of light by a parity-time-symmetric dipole beyond the first born approximation”. *Physical Review A*, American Physical Society, v. 106, p. 037501, 9 2022. ISSN 24699934. Disponível em: <<https://journals.aps.org/pra/abstract/10.1103/PhysRevA.106.037501>>.
- 78 LORAN, F.; MOSTAFAZADEH, A. Renormalization of multi-delta-function point scatterers in two and three dimensions, the coincidence-limit problem, and its resolution. *Annals of Physics*, Academic Press, v. 443, p. 168966, 8 2022. ISSN 0003-4916. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0003491622001312>>.
- 79 LORAN, F.; MOSTAFAZADEH, A. Singularity-free treatment of delta-function point scatterers in two dimensions and its conceptual implications. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, IOP Publishing, v. 55, p. 305303, 7 2022. ISSN 1751-8121. Disponível em: <<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8121/ac7a76https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1751-8121/ac7a76/meta>>.
- 80 ALI, A.; HOODBHOY, P. M.a.b. bég memorial volume. World Scientific Pub Co Pte Lt, p. 1–314, 10 1991. Disponível em: <<https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/9789814538664#page=46>>.

- 81 LORAN, F.; MOSTAFAZADEH, A.; SEYMEYEN, S.; TURGUT, O. T. Comment on “scattering of light by a parity-time-symmetric dipole beyond the first born approximation”. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 106, p. 037501, Sep 2022. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.106.037501>>.
- 82 MERTZIOS, B.; CHRISTODOULOU, M. On the generalized cayley-hamilton theorem. *IEEE transactions on automatic control*, IEEE, v. 31, n. 2, p. 156–157, 1986. Disponível em: <<https://ieeexplore.ieee.org/abstract/document/1104208>>.
- 83 VALKS johannes. *Raising the power of a 2×2 matrix | Physics and Mathematics*. 2011. Accessed: 2022-03-23. Disponível em: <<https://xphysics.wordpress.com/2011/12/03/raising-the-power-of-a-2%c3%972-matrix/>>.
- 84 BARANOV, D. G.; KRASNOK, A.; SHEGAI, T.; ALÙ, A.; CHONG, Y. Coherent perfect absorbers: linear control of light with light. *Nature Reviews Materials 2017 2:12*, Nature Publishing Group, v. 2, p. 1–14, 10 2017. ISSN 2058-8437. Disponível em: <<https://www.nature.com/articles/natrevmats201764>>.
- 85 SUN, Y.; TAN, W.; LI, H. Q.; LI, J.; CHEN, H. Experimental demonstration of a coherent perfect absorber with pt phase transition. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 112, p. 143903, 4 2014. ISSN 10797114. Disponível em: <<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.112.143903>>.
- 86 BRUCK, R.; MUSKENS, O. L. Plasmonic nanoantennas as integrated coherent perfect absorbers on soi waveguides for modulators and all-optical switches. *Optics Express, Vol. 21, Issue 23, pp. 27652-27661*, Optica Publishing Group, v. 21, p. 27652–27661, 11 2013. ISSN 1094-4087. Disponível em: <<https://opg.optica.org/viewmedia.cfm?uri=oe-21-23-27652&seq=0&html=truehttps://opg.optica.org/abstract.cfm?uri=oe-21-23-27652https://opg.optica.org/oe/abstract.cfm?uri=oe-21-23-27652>>.
- 87 KIM, J.; LEE, S.-Y.; PARK, H.; LEE, B.; KIM, H. Near-infrared coherent perfect absorption in plasmonic metal-insulator-metal waveguide. *Optics Express, Vol. 23, Issue 19, pp. 24464-24474*, Optica Publishing Group, v. 23, p. 24464–24474, 9 2015. ISSN 1094-4087. Disponível em: <<https://opg.optica.org/viewmedia.cfm?uri=oe-23-19-24464&seq=0&html=truehttps://opg.optica.org/abstract.cfm?uri=oe-23-19-24464https://opg.optica.org/oe/abstract.cfm?uri=oe-23-19-24464>>.
- 88 BERGMAN, K.; GROTE, R. R.; OSGOOD, R. M.; ROTHENBERG, J. M.; ACKERT, J. J.; KNIGHTS, A. P.; CHEN, C. P.; DADAP, J. I. Experimental demonstration of coherent perfect absorption in a silicon photonic racetrack resonator. *Optics Letters, Vol. 41, Issue 11, pp. 2537-2540*, Optica Publishing Group, v. 41, p. 2537–2540, 6 2016. ISSN 1539-4794. Disponível em: <<https://opg.optica.org/viewmedia.cfm?uri=ol-41-11-2537&seq=0&html=truehttps://opg.optica.org/abstract.cfm?uri=ol-41-11-2537https://opg.optica.org/ol/abstract.cfm?uri=ol-41-11-2537>>.
- 89 ALTUZARRA, C.; VEZZOLI, S.; VALENTE, J.; GAO, W.; SOCI, C.; FACCIO, D.; COUTEAU, C. Coherent perfect absorption in metamaterials with entangled photons. *ACS Photonics*, American Chemical Society, v. 4, p. 2124–2128, 9 2017. ISSN 23304022. Disponível em: <<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acsp Photonics.7b00514>>.
- 90 CANNATA, F.; DEDONDER, J. P.; VENTURA, A. Scattering in  $\mathcal{PT}$ -symmetric quantum mechanics. *Annals of Physics*, Academic Press, v. 322, p. 397–433, 2 2007. ISSN

---

0003-4916. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0003491606001229>>.

# Apêndices



## Solução exata para o material finito homogêneo

Neste apêndice, fornecemos a solução exata para as amplitudes do campo no sistema de dispersão composto por uma placa com tamanho  $L$  e permissividade elétrica  $\xi(z) = b$ . Os campos totais nas regiões  $z \leq 0$ ,  $0 \leq z \leq L$  e  $z \geq L$  são dados por  $\psi_1 = e^{ikz \cos \theta} + r e^{-ikz \cos \theta}$ ,  $\psi_2 = d_1 e^{ikz \sqrt{\cos^2 \theta + \alpha b}} + d_2 e^{-ikz \sqrt{\cos^2 \theta + \alpha b}}$  e  $\psi_3 = t e^{ikz \cos \theta}$ , respectivamente. Para conectar os parâmetros  $r$ ,  $t$ ,  $d_1$  e  $d_2$ , utilizamos o fato que a amplitude total do campo  $\psi(z)$  e sua derivada  $d\psi(z)/dz$  são contínuas em  $z = 0$  e  $z = L$ . A primeira condição de continuidade decorre diretamente da continuidade do campo elétrico paralelo à interface. A segunda condição de fronteira é uma consequência direta da equação diferencial satisfeita por  $\psi(z)$ , ou pode ser vista como uma condição de continuidade para o campo magnético.

Igualando o campo e suas derivadas, obtemos o seguinte sistema de equações:

$$\begin{aligned}
 1 + r &= d_1 + d_2, \\
 d_1 e^{ik\gamma L} + d_2 e^{-ik\gamma L} &= t e^{ikL \cos \theta}, \\
 (1 - r) \cos \theta &= \gamma(d_1 - d_2), \\
 \gamma(d_1 e^{ik\gamma L} - d_2 e^{-ik\gamma L}) &= t \cos \theta e^{ikL \cos \theta},
 \end{aligned} \tag{118}$$

onde  $\gamma = \sqrt{\cos^2 \theta + \alpha b}$ . Resolvendo o sistema obtemos as amplitudes

$$d_1 = \frac{2(\gamma + \cos \theta) \cos \theta}{(\gamma + \cos \theta)^2 - (\gamma - \cos \theta)^2 e^{2ik\gamma L}}, \tag{119}$$

$$d_2 = \frac{2(\cos \theta - \gamma) \cos \theta}{(\gamma - \cos \theta)^2 - (\gamma + \cos \theta)^2 e^{-2ik\gamma L}}. \tag{120}$$

A partir da primeira (segunda) equação em (118) obtemos a amplitude refletida (transmitida)  $r$  ( $t$ ).



## Solução exata para o material finito linear

Neste caso, onde  $\xi(z) = 1 + bz$ , a solução exata para a amplitude do campo  $\psi_2(z)$ , dentro do meio, é dada por

$$\psi_2(z) = c_1 \text{Ai}(u) + c_2 \text{Bi}(u), \quad (121)$$

onde  $c_1$  e  $c_2$  são constantes,

$$u = \frac{-bk^2 z \alpha - \frac{k^2}{2}(1 + 2\alpha + \cos 2\theta)}{(-b\alpha k^2)^{2/3}}$$

e Ai e Bi são funções de Airy definidas como soluções independentes da equação de Airy,

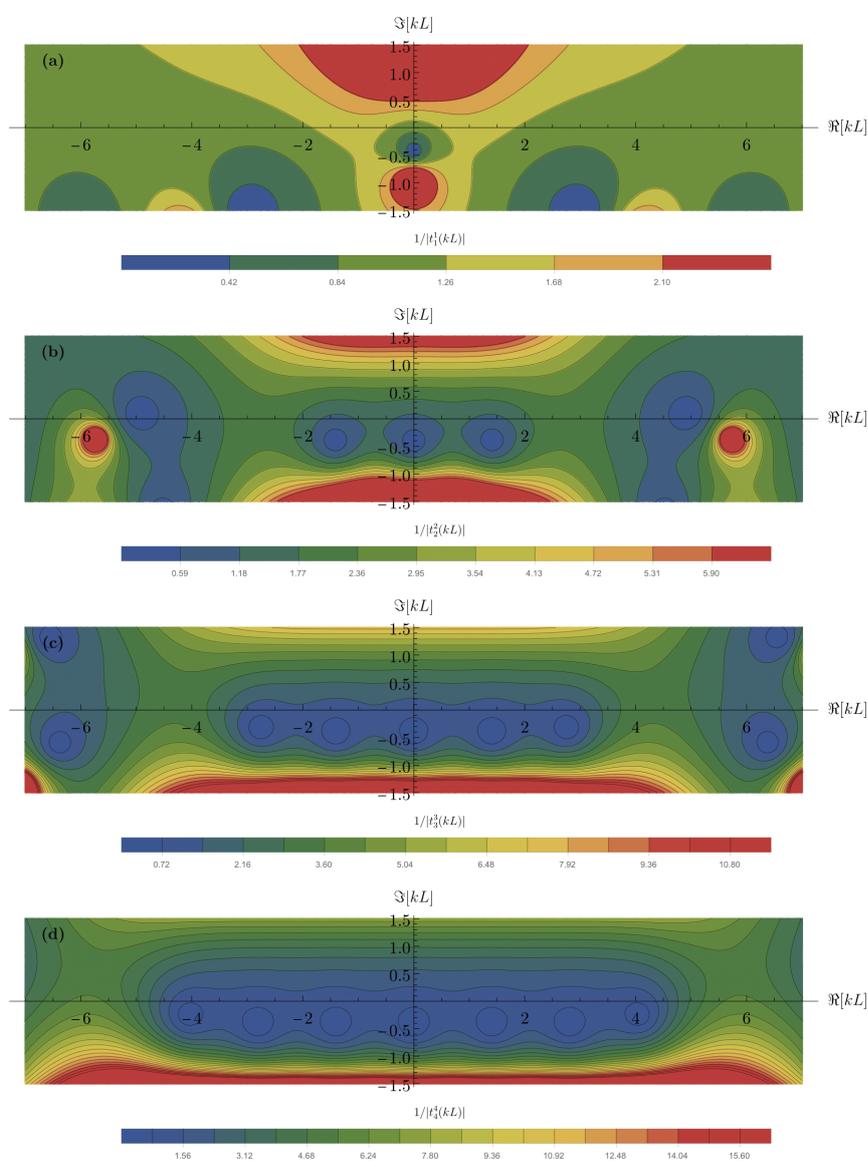
$$\begin{aligned} \text{Ai}(u) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{3^{\frac{n-2}{3}}}{\pi n!} \Gamma\left(\frac{n+1}{3}\right) \\ &\quad \times \sin\left[\frac{2\pi}{3}(n+1)\right] u^n, \\ \text{Bi}(u) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{3^{\frac{n-2}{3}}}{\pi n!} \Gamma\left(\frac{n+1}{3}\right) \\ &\quad \times \left\{ 1 + \sin\left[\frac{\pi}{6}(4n+1)\right] \right\} u^n, \end{aligned} \quad (122)$$

onde  $\Gamma$  é a função Gamma. Ambas as séries convergem no plano complexo, pois a equação diferencial não possui singularidades. Igualando as soluções para o espaço livre para  $z \leq 0$  e  $z \geq L$  em ambas as interfaces, obtemos as amplitudes transmitida e refletida (escritas em termos das funções de Airy e suas derivadas).

# **Anexos**

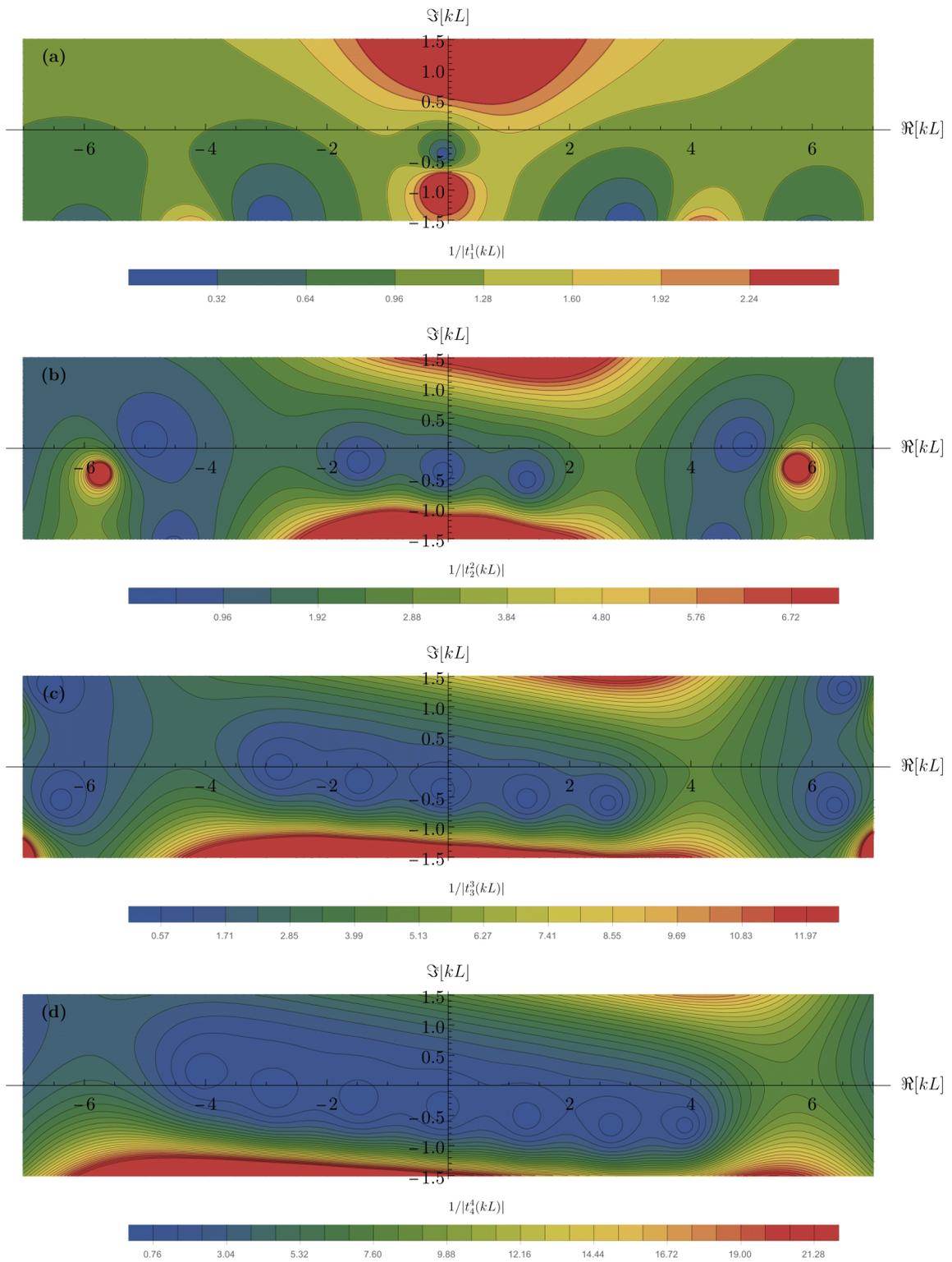
## Figuras dos aproximantes de Padé para o CPA

**Figura 23** – Resultados de (a)  $1/|t_1^1(kL)|$ , (b)  $1/|t_2^2(kL)|$  (c)  $1/|t_3^3(kL)|$  e (d)  $1/|t_4^4(kL)|$  para  $\xi(z) = 4$  no plano complexo de  $kL$ .



