Monika Kubek

Implementacja funkcji Greena dla sfery

3 października 2017

Implementacja funkcji Greena dla sfery na podstawie publikacji „Green's function formalism for phononic crystals" R. Sainidou, N. Stefanou, A. Modinos (Phys. Rev. B 69, 064301). Oznaczenia zostały zachowane według oryginału.

Implementacja

Rozważamy pojedynczą, jednorodną sferę o promieniu S i gęstości ρ_S umieszczoną w centrum układu współrzędnych. Jest ona zanurzona w jednorodnym ośrodku o gęstości ρ.

Zastosowano układ współrzędnych sferycznych oraz następujące oznaczenia:

— $\mathbf{r}$ - wektor położenia w przestrzeni,
— $\mathbf{q}$ - wektor falowy, $q = \omega / c_\nu$,
— ω - częstość kołowa fali,
— c_ν - prędkość fali w ośrodku, gdzie $\nu = l, t$ kolejno dla fali podłużnej i poprzecznej,
— indeks L $= Plm$ jest zbiorem trzech indeksów, gdzie:
  — $P = L, M, N$, gdzie L to fala podłużna, M i N to fale poprzeczne kolejno o polaryzacji p i s,
  — l - liczba naturalna,
  — m - liczba naturalna mniejsza lub równa l,
— Θ - jest funkcją skokową Heaviside'a,
— indeksy $i, i' = 1, 2, 3$ to składowe wektora.

Sferyczne funkcje własne odpowiadające wartości własnej $c_\nu q$ oznaczamy $\mathbf{u}_{\mathrm{L}q}$. Zbiór podłużnych, sferycznych funkcji własnych odpowiadających wartości własnej $c_l q$ dany jest jako

$$\sqrt{\rho V} \mathbf{u}_{Llmq}(\mathbf{r}) = \frac{1}{q} \nabla \left[f_l(qr) Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}) \right], \tag{1}$$

a zbiór poprzecznych, sferycznych funkcji własnych odpowiadających wartości własnej $c_t q$ dany jest wzorami

$$\sqrt{\rho V}\,\mathbf{u}_{Mlmq}\left(\mathbf{r}\right) = f_l\left(qr\right)\mathbf{X}_{lm}\left(\hat{\mathbf{r}}\right), \tag{2}$$

$$\sqrt{\rho V}\,\mathbf{u}_{Nlmq}\left(\mathbf{r}\right) = \frac{i}{q}\nabla\times\left[f_l\left(qr\right)\mathbf{X}_{lm}\left(\hat{\mathbf{r}}\right)\right]. \tag{3}$$

W powyższych wzorach:

— Y_l^m - to harmoniki sferyczne,
— $\mathbf{X}_{lm}$ - to wektorowe harmoniki sferyczne,
— f_l - w zależności od rodzaju fali jest to sferyczna funkcja Bessel'a j_l (dla fali padającej, funkcja własna oznaczona jest wtedy jako $\mathbf{J}_{\mathrm{L}}\left(\mathbf{r}\right)$) lub sferyczna funkcja Hankel'a h_l^+(dla fali rozproszonej, funkcja własna oznaczona jest wtedy jako $\mathbf{H}_{\mathrm{L}}\left(\mathbf{r}\right)$).

Wektorowe harmoniki sferyczne (VSH3) $\mathbf{X}_{lm}\left(\hat{\mathbf{r}}\right)$ są zdefiniowane w następujący sposób

$$\sqrt{l\left(l+1\right)}\,\mathbf{X}_{lm}\left(\hat{\mathbf{r}}\right) = -i\mathbf{r}\times\nabla Y_l^m\left(\hat{\mathbf{r}}\right), \tag{4}$$

a dokładne wyrażenia podają wzory (39-40) w pracy źródłowej. Spełniają one poniższą własność

$$\mathbf{X}_{l-m} = \left(-1\right)^{m+1}\mathbf{X}_{lm}^*, \tag{5}$$

oraz dla pola multipolowego

$$i\nabla\cdot\left(f\left(r\right)\mathbf{X}_{lm}\right) = 0, \tag{6}$$

$$i\sqrt{l\left(l+1\right)}\,\nabla\times\left(f\left(r\right)\mathbf{X}_{lm}\right) = -\frac{l\left(l+1\right)}{r}f\mathbf{Y}_{lm} - \left(\frac{df}{dr}+\frac{1}{r}f\right)\mathbf{\Psi}_{lm}, \tag{7}$$

gdzie:

— $\mathbf{Y}_{lm} = Y_{lm}\hat{\mathbf{r}}$ (VSH1),
— $\mathbf{\Psi}_{lm} = r\nabla Y_{lm}$ (VSH2).

