

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

**ΣΚΕΔΑΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑΔΟΣΗ ΑΚΟΥΣΤΙΚΩΝ ΚΑΙ
ΕΛΑΣΤΙΚΩΝ ΚΥΜΑΤΩΝ ΣΕ ΤΥΧΑΙΑ ΜΕΣΑ**

ΚΑΦΕΣΑΚΗ ΜΑΡΙΑ

**ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΡΗΤΗΣ
ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ**

ΦΕΒΡΟΥΑΡΙΟΣ 1997

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

**ΣΚΕΔΑΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑΔΟΣΗ ΑΚΟΥΣΤΙΚΩΝ ΚΑΙ
ΕΛΑΣΤΙΚΩΝ ΚΥΜΑΤΩΝ ΣΕ ΤΥΧΑΙΑ ΜΕΣΑ**

ΚΑΦΕΣΑΚΗ ΜΑΡΙΑ

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ : Ε. Ν. ΟΙΚΟΝΟΜΟΥ

ΗΜΕΡΟΜΗΝΙΑ ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΗΣ : 17 / 2 / 1997

ΣΥΜΒΟΥΛΕΥΤΙΚΗ ΕΠΙΤΡΟΠΗ

Οικονόμου Ελευθέριος Παπαδάκης Ιωάννης
Κελίρης Παντελής

ΕΞΕΤΑΣΤΙΚΗ ΕΠΙΤΡΟΠΗ

Οικονόμου Ελευθέριος Παπαδάκης Ιωάννης
Κελίρης Παντελής Σούκουλης Κώστας
Παπανικολάου Νικόλαος Τζανετάκης Παναγιώτης
Τσιρώνης Γεώργιος

ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΡΗΤΗΣ

Στους γονείς μου
Σοφοκλή και Στέλλα

Ευχαριστίες

Τις πιο θερμές μου ευχαριστίες θέλω να εκφράσω στον επιβλέποντα καθηγητή μου Ελευθέριο Οικονόμου για τη διαρκή και με πάντα πρόθυμη διάθεση καθοδήγησή του. Οι πολύτιμες συμβουλές και η εποικοδομητική κριτική του, απόρροια της βαθιάς γνώσης και εμπειρίας του σε θέματα φυσικής, επέδρασαν αποφασιστικά στη διαμόρφωση του τρόπου σκέψης μου. Η συνεργασία μαζί του ήταν μια ανεκτίμητη εμπειρία για μένα.

Ένα μεγάλο ευχαριστώ επίσης οφείλω στον Μιχάλη Σιγάλα τόσο για τα προγράμματα του πάνω σε υπολογισμό δομής ζώνης ελαστικών κυμάτων όσο και για την πολύ χρήσιμη για μένα επικοινωνία που είχαμε όλα τα χρόνια εκπόνησης της διατριβής αυτής και τη βοήθεια του σε ότι αφορά την κατανόηση της κυματικής διάδοσης σε περιοδικά συστήματα.

Σε ότι αφορά την κατανόηση της κυματικής διάδοσης σε τυχαία συστήματα πολύτιμη υπήρξε η επικοινωνία με τον Kurt Busch. Τον ευχαριστώ όχι μόνο για τη βοήθειά του αλλά και για την ευγένεια και την προθυμία με την οποία ανταποκρινόταν στις ερωτήσεις μου.

Θα ήθελα επίσης να ευχαριστήσω την επταμελή εξεταστική επιτροπή της διατριβής για τις εύστοχες παρατηρήσεις και υποδείξεις τους και ιδιαίτερα τον καθ. Κώστα Σούκουλη ο οποίος ήλθε στο Ηράκλειο ειδικά για την παρουσίαση και ο οποίος διάβασε το παρόν κείμενο και έκανε διορθώσεις.

Διορθώσεις σε τμήματα του κειμένου αυτού έκανε και ο φοιτητής Αλέξιος Κληρονόμος. Τον ευχαριστώ θερμά.

Για τη λύση καθημερινών υπολογιστικών προβλημάτων θα ήταν παράλειψη να μην αναφέρω τη βοήθεια του πάντα πρόθυμου Κοσμά Παπαχρήστου και των εργαζομένων στο υπολογιστικό κέντρο.

Ευχαριστώ επίσης θερμά τους φίλους και συμφοιτητές μου τόσο για τις χρήσιμες συζητήσεις που είχαμε όσο και για την ενθάρρυνση και συμπαράσταση τους. Τις ημέρες της συγγραφής της εργασίας ανεκτίμητη υπήρξε η βοήθεια και η συμπαράσταση της Κικής Χρυσοπούλου.

Ευχαριστώ τέλος το τμήμα Φυσικής του Πανεπιστημίου Κρήτης και το Ινστιτούτο Ηλεκτρονικής Δομής και Λέιζερ του Ιδρύματος Τεχνολογίας και Έρευνας για την τεχνική και οικονομική υποστήριξη τα χρόνια των σπουδών μου. Το τμήμα Φυσικής, εκτός από οικονομική υποστήριξη, μου έδωσε και την ευκαιρία να αποκτήσω διδακτική εμπειρία συμμετέχοντας στην εκπαιδευτική διαδικασία σαν βοηθός σε ενδιαφέροντα μαθήματα και να ωφεληθώ από τις γνώσεις και την πείρα εξαιρετικών δασκάλων.

Περιεχόμενα

Εισαγωγή	1
1 Ακουστικά και ελαστικά κύματα - Εξισώσεις	5
1.1 Θεμελιώδη μεγέθη και εξισώσεις της θεωρίας ελαστικότητας	5
1.2 Κυματικές εξισώσεις	6
1.3 Λύσεις της κυματικής εξίσωσης για ομογενή μέσα	7
2 Σκέδαση ελαστικού κύματος από σφαίρα σαν μέσο πρόβλεψης της δομής ζώνης	9
2.1 Εισαγωγή	9
2.2 Βασικοί υπολογισμοί	10
2.3 Αποτελέσματα	15
2.3.1 Τυπικά χαρακτηριστικά της ενεργού διατομής	15
2.3.2 Εξάρτηση της ενεργού διατομής από τις παραμέτρους των υλικών	17
2.3.3 Σχετική θέση στενών ζωνών, χάσματος και συντονισμών της ενεργού διατομής	19
2.3.4 Βέλτιστες συνθήκες για το χάσμα και ερμηνεία τους	19
3 Ακουστικά και ελαστικά κύματα σε τυχαία μέσα - CPA	23
3.1 Εισαγωγή	23
3.2 Μακροσκοπικά χαρακτηριστικά της διάδοσης	25
3.3 CPA	27
3.3.1 Τυπική CPA	28
3.3.2 CPA ενέργειας - Ταχύτητα ενέργειας	34
3.4 Προσεγγιστικά αποτελέσματα	39
3.4.1 Οριο χαμηλών συχνοτήτων	39
3.4.2 Οριο χαμηλών συγκεντρώσεων	40
3.5 Αριθμητικά αποτελέσματα	40
3.5.1 Σύγκριση απλής και coated CPA	40
3.5.2 Τυπικές μορφές των χαρακτηριστικών της διάδοσης	41
3.5.3 Ταχύτητα ενέργειας	46
Παραρτήματα	49
A Στοιχειώδη μεγέθη σε σφαιρικές συντεταγμένες	51
A.1 Τανυστής παραμόρφωσης, u_{ij} , σε σφαιρικές συντεταγμένες	51
A.2 Διανυσματικές σφαιρικές αρμονικές	51
A.3 Τανυστής τάσης, σ_{ij} , σε σφαιρικές συντεταγμένες	52

B	Σκέδαση από μια σφαίρα - υπολογισμοί	53
B.1	Πλήρης προσδιορισμός του πεδίου	53
B.2	Πυκνότητα ενέργειας	55
Γ	Σκέδαση από σύστημα δύο ομόκεντρων σφαιρών	57
Γ.1	Πεδίο - Ενεργός διατομή σκέδασης	57
Γ.2	Ενέργεια	59
Γ.3	Αναλυτικός υπολογισμός του πεδίου	59
Δ	Δημοσιεύσεις (Publications)	63
Δ.1	Interpretation of the Band Structure Results for Elastic and Acoustic Waves by Analogy with the LCAO Approach	63
Δ.2	Elastic Wave Band Gaps in 3-D Periodic Polymer Matrix Composites . . .	63
Δ.3	Elastic Waves in Periodic Composite Materials	63
Δ.4	Acoustic Waves in Random Media	63
Δ.5	Spectral gaps for Electromagnetic and Scalar waves: Possible explanation for certain differences	63
	Βιβλιογραφία	I

Εισαγωγή

Η διάδοση κλασικών κυμάτων όπως τα ηλεκτρομαγνητικά, ακουστικά ή ελαστικά¹ κύματα σε περιοδικά και τυχαία μέσα έχει γίνει αντικείμενο ιδιαίτερου ενδιαφέροντος τα τελευταία χρόνια για πολλούς τομείς της επιστήμης και της τεχνολογίας. Από την πλευρά της φυσικής στερεάς κατάστασης το ενδιαφέρον επικεντρώνεται στην ερώτηση για ύπαρξη ή όχι χάσματος² σε περιοδικά ή εντοπισμένων καταστάσεων σε τυχαία κλασικά συστήματα σε αναλογία με ότι συμβαίνει στα ηλεκτρόνια. Η απάντηση στο ερώτημα αυτό μπορεί να οδηγήσει σε εφαρμογές ανάλογες με τις εφαρμογές των ηλεκτρονικών χασμάτων κι εντοπισμένων καταστάσεων στους ημιαγωγούς, εφαρμογές οι οποίες έχουν αποτελέσει την καρδιά της τεχνολογίας τα τελευταία χρόνια. Επιπλέον, η μελέτη των κλασικών συστημάτων παρουσιάζει βασικά πλεονεκτήματα σε σχέση με τη μελέτη διάδοσης των ηλεκτρονίων.

Βασικό πλεονέκτημα είναι ότι τα κλασικά συστήματα αποτελούν περισσότερο “καθαρά” πειραματικά συστήματα σε σχέση με τα ηλεκτρόνια. Αυτό λόγω της απουσίας σύνθετων αλληλεπιδράσεων όπως αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου ή ηλεκτρονίων-φωτονίων, της έλλειψης ισχυρής εξάρτησης από τη θερμοκρασία και του γεγονότος ότι η συχνότητα του κλασικού κύματος μπορεί να καθοριστεί εξωτερικά εύκολα και με ακρίβεια.

Παρά το γεγονός όμως ότι τα κλασικά συστήματα είναι σχετικά “καθαρά” πειραματικά συστήματα ο εντοπισμός στην περίπτωση τους δεν είναι κάτι εκ των προτέρων εξασφαλισμένο. Συγκρίνοντας την βαθμωτή εξίσωση κύματος, $\nabla^2\phi + (\omega^2/c^2(\mathbf{r}))\phi = 0$, με την εξίσωση του Schrödinger, $\nabla^2\phi + 2(E - V(\mathbf{r}))\phi = 0$, μπορεί να δει κανείς ότι τα κλασικά κύματα είναι ισοδύναμα με κύματα ηλεκτρονίων ενέργειας, E , μεγαλύτερης από τη μέγιστη τιμή του δυναμικού $V(\mathbf{r})$. Σε αυτή την ενεργειακή περιοχή ο εντοπισμός των ηλεκτρονίων δεν φαίνεται να είναι εύκολος (αν και το πρόβλημα δεν έχει μελετηθεί πλήρως).

Η μελέτη των κλασικών κυμάτων ξεκίνησε από τα βαθμωτά κύματα³ που μελετήθηκαν κυρίως θεωρητικά τόσο σε περιοδικά όσο και σε τυχαία συστήματα σκεδαστών μέσα σε ομογενή μέσα. Βρέθηκε ότι οι βασικότερες παράμετροι για τον καθορισμό των χαρακτηριστικών της διάδοσης είναι η συγκέντρωση των σκεδαστών και ο λόγος της ταχύτητας διάδοσης του κύματος στους σκεδαστές προς την ταχύτητα διάδοσης στο περιβάλλον μέσο ενώ άλλες παράμετροι όπως η τοπολογία, το σχήμα των σκεδαστών κλπ. φάνηκαν να παίζουν επίσης ένα ρόλο.

Ακολούθησε η μελέτη των ηλεκτρομαγνητικών (ΗΜ) κυμάτων, θεωρητικά δυσκολότερη λόγω του διανυσματικού χαρακτήρα. Ο διανυσματικός αυτός χαρακτήρας θεωρήθηκε υπεύθυνος για την μεγαλύτερη - σε σχέση με τα βαθμωτά

¹Με τον όρο ακουστικά δηλώνονται τα κύματα ελαστικότητας που διαδίδονται σε ρευστά ενώ ελαστικά τα κύματα στα στερεά.

²Ο όρος χάσμα δηλώνει και στην περίπτωση κλασικών συστημάτων περιοχές συχνοτήτων στις οποίες δεν υπάρχει διάδοση του κύματος.

³Λέγοντας βαθμωτά εννοούμε κύματα που ικανοποιούν τη βαθμωτή κυματική εξίσωση $\nabla^2\phi + (\omega^2/c^2)\phi = 0$.

- αντίσταση των ΗΜ κυμάτων στη δημιουργία χάσματος. Παρόλα αυτά βρέθηκαν τόσο υπολογιστικά όσο και πειραματικά περιοδικές δομές που εμφανίζουν αρκετά μεγάλα χάσματα. Στην περίπτωση διάδοσης σε τυχαία συστήματα ένα αξιοσημείωτο αποτέλεσμα (το οποίο θα συζητηθεί περισσότερο εκτεταμένα στο κεφάλαιο 3), τόσο για βαθμωτά όσο και για ηλεκτρομαγνητικά κύματα, αφορά την ταχύτητα διάδοσης της ενέργειας. Η ταχύτητα αυτή βρέθηκε να μην ταυτίζεται ούτε με την ταχύτητα φάσης ούτε με την ταχύτητα ομάδας αλλά σε ορισμένες περιπτώσεις να είναι πολύ μικρότερη κι από τις δύο.

Τελευταία στη σειρά και το βαθμό μελέτης τόσο από τους θεωρητικούς όσο κι από τους πειραματικούς φυσικούς έχουν μείνει τα ακουστικά και τα ελαστικά κύματα τα οποία αποτελούν και το αντικείμενο της παρούσας εργασίας.

Λόγοι που ώθησαν το ενδιαφέρον μας στη μελέτη των ακουστικών κι ελαστικών κυμάτων είναι τόσο οι πολλές εφαρμογές τους (σε μηχανική, ιατρική, κ.ο.κ) αλλά κυρίως η πλούσια φυσική τους. Τα ελαστικά κύματα είναι πλήρως διανυσματικά κύματα (εγκάρσια και διαμήκη) και μάλιστα με διαφορετική ταχύτητα διάδοσης μεταξύ της διαμήκους και της εγκάρσιας συνιστώσας. Οι δύο αυτές συνιστώσες ενώ διαδίδονται ανεξάρτητα σε ένα ομογενές μέσο αναμιγνύονται στην παρουσία ανομοιογένειας και εγκάρσιο κύμα μετατρέπεται σε διαμήκες κι αντίστροφα. Επιπλέον η διάδοση ακουστικών κι ελαστικών κυμάτων σε ένα μέσο είναι ένα πρόβλημα πλούσιο σε παραμέτρους αφού εξαρτάται τόσο από τις ταχύτητες διάδοσης όσο κι από την πυκνότητα του μέσου και μάλιστα με τρόπο με όχι άμεσα προβλέψιμες συνέπειες.

Ολη αυτή η πλούσια φυσική πέρα από πηγή ενδιαφέροντος όμως είναι και πηγή θεωρητικών δυσκολιών κι ένας από τους λόγους που έδωσαν στα ακουστικά κι ελαστικά κύματα τη μικρότερη προτεραιότητα στη σειρά μελέτης από τους θεωρητικούς φυσικούς. Επιπλέον λόγος για την όχι εκτεταμένη θεωρητική μελέτη είναι και τα περιορισμένα πειραματικά αποτελέσματα.

Όσον αφορά τα ήδη υπάρχοντα θεωρητικά αποτελέσματα τα περισσότερα από αυτά αφορούν διάδοση σε περιοδικά συστήματα. Η διάδοση σε περιοδικά συστήματα, λόγω της συμμετρίας και της υπολογιστικής εμπειρίας από τη μελέτη της ηλεκτρονικής δομής ζώνης, είναι ευκολότερο πρόβλημα σε σχέση με τη διάδοση σε τυχαία. Επιπλέον λόγος για την “προτίμηση” των περιοδικών συστημάτων είναι το γεγονός ότι από ένα περιοδικό σύστημα μπορεί κανείς να πάρει πληροφορίες για το τυχαίο σύστημα που προκύπτει από τη σταδιακή “τυχαιοποίηση” του περιοδικού.

Παρά το ότι ο πλήρως διανυσματικός χαρακτήρας των ελαστικών κυμάτων ήταν μια ένδειξη μεγαλύτερης - σε σχέση με τα άλλα κλασικά κύματα - αντίστασης στη δημιουργία χάσματος βρέθηκαν - υπολογιστικά - εξαιρετικά μεγάλα χάσματα για αρκετές περιπτώσεις περιοδικών δομών. Μελετήθηκε επίσης εκτεταμένα η εξάρτηση των χάσμάτων καθώς και των άλλων χαρακτηριστικών της δομής ζώνης (πχ. ιδιαίτερα στενές ζώνες) από παραμέτρους όπως συγκέντρωση σκεδαστών, πλεγματική δομή, αντίθεση πυκνοτήτων ή ταχυτήτων των υλικών (σκεδαστών-περιβάλλοντος μέσου) και υπολογίστηκαν οι βέλτιστες συνθήκες για την εμφάνιση χάσματος.

Τα υπολογιστικά αυτά αποτελέσματα πάνω στη διάδοση ακουστικών κι ελαστικών κυμάτων σε περιοδικά μέσα αποτελούν την αφετηρία και το κίνητρο για το πρώτο μέρος αυτής της εργασίας. Παίρνοντας υπόψη ότι ένας από τους μηχανισμούς

δημιουργίας του χάσματος είναι η σκέδαση από καθένα σκεδαστή μελετήθηκε η σκέδαση από μία μόνο σφαίρα θυθισμένη σε ομογενές μέσο και εξετάστηκε πώς και σε ποιο βαθμό αυτή η σκέδαση μπορεί να δώσει πρόβλεψη κι εξήγηση για τα χαρακτηριστικά της δομής ζώνης σε σύστημα περιοδικά τοποθετημένων όμοιων σφαιρών. Η μελέτη αυτή και τα αποτελέσματα αναφέρονται στο κεφάλαιο 2.

Το δεύτερο μέρος της εργασίας αφορά μελέτη της διάδοσης τόσο ακουστικών όσο και ελαστικών κυμάτων σε διάφορα *τυχαία* συστήματα. Χρησιμοποιώντας διάφορες επεκτάσεις της γνωστής από το ηλεκτρονικό πρόβλημα μεθόδου Coherent Potential Approximation (CPA) και με αφορμή πρόσφατα πειράματα υπολογίζονται οι ταχύτητες ενέργειας και φάσης, η μέση ελεύθερη διαδρομή κι επίσης εξετάζεται η δυνατότητα εντοπισμού του κύματος στα διάφορα αυτά *τυχαία* συστήματα. Η μέθοδος και τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στο κεφάλαιο 3.

Τέλος, στο κεφάλαιο 1 γίνεται μια σύντομη παρουσίαση θεμελιωδών μεγεθών κι εξισώσεων της θεωρίας ελαστικότητας τα οποία χρησιμοποιήθηκαν στην πορεία της εργασίας. Αναφέρονται οι κυματικές εξισώσεις εστιάζοντας στην εξίσωση διάδοσης ελαστικών κυμάτων σε *ομογενή* μέσα και τις λύσεις της.

1

Ακουστικά και ελαστικά κύματα - Εξισώσεις

1.1 Θεμελιώδη μεγέθη και εξισώσεις της θεωρίας ελαστικότητας

Κάτω από την επίδραση δυνάμεων τα σώματα σε κάποιο βαθμό παραμορφώνονται. Η παραμόρφωση αυτή των σωμάτων (τα οποία θεωρούνται σαν συνεχή, πλήρως ελαστικά μέσα) είναι το κεντρικό θέμα της θεωρίας ελαστικότητας.

Η μετατόπιση ενός σημείου λόγω παραμόρφωσης δίδεται από το *διάνυσμα μετατόπισης*, \mathbf{u} , με συνιστώσες [1]

$$u_i = x'_i - x_i \quad (1.1)$$

όπου x_i και x'_i οι συνιστώσες του διανύσματος θέσης, \mathbf{r} , πριν και μετά την παραμόρφωση αντίστοιχα.

Όταν ένα σώμα παραμορφώνεται η απόσταση μεταξύ γειτονικών σημείων του, dl , αλλάζει κατά τρόπο ώστε¹

$$(dl')^2 = (dl)^2 + 2u_{ij}dx_i dx_j \quad (1.2)$$

dl' είναι η απόσταση των θεωρούμενων σημείων στο παραμορφωμένο σώμα και u_{ij} είναι οι συνιστώσες του γνωστού στην θεωρία ελαστικότητας *τανυστή παραμόρφωσης* οι οποίες σε καρτεσιανές συντεταγμένες και για μικρές παραμορφώσεις δίδονται από²

$$u_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (1.3)$$

Εκτός του τανυστή παραμόρφωσης ένας άλλος θεμελιώδης στη θεωρία ελαστικότητας τανυστής είναι ο λεγόμενος *τανυστής τάσης*³. Ο τανυστής τάσης, σ_{ij} , συνδέεται με τον τανυστή παραμόρφωσης με τη γενική σχέση

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} u_{kl} \quad (1.4)$$

C_{ijkl} είναι ο *τανυστής ελαστικότητας*, χαρακτηριστικός του μέσου.

Για *τοπικά ιστροπικά μέσα* ο C_{ijkl} μπορεί να γραφεί σαν⁴: $C_{ijkl} = \alpha \delta_{ik} \delta_{jl} + \beta \delta_{il} \delta_{jk} + \lambda \delta_{ij} \delta_{kl}$ και η σχέση παραμόρφωσης-τάσης (Εξ.1.4) παίρνει τη μορφή

¹Σε όλη τη συζήτηση θεωρούμε άθροιση ως προς τους επαναλαμβανόμενους δείκτες.

²Για τις συνιστώσες του u_{ij} σε σφαιρικές και κυλινδρικές συντεταγμένες δεξ αναφορά [1, σελ.3]. Οι συνιστώσες σε σφαιρικές συντεταγμένες αναφέρονται επίσης στο Παράρτημα Α.

³Τόσο ο u_{ij} όσο κι ο τανυστής τάσης είναι συμμετρικοί τανυστές.

⁴Οι $\delta_{ik} \delta_{jl}$, $\delta_{il} \delta_{jk}$ και $\delta_{ij} \delta_{kl}$ είναι οι μόνοι τανυστές τέταρτης τάξης που μένουν αναλλοίωτοι κάτω από στροφές κι ανακλάσεις του συστήματος συντεταγμένων.

$$\sigma_{ij} = 2\mu u_{ij} + \lambda u_{\ell\ell} \delta_{ij} \quad (1.5)$$

με $\mu = (\alpha + \beta)/2$. Οι συντελεστές $\lambda = \lambda(\mathbf{r})$ και $\mu = \mu(\mathbf{r})$ είναι οι λεγόμενοι συντελεστές Lamé του μέσου [1]. Ο μ εκφράζει την αντίσταση στις διατμητικές τάσεις ενώ ο συνδυασμός $B = \lambda + (2/3)\mu$ δίνει το υδροστατικό μέτρο ελαστικότητας.

Μέσω του τανυστή τάσης η δύναμη ανά μονάδα όγκου, \mathbf{F} , σε μια περιοχή του παραμορφούμενου σώματος μπορεί να εκφραστεί σαν

$$F_i = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \quad (1.6)$$

Ολοκληρώνοντας πάνω στον όγκο της περιοχής και μετατρέποντας το ολοκλήρωμα σε επιφανειακό εύκολα βρίσκει κανείς ότι η τάση, \mathbf{P} , πάνω σε ένα στοιχείο επιφάνειας της θεωρούμενης περιοχής εκφράζεται σαν

$$P_i = \sigma_{ij} n_j \quad (1.7)$$

με n_j τις συνιστώσες του μοναδιαίου κάθετου στο θεωρούμενο στοιχείο επιφάνειας.

Σημειώνουμε τέλος ότι η δυναμική ενέργεια ανά μονάδα όγκου του παραμορφούμενου σώματος, E_V , δίδεται από

$$E_V = \frac{1}{2} \sigma_{ij} u_{ij} \quad (1.8)$$

ενώ η ροή ενέργειας ανά μονάδα επιφάνειας, \mathbf{J} , από τη σχέση⁵ [2]

$$J_i = \sigma_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial t} \quad (1.9)$$

1.2 Κυματικές εξισώσεις

Παίρνοντας υπόψη τη σχέση 1.6 και τον δεύτερο νόμο του Νεύτωνα η γενική εξίσωση κίνησης για ένα ελαστικό μέσο μπορεί να γραφεί σαν [1, p.87]

$$\rho \frac{\partial^2 u^i}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \quad (1.10)$$

όπου $\rho = \rho(\mathbf{r})$ η πυκνότητα του μέσου.

Για την περίπτωση ισοτροπικών μέσων και αντικαθιστώντας το σ_{ij} από την αντίστοιχη έκφραση (Εξ. 1.5) η γενική εξίσωση κίνησης (Εξ.1.10) σε καρτεσιανές συντεταγμένες παίρνει τη μορφή

$$\frac{\partial^2 u^i}{\partial t^2} = \frac{1}{\rho} \left\{ \frac{\partial}{\partial x_i} (\lambda \frac{\partial u^\ell}{\partial x_\ell}) + \frac{\partial}{\partial x_j} [\mu (\frac{\partial u^i}{\partial x_j} + \frac{\partial u^j}{\partial x_i})] \right\}. \quad (1.11)$$

Η σχέση 1.11 είναι η γενική κυματική εξίσωση σε ισοτροπικό μέσο.

Για ρευστά, όπου η αντίσταση στη διάτμηση είναι μηδέν ($\mu = 0$), η εξίσωση 1.11 εισάγοντας την πίεση, $p = -\lambda \nabla \cdot \mathbf{u}$, παίρνει τη μορφή

⁵Τόσο για το E_V όσο και για το J_i , στη θέση των σ_{ij} , u_{ij} και u_j θεωρούνται τα πραγματικά μέρη των αντίστοιχων ποσοτήτων.

$$\frac{\partial^2 p}{\partial t^2} = \lambda \nabla \left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right) \quad (1.12)$$

Ομογενή μέσα : Στην περίπτωση *ομογενών μέσων*, δηλαδή μέσων με λ , μ , ρ = σταθερά, η γενική εξίσωση ελαστικού κύματος, Εξ.1.11, θεωρώντας χρονική εξάρτηση της μορφής $e^{-i\omega t}$ μπορεί να γραφεί σαν [2, 3]

$$(\lambda + 2\mu)\nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \mu\nabla \times \nabla \times \mathbf{u} + \rho\omega^2\mathbf{u} = 0 \quad (1.13)$$

Θέτοντας $\mathbf{u} = \mathbf{u}_l + \mathbf{u}_t$ όπου $\nabla \cdot \mathbf{u}_t = \nabla \times \mathbf{u}_l = 0$ δηλαδή χωρίζοντας το διάνυσμα παραμόρφωσης, \mathbf{u} , σε διαμήκη και εγκάρσια συνιστώσα (\mathbf{u}_l και \mathbf{u}_t αντίστοιχα) η Εξ.1.13 χωρίζεται σε δύο ανεξάρτητες διανυσματικές εξισώσεις Helmholtz [2]

$$\nabla^2 \mathbf{u}_l + \frac{\omega^2}{c_l^2} \mathbf{u}_l = 0 \quad (1.14)$$

$$\nabla^2 \mathbf{u}_t + \frac{\omega^2}{c_t^2} \mathbf{u}_t = 0 \quad (1.15)$$

Φυσική συνέπεια είναι η ύπαρξη για ομογενή μέσα *ασύζευκτων* διαμήκων κι εγκάρσιων κυμάτων που διαδίδονται *ανεξάρτητα* με ταχύτητες

$$c_l = \sqrt{(\lambda + 2\mu)/\rho} \quad \text{για το διαμήκες} \quad \text{και} \quad c_t = \sqrt{\mu/\rho} \quad \text{για το εγκάρσιο} \quad ^6.$$

1.3 Λύσεις της κυματικής εξίσωσης για ομογενή μέσα

Με το χωρισμό του διανύσματος μετατόπισης σε διαμήκη κι εγκάρσια συνιστώσα η λύση της εξίσωσης διάδοσης ελαστικού κύματος σε ομογενές μέσο (Εξ.1.13) ανάγεται τελικά στον υπολογισμό των λύσεων των δύο διανυσματικών εξισώσεων Helmholtz Εξ.1.14 και Εξ.1.15.

Σε ορθογώνια συστήματα συντεταγμένων μια διανυσματική εξίσωση Helmholtz μπορεί να αναλυθεί σε τρεις βαθμωτές κυματικές εξισώσεις μια για κάθε συνιστώσα του προς υπολογισμό διανύσματος. Επειδή το ίδιο δεν είναι δυνατόν σε καμπυλόγραμμες συντεταγμένες οι προσπάθειες για γενικό τρόπο λύσης της 1.13 στράφηκαν στην προσπάθεια εύρεσης τριών ανεξάρτητων *διανυσματικών* λύσεων πράγμα εφικτό για τα περισσότερα συστήματα συντεταγμένων [3, 4].

Εστω συναρτήσεις ϕ , ψ και χ τέτοιες ώστε

$$(\nabla^2 + k_l^2)\phi = 0, \quad (\nabla^2 + k_t^2)(\psi, \chi) = 0 \quad (1.16)$$

με $k_l = \omega/c_l$ και $k_t = \omega/c_t$ και \mathbf{a} ένα σταθερό διάνυσμα. Μπορεί να δείξει κανείς εύκολα με αντικατάσταση ότι οι ανεξάρτητες διανυσματικές συναρτήσεις

$$\mathbf{l} = \frac{1}{k_l} \nabla \phi \quad \mathbf{m} = \nabla \times \mathbf{a} \psi \quad \mathbf{n} = \frac{1}{k_t} \nabla \times \nabla \times \mathbf{a} \chi \quad (1.17)$$

είναι λύσεις της Εξ.1.13. Η \mathbf{l} δίνει τη διαμήκη συνιστώσα του κύματος (λύση της 1.14) ενώ οι \mathbf{m} και \mathbf{n} την εγκάρσια (λύσεις της 1.15).