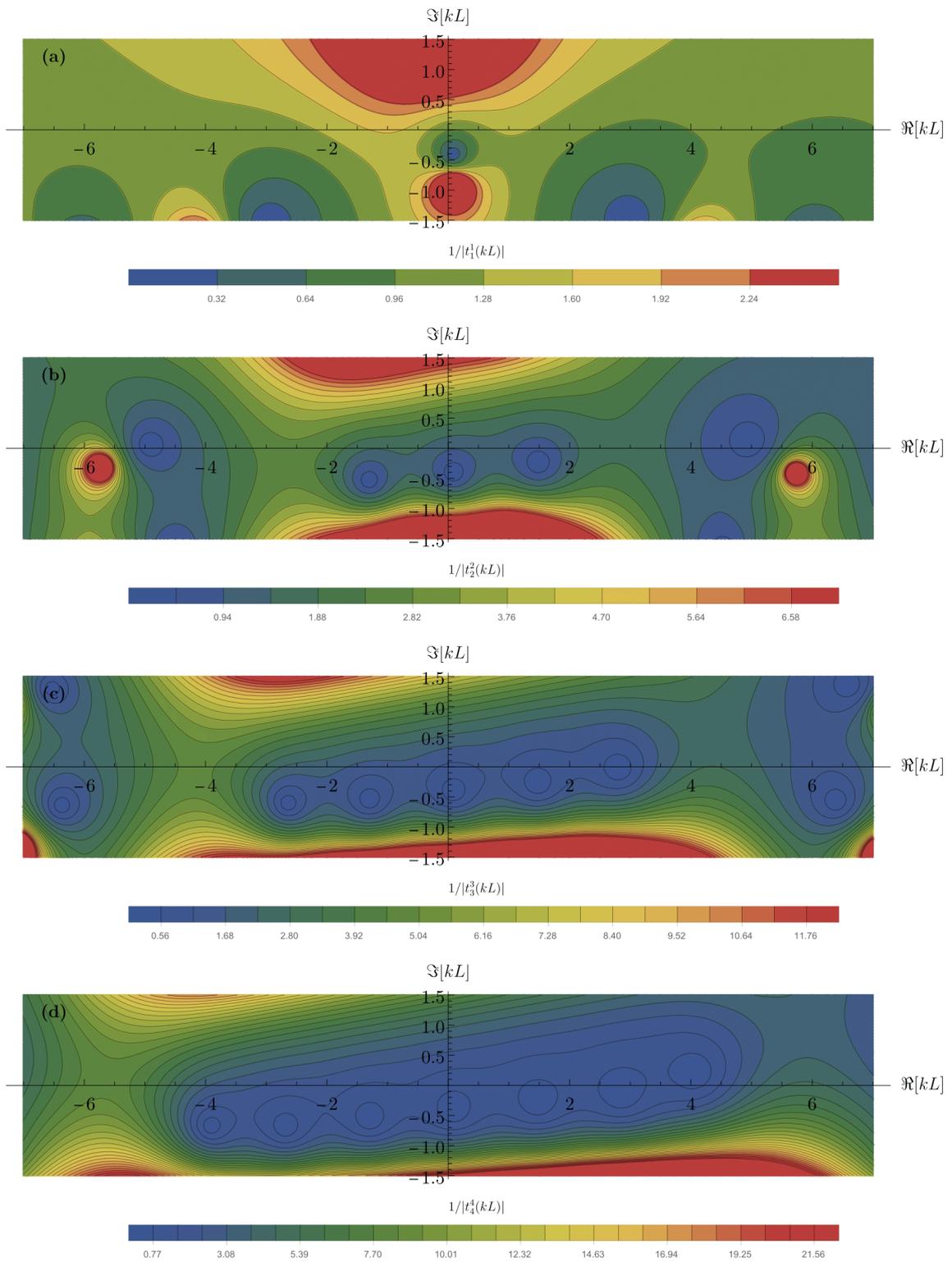
Fonte: AUTOR(2023)

**Figura 24** – Resultados de (a)  $1/|t_1^1(kL)|$ , (b)  $1/|t_2^2(kL)|$  (c)  $1/|t_3^3(kL)|$  e (d)  $1/|t_4^4(kL)|$  para  $\xi(z) = 4 + i$  no plano complexo de  $kL$ .



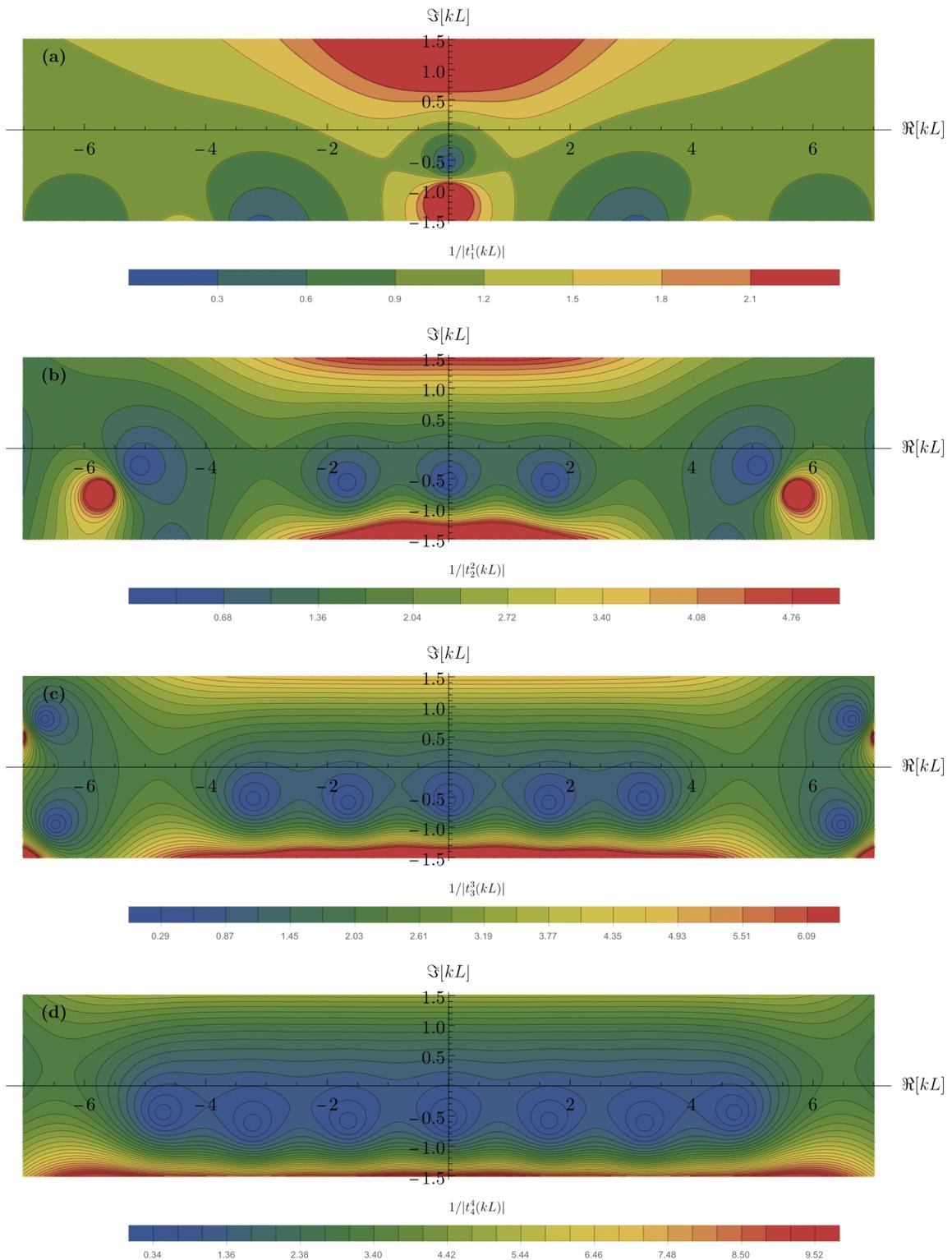
Fonte: AUTOR(2023)

**Figura 25** – Resultados de (a)  $1/|t_1^1(kL)|$ , (b)  $1/|t_2^2(kL)|$  (c)  $1/|t_3^3(kL)|$  e (d)  $1/|t_4^4(kL)|$  para  $\xi(z) = 4 - i$  no plano complexo de  $kL$



Fonte: AUTOR(2023)

**Figura 26** – Resultados de (a)  $1/|t_1^1(kL)|$ , (b)  $1/|t_2^2(kL)|$  (c)  $1/|t_3^3(kL)|$  e (d)  $1/|t_4^4(kL)|$  para  $\xi(z) = 1+gz$ , com  $g = 4$ , no plano complexo de  $kL$ .



Fonte: AUTOR(2023)



**Artigos publicados**

**Scattering of light by a parity-time-symmetric dipole beyond the first Born approximation**J. A. Rebouças <sup>\*</sup>*Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Ceará, Iguatu, Ceará 63500-000, Brazil  
and Universidade Federal de Alagoas, Maceió, Alagoas 57072-900, Brazil*P. A. Brandão *Universidade Federal de Alagoas, Maceió, Alagoas 57072-900, Brazil*

(Received 6 October 2021; revised 26 November 2021; accepted 2 December 2021; published 17 December 2021)

The scattering of light by localized three-dimensional dielectrics having gain and loss defies the usual Born approximation, since the material can increase the amplitude of the incident field within the scatterer, making the weak-scattering assumption invalid. The convergence of the Born series is rarely discussed in analytical treatments, as the state of exhaustion is reached after calculating the very first few terms of the series. Even if all the terms are obtained, the series will certainly be of a divergent type in general, thus invalidating the equality of the scattered field to its Taylor-series representation. We present here a simple localized material model of a dielectric having parity-time ( $\mathcal{PT}$ ) symmetry, consisting of a  $\mathcal{PT}$ -symmetric dipole, such that all the terms in the Born series are analytically evaluated and a closed-form expression is obtained in the far-zone approximation. The scattered field is then analyzed by using Padé approximants in order to obtain convergent representations of the scattered radiation and to compare with the exact solution. This allows us to study the role of the gain and loss parameter in strong-scattering regimes and to demonstrate the remarkable properties of Padé approximants when applied to scattering.

DOI: [10.1103/PhysRevA.104.063514](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.104.063514)**I. INTRODUCTION**

The scattering of radiation by dielectrics is one of the most important techniques available to obtain information about the inner structure of unknown objects and also to control the scattered wave field emanating from known dielectric material distributions. The mathematical theory behind it is very rich and has many levels of sophistication that permeates almost every field of physics [1]. In one of these ramifications, approximate solutions can be found by using perturbation theory. The idea is to represent the total field as a power-series expansion (Taylor series) in terms of some parameter such that if this parameter is set to zero, one obtains the solution to the unperturbed problem, representing the system without a scatterer. The advantage of this representation is that the coefficients of the Taylor series are usually easy to obtain, at least for the first few terms, and one hopes that they represent a good approximation to the exact answer as long as the expansion parameter is small in some sense (weak scattering) [2–10].

The disadvantage is that in some cases one is willing to obtain information in strong-scattering regimes, where the material strongly interacts with the incident radiation. If the Taylor representation is the only tool available, a large number of terms must be computed to obtain accurate results. This procedure is certainly to be done using computers and numerical approximations. Furthermore, the radius of convergence

in the power-series representation may not be easy to obtain since the analytical formula for all coefficients in the expansion is generally unknown. Even if the convergence radius is known, the physically reasonable numerical parameters can be such that the series diverges. Another representation which has been proven to be very useful arises if we replace the partial sums of the Taylor terms by Padé approximants. In this case, the function being sought is represented by a fraction of two polynomials [11–13]. There has been some work involving Padé approximants in quantum scattering theory [14–18] and in classical electromagnetic scattering [19,20]. Our approach closely follows a recent treatment involving one- and two-dimensional scattering with lossy materials [21].

Since the initial exposition of the remarkable effects of parity-time ( $\mathcal{PT}$ ) symmetry [22,23] in optics [24–31], the scattering of light by non-Hermitian materials with gain and loss has developed a new twist. In one-dimensional systems, effects such as unidirectional reflectionless materials [32] and the  $\mathcal{PT}$ -symmetric laser absorber [33] are among the most drastic ones highlighting the non-Hermitian aspect of photonics. In these one-dimensional systems possessing homogeneous material layers, the transfer and scattering matrix formalism are the most suited to obtain exact results for the transmittance and reflectance amplitudes [34]. However, in three-dimensional settings the lack of a general formalism forces us to deal with the Born series and the problem of its convergence. This is especially important if the material has gain because it could invalidate the weak-scattering assumption (first Born approximation).

<sup>\*</sup>jalvesreboucas@gmail.com

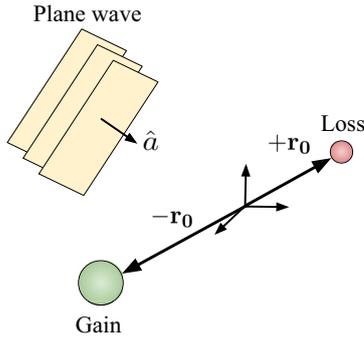


FIG. 1. Scattering system. A monochromatic plane wave of frequency  $\omega$  traveling in the direction specified by the unit vector  $\hat{a}$  interacts with the scatterer composed of two point particles with gain and loss ( $\mathcal{PT}$ -symmetric dipole). The position of the particle with loss (gain) is  $+\mathbf{r}_0$  ( $-\mathbf{r}_0$ ). All quantities plotted have arbitrary units.

Our aim here is to demonstrate how the Born series can be directly summed to obtain the exact closed-form solution to a three-dimensional scattering problem with a scatterer described by a  $\mathcal{PT}$ -symmetric physical dipole (see Fig. 1). This exact solution allows us to study the behavior of the scattered radiation in strong-scattering regimes. With the analytical solution at our disposal, the Padé representation of the scattered field is analyzed in order to highlight its remarkable properties over the Taylor-series representation. In Sec. II we present the general scattering formalism for a scalar field, the Born series, and the exact closed-form solution to the scattering of light by a  $\mathcal{PT}$ -symmetric dipole. Section III is devoted to a detailed discussion of Taylor and Padé approximants to the scattered field amplitude and its relation to the gain and loss parameter present in the scatterer. In Sec. IV we present a summary and our conclusions.

