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

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

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

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 $\mathbf{H}_\mathrm{L}(\mathbf{r})$).

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

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

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 $\mathbf{r}$. Jednostkowe wektory we współrzędnych sferycznych można zdefiniować w układzie kartezjańskim następująco

$$\text{radialny}\quad \hat{\mathbf{r}} = [\cos\theta\sin\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\phi], \tag{5}$$

$$\text{azymutalny}\quad \hat{\theta} = [-\sin\theta, \cos\theta, 0], \tag{6}$$

$$\text{polarny}\quad \hat{\phi} = [\cos\theta\cos\phi, \sin\theta\cos\phi, -\sin\phi]. \tag{7}$$

VSH3 spełniają poniższą własność

$$\mathbf{X}_{l-m} = (-1)^{m+1}\,\mathbf{X}_{lm}^*, \tag{8}$$

oraz dla pola multipolowego

$$i\nabla\cdot\left(f(r)\,\mathbf{X}_{lm}\right) = 0, \tag{9}$$

$$i\sqrt{l(l+1)}\,\nabla\times\left(f(r)\,\mathbf{X}_{lm}\right) = -\frac{l(l+1)}{r}f\mathbf{Y}_{lm} - \left(\frac{df}{dr}+\frac{1}{r}f\right)\mathbf{\Psi}_{lm}, \tag{10}$$

gdzie:

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

Falę płaską rozwijamy jako $\mathbf{u}_{p\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = \sum_\mathrm{L} a_\mathrm{L}^{p\hat{\mathbf{q}}}\mathbf{u}_\mathrm{L}^0(\mathbf{r})$ 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

$$a_{\mathrm{L}}^{+} = \sum_{\mathrm{L}'} T_{\mathrm{LL}'} a_{\mathrm{L}'}^{0}, \tag{11}$$

$$a_{\mathrm{L}}^{I} = \sum_{\mathrm{L}'} C_{\mathrm{LL}'} a_{\mathrm{L}'}^{0} \tag{12}$$

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

$$\begin{pmatrix} a_{Nlm}^{+} \\ a_{Llm}^{+} \\ a_{Nlm}^{I} \\ a_{Llm}^{I} \\ a_{Mlm}^{+} \\ a_{Mlm}^{I} \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{c|c} \boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{N} & \\ \hline & \boldsymbol{K}^{-1}\boldsymbol{L} \end{array}\right) \begin{pmatrix} a_{Nlm}^{0} \\ a_{Llm}^{0} \\ a_{Mlm}^{0} \end{pmatrix}, \tag{13}$$

a z uzyskanej macierzy blokowej dostaniemy odpowiednie wartości macierzy $\boldsymbol{T}$ i $\boldsymbol{C}$ z (11,12). Macierze te są diagonalne w momencie pędu (lm) i symetryczne w $PP' = MM'$, LL', NN', LN', NL'. Funkcja dla fali regularnej ostatecznie ma postać

$$\mathbf{R}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r}) = \left[\mathbf{J}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r}) + \sum_{\mathrm{L}'} T_{\mathrm{L}'\mathrm{L}} \mathbf{H}_{\mathrm{L}'}(\mathbf{r})\right] \Theta(r - S) + \sqrt{\rho_S/\rho} \sum_{\mathrm{L}'} C_{\mathrm{L}'\mathrm{L}} \mathbf{J}_{\mathrm{L}'}^{S}(\mathbf{r}) \Theta(S - r). \tag{14}$$

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

$$c_{\mathrm{L}}^{I+} = \sum_{\mathrm{L}'} Q_{\mathrm{LL}'} c_{\mathrm{L}'}^{0}, \tag{15}$$

$$c_{\mathrm{L}}^{I} = \sum_{\mathrm{L}'} P_{\mathrm{LL}'} c_{\mathrm{L}'}^{0} \tag{16}$$

W rozdziale Appendix A pracy źródłowej mamy układ równań

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

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

skąd analogicznie jak wcześniej otrzymujemy

$$\begin{pmatrix} c^{I+}_{Nlm} \\ c^{I+}_{Llm} \\ c^{I}_{Nlm} \\ c^{I}_{Llm} \\ a^{I+}_{Mlm} \\ a^{I}_{Mlm} \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{c|c} \boldsymbol{M'}^{-1}\boldsymbol{N'} & \\ \hline & \boldsymbol{K'}^{-1}\boldsymbol{L'} \end{array}\right)\begin{pmatrix} c^{0}_{Nlm} \\ c^{0}_{Llm} \\ c^{0}_{Mlm} \end{pmatrix}, \tag{17}$$

a z uzyskanej macierzy blokowej dostaniemy odpowiednie wartości macierzy $\boldsymbol{Q}$ i $\boldsymbol{P}$ z (15,16). Macierze te są diagonalne w momencie pędu (lm) i symetryczne w $PP' = MM'$, LL', NN', LN', NL'. Funkcja dla fali nieregularnej ostatecznie ma postać

$$\mathbf{I}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r}) = \mathbf{H}_{\mathrm{L}}(\mathbf{r})\,\Theta(r-S) + \sqrt{\rho_S/\rho}\sum_{\mathrm{L}}\left[P_{\mathrm{LL'}}\mathbf{J}^{S}_{\mathrm{L'}}(\mathbf{r}) + Q_{\mathrm{L'L}}\mathbf{H}^{S}_{\mathrm{L'}}(\mathbf{r})\right]\Theta(S-r). \tag{18}$$

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

$$G^{(s)}_{ii'}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = -i\sum_{\mathrm{L}}\frac{\omega}{c^3_\nu}\left[R_{\mathrm{L};i}(\mathbf{r})\,\bar{I}_{\mathrm{L};i'}(\mathbf{r}')\,\Theta(r'-r) + I_{\mathrm{L};i}(\mathbf{r})\,\bar{R}_{\mathrm{L};i'}(\mathbf{r}')\,\Theta(r-r')\right], \tag{19}$$

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

$$\nabla(fg) = f(\nabla g) + g(\nabla f) \tag{20}$$

$$\nabla\times(f\mathbf{A}) = f(\nabla\times\mathbf{A}) - \mathbf{A}\times(\nabla f) \tag{21}$$

Pytania

1. brak