⁶Σημειώνεται ότι η ομογένεια του μέσου είναι *αναγκαία συνθήκη* για την ύπαρξη της ανεξαρτησίας μεταξύ της διαμήκους και της εγκάρσιας συνιστώσας του κύματος.

Σφαιρικές συντεταγμένες : Σε σφαιρικές συντεταγμένες $\mathbf{a} = {}^7\mathbf{r}$ και η λύση \mathbf{u} εκφράζεται συνήθως σαν γραμμικός συνδυασμός των στοιχειωδών λύσεων $\mathbf{l}_{\varepsilon nm}$, $\mathbf{m}_{\varepsilon nm}$ και $\mathbf{n}_{\varepsilon nm}$ [3, 2].

Οι στοιχειώδεις λύσεις $\mathbf{l}_{\varepsilon nm}$, $\mathbf{m}_{\varepsilon nm}$ και $\mathbf{n}_{\varepsilon nm}$ (διανυσματικές σφαιρικές αρμονικές) είναι οι λύσεις που προέρχονται (με βάση τις εξισώσεις 1.17) από βαθμωτές συναρτήσεις⁸ της μορφής

$$\varphi_{\varepsilon nm} = R_n(kr)P_n^m(\cos\theta)\frac{\cos}{\sin} m\phi \quad (1.18)$$

όπου $n \in [0, \infty)$, $m \in [0, n]$, R_n συνάρτηση Bessel, $k = k_l$ για τις διαμήκεις λύσεις ($\mathbf{l}_{\varepsilon nm}$) και $k = k_t$ για τις εγκάρσιες ($\mathbf{m}_{\varepsilon nm}$, $\mathbf{n}_{\varepsilon nm}$) ενώ τα e, o δηλώνουν τις άρτιες (even) και τις περιττές (odd) αντίστοιχα σφαιρικές αρμονικές.

Οι αναλυτικές εκφράσεις των $\mathbf{l}_{\varepsilon nm}$, $\mathbf{m}_{\varepsilon nm}$ και $\mathbf{n}_{\varepsilon nm}$ αναφέρονται στο παράρτημα Α.

⁷Το \mathbf{r} δεν είναι σταθερό διάνυσμα αλλά αποδεικνύεται ότι στην περίπτωση των σφαιρικών συντεταγμένων δίνει ανεξάρτητες λύσεις με τη διαμήκη λύση, \mathbf{l} , κάθετη στην επιφάνεια σφαιράς με κέντρο την αρχή του συστήματος συντεταγμένων.

⁸Λύσεις της βαθμωτής εξίσωσης Helmholtz.

2

Σκέδαση ελαστικού κύματος από σφαίρα σαν μέσο πρόβλεψης της δομής ζώνης

2.1 Εισαγωγή

Όπως αναφέρθηκε στην εισαγωγή της εργασίας τα περισσότερα από τα ήδη υπάρχοντα αποτελέσματα πάνω στη διάδοση ακουστικών κι ελαστικών κυμάτων αφορούν διάδοση σε περιοδικά συστήματα [5, 6, 7, 8, 9, 10, 11]. Περισσότερο εκτεταμένα έχει μελετηθεί η διάδοση σε συστήματα σφαιρικών σκεδαστών περιοδικά τοποθετημένων σε ελαστικό μέσο. Διαπιστώθηκε η δυνατότητα ύπαρξης σε πολλές περιπτώσεις μεγάλων χασμάτων και μελετήθηκαν οι συνθήκες που ευνοούν την ύπαρξη αυτή. Μερικά από τα βασικά συμπεράσματα [8, 9] που διατυπώθηκαν είναι ότι η εμφάνιση χάσματος ευνοείται από (i) συγκέντρωση σφαιρών: 10 - 50%, (ii) στις περισσότερες περιπτώσεις μικρό λόγο διαμήκους προς εγκάρσια ταχύτητα (c_l/c_t) για τις σφαίρες και το περιβάλλον μέσο¹, (iii) μεγάλες ταχύτητες για το περιβάλλον μέσο (c_o), μικρές ταχύτητες για το υλικό των σφαιρών (c_i) - για σταθερή πυκνότητα παντού στο σύστημα - και (iv) μικρός λόγος ρ_o/ρ_i για στερεά ενώ μεγάλος λόγος ρ_o/ρ_i για υγρά όπου ρ_o η πυκνότητα του μέσου και ρ_i η πυκνότητα του υλικού των σφαιρών. Διαπιστώθηκε επίσης μια σχετική ανεξαρτησία των βασικών χαρικών της δομής ζώνης (χάσματα και πολύ στενές ζώνες²) τόσο από τη συγκέντρωση των σκεδαστών (σφαιρών) όσο κι από την πλεγματική δομή. Τέλος, ένα πρόσφατο μη αναμενόμενο αποτέλεσμα είναι ο υπολογισμός αξιοσημείωτα μεγάλων χασμάτων σε συστήματα σφαιρών από μέταλλο μεγάλης πυκνότητας, περιοδικά τοποθετημένων σε πλαστικά (υλικά χαμηλής πυκνότητας) όπως epoxy, PMMA κοκ. [10, 11, 12] παρά το ότι η αντίθεση ταχυτήτων, c_o/c_i , σ' αυτά τα συστήματα είναι σχεδόν ανύπαρκτη. Τα χάσματα αυτά βρέθηκαν να είναι πολύ μεγαλύτερα από χάσματα που υπολογίστηκαν σε συστήματα με τον ίδιο λόγο πυκνοτήτων μεταξύ σκεδαστών και περιβάλλοντος και μεγαλύτερο λόγο ταχυτήτων c_o/c_i .

Η προσπάθεια να κατανοηθούν τα παραπάνω αποτελέσματα και να βρεθεί ένας απλός τρόπος πρόβλεψης τους και πρόβλεψης κατάλληλων για δημιουργία χάσματος υλικών οδήγησε στη μελέτη της σκέδασης από μια μόνο σφαίρα³ [10, 11, 13] η οποία αποτελεί και το πρώτο μέρος της παρούσας εργασίας.

Η σκέδαση από μία σφαίρα έχει το πλεονέκτημα ότι αποτελεί ένα φυσικό σύστημα

¹Η ελάχιστη τιμή που μπορεί να έχει ο λόγος c_l/c_t σε μέσα χωρίς απορρόφηση (ώστε οι σταθερές Lamé να είναι θετικοί αριθμοί) είναι $\sqrt{2}$. Η εξάρτηση του χάσματος από το c_l/c_t σε πολλές περιπτώσεις είναι αρκετά σύνθετη κι όχι πολύ καθαρή.

²Οι "στενές ζώνες" παράγουν κορυφές στην πυκνότητα καταστάσεων.

³Η σκέδαση από μία μόνο σφαίρα μαζί με την πολλαπλή σκέδαση και καταστροφική συμβολή των σκεδαζομένων κυμάτων ευθύνεται για την εμφάνιση του χάσματος.

που μπορεί να μελετηθεί σχετικά εύκολα, χωρίς ανάγκη μεγάλου υπολογιστικού χρόνου και μνήμης και που λόγω της απλότητας του δίνει δυνατότητα φυσικής ερμηνείας των αποτελεσμάτων. Επιπλέον, η σχετική ανεξαρτησία των βασικών χαρακτηριστικών της δομής ζώνης τόσο από τη συγκέντρωση των σκεδαστών όσο κι από την πλεγματική δομή είναι μια ισχυρή ένδειξη για το ότι ο ρόλος της στον καθορισμό των χαρ/κών της δομής ζώνης στο αντίστοιχο περιοδικό σύστημα (σύστημα των περιοδικά τοποθετημένων όμοιων σφαιρών) είναι κυρίαρχος.

Θα πρέπει να σημειωθεί ότι μελέτη της σκέδασης από μία σφαίρα στην περίπτωση των βαθμωτών κυμάτων [14] κατάφερε να δώσει εκτίμηση τόσο για το μέγεθος όσο και για τη θέση του χάσματος (για τα ΗΜ κύματα ανάλογη μελέτη οδήγησε σε αποτελέσματα λιγότερο “καθαρά” λόγω του διανυσματικού χαρακτήρα των κυμάτων αυτών).

Η μελέτη της σκέδασης από μια μόνο σφαίρα, γίνεται εδώ μέσω υπολογισμού και ανάλυσης της ενεργού διατομής σκέδασης. Η βασική ιδέα είναι ο έλεγχος για πιθανή σύνδεση των συντονισμών της ενεργού διατομής με τις πολύ στενές ζώνες και τα χάσματα της δομής ζώνης ελέγχοντας έτσι την πιθανή επέκταση της γνωστής από το ηλεκτρονικό περιοδικό πρόβλημα ιδέας του LCAO (γραμμικός συνδυασμός ατομικών τροχιακών) στην περίπτωση των ακουστικών κι ελαστικών κυμάτων με τους συντονισμούς να παίζουν το ρόλο των ιδιοκαταστάσεων. Συνδέοντας τους συντονισμούς της ενεργού διατομής με τα χαρακτηριστικά της δομής ζώνης οι συνθήκες για ύπαρξη χάσματος μπορούν να μετατραπούν σε συνθήκες για την ενεργό διατομή και να δοθεί μια φυσική ερμηνεία για τις συνθήκες αυτές.

Στην προσπάθεια επέκτασης της ιδέας του LCAO στην περίπτωση των ακουστικών κι ελαστικών κυμάτων θα πρέπει να σημειωθούν δυο σημαντικές διαφορές σε σχέση με τα ηλεκτρόνια που κάνουν το πρόβλημα μη τετριμμένο. Το ότι (i) οι συντονισμοί δεν είναι πραγματικές ιδιοκαταστάσεις πλήρως εντοπιζόμενες⁴ και (ii) εκτός από το κανάλι διάδοσης μέσω των συντονισμών υπάρχει και η δυνατότητα διάδοσης μέσω του υλικού που περιβάλλει τις σφαίρες το οποίο μπορεί να υποστηρίξει κύματα για κάθε τιμή της συχνότητας.

Για τη σύνδεση της ενεργού διατομής με τα χαρακτηριστικά της δομής ζώνης στα πλαίσια της παρούσας δουλειάς α) εξετάστηκε η εξάρτηση της ενεργού διατομής από παραμέτρους του προβλήματος που επηρεάζουν την εμφάνιση χάσματος και συγκρίθηκε με την εξάρτηση του χάσματος από τις ίδιες παραμέτρους, β) η θέση του χάσματος και των πολύ στενών ζωνών συνδέθηκε με τη θέση των συντονισμών της ενεργού διατομής και γ) οι βέλτιστες για την εμφάνιση χάσματος συνθήκες εκφράστηκαν σαν συνθήκες πάνω στην ενεργό διατομή κι έγινε μια προσπάθεια φυσικής ερμηνείας των συνθηκών αυτών. Στην παρουσίαση που ακολουθεί, πριν την αναφορά των κυριότερων αποτελεσμάτων η οποία γίνεται στο υποκεφάλαιο 2.3, αναφέρονται συνοπτικά οι βασικότεροι υπολογισμοί.

2.2 Βασικοί υπολογισμοί

Το κύριο μέρος των υπολογισμών αυτού του κεφαλαίου αφορά υπολογισμό ενεργού διατομής σκέδασης, πλατών σκέδασης και υπολογισμό ενέργειας όταν Α) διαμήκες

⁴Σβήνουν πολύ αργά (σαν $1/r$) για $r \rightarrow \infty$.

και Β) εγκάρσιο επίπεδο κύμα σκεδάζεται από ελαστική σφαίρα δυθισμένη σε ελαστικό μέσο.

Σαν μαθηματικό πρόβλημα η μελέτη της σκέδασης από μια σφαίρα είναι αρκετά παλιό. Ο υπολογισμός της ενεργού διατομής σκέδασης έγινε για πρώτη φορά από τους Yiang και Tuell το 1956 [15, 2, 16, 17]. Πολλή δουλειά πάνω στη σκέδαση από μια σφαίρα έχει γίνει επίσης από τους Brill, Gaunaurd, και Überall οι οποίοι μελέτησαν κυρίως τα πλάτη σκέδασης [18, 19, 20, 21, 22, 23]. Μερικά από τα συμπεράσματα τους θα αναφερθούν και θα χρησιμοποιηθούν στην πορεία της παρουσίασης αυτού του κεφαλαίου.

Ο λόγος που βασικοί υπολογισμοί επαναλήφθηκαν κι αναφέρονται εδώ είναι από τη μια για να παρουσιαστούν με ένα ενιαίο τρόπο για την περίπτωση διαμήκους κι εγκάρσιου προσπίπτοντος κύματος κι από την άλλη λόγω τυπογραφικών λαθών στην υπάρχουσα βιβλιογραφία.

Οι υπολογισμοί που αναφέρονται αφορούν την περίπτωση σφαίρας (ακτίνας a) από ελαστικό στερεό με παραμέτρους: ρ_i (πυκνότητα), c_{li} , c_{ti} (διαμήκης και εγκάρσια ταχύτητα αντίστοιχα), τοποθετημένης σε επίσης στερεό ελαστικό μέσο με αντίστοιχες παραμέτρους ρ_o , c_{lo} , c_{to} . Περιπτώσεις όπως π.χ. ρευστά και σκληρή ή άδεια σφαίρα, υπολογιστικά, μπορούν να θεωρηθούν σαν οριακές περιπτώσεις της παραπάνω.

Εστω η περίπτωση (Α) όπου *διαμήκες* κύμα της μορφής

$$\mathbf{u}^{inc}(\mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{k}_{lo}\mathbf{r})} \hat{\mathbf{z}}, \quad k_{lo} = \omega/c_{lo} \quad (2.1)$$

που διαδίδεται κατά μήκος του $\hat{\mathbf{z}}$ άξονα προσπίπτει στην επιφάνεια της σφαίρας⁵.

Βάση όλων των υπολογισμών είναι ο προσδιορισμός του σκεδαζόμενου κύματος⁶, \mathbf{u}^{sc} , και του κύματος στο εσωτερικό της σφαίρας, \mathbf{u}^{in} . Πρώτο βήμα είναι η ανάπτυξη του προσπίπτοντος κύματος στη βάση των διανυσματικών σφαιρικών αρμονικών $\mathbf{l}_{\varepsilon nm}$, $\mathbf{m}_{\varepsilon nm}$, $\mathbf{n}_{\varepsilon nm}$ που ορίστηκαν στο κεφάλαιο 1. Το \mathbf{u}^{inc} σαν συνάρτηση των $\mathbf{l}_{\varepsilon nm}$, $\mathbf{m}_{\varepsilon nm}$ και $\mathbf{n}_{\varepsilon nm}$ μπορεί να γραφεί σαν⁷ [3]

$$\mathbf{u}^{inc}(\mathbf{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} i^n (2n+1) (-i) \mathbf{l}_{\varepsilon n0}(j, k_{lo}) \quad (2.2)$$

όπου j η σφαιρική συνάρτηση Bessel πρώτου είδους [24] με όρισμα $k_{lo}r$ και $i = \sqrt{-1}$.

Παίρνοντας υπόψη ότι η σφαίρα διατηρεί τις συμμετρίες του προσπίπτοντος και απαιτώντας ξεχωριστό σφαιρικό κύμα μακριά από την επιφάνεια της και πεδίο καλά ορισμένο παντού στο εσωτερικό της⁸, το σκεδαζόμενο κύμα, \mathbf{u}^{sc} , και το εσωτερικό πεδίο, \mathbf{u}^{in} , μπορούν να γραφούν σαν [15]

$$\mathbf{u}^{sc}(\mathbf{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} i^n (2n+1) [A_{\varepsilon n0} \mathbf{l}_{\varepsilon n0}(h, k_{lo}) + C_{\varepsilon n0} \mathbf{n}_{\varepsilon n0}(h, k_{to})] \quad (2.3)$$

και

⁵Η αρχή του συστήματος συντεταγμένων τοποθετείται στο κέντρο της σφαίρας.

⁶Το κύμα στην περιοχή έξω από τη σφαίρα είναι άθροισμα του προσπίπτοντος και του σκεδαζόμενου κύματος.

⁷Ο διαμήκης χαρακτήρας υπαγορεύει μόνο λύσεις \mathbf{l}_{nm} ενώ η συμμετρία γύρω από τον $\hat{\mathbf{z}}$ περιορίζει σ' αυτές με $m = 0$.

⁸Οι συνθήκες αυτές καθορίζουν τη συνάρτηση Bessel.

$$\mathbf{u}^{in}(\mathbf{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} i^n (2n+1) [E_{en0} \mathbf{l}_{en0}(j, k_{lj}) + G_{en0} \mathbf{n}_{en0}(j, k_{tj})] \quad (2.4)$$

όπου h η σφαιρική συνάρτηση Hankel πρώτου είδους [24] και $k_{lj} = \omega/c_{lj}$, $k_{tj} = \omega/c_{tj}$ ($j = o, i$). Οι συντελεστές $A_{en0}, C_{en0}, E_{en0}, G_{en0}$ υπολογίζονται (βλέπε παράρτημα Β) με εφαρμογή κατάλληλων συνοριακών συνθηκών πάνω στην επιφάνεια της σφαίρας, $r = a$, οι οποίες θα συζητηθούν παρακάτω.

Στην περίπτωση (Β) όπου εγκάρσιο επίπεδο κύμα πολωμένο στον $\hat{\mathbf{x}}$ άξονα που διαδίδεται κατά μήκος του $\hat{\mathbf{z}}$ άξονα προσπίπτει στην επιφάνεια της σφαίρας

$$\mathbf{u}^{inc}(\mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{k}_{to}\mathbf{r})} \hat{\mathbf{x}} = \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} [\mathbf{m}_{on1}(j, k_{to}) - i \mathbf{n}_{en1}(j, k_{to})] \quad (2.5)$$

Το σκεδαζόμενο κύμα σ' αυτή την περίπτωση δίδεται από [2]

$$\mathbf{u}^{sc}(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} [A_{en1} \mathbf{l}_{en1}(h, k_{lo}) + B_{on1} \mathbf{m}_{on1}(h, k_{to}) + C_{en1} \mathbf{n}_{en1}(h, k_{to})] \quad (2.6)$$

ενώ το κύμα στο εσωτερικό της σφαίρας από

$$\mathbf{u}^{in}(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} [E_{en1} \mathbf{l}_{en1}(j, k_{lj}) + F_{on1} \mathbf{m}_{on1}(j, k_{tj}) + G_{en1} \mathbf{n}_{en1}(j, k_{tj})] \quad (2.7)$$

Οι συντελεστές $A_{en1}, B_{on1}, C_{en1}, E_{en1}, F_{on1}$ και G_{en1} προσδιορίζονται κι εδώ (βλέπε παράρτημα Β) από εφαρμογή συνοριακών συνθηκών στην επιφάνεια της σφαίρας.

Συνοριακές συνθήκες [2] : Η πρώτη συνοριακή συνθήκη προκύπτει από την απαίτηση η σφαίρα και το περιβάλλον μέσο που βρίσκονται σε επαφή να συνεχίσουν να βρίσκονται σε επαφή σε κάθε χρονική στιγμή. Μαθηματικά αυτό εκφράζεται με τη συνέχεια του διανύσματος μετατόπισης, \mathbf{u} , πάνω στην επιφάνεια της σφαίρας, $r = a$

$$\mathbf{u}^{inc}|_{r=a} + \mathbf{u}^{sc}|_{r=a} = \mathbf{u}^{in}|_{r=a} \quad (2.8)$$

Η συνθήκη 2.8 στην πιο γενική περίπτωση (σφαίρα από ελαστικό στερεό σε στερεό ελαστικό μέσο) οδηγεί σε τρεις εξισώσεις μία για κάθε συνιστώσα του \mathbf{u} .

Δεύτερη συνθήκη είναι η συνέχεια του διανύσματος της τάσης πάνω στην επιφάνεια

$$\mathbf{P}^{inc}|_{r=a} + \mathbf{P}^{sc}|_{r=a} = \mathbf{P}^{in}|_{r=a} \quad (2.9)$$

Παίρνοντας υπόψη το ότι οι συνιστώσες της τάσης δίδονται από $P_i = \sigma_{ijn_j}$ (δες. Εξ.1.7) με μοναδιαίο κάθετο στην επιφάνεια της σφαίρας ($\hat{\mathbf{n}}$) το διάνυσμα $\hat{\mathbf{r}}$ η 2.9 οδηγεί στις συνθήκες

$$\begin{aligned} (\sigma_{rr}^{inc} + \sigma_{rr}^{sc})_{r=a} &= (\sigma_{rr}^{in})_{r=a} \\ (\sigma_{\theta r}^{inc} + \sigma_{\theta r}^{sc})_{r=a} &= (\sigma_{\theta r}^{in})_{r=a} \\ (\sigma_{\phi r}^{inc} + \sigma_{\phi r}^{sc})_{r=a} &= (\sigma_{\phi r}^{in})_{r=a} \end{aligned} \quad (2.10)$$

Στην περίπτωση που ο σκεδαστής είναι άπειρα σκληρή σφαίρα ($\rho, \lambda, \mu \rightarrow \infty, c_l, c_t \rightarrow 0$) ή άδεια σφαίρα ($\rho, \lambda, \mu, c_l, c_t \rightarrow 0$) όπου το πεδίο στο εσωτερικό είναι μηδέν και επίσης στην περίπτωση όπου κάποιο από τα δύο υλικά είναι ρευστό και άρα δεν υποστηρίζει εγκάρσια κύματα, λιγότερες από έξι εξισώσεις είναι αρκετές για τον προσδιορισμό του πεδίου παντού στο χώρο. Στην περίπτωση της *άπειρα σκληρής σφαίρας* η αδυναμία παραμόρφωσης επιβάλλει τη χρήση της εξίσωσης 2.8 πάνω στην επιφάνεια με το δεξιό μέλος μηδέν. Στην περίπτωση της *άδειας σφαίρας* η αδυναμία του σκεδαστή να ασκεί τάσεις επιβάλλει τη χρήση των εξισώσεων 2.9 με το δεξιό μέλος επίσης μηδέν. Τέλος στην περίπτωση που είτε ο σκεδαστής είτε το περιβάλλον μέσο είναι ρευστό οι συνοριακές συνθήκες είναι η συνέχεια της κάθετης στην επιφάνεια μετατόπισης και τάσης (u_r, σ_{rr}), κι ο μηδενισμός των εγκάρσιων τάσεων ($\sigma_{\theta r}, \sigma_{\phi r}$) πάνω στην επιφάνεια.

Ενεργός διατομή : Η ενεργός διατομή σκέδασης ορίζεται σαν ο λόγος της σκεδαζόμενης ροής ενέργειας προς την προσπίπτουσα ροή ενέργειας ανά μονάδα επιφάνειας. Για την περίπτωση προσπίπτοντος κύματος που διαδίδεται κατά τον \hat{z} άξονα και σκεδάζεται στην επιφάνεια σφαίρας τοποθετημένης στην αρχή των αξόνων αυτό εκφράζεται μαθηματικά σαν [13, 11]

$$\sigma = \frac{\int \langle J_r^{sc} \rangle r^2 d\Omega}{\langle J_z^{inc} \rangle} \quad \text{για } r \rightarrow \infty \quad (2.11)$$

όπου

$$\langle J_i \rangle = \langle \Re(\sigma_{ij}^{sc}) \Re(\dot{u}_j^{sc}) \rangle = -\frac{1}{2} \omega \Im([\sigma_{ij}]^* u_j) \quad (2.12)$$

Το σύμβολο \dot{u}_j δηλώνει τη χρονική παράγωγο του u_j , το σύμβολο $\langle \rangle$ μέση τιμή ως προς χρόνο ενώ τα \Re, \Im πραγματικό και φανταστικό μέρος αντίστοιχα μιγαδικού αριθμού. Το τελευταίο μέλος της 2.12 προκύπτει λαμβάνοντας υπόψη τη χρονική εξάρτηση του κύματος ($\sigma, \mathbf{u} \sim e^{-i\omega t}$).

Για την περίπτωση του διαμήκους προσπίπτοντος κύματος της εξίσωσης 2.1 η ενεργός διατομή, σ_l , (αντικαθιστώντας στους τύπους 2.12 και 2.11 τις αντίστοιχες εκφράσεις για τα u_j και σ_{ij} -δες παράρτημα Α) υπολογίζεται σαν [15, 13]

$$\hat{\sigma}_l = \frac{\sigma_l}{\pi a^2} = \sum_{n=0}^{\infty} 4(2n+1) \left[\frac{|A_{en0}|^2}{|Z_{l0}|^2} + n(n+1) \left(\frac{Z_{l0}}{Z_{t0}} \right) \frac{|C_{en0}|^2}{|Z_{t0}|^2} \right] = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{\sigma}_l(n) \quad (2.13)$$

με $Z_{l0} = k_{l0}a$, $Z_{t0} = k_{t0}a$ και $\hat{\sigma}_l(n)$ αδιάστατη *μερική* ενεργός διατομή οφειλόμενη στη συνεισφορά του του n^{ov} σφαιρικού κύματος.

Για εγκάρσιο προσπίπτον κύμα (Εξ.2.5) η αντίστοιχη της 2.13 έκφραση για την ενεργό διατομή, σ_t , είναι [2, 13]

$$\hat{\sigma}_t = \frac{\sigma_t}{\pi a^2} = \sum_{n=1}^{\infty} 2(2n+1) \left[\frac{1}{n(n+1)} \left(\frac{Z_{t0}}{Z_{l0}} \right) \frac{|A_{en1}|^2}{|Z_{l0}|^2} + \frac{|B_{on1}|^2}{|Z_{t0}|^2} + \frac{|C_{en1}|^2}{|Z_{t0}|^2} \right] = \sum_{n=1}^{\infty} \hat{\sigma}_t(n) \quad (2.14)$$

Στους δύο αμέσως προηγούμενους τύπους (2.13, 2.14) ο όρος που περιέχει τον συντελεστή A_{en} δίνει το διαμήκες σκεδαζόμενο κύμα ενώ οι όροι που περιέχουν τους B_{on} και C_{en} το εγκάρσιο.

Το άπειρα αθροίσματα των 2.13 και 2.14, υπολογιστικά, στα πλαίσια της παρούσας δουλειάς, προσεγγίζονται με πεπερασμένα χρησιμοποιώντας κριτήριο που συγκρίνει κάθε όρο του αθροίσματος ($\hat{\sigma}(n)$) με το άθροισμα των προηγούμενων όρων. Για χαμηλές συχνότητες ($Z_l, Z_t < 2$) τρεις έως τέσσερις όροι στο άθροισμα είναι αρκετοί να δώσουν ικανοποιητική ακρίβεια ενώ σε όλους τους υπολογισμούς 20 όροι είναι οι περισσότεροι που έχουν χρησιμοποιηθεί.

Αξίζει να αναφερθεί τέλος ότι στο όριο των χαμηλών συχνοτήτων (Rayleigh σκέδαση) τόσο η σ_l όσο και η σ_t τείνουν στο μηδέν σαν ω^4 .

Πλάτη σκέδασης: Τα πλάτη σκέδασης, $\mathbf{f}_l, \mathbf{f}_t$, τα οποία δίνουν πληροφορίες για την γωνιακή κατανομή του σκεδαζόμενου κύματος ορίζονται και στην περίπτωση των ελαστικών κυμάτων όπως και στην περίπτωση των ηλεκτρονίων από την έκφραση του σκεδαζόμενου πεδίου μακριά από την επιφάνεια του σκεδαστή⁹

$$\mathbf{u}^{sc}(\mathbf{r}) = \mathbf{f}_l(\theta, \phi) \frac{e^{ik_l r}}{r} + \mathbf{f}_t(\theta, \phi) \frac{e^{ik_t r}}{r} \quad \text{για } r \rightarrow \infty \quad (2.15)$$

Διαφορές με τα ηλεκτρόνια είναι (i) η ύπαρξη στην περίπτωση των ελαστικών κυμάτων δύο πλατών σκέδασης πού αντιστοιχούν το ένα (\mathbf{f}_l) σε διαμήκεις σκεδαζόμενο κύμα και το άλλο (\mathbf{f}_t) σε εγκάρσιο και (ii) ότι τα πλάτη σκέδασης είναι στην περίπτωση αυτή διανύσματα (με $\mathbf{f}_l = f_l \hat{\mathbf{r}}$ και $\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{f}_t = 0$). Για χαμηλές συχνότητες ($\omega \rightarrow 0$) το πραγματικό μέρος των $\mathbf{f}_l, \mathbf{f}_t$ τείνει στο μηδέν σαν ω^2 ενώ το φανταστικό σαν¹⁰ ω^5 .

Οπτικό θεώρημα: Από την απαίτηση διατήρησης της ολικής ενέργειας προκύπτει και στην περίπτωση των ελαστικών κυμάτων το επίσης γνωστό από τα ηλεκτρόνια οπτικό θεώρημα το οποίο συνδέει τα πλάτη σκέδασης με την ενεργό διατομή [25].

Για προσπίπτον διαμήκεις κύμα που διαδίδεται κατά τον $\hat{\mathbf{z}}$ άξονα η μαθηματική του έκφραση είναι

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k_{l0}} \Im[f_{ll}]_{\theta=0} = \pi a^2 \sum_{n=0}^{\infty} 4(2n+1) \frac{\Im[A_{en0}]}{Z_{l0}^2} \quad (2.16)$$

όπου ο πρώτος δείκτης στο πλάτος σκέδασης δηλώνει την πόλωση του προσπίπτοντος κύματος και ο δεύτερος την πόλωση του σκεδαζόμενου¹¹. Για εγκάρσιο προσπίπτον κύμα, πολωμένο στον $\hat{\mathbf{x}}$ άξονα

$$\sigma_t = \frac{4\pi}{k_{t0}} \Im[\hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{f}_{tt}]_{\theta=0} = \pi a^2 \sum_{n=1}^{\infty} 2(2n+1) \frac{\Im[C_{en1} - iB_{on1}]}{Z_{t0}^2} \quad (2.17)$$

Ενέργεια: Η πυκνότητα ενέργειας σε κάθε περιοχή του χώρου είναι άθροισμα πυκνότητας κινητικής ενέργειας, E_T και πυκνότητας δυναμικής ενέργειας, E_V (δες

⁹Τα πλάτη σκέδασης, γενικά, είναι συνάρτηση του προσπίπτοντος και του σκεδαζόμενου κυματανύσματος ($\mathbf{f} = \mathbf{f}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$). Για ελαστική σκέδαση (ίσο μέτρο, k , προσπίπτοντος, \mathbf{k} , και σκεδαζόμενου, \mathbf{k}' , κυματανύσματος) και \mathbf{k} κατά τον $\hat{\mathbf{z}}$ άξονα, τα πλάτη σκέδασης γίνονται συνάρτηση του k και των γωνιών θ και ϕ (αφού η διεύθυνση του \mathbf{k}' ταυτίζεται μ'εκείνη του \mathbf{r}).