## II. SCATTERING THEORY AND BORN SERIES

Consider the scalar representation of a complex optical wave field  $u(\mathbf{r}, \omega)$  of monochromatic angular frequency  $\omega$  satisfying the differential equation

$$\nabla^2 u(\mathbf{r}, \omega) + k^2 \varepsilon(\mathbf{r}, \omega) u(\mathbf{r}, \omega) = 0, \quad (1)$$

where  $k = \omega/c$  is the wave number, with  $c$  the speed of light in vacuum, and  $\varepsilon(\mathbf{r}, \omega)$  represents the complex-valued relative permittivity of a localized scatterer. By writing the relative permittivity as  $\varepsilon(\mathbf{r}, \omega) = 1 + \alpha \chi(\mathbf{r}, \omega)$ , with  $\chi(\mathbf{r}, \omega)$  the linear electric susceptibility and  $\alpha$  the perturbation parameter, the differential equation satisfied by the wave field  $u(\mathbf{r}, \omega)$  is given by

$$\nabla^2 u(\mathbf{r}, \omega) + k^2 u(\mathbf{r}, \omega) = -\alpha k^2 \chi(\mathbf{r}, \omega) u(\mathbf{r}, \omega). \quad (2)$$

The original problem we want to solve is recovered by setting  $\alpha = 1$ . To obtain the integral form of Eq. (2), we view the right-hand side as an inhomogeneous term and define the Green's function  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  as a solution of

$$\nabla^2 G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + k^2 G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (3)$$

such that it is possible to write

$$u(\mathbf{r}) = u_0(\mathbf{r}) + \alpha k^2 \int_{\mathbf{r}'} \chi(\mathbf{r}') u(\mathbf{r}') G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d^3 r', \quad (4)$$

where  $u_0(\mathbf{r})$  is the solution to the homogeneous equation, which is obtained from (2) with  $\alpha = 0$  (unperturbed problem). The explicit form of the Green's function  $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  that is physically acceptable is given by

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \quad (5)$$

To apply perturbation methods, we assume that the field can be expressed as a power series in  $\alpha$ ,

$$u(\mathbf{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} u_n(\mathbf{r}) \alpha^n, \quad (6)$$

where  $u_0(\mathbf{r})$  is the solution to the unperturbed problem with  $\alpha = 0$ . Equation (6) is known as the Born series. The unperturbed wave field  $u_0(\mathbf{r})$  satisfies the homogeneous Helmholtz equation  $\nabla^2 u_0(\mathbf{r}) + k^2 u_0(\mathbf{r}) = 0$  and represents the total field in the absence of the scatterer. We assume that the unperturbed wave field is given by the plane wave

$$u_0(\mathbf{r}) = e^{ik\hat{a}\cdot\mathbf{r}}, \quad (7)$$

where  $\hat{a}$  is a unit vector indicating the incident direction.

After substituting Eq. (6) into (4), we obtain the recursion relation between the expansion coefficients  $u_n(\mathbf{r})$ :

$$u_n(\mathbf{r}) = k^2 \int_{\mathbf{r}'} \chi(\mathbf{r}') G(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) u_{n-1}(\mathbf{r}') d^3 r' \quad (n \geq 1). \quad (8)$$

The first correction  $u_1(\mathbf{r})$  to the total field  $u(\mathbf{r})$  is known as the Born approximation. In what follows, we will be interested in the scattered field far beyond the region where the scatterer is located (far-zone approximation). Therefore, the Green's function represented by Eq. (5) can be approximated by

$$\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \sim \frac{e^{ikr}}{4\pi r} e^{-ik\hat{s}\cdot\mathbf{r}'} \quad (r \gg r'), \quad (9)$$

where  $\hat{s} = \mathbf{r}/r$  and  $r = |\mathbf{r}|$ .

The localized material is represented by a  $\mathcal{PT}$ -symmetric dipole, given by the dielectric constant  $\varepsilon(\mathbf{r}, \omega) = 1 + \alpha \chi(\mathbf{r}, \omega)$ , with the linear electric susceptibility  $\chi(\mathbf{r}, \omega)$  written as

$$\chi(\mathbf{r}, \omega) = (\sigma + i\gamma)\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) + (\sigma - i\gamma)\delta(\mathbf{r} + \mathbf{r}_0), \quad (10)$$

where  $\sigma$  and  $\gamma$  are positive parameters and  $+\mathbf{r}_0$  ( $-\mathbf{r}_0$ ) is the position of the scatterer which has loss (gain) [35,36]. After substituting Eqs. (9) and (10) into (8) we obtain

$$u_n(\mathbf{r}) = \frac{k^2}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \left[ (\sigma + i\gamma) u_{n-1}(\mathbf{r}_0) e^{-ik\hat{s}\cdot\mathbf{r}_0} + (\sigma - i\gamma) u_{n-1}(-\mathbf{r}_0) e^{ik\hat{s}\cdot\mathbf{r}_0} \right] \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (11)$$

Since we are interested in the scattered field amplitude, it is more convenient to write the total field

as

$$\begin{aligned}
 u(\mathbf{r}) &= u_0(\mathbf{r}) + u_1(\mathbf{r})\alpha + u_2(\mathbf{r})\alpha^2 + \dots \\
 &= u_0(\mathbf{r}) + \frac{e^{ikr}}{r} [\tilde{u}_1(\mathbf{r})\alpha + \tilde{u}_2(\mathbf{r})\alpha^2 + \dots] \\
 &= u_0(\mathbf{r}) + \frac{e^{ikr}}{r} \tilde{u}_s(\mathbf{r}), \tag{12}
 \end{aligned}$$

where  $\tilde{u}_s(\mathbf{r})$  is the scattering amplitude, and deal directly with  $\tilde{u}_i(\mathbf{r})$ , which is independent of  $r$ . In the Appendix we demonstrate the induction process employed to obtain a closed-form expression for  $\tilde{u}_n(\mathbf{r})$  and  $\tilde{u}_s(\mathbf{r})$ . Although the expressions are a bit involved, this is a rare example where the  $n$ th term of the expansion can be written analytically for a scattering three-dimensional problem. The closed-form expression for  $\tilde{u}_s$  is given by

$$\begin{aligned}
 \tilde{u}_s(\mathbf{r}) &= e^{-ik\hat{s}\cdot\mathbf{r}_0} \\
 &\times \frac{-D_2k^4Q_0 + D_4k^4P_0 - 4\pi k^2P_0}{D_2D_3k^4 - (D_1k^2 - 4\pi)(D_4k^2 - 4\pi)} \\
 &+ e^{ik\hat{s}\cdot\mathbf{r}_0} \frac{D_1k^4Q_0 - D_3k^4P_0 - 4\pi k^2Q_0}{D_2D_3k^4 - (D_1k^2 - 4\pi)(D_4k^2 - 4\pi)}, \tag{13}
 \end{aligned}$$

where  $P_0 = (\sigma + i\gamma)e^{ik\hat{a}\cdot\mathbf{r}_0}$ ,  $Q_0 = (\sigma - i\gamma)e^{-ik\hat{a}\cdot\mathbf{r}_0}$ ,  $D_1 = (\sigma + i\gamma)/r_0$ ,  $D_2 = (\sigma + i\gamma)e^{2ki\mathbf{r}_0}/r_0$ ,  $D_3 = (\sigma - i\gamma)e^{2ki\mathbf{r}_0}/r_0$ , and  $D_4 = (\sigma - i\gamma)/r_0$ . One final quantity that will be of interest is the partial sum  $S_N$  of the first  $N$  terms in the Taylor-series representation,  $S_N(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^N \tilde{u}_n(\mathbf{r})$ , with  $S_1(\mathbf{r})$  the scattering amplitude in the usual Born approximation. In the next section we discuss the relationship between the closed-form expression for  $\tilde{u}_s(\mathbf{r})$  and the correction terms  $\tilde{u}_n$  along with its Padé approximants for the scattered radiation.

### III. TAYLOR AND PADÉ REPRESENTATIONS FOR THE SCATTERED FIELD

This section is devoted to a more detailed discussion involving the exact solution obtained in the preceding section and its connection to Taylor and Padé representations. The following discussion is divided between passive scatterers with  $\gamma = 0$  (Hermitian scattering) and active scatterers with  $\gamma \neq 0$  (non-Hermitian scattering).

#### A. Hermitian scattering

Consider the situation without the presence of gain and/or loss in the scatterers, i.e.,  $\gamma = 0$ . An important issue to be addressed is how the scattering amplitude, in a fixed direction  $(\theta, \phi)$ , behaves as we increase  $\sigma$ , thus making the transition between weak- and strong-scattering regimes. The exact answer to this question cannot be obtained if one is working with the first Born approximation since, in this case, the scattering amplitude is a linear function of  $\sigma$  and so it predicts an infinite amplitude in the limit  $\sigma \rightarrow \infty$ :

$$S_1(\mathbf{r}) = \tilde{u}_1(\mathbf{r}) = \sigma \frac{k^2}{2\pi} \cos[k\mathbf{r}_0 \cdot (\hat{a} - \hat{s})]. \tag{14}$$

Figure 2 shows the plot of  $|S_1(\mathbf{r})|$  (first Born approximation) as a function of  $\sigma$  for a fixed scattering direction (dashed

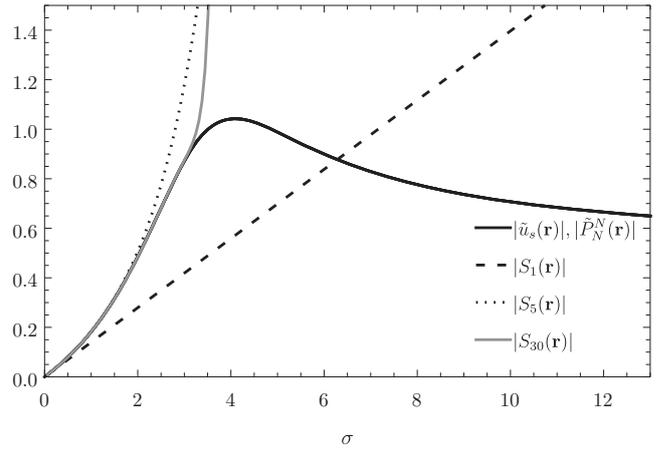


FIG. 2. Scattered field amplitude as a function of  $\sigma$ . The dashed line shows the first Born approximation  $|S_1(\mathbf{r})|$ , the dotted line  $|S_5(\mathbf{r})|$ , the gray solid line  $|S_{30}(\mathbf{r})|$ , and the black solid line  $|\tilde{P}_N^N(\mathbf{r})|$  ( $N = 1, 2, 3$ ) and the exact solution  $|\tilde{u}_s(\mathbf{r})|$ . For more information see Table II. The parameters are  $\theta = \frac{\pi}{2}$ ,  $\phi = 0$ ,  $k = 1$ ,  $x_0 = \frac{1}{2}$ , and  $\gamma = 0$ . All quantities plotted have arbitrary units.

curve). The picture also shows the plots of the sum of the first 5 and 30 terms in the Taylor series,  $|S_5(\mathbf{r})|$  (dotted curve) and  $|S_{30}(\mathbf{r})|$  (gray solid line) along with the exact solution for  $|u_s(\mathbf{r})|$  (black curve). Curiously, as we increase  $\sigma$ , the field amplitude increases and it reaches a maximum value around  $\sigma \approx 4$  before it saturates to a constant amplitude. As expected, we obtain better accuracy as we add more terms into the Taylor partial sum. Notice, however, that the discrepancy between the first Born approximation and the exact solution is very pronounced even for small values of  $\sigma$ . To explain the behavior of the partial sums displayed in Fig. 2, we calculate the radius of convergence of the Born series in the complex  $\alpha$  plane. The first column of Table I shows several values of  $\sigma$  and  $R_\alpha$  is the convergence radius for the respective values of  $\sigma$ . Since the original problem is restored by choosing  $\alpha = 1$ , Table I indicates that the Taylor series diverges for  $\sigma > 3.57983$ , approximately. Since the Taylor representation is not suitable to obtain information in strong-scattering regimes, we turn our discussion to another representation. A

TABLE I. Radius of convergence  $R_\alpha$  in the complex  $\alpha$  plane for the Taylor series  $\sum_n u_n \alpha^n$  for several values of  $\sigma$ . The parameters are  $\phi = 0$ ,  $\theta = \frac{\pi}{2}$ ,  $k = 1$ ,  $x_0 = \frac{1}{2}$ , and  $\gamma = 0$ .

$\sigma$	$R_\alpha$
1	3.57983
2	1.78991
3	1.19328
4	0.894956
5	0.715965
6	0.596638
7	0.511404
8	0.447478
9	0.397758
10	0.357983

TABLE II. Comparison between the exact solution  $\tilde{u}_s$  for the scattered field amplitude and its Taylor  $S_N$  and Padé  $\tilde{P}_N^N$  representations (with  $\sigma = 1$ ). The parameters are  $\gamma = 0, k = 1, x_0 = \frac{1}{2}, \phi = 0$ , and  $\theta = \frac{\pi}{2}$ . All values of  $\alpha$  are inside the radius of convergence.

$\alpha$	Exact solution	$ S_N  (N)$	$ \tilde{P}_1^1 $	$ \tilde{P}_2^2 $
3.57	1.0090898257861656	1.0090877280387027(4000)	1.0090898257861698	1.009089825786168
1.79	0.40969141139798726	0.40969141139798715(100)	0.4096914113979872	0.40969141139798704
0.895	0.15828711442382187	0.15828711442382182(30)	0.15828711442382185	0.1582871144238218
0.447	0.06995869702491307	0.06995869702491307(20)	0.06995869702491307	0.0699586970249131
0.0357	0.0050302415730227356	0.005030241573022735(10)	0.0050302415730227356	0.005030241573022735

Padé approximant  $P_M^N$  of order  $(M, N)$  is defined as the ratio between two polynomials with degrees  $M$  and  $N$ ,

$$P_M^N(\mathbf{r}) = \frac{\sum_{n=0}^N A_n(\mathbf{r})\alpha^n}{\sum_{m=0}^M B_m(\mathbf{r})\alpha^m}, \quad (15)$$

where we define  $B_0 = 1$  without loss of generality. The remaining  $M + N + 1$  coefficients  $A_n$  and  $B_n$  are related to  $u_n$  of Eq. (6) after the first  $M + N + 1$  terms in the Taylor-series expansion of  $P_M^N$  match the first  $M + N + 1$  terms of the power series (6). There are well-known algorithms to efficiently perform such operations [11,13]. In what follows, we only consider the diagonal approximants with  $M = N$ . We have performed numerical simulations (not shown) and verified that the off-diagonal approximants  $P_M^{M+1}$  and  $P_{M+1}^M$  indeed converge to the exact answer in the appropriate limit.

As an elementary example, the approximant  $P_1^1(\mathbf{r})$  is given explicitly by

$$P_1^1(\mathbf{r}) = \frac{A_0(\mathbf{r}) + A_1(\mathbf{r})\alpha}{1 + B_1(\mathbf{r})\alpha} = u_0(\mathbf{r}) + \frac{u_1^2(\mathbf{r})\alpha}{u_1(\mathbf{r}) - u_2(\mathbf{r})\alpha}. \quad (16)$$

Thus, to obtain  $P_N^N(\mathbf{r})$  we need the first  $2N + 1$  coefficients in the Taylor representation. Our claim is that the approximants approach the correct answer as  $N$  increases. We discuss this point later.

All diagonal approximants are of the form  $P_N^N(\mathbf{r}) = u_0(\mathbf{r}) + f_N[u_1(\mathbf{r}), u_2(\mathbf{r}), \dots]$ , where  $f_N$  is a function independent of the incident field  $u_0(\mathbf{r})$ . Since we are mainly interested in the properties of the scattered field, all the results displayed below refer to  $[P_N^N(\mathbf{r}) - u_0(\mathbf{r})]/(e^{ikr}/r) = \tilde{P}_N^N(\mathbf{r})$ , where  $\tilde{P}_N^N(\mathbf{r})$  is the approximant for the scattered field amplitude. In other words, all Padé approximants are of the form

$$P_N^N(\mathbf{r}) = u_0(\mathbf{r}) + \frac{e^{ikr}}{r} \tilde{P}_N^N(\mathbf{r}), \quad (17)$$

where  $\tilde{P}_N^N(\mathbf{r})$  is independent of  $r$ .

