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.

## Konwencja

Używane są układy współrzędnych kartezjańskich $(x, y, z)$ i sferycznych $(r, \theta, \phi)$.

**Kartezjański** układ współrzędnych $(x, y, z)$ - jego relacja z układem sferycznym jest następująca

$$x = r\cos\phi\sin\theta \tag{1}$$
$$y = r\sin\phi\sin\theta \tag{2}$$
$$z = r\cos\theta \tag{3}$$

**Sferyczny** układ współrzędnych$(r, \theta, \phi)$- jego relacja z układem kartezjańskim jest następująca

$$\text{radialna} \qquad r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \tag{4}$$
$$\text{polarna} \qquad \theta = \cos^{-1}\left(\frac{z}{r}\right) \tag{5}$$
$$\text{azymutalna} \qquad \phi = \mathrm{tg}^{-1}\left(\frac{y}{x}\right), \tag{6}$$

gdzie $r \in [0, \inf)$, $\theta \in [0, \pi)$, $\phi =\in [0, 2\pi]$. Jednostkowe wektory we współrzędnych sferycznych można zdefiniować w układzie kartezjańskim następująco

$$\text{radialny} \qquad \hat{\mathbf{r}} = [\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta] \tag{7}$$
$$\text{polarny} \qquad \hat{\boldsymbol{\theta}} = [\cos\theta\cos\phi, \sin\phi\cos\theta, -\sin\theta] \tag{8}$$
$$\text{azymutalny} \qquad \hat{\boldsymbol{\phi}} = [-\sin\phi, \cos\phi, 0]\,. \tag{9}$$

Gradient we współrzędnych sferycznych wynosi

$$\nabla = \hat{\mathbf{r}}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\hat{\boldsymbol{\theta}} + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\hat{\boldsymbol{\phi}}. \tag{10}$$

### Źródło


1. Weisstein, Eric W. "Spherical Coordinates." From MathWorld--A Wolfram Web Resource. http://mathworld.wolfram.com/SphericalCoordinates.html
2. Spherical coordinate system, https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Spherical_coordina (last visited Dec. 7, 2017).


# Implementacja

Rozważamy pojedynczą, jednorodną sferę o promieniu $S$ i gęstości $\rho_S$ umieszczoną w centrum układu współrzędnych. Jest ona zanurzona w jednorodnym ośrodku o gęstości $\rho$. Fale podłużna i poprzeczna rozchodzą się niezależnie kolejno z prędkością $c_l$ i $c_t$.

Zastosowano układ współrzędnych sferycznych oraz następujące oznaczenia:

— $\mathbf{r}$ - wektor położenia w przestrzeni,
— $\mathbf{q}$ - wektor falowy, $q = \omega/c_\nu$, $\mathbf{q} = q_1\hat{\boldsymbol{e}}_\mathbf{1} + q_2\hat{\boldsymbol{e}}_\mathbf{2} + q_3\hat{\boldsymbol{e}}_\mathbf{3}$
  — $\hat{\boldsymbol{e}}_\mathrm{p}$ to wektor jednostkowy, $\mathrm{p} = 1, 2, 3$
  — $\mathrm{p} = 1$ definiuje falę podłużną: radialny wektor jednostkowy wzdłuż $\mathbf{q}$
  — $\mathrm{p} = 2, 3$ definiują kolejno fale poprzeczne (polaryzacja $p$ oraz $s$): polarny i azymutalny wektor jednostkowy prostopadły do $\mathbf{q}$
— $\omega$ - częstość kołowa fali,
— $c_\nu$ - prędkość fali w ośrodku, gdzie $\nu = l, t$ kolejno dla fali podłużnej i poprzecznej,
— indeks $\mathrm{L} = Plm$ 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 $l$,
— $\Theta$ - 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

$$\sqrt{\rho V}\mathbf{u}_{Llmq}(\mathbf{r}) = \frac{1}{q}\nabla\left[f_l(qr)\,Y_l^m(\hat{\mathbf{r}})\right], \tag{11}$$

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

$$\sqrt{\rho V}\mathbf{u}_{Mlmq}(\mathbf{r}) = f_l(qr)\,\mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}}), \tag{12}$$

$$\sqrt{\rho V}\mathbf{u}_{Nlmq}(\mathbf{r}) = \frac{i}{q}\nabla\times\left[f_l(qr)\,\mathbf{X}_{lm}(\hat{\mathbf{r}})\right]. \tag{13}$$

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

$$\sqrt{l\left(l+1\right)}\,\mathbf{X}_{lm}\left(\hat{\mathbf{r}}\right) = -i\mathbf{r}\times\nabla Y_l^m\left(\hat{\mathbf{r}}\right), \tag{14}$$

a dokładne wyrażenia podają wzory (39-40) w pracy źródłowej. Składowe $\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{2}}$ i $\hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{3}}$ to wektory jednostkowe kolejno polarny i azymutalny, które są prostopadłe do wektora $\mathbf{r} = (r, 0, 0)$. VSH3 jest zatem z definicji niezależne od długości wektora $r$.