¹⁰Εξαιρέση αποτελεί η περίπτωση στην οποία ο σκεδαστής είναι άπειρα σκληρή σφαίρα. Εκεί τόσο το παραγματικό όσο και το φανταστικό μέρος των πλατών σκέδασης τείνει στο μηδέν σαν ω .

¹¹ f_{ll} δηλαδή είναι το πλάτος σκέδασης διαμήκους σκεδαζόμενου κύματος που προέρχεται από διαμήκεις προσπίπτον.

Εξ.1.8) με

$$\begin{aligned} E_T &= \frac{1}{2} \rho \Re(\dot{u}_i) \Re(\dot{u}_i) \\ E_V &= \frac{1}{2} \Re(\sigma_{ij}) \Re(u_{ij}) \end{aligned} \quad (2.18)$$

Παίρνοντας υπόψη την χρονική εξάρτηση του κύματος, εκφράζοντας τα πραγματικά μέρη μέσω των αντίστοιχων μιγαδικών ποσοτήτων και παίρνοντας χρονική μέση τιμή, η ολική πυκνότητα ενέργειας, $\langle E(\mathbf{r}) \rangle$, μπορεί να γραφεί σαν¹²

$$\langle E(\mathbf{r}) \rangle = \langle E_T \rangle + \langle E_{V_1} \rangle + \langle E_{V_2} \rangle = \frac{1}{4} \rho \omega^2 u_i u_i^* + \frac{1}{4} \lambda u_{ii} u_{jj}^* + \frac{1}{2} \mu u_{ij} u_{ij}^* \quad (2.19)$$

Ο υπολογισμός του $\langle E(\mathbf{r}) \rangle$ για το σύστημα σφαίρα σε ομογενές μέσο και σκέδαση διαμήκους κι εγκάρσιου κύματος αναφέρεται αναλυτικά στο παράρτημα Β.

2.3 Αποτελέσματα

Όπως αναφέρθηκε στην εισαγωγή αυτού του κεφαλαίου το πρώτο δήμα για τη σύνδεση των χαρακτηριστικών της δομής ζώνης με τους συντονισμούς της ενεργού διατομής είναι η μελέτη της παράλληλης εξάρτησης τους από τις παραμέτρους του προβλήματος. Πριν προχωρήσουμε στα αποτελέσματα της συγκριτικής μελέτης αυτής της εξάρτησης θα αναφέρουμε συνοπτικά μερικά από τα τυπικά χαρ/κα της ενεργού διατομής τα οποία θα χρησιμοποιηθούν στην περαιτέρω ανάλυση.

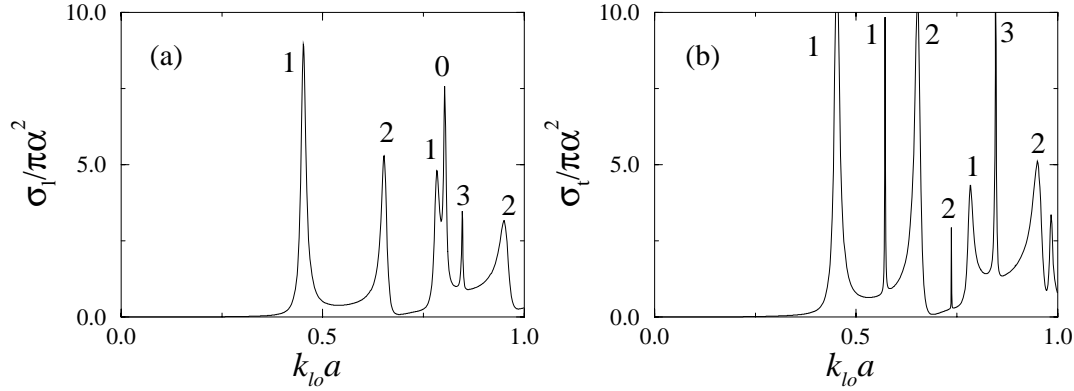
2.3.1 Τυπικά χαρακτηριστικά της ενεργού διατομής

Μια τυπική μορφή ενεργού διατομής σκέδασης φαίνεται στο Σχ.2.1 Το Σχ.2.1(a) δείχνει την ενεργό διατομή για προσπίπτον διαμήκες κύμα ενώ το Σχ.2.1(b) για εγκάρσιο στην περίπτωση “σκληρών” στερεών με $c_l/c_t \approx \sqrt{2}$. Η ενεργός διατομή όπως φαίνεται στο Σχ.2.1 αποτελείται από οξείς συντονισμούς με μια περιοχή ασθενέστερης σκέδασης ανάμεσα σ' αυτούς. Οι συντονισμοί αυτοί παρατηρούνται όταν η συχνότητα του προσπίπτοντος κύματος συμπίπτει με κάποια από τις ιδιοταλαντώσεις της σφαίρας. Καθένας από τους συντονισμούς είναι συνεισφορά ενός σφαιρικού μερικού κύματος (n) το οποίο δηλώνεται στο Σχ.2.1 με ένα αριθμό δίπλα ή πάνω από τον αντίστοιχο συντονισμό. Σημειώνεται ότι στην περίπτωση εγκάρσιου προσπίπτοντος κύματος δεν υπάρχει συντονισμός προερχόμενος από το $n = 0$ σφαιρικό κύμα το οποίο είναι μόνο διαμήκες¹³ κι επίσης ότι το μεγαλύτερο μέρος της σκεδαζόμενης ενέργειας είναι με μορφή εγκάρσιου κύματος.

Οι συντονισμοί για πρόσπτωση διαμήκους κύματος (Σχ.2.1(a)) (εξαιρώντας αυτούς που προέρχονται από το $n = 0$) συμπίπτουν σε θέση με συντονισμούς για πρόσπτωση εγκάρσιου (Σχ.2.1(b)). Οι συμπίπτοντες αυτοί συντονισμοί είναι συνεισφορά των

¹²Στην εξίσωση 2.19 υπάρχει ένας προς ένα αντιστοιχία των όρων του μεσαίου με τους όρους του δεξιού μέλους.

¹³Το $n = 0$ (σφαιρικά συμμετρικό) κύμα αντιστοιχεί σε σφαιρικά συμμετρική ταλάντωση της σφαίρας η οποία δεν μπορεί να διεγερθεί από το εγκάρσιο προσπίπτον κύμα όπως φαίνεται από την Εξ.2.5.



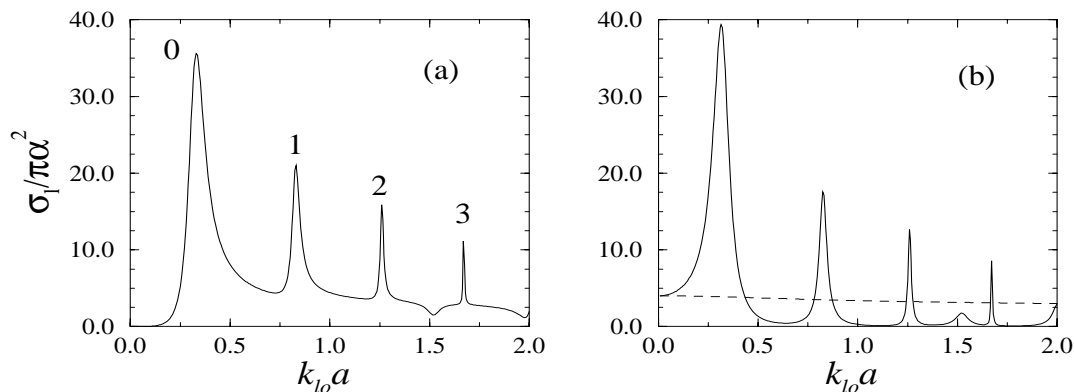
Σχ. 2.1: Ολική ενεργός διατομή για διαμήκεις (a) κι εγκάρσιο (b) προσπίπτον κύμα. $c_l/c_s = 2^{1/2}$ για τη σφαίρα και το περιβάλλον μέσο, $\rho_o/\rho_i = 1$ και $c_{lo}/c_{li} = 5.48$. a είναι η ακτίνα της σφαίρας και $k_{lo} = \omega/c_{lo}$ ο διαμήκης κυματάριθμος στο περιβάλλον μέσο. Ο αριθμός δίπλα ή πάνω από κάθε συντονισμό δηλώνει την υπεύθυνη για την προέλευσή του σφαιρική αρμονική.

ίδιων μερικών κυμάτων όπως φαίνεται από τους αριθμούς στο Σχ.2.1 και μάλιστα της 1 και \mathbf{n} συνιστώσας τους. Στην περίπτωση εγκάρσιου προσπίπτοντος κύματος υπάρχουν επιπλέον συντονισμοί (προερχόμενοι από την \mathbf{m} συνιστώσα) οι οποίοι στις περισσότερες περιπτώσεις υλικών είναι πολύ οξείς (δες. πχ. τον δεύτερο και τέταρτο συντονισμό του Σχ.2.1(b)). Τέτοιοι οξείς συντονισμοί αντιστοιχούν σε πολύ μεγάλη συγκέντρωση ενέργειας στο εσωτερικό της σφαίρας σε σχέση με τη σκεδαζόμενη πυκνότητα ενέργειας. Αντίθετα πιο ευρείς συντονισμοί συνοδεύονται από μεγαλύτερη εκροή ενέργειας από το εσωτερικό της σφαίρας στο εξωτερικό της.

Στην περίπτωση του Σχ.2.1 όπως και σε κάθε περίπτωση στην οποία το περιβάλλον μέσο είναι “σκληρό” στερεό ($c_l/c_t \rightarrow \sqrt{2}$) ο πρώτος συντονισμός προέρχεται από το σφαιρικό κύμα με $n = 1$. Αντίθετα στις περιπτώσεις στις οποίες το περιβάλλον μέσο είναι ρευστό η πρώτη κορυφή στην ενεργό διατομή οφείλεται στο $n = 0$ κύμα. Μια τέτοια περίπτωση είναι εκείνη του Σχ.2.2(a) όπου εικονίζεται μια τυπική μορφή ενεργού διατομής σκέδασης από σφαίρα βυθισμένη σε υγρό. Θα πρέπει να σημειωθεί ότι όταν είτε η σφαίρα είτε το περιβάλλον μέσο είτε και τα δύο είναι ρευστά, οι διαδοχικοί $(\nu + 1, \nu)$ συντονισμοί της κάθε μερικής ενεργού διατομής $\sigma_l(n)$ απέχουν μεταξύ τους σταθερή απόσταση τέτοια ώστε $[d/\lambda_{li}]_{\nu+1} - [d/\lambda_{li}]_{\nu} = 1$ ($\lambda_{li} = 2\pi/k_{li}$, $d = 2a$)¹⁴

Αναφέρουμε τέλος ένα αξιοσημείωτο αποτέλεσμα το οποίο θα χρησιμοποιηθεί για την κατανόηση βασικών αποτελεσμάτων: Όταν η σφαίρα είναι σχετικά κοντά σε παραμέτρους στην άπειρα σκληρή (ή άδεια) σφαίρα το κάθε πλάτος σκέδασης, f_j ($j = l, s$), μπορεί να γραφεί σαν άθροισμα δύο συμβαλλόμενων όρων [18, 19, 20, 21, 22, 23]. Ο πρώτος όρος ($f_j(0)$) ταυτίζεται με το πλάτος σκέδασης άπειρα σκληρής (ή άδειας) σφαίρας βυθισμένης στο περιβάλλον μέσο. Αυτός ο όρος αντιστοιχεί σε σκέδαση από το σύνορο της σφαίρας ανεξάρτητα από το υλικό της. Στις περιοχές συχνοτήτων που κυριαρχεί δεν υπάρχει σημαντική εισροή κύματος μέσα στη σφαίρα

¹⁴ Αν εξαιρέσει κανείς τους συντονισμούς που προέρχονται από την \mathbf{m} συνιστώσα του κύματος ισχύει το ίδιο και για τις $\sigma_t(n)$ όταν σφαίρα από υγρό είναι βυθισμένη σε στερεό ελαστικό μέσο.



Σχ. 2.2: (a) : Ενεργός διατομή για σκέδαση κύματος από σφαίρα από υγρό βυθισμένη σε υγρό περιβάλλον μέσο με $c_{l_o}/c_{l_i} = 3$, $\rho_o/\rho_i = 3$ και $c_{s_o} = c_{s_i} = 0$. (b) : Ενεργός διατομή για σκέδαση από κενή σφαίρα βυθισμένη στο ίδιο με το (a) περιβάλλον μέσο (διακεκομμένη γραμμή) και ενεργός διατομή που προκύπτει αν από το πλάτος σκέδασης της σφαίρας από υγρό αφαιρέσουμε το πλάτος σκέδασης της κενής σφαίρας (συνεχής γραμμή). a : ακτίνα σφαίρας $k_{l_o} = \omega/c_{l_o}$ ο κυματάριθμος στο περιβάλλον μέσο. Ο αριθμός δίπλα ή πάνω από κάθε συντονισμό δηλώνει την υπεύθυνη για την προέλευσή του σφαιρική αρμονική.

όπως πιστοποιείται από υπολογισμούς της πυκνότητας ενέργειας στα πλαίσια της παρούσας εργασίας. Ο δεύτερος όρος ($f_j - f_j(0)$) δίνει μια ακολουθία συντονισμών καλά χωρισμένων από περιοχές σχεδόν μηδενικής σκέδασης. Οι συντονισμοί αυτοί είναι χαρακτηριστικοί του υλικού της σφαίρας και αντιστοιχούν σε συχνότητες μέγιστης απορρόφησης του κύματος από το υλικό αυτό. Λαμβάνοντας υπόψη το οπτικό θεώρημα αντίστοιχες με τα πλάτη σκέδασης εικόνες έχουμε και για την ενεργό διατομή σκέδασης με μια τυπική εικόνα το Σχ.2.2(b).

2.3.2 Εξάρτηση της ενεργού διατομής από τις παραμέτρους των υλικών

Η συγκριτική εξάρτηση χάσματος και ενεργού διατομής σκέδασης από παραμέτρους όπως λόγο ταχυτήτων των υλικών, λόγο πυκνοτήτων και σκληρότητα (c_l/c_t), παρουσιάζεται εκτεταμένα στο παράρτημα Δ. Σε ότι ακολουθεί επιχειρείται μια συνοπτική αναφορά των κυριότερων αποτελεσμάτων.

Εξάρτηση από τον λόγο ταχυτήτων c_{l_o}/c_{l_i} : Όπως αναφέρθηκε στην εισαγωγή αυτού του κεφαλαίου το χάσμα (απουσία διαφοράς πυκνοτήτων και κρατώντας σταθερή την σκληρότητα, c_l/c_t , των υλικών) ευνοείται από την αύξηση του λόγου c_{l_o}/c_{l_i} . Αυξάνοντας το c_{l_o}/c_{l_i} για τιμές μεγαλύτερες από μονάδα το χάσμα αν υπάρχει γίνεται όλο και ευρύτερο φτάνοντας μια τιμή κορεσμού. Αντίθετα ελάττωση του λόγου c_{l_o}/c_{l_i} σε τιμές μικρότερες από μονάδα ενώ επίσης συνεπάγεται αύξηση της διαφοράς ανάμεσα στα δυο υλικά δεν φαίνεται να ευνοεί την εμφάνιση χάσματος.

Όσον αφορά την ενεργό διατομή, για $c_{l_o}/c_{l_i} > 1$ δηλαδή σκεδαστή χαμηλής ταχύτητας σε υψηλής ταχύτητας περιβάλλον μέσο, η αύξηση του c_{l_o}/c_{l_i} προκαλεί¹⁵ (i) την εμφάνιση ολοένα και πιο οξείων (υψηλότερων και στενότερων) συντονισμών, (ii) οι συντονισμοί αυτοί έχουν την τάση να έρχονται κοντύτερα σε θέση ο ένας

¹⁵Κρατώντας σταθερή τη σκληρότητα (c_l/c_t) τόσο της σφαίρας όσο και του περιβάλλοντος μέσου.

στον άλλο και να μετακινούνται σε χαμηλότερες συχνότητες και (iii) ελαττώνεται η σκέδαση στις περιοχές συχνοτήτων ανάμεσα στους συντονισμούς (υπόδαθρο).

Για $c_{1o}/c_{1i} < 1$, η ελάττωση του c_{1o}/c_{1i} παρά το ότι αυξάνει τη διαφορά ανάμεσα σε σφαίρα και περιβάλλον μέσο δεν προκαλεί αισθητή αλλαγή στην ενεργό διατομή η οποία παραμένει χαμηλή σε τιμές και ομαλή στην εξάρτησή της από τη συχνότητα.

Η διαφορά αυτή μεταξύ των περιπτώσεων $c_{1o}/c_{1i} < 1$ και $c_{1o}/c_{1i} > 1$ δεν είναι απρόσμενη αν σκεφτεί κανείς ότι σκεδαστές με χαμηλή ταχύτητα διάδοσης αντιστοιχούν σε βαθειά πηγάδια δυναμικού στην εξίσωση Schrödinger. Όπως είναι γνωστό βαθύ πηγάδι δυναμικού στο ηλεκτρονικό πρόβλημα συνεπάγεται έντονους συντονισμούς στην ενεργό διατομή.

Όπως επίσης φαίνεται από τα παραπάνω, έντονες κορυφές στη σκέδαση από μία σφαίρα ευνοούν την ύπαρξη χάσματος στο σύστημα των περιοδικά τοποθετημένων όμοιων σφαιρών.

Εξάρτηση από το λόγο πυκνοτήτων ρ_o/ρ_i : Όσον αφορά την εξάρτηση της ενεργού διατομής από το λόγο ρ_o/ρ_i η αύξηση αυτού του λόγου για υγρά συνεπάγεται αξιοσημείωτη αύξηση της ενεργού διατομής σκέδασης. Η πιο δραματική αύξηση συμβαίνει στον πρώτο συντονισμό ο οποίος όπως έχει αναφερθεί είναι συνεισφορά του $n = 0$ σφαιρικού κύματος και στο υπόδαθρο (σκέδαση στην περιοχή συχνοτήτων ανάμεσα στους συντονισμούς) το οποίο επίσης είναι συνεισφορά του $n = 0$ κύματος. Για στερεά αντίθετα η αύξηση του λόγου ρ_o/ρ_i συνεπάγεται ελάττωση και του ύψους και του εύρους των συντονισμών. Οι συντονισμοί στην περίπτωση αυτή ευνοούνται από σφαίρα υψηλής πυκνότητας σε χαμηλής πυκνότητας περιβάλλον μέσο.

Η εξάρτηση της ενεργού διατομής από το λόγο των πυκνοτήτων συγκρινόμενη με την αναφερθείσα στην εισαγωγή αυτού του κεφαλαίου εξάρτηση του χάσματος από τον ίδιο λόγο δείχνει επίσης ότι εντονότερες κορυφές στην ενεργό διατομή συνεπάγονται μεγαλύτερο χάσμα. Μένει να κατανοηθεί η πηγή της διαφοράς μεταξύ στερεών κι υγρών στην εξάρτηση από το λόγο των πυκνοτήτων. Η διαφορά αυτή μπορεί να κατανοηθεί αν σκεφτεί κανείς ότι στην περίπτωση των υγρών και η πρώτη κορυφή της ενεργού διατομής και το υπόδαθρο οφείλονται αποκλειστικά στη συνεισφορά του $n = 0$ μερικού κύματος η οποία είναι σχεδόν ανύπαρκτη στην περίπτωση των “σκληρών” στερεών (σε στερεά λόγω του μεγάλου c_t η σκέδαση εγκάρσιου κύματος κυριαρχεί στην ενεργό διατομή). Η $n = 0$ αυτή σκέδαση που αντιστοιχεί σε σφαιρικά συμμετρικές ταλαντώσεις της σφαίρας μεγιστοποιείται με την αύξηση του λόγου ρ_o/ρ_i μια και σφαίρα από όχι πυκνό υλικό μέσα σε υγρό μπορεί να δώσει εντονότερες ιδιοταλαντώσεις και άρα εντονότερη σκέδαση σε σχέση με σφαίρα από πυκνό υλικό.

Εξάρτηση από την σκληρότητα των υλικών c_{1o}/c_{1o} και c_{1i}/c_{1i} : Όσον αφορά την εξάρτηση της ενεργού διατομής από την σκληρότητα της σφαίρας, c_{1i}/c_{1i} , και του περιβάλλοντος μέσου, c_{1o}/c_{1o} , αξίζει να σημειωθεί ότι τα αποτελέσματα σε όλες τις περιπτώσεις που μελετήθηκαν φάνηκαν να είναι πολύ πιο ευαίσθητα στην σκληρότητα του περιβάλλοντος μέσου απ’ ότι στη σκληρότητα της σφαίρας. Έτσι η περίπτωση σφαίρας από υγρό σε στερεό (υγρό) μέσο δίνει πολύ παρόμοια ενεργό διατομή με την περίπτωση σφαίρας από στερεό σε στερεό (υγρό) μέσο (όταν ο λόγος ταχυτήτων και πυκνοτήτων των δύο υλικών είναι ο ίδιος). Ανάλογα, αναμένεται και για το χάσμα η ίδια σχετική έλλειψη ευαισθησίας στη σκληρότητα των σκεδαστών σε σχέση με την ευαισθησία στη σκληρότητα του περιβάλλοντος τους.

2.3.3 Σχετική θέση στενών ζωνών, χάσματος και συντονισμών της ενεργού διατομής

Σε όλες τις περιπτώσεις υλικών που είχαν μελετηθεί αρχικά (με συγκέντρωση σκεδαστών 10-60%) και που έδειξαν να εμφανίζουν ένα χάσμα, το χάσμα αυτό βρέθηκε να είναι περίπου στο μέσο μεταξύ πρώτου και δεύτερου συντονισμού της ενεργού διατομής με το εύρος του πολύ μικρότερο από την απόσταση των δύο αυτών κορυφών. Οι στενές ζώνες σε όλες τις περιπτώσεις βρέθηκαν να είναι πολύ κοντά στους συντονισμούς ενώ η ταύτιση τους με τους συντονισμούς είναι τόσο μεγαλύτερη όσο πιο στενή είναι η ζώνη.

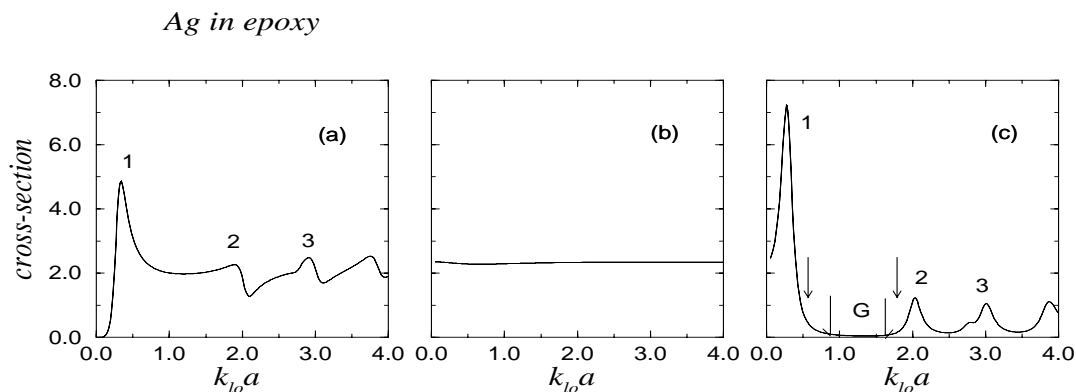
Εκτεταμένη μελέτη της θέσης του χάσματος και των στενών ζωνών σαν συνάρτηση της συγκέντρωσης των σκεδαστών έδειξε ότι η πρώτη εμφάνιση του χάσματος (σε πολύ χαμηλές συγκεντρώσεις) συμβαίνει πολύ κοντά στον πρώτο συντονισμό. Όσο η συγκέντρωση αυξάνει το χάσμα απομακρύνεται από το συντονισμό πλησιάζοντας το μέσο δυο διαδοχικών κορυφών, θέση στην οποία σταθεροποιείται μέχρι την εξαφάνιση του (για μεγάλες συγκεντρώσεις) ενώ στενές ζώνες εμφανίζονται πολύ κοντά στους συντονισμούς. Τα αποτελέσματα αυτά είναι πολύ παρόμοια με αντίστοιχα αποτελέσματα στην περίπτωση βαθμωτών κυμάτων [14] και απόλυτα συνεπή με τη βασική ιδέα του LCAO. Σε χαμηλές συγκεντρώσεις η εμφάνιση του χάσματος πολύ κοντά σε ένα συντονισμό μπορεί να αποδοθεί στο ότι στις συγκεντρώσεις αυτές η διάδοση του κύματος γίνεται κυρίως μέσω του περιβάλλοντος μέσου και οι σκεδαστές απλώς αποτελούν εμπόδιο για αυτή τη διάδοση. Άρα το χάσμα εμφανίζεται στην περιοχή έντονης σκέδασης από καθένα σκεδαστή. Όσο η συγκέντρωση αυξάνει οι καταστάσεις συντονισμού γειτονικών σφαιρών αλληλοεπικαλύπτονται δίνοντας ζώνες διάδοσης και προσφέροντας έτσι στο κύμα ένα άλλο κανάλι διάδοσης, προτιμητέο σ' αυτή την περιοχή συγκεντρώσεων (όπου η διάδοση μέσω του περιβάλλοντος μέσου είναι περισσότερο δύσκολη). Έτσι το χάσμα κινείται προς την περιοχή συχνοτήτων ανάμεσα στους συντονισμούς ενώ η θέση των συντονισμών ταυτίζεται με τη θέση των στενών ζωνών του συστήματος (υβριδισμός ή απώθηση των ιδιοκαταστάσεων είναι πιθανοί λόγοι για τους οποίους δεν υπάρχει ακριβής ταύτιση μεταξύ στενών ζωνών και συντονισμών).

Τα παραπάνω αποτελέσματα αναφέρονται περισσότερο αναλυτικά και πιστοποιούνται με διαγράμματα στο παράρτημα Δ.

2.3.4 Βέλτιστες συνθήκες για το χάσμα και ερμηνεία τους

Όπως αναφέρθηκε στην εισαγωγή αυτού του κεφαλαίου ένα αξιοσημείωτο και μη αναμενόμενο αποτέλεσμα της μελέτης της δομής ζώνης είναι το ότι ενώ το χάσμα απουσία διαφοράς πυκνοτήτων ευνοείται από μεγάλο λόγο c_{l0}/c_{li} , στην παρουσία διαφοράς πυκνοτήτων βρέθηκαν πολύ μεγαλύτερα χάσματα σε υλικά με λόγο ταχυτήτων πολύ κοντά στη μονάδα απ' ότι σε υλικά με μεγάλο λόγο c_{l0}/c_{li} (με τον λόγο των πυκνοτήτων τον ίδιο και στις δύο περιπτώσεις). Ρεαλιστικές περιπτώσεις τέτοιων συστημάτων είναι σφαίρες από βαρύ μέταλλο (πχ. Ag, χάλυβα) περιοδικά τοποθετημένες σε πλαστικό (πχ. epoxy, PMMA).

Τυπική μορφή της ενεργού διατομής στην περίπτωση αυτών των μεγάλων χασμάτων βρέθηκε να είναι αυτή του Σχ.2.3(a). Η ενεργός διατομή αποτελείται από έντονους (υψηλούς κι ευρείς) συντονισμούς, σχετικά απομακρυσμένους μεταξύ τους, με μια



Σχ. 2.3: (a) : Ενεργός διατομή για σκέδαση διαμήκους κύματος από σφαίρα από άργυρο δυθισμένη σε epoxy. (b) : Ενεργός διατομή για σκέδαση από άπειρα σκληρή σφαίρα δυθισμένη σε epoxy. (c) : Ενεργός διατομή που προκύπτει αν από το πλάτος σκέδασης της σφαίρας από άργυρο αφαιρέσουμε το πλάτος σκέδασης της άπειρα σκληρής σφαίρας. a : ακτίνα σφαίρας, $k_{l0} = \omega/c_{l0}$ ο διαμήκης κυματάριθμος στο epoxy. Ο αριθμός δίπλα ή πάνω από κάθε συντονισμό δηλώνει την υπεύθυνη για την προέλευσή του σφαιρική αρμονική. Τα βέλη στο (c) δείχνουν τη θέση των στενών ζωνών ενώ το διπλό βέλος που πλαισιώνει το γράμμα G δείχνει τα όρια του μέγιστου χάσματος στο *fcc* περιοδικό πρόβλημα σφαιρών από άργυρο σε epoxy.

περιοχή ισχυρής σκέδασης ανάμεσα σ' αυτούς. Η σκέδαση στην περιοχή ανάμεσα στους συντονισμούς (υπόδαθρο) οφείλεται σχεδόν αποκλειστικά σε συνεισφορά της άπειρα σκληρής σφαίρας (δες υποκεφάλαιο 2.3.1) όπως φαίνεται στο Σχ.2.3(c) όπου η συνεισφορά αυτή έχει αφαιρεθεί και οι συντονισμοί αναδεικνύονται καθαρά. Το χάσμα κι εδώ (δες Σχ.2.3(c)) εμφανίζεται στην περιοχή ανάμεσα στους συντονισμούς ενώ στενές ζώνες διάδοσης εμφανίζονται κοντά σ' αυτούς.

Μετά από συστηματική μελέτη αποδείχτηκε ότι οποτεδήποτε στην ενεργό διατομή σκέδασης εμφανίζονται έντονες κορυφές, σχετικά απομακρυσμένες, χωρισμένες από υψηλό υπόδαθρο λόγω συνεισφοράς άπειρα σκληρής σφαίρας, εμφανίζεται μεγάλο χάσμα στη δομή ζώνης του αντίστοιχου περιοδικού συστήματος.