Figure 2 shows the plot of  $|\tilde{P}_N^N(\mathbf{r})|$  for  $N = 1, 2$ , and 3. In the scale used, the lines for the approximants are indistinguishable from the line representing the exact solution. This amazing match is due to the fact that the exact solution is already in a Padé form, being represented by a fraction of two second-degree polynomials in the variable  $\sigma$ . The truly remarkable thing to note here is that only two coefficients ( $\tilde{u}_1$  and  $\tilde{u}_2$ ) are necessary to construct  $P_1^1$ , which agrees with the exact answer in ten decimal places for some values of  $\alpha$  (or  $\sigma$ ).

Table II compares the exact solution with its Padé and Taylor representations for a fixed scattering direction.

In this Hermitian configuration we expect the scattered radiation field to possess a symmetric profile in relation to the scatterers. Figure 3 shows the plot of the scattered field amplitude as a function of the polar angle  $\theta$ . Again, the first Padé approximant  $\tilde{P}_1^1$  is able to retrieve information about the scattering directions from the exact solution by using only two coefficients of the Taylor series. The figure also displays the first, second, and third Born approximations along with the exact solution to the problem. The plotted lines of  $|\tilde{P}_1^1(\mathbf{r})|$ ,  $|\tilde{P}_2^2(\mathbf{r})|$ , and  $|\tilde{u}_s(\mathbf{r})|$  are indistinguishable from one another in the scale adopted (black curve).

### B. Non-Hermitian scattering

Consider now an active  $\mathcal{PT}$  dipole with balanced gain and loss ( $\gamma \neq 0$ ). This system has been studied under the first Born approximation [35,36]. The first thing to note is that we can no longer consider  $\sigma$  or  $\gamma$  as an expansion parameter since we are unable to recover the unperturbed problem (no scatterers) by letting  $\sigma$  or  $\gamma$  vanish independently. By the same reasoning as in the Hermitian case, we ask what happens to the scattered field amplitude for a fixed direction as we increase  $\sigma$  or  $\gamma$ . Figure 4 displays the behavior of the exact solution, the Padé approximants, and the Taylor summation

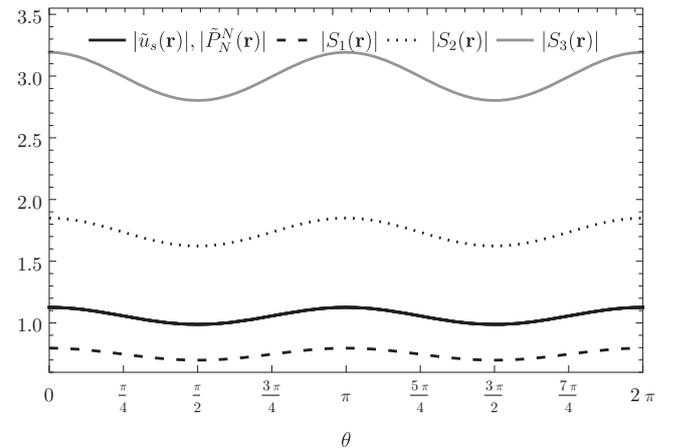


FIG. 3. Scattered field amplitude as a function of  $\theta$ . The dashed line shows the first Born approximation  $|S_1(\mathbf{r})|$ , the dotted line  $|S_2(\mathbf{r})|$ , the gray solid line  $|S_3(\mathbf{r})|$ , and the black solid line  $|\tilde{P}_N^N(\mathbf{r})|$  ( $N = 1, 2, 3$ ) and the exact solution  $|\tilde{u}_s(\mathbf{r})|$ . The parameters are  $\phi = 0, k = 1, x_0 = \frac{1}{2}, \sigma = 5$ , and  $\gamma = 0$ . All quantities plotted have arbitrary units.

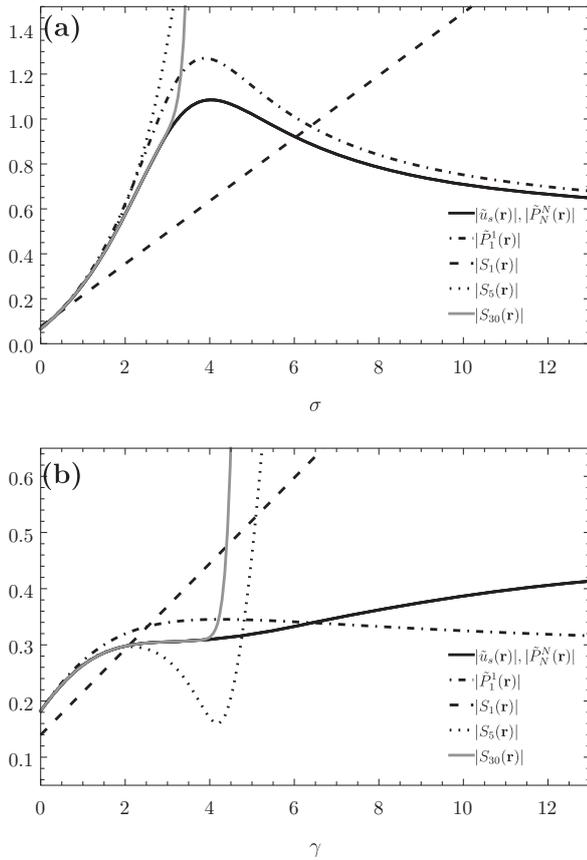


FIG. 4. (a) Same as in Fig. 2 but with  $\gamma = 1$  and (b)  $|\tilde{u}_s(\mathbf{r})|$ ,  $|S_1(\mathbf{r})|$ ,  $|S_5(\mathbf{r})|$ ,  $|S_{30}(\mathbf{r})|$ ,  $|\tilde{P}_1^N(\mathbf{r})|$ , and  $|\tilde{P}_3^N(\mathbf{r})|$  ( $N = 2, 3$ ) as a function of  $\gamma$  with  $\sigma = 1$ . The parameters are  $\theta = \frac{\pi}{2}$ ,  $\phi = 0$ ,  $k = 1$ , and  $x_0 = \frac{1}{2}$ . The line plots of  $|\tilde{P}_2^N(\mathbf{r})|$  and  $|\tilde{P}_3^N(\mathbf{r})|$  are indistinguishable from the line representing the exact solution. All quantities plotted have arbitrary units.

as a function of  $\sigma$  (for  $\gamma = 1$ ) in Fig. 4(a) and as a function of  $\gamma$  (for  $\sigma = 1$ ) in Fig. 4(b). In this case, even though the closed-form solution is already in Padé form, the  $\tilde{P}_1^N$  approximant is not able to return accurate results, as the dot-dashed curve in Fig. 4 demonstrates. However, the second diagonal Padé approximant  $\tilde{P}_2^N$  agrees almost exactly with the correct answer, its plotted line being indistinguishable from the line of  $|\tilde{u}_s|$

(black curve). Thus, with only four coefficients of the Born series, it is possible to obtain very accurate results by varying  $\sigma$  and/or  $\gamma$ . We conclude that Padé approximants also work for dielectric systems with gain. To explain the behavior of the partial sums  $S_N$ , the reader can consult Table III, which shows the radius of convergence in the complex  $\alpha$  plane for several values of  $\gamma$  and  $\sigma$ . For example, by inspecting Table III one can explain the divergence of  $S_N$  in Fig. 4(a) for  $\sigma \approx 3.5$ . This table also suggests one general behavior, that is, increasing  $\gamma$  decreases  $R_\alpha$ . Thus, gain and loss directly influence the radius of convergence of the Born series.

Physically, as the gain and loss parameter  $\gamma$  increases, the scattered field amplitude saturates to a constant value independent of  $\sigma$ . This can be verified by inspecting Eq. (13) in the limit  $\gamma \rightarrow \infty$ , which gives

$$\tilde{u}_s(\mathbf{r}) \sim r_0 \cos(kr_0 \sin \theta) [i \tan(kr_0) - 1]. \quad (18)$$

Since the Born approximation is formed by retaining the first term in the Taylor expansion, it predicts an infinite amount of energy to the scattered radiation when  $\gamma$  (or  $\sigma$ ) increases, which is clearly nonphysical. Curiously, we also verified that in this limit, the scattered field profile turns out to be symmetric in the sense that it scatters light like its Hermitian counterpart (the scattered field amplitude being an even function of  $\theta$ ). Thus, even though the system is non-Hermitian in character, it can generate a scattered field with symmetrical properties.

Regarding the directional properties of the scattered radiation, Fig. 5 shows the non-Hermitian version of Fig. 3. It is seen that the symmetric character of the field is broken as a result of the gain and loss present in the scatterer. In general, more radiation is emitted in the direction where the scatterer with gain is located ( $\theta = \frac{\pi}{2}$ ,  $\phi = 0$ ). The first diagonal Padé approximant  $\tilde{P}_1^N$  is again not accurate enough to represent the analytical solution. On the other hand, the second diagonal Padé approximant  $\tilde{P}_2^N$  displays remarkable agreement with the exact solution  $|\tilde{u}_s|$  in the far zone. All high-order Padé approximants  $\tilde{P}_N^N$  for  $N > 3$  give even more accurate numerical values. In order to expose some numerical values from this remarkable match between  $\tilde{P}_N^N$  and  $|\tilde{u}_s|$ , Table IV demonstrates the agreement between partial sums  $S_N$ , Padé approximants  $\tilde{P}_N^N$ , and the closed-form expression  $|\tilde{u}_s|$  for several values of  $\alpha$ .

TABLE III. Radius of convergence in the complex  $\alpha$  plane for the Taylor series  $\sum_n u_n \alpha^n$  for several values of  $\sigma$  and  $\gamma$ . The parameters are  $\phi = 0$ ,  $\theta = \pi/2$ ,  $k = 1$ , and  $x_0 = 0.5$ .

$\sigma$	$R_\alpha(\gamma = 1)$	$R_\alpha(\gamma = 5)$	$R_\alpha(\gamma = 10)$
1	2.86615	0.909877	0.471608
2	1.68626	0.827169	0.454939
3	1.1624	0.736475	0.435248
4	0.881973	0.64986	0.413585
5	0.709336	0.57323	0.39096
6	0.592808	0.508002	0.368237
7	0.508995	0.453362	0.346077
8	0.445866	0.407738	0.32493
9	0.396627	0.369507	0.305066
10	0.357158	0.337251	0.286615

TABLE IV. Comparison between the exact solution  $\tilde{u}_s$  for the scattered field amplitude and its Taylor  $S_N$  and Padé  $\tilde{P}_N^N$  representations (with  $\sigma = 1$  and  $\gamma = 1$ ). The parameters are  $k = 1$ ,  $x_0 = \frac{1}{2}$ ,  $\phi = 0$ , and  $\theta = \frac{\pi}{2}$ . All values of  $\alpha$  are inside the radius of convergence.

$\alpha$	Exact solution	$ S_N  (N)$	$ \tilde{P}_1^1 $	$ \tilde{P}_2^2 $	$ \tilde{P}_3^3 $
2.86	0.7033410417066716	0.7043237092362864(3000)	1.008376895441823	0.7033410417066689	0.7049399474872458
1.43	0.3980343662336995	0.3980343662336992(100)	0.42667412501982227	0.3980343662336992	0.39814262254852434
0.725	0.18228544344617278	0.18228544344617276(30)	0.1848242433424334	0.18228544344617276	0.18229087198641047
0.0725	0.015913207781144273	0.01591320778114422(10)	0.015914968978725994	0.015913207781144276	0.0159132081952227

In closing, a few remarks about Padé approximants are in order. We have emphasized that the approximants become very close to the actual answer but we have not proved such a claim. This is a very difficult question since there are no theorems on the convergence and uniqueness of Padé approximants in the general case for an arbitrary function [11]. There is only one class of functions for which the Padé approximants are known to converge to the exact answer and that is the class of Stieltjes functions. However, there is evidence that the approximants converge to the exact answer (in this scattering scenario at least) and our results suggest that this indeed happens [21]. A more formal and general discussion in this

direction, involving light field amplitudes satisfying Eq. (1), is still lacking in the literature.

#### IV. CONCLUSION

We have studied the scattering of a monochromatic plane wave by a  $\mathcal{PT}$ -symmetric dipole. An explicit closed-form expression for the scattered wave amplitude in the far-zone was obtained. The Padé approximants and the Born approximation were compared with the closed-form expression and we stressed the limitations of the Born series in the strong-scattering regime. The Padé approximants were shown to be a remarkable and accurate alternative for treating weak- and strong-scattering regimes. The approach using Padé approximants may be more suitable for problems that do not have an exact solution and when the Born series diverge. Therefore, we believe that our results contribute an important step towards scattering in strong regimes.

One possible experimental implementation of our scattering system could be realized as in Ref. [37], consisting of a photonic structure with holes filled by semiconductor junctions, as also suggested in Ref. [35].

#### ACKNOWLEDGMENTS

The authors would like to acknowledge financial support from CNPq.

#### APPENDIX: CLOSED-FORM EXPRESSION FOR $\tilde{u}_s(\mathbf{r})$

In this Appendix we demonstrate the induction process used to obtain a closed-form expression for  $\tilde{u}_s$  and  $u_n$  in terms of  $u_0$ . Starting from Eq. (11), the explicit form for the first three corrections are given by

$$u_1(\mathbf{r}) = \frac{k^2}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} [P_0 e^{-ik\hat{s}\cdot\mathbf{r}_0} + Q_0 e^{ik\hat{s}\cdot\mathbf{r}_0}], \quad (A1)$$

where  $P_0 = (\sigma + i\gamma)e^{ik\hat{a}\cdot\mathbf{r}_0}$  and  $Q_0 = (\sigma - i\gamma)e^{-ik\hat{a}\cdot\mathbf{r}_0}$ ;

$$u_2(\mathbf{r}) = \left(\frac{k^2}{4\pi}\right)^2 \frac{e^{ikr}}{r} [P_1 e^{-ik\hat{s}\cdot\mathbf{r}_0} + Q_1 e^{ik\hat{s}\cdot\mathbf{r}_0}], \quad (A2)$$

where  $P_1 \equiv (\sigma + i\gamma)(P_0 + Q_0 e^{2ikr_0})/r_0$  and  $Q_1 \equiv (\sigma - i\gamma)(P_0 e^{2ikr_0} + Q_0)/r_0$ ; and

$$u_3(\mathbf{r}) = \left(\frac{k^2}{4\pi}\right)^3 \frac{e^{ikr}}{r} [P_2 e^{-ik\hat{s}\cdot\mathbf{r}_0} + Q_2 e^{ik\hat{s}\cdot\mathbf{r}_0}], \quad (A3)$$

where  $P_2 \equiv (\sigma + i\gamma)(P_1 + Q_1 e^{2ikr_0})/r_0$  and  $Q_2 \equiv (\sigma - i\gamma)(P_1 e^{2ikr_0} + Q_1)/r_0$ . Thus, the general formula for  $u_n$  can