Falę płaską rozwijamy jako $\mathbf{u}_{p\mathbf{q}}\left(\mathbf{r}\right) = \sum_{\mathrm{L}} a_{\mathrm{L}}^{p\hat{\mathbf{q}}}\mathbf{u}_{\mathrm{L}}^0\left(\mathbf{r}\right)$ co jest sumą powyższych fal kulistych z pewnymi współczynnikami a_{L}.

Fala padająca zostaje rozwinięta w falę sferyczną i ma formę $\sum_{\mathrm{L}} a_{\mathrm{L}}^I\mathbf{J}_{\mathrm{L}}^S\left(\mathbf{r}\right)$ wewnątrz sfery oraz $\sum_{\mathrm{L}}\left[a_{\mathrm{L}}^0\mathbf{J}_{\mathrm{L}}\left(\mathbf{r}\right)+a_{\mathrm{L}}^+\mathbf{H}_{\mathrm{L}}\left(\mathbf{r}\right)\right]$ na zewnątrz (jako suma padającej i rozproszonej). Z założenia ciągłości na granicy otrzymujemy układ równań liniowych

$$a_{\mathrm{L}}^+ = \sum_{\mathrm{L}'} T_{\mathrm{LL}'}a_{\mathrm{L}'}^0, \tag{8}$$

$$a_{\mathrm{L}}^I = \sum_{\mathrm{L}'} C_{\mathrm{LL}'}a_{\mathrm{L}'}^0 \tag{9}$$

W rozdziale Appendix A pracy źródłowej mamy układ równań

$$\boldsymbol{M}_{4x4}\begin{pmatrix} a^{+}_{Nlm} \\ a^{+}_{Llm} \\ a^{I}_{Nlm} \\ a^{I}_{Llm} \end{pmatrix} = \boldsymbol{N}_{4x2}\begin{pmatrix} a^{0}_{Nlm} \\ a^{0}_{Llm} \end{pmatrix}, \text{ (A1)}$$

$$\boldsymbol{K}_{2x2}\begin{pmatrix} a^{+}_{Mlm} \\ a^{I}_{Mlm} \end{pmatrix} = a^{0}_{Mlm}\boldsymbol{L}_{2x1}, \text{ (A2)}$$

skąd otrzymujemy, że

$$\begin{pmatrix} a^{+}_{Nlm} \\ a^{+}_{Llm} \\ a^{I}_{Nlm} \\ a^{I}_{Llm} \\ a^{+}_{Mlm} \\ a^{I}_{Mlm} \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{c|c} \boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{N} & \\ \hline & \boldsymbol{K}^{-1}\boldsymbol{L} \end{array}\right)\begin{pmatrix} a^{0}_{Nlm} \\ a^{0}_{Llm} \\ a^{0}_{Mlm} \end{pmatrix}, \tag{10}$$

a z uzyskanej macierzy blokowej dostaniemy odpowiednie wartości macierzy $\boldsymbol{T}$ i $\boldsymbol{C}$ z (8,9). Macierze te są diagonalne w momencie pędu (lm) i symetryczne w $PP' = MM'$, LL', NN', LN', NL'. Funkcja dla fali regularnej ostatecznie ma postać

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r}) = {} & \left[\mathbf{J}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r}) + \sum_{\mathrm{L}'} T_{\mathrm{L}'\mathrm{L}}\mathbf{H}_{\mathrm{L}'}(\mathbf{r})\right]\Theta(r-S) \\ & + \sqrt{\rho_S/\rho}\sum_{\mathrm{L}'} C_{\mathrm{L}'\mathrm{L}}\mathbf{J}^{S}_{\mathrm{L}'}(\mathbf{r})\,\Theta(S-r). \end{aligned} \tag{11}$$