Το παραπάνω αξιοσημείωτο αποτέλεσμα μπορεί να κατανοηθεί αν δεχθεί κανείς την ύπαρξη δύο οριακών καναλιών διάδοσης όπως έχει ήδη συζητηθεί. Το ένα κανάλι είναι μέσω του περιβάλλοντος τις σφαίρες μέσω ενώ το άλλο πηγαίνοντας από κάθε σφαίρα στις γειτονικές της μέσω των αλληλοεπικαλυπτόμενων καταστάσεων συντονισμού τους (στις περισσότερες περιπτώσεις χρησιμοποιούνται και τα δύο κανάλια).

Στην περιοχή ανάμεσα στους συντονισμούς, όπου η σκέδαση οφείλεται στην άπειρα σκληρή σφαίρα, κανένα από τα δύο αυτά κανάλια δεν είναι προσβάσιμο. Το κύμα δεν μπορεί να χρησιμοποιήσει τις σφαίρες για τη διάδοσή του αφού και δεν μπορεί να τις διαπεράσει εύκολα κι ούτε υπάρχει συντονισμός κοντά. Επίσης δεν μπορεί να χρησιμοποιήσει το περιβάλλον μέσω λόγω της ισχυρής σκέδασης. Έτσι γίνεται εύκολη η δημιουργία χάσματος σε αυτή την περιοχή. Επιπλέον, η μεγάλη απόσταση των συντονισμών (λόγω έλλειψης διαφοράς ταχυτήτων) επιτρέπει ένα αρκετά μεγάλο

εύρος του χάσματος¹⁶. Στην περιοχή των συντονισμών από την άλλη, το μεγάλο εύρος τους (πράγμα που δείχνει μεγάλη εκροή ενέργειας από το εσωτερικό της σφαίρας στο εξωτερικό της και άρα εύκολη αλληλοεπικάλυψη μεταξύ των συντονισμών γειτονικών σφαιρών) κάνει προτιμητέα τη διάδοση του κύματος μέσω των σφαιρών δίνοντας ζώνες διάδοσης όπως φαίνεται στο Σχ.2.3(c).

Τα παραπάνω, σε συνδυασμό με το ρόλο του c_o/c_i που συζητήθηκε στο υποκεφάλαιο 2.3.2, δείχνουν ότι ο λόγος που ευνοεί η μικρή διαφορά ταχυτήτων στις περιπτώσεις συστημάτων όπου υπάρχει ήδη διαφορά στις παραμέτρους των υλικών λόγω των πυκνοτήτων είναι ότι από τη μία δίνει ισχυρό υπόβαθρο λόγω άπειρα σκληρής σφαίρας (αν προσέξει κανείς τόσο την αντίθεση πυκνοτήτων όσο και την αντίθεση ταχυτήτων και σταθερών Lamé μπορεί να δει ότι σφαίρα από βαρύ μέταλλο σε ελαφρύ υλικό με το λόγο c_o/c_i όχι μεγάλο είναι κοντύτερα σε παραμέτρους στη άπειρα σκληρή σφαίρα θυθισμένη στο ίδιο υλικό) επιτρέποντας το άνοιγμα του χάσματος κι από την άλλη κρατά τους συντονισμούς μακριά επιτρέποντας στο χάσμα να γίνει αρκετά ευρύ.

Θα πρέπει να αναφέρουμε τέλος ότι, σύμφωνα με τα παραπάνω, κάποιος θα περίμενε μεγάλο χάσμα σε περιπτώσεις ενεργού διατομής που αποτελείται από υψηλούς κι ευρείς συντονισμούς χωρισμένους από υψηλό υπόβαθρο λόγω συνεισφοράς άδειας σφαίρας. Αυτό θα μπορούσε να συμβεί για σφαίρα χαμηλής πυκνότητας και ταχύτητας σε υψηλής πυκνότητας και ταχύτητας περιβάλλον μέσο με το περιβάλλον μέσο να είναι ρευστό. Λόγω του μεγάλου όμως του υψηλού c_o/c_i που απαιτείται για την μεγαλύτερη συνεισφορά της άδειας σφαίρας στο υπόβαθρο, οι συντονισμοί της ενεργού διατομής σ' αυτή την περίπτωση δεν θα είναι αρκετά απομακρυσμένοι. Δεν πιστεύουμε έτσι ότι η περίπτωση αυτή ευνοεί ένα αρκετά ευρύ χάσμα.

¹⁶Υπενθυμίζεται ότι το εύρος του χάσματος είναι μικρότερο από την απόσταση ανάμεσα στους συντονισμούς.

3

Ακουστικά και ελαστικά κύματα σε τυχαία μέσα - CPA

3.1 Εισαγωγή

Όπως έχει ήδη αναφερθεί, η μελέτη της διάδοσης κλασικών κυμάτων σε τυχαία μέσα - μέσα στα οποία σκεδαστές είναι τυχαία τοποθετημένοι σε ομογενές υλικό - έχει γίνει αντικείμενο ιδιαίτερου ενδιαφέροντος τα τελευταία χρόνια για τους φυσικούς στερεάς κατάστασης λόγω της σύνδεσής της με το γνωστό από τα ηλεκτρονία πρόβλημα του εντοπισμού. Η μελέτη αυτή βασίζεται στον υπολογισμό μακροσκοπικών χαρακτηριστικών της διάδοσης όπως ταχύτητα φάσης, ομάδας και ενέργειας (c_{ph} , v_g και v_E αντίστοιχα), μέση ελεύθερη διαδρομή σκέδασης, l_s , και μεταφοράς, l_t , παράμετρος εντοπισμού, $kl_s = (\omega/c_{ph})l_s$, κοκ.

Παρά τις αντιστοιχίες με το ηλεκτρονικό πρόβλημα, οι οποίες δίνουν δυνατότητα προσανατολισμού στο πρόβλημα των κλασικών κυμάτων και πιθανής πρόβλεψης και κατανόησης αποτελεσμάτων, υπάρχουν βασικές διαφορές μεταξύ κλασικών κυμάτων και ηλεκτρονίων και ο έλεγχος για το αν οι διαφορές αυτές αποτελούν πηγή νέας φυσικής έδωσε ώθηση στο ενδιαφέρον. Οι διαφορές έγκεινται *i*) στη γραμμική σχέση διασποράς των κλασικών κυμάτων σε ομογενή μέσα - η οποία πηγάζει από την δεύτερη τάξη της χρονικής παραγωγού στην κυματική εξίσωση, *ii*) στο γεγονός ότι το δυναμικό στην περίπτωση των κλασικών κυμάτων είναι συνάρτηση της συχνότητας¹, ω και *iii*) στο ότι οι κλασικοί σκεδαστές δεν είναι σημειακοί αλλά μακροσκοπικά σώματα.

Η διάδοση σε τυχαία μέσα έχει μελετηθεί εκτεταμένα τόσο για βαθμωτά όσο και για ηλεκτρομαγνητικά (HM) κύματα (για μια ανασκόπηση δεξ αναφορές [26, 27, 28, 29]). Έχουν αναπτυχθεί διάφορες μέθοδοι, οι περισσότερες βασισμένες σε θεωρίες φαινομένου μέσου (effective medium theories) και ιδιαίτερα σε επεκτάσεις της - γνωστής από το ηλεκτρονικό πρόβλημα - “προσέγγισης σύμφωνου δυναμικού” (CPA : Coherent Potential Approximation) [30, 29]. Η CPA, η οποία υπολογίζει ένα ομογενές φαινόμενο μέσο σαν προσέγγιση των μέσων ιδιοτήτων του τυχαίου, έδωσε πολύ καλά - συγκρινόμενα με το πείραμα - αποτελέσματα τόσο για βαθμωτά όσο και για ηλεκτρομαγνητικά κύματα. Έχουν μελετηθεί επίσης τα όρια ισχύος των διαφόρων θεωριών και προσεγγίσεων και έχει συζητηθεί εκτεταμένα το φυσικό νόημα των χαρακτηριστικών μεγεθών της διάδοσης [29, 31].

Από πειραματική άποψη το πιο ενδιαφέρον αποτέλεσμα προήλθε από μετρήσεις του συντελεστή διάχυσης, $D (= v_E l_t / 3)$, για διάδοση ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων [32, 33]. Οι μετρήσεις αυτές έδειξαν ότι η ταχύτητα ενέργειας, v_E , η οποία είναι η

¹ $\nabla^2 \phi + \frac{\omega^2}{c^2(\mathbf{r})} \phi = 0 \Rightarrow \nabla^2 \phi + \frac{\omega^2}{c_0^2} \phi + \omega^2 [\frac{1}{c^2(\mathbf{r})} - \frac{1}{c_0^2}] \phi = 0.$

σωστή ταχύτητα για την περιγραφή της διάδοσης της ενέργειας σε ένα τυχαίο μέσο, δεν ταυτίζεται εν γένει ούτε με την ταχύτητα φάσης ούτε με την ταχύτητα ομάδας. Για χαμηλές συγκεντρώσεις σκεδαστών η v_E βρέθηκε να είναι μικρότερη από τις προηγούμενες δύο ιδιαίτερα σε συχνότητες κοντά στις συχνότητες συντονισμού του ενός σκεδαστή ενώ σε υψηλότερες συγκεντρώσεις η εξάρτηση της από τη συχνότητα φάνηκε να είναι ασθενής.

Οι παραπάνω μετρήσεις έστρεψαν ένα σημαντικό μέρος του ενδιαφέροντος στον υπολογισμό της v_E (ο οποίος δεν μπορεί να γίνει άμεσα μέσω CPA). Ακριδής θεωρία αναπτύχθηκε μόνο στο όριο χαμηλών συγκεντρώσεων σκεδαστών και για βαθμωτά κύματα [32, 34, 35, 31]. Η θεωρία αυτή - βασισμένη στο όριο χαμηλών συγκεντρώσεων της εξίσωσης Boltzmann - επεκτάθηκε και για ΗΜ κύματα με ένα μάλλον ευριστικό τρόπο χωρίς να λαμβάνεται υπόψη από την αρχή ο διανυσματικός χαρακτήρας των κυμάτων αυτών [32, 34, 35, 31]. Για τις υψηλές συγκεντρώσεις, μια προσπάθεια προσέγγισης της v_E αποτελεί ένας συνδυασμός της θεωρίας χαμηλών συγκεντρώσεων με μια επέκταση της CPA [36, 37]. Θα πρέπει να αναφερθεί τέλος μια καινούρια μέθοδος για τον υπολογισμό της v_E βασισμένη επίσης στην ιδέα της CPA, γνωστή σαν CPA ενέργειας [38, 39], η οποία αναπτύχθηκε πρόσφατα και η οποία φαίνεται να προσεγγίζει τα πειραματικά αποτελέσματα τόσο για υψηλές όσο και για χαμηλές συγκεντρώσεις. Οι χαμηλές τιμές της v_E κοντά στους συντονισμούς σε χαμηλές συγκεντρώσεις αποδόθηκαν στην καθυστέρηση του κύματος μέσα στους σκεδαστές στη γειτονιά των συντονισμών. Όσο η συγκέντρωση αυξάνεται η καθυστέρηση αυτή γίνεται μικρότερη - δίνοντας πιο ομαλή εξάρτηση από τη συχνότητα στην v_E - λόγω του ότι οι καταστάσεις συντονισμού γειτονικών σκεδαστών αλληλοεπικαλύπτονται προσφέροντας στο κύμα τη δυνατότητα να μεταδίδει εύκολα, μέσω αυτών, από τον ένα σκεδαστή στον άλλο [32, 34, 35, 29, 31].

Ενώ η CPA και οι επεκτάσεις της έχουν χρησιμοποιηθεί εκτεταμένα τόσο για βαθμωτά όσο και για ΗΜ κύματα, η μελέτη της διάδοσης ακουστικών κι ελαστικών κυμάτων σε τυχαία μέσα είναι πολύ λιγότερο εκτεταμένη. Το γεγονός αυτό οφείλεται από τη μια στις θεωρητικές δυσκολίες αυτής της μελέτης κι από την άλλη στην έλλειψη αρκετών αξιόπιστων πειραμάτων. Οι θεωρητικές δυσκολίες πηγάζουν από (i) τον πλήρως διανυσματικό χαρακτήρα των ελαστικών κυμάτων (οι ήδη υπάρχουσες θεωρίες είχαν αρχικά αναπτυχθεί για βαθμωτά κύματα και στις περισσότερες περιπτώσεις δεν υπάρχει μια εύκολη και προφανής επέκταση τους στην περίπτωση διανυσματικών κυμάτων) (ii) την διαφορετική ταχύτητα μεταξύ διαμήκους κι εγκάρσιας συνιστώσας ελαστικού κύματος και το γεγονός της *ανάμιξης*² των δύο αυτών συνιστωσών στην παρουσία ανομοιογένειας (οι προκύπτουσες δυσκολίες θα συζητηθούν στην πορεία της παρουσίασης του κεφαλαίου) και (iii) τον μεγαλύτερο της μίας αριθμό παραμέτρων που χρειάζονται για τον πλήρη προσδιορισμό ενός ομογενούς ελαστικού μέσου³ (πυκνότητα και ταχύτητες). Το τελευταίο οδηγεί σε ανάγκη περισσότερων από μία εξισώσεων για τον υπολογισμό του φαινομένου μέσου, στα πλαίσια εφαρμογής της CPA, με αποτέλεσμα τόσο θεωρητικές δυσκολίες (ερώτημα για το ποιες είναι οι πιο κατάλληλες εξισώσεις για τον υπολογισμό) όσο και υπολογιστικές (προβλήματα σύγκλισης, πολλαπλές λύσεις κοκ.).

²Με τον όρο ανάμιξη δηλώνεται η μετατροπή διαμήκους κύματος σε εγκάρσιο κι αντίστροφα.

³Τόσο στη διάδοση βαθμωτών όσο και ΗΜ κυμάτων μία μόνο παράμετρος (πχ. η διηλεκτρική σταθερά) είναι αρκετή για να περιγράψει τη διάδοση του κύματος σε ένα ομογενές μέσο.

Τα πειράματα από την άλλη μεριά τα οποία θα μπορούσαν να είναι κίνητρο για θεωρητική μελέτη αφορούν κυρίως μετρήσεις ταχυτήτων σε περιοχές χαμηλών συγκεντρώσεων ή χαμηλών συχνοτήτων (περιοχές ασθενούς σκέδασης) [40, 41, 42, 43]. Οι - πιο ενδιαφέρουσες - περιοχές συχνοτήτων στις οποίες η διάδοση καθορίζεται από σκέδαση συντονισμού και συμβολή των σκεδαζομένων κυμάτων (περιοχές ισχυρής σκέδασης) είναι στην ουσία πειραματικά ανεξερεύνητες. Πρόσφατα, μετρήθηκε για πρώτη φορά συντελεστής διάχυσης, D , και μέση ελεύθερη διαδρομή μεταφοράς, l_t , - επιτρέποντας έτσι υπολογισμό της ταχύτητας ενέργειας, v_E - σε τυχαίο μέσο αποτελούμενο από σφαίρες γυαλιού σε νερό, σε περιοχές ισχυρής σκέδασης [44]. Μετρήθηκαν επίσης ταχύτητες φάσης και ομάδας και μέση ελεύθερη διαδρομή σκέδασης στο ίδιο σύστημα [45]. Τα πειράματα αυτά σε συνδυασμό με παλιότερα πειράματα μέτρησης ταχύτητας φάσης [40, 43] αποτελούν το κίνητρο για το δεύτερο μέρος της παρούσας εργασίας. Σκοπός, είναι ο έλεγχος και η επέκταση μεθόδων που αναπτύχθηκαν για βαθμωτά και ηλεκτρομαγνητικά κύματα στην περίπτωση των ελαστικών και ακουστικών κυμάτων. Οι μέθοδοι αυτοί είναι δύο επεκτάσεις της τυπικής CPA (γνωστές με το όνομα απλή CPA και coated CPA [36]) για τον υπολογισμό ταχυτήτων φάσεων, μέσω ελεύθερων διαδρομών και εκτίμηση της δυνατότητας εντοπισμού και η προαναφερθείσα CPA ενέργειας η οποία εστιάζει το ενδιαφέρον της στον επιπλέον υπολογισμό της ταχύτητας ενέργειας.

Όσον αφορά τη δομή της παρουσίασης του κεφαλαίου : (α) Γίνεται μια συνοπτική αναφορά σε ορισμό και ανάλυση των μακροσκοπικών χαρακτηριστικών της διάδοσης και επίσης στα όρια ισχύος των διαφόρων θεωριών και προσεγγίσεων. Η αναφορά γίνεται για την περίπτωση βαθμωτών κυμάτων με τα αποτελέσματα να ισχύουν επίσης για ακουστικά κύματα⁴. Για ελαστικά κύματα υπάρχουν κάποιες ιδιαιτερότητες οι οποίες σημείο προς σημείο θα συζητηθούν στην πορεία της παρουσίασης του κεφαλαίου. (β) Παρουσιάζονται και αναλύονται οι μέθοδοι που χρησιμοποιούνται. Η παρουσίαση των μεθόδων, στα σημεία που σκοπός είναι η κατανόηση των βασικών ιδεών, γίνεται και εδώ (λόγω απλότητας και δυνατότητας σύγκρισης) για βαθμωτά κύματα. Σε δεύτερο δήμα συζητούνται οι ιδιαιτερότητες των ακουστικών (όπου υπάρχουν) και των ελαστικών κυμάτων. (γ) Παρουσιάζονται αποτελέσματα που έχουν εξαχθεί αναλυτικά για διάφορες οριακές περιπτώσεις και (δ) παρουσιάζονται και σχολιάζονται αριθμητικά αποτελέσματα.

3.2 Μακροσκοπικά χαρακτηριστικά της διάδοσης

Σε ένα ομογενές μέσο χωρίς απορρόφηση ένα επίπεδο κύμα χαρακτηρίζεται από τη συχνότητα, ω και τη διεύθυνση διάδοσης. Πληροφορία για τη διεύθυνση διάδοσης δίνει η διεύθυνση του πραγματικού (για ομογενή μέσα χωρίς απορρόφηση) κυματανύσματος, \mathbf{k} , του οποίου το μέτρο συνδέεται με τη συχνότητα και την ταχύτητα φάσης με τη γνωστή για σωματίδια χωρίς μάζα σχέση διασποράς $\omega = kc_{ph}$. Η c_{ph} είναι η ταχύτητα με την οποία διαδίδεται ένα σταθερό μέτωπο του κύματος και στην περίπτωση αυτή ταυτίζεται με την ταχύτητα ομάδας, $v_g = d\omega/dk$, την ταχύτητα δηλαδή διάδοσης της ενέργειας ενός σύμφωνου παλμού.

Σε ένα τυχαίο μέσο αντίθετα, λόγω των πολλαπλών σκεδάσεων, η σχέση διασποράς παύει να έχει την παραπάνω απλή μορφή ή και να ισχύει ως έννοια. Οι πολλαπλές

⁴Τα ακουστικά κύματα για σταθερή πυκνότητα ταυτίζονται με τα βαθμωτά.

σκεδάσεις κάνουν το κύμα να χάνει τη φάση του, τυχαιοποιώντας τη διεύθυνση του. Η τυχαιοποίηση αυτή, η οποία σε μεγάλο βαθμό είναι συνάρτηση του πόσο έντονη είναι η σκέδαση από κάθε ένα σκεδαστή και άρα συνάρτηση της συχνότητας, κάνει τις ταχύτητες διάδοσης να είναι επίσης συναρτήσεις της συχνότητας και σε περιπτώσεις ισχυρής σκέδασης και της διεύθυνσης. Το μέσο μήκος στο οποίο η συμφωνία φάσης διατηρείται σε ένα τυχαίο μέσο χαρακτηρίζεται σαν μέση ελεύθερη διαδρομή σκέδασης, l_s , του κύματος [46, 47]. Σε χαμηλές συγκεντρώσεις σκεδαστών ισχύει ότι $l_s = 1/n\sigma$ όπου n η συγκέντρωση των σκεδαστών και σ η ολική ενεργός διατομή σκέδασης από ένα σκεδαστή.

Στην περίπτωση ασθενούς σκέδασης ή λεπτών δειγμάτων, L , του τυχαίου μέσου τέτοιων ώστε $L \leq l_s$, (ακριβέστερα σε κλίμακες μήκους $L \leq l_s$) τα φαινόμενα πολλαπλής σκέδασης δεν παίζουν καθοριστικό ρόλο στη διάδοση (οι σκεδαστές είναι κατά κάποιο τρόπο ασυσχέτιστοι) και η αρχική φάση του κύματος σε μεγάλο βαθμό διατηρείται. Η περιοχή αυτή ($L \leq l_s$), η οποία χαρακτηρίζεται σαν περιοχή βαλλιστικής διάδοσης, είναι η περιοχή μέγιστης επιτυχίας των θεωριών φαινομένου μέσου, θεωρίες που βασίζονται σε απαιτήσεις πάνω στη μέση συνάρτηση Green⁵, $\langle G \rangle_c$. Επίσης είναι η περιοχή όπου μεγέθη όπως η ταχύτητα φάσης και ομάδας (ταχύτητες που σχετίζονται με σύμφωνη διάδοση του κύματος) έχουν κάποιο φυσικό νόημα [29, 31, 39].

Στην περίπτωση όπου το τυχαίο μέσο είναι σε διάσταση πολύ μεγαλύτερο από τη μέση ελεύθερη διαδρομή ($L \geq l_s$) οι πολλαπλές σκεδάσεις (οι οποίες, ακόμα κι ασθενείς, δρουν συσσωρευτικά) κυριαρχούν στον καθορισμό της διάδοσης. Το αποτέλεσμα είναι πλήρης απώλεια της φάσης του κύματος. Στην περιοχή αυτή ο σύμφωνος κυματικός χαρακτήρας επισκιάζεται από ένα χαρακτήρα διάχυσης⁶. Πληροφορία για τη διάχυση του κύματος δίνει το γινόμενο $\langle GG \rangle_c$. Έτσι, για την περιγραφή της διάδοσης σ' αυτή την περιοχή - η οποία χαρακτηρίζεται σαν περιοχή διάχυσης - χρειάζονται θεωρίες βασισμένες σε απαιτήσεις πάνω στο $\langle GG \rangle_c$ ή κατάλληλη τροποποίηση των θεωριών φαινομένου μέσου ώστε να περιγράφονται περισσότερο ικανοποιητικά τα φαινόμενα πολλαπλής σκέδασης. Επίσης εδώ η περιγραφή μέσω των ταχυτήτων φάσης και ομάδας χάνει το νόημα της και η διάδοση της ενέργειας μπορεί να περιγραφεί μόνο μέσω της ταχύτητας ενέργειας⁷, $v_E = 3D/l_t$ [29, 31, 39]. l_t είναι η λεγόμενη μέση ελεύθερη διαδρομή μεταφοράς η οποία ορίζεται σαν το μέσο μήκος στο οποίο το κύμα διατηρεί τη μνήμη της αρχικής του διεύθυνσης (φάσης) [46, 47]. Η μέση ελεύθερη διαδρομή μεταφοράς διαφέρει από την l_s ($\approx 1/n\sigma$) κατά το ότι περιέχει έναν όρο της μορφής $(1 - \cos\theta)$ στον υπολογισμό της ενεργού διατομής, σ , ενώ ταυτίζεται με αυτήν μόνο για ισοτροπική σκέδαση.

Όσον αφορά τέλος τη δυνατότητα εντοπισμού του κύματος, τη δυνατότητα δηλαδή ένας διαδιδόμενος παλμός να μετατραπεί σε εκθετικά αποσβενύμενο λόγω καταστροφικής συμβολής των πολλαπλά σκεδαζομένων κυμάτων, θα πρέπει να αναφερθεί ότι αυτό γενικά δεν είναι αναμενόμενο ούτε σε χαμηλές συχνότητες όπου η σκέδαση είναι ασθενής ούτε σε πολύ υψηλές όπου η σκέδαση περιγράφεται από

⁵Η συνάρτηση Green μπορεί να δώσει πληροφορία για ενδιαφέροντα μεγέθη όπως είναι η πυκνότητα καταστάσεων, η μέση ελεύθερη διαδρομή σκέδασης κοκ. Η μέση τιμή παίρνεται πάνω σε όλες τις δυνατές διατάξεις σκεδαστών.

⁶Η περιγραφή της διάδοσης της ενέργειας πολλαπλά σκεδαζομένων κυμάτων γίνεται μέσω της εξίσωσης διάχυσης.

⁷Σε περιοχές ασθενούς σκέδασης οι ταχύτητες c_{ph} , v_g και v_E είναι περίπου οι ίδιες.

τη γεωμετρική οπτική και φαινόμενα συμβολής δεν συμπεριλαμβάνονται. Μόνη δυνατότητα για εντοπισμό υπάρχει σε περιοχές συχνοτήτων που αντιστοιχούν σε μήκη κύματος συγκρίσιμα με την διάσταση των σκεδαστών (εκεί η ενεργός διατομή σκέδασης έχει την πλούσια σε δομή μορφή που παρουσιάστηκε στο κεφάλαιο 2). Ποσοτικά, ο έλεγχος για εντοπισμό γίνεται με εξέταση της παραμέτρου εντοπισμού $kl = (\omega/c_{ph}) \cdot l_s$. Η παράμετρος αυτή συγκρίνει το μήκος κύματος $\lambda (= 2\pi/k)$ με τη μέση ελεύθερη διαδρομή l_s . Εντοπισμός μπορεί να υπάρξει μόνο για τιμές της παραμέτρου kl μικρότερες από μονάδα ενώ το ακριβές όριο μετάδοσης, $(kl)_c$, από εκτεταμένες σε εντοπισμένες καταστάσεις δεν έχει προσδιοριστεί ακριβώς. Προσπάθεια υπολογισμού της κρίσιμης τιμής $(kl)_c$, αποτέλεσε η λεγόμενη PWA [48, 49, 50] στην οποία το πρόβλημα της εύρεσης εντοπισμένων καταστάσεων σε τυχαίο μέσο συνδέεται με το πρόβλημα εύρεσης δέσιμων καταστάσεων σε πηγάδι δυναμικού. Η θεωρία αυτή δίνει $(kl)_c = 0.844$ [48, 49, 50] ενώ άλλη τιμή που υπάρχει στη βιβλιογραφία, αποτέλεσμα διαφορετικού τρόπου προσέγγισης, είναι η $(kl)_c = 0.911$ [29].

3.3 CPA

Όπως αναφέρθηκε στην εισαγωγή, η CPA αντικαθιστά το τυχαίο μέσο με ένα *ομογενές* φαινόμενο (effective) μέσο. Το φαινόμενο αυτό μέσο χαρακτηρίζεται από ένα μιγαδικό, εξαρτώμενο από τη συχνότητα κυματοδιάνυσμα διάδοσης, $q_e(\omega)$, (ή ισοδύναμα μια μιγαδική ταχύτητα, $c_e = \omega/q_e$) το οποίο και υπολογίζεται αυτοσυνεπώς⁸ [30, 29]. Το πραγματικό μέρος του q_e , χαρακτηρίζεται σαν το επανακανονικοποιημένο κυματοδιάνυσμα διάδοσης στο τυχαίο μέσο και δίνει την ταχύτητα φάσης, $c_{ph} = \omega/\Re[q_e]$ ενώ το φανταστικό μέρος συνδέεται με την απώλεια της φάσης του κύματος λόγω πολλαπλών σκεδάσεων και δίνει τη μέση ελεύθερη διαδρομή σκέδασης, $l_s = 1/2\Im[q_e]$.

Το φαινόμενο μέσο, q_e , στα πλαίσια όλων των εκδοχών της CPA υπολογίζεται από την *βασική απαίτηση* η συνάρτηση Green του μέσου αυτού, G_e , να είναι ίση με την μέση τιμή της συνάρτησης Green του πραγματικού μέσου, $\langle G \rangle_c$, όπου η μέση τιμή παίρνεται πάνω σε όλες τις δυνατές διατάξεις της τυχειότητας [30]. Η συνθήκη αυτή μαθηματικά εκφράζεται σαν

$$\langle G \rangle_c = G_e \left(= \frac{1}{q_e^2 - k^2} \right) \quad (3.1)$$

Το δεξιό μέλος στην 3.1 είναι η έκφραση στο χώρο των ορμών (k -χώρο) της συνάρτησης Green ομογενούς μέσου με κυματόνυσμα q_e .

Εστω τώρα ένα ομογενές μέσο που χαρακτηρίζεται από από ένα κυματόνυσμα k_m (ή ισοδύναμα μια ταχύτητα $c_m = \omega/k_m$). Τότε η συνάρτηση Green, G , του τυχαίου μέσου μπορεί να γραφεί σαν [30, 29]

$$G = G_m + G_m T_m G_m \quad (3.2)$$

⁸ Αναφερόμαστε σε μέσα που χαρακτηρίζονται πλήρως από μόνο ένα κυματοδιάνυσμα. Η επέκταση στην περίπτωση των ελαστικών κι ακουστικών κυμάτων θα συζητηθεί παρακάτω.

όπου G_m είναι η συνάρτηση Green του ομογενούς αυτού μέσου και T_m ο καλά γνωστός από τη θεωρία διαταραχών τελεστής σκέδασης⁹, ο οποίος περιέχει όλη την πληροφορία για σκέδαση ανάμεσα στο ομογενές μέσο, k_m , και το τυχαίο (ο δείκτης m δηλώνει ότι ο T ορίζεται σχετικά με το μέσο k_m).

Παίρνοντας μέση τιμή στην Εξ.3.2 προκύπτει η

$$\langle G \rangle_c = G_m + G_m \langle T_m \rangle_c G_m \quad (3.3)$$

η οποία στον k -χώρο μπορεί να γραφεί σαν [29]:

$$\langle G \rangle_c = \frac{1}{k_m^2 - k^2 - \Sigma_m(\omega)} \quad (3.4)$$

Στη σχέση 3.4 όλη η πληροφορία για τη σκέδαση έχει μεταφερθεί από τον $\langle T_m \rangle_c$ στην μιγαδική συνάρτηση $\Sigma_m(\omega)$ γνωστή σαν ιδιοενέργεια (self-energy)¹⁰. Η Σ για ασθενή σκέδαση είναι ανάλογη του $\langle T \rangle_c$ [29, σελ.55] ενώ ο δείκτης m μπαίνει κι εδώ για να δηλώσει σκέδαση σχετικά με το μέσο k_m .