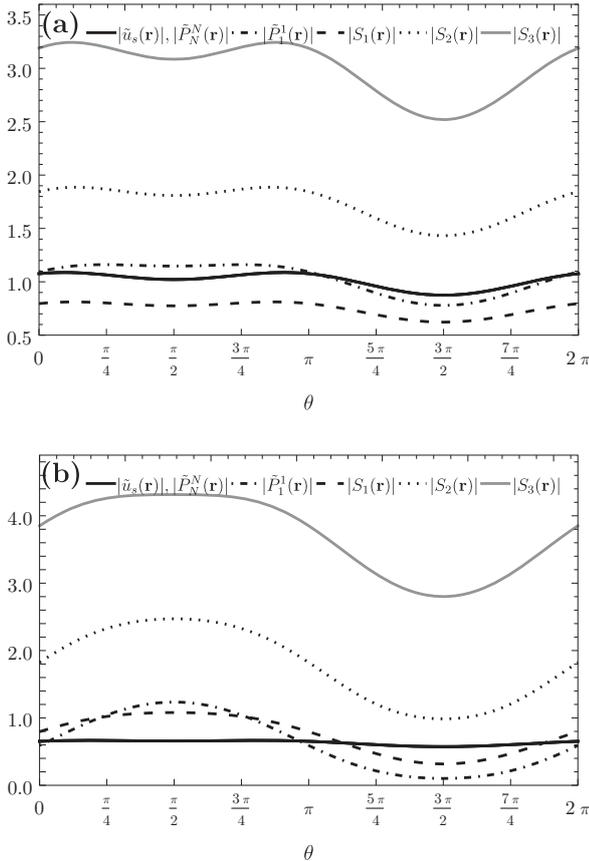


FIG. 5. (a) Same as in Fig. 3 but with  $\sigma = 5$  and  $\gamma = 1$  and (b)  $\gamma = 5$ , for  $|\tilde{u}_s(\mathbf{r})|$ ,  $|S_1(\mathbf{r})|$ ,  $|S_2(\mathbf{r})|$ ,  $|S_3(\mathbf{r})|$ ,  $|\tilde{P}_1^1(\mathbf{r})|$ , and  $|\tilde{P}_N^N(\mathbf{r})|$  ( $N = 2, 3$ ) as a function of  $\theta$ . The parameters are  $\phi = 0$ ,  $k = 1$ , and  $x_0 = \frac{1}{2}$ . The line plots of  $|\tilde{P}_2^2(\mathbf{r})|$  and  $|\tilde{P}_3^3(\mathbf{r})|$  are indistinguishable from the line representing the exact solution. All quantities plotted have arbitrary units.

be written as

$$u_n(\mathbf{r}) = \left(\frac{k^2}{4\pi}\right)^n \frac{e^{ikr}}{r} [P_{n-1}e^{-ik\hat{s}\cdot\mathbf{r}_0} + Q_{n-1}e^{ik\hat{s}\cdot\mathbf{r}_0}], \quad (\text{A4})$$

where

$$\begin{aligned} P_n &= D_1 P_{n-1} + D_2 Q_{n-1}, \\ Q_n &= D_3 P_{n-1} + D_4 Q_{n-1}, \end{aligned} \quad (\text{A5})$$

with  $D_1 = (\sigma + i\gamma)/r_0$ ,  $D_2 = (\sigma + i\gamma)e^{2ki r_0}/r_0$ ,  $D_3 = (\sigma - i\gamma)e^{2ki r_0}/r_0$ , and  $D_4 = (\sigma - i\gamma)/r_0$ . Equations (A5) represent a system of difference equations with constant coefficients and initial conditions  $P_0 = (\sigma + i\gamma)e^{ik\hat{a}\cdot\mathbf{r}_0}$  and  $Q_0 = (\sigma - i\gamma)e^{-ik\hat{a}\cdot\mathbf{r}_0}$ . They can be solved by writing the system as

$$\begin{bmatrix} P_n \\ Q_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_1 & D_2 \\ D_3 & D_4 \end{bmatrix}^n \begin{bmatrix} P_0 \\ Q_0 \end{bmatrix} = D^n \begin{bmatrix} P_0 \\ Q_0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A6})$$

where  $D$  is a  $2 \times 2$  matrix with coefficients  $D_j$ . By using the identity

$$D^n = \frac{\lambda_1^n - \lambda_2^n}{\lambda_1 - \lambda_2} D - \lambda_1 \lambda_2 \frac{\lambda_1^{n-1} - \lambda_2^{n-1}}{\lambda_1 - \lambda_2} \mathbf{1}, \quad (\text{A7})$$

where  $\lambda_1$  and  $\lambda_2$  are the eigenvalues of  $D$  and  $\mathbf{1}$  is the identity matrix, the general solution is given explicitly by

$$\begin{aligned} P_n &= \frac{2^{-n-1}}{\sqrt{(D_1 - D_4)^2 + 4D_2 D_3}} \\ &\times ((D_1 P_0 + 2D_2 Q_0 - D_4 P_0) \\ &\times \{[\sqrt{(D_1 - D_4)^2 + 4D_2 D_3} + D_1 + D_4]^n \\ &- [-\sqrt{(D_1 - D_4)^2 + 4D_2 D_3} + D_1 + D_4]^n\} \\ &+ P_0 \sqrt{(D_1 - D_4)^2 + 4D_2 D_3} \\ &\times \{[-\sqrt{(D_1 - D_4)^2 + 4D_2 D_3} + D_1 + D_4]^n \\ &+ [\sqrt{(D_1 - D_4)^2 + 4D_2 D_3} + D_1 + D_4]^n\}), \end{aligned} \quad (\text{A8})$$

$$\begin{aligned} Q_n &= \frac{2^{-n-1}}{\sqrt{(D_1 - D_4)^2 + 4D_2 D_3}} \\ &\times ((D_4 Q_0 + 2D_3 P_0 - D_1 Q_0) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\times \{[\sqrt{(D_1 - D_4)^2 + 4D_2 D_3} + D_1 + D_4]^n \\ &- [-\sqrt{(D_1 - D_4)^2 + 4D_2 D_3} + D_1 + D_4]^n\} \\ &+ Q_0 \sqrt{(D_1 - D_4)^2 + 4D_2 D_3} \\ &\times \{[-\sqrt{(D_1 - D_4)^2 + 4D_2 D_3} + D_1 + D_4]^n \\ &+ [\sqrt{(D_1 - D_4)^2 + 4D_2 D_3} + D_1 + D_4]^n\}). \end{aligned} \quad (\text{A9})$$

Equations (A8) and (A9) together with (A4) represent the general solution for the Born series. The total wave field is given by the sum of the incident and scattered waves (with  $\alpha = 1$ ),

$$u(\mathbf{r}) = u_0(\mathbf{r}) + \sum_{n=1}^{\infty} u_n(\mathbf{r}), \quad (\text{A10})$$

where, after substituting Eq. (A4) into Eq. (A10), we obtain

$$\begin{aligned} u(\mathbf{r}) &= u_0(\mathbf{r}) + \frac{e^{ikr}}{r} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{k^2}{4\pi}\right)^n \\ &\times (P_{n-1}e^{-ik\hat{s}\cdot\mathbf{r}_0} + Q_{n-1}e^{ik\hat{s}\cdot\mathbf{r}_0}). \end{aligned} \quad (\text{A11})$$

It is easy to see that all the summation terms in Eq. (A11) can be put into a geometric series form  $\sum_{n=1}^{\infty} \zeta^n = \frac{\zeta}{1-\zeta}$ , with  $|\zeta| < 1$ . Thus, (A11) can be written as

$$u(\mathbf{r}) = u_0(\mathbf{r}) + \frac{e^{ikr}}{r} \tilde{u}_s(\mathbf{r}), \quad (\text{A12})$$

where

$$\begin{aligned} \tilde{u}_s(\mathbf{r}) &= e^{-ik\hat{s}\cdot\mathbf{r}_0} \\ &\times \frac{-D_2 k^4 Q_0 + D_4 k^4 P_0 - 4\pi k^2 P_0}{D_2 D_3 k^4 - (D_1 k^2 - 4\pi)(D_4 k^2 - 4\pi)} \\ &+ e^{ik\hat{s}\cdot\mathbf{r}_0} \\ &\times \frac{D_1 k^4 Q_0 - D_3 k^4 P_0 - 4\pi k^2 Q_0}{D_2 D_3 k^4 - (D_1 k^2 - 4\pi)(D_4 k^2 - 4\pi)} \end{aligned} \quad (\text{A13})$$

is the closed-form expression for the scattered wave in the far-zone approximation.

- 
- [1] R. G. Newton, *Scattering Theory of Waves and Particles* (Springer Science + Business Media, New York, 2013).
- [2] I. R. Lapidus, *Am. J. Phys.* **37**, 1064 (1969).
- [3] R. Kleinman, G. Roach, and P. van den Berg, *J. Opt. Soc. Am. A* **7**, 890 (1990).
- [4] O. J. Martin, A. Dereux, and C. Girard, *J. Opt. Soc. Am. A* **11**, 1073 (1994).
- [5] T. Shirai and T. Asakura, *Opt. Commun.* **123**, 234 (1996).
- [6] A. Abubakar and T. M. Habashy, *Wave Motion* **41**, 211 (2005).
- [7] S. Trattner, M. Feigin, H. Greenspan, and N. Sochen, *J. Opt. Soc. Am. A* **26**, 1147 (2009).
- [8] T. Setälä, T. Hakkarainen, A. T. Friberg, and B. J. Hoenders, *Phys. Rev. A* **82**, 013814 (2010).
- [9] J. Lim, H. Ding, M. Mir, R. Zhu, K. Tangella, and G. Popescu, *Biomed. Opt. Express* **2**, 2784 (2011).
- [10] A. S. Bereza, A. V. Nemykin, S. V. Perminov, L. L. Frumin, and D. A. Shapiro, *Phys. Rev. A* **95**, 063839 (2017).
- [11] G. A. Baker, Jr., *Essentials of Padé Approximants* (Elsevier, Amsterdam, 1975).
- [12] C. Brezinski, *History of Continued Fractions and Padé Approximants* (Springer Science + Business Media, New York, 2012), Vol. 12.
- [13] C. M. Bender and S. A. Orszag, *Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers I: Asymptotic Methods and Perturbation Theory* (Springer Science + Business Media, New York, 2013).
- [14] S. Tani, *Phys. Rev.* **139**, B1011 (1965).
- [15] J. Gammel and F. McDonald, *Phys. Rev.* **142**, 1245 (1966).
- [16] I. R. Lapidus, *Am. J. Phys.* **48**, 51 (1980).
- [17] J. Tjon, *Phys. Rev. D* **1**, 2109 (1970).
- [18] J. Fleischer and M. Pindor, *Phys. Rev. D* **24**, 1978 (1981).

- [19] C. Eftimiu and G. Welland, *IEEE Trans. Antennas Propag.* **35**, 721 (1987).
- [20] G. R. Hadley, *Opt. Lett.* **17**, 1426 (1992).
- [21] T. A. van der Sijs, O. El Gawhary, and H. P. Urbach, *Phys. Rev. Research* **2**, 013308 (2020).
- [22] C. M. Bender and S. Boettcher, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5243 (1998).
- [23] C. M. Bender, *Rep. Prog. Phys.* **70**, 947 (2007).
- [24] C. E. Rüter, K. G. Makris, R. El-Ganainy, D. N. Christodoulides, M. Segev, and D. Kip, *Nat. Phys.* **6**, 192 (2010).
- [25] S. Longhi, *Europhys. Lett.* **120**, 64001 (2018).
- [26] Y. D. Chong, L. Ge, and A. D. Stone, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 093902 (2011).
- [27] P. Ambichl, K. G. Makris, L. Ge, Y. Chong, A. D. Stone, and S. Rotter, *Phys. Rev. X* **3**, 041030 (2013).
- [28] P. A. Kalozoumis, G. Pappas, F. K. Diakonov, and P. Schmelcher, *Phys. Rev. A* **90**, 043809 (2014).
- [29] S. Longhi and L. Feng, *Opt. Lett.* **39**, 5026 (2014).
- [30] P. Kalozoumis, C. Morfonios, G. Kodaxis, F. Diakonov, and P. Schmelcher, *Appl. Phys. Lett.* **110**, 121106 (2017).
- [31] V. Achilleos, Y. Aurégan, and V. Pagneux, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 243904 (2017).
- [32] L. Feng, Y.-L. Xu, W. S. Fegadolli, M.-H. Lu, J. E. Oliveira, V. R. Almeida, Y.-F. Chen, and A. Scherer, *Nat. Mater.* **12**, 108 (2013).
- [33] S. Longhi, *Phys. Rev. A* **82**, 031801(R) (2010).
- [34] P. Markos and C. M. Soukoulis, *Wave Propagation: From Electrons to Photonic Crystals and Left-Handed Materials* (Princeton University Press, Princeton, 2008).
- [35] K. Staliunas, P. Markoš, and V. Kuzmiak, *Phys. Rev. A* **96**, 043852 (2017).
- [36] P. A. Brandão and S. B. Cavalcanti, *Phys. Rev. A* **100**, 043822 (2019).
- [37] M. Turduev, M. Botey, I. Giden, R. Herrero, H. Kurt, E. Ozbay, and K. Staliunas, *Phys. Rev. A* **91**, 023825 (2015).

**Born-Padé approach to electromagnetic scattering in complex one-dimensional inhomogeneous slabs**J. A. Rebouças <sup>\*</sup>*Instituto de Educação Ciência e Tecnologia do Ceará, Iguatu, CE, Brazil  
and Universidade Federal de Alagoas, Maceió, AL, Brazil*P. A. Brandão <sup>†</sup>*Universidade Federal de Alagoas, Maceió, AL, Brazil*

(Received 26 July 2022; accepted 20 September 2022; published 4 October 2022)

Perturbation theory is applied to one-dimensional scattering systems consisting of a general class of inhomogeneous and isotropic slabs having size  $L$  described by the relative permittivity  $\varepsilon(z) = 1 + \alpha\chi(z)$ , where  $\chi(z)$  is the electric susceptibility and  $\alpha$  the perturbation parameter. The transmitted and reflected amplitudes are shown to be written as Born series in powers of  $\alpha$  and Padé approximants are used to obtain analytical results with a high and arbitrary degree of accuracy. The approach is very general and can handle oblique incidence. Examples are given for the transmission and reflection amplitudes of plane waves interacting with Hermitian and non-Hermitian structures with known and unknown exact solutions.

DOI: [10.1103/PhysRevA.106.043503](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.106.043503)**I. INTRODUCTION**

A very important theoretical problem in optics is the exact and analytical determination of the scattering amplitudes, for the transmitted and reflected plane waves, after interacting with an inhomogeneous material described by the relative dielectric permittivity  $\varepsilon(z)$  and occupying a finite extension of size  $L$ . If the slab is composed of several dielectric layers, with constant but distinct values of  $\varepsilon$  in each layer, there are well-known procedures, such as the transfer and scattering matrix formalism, that can be used to obtain exact results, usually by performing numerical operations involving matrix multiplication [1,2]. By using matrices to obtain the scattered amplitudes, one has the obvious advantage in that it can be easily implemented in computers and give fast results. The disadvantage is that one loses track of what is going on during this process, especially if there are a large number of layers, and the procedure will ultimately depend on the numerical algorithm, which behaves like a black box without a more intuitive feeling about the process. Moreover, if the material is intrinsically inhomogeneous, this method can still be used but at the expense of introducing numerical errors arising from approximating the continuous material by piecewise constant parts.

Another method that is generally valid in scattering systems is perturbation theory [3]. Perturbation methods substitute a very hard problem into a sequence of (presumably) much easier ones. The approach taken to obtain the scattered amplitudes in the majority of cases, especially in two or three dimensions, is almost always dependent on the Born approximation, which is used under the assumption of a

weak scatterer. The Born approximation is obtained from perturbation theory by rejecting all terms in the Taylor expansion of the scattered field except the first nontrivial one. Unfortunately, if the objective is to go beyond the Born approximation, in most cases the perturbation series diverges in the formal sense. Since it is highly desirable to derive results under regimes where the scatterer strongly interacts with the incident field, there are two main routes to take from here: (i) to choose another formulation, relying on heavily numerical computations or (ii) to sum the divergent series. This paper is based on the second route applied to one-dimensional scattering involving inhomogeneous isotropic materials.

Analytic or semianalytic scattering theories for plane waves interacting with inhomogeneous slabs were considered before [4–11]. Particular importance was given to the work of Bremmer [4] who studied this problem from a very physical point of view by discretizing the slab, calculating the refractions through the material, and then performing the continuous limit to obtain an analytical solution to the problem. The solution obtained by Bremmer has the form of a series whose first term is the WKB approximation [4,5]. The convergence of Bremmer series was also addressed [6].

