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.

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

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

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

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 $\mathbf{J}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r})$) lub sferyczna funkcja Hankel'a h_l^+(dla fali rozproszonej, funkcja własna oznaczona jest wtedy jako $\mathbf{H}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r})$).

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

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

$$a_{\mathrm{L}}^+ = \sum_{\mathrm{L}'} T_{\mathrm{LL}'} a_{\mathrm{L}'}^0, \tag{4}$$

$$a_{\mathrm{L}}^I = \sum_{\mathrm{L}'} C_{\mathrm{LL}'} a_{\mathrm{L}'}^0 \tag{5}$$

W rozdziale Appendix A pracy źródłowej mamy układ równań

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

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

skąd otrzymujemy, że

$$\begin{pmatrix} a_{Nlm}^+ \\ a_{Llm}^+ \\ a_{Nlm}^I \\ a_{Llm}^I \\ a_{Mlm}^+ \\ a_{Mlm}^I \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{c|c} \boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{N} & \\ \hline & \boldsymbol{K}^{-1}\boldsymbol{L} \end{array}\right) \begin{pmatrix} a_{Nlm}^0 \\ a_{Llm}^0 \\ a_{Mlm}^0 \end{pmatrix}, \tag{6}$$

a z uzyskanej macierzy blokowej dostaniemy odpowiednie wartości macierzy $\boldsymbol{T}$ i $\boldsymbol{C}$ z (4,5). Funkcja padająca ostatecznie ma postać

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r}) = \left[\mathbf{J}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r}) + \sum_{\mathrm{L}'} T_{\mathrm{L}'\mathrm{L}} \mathbf{H}_{\mathrm{L}'}(\mathbf{r})\right] \Theta(r - S) \\ + \sqrt{\rho_S/\rho} \sum_{\mathrm{L}'} C_{\mathrm{L}'\mathrm{L}} \mathbf{J}_{\mathrm{L}'}^S(\mathbf{r}) \Theta(S - r). \end{aligned} \tag{7}$$

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

$$c_{\mathrm{L}}^{I+} = \sum_{\mathrm{L}'} Q_{\mathrm{LL}'} c_{\mathrm{L}'}^{0}, \tag{8}$$

$$c_{\mathrm{L}}^{I} = \sum_{\mathrm{L}'} P_{\mathrm{LL}'} c_{\mathrm{L}'}^{0} \tag{9}$$

W rozdziale Appendix A pracy źródłowej mamy układ równań

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

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

skąd analogicznie jak wcześniej otrzymujemy

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

a z uzyskanej macierzy blokowej dostaniemy odpowiednie wartości macierzy $\boldsymbol{Q}$ i $\boldsymbol{P}$ z (8,9). Funkcja padająca ostatecznie ma postać

$$\begin{aligned} \mathbf{I}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r}) = \mathbf{H}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r})\,\Theta(r-S) + \sqrt{\rho_S/\rho} \sum_{\mathrm{L}} \big[& P_{\mathrm{LL}'}\mathbf{J}_{\mathrm{L}'}^{S}(\mathbf{r}) \\ & + Q_{\mathrm{L}'\mathrm{L}}\mathbf{H}_{\mathrm{L}'}^{S}(\mathbf{r})\big]\,\Theta(S-r). \end{aligned} \tag{11}$$

Funkcja Greena dla sfery, którą implementujemy, ma postać

$$\begin{aligned} G_{ii'}^{(s)}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = -i \sum_{\mathrm{L}} \frac{\omega}{c_{\nu}^{3}} \big[& R_{\mathrm{L};i}(\mathbf{r})\,\bar{I}_{\mathrm{L};i'}(\mathbf{r}')\,\Theta(r'-r) \\ & + I_{\mathrm{L};i}(\mathbf{r})\,\bar{R}_{\mathrm{L};i'}(\mathbf{r}')\,\Theta(r-r')\big], \end{aligned} \tag{12}$$

gdzie

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