Αξίζει να αναφερθεί τέλος ότι ο τελεστής σκέδασης T μπορεί να γραφεί σαν ένα άπειρο άθροισμα της μορφής [30]

$$T_m = \sum_i t_i + \sum_{i \neq j} t_i G_m t_j + \sum_{i \neq j \neq k} t_i G_m t_j G_m t_k + \dots \quad (3.5)$$

όπου οι τελεστές t_i αντιπροσωπεύουν τη σκέδαση από κάθε δομική μονάδα του τυχαίου μέσου που περιβάλλεται από το μέσο k_m ενώ όροι πάνω από τον πρώτο περιγράφουν φαινόμενα πολλαπλής σκέδασης μεταξύ των διαφόρων δομικών μονάδων.

Οι παραπάνω τύποι (Εξ.3.1-Εξ.3.5) είναι η βάση για την ανάλυση και κατανόηση των εκδοχών της CPA που χρησιμοποιούνται στην παρούσα δουλειά. Οι εκδοχές αυτές όπως ήδη αναφέρθηκε, είναι η απλή και η coated CPA [36] οι οποίες είναι άμεσες επεκτάσεις της τυπικής CPA κι επίσης η CPA ενέργειας [38, 39] η οποία είναι απλώς βασισμένη στην ιδέα της CPA.

3.3.1 Τυπική CPA

Η βασική συνθήκη για τον υπολογισμό του φαινόμενου μέσου, q_e , στα πλαίσια της τυπικής CPA [30, 29] είναι ο μηδενισμός της κατά μέσο όρο σκέδασης ανάμεσα στο φαινόμενο μέσο, q_e , και το πραγματικό τυχαίο σύστημα [30, 29]. Η συνθήκη αυτή μαθηματικά εκφράζεται σαν

$$\langle T_e \rangle_c = 0 \quad (3.6)$$

Η Εξ.3.6 δεν είναι τίποτε άλλο παρά ο τρόπος υλοποίησης, στα πλαίσια της τυπικής CPA, της βασικής απαίτησης της CPA σύμφωνα με την οποία η συνάρτηση Green του φαινόμενου μέσου θα πρέπει να ταυτίζεται με τη μέση συνάρτηση Green του τυχαίου. Πράγματι, όπως εύκολα μπορεί να δει κανείς, αν $\langle T_m \rangle_c = 0$ στην

⁹Τόσο ο T όσο και η G είναι ταυστές. Συναρτήσεις είναι οι αναπαραστάσεις τους στον πραγματικό χώρο ή στον χώρο των οσμών.

¹⁰Η Σ γενικά είναι συνάρτηση τόσο του ω όσο και του \mathbf{k} . Για την ανεξαρτησία της Σ από το \mathbf{k} δεξ αναφορά [29] σελ.67.

Εξ.3.3, η βασική απαίτηση της CPA ικανοποιείται αυτόματα και το ομογενές μέσο G_m , ταυτίζεται με το προς υπολογισμό φαινόμενο μέσο G_e ($G_m = G_e = \langle G \rangle_c \Rightarrow T_m = T_e$). Σ' αυτή την περίπτωση $\Sigma_m(\omega) = \Sigma_e(\omega) = 0$ και το k_m είναι το κυματοδιάνυσμα διάδοσης q_e .

Η εφαρμογή της συνθήκης 3.6 απαιτεί υπολογισμό της συνολικής σκέδασης ανάμεσα στο φαινόμενο μέσο και το τυχαίο. Το γεγονός ότι η σκέδαση αυτή, εν γένει, δεν μπορεί να υπολογιστεί ακριβώς, οδηγεί στην ανάγκη προσέγγισης. Με τη *βασική προσέγγιση της CPA* η συνθήκη $\langle T \rangle_c = 0$ (ο δείκτης e στο εξής θα παραλείπεται) αντικαθίσταται από την πιο χαλαρή απαίτηση [30]

$$\langle t \rangle_c = 0 \quad (3.7)$$

όπου $\langle t \rangle_c = \langle t_i \rangle_c$ (δες Εξ.3.5) η μέση τιμή της σκέδασης από κάθε ανεξάρτητη δομική μονάδα του τυχαίου μέσου που περιβάλλεται από το φαινόμενο. Το φαινόμενο μέσο δηλαδή αντικαθίσταται μόνο *τοπικά* από το τυχαίο και απαιτείται η σκέδαση που προκύπτει από την τοπική αυτή αντικατάσταση να είναι κατά μέσο όρο μηδέν.

Ερωτήματα που προκύπτουν είναι α) ποιές είναι οι συνέπειες της παραπάνω προσέγγισης όσον αφορά τα όρια ισχύος της μεθόδου και β) πως πρέπει να γίνει η τοπική αντικατάσταση που προαναφέρθηκε ώστε να αναπαρασταθεί καλύτερα το συγκεκριμένο τυχαίο μέσο. Πως θα διαλεχθούν δηλαδή οι δομικές μονάδες του τυχαίου μέσου που εμβαπτίζονται στο φαινόμενο.

Όσον αφορά το ερώτημα (α) αξίζει να παρατηρήσει κανείς ότι στο όριο όπου $\langle T \rangle_c \rightarrow 0$ η σκέδαση γίνεται αρκετά ασθενής. Αυτό σημαίνει ασθενή σκέδαση από κάθε σκεδαστή ξεχωριστά και άρα σκεδαστές ασυσχέτιστους μεταξύ τους. Αν δηλαδή t_i είναι η σκέδαση από τον σκεδαστή i τότε $\langle t_i t_j \rangle_{i \neq j} \approx \langle t_i \rangle \langle t_j \rangle$. Με βάση την εξίσωση 3.5 μπορεί να δει κανείς ότι η συνθήκη που προκύπτει μετά από την βασική προσέγγιση της CPA, Εξ.3.7, μηδενίζει τους τρεις πρώτους όρους στο ανάπτυγμα για τον $\langle T \rangle_c$. Περιμένουμε λοιπόν ότι αν μπορεί να γίνει $\langle T \rangle_c \approx 0$, η CPA θα είναι αρκετά ακριβής μια και όροι πάνω από τον τρίτο - σαν γινόμενα μικρών ποσοτήτων - δεν θα συνεισφέρουν σημαντικά. Περιμένουμε επίσης να αποτυγχάνει σε περιπτώσεις όπου όροι πάνω από τον τρίτο κυριαρχούν στο ανάπτυγμα του $\langle T \rangle_c$, περιπτώσεις δηλαδή όπου η σκέδαση κυριαρχείται από φαινόμενα πολλαπλής σκέδασης εντοπιζόμενα σε περιοχές συσσωματωμάτων σκεδαστών [30].

Όσον αφορά το ερώτημα (β), το ποιός δηλαδή είναι ο καταλληλότερος τρόπος τοπικής αντικατάστασης του φαινομένου μέσου από το τυχαίο, η απάντηση του δίνει ύπαρξη σε διάφορες εκδοχές της τυπικής CPA όπως είναι η απλή CPA και η coated CPA οι οποίες παρουσιάζονται αμέσως παρακάτω.

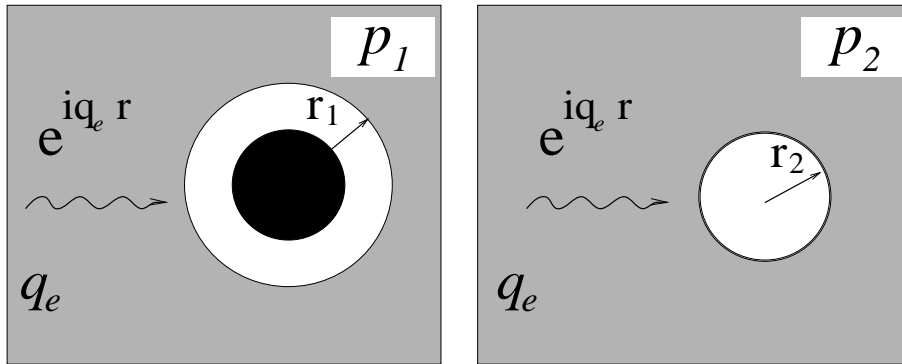
Στην παρουσίαση που ακολουθεί περιοριζόμαστε σε τυχαία συστήματα που αποτελούνται από όμοιους *σφαιρικούς σκεδαστές* (ακτίνας a) τοποθετημένους, σε ποσοστό όγκου f_s , μέσα σε ομογενές περιβάλλον μέσο. Οτι αφορά τους σκεδαστές θα χαρακτηρίζεται από τον δείκτη i (in), ότι αφορά το περιβάλλον μέσο από τον δείκτη o (out), ενώ ότι αφορά το φαινόμενο μέσο από τον δείκτη e (effective). Τόσο η απλή όσο και η coated CPA εφαρμόζονται με τον ίδιο τρόπο (όπως περιγράφεται παρακάτω) για κάθε κατηγορία κλασικών κυμάτων.

Απλή CPA

Στα πλαίσια της απλής CPA το φαινόμενο μέσο αντικαθίσταται τοπικά με πιθανότητα $p_1 = f_s$ από ένα σφαιρικό σκεδαστή όμοιο με τους σκεδαστές στο πραγματικό τυχαίο σύστημα (σκεδαστής τύπου 1) και με πιθανότητα $p_2 = 1 - f_s$ ένα σκεδαστή ίσης ακτίνας, a , από το υλικό του περιβάλλοντος μέσου (σκεδαστής τύπου 2).

Coated CPA

Στα πλαίσια της coated CPA [36, 39] το φαινόμενο μέσο αντικαθίσταται τοπικά με πιθανότητα p_1 από ένα σφαιρικό σκεδαστή όμοιο κι εδώ με τους σκεδαστές του τυχαίου συστήματος αλλά καλυμμένο με ένα σφαιρικό κέλυφος (ακτίνας r_1) από το υλικό του περιβάλλοντος μέσου (σκεδαστής τύπου 1). Αντικαθίσταται επίσης με πιθανότητα p_2 από μια σφαίρα ακτίνας r_2 από το υλικό του περιβάλλοντος μέσου (σκεδαστής τύπου 2) (δες, Σχ.3.1). Ο τρόπος αυτός αντικατάστασης αναπαριστά το γεγονός ότι στο πραγματικό τυχαίο σύστημα τα δύο υλικά (σκεδαστές-περιβάλλον) δεν είναι τοπολογικά ισοδύναμα μια και οι σκεδαστές είναι απομονωμένοι ενώ η φάση του περιβάλλοντος μέσου είναι συνεκτική. Με την έννοια αυτή περιμένει κανείς η coated CPA να περιγράφει καλύτερα, σε σχέση με την απλή, τη διάδοση σε τυχαία συστήματα χωρικά απομονωμένων σκεδαστών.



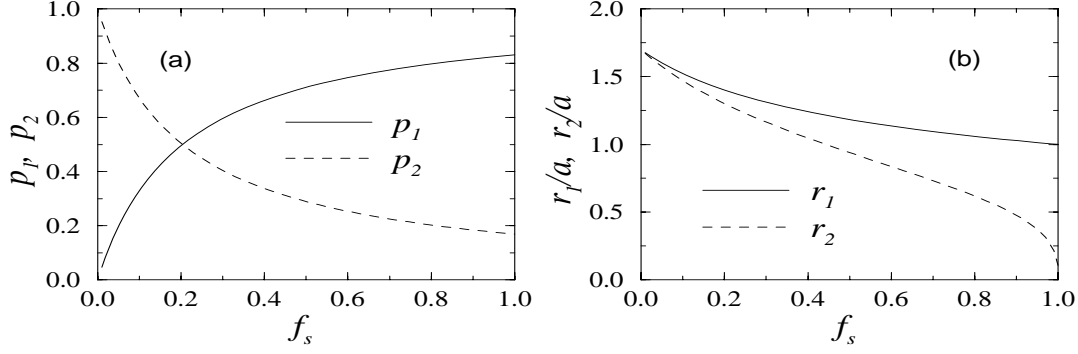
Σχ.3.1: Ο τρόπος που γίνεται η αντικατάσταση του φαινόμενου μέσου από το τυχαίο στα πλαίσια της coated CPA. Η σκιασμένη περιοχή παριστάνει το τυχαίο μέσο, η μαύρη σφαίρα ταυτίζεται με τους σκεδαστές στο τυχαίο σύστημα ενώ η άσπρη περιοχή με το περιβάλλον μέσο. Η σκέδαση υπολογίζεται θεωρώντας πρόσπτωση επίπεδου κύματος.

Οι ακτίνες r_1, r_2 και οι πιθανότητες p_1, p_2 , που προαναφέρθηκαν είναι συναρτήσεις του ποσοστού του όγκου, f_s , των σκεδαστών στο τυχαίο σύστημα. Αφετηρία για τον υπολογισμό τους είναι οι προφανείς ισότητες

$$p_1 + p_2 = 1 \quad (3.8)$$

$$\frac{V}{V_1 + V_2} = f_s \quad (3.9)$$

όπου $V = \frac{4}{3}\pi a^3$ και $V_i = \frac{4}{3}\pi r_i^3$ ($i = 1, 2$). Οι δύο παραπάνω συνθήκες, όπως εύκολα διαπιστώνει κανείς, δεν είναι αρκετές για τον υπολογισμό των p_i, r_i ($i = 1, 2$). Για



Σχ.3.2: Οι πιθανότητες p_1, p_2 και οι ακτίνες r_1, r_2 για τους δύο τύπους σκεδαστών στα πλαίσια της coated CPA, σαν συνάρτηση του ποσοστού του όγκου των σφαιρών, f_s .

την εύρεση επιπλέον συνθηκών ακολουθείται η παρακάτω διαδικασία. Θεωρείται το φαινόμενο μέσο να χωροπληρείται από μη αλληλοεπικαλυπτόμενες κυψελίδες Wigner-Seitz με όγκο $V_p = z^3 V$. Το z είναι ελεύθερη παράμετρος με την οποία γίνεται προσπάθεια να συσχετιστούν οι προς υπολογισμό ποσότητες. Στο κέντρο της κυψελίδας τοποθετείται ένας σκεδαστής τύπου 1 με πιθανότητα p_1 κι ένας σκεδαστής τύπου 2 με πιθανότητα p_2 .

Είναι προφανές ότι ισχύουν οι εξισώσεις

$$p_1 V \propto f_s \quad (3.10)$$

$$p_1(V_1 - V) + p_2 V_2 \propto 1 - f_s \quad (3.11)$$

όπου η σταθερά αναλογίας είναι η ίδια και στις δύο περιπτώσεις. Επιπλέον ο όγκος V_1 μπορεί να θεωρηθεί ίσος με $V_p/(n+1)$ όπου n ο μέσος αριθμός σφαιρών (πραγματικών σκεδαστών) μέσα στον όγκο V_p γύρω από την κεντρική. Ο n είναι ανάλογος με το ποσοστό του όγκου των σφαιρών, f_s , και με τον διαθέσιμο όγκο. Επειδή το z είναι ελεύθερη παράμετρος μπορούμε να διαλέξουμε τη σταθερά αναλογίας να είναι μονάδα, δηλαδή $n = f_s(z^3 - 1)$. Έτσι $V_1 = V z^3 / [f_s(z^3 - 1) + 1]$. Ομοια, $V_2 = V_p - \bar{n} V_1$ όπου ο \bar{n} , ο μέσος αριθμός σφαιρών στον όγκο V_p , είναι ανάλογος με τον διαθέσιμο όγκο V_p/V και το f_s . Παίρνοντας πάλι μονάδα τη σταθερά αναλογίας θα ισχύει ότι $V_2 = z^3(V - f_s V_1)$. Με τις παραπάνω επιλογές οι p_1, p_2 εξαρτώνται μόνο από το f_s και την ελεύθερη παράμετρο z μέσω των οποίων εκφράζονται σαν

$$p_1 = \frac{f_s z^3}{f_s z^3 + 1} \quad (3.12)$$

$$p_2 = \frac{1}{f_s z^3 + 1} \quad (3.13)$$

Ο υπολογισμός του z γίνεται από την απαίτηση τα αποτελέσματα να δίνουν γνωστά προσεγγιστικά αποτελέσματα για τις ταχύτητες και μέσες ελεύθερες διαδρομές στο όριο των μεγάλων μηκών κύματος ($\omega \rightarrow 0$). Βρέθηκε ότι η τιμή $z = 1.7$ προσεγγίζει αρκετά ικανοποιητικά τα αποτελέσματα αυτά. Με βάση το $z = 1.7$ οι ακτίνες r_1, r_2 και οι πιθανότητες p_1, p_2 σαν συνάρτηση της συγκέντρωσης f_s δείχνονται στο Σχ.3.2.

Εξισώσεις

Μετά την επιλογή των δομικών μονάδων του τυχαίου συστήματος που εμβαπτιζονται στο φαινόμενο μέσο το πρόβλημα για τον υπολογισμό του q_e μέσω της συνθήκης 3.7, ανάγεται στον υπολογισμό του ταυνοστή σκέδασης, t , για σκέδαση επίπεδου κύματος από κάθε μία δομική μονάδα. Ο t είναι συνάρτηση τόσο του προσπίπτοντος κυματανύσματος, έστω \mathbf{q}_e , όσο και του σκεδαζόμενου, έστω \mathbf{q}'_e και συνδέεται με το πλάτος σκέδασης με τη σχέση [29]

$$t_{\mathbf{q}_e, \mathbf{q}'_e} = -4\pi f(\mathbf{q}_e, \mathbf{q}'_e) (= -4\pi f(\theta, \phi)) \quad (3.14)$$

όπου θ και ϕ η πολική και αζιμουθιακή γωνία του διανύσματος θέσης. Το τελευταίο μέλος της παραπάνω ισότητας προκύπτει διαλέγοντας τη διεύθυνση του προσπίπτοντος κύματος να είναι εκείνη του $\hat{\mathbf{z}}$ άξονα και παίρνοντας υπόψη ότι η διεύθυνση του \mathbf{q}'_e ταυτίζεται με εκείνη του διανύσματος θέσης.

Με βάση τα παραπάνω, η συνθήκη της τυπικής CPA (Εξ.3.7) γίνεται

$$\langle f \rangle_c = 0 \quad (3.15)$$

Το πλάτος σκέδασης όμως στην περίπτωση των κλασικών κυμάτων (λόγω της μακροσκοπικής φύσης των σκεδαστών) δεν είναι απλώς αριθμός αλλά μια συνάρτηση των γωνιών και ένα βασικό ερώτημα είναι για ποιά τιμή των γωνιών η μέση τιμή της συνάρτησης αυτής θα πρέπει παρθεί ίση με μηδέν.

Σαν καταλληλότερη ποσότητα για τον μηδενισμό διαλέγεται το πλάτος σκέδασης στη διεύθυνση πρόσπτωσης, $f(\theta = 0)$. Ο λόγος είναι ότι η ποσότητα αυτή συνδέεται με την ολική ενεργό διατομή σκέδασης (μέσω του οπτικού θεωρήματος - δες Εξ.2.16 και Εξ.2.17) και άρα ο μηδενισμός της εξασφαλίζει μηδενική μέση σκέδαση. Αξίζει να σημειωθεί επίσης ότι στο όριο όπου ο T μπορεί να προσεγγιστεί μόνο από τον πρώτο όρο του αναπτύγματος 3.5, ο μηδενισμός του μέσου πλάτους σκέδασης στη διεύθυνση πρόσπτωσης, ο οποίος σημαίνει μηδενισμό μόνο των “διαγωνίων” στοιχείων του $\langle t \rangle_c$ ($\langle t_{\mathbf{q}_e, \mathbf{q}_e} \rangle_c$), συνεπάγεται ακριβή μηδενισμό του ολικού¹¹ $\langle T \rangle_c$.

Ιδιαιτερότητες των ελαστικών κυμάτων : Στην περίπτωση των ελαστικών κυμάτων όπου ένα ομογενές μέσο χαρακτηρίζεται από δύο κυματανύσματα (ένα για διάδοση διαμήκους κύματος κι ένα για εγκάρσιου) και την πυκνότητα, το φαινόμενο μέσο θα χαρακτηρίζεται (εκτός από την πυκνότητα ρ_e) από τα δύο κυματανύσματα q_{le}, q_{te} (ο δείκτης l δηλώνει το διαμήκες κι ο δείκτης t το εγκάρσιο) με συνέπειες δύο ταχύτητες φάσης, $c_l^{ph} = \omega/\Re[q_{le}]$ και $c_t^{ph} = \omega/\Re[q_{te}]$ και δύο μέσες ελεύθερες διαδρομές σκέδασης¹², $l_l = 1/2\Im[q_{le}]$ και $l_t = 1/2\Im[q_{te}]$. Το γεγονός αυτό συνεπάγεται απαίτηση πέντε τουλάχιστον εξισώσεων για τον υπολογισμό του φαινομένου μέσου (τέσσερις εξισώσεις για τον υπολογισμό των μιγαδικών κυματανυσμάτων και μια εξίσωση για την πυκνότητα).

Οι επιπλέον σε σχέση με τα άλλα κλασικά κύματα εξισώσεις προέρχονται από τη διαφορετική έκφραση του ταυνοστή σκέδασης, t , για διαμήκες κι εγκάρσιο προσπίπτον

¹¹ Αν $T = \sum_i t_i$, τότε το γεγονός ότι ο $\langle T \rangle_c$ αντιστοιχεί σε συνάρτηση Green ομογενούς μέσου και άρα είναι συνάρτηση μόνο ενός \mathbf{k} συνεπάγεται ότι ο μηδενισμός μόνο των διαγωνίων στοιχείων των $\langle t_i \rangle_c$, είναι ικανός να εξασφαλίσει μηδενισμό του ολικού $\langle T \rangle_c$ (δες αναφορά [29], σελ.54).

¹² Σημειώνεται ότι ο δείκτης t εδώ δηλώνει τη μέση ελεύθερη διαδρομή εγκάρσιου κύματος κι όχι τη μέση ελεύθερη διαδρομή μεταφοράς η οποία στο εξής θα δηλώνεται εκπεφρασμένα.

κύμα. Για διαμήκες προσπίπτον κύμα (και παίρνοντας τον \hat{z} άξονα στη διεύθυνση πρόσπτωσης) τα διαγώνια στοιχεία του t ($t_{qe, qe}$) είναι ανάλογα με το διαμήκες πλάτος σκέδασης στη διεύθυνση πρόσπτωσης¹³ $f_{ii}(\theta = 0) = f_{ii}(0)$ (δες Εξ.2.16) [51, 52, 53]. Έτσι η απαίτηση μηδενισμού της μέσης τιμής του t οδηγεί σε απαίτηση μηδενισμού του $\langle f_{ii}(0) \rangle_c$. Για εγκάρσιο προσπίπτον, πολωμένο στον \hat{n} άξονα, που διαδίδεται κατά τον \hat{z} άξονα, τα διαγώνια στοιχεία του t είναι ανάλογα με το εγκάρσιο πλάτος σκέδασης, $f_{tt}(0)$, όπου $f_{tt}(0) = \hat{n} \mathbf{f}_{tt}|_{\theta=0}$ (δες Εξ.2.17) [51, 52]. Έτσι ο υπολογισμός του φαινομένου μέσου ανάγεται σε επίλυση των εξισώσεων

$$\begin{aligned} \langle f_{ii}(0) \rangle_c &= p_1 f_{ii1}(0) + p_2 f_{ii2}(0) = 0 \\ \langle f_{tt}(0) \rangle_c &= p_1 f_{tt1}(0) + p_2 f_{tt2}(0) = 0 \end{aligned} \quad (3.16)$$

η οποία γίνεται αυτοσυνεπώς. Στις 3.16, p_i ($i = 1, 2$) είναι η πιθανότητα το φαινόμενο μέσο να αντικαθίσταται από τον σκεδαστή τύπου i (όπως αυτός ορίστηκε στην απλή και coated CPA) και $f_{iij}(0)$ ($f_{tji}(0)$) το διαμήκες (εγκάρσιο) πλάτος σκέδασης στη διεύθυνση πρόσπτωσης¹⁴ για πρόσπτωση διαμήκους (εγκάρσιου) επίπεδου κύματος σ' αυτόν τον σκεδαστή¹⁵.

Οι παραπάνω εξισώσεις (3.16) είναι δυο μιγαδικές εξισώσεις αρκετές για τον υπολογισμό μόνο των δύο μιγαδικών κυματανυσμάτων q_{ie} και q_{te} . Όπως όμως ήδη αναφέρθηκε, ο πλήρης προσδιορισμός του φαινομένου μέσου τόσο για ελαστικά κύματα όσο και για ακουστικά, απαιτεί και γνώση της πυκνότητας, ρ_e (η οποία συμμετέχει στον αυτοσυνεπή υπολογισμό 3.16). Για τον υπολογισμό της ρ_e μια τουλάχιστον επιπλέον εξίσωση απαιτείται. Σε διερεύνηση στα πλαίσια της παρούσας δουλειάς για το ποια είναι η πιο κατάλληλη, συμπληρωματική των συνθηκών 3.16, εξίσωση δεν έχει βρεθεί μέχρι στιγμής ικανοποιητική απάντηση. Θέτοντας ίση με μηδέν τη μέση τιμή κάποιου από τα πλάτη σκέδασης f_{ii} και f_{tt} σε διεύθυνση διαφορετική από τη διεύθυνση πρόσπτωσης, το αποτέλεσμα ήταν προβλήματα σύγκλισης, πολλαπλές λύσεις η μία κοντά στην άλλη ή φυσικά μη παραδεκτές λύσεις. Μικρή βελτίωση (για ελαστικά κύματα) υπήρξε θέτοντας ίσο με μηδέν σε κάποια διεύθυνση, το μέσο πλάτος σκέδασης που αντιστοιχεί σε εγκάρσιο σκεδαζόμενο κύμα προερχόμενο από διαμήκες προσπίπτον¹⁶ ($\langle f_{it} \rangle_c$) το οποίο στη διεύθυνση πρόσπτωσης είναι μηδέν. Στις περιπτώσεις όπου καταφέραμε να έχουμε μια αυτοσυνεπή πλήρη λύση (υπολογισμο ταυτόχρονα ταχυτήτων και πυκνότητας) το αποτέλεσμα ήταν πολύ κοντά σε ότι υπολογίστηκε χρησιμοποιώντας για την ρ_e την μέση τιμή των πυκνοτήτων των δύο υλικών (σκεδαστών-περιβάλλοντος μέσου), $\rho_e = f_s \rho_i + (1 - f_s) \rho_o$, ή προσεγγιστικούς τύπους για την πυκνότητα στο όριο των χαμηλών συχνοτήτων [54, 55]. Τα περισσότερα από τα αποτελέσματα που θα παρουσιαστούν παρακάτω έχουν εξαχθεί μ'αυτή την προσέγγιση.

¹³Ο πρώτος δείκτης στο πλάτος σκέδασης δηλώνει την πόλωση του προσπίπτοντος και ο δεύτερος την πόλωση του σκεδαζόμενου κύματος.

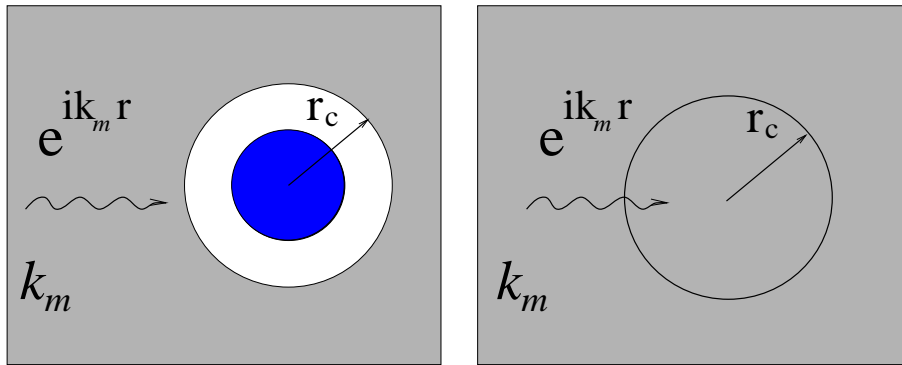
¹⁴Οι αναλυτικές εκφράσεις των $f_{ii}(0)$ και $f_{tt}(0)$ μπορούν να εξαχθούν εύκολα από τις εξισώσεις 2.16 και 2.17 και είναι ίδιες σε μορφή τόσο για απλή σφαίρα όσο και για σύστημα δύο ομόκεντρων σφαιρών.

¹⁵Η σκέδαση από σύστημα δύο ομόκεντρων σφαιρών (coated σφαίρα) περιγράφεται αναλυτικά στο παράρτημα Γ.

¹⁶Το πλάτος αυτό είναι ανάλογο με το πλάτος σκέδασης που αντιστοιχεί σε διαμήκες σκεδαζόμενο κύμα προερχόμενο από εγκάρσιο προσπίπτον.

3.3.2 CPA ενέργειας - Ταχύτητα ενέργειας

Η CPA ενέργειας είναι μια καινούρια μέθοδος που χρησιμοποιήθηκε με επιτυχία στον υπολογισμό της ταχύτητας ενέργειας τόσο ηλεκτρομαγνητικών όσο και βαθμωτών κυμάτων [38, 39]. Χρησιμοποιεί μεν τη βασική ιδέα της CPA (Εξ.3.1) και τα βασικά της πλεονεκτήματα δηλαδή την απλότητα όσον αφορά την ιδέα και τους υπολογισμούς αλλά πλησιάζει το πρόβλημα από μια διαφορετική οπτική γωνία μια και το βασικό της ενδιαφέρον είναι ο υπολογισμός ιδιοτήτων μεταφοράς, ιδιοτήτων που χαρακτηρίζουν τη διάδοση και σε περιοχές όπου η φάση έχει χαθεί εντελώς. Μια θεωρία που θα ισχύει και σ' αυτές τις περιοχές θα πρέπει να βασίζεται σε απαίτηση πάνω στο $\langle GG \rangle_c$ ή μιλώντας με όρους πεδίου κι όχι συναρτήσεων Green στη μέση ενέργεια. Πράγματι, η CPA ενέργειας ξεκινά από την ιδέα ότι σε ένα τυχαίο μέσο η πυκνότητα ενέργειας θα πρέπει να είναι ομογενής σε κλίμακες μεγαλύτερες από τη βασική δομική μονάδα του μέσου¹⁷. Το τελευταίο είναι απόρροια του ότι σε τέτοιες κλίμακες το τυχαίο μέσο είναι γεωμετρικά ομογενές. Σε ότι ακολουθεί παρουσιάζουμε αρχικά τη μέθοδο όπως αναπτύχθηκε για βαθμωτά και για ΗΜ κύματα [38, 39] και σε δεύτερο δήμα αναφέρουμε αναλυτικά τον υπολογισμό για ακουστικά κι ελαστικά κύματα μαζί με τις ιδιαιτερότητες αυτής της περίπτωσης.