One-dimensional inhomogeneous slabs have found numerous recent applications in optics due especially to the emergence of non-Hermitian photonics [12–14]. The fact that a quantum system described by a non-Hermitian Hamiltonian having parity-time (PT) symmetry can give real eigenvalues [15] has a direct consequence in optical-analog systems. Effects such as lasing modes in active cavities [16], unidirectional invisibility [17,18], slabs with random properties [19], anisotropic reflection in Bragg systems [20] and PT-symmetric laser absorbers [21–27] were considered in this context. Thus, the development of analytical methods are useful in that one can explore a more general class of inhomogeneous materials.

<sup>\*</sup>jalvesreboucas@gmail.com<sup>†</sup>paulo.brandao@fis.ufal.br

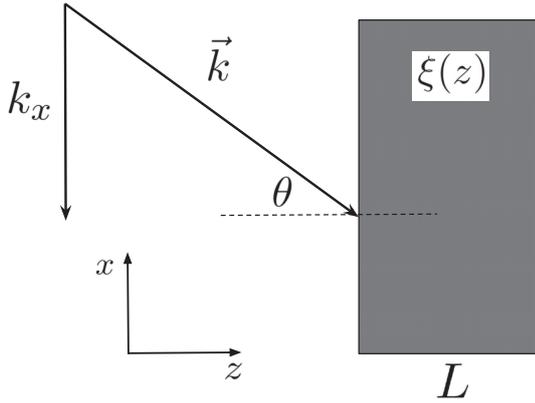


FIG. 1. Scattering geometry. The incident plane wave is characterized by the wave vector  $\mathbf{k}$ , which makes an angle  $\theta$  with the normal to the interface located at  $z = 0$ . The parallel component  $k_x$  to the dielectric interface is given by  $k_x = -k \sin \theta$ .

This paper is organized as follows: In Sec. II A we develop the Born series for the scattering problem by using perturbation theory. Section II B introduces the Padé approximants for the reflected and transmitted amplitudes. Section III is devoted to the application of the formalism in a variety of slabs: Sec. III A, homogeneous slab; Sec. III B, linear slab; Sec. III C periodic slab; and Sec. III D, slab without known closed-form analytical solution, consisting of a combination of the linear and periodic cases (Bloch-type slab). Finally, in Sec. IV, we state our conclusions.

## II. THEORY

This section is composed of two subsections. The first one deals with the development of the Born series through the use of perturbation theory. The second subsection introduces the idea of a Padé approximant to represent the transmitted and reflected amplitudes of the scattered waves.

### A. Born series for the Helmholtz equation

A monochromatic component  $E(x, z; \omega)$  of the electric field polarized in the  $y$  direction satisfies the Helmholtz equation

$$\frac{\partial^2 E}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} + k^2 \varepsilon(z) E = 0, \quad (1)$$

where  $k = \omega/c$ , with  $c$  being the speed of light in vacuum,  $\omega$  the angular frequency,  $\varepsilon(z) = 1 + \alpha \chi(z)$  is the inhomogeneous dielectric constant,  $\chi(z)$  is the dielectric susceptibility and  $\alpha$  the expansion parameter that we put equal one at the end of the calculations. We assume that the material is confined in the region between 0 and  $L > 0$  and write  $\chi(z) = \Theta_L(z) \xi(z)$ , where  $\Theta_L(z) = 1$  if  $z \in [0, L]$  and  $\Theta_L(z) = 0$  if  $z \notin [0, L]$ . We leave  $\xi(z)$  unspecified for the moment but it can be a real or complex function of  $z$ . The real electric field is obtained from  $\mathbf{E}(x, z, t) = \text{Re}[E(x, z; \omega) e^{-i\omega t}] \hat{y}$ .

To take into account effects arising from the incident angle of the plane wave, the field is written as (see Fig. 1)

$$E(x, z) = \psi(z) e^{ik_x x}, \quad (2)$$

where  $\psi(z)$  is a  $z$ -dependent field amplitude and  $k_x$  is the wave-vector component perpendicular to the propagation direction. If  $\theta \in (-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$  is the angle formed between the incident wave vector  $\mathbf{k}$  and the  $z$  axis, then  $k_x = -k \sin \theta$  and the differential equation satisfied by  $\psi(z)$  can be written as

$$\frac{d^2 \psi(z)}{dz^2} + k^2 \psi(z) \cos^2 \theta = -k^2 \alpha \chi(z) \psi(z). \quad (3)$$

The Green's function method can be used to cast Eq. (3) into an integral relation. The Green's function  $G(z, z')$  for the slab-free Helmholtz equation is obtained in the usual way. The result is given by

$$G(z, z') = \frac{e^{ik \cos \theta |z - z'|}}{2ik \cos \theta}, \quad (4)$$

and (3) can be rewritten as

$$\begin{aligned} \psi(z) &= e^{ikz \cos \theta} - \alpha k^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dz' G(z, z') \chi(z') \psi(z') \\ &= e^{ikz \cos \theta} - \alpha k^2 \int_0^L dz' G(z, z') \xi(z') \psi(z'), \end{aligned} \quad (5)$$

where the first term on the right-hand side is a unit amplitude plane wave, which is the solution to the homogeneous problem with  $\alpha = 0$  (no scatterer).

To proceed, the field amplitude  $\psi(z)$  is assumed to be written as a series expansion in powers of  $\alpha$ :

$$\psi(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(z) \alpha^n, \quad (6)$$

with  $\psi_0(z) = e^{ikz \cos \theta}$  being the solution to the unperturbed problem with  $\alpha = 0$ . The remaining coefficients  $\psi_n$  ( $n \geq 1$ ) are related recursively by

$$\psi_n(z) = -k^2 \int_0^L dz' G(z, z') \xi(z') \psi_{n-1}(z'). \quad (7)$$

Thus, to obtain the reflected and transmitted fields it is necessary to solve the integral inside the scatterer. Direct use of the Green's function allows us to write

$$\psi_n(z) = P_n(z) e^{ikz \cos \theta} + N_n(z) e^{-ikz \cos \theta}, \quad (8)$$

valid in the region  $0 \leq z \leq L$ , where  $P_n$  and  $N_n$  are determined recursively through the system of equations

$$\begin{aligned} P_n(z) &= \frac{ik}{2 \cos \theta} \int_0^z ds \xi(s) P_{n-1}(s) \\ &\quad + \frac{ik}{2 \cos \theta} \int_0^z ds \xi(s) N_{n-1}(s) e^{-2iks \cos \theta}, \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} N_n(z) &= \frac{ik}{2 \cos \theta} \int_z^L ds \xi(s) P_{n-1}(s) e^{2iks \cos \theta} \\ &\quad + \frac{ik}{2 \cos \theta} \int_z^L ds \xi(s) N_{n-1}(s), \end{aligned} \quad (10)$$

with the initial conditions  $P_0 = 1$  and  $N_0 = 0$ .

Finally, the transmitted field in the region  $z > L$  can be calculated by using

$$\psi_n(z) = t_n e^{ikz \cos \theta} \quad (z > L), \quad (11)$$

where  $t_n$  is given by

$$t_n = \frac{ik}{2 \cos \theta} \left[ \int_0^L ds \xi(s) P_{n-1}(s) + \int_0^L ds \xi(s) N_{n-1}(s) e^{-2iks \cos \theta} \right] \quad (12)$$

and the reflected field in the region  $z < 0$  can be calculated from

$$\psi_n(z) = r_n e^{-ikz \cos \theta} \quad (z < 0), \quad (13)$$

with  $r_n$  given by

$$r_n = \frac{ik}{2 \cos \theta} \left[ \int_0^L ds \xi(s) P_{n-1}(s) e^{2iks \cos \theta} + \int_0^L ds \xi(s) N_{n-1}(s) \right]. \quad (14)$$

For a given material distribution  $\xi(z)$ , Eqs. (9) and (10) can be solved by iteration and the coefficients  $t_n$  and  $r_n$  are calculated by using Eqs. (12) and (14). The total transmitted  $t$  and reflected  $r$  amplitudes are given by

$$t = \sum_{n=0}^{\infty} t_n \alpha^n = 1 + t_1 \alpha + t_2 \alpha^2 + \dots, \\ r = \sum_{n=0}^{\infty} r_n \alpha^n = 0 + r_1 \alpha + r_2 \alpha^2 + \dots, \quad (15)$$

where  $r_0 = 0$  and  $t_0 = 1$  are the solutions to the unperturbed problem (wave is fully transmitted) and  $(t_1, r_1)$  are the first-order Born approximations for the transmitted and reflected amplitudes. By the end of the analysis we substitute  $\alpha = 1$  to obtain the scattering amplitudes for the original slab with  $\varepsilon(z) = 1 + \chi(z)$ .

### B. Padé approximants

By following the recipe presented in the previous section, one obtains the transmitted and reflected amplitudes represented by a Taylor series expansion in powers of  $\alpha$ . In most cases of interest, however, the series will be of a divergent type when  $\alpha = 1$  is substituted in the expressions, invalidating the equality between  $t(r)$  and  $\sum_n t_n \alpha^n$  ( $\sum_n r_n \alpha^n$ ). Therefore, it is important to ask if there is another representation available that yields accurate and convergent results in a larger region in the complex  $\alpha$  plane.

One such representation seems to handle these issues very well. The Padé approximants  $P_N^M$  are a family of rational functions whose denominator and numerator are polynomials of degree  $N$  and  $M$ , respectively:

$$P_N^M = \frac{\sum_{n=0}^M A_n \alpha^n}{\sum_{n=0}^N B_n \alpha^n} = \frac{A_0 + A_1 \alpha + A_2 \alpha^2 + \dots + A_M \alpha^M}{1 + B_1 \alpha + \dots + B_N \alpha^N}, \quad (16)$$

where  $A_n$  and  $B_n$  are coefficients and  $B_0 = 1$  is assumed without loss of generality [3,28–30]. Given a Taylor series  $\sum_{n=0}^{\infty} a_n \alpha^n$ , the idea is to match the first  $N + M + 1$  coefficients in the Taylor expansion of the Padé representations

with that of its corresponding Taylor series. For example, the first diagonal ( $N = M = 1$ ) Padé approximant  $P_1^1$  is given explicitly by

$$P_1^1 = \frac{A_0 + A_1 \alpha}{1 + B_1 \alpha} = a_0 + \frac{a_1^2 \alpha}{a_1 - a_2 \alpha}. \quad (17)$$

In the particular case of diagonal Padé approximants ( $N = M$ ), the representations can be obtained directly by performing the division between the determinant of two  $(N + 1) \times (N + 1)$  matrices  $\mathbf{Q}$  and  $\mathbf{L}$ , given by

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \dots & a_{N+1} \\ a_2 & a_3 & \dots & a_{N+2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_N & a_{N+1} & \dots & a_{2N} \\ a_0 \alpha^N & a_0 \alpha^{N-1} + a_1 \alpha^N & \dots & \sum_{j=0}^N a_j \alpha^j \end{pmatrix}, \\ \mathbf{L} = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \dots & a_{N+1} \\ a_2 & a_3 & \dots & a_{N+2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_N & a_{N+1} & \dots & a_{2N} \\ \alpha^N & \alpha^{N-1} & \dots & 1 \end{pmatrix}. \quad (18)$$

Thus, we can identify  $P_N^N = \det \mathbf{Q} / \det \mathbf{L}$ . More general matrices can be viewed in Ref. [28]. We hope that the Padé approximants become closer to the exact answer as  $N, M \rightarrow \infty$ . In what follows, we consider only the diagonal approximants with  $N = M$ . The transmitted  $t$  and reflected  $r$  amplitudes have Padé representations given by

$$t_M^M = \frac{\sum_{n=0}^M \mathcal{A}_n \alpha^n}{1 + \sum_{n=1}^M \mathcal{B}_n \alpha^n}, \quad (19)$$

$$r_M^M = \frac{\sum_{n=0}^M \mathcal{C}_n \alpha^n}{1 + \sum_{n=1}^M \mathcal{D}_n \alpha^n}. \quad (20)$$

There are well-known algorithms, which relates  $\mathcal{A}_n$  and  $\mathcal{B}_n$  ( $\mathcal{C}_n$  and  $\mathcal{D}_n$ ) with  $t_n$  ( $r_n$ ) [3,28–30].

The most remarkable property of Padé approximants is that they are able to represent a given function in a larger region in the complex  $\alpha$  plane, when compared to the convergence region in the Taylor representation of the same function. In other words, the approximants approach a limit even if the Taylor representation diverges. Moreover, they converge faster than Taylor approximants (partial sums) in most cases. It is also verified that only very few initial terms in the Taylor expansion must be known to form the first approximants, and this represents a major advantage since one is usually not in possession of all the terms in a general perturbation problem. More explicitly, the first  $2N + 1$  coefficients in the Taylor series are necessary to form the approximant  $P_N^N$ .

Unfortunately, there are no general theorems on the questions of existence and uniqueness of the approximants to arbitrary functions with the exception of Stieltjes functions. Nevertheless, there is a large amount of evidence that the approximants can handle a variety of functions other than Stieltjes. Research in this direction is still ongoing.

### III. APPLICATIONS

To validate the above formalism and the Padé representations for the transmitted and reflected amplitudes, we

consider a few applications involving dielectric systems with known and unknown exact solutions. Recent works on the use of Padé approximants in classical optics can be found in Refs. [31–33].

### A. Hermitian and non-Hermitian homogeneous dielectric slab

The first example we consider is the most simple one where  $\xi(z) = b$  with  $b$  a real or complex number, independent of  $z$ . The scatterer is a homogeneous dielectric slab of size  $L$ . In this case, the first two coefficients  $P_1$  and  $N_1$ , obtained directly from Eqs. (9) and (10), are given by

$$\begin{aligned} P_1(z) &= \frac{ibkz}{2 \cos \theta}, \\ N_1(z) &= b \frac{e^{2ikL \cos \theta} - e^{2ikz \cos \theta}}{4 \cos^2 \theta}. \end{aligned} \quad (21)$$

From Eqs. (12) and (14) we obtain the first two corrections to the transmitted and reflected amplitudes,

$$\begin{aligned} t_1 &= \frac{ikbL}{2 \cos \theta}, \\ t_2 &= \frac{ikb^2}{8 \cos^2 \theta} \left[ ikL^2 - \frac{L}{\cos \theta} + \frac{(e^{2ikL \cos \theta} - 1)}{2ik \cos^2 \theta} \right], \end{aligned} \quad (22)$$

and

$$\begin{aligned} r_1 &= \frac{b}{4 \cos^2 \theta} (e^{2ikL \cos \theta} - 1), \\ r_2 &= \frac{b^2}{8 \cos^4 \theta} [e^{2ikL \cos \theta} (2ikL \cos \theta - 1) + 1], \end{aligned} \quad (23)$$

which represent the first and second Born approximations, respectively. This iterative procedure can be carried out until one reaches a desired approximation order. Explicitly, with  $(t_0, t_1, t_2)$  and  $(r_0, r_1, r_2)$  given above, the first-order Padé approximant can be readily obtained by using Eq. (17). More coefficients are necessary to construct high-order approximants.