Fala rozproszona zostaje rozwinięta w falę sferyczną i ma wewnątrz sfery formę $\sum_{\mathrm{L}}\left[c^{I}_{\mathrm{L}}\mathbf{J}^{S}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r}) + c^{I+}_{\mathrm{L}}\mathbf{H}^{S}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r})\right]$ (jako suma padającej i rozproszonej) oraz $\sum_{\mathrm{L}} c^{0}_{\mathrm{L}}\mathbf{H}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r})$ na zewnątrz. Z założenia ciągłości na granicy otrzymujemy układ równań liniowych

$$c^{I+}_{\mathrm{L}} = \sum_{\mathrm{L}'} Q_{\mathrm{LL}'}c^{0}_{\mathrm{L}'}, \tag{12}$$

$$c^{I}_{\mathrm{L}} = \sum_{\mathrm{L}'} P_{\mathrm{LL}'}c^{0}_{\mathrm{L}'} \tag{13}$$

W rozdziale Appendix A pracy źródłowej mamy układ równań

$$\boldsymbol{M'}_{4x4}\begin{pmatrix} c^{I+}_{Nlm} \\ c^{I+}_{Llm} \\ c^{I}_{Nlm} \\ c^{I}_{Llm} \end{pmatrix} = \boldsymbol{N'}_{4x2}\begin{pmatrix} c^{0}_{Nlm} \\ c^{0}_{Llm} \end{pmatrix}, \text{ (A5)}$$

$$\boldsymbol{K'}_{2x2}\begin{pmatrix} a^{I+}_{Mlm} \\ a^{I}_{Mlm} \end{pmatrix} = c^{0}_{Mlm}\boldsymbol{L'}_{2x1}, \text{ (A6)}$$

skąd analogicznie jak wcześniej otrzymujemy

$$\begin{pmatrix} c^{I+}_{Nlm} \\ c^{I+}_{Llm} \\ c^{I}_{Nlm} \\ c^{I}_{Llm} \\ a^{I+}_{Mlm} \\ a^{I}_{Mlm} \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{c|c} \boldsymbol{M'}^{-1}\boldsymbol{N'} & \\ \hline & \boldsymbol{K'}^{-1}\boldsymbol{L'} \end{array} \right) \begin{pmatrix} c^{0}_{Nlm} \\ c^{0}_{Llm} \\ c^{0}_{Mlm} \end{pmatrix}, \tag{14}$$

a z uzyskanej macierzy blokowej dostaniemy odpowiednie wartości macierzy $\boldsymbol{Q}$ i $\boldsymbol{P}$ z (12,13). Macierze te są diagonalne w momencie pędu (lm) i symetryczne w $PP' = MM'$, LL', NN', LN', NL'. Funkcja dla fali nieregularnej ostatecznie ma postać

$$\mathbf{I}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r}) = \mathbf{H}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r})\,\Theta(r-S) + \sqrt{\rho_S/\rho}\sum_{\mathrm{L}}\left[P_{\mathrm{LL'}}\mathbf{J}^S_{\mathrm{L'}}(\mathbf{r}) + Q_{\mathrm{L'L}}\mathbf{H}^S_{\mathrm{L'}}(\mathbf{r})\right]\Theta(S-r)\,. \tag{15}$$

Wyrazy macierzy M, N, K, L są zdefiniowane w Appendix A za pomocą wzorów (A3-4) i (A7-8), gdzie $z_\nu = \omega S/c_\nu$, $x_\nu = \omega S/c_{s\nu}$

Funkcja Greena dla sfery, którą implementujemy, ma postać

$$G^{(s)}_{ii'}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = -i\sum_{\mathrm{L}}\frac{\omega}{c^3_\nu}\left[R_{\mathrm{L};i}(\mathbf{r})\,\bar{I}_{\mathrm{L};i'}(\mathbf{r}')\,\Theta(r'-r) + I_{\mathrm{L};i}(\mathbf{r})\,\bar{R}_{\mathrm{L};i'}(\mathbf{r}')\,\Theta(r-r')\right], \tag{16}$$

gdzie

$$\bar{\mathbf{u}}_{Plm}(\mathbf{r}) = (-1)^f\,\mathbf{u}_{Pl-m}(\mathbf{r}) \text{ dla } \begin{cases} f=m & \text{gdy } P=L,N \\ f=m+1 & \text{gdy } P=M \end{cases}.$$

Wzory pomocnicze

$$\nabla(fg) = f(\nabla g) + g(\nabla f) \tag{17}$$
$$\nabla\times(f\mathbf{A}) = f(\nabla\times\mathbf{A}) - \mathbf{A}\times(\nabla f) \tag{18}$$

Pytania

1. brak