Σχ.3.3: Ο τρόπος που αντικαθίσταται το ομογενές μέσο k_m (σκιασμένη περιοχή) από το τυχαίο στα πλαίσια εφαρμογής της CPA ενέργειας. Η μαύρη σφαίρα (άσπρη περιοχή) ταυτίζεται με τους σκεδαστές (το περιβάλλον μέσο) στο τυχαίο σύστημα. Το k_m υπολογίζεται από την απαίτηση η ολική ενέργεια στη βασική δομική μονάδα του τυχαίου συστήματος - coated σφαίρα (αριστερό πλαίσιο) - να είναι ίση με την ολική ενέργεια στην περιοχή που περικλείεται από τον κύκλο στο δεξιό πλαίσιο. Η ενέργεια υπολογίζεται θεωρώντας πρόσπτωση επίπεδου κύματος.

Στα πλαίσια της CPA ενέργειας ο υπολογισμός του φαινομένου μέσου γίνεται σε δύο στάδια. Στο πρώτο στάδιο υπολογίζεται ένα ομογενές μέσο, G_m , από την απαίτηση η πυκνότητα ενέργειας σε αυτό το μέσο να είναι ίση με τη μέση πυκνότητα ενέργειας στο τυχαίο. Η παραπάνω απαίτηση εξίσωσης της ενέργειας υλοποιείται με το να θεωρείται μια βασική δομική μονάδα του τυχαίου μέσου (δες Σχ.3.3) η οποία εμβαπτίζεται στο ομογενές μέσο, G_m , και να απαιτείται η ολική ενέργεια σε αυτή τη δομική μονάδα να είναι ίση με την ολική ενέργεια σε ένα τμήμα ίσου όγκου του ομογενούς μέσου. Η ενέργεια υπολογίζεται θεωρώντας πρόσπτωση επίπεδου

¹⁷Θεωρώντας μη εντοπισμένο κύμα.

κύματος. Η διαδικασία που αναφέρθηκε υπολογίζει αυτοσυνεπώς ένα κυματάνυσμα, k_m , το οποίο χαρακτηρίζει το ομογενές μέσο. Το k_m στην περίπτωση αυτή είναι πραγματικό μια και υπολογίζεται μέσω συλλογισμού διατήρησης της ενέργειας σε μέσα χωρίς απόσβεση.

Σε δεύτερο θήμα υπολογίζεται το μιγαδικό κυματάνυσμα q_e που χαρακτηρίζει το υπό αναζήτηση φαινόμενο μέσο. Ο υπολογισμός του q_e γίνεται εξισώνοντας τη συνάρτηση Green του φαινομένου μέσου με την μέση συνάρτηση Green του τυχαίου όπως δίνεται με βάση τον τύπο 3.4. Συγκρίνοντας τους τύπους 3.1 και 3.4 μπορεί να δει κανείς ότι το q_e θα δίδεται από

$$q_e^2 = k_m^2 - \Sigma_m(\omega) \quad (3.17)$$

Η $\Sigma_m(\omega)$ (σε πρώτη τάξη ως προς τη συγκέντρωση των σκεδαστών) υπολογίζεται από τον απλό τύπο [29, 37, 39]

$$\Sigma_m = -4\pi n f(0) \quad (3.18)$$

όπου n είναι η συγκέντρωση (αριθμητική πυκνότητα) των σκεδαστών στο τυχαίο σύστημα και $f(0)$ το πλάτος σκέδασης στη διεύθυνση πρόσπτωσης για επίπεδο κύμα που σκεδάζεται από τη βασική δομική μονάδα του τυχαίου η οποία έχει εμβαπτιστεί στο μέσο k_m .

Σαν βασική δομική μονάδα του τυχαίου μέσου που εμβαπτίζεται στο k_m θεωρήθηκε αρχικά για τα ΗΜ και βαθμωτά κύματα μια σφαίρα ίδια με τους σκεδαστές του τυχαίου μέσου καλυμμένη με ένα σφαιρικό κέλυφος εξωτερικής ακτίνας r_c (με $r_c^3 = a^3/f_s$) από το υλικό του περιβάλλοντος μέσου (δες Σχ.3.3).

Ελαστικά κύματα : Στην περίπτωση ελαστικών κυμάτων τώρα, όπου ένα ομογενές μέσο χαρακτηρίζεται από δύο κυματάνυσματα και την πυκνότητα, στο πρώτο θήμα του υπολογισμού του φαινομένου μέσου στα πλαίσια της CPA ενέργειας, χρειάζεται να υπολογίσει κανείς τόσο τα δύο πραγματικά κυματάνυσματα k_{lm} και k_{tm} όσο και την πυκνότητα ρ_m .

Τα δύο κυματάνυσματα υπολογίζονται από την απαίτηση ομογένειας της ενέργειας όπως αυτή αναφέρθηκε παραπάνω. Οι αντίστοιχες δύο εξισώσεις προκύπτουν με το να θεωρήσουμε πρόσπτωση τόσο διαμήκους όσο και εγκάρσιου κύματος πάνω στη βασική δομική μονάδα του τυχαίου που εμβαπτίζεται στο ομογενές.

Στα πλαίσια της παρούσας δουλειάς σαν βασική δομική μονάδα διαλέγεται είτε η διπλή σφαίρα εξωτερικής ακτίνας $r_c = a/[f_s]^{1/3}$ (δες Σχ.3.3) που χρησιμοποιήθηκε στα βαθμωτά και ΗΜ κύματα με πιθανότητα μονάδα (η CPA ενέργειας με αυτή τη βασική δομική μονάδα θα χαρακτηρίζεται σαν E-CPA1) είτε το σύστημα των δύο σφαιρών που ορίζεται στην coated CPA με τις ίδιες πιθανότητες κι ακτίνες (E-CPA2).

Η απαίτηση ομογένειας της ενέργειας, για την περίπτωση της E-CPA2, οδηγεί στις δύο παρακάτω αυτοσυνεπώς επιλύσιμες εξισώσεις

$$p_1 \int_0^{r_1} \tilde{E}_l^c r^2 dr + p_2 \int_0^{r_2} \tilde{E}_l^s r^2 dr = \frac{1}{2} \rho_m \omega^2 [p_1 \frac{r_1^3}{3} + p_2 \frac{r_2^3}{3}] \quad (3.19)$$

$$p_1 \int_0^{r_1} \tilde{E}_t^c r^2 dr + p_2 \int_0^{r_2} \tilde{E}_t^s r^2 dr = \frac{1}{2} \rho_m \omega^2 [p_1 \frac{r_1^3}{3} + p_2 \frac{r_2^3}{3}] \quad (3.20)$$

Το σύμβολο \tilde{E} δηλώνει τη μέση τιμή της πυκνότητας ενέργειας, E , ως προς χρόνο και ως προς όλες τις διευθύνσεις (για τον υπολογισμό της \tilde{E} βλέπε παραρτήματα Β και Γ). Οι δείκτες l και t δηλώνουν ότι αυτή η πυκνότητα ενέργειας υπολογίστηκε θεωρώντας πρόσπτωση διαμήκους και εγκάρσιου κύματος αντίστοιχα ενώ οι c και s ότι στην αρχή του συστήματος συντεταγμένων έχει τοποθετηθεί αντίστοιχα η coated και η απλή (simple) σφαίρα. Το δεξιό μέλος των 3.19 και 3.20 υπολογίστηκε παίρνοντας υπόψη ότι η πυκνότητα ενέργειας για διαμήκες και εγκάρσιο επίπεδο κύμα συχνότητας ω που διαδίδεται σε ομογενές μέσο πυκνότητας ρ_m δίδεται από $\tilde{E} = \rho_m \omega^2 / 2$.

Στα πλαίσια της παρούσας δουλειάς, η πυκνότητα ρ_m (η γνώση της οποίας είναι απαραίτητη τόσο για τον υπολογισμό 3.19 και 3.20 όσο και για τον περαιτέρω υπολογισμό του μιγαδικού φαινομένου μέσου, G_e) προσεγγίζεται από τον μέσο όρο των πυκνοτήτων σκεδαστών περιβάλλοντος μέσου ($\rho_m = f_s \rho_i + (1 - f_s) \rho_o$) ή από εκφράσεις που έχουν εξαχθεί για το όριο χαμηλών συχνοτήτων [54, 55] - με πρακτικά τα ίδια αποτελέσματα.

Τέλος, τα μιγαδικά κυματανύσματα q_{le} και q_{te} από τα οποία προκύπτουν οι ταχύτητες φάσης και οι μέσες ελεύθερες διαδρομές υπολογίζονται από

$$q_{le}^2 = k_{lm}^2 - \Sigma_{llm}(\omega) \quad (3.21)$$

$$q_{te}^2 = k_{tm}^2 - \Sigma_{ttm}(\omega) \quad (3.22)$$

όπου

$$\Sigma_{jjm}(\omega) = -4\pi \sum_i n_i f_{jji}(0) \quad (j = l, t) \quad (3.23)$$

Στην εξίσωση 3.23, $f_{lli}(0)$ ($f_{tli}(0)$) είναι το διαμήκες (εγκάρσιο) πλάτος σκέδασης στη διεύθυνση πρόσπτωσης για διαμήκες (εγκάρσιο) (δες Εξ.3.16) επίπεδο προσπίπτον κύμα που σκεδάζεται από ένα σκεδαστή τύπου i τοποθετημένο στο ομογενές μέσο G_m και n_i είναι η συγκέντρωση του i τύπου σκεδαστών. Για διάταξη σκέδασης αυτή της coated CPA (E-CPA2), $n_1 = f_s/V$ και $n_2 = [1 - n_1 V_1]/V_2$ ($V_j = 4\pi r_j^3/3$ ($j = 1, 2$), $V = 4\pi a^3/3$).

Ταχύτητα ενέργειας

Ο υπολογισμός της ταχύτητας ενέργειας, v_E , στα πλαίσια της CPA ενέργειας γίνεται με αφετηρία τη θεωρία που αναπτύχθηκε στο όριο των χαμηλών συγκεντρώσεων σκεδαστών [32, 34, 35, 31]. Σύμφωνα με τη θεωρία αυτή η ταχύτητα ενέργειας δίδεται από την παρακάτω συνάρτηση της σκέδασης, $\Sigma_o(\omega)$ ($= -4\pi n f(0)$), ανάμεσα σε ένα σκεδαστή του τυχαίου συστήματος και στο περιβάλλον του μέσο k_o

$$v_E = \frac{\omega}{k_o^2} \frac{\sqrt{k_o^2 - \Re[\Sigma_o]}}{1 + \delta} \quad (3.24)$$

Η ποσότητα δ , χαρακτηριστική στη διάδοση των κλασικών κυμάτων (για ηλεκτρόνια $\delta = 0$)¹⁸, μπορεί επίσης να εκφραστεί σαν συνάρτηση της σκέδασης

¹⁸Η διαφορά κλασικών κυμάτων και ηλεκτρονίων σε αυτό το σημείο πηγάζει από τη διαφορετική τάξη της χρονικής παραγωγού στις αντίστοιχες εξισώσεις.

ανάμεσα στον σκεδαστή και το περιβάλλον μέσο. Το δ είναι ανάλογο του χρόνου που καταναλώνει το κύμα μέσα στους σκεδαστές ο οποίος με τη σειρά του δρέθηκε να είναι ανάλογος της ενέργειας που συγκεντρώνεται μέσα σε κάθε σκεδαστή. Έτσι το δ γίνεται μέγιστο κοντά στους συντονισμούς της ενεργού διατομής σκέδασης από ένα σκεδαστή (συντονισμός συνήθως σημαίνει μέγιστη συγκέντρωση του κύματος μέσα στον σκεδαστή) δίνοντας τα ελάχιστα στην v_E που αναφέρθηκαν στην εισαγωγή.

Στα πλαίσια της CPA ενέργειας τώρα, η ταχύτητα ενέργειας v_E , υπολογίζεται από την ίδια με την έκφραση 3.24 συνάρτηση, στην οποία το περιβάλλον μέσο k_o αντικαθίσταται από το ομογενές μέσο k_m ενώ ο απλός σκεδαστής μέσω του οποίου υπολογίζεται η ιδιοενέργεια, Σ , αντικαθίσταται από τη βασική ή τις βασικές δομικές μονάδες του τυχαίου συστήματος που εμβαπτίζονται στο k_m . Αποτέλεσμα είναι η έκφραση

$$v_E = \frac{\omega}{k_m^2} \frac{\sqrt{k_m^2 - \Re[\Sigma_m]}}{1 + \delta} \quad (3.25)$$

όπου τα Σ και δ υπολογίζονται σχετικά με το μέσο k_m .

Η έκφραση 3.25 στα πλαίσια της CPA ενέργειας χρησιμοποιείται για κάθε συγκέντρωση. Η ισχύς για κάθε συγκέντρωση δικαιολογείται από το ότι αντικαθιστώντας το πραγματικό μέσο γύρω από κάθε σκεδαστή με ένα προσεγγιστικό ομογενές μέσο - ο υπολογισμός του οποίου λαμβάνει υπόψη του φαινόμενα πολλαπλής σκέδασης - η κατάσταση πλησιάζει εκείνη των ανεξάρτητων σκεδάσεων, η οποία μπορεί να περιγραφεί ικανοποιητικά από τη θεωρία χαμηλών συγκεντρώσεων.

Το πλεονέκτημα τώρα της επιλογής του k_m με την υπόθεση της CPA ενέργειας είναι το ότι λόγω ομογένειας της ενέργειας δεν θα υπάρχει επιπλέον καθυστέρηση του κύματος στο πραγματικό μέσο σχετικά με το μέσο k_m . Έτσι, περιμένει κανείς η ποσότητα δ στον τύπο 3.25 (η οποία έχει υπολογιστεί μέσω ακριβούς θεωρίας μόνο για βαθμωτά κύματα και η επέκταση της στα ΗΜ είχε για πολύ καιρό αμφισβητηθεί) να είναι περίπου ίση με μηδέν και να μπορεί να αγνοηθεί.

Πράγματι, τόσο για ΗΜ όσο και για βαθμωτά κύματα η έκφραση 3.25 με $\delta = 0$ έδωσε αποτελέσματα που προσεγγίζουν πολύ ικανοποιητικά τα πειραματικά δεδομένα τόσο για χαμηλές όσο και για υψηλότερες συγκεντρώσεις.

Δυστυχώς για ακουστικά κι ελαστικά κύματα η κατάσταση είναι περισσότερο σύνθετη. Στα πλαίσια εφαρμογής της CPA ενέργειας σε διάδοση ακουστικών κι ελαστικών κυμάτων - όπως αποδείχτηκε στους υπολογισμούς αυτής της εργασίας - η ποσότητα δ , ενώ είναι αρκετά μικρή, δεν είναι αμελητέα ώστε να αγνοηθεί εντελώς - ιδιαίτερα σε χαμηλές συχνότητες.

Ο λόγος για αυτή τη διαφορά των ακουστικών κι ελαστικών σχετικά με τα βαθμωτά και ΗΜ κύματα πηγάζει από την ύπαρξη της πυκνότητας σαν ανεξάρτητης παραμέτρου για τον καθορισμό της διάδοσης σε ένα ελαστικό μέσο. Στη συγκεκριμένη περίπτωση, η επιλογή της πυκνότητας, ρ_m , του ομογενούς μέσου επηρεάζει αισθητά την τιμή του δ . Η επιρροή αυτή μειώνεται όσο αυξάνει η συχνότητα. Για ενδιάμεσες και υψηλές συχνότητες το δ είναι πολύ μικρό και σχεδόν ανεξάρτητο από την επιλογή του ρ_m . Θα πρέπει να σημειωθεί πάντως, κι εκεί βασίζεται η αξιοπιστία των αποτελεσμάτων που παρουσιάζονται, ότι η εξάρτηση των k_m , Σ_m και δ ($= \delta_m$) από το ρ_m είναι τέτοια ώστε να οδηγεί σε πρακτικά ίδια

ταχύτητα v_E για κάθε επιλογή του ρ_m .

Μια επιπλέον διαφορά των ακουστικών κι ελαστικών από τα βαθμωτά και ΗΜ κύματα, η οποία σχετίζεται άμεσα με την ταχύτητα ενέργειας και την εξάρτηση της από τη συχνότητα όπως αυτή ερμηνεύτηκε στην εισαγωγή, πηγάζει από τη φύση των συντονισμών της ενεργού διατομής σκέδασης. Όπως συζητήθηκε στο κεφάλαιο 2, στη σκέδαση ακουστικών κι ελαστικών κυμάτων υπάρχουν συντονισμοί προερχόμενοι από την σκληρή ή άδεια σφαίρα. Οι συντονισμοί αυτοί δεν συνοδεύονται από μεγάλη συγκέντρωση ενέργειας μέσα στη σφαίρα. Το γεγονός αυτό συνεπάγεται ότι η εξάρτηση της v_E από τη συχνότητα δεν περιμένει κανείς να έχει σε όλες τις περιπτώσεις την τυπική μορφή που παρατηρήθηκε και ερμηνεύτηκε τόσο στα βαθμωτά όσο και στα ΗΜ κύματα.

Ερχόμενοι τώρα σε εφαρμογή της CPA ενέργειας στην περίπτωση των πλήρως διανυσματικών ελαστικών κυμάτων η κατάσταση γίνεται ακόμα περισσότερο περίπλοκη. Εδώ, το αποτέλεσμα της προσέγγισης του τυχαίου μέσου με ομογενές, είναι ο υπολογισμός δύο ταχυτήτων διάδοσης της ενέργειας μία για διαμήκεις προσπίπτον κύμα και μία για εγκάρσιο. Το πρόβλημα του κατά πόσον έχει κάποιο φυσικό νόημα για το τυχαίο μέσο - όπου το νόημα προσπίπτοντος κύματος μίας μόνο πόλωσης εξαφανίζεται - η ύπαρξη δύο διαφορετικών ταχυτήτων ενέργειας και του πώς σχετίζονται οι ταχύτητες αυτές με τον συντελεστή διάχυσης στο μέσο είναι ένα από τα ανοιχτά προβλήματα στη διάδοση ελαστικών κυμάτων. Το πρόβλημα αυτό, το οποίο πηγάζει από τη διαφορά μεταξύ ομογενών και τυχαίων μέσων όσον αφορά τη σύζευξη ή μη της διαμήκους και της εγκάρσιας συνιστώσας του κύματος, είναι απόρροια του γενικού ερωτήματος κατά πόσο το φαινόμενο μέσο (ένα ομογενές μέσο στο οποίο διαμήκεις και εγκάρσιο κύμα είναι ασύζευκτα) μπορεί να προσεγγίσει το τυχαίο όπου συμβαίνουν συνεχείς μετατροπές διαμήκους κύματος σε εγκάρσιο και αντίστροφα, όσον αφορά μεγέθη που ενδιαφέρουν στην περίπτωση που η πολλαπλή σκέδαση κυριαρχεί τη διάδοση.

Παρακάτω αναφέρεται ο υπολογισμός της ταχύτητας ενέργειας στην περίπτωση διάδοσης ακουστικών κυμάτων όταν δηλαδή το τυχαίο σύστημα μακροσκοπικά είναι ρευστό. Αυτό μπορεί να συμβεί για σκεδαστές από είτε ρευστό είτε στερεό σε ρευστό περιβάλλον μέσο. Για διάδοση ακουστικών κυμάτων η ταχύτητα ενέργειας, v_E , δίδεται από την έκφραση 3.25. Στην 3.25 το $k_m = k_{lm}$ είναι το κυματόνισμα που υπολογίζεται από την υλοποίηση της απαίτησης ομογένειας της ενέργειας, εξίσωση 3.19. Η συνάρτηση $\Sigma_m = \Sigma_{ilm}$ δίδεται από την έκφραση 3.23 ενώ η ποσότητα $\delta = \delta_m$ από $\delta = \sum_i n_i \delta_i$ ($i = 1, 2$) [34, 35, 38, 39] με

$$\delta_i = 4\pi \Re \left[\frac{\partial f_i(\mathbf{k}_m, \mathbf{k}'_m)}{\partial k_m^2} \right] + \int d\Omega \frac{d\sigma^i}{d\Omega} \frac{\partial \phi^i_{\mathbf{k}_m \mathbf{k}'_m}}{\partial k_m} \quad (3.26)$$

Στη σχέση 3.26

$$f_i = f_{li} \quad (\text{δες Εξ.3.23}), \quad \frac{d\sigma^i}{d\Omega} = |f_i(\mathbf{k}_m, \mathbf{k}'_m)|^2$$

$$\text{και } f_i(\mathbf{k}_m, \mathbf{k}'_m) = -|f_i(\mathbf{k}_m, \mathbf{k}'_m)| \exp [i\phi^i_{\mathbf{k}_m \mathbf{k}'_m}]. \quad (3.27)$$

Αντικαθιστώντας τις 3.27 στην 3.26, η ποσότητα δ_i μπορεί να πάρει την πιο απλή και πρόσφορη για αριθμητικούς υπολογισμούς μορφή

$$\delta_i = 4\pi \frac{\omega}{k_m} \Re \left[\frac{1}{2k_m} \frac{\partial f_i(\mathbf{k}_m, \mathbf{k}_m)}{\partial \omega} \right] + \frac{\omega}{k_m} \int d\Omega \Im \left\{ [f_i(\mathbf{k}_m, \mathbf{k}'_m)]^* \frac{\partial f_i(\mathbf{k}_m, \mathbf{k}'_m)}{\partial \omega} \right\} \quad (3.28)$$

3.4 Προσεγγιστικά αποτελέσματα

3.4.1 Όριο χαμηλών συχνοτήτων

Όπως συζητήθηκε στο κεφάλαιο 2 τα πλάτη σκέδασης σε χαμηλές συχνότητες τείνουν στο μηδέν σαν ω^2 . Γράφοντας το κάθε πλάτος σκέδασης σαν άθροισμα μερικών πλατών (συνεισφορών από κάθε μερικό σφαιρικό κύμα) διαπιστώνει κανείς ότι ο ανάλογος με ω^2 όρος στο ανάπτυγμα για μικρές συχνότητες προέρχεται από τα $n = 0$ και $n = 1$ σφαιρικά κύματα. Για $n \geq 2$ τα μερικά πλάτη σκέδασης τείνουν στο μηδέν σαν ω^ℓ με $\ell \geq 3$ (για ρευστά $\ell = 2n$). Έτσι, εφαρμόζοντας τη συνθήκη της CPA στο όριο χαμηλών συχνοτήτων, αρκεί κανείς να απαιτήσει τον μηδενισμό μόνο των δύο πρώτων όρων ($n = 0$ και $n = 1$) στο $\langle f_{ll}(0) \rangle_c$ και του $n = 1$ όρου στο $\langle f_{tt}(0) \rangle_c$.

Ο μηδενισμός του πρώτου ($n = 0$) όρου του $\langle f_{ll}(0) \rangle_c$ για τυχαίο σύστημα στερεών και στα πλαίσια της απλής CPA οδήγησε στην έκφραση

$$f_s \frac{B_i - B_e}{3B_i + 4\mu_e} + (1 - f_s) \frac{B_o - B_e}{3B_o + 4\mu_e} = 0 \quad (3.29)$$

όπου B είναι το υδροστατικό μέτρο ελαστικότητας ($B = \lambda + \frac{2}{3}\mu$).

Για μακροσκοπικά ρευστά συστήματα ($\mu_e = \mu_o = 0$), αποτέλεσμα του μηδενισμού της $n = 0$ συνεισφοράς στο $\langle f_{ll}(0) \rangle_c$ στα πλαίσια τόσο της απλής CPA όσο και μιας coated CPA με βασική μονάδα σκέδασης μία μόνο coated σφαίρα εξωτερικής ακτίνας $r_c = a/[f_s]^{1/3}$ είναι η έκφραση

$$\frac{1}{B_e} = \frac{f_s}{B_i} + \frac{1 - f_s}{B_o} \quad (3.30)$$

η οποία είναι γνωστή σαν νόμος του Wood [29].

Ο μηδενισμός του $n = 1$ όρου στο $\langle f_{ll}(0) \rangle_c$ οδήγησε στην ίδια σχέση με τον μηδενισμό του $n = 1$ όρου στο $\langle f_{tt}(0) \rangle_c$, η οποία είναι σχέση ανάμεσα μόνο στις πυκνότητες ρ_i, ρ_o και ρ_e και η οποία διαφέρει ανάλογα με τη διάταξη σκέδασης που χρησιμοποιείται. Στα πλαίσια της CPA με βασική μονάδα σκέδασης μία μόνο coated σφαίρα εξωτερικής ακτίνας r_c , το ρ_e τόσο για στερεά όσο και για ρευστά υπολογίστηκε σαν

$$\rho_e = \rho_o \frac{f_s(\rho_i - \rho_o) + 2\rho_i + \rho_o}{2f_s(\rho_o - \rho_i) + 2\rho_i + \rho_o} \quad (3.31)$$

Στα πλαίσια της απλής CPA η εξαχθείσα έκφραση του ρ_e για τυχαίο σύστημα ρευστών ($\mu_i = \mu_o = \mu_e = 0$) είναι

$$f_s \frac{\rho_i - \rho_e}{2\rho_i + \rho_e} + (1 - f_s) \frac{\rho_o - \rho_e}{2\rho_o + \rho_e} = 0 \quad (3.32)$$

ενώ για στερεά ($\mu_i, \mu_o, \mu_e \neq 0$)

$$\rho_e = f_s \rho_i + (1 - f_s) \rho_o \quad (3.33)$$

3.4.2 Όριο χαμηλών συγκεντρώσεων

Όσον αφορά το όριο χαμηλών συγκεντρώσεων, μπορεί να πάρει κανείς αναλυτικό αποτέλεσμα θεωρώντας τη διαφορά ανάμεσα στο περιβάλλον μέσο του πραγματικού συστήματος και το φαινόμενο μέσο σαν μικρή ποσότητα, αναπτύσσοντας τη συνθήκη της CPA ως προς αυτή τη μικρή ποσότητα και κρατώντας όρους πρώτης τάξης ως προς τη συγκέντρωση. Για διάταξη σκέδασης αυτή της απλής CPA η παραπάνω διαδικασία οδηγεί σε εκφράσεις για τις μέσες ελεύθερες διαδρομές σκέδασης. Για την πλήρη ελαστική περίπτωση (τυχαίο σύστημα στερεών) βρίσκουμε

$$l_l = \frac{1}{n\sigma_l} \quad (3.34)$$

$$l_t = \frac{1}{n\sigma_t} \quad (3.35)$$

όπου n είναι η συγκέντρωση των σφαιρών στο τυχαίο σύστημα και σ_l (σ_t) η ενεργός διατομή σκέδασης διαμήκους (εγκάρσιου) κύματος από μία σφαίρα.

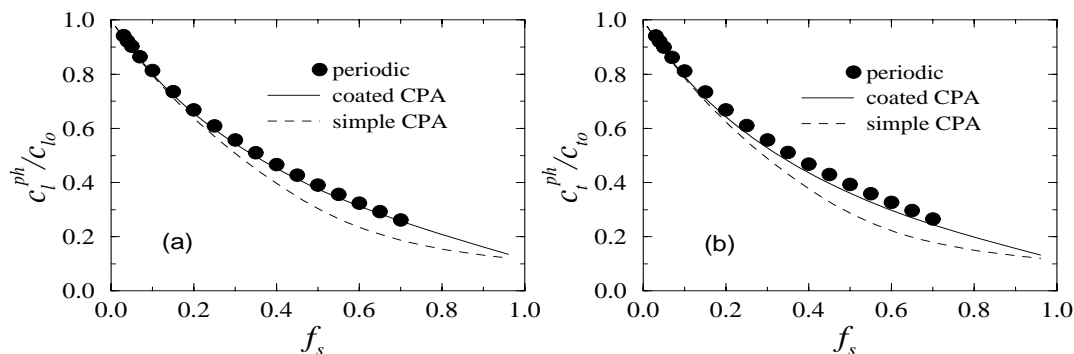
3.5 Αριθμητικά αποτελέσματα

Στα υπολογιστικά αποτελέσματα που παρουσιάζονται παρακάτω γίνεται κατ'αρχήν μια σύγκριση απλής και coated CPA όσον αφορά υπολογισμό χαρακτηριστικών της διάδοσης. Σε δεύτερο δήμα συζητούνται τυπικές μορφές των χαρακτηριστικών αυτών για διάφορες περιπτώσεις υλικών. Επίσης γίνεται μια σύγκριση με τα πειραματικά δεδομένα. Τέλος παρουσιάζονται και σχολιάζονται διαγράμματα για την ταχύτητα ενέργειας.

Η παρουσίαση και η προσπάθεια κατανόησης και ερμηνείας γίνεται σε στενή σύνδεση με το πρόβλημα της σκέδασης από μία μόνο σφαίρα. Το γεγονός ότι η σκέδαση από μία σφαίρα κατάφερε να περιγράψει τη διάδοση σε περιοδικά συστήματα, συνδυαζόμενο με το ότι η διάδοση τόσο σε περιοδικά όσο και σε τυχαία συστήματα καθορίζεται από του ίδιους μηχανισμούς (σκέδαση και συμβολή των πολλαπλά σκεδαζομένων κυμάτων) δικαιολογεί αυτό τον τρόπο αντιμετώπισης. Ο προσανατολισμός στη σκέδαση από μία σφαίρα υποκινείται επιπλέον κι από την εμπειρία από τη διάδοση HM και βαθμωτών κυμάτων (βλέπε ερμηνεία για την εξάρτηση της ταχύτητας ενέργειας από τη συχνότητα).