We present in Fig. 2 several plots of the approximants  $|t_N^N|^2$  and  $|r_N^N|^2$  for  $N = 1, 3$ , and  $5$  along with the exact solution (see Appendix A). First of all, since the exact solution for the scattered amplitudes is not a quotient of polynomials in  $\alpha$ , the Padé approximants can never return the exact answer in this case. Nevertheless, it is remarkable how they are able to adapt to the exact solution as  $N$  increases. In Figs. 2(a)–2(c) we display the scattering amplitudes as a function of  $kL$ . The approximation becomes better as  $N$  increases, as expected, and for  $N = 5$  we already obtain a very accurate result for the range of parameters used. Notice that to calculate  $t_5^5$  and  $r_5^5$  only 11 terms in the Taylor expansion are used. Figures 2(d)–2(f) display the behavior of the scattering amplitudes as a function of  $b$ . This case is more remarkable because  $t_n \sim b^n$  and  $r_n \sim b^n$  (which is expected since for a homogeneous slab we can take  $b$  as the perturbation parameter) so the Taylor representation is certainly to be of a divergent type, especially for values of  $b$  as large as 40. Indeed, a plot of the partial sums of the power series in  $\alpha$  having the same number of terms

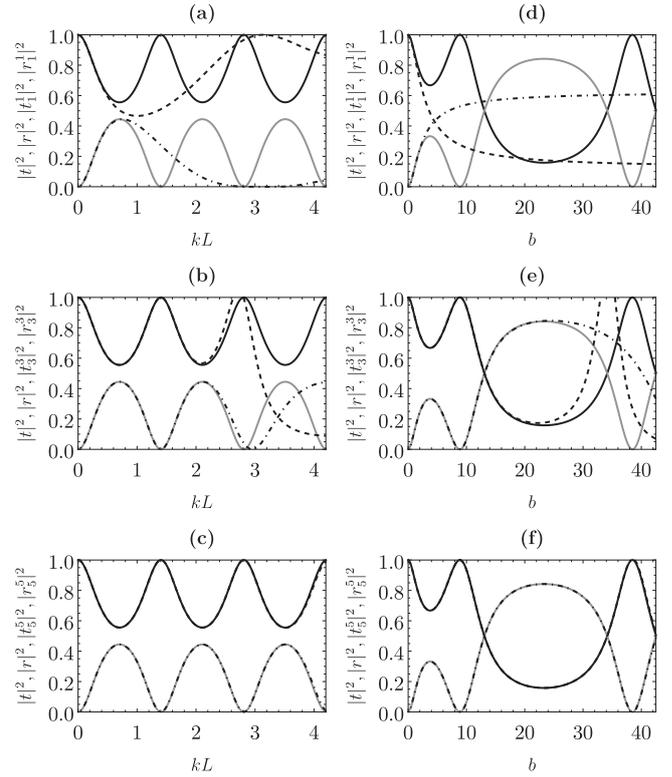


FIG. 2. Transmission and reflection amplitudes for a homogeneous slab  $\xi(z) = b$  as a function of (a)–(c)  $kL$ , with fixed  $b = 4$  and (d)–(f)  $b$  with fixed  $kL = 1$ . The continuous black line is the exact (absolute squared) solution for the transmitted amplitude and the continuous gray line is the exact solution for the absolute squared reflected amplitude. The dashed (dashed-dotted) lines are the Padé approximants for the transmitted (reflected) amplitudes (a), (d)  $|t_1^1|^2$  and  $|r_1^1|^2$ , (b), (e)  $|t_3^3|^2$  and  $|r_3^3|^2$ , (c), (f)  $|t_5^5|^2$  and  $|r_5^5|^2$ . Parameters used:  $\alpha = 1$  and  $\theta = 0$ .

as in the corresponding Padé representations diverges wildly (not shown). Nevertheless, the Padé approximants are able to recover the true behavior. We remark again that there are no numerical errors associated with these results in the sense that they represent analytic approximations.

To see how the Padé's handle gain and loss, Fig. 3 shows the plot of  $|t_N^N|^2$  and  $|r_N^N|^2$  as a function of  $kL$  for homogeneous slabs with loss and gain, i.e.,  $\xi(z) = 4 \pm i$ . Clearly, the approximants have no trouble in dealing with a lossy or active layer.

### B. Linear slab

Another interesting class of dielectrics are the linear materials described by the profile  $\xi(z) = 1 + gz$ , with  $g$  being a constant parameter. The Helmholtz equation for this case can be recast into Airy's equation of the form  $d^2\psi_2(u)/du^2 = u\psi_2(u)$  and we provide in Appendix B the exact solution. By following the same recipe as in the previous section, one obtains the approximants to a desired order of accuracy.

The comparison between the exact scattering amplitudes and their Padé representations is shown in Figs. 4(a)–4(c)

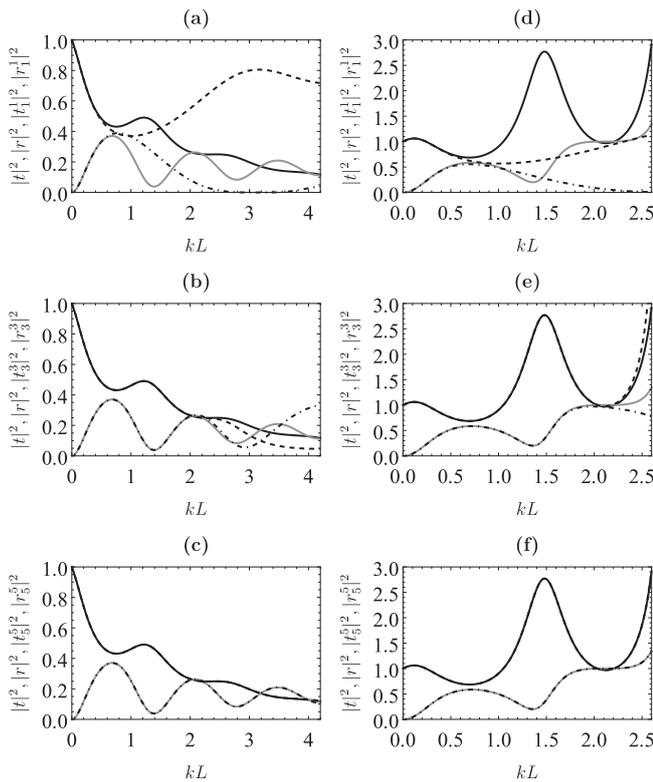


FIG. 3. Transmission and reflection amplitudes for a homogeneous slab with (a)–(c)  $\xi(z) = 4 + i$  and (d)–(f)  $\xi(z) = 4 - i$  as a function of  $kL$ . The continuous black line is the exact (absolute squared) solution for the transmitted amplitude and the continuous gray line is the exact solution for the (absolute squared) reflected amplitude. The dashed (dashed-dotted) lines are the Padé approximants for the transmitted (reflected) amplitudes. (a), (d)  $|t_1^1|^2$  and  $|r_1^1|^2$ , (b), (e)  $|t_3^3|^2$  and  $|r_3^3|^2$  and (c), (f)  $|t_5^5|^2$  and  $|r_5^5|^2$ . Parameters used:  $\theta = 0$  and  $\alpha = 1$ .

as  $kL$  varies. Again, the Padé's are able to approximate the exact answer with an excellent precision, even for an oblique incident plane wave with  $\theta = \frac{\pi}{4}$ . In Figs. 4(d)–4(f) we plot the transmission and reflection as function of  $g$  for  $g$  values as large as 50.

### C. Periodic slab having $PT$ symmetry at the symmetry-breaking point

Let us now turn to a more interesting and complex inhomogeneous slab, which, nonetheless, has been found to possess an exact analytical solution for the scattered amplitudes [34].

In 1998, Bender and Boettcher suggested that non-Hermitian quantum Hamiltonians can have real-valued spectra if they satisfy the condition of  $PT$  symmetry [15]. In quantitative terms, the one-dimensional potential energy function  $V(x)$  is  $PT$  symmetric if  $V(x) = V^*(-x)$ , since the combined action of  $P$  and  $T$  is to replace  $x \rightarrow -x$  and  $i \rightarrow -i$ . This condition, however, is not sufficient to guarantee the reality of the spectrum. The most common situation is that of a Hamiltonian depending on some parameter  $\alpha$  of the system such that if  $\alpha < \alpha_c$  all eigenvalues are real and if  $\alpha > \alpha_c$  all eigenvalues are complex-valued. The value  $\alpha_c$

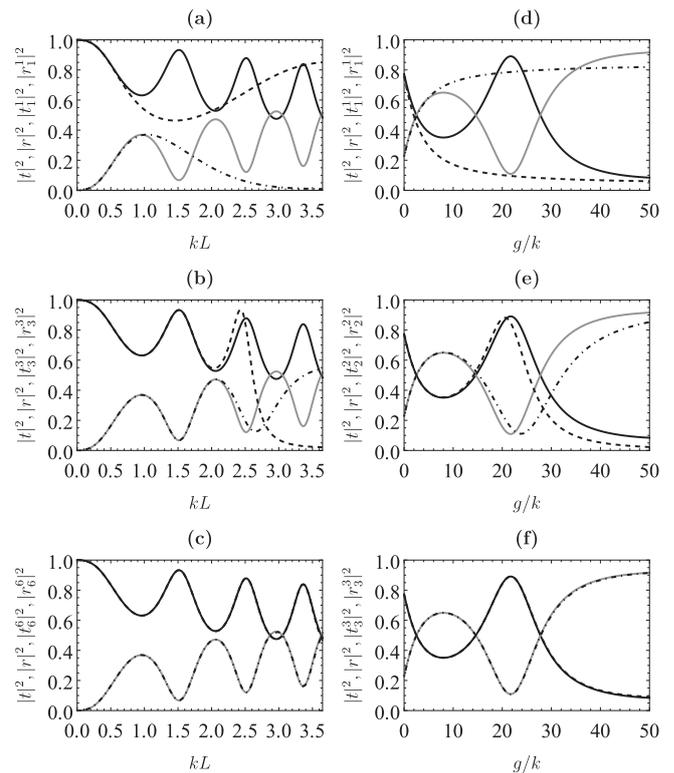


FIG. 4. Transmission and reflection amplitudes for a linear slab with  $\xi(z) = 1 + gz$  as a function of (a)–(c)  $kL$ , with  $g = 4$  and  $\theta = 0$  and of (d)–(f)  $g/k$ , with  $kL = 1$  and  $\theta = \pi/4$ . The continuous black line is the exact (absolute squared) solution for the transmitted amplitude and the continuous gray line is the exact solution for the (absolute squared) reflected amplitude. The dashed (dashed-dotted) lines are the Padé approximants for the transmitted (reflected) amplitudes. (a), (d)  $|t_1^1|^2$  and  $|r_1^1|^2$ , (b), (e)  $|t_3^3|^2$  and  $|r_3^3|^2$ , (c), (f)  $|t_6^6|^2$  and  $|r_6^6|^2$  and (e)  $|t_2^2|^2$  and  $|r_2^2|^2$ . Parameters used:  $\alpha = 1$ .

represents the symmetry breaking point (exceptional point) of the system, where there is a phase transition between real and complex-valued eigenvalues. For an introduction of  $PT$  symmetry in quantum and classical mechanics, the reader can consult Refs. [35–39]

Due to the mathematical analogy existent between nonrelativistic quantum mechanics and the paraxial wave equation, it was soon suggested that the refractive index  $n(x)$  of inhomogeneous material could be engineered to simulate analog quantum effects [12]. In this section, we explore the scattering of plane waves by one  $PT$ -symmetric slab at the symmetry-breaking point. Our interest in this particular potential is that it exhibits the peculiar phenomenon of unidirectional invisibility, meaning that the reflection from one end is diminished while it is enhanced from the other, and the transmission coefficient is very close to one [17], thus making it relevant to the development of diodelike photonic devices.

We thus consider a slab having  $PT$  symmetry at the symmetry-breaking point, described by  $\xi(z) = be^{idz}$ , with  $b$  and  $d$  positive numbers. The first- and second-order Born approximations for the transmitted  $t$  and reflected  $r$  ampli-

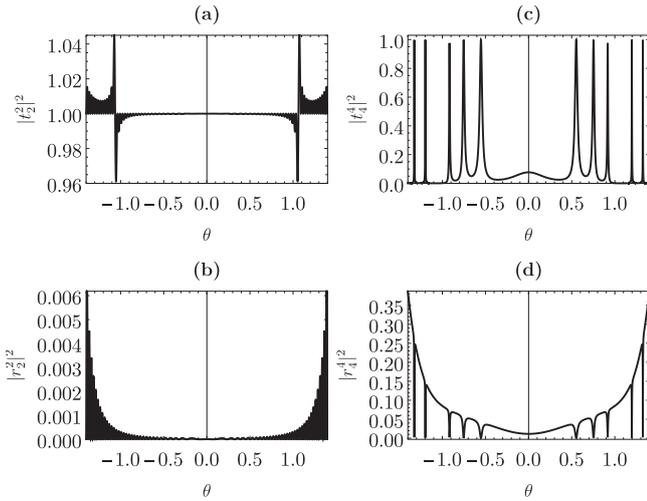


FIG. 5. Transmitted and reflected amplitudes for a periodic slab with  $\xi(z) = be^{idz}$  as a function of  $\theta$ . (a)  $|t_2|^2$ , (b)  $|r_2|^2$ , (c)  $|t_4|^2$ , and (d)  $|r_4|^2$ . Parameters used:  $\alpha = 1$ ,  $d = \frac{2\pi}{0.42}$ ,  $k = \frac{2\pi\sqrt{2.4}}{0.633}$  (a), (b)  $b = 0.02$ ,  $L = 8.4$ , (c), (d)  $b = 1$  and  $L = 1.68$ .

tudes are given by

$$t_1 = \frac{kb}{2d \cos \theta} (e^{iLd} - 1),$$

$$t_2 = \frac{k^2 b^2}{8d \cos^2 \theta} \left[ \frac{d(e^{2iLd} - 2e^{iL(d+2k \cos \theta)} + 1)}{(d - 2k \cos \theta)(d + 2k \cos \theta)} + \frac{2k(e^{2iLd} - 1) \cos \theta}{(d - 2k \cos \theta)(d + 2k \cos \theta)} + \frac{(e^{iLd} - 1)^2}{d} \right] \quad (24)$$

$$r_1 = \frac{kb}{2 \cos \theta} \left[ \frac{e^{iL(d+2k \cos \theta)} - 1}{d + 2k \cos \theta} \right],$$

$$r_2 = \frac{k^2 b^2}{4d \cos^2 \theta} \left[ \frac{e^{2iL(d+k \cos \theta)}}{d + k \cos \theta} - \frac{e^{2iL(d+2k \cos \theta)}}{d + 2k \cos \theta} + \frac{d}{(d + k \cos \theta)(d + 2k \cos \theta)} \right]. \quad (25)$$

$$t_1 = \frac{1}{2} ik \sec \theta \left[ \frac{\Gamma L^2}{2} + \frac{\sigma \sin(Ld)}{d} \right],$$

$$r_1 = \frac{1}{2} ik \sec \theta \left\{ \frac{\Gamma \sec^2 \theta [(1 - 2ikL \cos \theta) e^{2ikL \cos \theta} - 1]}{4k^2} + \frac{[d \sin(Ld) + 2ik \cos(Ld) \cos \theta] \sigma e^{2ikL \cos \theta} - 2i\sigma k \cos \theta}{d^2 - 4k^2 \cos^2 \theta} \right\}. \quad (26)$$

Figures 6(a)–6(c) show the plot for the amplitudes as functions of  $kL$ . They resemble the amplitudes for the linear slab. However, there are small lumps present in the plot that do not appear in the linear case. This behavior arises from the oscillatory nature of the material. Figures 6(d)–6(f) plot the scattered amplitudes as functions of  $\sigma$  and we see once again the remarkable convergence properties of the approximants. In all cases the energy is conserved for sufficient large values of  $N$ .

We discuss only one aspect of this slab, which is the behavior of the scattered amplitudes as functions of the incident angle  $\theta$ . By using the same parameters as in Ref. [34], we obtain the Taylor series and construct the Padé approximants. Figures 5(a) and 5(b) display the approximants  $|t_2|^2$  and  $|r_2|^2$ . The exact solution is not shown along with the approximate one because both oscillate too fast and it would be very difficult to compare. We refer the reader to consult Fig. 5 of Ref. [34].

With the particular numerical values taken from Ref. [34], the first three terms in the Born series actually reproduce the exact behavior quite well. This is due to the fact that the amplitude of  $\chi(z)$  is very small (0.02). Thus, we increase this amplitude in such a way that the Taylor series no longer converges and plot in Figs. 5(c) and 5(d),  $|t_4|^2$  and  $|r_4|^2$  with  $b = 1$ . Again, the approximants converge and display an interesting behavior consisting of strong peaks in the transmission and corresponding troughs in the reflected amplitude. It is remarkable how the quotient of two polynomials can capture this rich dynamics. Note that only the first nine terms of the Taylor series are used to construct the plots shown in Figs. 5(c) and 5(d). We close this section by stating that PT-symmetric media has been engineered in laboratories and the effects discussed here have been verified in optical experiments [40–42].