VSH3 spełniają poniższą własność

$$\mathbf{X}_{l-m} = \left(-1\right)^{m+1}\mathbf{X}_{lm}^*, \tag{15}$$

oraz dla pola multipolowego

$$i\nabla\cdot\left(f\left(r\right)\mathbf{X}_{lm}\right) = 0, \tag{16}$$

$$i\sqrt{l\left(l+1\right)}\,\nabla\times\left(f\left(r\right)\mathbf{X}_{lm}\right) = -\frac{l\left(l+1\right)}{r}f\mathbf{Y}_{lm} - \left(\frac{df}{dr}+\frac{1}{r}f\right)\mathbf{\Psi}_{lm}, \tag{17}$$

gdzie:

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

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

**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

$$a_{\mathrm{L}}^+ = \sum_{\mathrm{L}'} T_{\mathrm{LL}'}a_{\mathrm{L}'}^0, \tag{18}$$

$$a_{\mathrm{L}}^I = \sum_{\mathrm{L}'} C_{\mathrm{LL}'}a_{\mathrm{L}'}^0 \tag{19}$$

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

$$\begin{pmatrix} a^{+}_{Nlm} \\ a^{+}_{Llm} \\ a^{I}_{Nlm} \\ a^{I}_{Llm} \\ a^{+}_{Mlm} \\ a^{I}_{Mlm} \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{c|c} \boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{N} & \\ \hline & \boldsymbol{K}^{-1}\boldsymbol{L} \end{array}\right) \begin{pmatrix} a^{0}_{Nlm} \\ a^{0}_{Llm} \\ a^{0}_{Mlm} \end{pmatrix}, \tag{20}$$

a z uzyskanej macierzy blokowej dostaniemy odpowiednie wartości macierzy $\boldsymbol{T}$ i $\boldsymbol{C}$ z (18,19). Macierze te są diagonalne w momencie pędu (lm) i symetryczne w $PP' = MM'$, $LL'$, $NN'$, $LN'$, $NL'$. Funkcja dla fali regularnej ostatecznie ma postać

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r}) = & \left[\mathbf{J}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r}) + \sum_{\mathrm{L}'} T_{\mathrm{L}'\mathrm{L}}\mathbf{H}_{\mathrm{L}'}(\mathbf{r})\right]\Theta(r-S) \\ & + \sqrt{\rho_S/\rho}\sum_{\mathrm{L}'} C_{\mathrm{L}'\mathrm{L}}\mathbf{J}^{S}_{\mathrm{L}'}(\mathbf{r})\,\Theta(S-r). \end{aligned} \tag{21}$$

**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

$$c^{I+}_{\mathrm{L}} = \sum_{\mathrm{L}'} Q_{\mathrm{L}\mathrm{L}'}c^{0}_{\mathrm{L}'}, \tag{22}$$

$$c^{I}_{\mathrm{L}} = \sum_{\mathrm{L}'} P_{\mathrm{L}\mathrm{L}'}c^{0}_{\mathrm{L}'} \tag{23}$$

W rozdziale Appendix A pracy źródłowej mamy układ równań

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

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

skąd analogicznie jak wcześniej otrzymujemy

$$\begin{pmatrix} c^{I+}_{Nlm} \\ c^{I+}_{Llm} \\ c^{I}_{Nlm} \\ c^{I}_{Llm} \\ a^{I+}_{Mlm} \\ a^{I}_{Mlm} \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{c|c} \boldsymbol{M'}^{-1}\boldsymbol{N'} & \\ \hline & \boldsymbol{K'}^{-1}\boldsymbol{L'} \end{array}\right) \begin{pmatrix} c^{0}_{Nlm} \\ c^{0}_{Llm} \\ c^{0}_{Mlm} \end{pmatrix}, \tag{24}$$

a z uzyskanej macierzy blokowej dostaniemy odpowiednie wartości macierzy $\boldsymbol{Q}$ i $\boldsymbol{P}$ z (22,23). Macierze te są diagonalne w momencie pędu (lm) i symetryczne w $PP' = MM'$, $LL'$, $NN'$, $LN'$, $NL'$. Funkcja dla fali nieregularnej ostatecznie ma postać

$$\mathbf{I}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r}) = \mathbf{H}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r})\,\Theta(r-S) + \sqrt{\rho_S/\rho}\sum_{\mathrm{L}}\left[P_{\mathrm{LL'}}\mathbf{J}^S_{\mathrm{L'}}(\mathbf{r}) + Q_{\mathrm{L'L}}\mathbf{H}^S_{\mathrm{L'}}(\mathbf{r})\right]\Theta(S-r)\,. \quad (25)$$

**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

$$G^{(s)}_{ii'}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = -i\sum_{\mathrm{L}}\frac{\omega}{c^3_\nu}\left[R_{\mathrm{L};i}(\mathbf{r})\,\bar{I}_{\mathrm{L};i'}(\mathbf{r}')\,\Theta(r'-r) + I_{\mathrm{L};i}(\mathbf{r})\,\bar{R}_{\mathrm{L};i'}(\mathbf{r}')\,\Theta(r-r')\right], \quad (26)$$

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

$$\nabla(fg) = f(\nabla g) + g(\nabla f) \quad (27)$$

$$\nabla\times(f\mathbf{A}) = f(\nabla\times\mathbf{A}) - \mathbf{A}\times(\nabla f) \quad (28)$$

## Pytania

1. brak