3.5.1 Σύγκριση απλής και coated CPA

Όσον αφορά την σύγκριση απλής και coated CPA - η οποία έγινε σαν πρώτο βήμα της υπολογιστικής μελέτης - ένα ενδεικτικό αποτέλεσμα είναι εκείνο του σχήματος 3.4. Στο Σχ.3.4 απεικονίζονται οι ταχύτητες φάσης διαμήκους και εγκάρσιου κύματος που διαδίδεται σε σύστημα σφαιρών (από υψηλής πυκνότητας, υψηλής ταχύτητας υλικό) τυχαία τοποθετημένων σε ομογενές (χαμηλής ταχύτητας, χαμηλής πυκνότητας) περιβάλλον μέσο, σαν συνάρτηση της συγκέντρωσης. Τόσο οι σφαίρες όσο και το περιβάλλον μέσο είναι "σκληρά" στερεά ($c_l/c_t \approx \sqrt{2}$). Ο υπολογισμός έγινε σε χαμηλές συχνότητες, περιοχή βέλτιστης ισχύος της CPA (σε χαμηλές συχνότητες - μεγάλα μήκη κύματος - τα χαρακτηριστικά της διάδοσης είναι συνάρτηση μόνο της



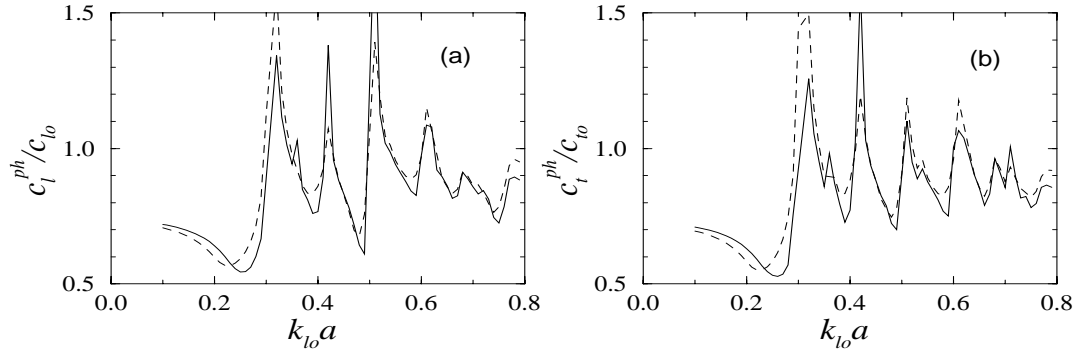
Σχ.3.4: Ταχύτητες φάσης διαμήκους (c_l^{ph}) και εγκάρσιου (c_t^{ph}) κύματος που διαδίδεται σε τυχαίο σύστημα σφαιρών μέσα σε ομογενές μέσο σαν συνάρτηση του ποσοστού του όγκου των σφαιρών, f_s . Οι παράμετροι του συστήματος είναι $\rho_o/\rho_i = 1/4$, $c_{l_o}/c_{l_i} = 8.66$, $c_i/c_t = 1.4143$. Οι ταχύτητες υπολογίστηκαν σε συχνότητα $\omega a/c_{l_o} = 0.05$ (a : ακτίνα σφαιρών). Οι δείκτες l και t δηλώνουν το διαμήκες και εγκάρσιο αντίστοιχα ενώ οι i και o τις σφαίρες και το περιβάλλον μέσο. Οι κύκλοι δείχνουν το αποτέλεσμα στο αντίστοιχο fcc περιοδικό πρόβλημα, η συνεχής γραμμή το αποτέλεσμα της coated CPA και η διακεκομμένη το αποτέλεσμα της απλής CPA.

συχνότητας όπως δέχεται η CPA). Η σύγκριση απλής και coated CPA γίνεται μέσω σύγκρισης με ακριβή αριθμητικά αποτελέσματα του αντίστοιχου fcc περιοδικού προβλήματος. Τα αποτελέσματα αυτά, λόγω του ότι το μήκος κύματος είναι αρκετά μεγαλύτερο από τα διάφορα χαρακτηριστικά μήκη του μέσου και άρα το κύμα βλέπει το μέσο σαν ομογενές, θα πρέπει να ταυτίζονται με τα αποτελέσματα των CPA. Στο Σχ.3.4 η συνεχής γραμμή είναι αποτέλεσμα της coated CPA, η διακεκομμένη αποτέλεσμα της απλής CPA ενώ οι κύκλοι αντιπροσωπεύουν τις ταχύτητες φάσης στο αντίστοιχο fcc περιοδικό πρόβλημα. Στους υπολογισμούς μέσω των CPA η πυκνότητα του φαινόμενου μέσου προσεγγίστηκε από το μέσο όρο των πυκνοτήτων σκεδαστών περιβάλλοντος.

Όπως φαίνεται από το Σχ.3.4, η coated CPA δίνει αποτελέσματα πλησιέστερα σε εκείνα του περιοδικού προβλήματος σε σύγκριση με την απλή. Η απλή CPA ενώ αποκλίνει για ενδιάμεσες συγκεντρώσεις τείνει να επανέλθει όσο το f_s πλησιάζει τη μονάδα. Αυτό είναι αναμενόμενο μια και σε υψηλές συγκεντρώσεις ($f_s \geq 0.64$) οι σκεδαστές είναι συνδεδεμένοι μεταξύ τους κάνοντας τις δύο φάσεις του τυχαίου συστήματος (σκεδαστές-περιβάλλον) να είναι τοπολογικά ισοδύναμες όπως δηλαδή ακριβώς θεωρούνται από την απλή CPA. Διαπιστώθηκε τέλος ότι η coated CPA προσεγγίζει τόσο καλύτερα τα αποτελέσματα του περιοδικού προβλήματος όσο μεγαλύτερος είναι ο λόγος c_o/c_i .

3.5.2 Τυπικές μορφές των χαρακτηριστικών της διάδοσης

Στην παράγραφο που ακολουθεί συζητούνται τυπικές μορφές των χαρακτηριστικών της διάδοσης για διάφορα τυχαία συστήματα σφαιρών σε ομογενές περιβάλλον. Κριτήριο για την επιλογή των συστημάτων, εκτός από την ύπαρξη πειραματικών αποτελεσμάτων με τα οποία γίνεται σύγκριση, είναι και η μορφή της αντίστοιχης ενεργού διατομής σκέδασης από μία σφαίρα, μέσω της οποίας γίνεται προσπάθεια



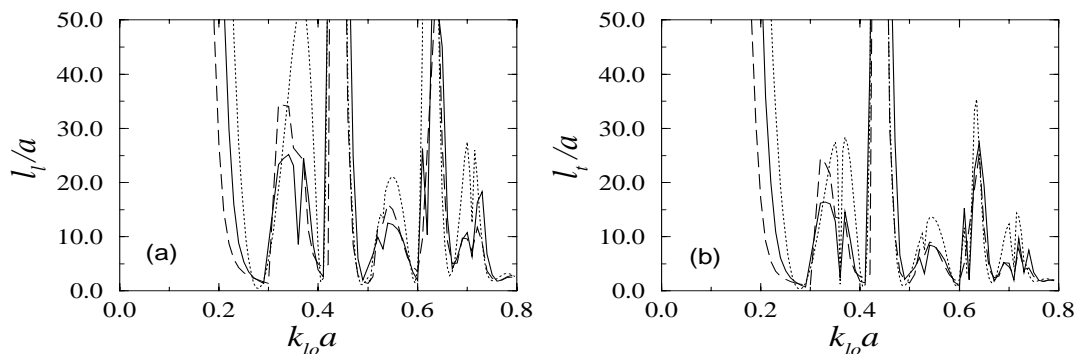
Σχ.3.5: Ταχύτητες φάσης διαμήκους (a) κι εγκάρσιου (b) κύματος σαν συνάρτηση της συχνότητας για το τυχαίο σύστημα που περιγράφεται στο σχήμα 3.4. Οι ταχύτητες υπολογίστηκαν σε ποσοστό όγκου σφαιρών $f_s = 0.144$. Η συνεχής γραμμή δείχνει το αποτέλεσμα της coated CPA ενώ η διακεκομμένη της απλής CPA.

κατανόησης των αποτελεσμάτων.

Τα δύο πρώτα σχήματα, Σχ.3.5 και Σχ.3.6, είναι τυπικά των χαρακτηριστικών της διάδοσης σε συστήματα σκεδαστών χαμηλής ταχύτητας σε υψηλής ταχύτητας περιβάλλον μέσο. Για σκεδαστή χαμηλής ταχύτητας σε υψηλής ταχύτητας περιβάλλον, η ενεργός διατομή - όπως συζητήθηκε στο κεφάλαιο 2 - αποτελείται από οξείες συντονισμούς, ο ένας κοντά στον άλλο, οι οποίοι συνήθως συνοδεύονται από μεγάλη συγκέντρωση ενέργειας μέσα στον σκεδαστή. Τέτοιας μορφής ενεργός διατομή είναι χαρακτηριστική και στην διάδοση HM κυμάτων. Με βάση αυτό περιμένουμε και τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται στα σχήματα 3.5 και 3.6 να είναι ανάλογα με αυτά που έχουν υπολογιστεί για HM κύματα και να μπορούν να γίνουν κατανοητά με βάση τους ίδιους συλλογισμούς.

Στο Σχ.3.5 δείχνονται οι ταχύτητες φάσης σαν συνάρτηση της συχνότητας για το τυχαίο σύστημα που περιγράφεται στο σχήμα 3.4. Ο υπολογισμός έγινε για ποσοστό όγκου σφαιρών $f_s = 0.144$. Η συγκέντρωση $f_s = 0.144$ είναι εκείνη για την οποία υπάρχει το μέγιστο χάσμα στο αντίστοιχο fcc περιοδικό πρόβλημα [7] οπότε δεν μπορεί να θεωρηθεί χαμηλή συγκέντρωση για το σύστημα. Όπως μπορεί να παρατηρήσει κανείς από το Σχ.3.5 η ταχύτητα φάσης παρουσιάζει μέγιστα για κάποιες συχνότητες στις οποίες μάλιστα γίνεται αρκετά μεγαλύτερη από την ταχύτητα του (υψηλής ταχύτητας) περιβάλλοντος μέσου. Το γεγονός αυτό έχει το ανάλογο του στην περίπτωση διάδοσης HM κυμάτων όπου η ταχύτητα φάσης γίνεται σε ορισμένες περιπτώσεις μεγαλύτερη από την ταχύτητα του φωτός. Τα μέγιστα αυτά της ταχύτητας φάσης αντιστοιχούν στις συχνότητες εκείνες στις οποίες υπάρχει κορυφή στην ενεργό διατομή σκέδασης από μία σφαίρα όπως φαίνεται από τα σχήματα 10(a) και 11(a) του πρώτου άρθρου στο παράρτημα Δ. Στις περιοχές αυτές ισχυρής σκέδασης, η ταχύτητα φάσης χάνει το νόημά της - μια και υπάρχει πλήρης απώλεια της φάσης του κύματος - κάνοντας εύλογο το να μην αναζητήσει κανείς κάποιο φυσικό νόημα για τις υπερβολικά υψηλές τιμές της c^{ph} .

Στο Σχ.3.6 δείχνονται σαν συνάρτηση της συχνότητας οι μέσες ελεύθερες διαδρομές σκέδασης διαμήκους (l_l) και εγκάρσιου (l_t) κύματος που διαδίδεται στο σύστημα που περιγράφεται στο σχήμα 3.4. Ο υπολογισμός έγινε κι εδώ σε $f_s = 0.144$. Η συνεχής γραμμή είναι το αποτέλεσμα της απλής CPA, η διακεκομμένη της coated CPA ενώ



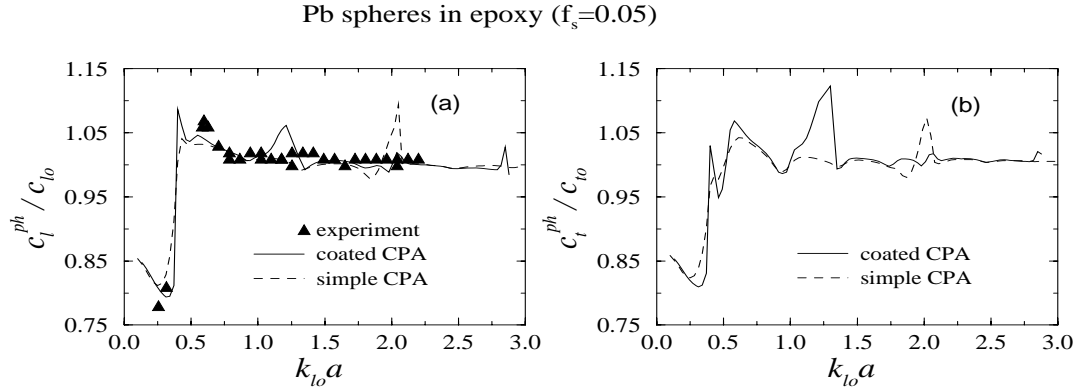
Σχ.3.6: Μέσες ελεύθερες διαδρομές σαν συνάρτηση της συχνότητας για διαμήκες (a) και εγκάρσιο (b) κύμα που διαδίδεται στο τυχαίο σύστημα που περιγράφεται στο σχήμα 3.4. Οι μέσες ελεύθερες διαδρομές υπολογίστηκαν σε ποσοστό όγκου σφαιρών $f_s = 0.144$. Η συνεχής γραμμή δείχνει το αποτέλεσμα της coated CPA, η διακεκομμένη της απλής CPA και η σπικτή το αποτέλεσμα χαμηλής συγκέντρωσης προσεγγιστικών τύπων.

σπικτή είναι αποτέλεσμα των χαμηλής συγκέντρωσης προσεγγίσεων $l_i = 1/n\sigma_i$ (δες εξίσωση 3.34) για το (a) και $l_t = 1/n\sigma_t$ (δες εξίσωση 3.35) για το (b). Τα ελάχιστα στις μέσες ελεύθερες διαδρομές αντιστοιχούν κι εδώ στις συχνότητες συντονισμού του ενός σκεδαστή όπως μπορεί να δει κανείς συγκρίνοντας με τα σχήματα 10(a) και 11(a) του πρώτου άρθρου στο παράρτημα Δ.

Όσον αφορά εξέταση για δυνατότητα εντοπισμού του κύματος στο παραπάνω σύστημα, υπολογίστηκαν οι παράμετροι $(kl)_l = \omega l_i / c_l^{ph}$ και $(kl)_t = \omega l_t / c_t^{ph}$. Τιμές μικρότερες από μονάδα των $(kl)_l$ και $(kl)_t$ βρέθηκαν για συχνότητες $\omega a / c_{l_o} \approx 0.29$ (a : ακτίνα σφαιρών). Το χάσμα στο αντίστοιχο fcc περιοδικό πρόβλημα εμφανίζεται για συχνότητες $\omega a / c_{l_o}$ ανάμεσα σε 0.31 και 0.36. Θα πρέπει να σημειωθεί ότι όσον αφορά εντοπισμό του ελαστικού κύματος, ο οποίος μπορεί να υπάρξει μόνο σε περιοχές ισχυρής σκέδασης συντονισμού, η αποσύζευξη διαμήκους κι εγκάρσιου κύματος που εισάγει η εξέταση ξεχωριστά της $(kl)_l$ και $(kl)_t$, μπαίνει κάτω από τα ίδια ερωτηματικά που συζητήθηκαν σε σχέση με την ταχύτητα ενέργειας (βλέπε παράγραφο 3.4).

Θα πρέπει να αναφερθεί τέλος ότι η σύγκλιση (δυνατότητα ύπαρξης λύσης, q_{le}, q_{te}) της CPA για την παραπάνω περίπτωση γίνεται εξαιρετικά δύσκολη ιδιαίτερα στις περιοχές κοντά στους συντονισμούς. Το γεγονός αυτό αντανακλά την αδυναμία του ομογενούς μέσου να περιγράψει τις έντονες μεταβολές στη διάδοση που συμβαίνουν σε αυτές τις περιοχές λόγω των έντονων πολλαπλών σκεδάσεων.

Όπως αναφέρθηκε στην εισαγωγή του κεφαλαίου, ένα από τα κίνητρα για την εφαρμογή της CPA στην περίπτωση ελαστικών κυμάτων είναι κάποια παλιότερα πειράματα μέτρησης της ταχύτητας φάσης. Στα πειράματα αυτά μετρήθηκε η ταχύτητα φάσης διαμήκους κύματος σε σύστημα σφαιρών από μόλυβδο ($\rho = 11.3 \text{ g/cm}^3, c_l = 2.21 \text{ km/s}, c_t = 0.86 \text{ km/s}$) τυχαία τοποθετημένων σε epoxy ($\rho = 1.202 \text{ g/cm}^3, c_l = 2.64 \text{ km/s}, c_t = 1.2 \text{ km/s}$) το οποίο σχολιάζουμε στη συνέχεια. Ένα χαρακτηριστικό στο σύστημα αυτό είναι οι παραπλήσιες ταχύτητες σκεδαστών και περιβάλλοντος και ο μικρός λόγος πυκνοτήτων, ρ_o / ρ_i , πράγμα που οδηγεί σε ενεργό διατομή σκέδασης χαρακτηριστική της περίπτωσης μεγάλων χασμάτων (βλέπε κεφ. 2.3.4). Στο Σχ.3.7 δείχνονται τα πειραματικά αποτελέσματα (τρίγωνα)



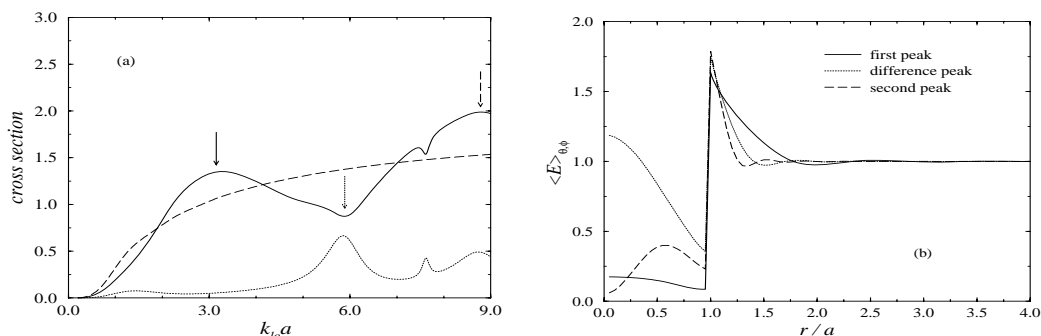
Σχ. 3.7: Ταχύτητες φάσης σαν συνάρτηση της συχνότητας για διαμήκεις (c_l^{ph}) και εγκάρσιο (c_t^{ph}) κύμα που διαδίδεται σε σύστημα σφαιρών από μόλυβδο τυχαία τοποθετημένων σε epoxy. Ποσοστό όγκου σφαιρών, $f_s = 0.05$. Τα τρίγωνα δείχνουν το πειραματικό αποτέλεσμα, η συνεχής γραμμή το αποτέλεσμα της coated CPA και η διακεκομμένη της απλής CPA. $k_{l0}a = \omega a / c_{l0}$, a : ακτίνα σφαιρών.

των Kinra et al [40] για ποσοστό όγκου σκεδαστών $f_s = 0.05$, όπως επίσης και οι ταχύτητες φάσης c_l^{ph} και c_t^{ph} υπολογισμένες στα πλαίσια της απλής (διακεκομμένη γραμμή) και της coated (συνεχής γραμμή) CPA (στους υπολογισμούς αυτούς η πυκνότητα του φαινόμενου μέσου υπολογίστηκε αυτοσυνεπώς απαιτώντας μηδενισμό του $\langle f_{it}(\theta = \pi/2) \rangle_c$). Όπως μπορεί να δει κανείς από το σχήμα, το αποτέλεσμα των CPA προσεγγίζει παρά πολύ ικανοποιητικά το αντίστοιχο πειραματικό αποτέλεσμα.

Για το σχολιασμό της μορφής των ταχυτήτων φάσης θα πρέπει να αναφερθεί κατ' αρχήν ότι η συγκέντρωση $f_s = 0.05$ είναι σχετικά χαμηλή συγκέντρωση για το σύστημα (το χάσμα στο αντίστοιχο περιοδικό πρόβλημα εμφανίζεται σε ποσοστό όγκου μολύβδου μεγαλύτερο από 10%). Η ενεργός διατομή σκέδασης για σφαίρα από μόλυβδο θυθισμένη σε epoxy (η οποία δείχνεται στο Σχ.1 του δεύτερου άρθρου του παραρτήματος Δ) αποτελείται από σχετικά υψηλούς αλλά και ευρείς συντονισμούς - πράγμα που συνεπάγεται όχι ισχυρή παγίδευση του κύματος μέσα στη σφαίρα - χωρισμένους από μια περιοχή επίσης σημαντικής σκέδασης (λόγω συνεισφοράς της άπειρα σκληρής σφαίρας).

Η χαμηλή συγκέντρωση, συνδυαζόμενη με την όχι οξεία μορφή των συντονισμών της ενεργού διατομής, κάνουν αναμενόμενο μικρές μόνο αποκλίσεις από τη σύμφωνη διάδοση του κύματος στο σύστημα του σχήματος 3.7. Οι ταχύτητες φάσης οι οποίες όπως φαίνεται από το σχήμα δεν παρουσιάζουν αφύσικες τιμές πιστοποιούν το γεγονός αυτό. Επίσης οι ταχύτητες φάσης φαίνεται να επηρεάζονται μόνο από τον πρώτο συντονισμό της ενεργού διατομής ενώ για $k_{l0}a \geq 1$ είναι σχεδόν σταθερές και κοντά στις ταχύτητες των δύο συστατικών του συστήματος. Θα πρέπει να σημειωθεί τέλος ότι η δυνατότητα της CPA να δώσει αποτελέσματα για το παραπάνω σύστημα σε υψηλότερες συγκεντρώσεις είναι πολύ περιορισμένη - ιδιαίτερα στην περιοχή συχνοτήτων μεταξύ των συντονισμών της ενεργού διατομής¹⁹. Χαρακτηριστικό της

¹⁹Όπως συζητήθηκε στο κεφάλαιο 2 η περιοχή αυτή είναι περιοχή ισχυρής σκέδασης στην οποία μάλιστα το κύμα δεν μπορεί να διαπεράσει εύκολα τις σφαίρες. Άρα υπάρχει μεγάλη απόκλιση από τη σύμφωνη διάδοση.



Σχ. 3.8: (a) : Αδιάστατη ενεργός διατομή σκέδασης σαν συνάρτηση της συχνότητας $k_{l_0} a = \omega a / c_{l_0}$ για σφαίρα από γυαλί (συνεχής γραμμή) σε νερό και για “άπειρα σκληρή” σφαίρα σε νερό (διακεκομμένη γραμμή). Η στικτή γραμμή δείχνει την ενεργό διατομή που προκύπτει αν από το πλάτος σκέδασης της σκληρής σφαίρας αφαιρεθούν τα πλάτη σκέδασης της σφαίρας από γυαλί. (b) : Πυκνότητα ενέργειας σαν συνάρτηση της απόστασης, r , από το κέντρο της σφαίρας για τις τρεις συχνότητες που δείχνουν τα βέλη στο (a) (η συνεχής γραμμή στο (b) αντιστοιχεί στη συχνότητα που δείχνει το βέλος με την συνεχή γραμμή στο (a) κοκ.) a : ακτίνα σφαίρας, c_{l_0} ταχύτητα ήχου στο νερό.

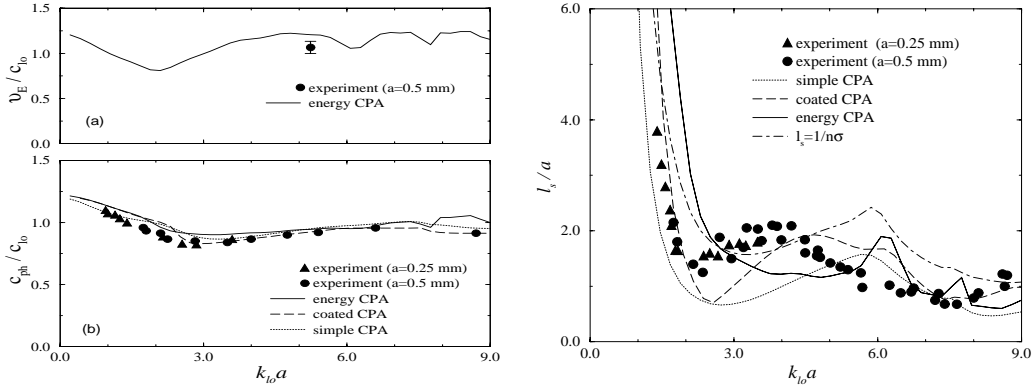
περιοχής αυτής είναι τα προβλήματα σύγκλισης και οι πολλαπλές αφύσικες λύσεις.

Δεύτερο σύστημα το οποίο έχει μελετηθεί πειραματικά και το οποίο παρουσιάζεται αμέσως παρακάτω είναι σύστημα σφαιρών από γυαλί ($\rho = 2.5 \text{ g/cm}^3, c_l = 5.7 \text{ km/s}, c_t = 3.4 \text{ km/s}$), τυχαία δυθισμένων σε νερό ($\rho = 1 \text{ g/cm}^3, c_l = 1.5 \text{ km/s}$) σε ποσοστό όγκου 63% (σημειώνεται ότι σ’ αυτή την περίπτωση η ταχύτητα στο περιβάλλον μέσο είναι πολύ χαμηλότερη από εκείνες στον σκεδαστή). Η ενεργός διατομή, σ , για σφαίρα από γυαλί δυθισμένη σε νερό δείχνεται στο σχήμα 3.8(a) (συνεχής γραμμή). Χαρακτηριστικά της είναι η όχι έντονη εξάρτηση από την συχνότητα και οι σχετικά χαμηλοί κι ευρείς συντονισμοί στους οποίους μάλιστα το κύμα δεν έχει τάσεις συγκέντρωσης μέσα στη σφαίρα (συντονισμοί που οφείλονται σε συνεισφορά της “άπειρα σκληρής” σφαίρας). Το τελευταίο φαίνεται από την στικτή γραμμή του σχήματος 3.8(a) όπου εικονίζεται η ενεργός διατομή, σ_{sb} , που προκύπτει αν από το πλάτος σκέδασης της σφαίρας από γυαλί αφαιρεθεί το πλάτος σκέδασης της σκληρής σφαίρας (δες κεφάλαιο 2). Οι κορυφές της σ_{sb} αντιστοιχούν σε περιοχές μέγιστης συγκέντρωσης του κύματος μέσα στη σφαίρα (η έλλειψη ισχυρής συγκέντρωσης του κύματος στους συντονισμούς της σ και η μεγαλύτερη συγκέντρωση στις κορυφές της σ_{sb} πιστοποιούνται και από το διάγραμμα 3.8(b) όπου εικονίζεται η πυκνότητα ενέργειας σαν συνάρτηση της απόστασης από το κέντρο της σφαίρας).

Με βάση την ασθενή εξάρτηση της ενεργού διατομής από τη συχνότητα, περιμένει κανείς για το τυχαίο σύστημα σφαίρες γυαλιού σε νερό, ασθενή εξάρτηση των ταχυτήτων και των άλλων χαρακτηριστικών της διάδοσης από τη συχνότητα. Περιμένει επίσης ταχύτητες πλησιέστερα σε αυτή του νερού ακόμα και σε μεγάλες συγκεντρώσεις, απόρροια των χαμηλών τιμών της σ_{sb} .

Το πειραματικό αποτέλεσμα για την ταχύτητα φάσης [45], τη μέση ελεύθερη διαδρομή σκέδασης [45] και την ταχύτητα ενέργειας [44] το οποίο δείχνεται στο Σχ.3.9 πιστοποιεί τις παραπάνω προβλέψεις.

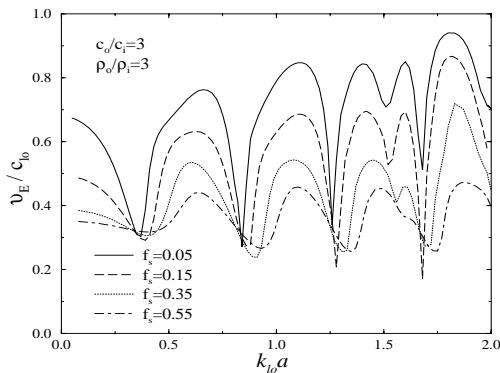
Στο Σχ.3.9 φαίνονται επίσης τα αποτελέσματα των CPA. Παρατηρεί κανείς ότι



Σχ. 3.9: Ταχύτητα ενέργειας v_E (a), ταχύτητα φάσης c_{ph} (b) και μέση ελεύθερη διαδρομή σκέδασης, l_s , (δεξιό πλαίσιο) σαν συνάρτηση της συχνότητας $k_{l_0} a = \omega a / c_{l_0}$ για σφαίρες γυαλιού τυχαία βυθισμένες σε νερό. Ποσοστό όγκου γυαλιού, $f_s = 0.63$. Τα τρίγωνα και οι κύκλοι δείχνουν το πειραματικό αποτέλεσμα για σφαίρες ακτίνας 0.25 mm και 0.5 mm αντίστοιχα. Η συνεχής, διακεκομμένη και στικτή γραμμή δείχνουν αντίστοιχα το αποτέλεσμα της CPA ενέργειας, της coated CPA και της απλής CPA. Η στικτή-διακεκομμένη γραμμή στη μέση ελεύθερη διαδρομή δίνει τη χαμηλής συγκέντρωσης προσέγγιση $l_s = 1/n\sigma$. c_{l_0} είναι η ταχύτητα του ήχου στο νερό.

το αποτέλεσμα της coated CPA (διακεκομμένη γραμμή) προσεγγίζει πάρα πολύ ικανοποιητικά το αντίστοιχο πειραματικό αποτέλεσμα. Οι αποκλίσεις, όπου υπάρχουν, καθώς και αναλυτική σύγκριση των μεθόδων σε αυτή την περίπτωση σχολιάζονται εκτεταμένα στο τέταρτο άρθρο του παραρτήματος Δ. Αξίζει να αναφερθεί εδώ ότι οι αποκλίσεις πειραματικών αποτελεσμάτων κι αποτελεσμάτων της coated CPA για $k_{l_0} a \approx 3$ αποδίδονται σε φαινόμενα αυξημένης πολλαπλής σκέδασης τα οποία δεν μπορούν να περιγραφούν πολύ ικανοποιητικά από την CPA. Η αύξηση της πολλαπλής σκέδασης σ' αυτήν την περιοχή δικαιολογείται από την ισχυρή σκέδαση από ένα σκεδαστή (δες ενεργό διατομή σκέδασης) κι από το γεγονός ότι σε $k_{l_0} a \approx 3$ το μήκος κύματος, $\lambda_{l_0} = 2\pi/k_{l_0}$, γίνεται συγκρίσιμο με την μέση απόσταση γειτονικών σκεδαστών.