#### D. Bloch-type slab

For this last example we consider a permittivity profile such that the Helmholtz equation has no known analytical exact solution. The profile  $\xi(z) = \Gamma z + \sigma \cos(dz)$  has the form of a linear ramp superposed with a periodic modulation ( $\sigma$  and  $\Gamma$  are constants). It resembles the potential function of Schrodinger's equation that generates Bloch oscillations.

Since in this case we have no grounds for comparison with exact solutions, we choose the normalization condition  $|t|^2 + |r|^2 = 1$  to guarantee that the scattered amplitudes remain bounded. The first Born approximation for the transmitted and reflected amplitudes are given by

#### IV. CONCLUSIONS

We demonstrate the usefulness and importance of Padé approximants in problems involving scattering of plane waves by inhomogeneous complex media. By using regular perturbation theory to obtain the reflected and transmitted amplitudes, divergent series are obtained, which can be summed by constructing the approximants. The formalism is valid for arbitrary inhomogeneous materials and can handle oblique incidence.

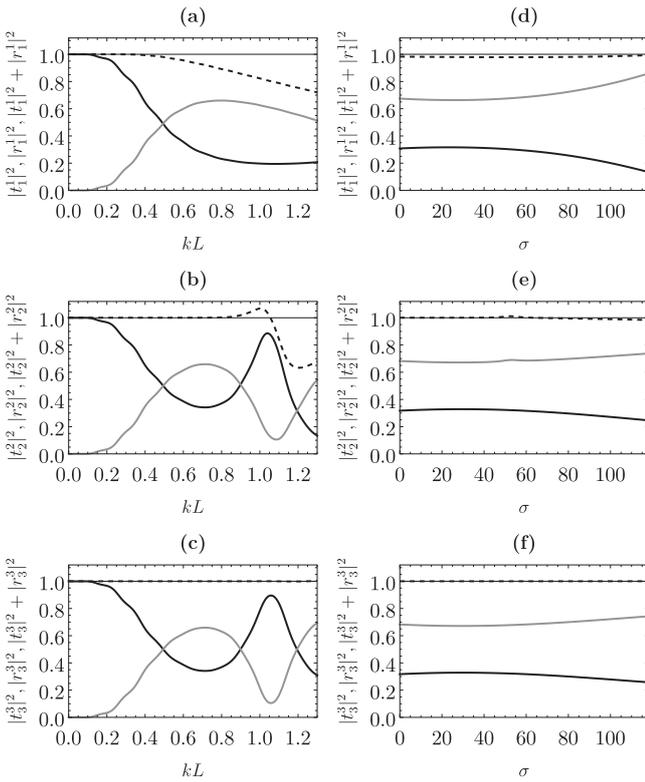


FIG. 6. Transmitted and reflected amplitudes for the inhomogeneous slab  $\xi(z) = \Gamma z + \sigma \cos(dz)$  as a function of (a)–(c)  $kL$ , with fixed  $\sigma = 2$  and  $\theta = 0$ , (d)–(f)  $\sigma$  with fixed  $kL = 1/2$  and  $\theta = \pi/4$ . The continuous thick black line (continuous gray line) are the Padé approximants for transmission  $|t_N^N|^2$  (reflection  $|r_N^N|^2$ ). The dashed line is the total energy. (a) and (d)  $N = 1$  (b) and (e)  $N = 2$  and (c) and (f)  $N = 3$ . Parameters used in all plots:  $\alpha = 1$ ,  $d = 50$ , and  $\Gamma = 20$ . The corresponding Born series diverges for these set of parameters. The continuous thin black line marks the unitary value.

#### ACKNOWLEDGMENTS

The authors acknowledge the financial support of CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico) and FAPEAL (Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Alagoas).

#### APPENDIX A: EXACT SOLUTION FOR A HOMOGENEOUS SLAB

In this Appendix we provide the exact solution to the field amplitudes in the scattering system composed of a slab with size  $L$  and homogeneous dielectric permittivity  $\xi(z) = b$ . The total fields in the region  $z \leq 0$ ,  $0 \leq z \leq L$  and  $z \geq L$  are given by  $\psi_1 = e^{ikz \cos \theta} + r e^{-ikz \cos \theta}$ ,  $\psi_2 = d_1 e^{ikz \sqrt{\cos^2 \theta + \alpha b}} + d_2 e^{-ikz \sqrt{\cos^2 \theta + \alpha b}}$  and  $\psi_3 = t e^{ikz \cos \theta}$ , respectively. To connect the parameters  $r$ ,  $t$ ,  $d_1$ , and  $d_2$  one uses the fact that the total field amplitude  $\psi(z)$  and its derivative  $d\psi(z)/dz$  are

continuous at  $z = 0$  and  $z = L$ . The first continuity condition comes directly from the continuity of the electric field parallel to the interface. The second boundary condition is a direct consequence of the differential equation satisfied by  $\psi(z)$ , or it can be viewed as a continuity condition for the magnetic field.

After straightforward algebra, the following system of equations is obtained:

$$\begin{aligned} 1 + r &= d_1 + d_2, \\ d_1 e^{ikyL} + d_2 e^{-ikyL} &= t e^{ikL \cos \theta}, \\ (1 - r) \cos \theta &= \gamma (d_1 - d_2), \\ \gamma (d_1 e^{ikyL} - d_2 e^{-ikyL}) &= t \cos \theta e^{ikL \cos \theta}, \end{aligned} \quad (\text{A1})$$

where  $\gamma = \sqrt{\cos^2 \theta + \alpha b}$ . By solving the system we obtain the amplitudes

$$d_1 = \frac{2(\gamma + \cos \theta) \cos \theta}{(\gamma + \cos \theta)^2 - (\gamma - \cos \theta)^2 e^{2ikyL}}, \quad (\text{A2})$$

$$d_2 = \frac{2(\cos \theta - \gamma) \cos \theta}{(\gamma - \cos \theta)^2 - (\gamma + \cos \theta)^2 e^{-2ikyL}}. \quad (\text{A3})$$

From the first (second) equation in (A1) we obtain the reflected (transmitted) amplitude  $r$  ( $t$ ).

#### APPENDIX B: EXACT SOLUTION FOR A LINEAR SLAB

In the case where  $\xi(z) = 1 + bz$ , the exact solution for the field amplitude  $\psi_2(z)$  inside the slab is given by

$$\psi_2(z) = c_1 \text{Ai}(u) + c_2 \text{Bi}(u), \quad (\text{B1})$$

where  $c_1$  and  $c_2$  are constants,

$$u = \frac{-bk^2 z \alpha - \frac{k^2}{2}(1 + 2\alpha + \cos 2\theta)}{(-b\alpha k^2)^{2/3}}$$

and Ai and Bi are Airy functions defined as the linearly independent solutions of Airy's equation,

$$\begin{aligned} \text{Ai}(u) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{3^{\frac{n-2}{3}}}{\pi n!} \Gamma\left(\frac{n+1}{3}\right) \\ &\quad \times \sin\left[\frac{2\pi}{3}(n+1)\right] u^n, \\ \text{Bi}(u) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{3^{\frac{n-2}{3}}}{\pi n!} \Gamma\left(\frac{n+1}{3}\right) \\ &\quad \times \left\{ 1 + \sin\left[\frac{\pi}{6}(4n+1)\right] \right\} u^n, \end{aligned} \quad (\text{B2})$$

where  $\Gamma$  is the Gamma function. Both series converge in the finite complex plane because the differential equation has no singular points. By matching the free-space solutions for  $z \leq 0$  and  $z \geq L$  at both interfaces one obtains the transmitted and reflected amplitudes (written in terms of Airy functions and their derivatives).

[1] M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light* (Elsevier, Amsterdam, 2013)

[2] B. E. Saleh and M. C. Teich, *Fundamentals of Photonics* (Wiley, New York, 2019).

[3] C. M. Bender, S. Orszag, and S. A. Orszag, *Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers I: Asymptotic*

- Methods and Perturbation Theory*, Vol. 1 (Springer Science & Business Media, Berlin, 1999).
- [4] H. Bremmer, The wkb approximation as the first term of a geometric-optical series, *Commun. Pure Appl. Math.* **4**, 105 (1951).
- [5] F. Atkinson, Wave propagation and the bremsstrahlung series, *J. Math. Anal. Appl.* **1**, 255 (1960).
- [6] H. Berk, D. Book, and D. Pfirsch, Convergence of the bremsstrahlung series for the spatially inhomogeneous helmholtz equation, *J. Math. Phys.* **8**, 1611 (1967).
- [7] J. Hassab, Perturbational solution of the helmholtz equation in arbitrary inhomogeneous media, *IEEE Trans. Antennas Propag.* **20**, 524 (1972).
- [8] C. Chen, An integral equation formulation of the direct scattering problem for an inhomogeneous slab, *IEEE Trans. Antennas Propag.* **26**, 797 (1978).
- [9] C. Chen and C.-D. Lien, A finite element solution of the wave propagation problem for an inhomogeneous dielectric slab, *IEEE Trans. Antennas Propag.* **27**, 877 (1979).
- [10] C.-H. Chen and Y.-W. Kiang, A variational theory for wave propagation in a one-dimensional inhomogeneous medium, *IEEE Trans. Antennas Propag.* **28**, 762 (1980).
- [11] C.-C. Su and C.-H. Chen, A fast algorithm for inhomogeneous slab scattering problems from the integral equation approach, *J. Appl. Phys.* **53**, 6009 (1982).
- [12] S. Longhi, Parity-time symmetry meets photonics: A new twist in non-hermitian optics, *Europhys. Lett.* **120**, 64001 (2017).
- [13] R. El-Ganainy, M. Khajavikhan, D. N. Christodoulides, and S. K. Ozdemir, The dawn of non-hermitian optics, *Commun. Phys.* **2**, 37 (2019).
- [14] L. Feng, R. El-Ganainy, and L. Ge, Non-hermitian photonics based on parity-time symmetry, *Nature Photon.* **11**, 752 (2017).
- [15] C. M. Bender and S. Boettcher, Real Spectra in Non-Hermitian Hamiltonians Having  $\mathcal{PT}$  Symmetry, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5243 (1998).
- [16] L. Ge, Y. D. Chong, S. Rotter, H. E. Türeci, and A. D. Stone, Unconventional modes in lasers with spatially varying gain and loss, *Phys. Rev. A* **84**, 023820 (2011).
- [17] Z. Lin, H. Ramezani, T. Eichelkraut, T. Kottos, H. Cao, and D. N. Christodoulides, Unidirectional Invisibility Induced by  $\mathcal{PT}$ -Symmetric Periodic Structures, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 213901 (2011).
- [18] H. Jones, Analytic results for a  $\mathcal{PT}$ -symmetric optical structure, *J. Phys. A: Math. Theor.* **45**, 135306 (2012).
- [19] S. Kalish, Z. Lin, and T. Kottos, Light transport in random media with  $\mathcal{PT}$  symmetry, *Phys. Rev. A* **85**, 055802 (2012).
- [20] X.-F. Zhu, Y.-G. Peng, and D.-G. Zhao, Anisotropic reflection oscillation in periodic multilayer structures of parity-time symmetry, *Opt. Express* **22**, 18401 (2014).
- [21] S. Longhi,  $\mathcal{PT}$ -symmetric laser absorber, *Phys. Rev. A* **82**, 031801(R) (2010).
- [22] Y. D. Chong, L. Ge, and A. D. Stone,  $\mathcal{PT}$ -Symmetry Breaking and Laser-Absorber Modes in Optical Scattering Systems, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 093902 (2011).
- [23] P. Ambichl, K. G. Makris, L. Ge, Y. Chong, A. D. Stone, and S. Rotter, Breaking of  $\mathcal{PT}$  Symmetry in Bounded and Unbounded Scattering Systems, *Phys. Rev. X* **3**, 041030 (2013).
- [24] P. A. Kalozoumis, G. Pappas, F. K. Diakonou, and P. Schmelcher, Systematic pathway to  $\mathcal{PT}$ -symmetry breaking in scattering systems, *Phys. Rev. A* **90**, 043809 (2014).
- [25] S. Longhi and L. Feng,  $\mathcal{PT}$ -symmetric microring laser-absorber, *Opt. Lett.* **39**, 5026 (2014).
- [26] P. Kalozoumis, C. Morfonios, G. Kodaxis, F. Diakonou, and P. Schmelcher, Emitter and absorber assembly for multiple self-dual operation and directional transparency, *Appl. Phys. Lett.* **110**, 121106 (2017).
- [27] V. Achilleos, Y. Aurégan, and V. Pagneux, Scattering by Finite Periodic  $\mathcal{PT}$ -Symmetric Structures, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 243904 (2017).
- [28] G. A. Baker, G. A. Baker Jr, P. Graves-Morris, G. Baker, and S. S. Baker, *Padé Approximants: Encyclopedia of Mathematics and Its Applications*, Vol. 59 (Cambridge University Press, Cambridge, 1996).
- [29] C. Brezinski, *History of Continued Fractions and Padé Approximants*, Vol. 12 (Springer Science & Business Media, Berlin, 2012).
- [30] A. George Jr. *et al.*, *Essentials of Padé Approximants* (Elsevier, Amsterdam, 1975).
- [31] J. A. Rebouças and P. A. Brandão, Scattering of light by a parity-time-symmetric dipole beyond the first born approximation, *Phys. Rev. A* **104**, 063514 (2021).
- [32] F. Loran, A. Mostafazadeh, S. Söymen, and O. T. Turgut, [arXiv:2204.09550](https://arxiv.org/abs/2204.09550).
- [33] T. A. van der Sijs, O. El Gawhary, and H. P. Urbach, Electromagnetic scattering beyond the weak regime: Solving the problem of divergent born perturbation series by padé approximants, *Phys. Rev. Res.* **2**, 013308 (2020).
- [34] H. Jones and M. Kulishov, Extension of analytic results for a  $\mathcal{PT}$ -symmetric structure, *J. Opt.* **18**, 055101 (2016).
- [35] C. M. Bender, Making sense of non-hermitian hamiltonians, *Rep. Prog. Phys.* **70**, 947 (2007).
- [36] C. M. Bender, S. Boettcher, and P. N. Meisinger,  $\mathcal{PT}$ -symmetric quantum mechanics, *J. Math. Phys.* **40**, 2201 (1999).
- [37] C. M. Bender, Introduction to  $\mathcal{PT}$ -symmetric quantum theory, *Contemp. Phys.* **46**, 277 (2005).
- [38] C. M. Bender, D. C. Brody, and H. F. Jones, Must a hamiltonian be hermitian?, *Am. J. Phys.* **71**, 1095 (2003).
- [39] C. M. Bender,  *$\mathcal{PT}$  Symmetry: In Quantum and Classical Physics* (World Scientific, Singapore, 2019).
- [40] A. Guo, G. J. Salamo, D. Duchesne, R. Morandotti, M. Volatier-Ravat, V. Aimez, G. A. Siviloglou, and D. N. Christodoulides, Observation of  $\mathcal{PT}$ -Symmetry Breaking in Complex Optical Potentials, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 093902 (2009).
- [41] C. E. Rüter, K. G. Makris, R. El-Ganainy, D. N. Christodoulides, M. Segev, and D. Kip, Observation of parity-time symmetry in optics, *Nature Phys.* **6**, 192 (2010).
- [42] L. Feng, Y.-L. Xu, W. S. Fegadolli, M.-H. Lu, J. E. Oliveira, V. R. Almeida, Y.-F. Chen, and A. Scherer, Experimental demonstration of a unidirectional reflectionless parity-time metamaterial at optical frequencies, *Nature Mater.* **12**, 108 (2013).