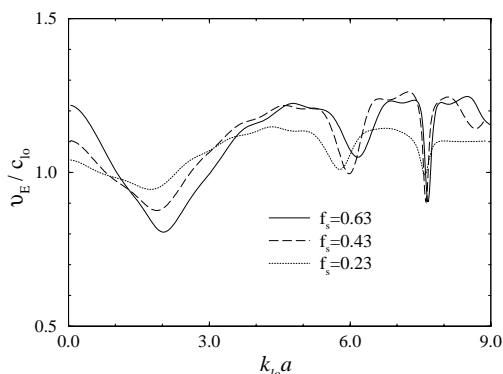
3.5.3 Ταχύτητα ενέργειας



Σχ. 3.10: Ταχύτητα ενέργειας σαν συνάρτηση της αδιάστατης συχνότητας $k_{l_0} a = \omega a / c_{l_0}$ για τυχαίο σύστημα σφαιρών από ρευστό σε ρευστό περιβάλλον μέσο. Οι παράμετροι του συστήματος είναι $\rho_o / \rho_i = 3$ και $c_{l_0} / c_{l_i} = 3$. Οι δείκτες i και o χαρακτηρίζουν αντίστοιχα τις σφαίρες και το περιβάλλον μέσο. a : ακτίνα σφαιρών.

Στο τελευταίο αυτό μέρος των αποτελεσμάτων παρουσιάζονται διαγράμματα της ταχύτητας ενέργειας, v_E , σαν συνάρτηση της συχνότητας. Το ενδιαφέρον επικεντρώνεται στο πως επηρεάζεται αυτή η συνάρτηση από τη συγκέντρωση των σκεδαστών στο σύστημα.

Στο Σχ.3.10 εικονίζεται η v_E σαν συνάρτηση της συχνότητας για ένα τυχαίο σύστημα σφαιρών από υλικό χαμηλής ταχύτητας, χαμηλής πυκνότητας, σε υψηλής ταχύτητας, υψηλής πυκνότητας ρευστό περιβάλλον μέσο. Η αντίστοιχη ενεργός διατομή σκέδασης για το σύστημα αυτό εικονίζεται στο Σχ.2.2. Η ενεργός διατομή θυμίζει κι εδώ την τυπική μορφή που συναντάται σε ΗΜ και βαθμωτά κύματα με τους οξείς συντονισμούς που συνοδεύονται από μεγάλη συγκέντρωση ενέργειας μέσα στη σφαίρα. Ανάλογα, η ταχύτητα ενέργειας v_E , όπως φαίνεται στο Σχ.3.10, ακολουθεί τα όσα έχουν συζητηθεί για την v_E στη διάδοση ΗΜ και βαθμωτών κυμάτων. Χαρακτηριστικά της δηλαδή είναι η έντονη εξάρτηση από τη συχνότητα με τα βαθειά ελάχιστα για χαμηλές συγκεντρώσεις (λόγω της καθυστέρησης του κύματος στους σκεδαστές) κι επίσης η ομαλότερη εξάρτηση από τη συχνότητα για υψηλότερες συγκεντρώσεις (λόγω του ότι το κύμα δραπετεύει τώρα ευκολότερα από τους σκεδαστές μέσω των αλληλοεπικαλυπτόμενων καταστάσεων συντονισμού τους). Η μετακίνηση των ελαχίστων όσο αυξάνει η συγκέντρωση πιστεύουμε ότι οφείλεται σε σύζευξη των καταστάσεων συντονισμού γειτονικών σκεδαστών (ανάλογα με την μετακίνηση των ενεργειακών καταστάσεων στο ηλεκτρονικό πρόβλημα λόγω ισχυρής σύζευξης).



Σχ. 3.11: Ταχύτητα ενέργειας, v_E , σαν συνάρτηση της αδιάστατης συχνότητας $k_{l_0}a = \omega a/c_{l_0}$ για σφαίρες από γυαλί τυχαία δυθισμένες σε νερό. Η v_E έχει υπολογιστεί για τρεις διαφορετικές τιμές του κατ' όγκο ποσοστού, f_s , του γυαλιού στο σύστημα. a : ακτίνα σφαιρών.

Δεύτερο σύστημα που παρουσιάζεται είναι το σύστημα σφαιρών από γυαλί σε νερό που συζητήθηκε προηγουμένως. Το σύστημα αυτό είναι αντιπροσωπευτικό της περίπτωσης σκεδαστών υψηλής ταχύτητας και πυκνότητας σε χαμηλής ταχύτητας και πυκνότητας ρευστό περιβάλλον μέσο. Βασικό χαρακτηριστικό της αντίστοιχης ενεργού διατομής σ' αυτή την περίπτωση (δες Σχ.3.8 και προηγούμενη συζήτηση) είναι το ότι οι συντονισμοί οφείλονται σε συνεισφορά της σκληρής σφαίρας.

Η ταχύτητα ενέργειας σαν συνάρτηση της συχνότητας για το σύστημα γυαλί-νερό και για διάφορες συγκεντρώσεις εικονίζεται στο Σχ.3.11. Η ομαλή εξάρτηση από τη συχνότητα σε χαμηλές συγκεντρώσεις οφείλεται στο ότι δεν υπάρχει εδώ συσσώρευση ενέργειας μέσα στις σφαίρες στους συντονισμούς και άρα δεν υπάρχει έντονη καθυστέρηση του κύματος. Η μόνη καθυστέρηση - στους συντονισμούς - οφείλεται στο σκεδαζόμενο κύμα (στο ότι δηλαδή ένα μεγάλο μέρος του επίπεδου προσπίπτοντος κύματος μετατρέπεται σε σκεδαζόμενο). Έτσι, όσο αυξάνεται η συγκέντρωση αυτό το γεγονός θα εντείνεται και το αποτέλεσμα θα είναι όλο

και βαθύτερα ελάχιστα στην v_E όπως πιστοποιείται από το σχήμα 3.11. Αξίζει να προσέξει κανείς επίσης τα ελάχιστα της v_E στη συχνότητα $k_{l_0}a \approx 6$ όπου, όπως φαίνεται από την ενεργό διατομή σ_{sb} κι από το διάγραμμα πυκνότητας της ενέργειας (δες Σχ.3.8), το κύμα έχει τάσεις συγκέντρωσης μέσα στις σφαίρες κι άρα καθυστέρησης. Αξίζει να αναφερθεί τέλος ότι στο όριο χαμηλών συχνοτήτων και επίσης σε περιοχές πολύ ασθενούς σκέδασης, η αύξηση της ταχύτητας ενέργειας με την αύξηση της συγκέντρωσης οφείλεται στην μεγαλύτερη συμμετοχή του (υψηλής ταχύτητας) γυαλιού στο σύστημα.

Παρατηρήματα

A

Στοιχειώδη μεγέθη σε σφαιρικές συντεταγμένες

A.1 Τανυστής παραμόρφωσης, u_{ij} , σε σφαιρικές συντεταγμένες

Συνιστώσες του τανυστή παραμόρφωσης σε σφαιρικές συντεταγμένες (r, θ, ϕ) σαν συνάρτηση των σφαιρικών συνιστωσών του διανύσματος μετατόπισης, \mathbf{u} :

$$\begin{aligned} u_{rr} &= \frac{\partial u_r}{\partial r}, & u_{\theta\theta} &= \frac{1}{r} \frac{\partial u_\theta}{\partial \theta} + \frac{u_r}{r}, & u_{\phi\phi} &= \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial u_\phi}{\partial \phi} + \frac{u_\theta}{r} \cot \theta + \frac{u_r}{r}, \\ 2u_{\theta\phi} &= \frac{1}{r} \left(\frac{\partial u_\phi}{\partial \theta} - u_\phi \cot \theta \right) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial u_\theta}{\partial \phi}, & 2u_{r\theta} &= \frac{\partial u_\theta}{\partial r} - \frac{u_\theta}{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial \theta}, & (A.1) \\ 2u_{\phi r} &= \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial u_r}{\partial \phi} + \frac{\partial u_\phi}{\partial r} - \frac{u_\phi}{r} \end{aligned}$$

A.2 Διανυσματικές σφαιρικές αρμονικές

Στοιχειώδεις λύσεις $\mathbf{l}_{\varepsilon nm}$, $\mathbf{m}_{\varepsilon nm}$, $\mathbf{n}_{\varepsilon nm}$ (δες κεφάλαιο 1) της ελαστικής κυματικής εξίσωσης (Εξ.1.13) σε σφαιρικές συντεταγμένες (διανυσματικές σφαιρικές αρμονικές):

$$\begin{aligned} \mathbf{l}_{\varepsilon nm}(R, k_l) &= \frac{1}{k_l} \frac{\partial}{\partial r} R_n(k_l r) P_n^m(\cos \theta) \sin m\phi \hat{\mathbf{r}} + \frac{1}{k_l r} R_n(k_l r) \frac{\partial}{\partial \theta} P_n^m(\cos \theta) \sin m\phi \hat{\boldsymbol{\theta}} \\ &\quad + \frac{m}{k_l r \sin \theta} R_n(k_l r) P_n^m(\cos \theta) \cos m\phi \hat{\boldsymbol{\phi}} \end{aligned} \quad (A.2)$$

$$\mathbf{m}_{\varepsilon nm}(R, k_t) = \frac{m}{\sin \theta} R_n(k_t r) P_n^m(\cos \theta) \sin m\phi \hat{\boldsymbol{\theta}} - R_n(k_t r) \frac{\partial}{\partial \theta} P_n^m(\cos \theta) \cos m\phi \hat{\boldsymbol{\phi}} \quad (A.3)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_{\varepsilon nm}(R, k_t) &= \frac{n(n+1)}{k_t r} R_n(k_t r) P_n^m(\cos \theta) \sin m\phi \hat{\mathbf{r}} + \frac{1}{k_t r} \frac{\partial}{\partial r} [r R_n(k_t r)] \frac{\partial}{\partial \theta} P_n^m(\cos \theta) \\ &\quad \cos m\phi \hat{\boldsymbol{\theta}} + \frac{m}{k_t r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial r} [r R_n(k_t r)] P_n^m(\cos \theta) \sin m\phi \hat{\boldsymbol{\phi}} \end{aligned} \quad (A.4)$$

R_n : συνάρτηση Bessel, $P_n^m(\cos \theta)$: πολυώνυμο Legendre.

A.3 Τανυστής τάσης, σ_{ij} , σε σφαιρικές συντεταγμένες

Από τα στοιχεία του τανυστή τάσης εκείνα τα οποία χρησιμοποιούνται στις συνοριακές συνθήκες για τον πλήρη προσδιορισμό του κύματος στο πρόβλημα της σκέδασης από μία σφαίρα είναι τα σ_{rj} με $j = r, \theta, \phi$ ¹. Σε ότι ακολουθεί παραθέτουμε το αποτέλεσμα για τα σ_{rj} όταν το πεδίο, \mathbf{u} , είναι ένα από τα στοιχειώδη διανύσματα $\mathbf{l}_{en_1^0}(R, k_l)$, $\mathbf{m}_{on_1^0}(R, k_t)$ και $\mathbf{n}_{en_1^0}(R, k_t)$ (η τιμή μηδέν (ένα) του τρίτου δείκτη (m) των διανυσματικών σφαιρικών αρμονικών αντιπροσωπεύεται από την πάνω (κάτω) γραμμή των εκφράσεων των σ_{rj}). Οποιοσδήποτε γραμμικός συνδυασμός των παραπάνω διανυσμάτων σαν \mathbf{u} , οδηγεί στον ίδιο γραμμικό συνδυασμό στοιχείων του τανυστή τάσης. Τα σ_{rj} υπολογίζονται με χρήση της εξίσωσης ορισμού του τανυστή τάσης για ισοτροπικά μέσα (Εξ.1.5) και των εξισώσεων A.1.

Για $\mathbf{u} = \mathbf{l}_{en_1^0}(R, k_l)$,

$$\sigma_{rr} = k_l [2\mu R_n''(k_l r) - \lambda R_n(k_l r)]_{P_n^1(\cos\theta)}^{P_n(\cos\theta)} \cos\phi \quad (\text{A.5})$$

$$\sigma_{r\theta} = 2\mu k_l \left[\frac{R_n'(k_l r)}{k_l r} - \frac{R_n(k_l r)}{(k_l r)^2} \right]_{[\partial P_n^1(\cos\theta)/\partial\theta]}^{\partial P_n(\cos\theta)/\partial\theta} \cos\phi \quad (\text{A.6})$$

$$\sigma_{r\phi} = -2\mu k_l \left[\frac{R_n'(k_l r)}{k_l r} - \frac{R_n(k_l r)}{(k_l r)^2} \right]_{[P_n^1(\cos\theta)/\sin\theta]}^0 \sin\phi \quad (\text{A.7})$$

Για $\mathbf{u} = \mathbf{m}_{on_1^0}(R, k_t)$,

$$\sigma_{rr} = 0 \quad (\text{A.8})$$

$$\sigma_{r\theta} = \mu k_t \left[R_n'(k_t r) - \frac{R_n(k_t r)}{k_t r} \right]_{[P_n^1(\cos\theta)/\sin\theta]}^0 \cos\phi \quad (\text{A.9})$$

$$\sigma_{r\phi} = -\mu k_t \left[R_n'(k_t r) - \frac{R_n(k_t r)}{k_t r} \right]_{[\partial P_n^1(\cos\theta)/\partial\theta]}^0 \sin\phi \quad (\text{A.10})$$

Για $\mathbf{u} = \mathbf{n}_{en_1^0}(R, k_t)$,

$$\sigma_{rr} = 2\mu k_t n(n+1) \left[\frac{R_n'(k_t r)}{k_t r} - \frac{R_n(k_t r)}{(k_t r)^2} \right]_{P_n^1(\cos\theta)}^{\partial P_n(\cos\theta)/\partial\theta} \cos\phi \quad (\text{A.11})$$

$$\sigma_{r\theta} = \mu k_t [R_n''(k_t r) + [n(n+1) - 2] \frac{R_n(k_t r)}{(k_t r)^2}]_{[\partial P_n^1(\cos\theta)/\partial\theta]}^{\partial P_n(\cos\theta)/\partial\theta} \cos\phi \quad (\text{A.12})$$

$$\sigma_{r\phi} = -\mu k_t [R_n''(k_t r) + [n(n+1) - 2] \frac{R_n(k_t r)}{(k_t r)^2}]_{[P_n^1(\cos\theta)/\sin\theta]}^0 \sin\phi \quad (\text{A.13})$$

Στις παραπάνω εξισώσεις (A.5-A.13) τα λ και μ είναι οι σταθερές Lamé ενώ τα R_n' και R_n'' δηλώνουν αντίστοιχα την πρώτη και δεύτερη παράγωγο ως προς το όρισμα της R_n .

¹Υπενθυμίζεται ότι ο τανυστής τάσης είναι συμμετρικός.

B

Σκέδαση από μια σφαίρα - υπολογισμοί

B.1 Πλήρης προσδιορισμός του πεδίου

Όπως αναφέρθηκε στο κείμενο οι συντελεστές που εμφανίζονται στις εκφράσεις τόσο του σκεδαζόμενου κύματος όσο και του κύματος στο εσωτερικό της σφαίρας στο πρόβλημα της σκέδασης από μία σφαίρα υπολογίζονται από εφαρμογή κατάλληλων συνοριακών συνθηκών στην επιφάνεια. Για πρόσπτωση διαμήκους κύματος της μορφής που περιγράφεται από την εξίσωση 2.1, οι συνοριακές αυτές συνθήκες οδηγούν στο αμέσως επόμενο γραμμικό σύστημα από τη λύση του οποίου υπολογίζονται οι A_{en0} , C_{en0} , E_{en0} και G_{en0} (δες Εξ.2.3 και Εξ.2.4).

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{en0} \\ C_{en0} \\ E_{en0} \\ G_{en0} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^l \\ b_2^l \\ b_3^l \\ b_4^l \end{bmatrix} \quad (\text{B.1})$$

Τα a_{ij} και b_i^l ($i, j \in [1, 4]$) αναφέρονται στη συνέχεια του παραρτήματος. Η πρώτη εξίσωση του συστήματος B.1 (η εξίσωση που προκύπτει από την πρώτη γραμμή του 4x4 πίνακα του αριστερού μέλους) προέρχεται από απαίτηση συνέχειας της κάθετης στην επιφάνεια της σφαίρας συνιστώσας της μετατόπισης, η δεύτερη από απαίτηση συνέχειας της εφαπτομενικής συνιστώσας ενώ η τρίτη και η τέταρτη από απαίτηση συνέχειας της κάθετης κι εφαπτομενικής αντίστοιχα συνιστώσας της τάσης.

Για πρόσπτωση εγκάρσιου κύματος (της μορφής που περιγράφεται από την εξίσωση 2.5) οι συνοριακές συνθήκες αποσυνδέουν τον υπολογισμό των B_{on1} και F_{on1} από τον υπολογισμό των υπόλοιπων συντελεστών. Οι συντελεστές A_{en1} , B_{on1} , C_{en1} , E_{en1} , F_{on1} και G_{en1} (δες εξισώσεις 2.6 και 2.7) σ' αυτή την περίπτωση υπολογίζονται από τη λύση των συστημάτων

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{en1} \\ C_{en1} \\ E_{en1} \\ G_{en1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^t \\ b_2^t \\ b_3^t \\ b_4^t \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} e_{11} & e_{12} \\ e_{21} & e_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_{on1} \\ F_{on1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1^t \\ c_2^t \end{bmatrix} \quad (\text{B.2})$$

Τα a_{ij} , b_i^l , b_i^t , e_{ij} και c_i^t δίδονται από

$$\begin{aligned}
a_{11} &= h'_n(Z_{l_o}) & a_{21} &= h_n(Z_{l_o})/Z_{l_o} \\
a_{12} &= n(n+1)h_n(Z_{t_o})/Z_{t_o} & a_{22} &= h'_n(Z_{t_o}) + h_n(Z_{t_o})/Z_{t_o} \\
a_{13} &= -j'_n(Z_{l_i}) & a_{23} &= -j_n(Z_{l_i})/Z_{l_i} \\
a_{14} &= -n(n+1)j_n(Z_{t_i})/Z_{t_i} & a_{24} &= -j'_n(Z_{t_i}) - j_n(Z_{t_i})/Z_{t_i} \\
b_1^l &= \imath j'_n(Z_{l_o}) & b_2^l &= \imath j_n(Z_{l_o})/Z_{l_o} \\
b_1^t &= m(n+1)j_n(Z_{t_o})/Z_{t_o} & b_2^t &= \imath [j'_n(Z_{t_o}) + j_n(Z_{t_o})/Z_{t_o}]
\end{aligned} \tag{B.3}$$

$$\begin{aligned}
a_{31} &= Z_{l_o} [2\mu_o h''_n(Z_{l_o}) - \lambda_o h_n(Z_{l_o})] \\
a_{32} &= 2n(n+1)\mu_o [h'_n(Z_{t_o}) - h_n(Z_{t_o})/Z_{t_o}] \\
a_{33} &= -Z_{l_i} [2\mu_i j''_n(Z_{l_i}) - \lambda_i j_n(Z_{l_i})] \\
a_{34} &= -2n(n+1)\mu_i [j'_n(Z_{t_i}) - j_n(Z_{t_i})/Z_{t_i}] \\
b_3^l &= \imath Z_{l_o} [2\mu_o j''_n(Z_{l_o}) - \lambda_o j_n(Z_{l_o})] \\
b_3^t &= 2\imath n(n+1)\mu_o [j'_n(Z_{t_o}) - j_n(Z_{t_o})/Z_{t_o}]
\end{aligned} \tag{B.4}$$

$$\begin{aligned}
a_{41} &= 2\mu_o [h'_n(Z_{l_o}) - h_n(Z_{l_o})/Z_{l_o}] \\
a_{42} &= \mu_o [Z_{t_o} h''_n(Z_{t_o}) + (n-1)(n+2)h_n(Z_{t_o})/Z_{t_o}] \\
a_{43} &= -2\mu_i [j'_n(Z_{l_i}) - j_n(Z_{l_i})/Z_{l_i}] \\
a_{44} &= -\mu_i [Z_{t_i} j''_n(Z_{t_i}) + (n-1)(n+2)j_n(Z_{t_i})/Z_{t_i}] \\
b_4^l &= 2\imath \mu_o [j'_n(Z_{l_o}) - j_n(Z_{l_o})/Z_{l_o}] \\
b_4^t &= \imath \mu_o [Z_{t_o} j''_n(Z_{t_o}) + (n-1)(n+2)j_n(Z_{t_o})/Z_{t_o}]
\end{aligned} \tag{B.5}$$

$$\begin{aligned}
e_{11} &= h_n(Z_{t_o}) & e_{21} &= \mu_o [Z_{t_o} h'_n(Z_{t_o}) - h_n(Z_{t_o})] \\
e_{12} &= -j_n(Z_{t_i}) & e_{22} &= -\mu_i [Z_{t_i} j'_n(Z_{t_i}) - j_n(Z_{t_i})] \\
c_1^t &= -j_n(Z_{t_o}) & c_2^t &= -\mu_o [Z_{t_o} j'_n(Z_{t_o}) - j_n(Z_{t_o})]
\end{aligned} \tag{B.6}$$

Στις παραπάνω εκφράσεις, $Z_{lj} = k_{lj}a = \omega a/c_{lj}$ ($j = i, o$) και $Z_{tj} = k_{tj}a = \omega a/c_{tj}$ με c_{li}, c_{ti} να δηλώνουν αντίστοιχα την ταχύτητα διάδοσης της διαμήκους και της εγκάρσιας συνιστώσας του κύματος μέσα στη σφαίρα και c_{lo}, c_{to} στο περιβάλλον μέσο. a είναι η ακτίνα της σφαίρας και j_n, h_n είναι αντίστοιχα η σφαιρική συνάρτηση Bessel πρώτου είδους και σφαιρική Hankel επίσης πρώτου είδους [24]. Τέλος, δύο χρήσιμα για την εξαγωγή των συστημάτων B.1 και B.2 ολοκληρώματα είναι τα [3]

$$\begin{aligned}
\int_0^\pi \left(\frac{dP_n^m}{d\theta} \frac{dP_{n'}^m}{d\theta} + \frac{m^2 P_n^m P_{n'}^m}{\sin^2 \theta} \right) \sin \theta d\theta &= \frac{2}{2n+1} \frac{(n+m)!}{(n-m)!} n(n+1) \delta_{nn'} \\
\int_0^\pi \frac{d}{d\theta} (P_n^m P_{n'}^m) d\theta &= 0
\end{aligned} \tag{B.7}$$

με $P_n^m(\cos \theta)$: πολυώνυμα Legendre και $\delta_{nn'} = 1$ για $n = n'$ και 0 για $n \neq n'$.

B.2 Πυκνότητα ενέργειας

Στο πρόβλημα της σκέδασης επίπεδου κύματος από μια σφαίρα, τόσο στην περίπτωση διαμήκους προσπίπτοντος κύματος όσο και στην περίπτωση εγκάρσιου, το πεδίο, \mathbf{u} , σε κάθε περιοχή του χώρου και το ίχνος, u_{ii}^{sum} , του τανυστή παραμόρφωσης u_{ij} (όπως μπορεί να δει κανείς εύκολα αντικαθιστώντας στους τύπους 2.2-2.7, A.5 και A.11 τις αντίστοιχες εκφράσεις των $\mathbf{l}_{\epsilon nm}$, $\mathbf{m}_{\epsilon nm}$ και $\mathbf{n}_{\epsilon nm}$) μπορούν να γραφούν σαν¹

$$u_r(\mathbf{r}) = \sum_n N(n) i^n u_{r,n}(r) \Theta_{r,n}(\theta) \Phi_{r,n}(\phi) \quad (\text{B.8})$$

$$u_\theta(\mathbf{r}) = \sum_n N(n) i^n [u_{\theta,n}^{\{1\}}(r) \Theta_{\theta,n}^{\{1\}}(\theta) + u_{\theta,n}^{\{2\}}(r) \Theta_{\theta,n}^{\{2\}}(\theta)] \Phi_{\theta,n}(\phi) \quad (\text{B.9})$$

$$u_\phi(\mathbf{r}) = -\sum_n N(n) i^n [u_{\theta,n}^{\{1\}}(r) \Theta_{\theta,n}^{\{2\}}(\theta) + u_{\theta,n}^{\{2\}}(r) \Theta_{\theta,n}^{\{1\}}(\theta)] \Phi_{\phi,n}(\phi) \quad (\text{B.10})$$

$$u_{ii}^{sum} = \sum_i u_{ii}(\mathbf{r}) = \sigma_{rr}(\lambda = 1, \mu = 0) = \sum_n N(n) i^n u_{ii,n}^{sum}(r) \Theta_{r,n}(\theta) \Phi_{r,n}(\phi) \quad (\text{B.11})$$

όπου για προσπίπτον διαμήκες κύμα, $N(n) = (2n + 1)$, $\Theta_{r,n}(\theta) = P_n(\cos \theta)$, $\Phi_{r,n}(\phi) = 1$, $\Theta_{\theta,n}^{\{1\}}(\theta) = \partial P_n(\cos \theta) / \partial \theta = -P_n^1(\cos \theta)$, $\Theta_{\theta,n}^{\{2\}}(\theta) = 0$, $\Phi_{\theta,n}(\phi) = 1$, $\Phi_{\phi,n}(\phi) = 0$, $u_{\theta,n}^{\{2\}} = 0$

ενώ για προσπίπτον εγκάρσιο, $N(n) = (2n + 1) / n(n + 1)$, $\Theta_{r,n}(\theta) = P_n^1(\cos \theta)$, $\Phi_{r,n}(\phi) = \cos \phi$, $\Theta_{\theta,n}^{\{1\}}(\theta) = \partial P_n^1(\cos \theta) / \partial \theta$, $\Theta_{\theta,n}^{\{2\}}(\theta) = P_n^1(\cos \theta) / \sin \theta$, $\Phi_{\theta,n}(\phi) = \cos \phi$, $\Phi_{\phi,n}(\phi) = \sin \phi$.

Όπως συζητήθηκε στο κεφάλαιο 2 η πυκνότητα ενέργειας, παίρνοντας μέση τιμή ως προς χρόνο, μπορεί να γραφεί σαν

$$\langle \mathbf{E}(\mathbf{r}) \rangle = \langle \mathbf{E}_T + \mathbf{E}_{V_1} + \mathbf{E}_{V_2} \rangle = \frac{1}{4} \rho \omega^2 \sum_i u_i u_i^* + \frac{1}{4} \lambda \sum_i u_{ii} u_{ii}^* + \frac{1}{2} \mu \sum_{i,j} u_{ij} u_{ij}^* \quad (\text{B.12})$$

Συμβολίζοντας με $\tilde{\mathbf{E}}_j$ ($j = T, V_1, V_2$) τη μέση τιμή του $\langle \mathbf{E}_j \rangle$ ως προς όλες τις διευθύνσεις ($\tilde{\mathbf{E}}_j = (1/4\pi) \int \langle \mathbf{E}_j \rangle \sin \theta d\theta d\phi$), οι ενέργειες $\tilde{\mathbf{E}}_T$, $\tilde{\mathbf{E}}_{V_1}$ και $\tilde{\mathbf{E}}_{V_2}$ τόσο για πρόσπτωση διαμήκους κύματος όσο και για πρόσπτωση εγκάρσιου δίδονται από

$$\tilde{\mathbf{E}}_T = \beta \frac{1}{4} \rho \omega^2 \sum_n N(n) [|u_{r,n}|^2 + n(n + 1) (|u_{\theta,n}^{\{1\}}|^2 + |u_{\theta,n}^{\{2\}}|^2)] \quad (\text{B.13})$$

$$\tilde{\mathbf{E}}_{V_1} = \beta \frac{1}{4} \lambda \sum_n N(n) |u_{ii,n}^{sum}|^2 \quad (\text{B.14})$$

$$\tilde{\mathbf{E}}_{V_2} = \beta \frac{1}{2} \mu \sum_n N(n) [|u_{rr,n}|^2 + \frac{1}{2r^2} n(n + 1)(n - 1)(n + 2) (|u_{\theta,n}^{\{1\}}|^2 + |u_{\theta,n}^{\{2\}}|^2) + \frac{1}{2} |u_{\theta\phi,n}|^2 + 2n(n + 1) (|u_{r\theta,n}^{\{1\}}|^2 + |u_{r\theta,n}^{\{2\}}|^2)] \quad (\text{B.15})$$

¹Στους τύπους αυτού του παραρτήματος δεν θεωρούμε άθροιση ως προς τους επαναλαμβανόμενους δείκτες.

όπου $\beta = 1$ για διαμήγεις προσπίπτον και $\beta = 1/2$ για εγκάρσιο κι επίσης

$$\begin{aligned}
 u_{rr,n} &= \frac{\partial u_{r,n}}{\partial r} & u_{r\theta,n}^{\{1\}} &= \frac{\partial u_{\theta,n}^{\{1\}}}{\partial r} - \frac{u_{\theta,n}^{\{1\}}}{r} + \frac{u_{r,n}}{r} \\
 u_{r\theta,n}^{\{2\}} &= \frac{\partial u_{\theta,n}^{\{2\}}}{\partial r} - \frac{u_{\theta,n}^{\{2\}}}{r} & u_{\theta\phi,n} &= u_{ii,n}^{sum} - u_{rr,n}
 \end{aligned} \tag{B.16}$$

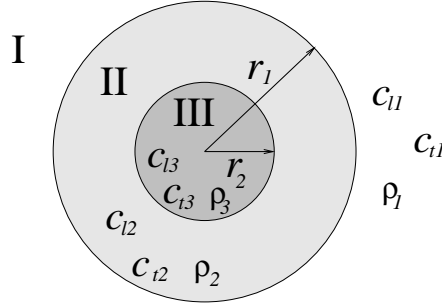
Γ

Σκέδαση από σύστημα δύο ομόκεντρων σφαιρών

Γ.1 Πεδίο - Ενεργός διατομή σκέδασης

Ο υπολογισμός της σκέδασης από ένα σύστημα δύο ομόκεντρων σφαιρών όπως εκείνο του παρακάτω σχήματος ακολουθεί την ίδια πορεία με τον υπολογισμό της σκέδασης από μια απλή σφαίρα. Αφετηρία είναι ο υπολογισμός του πεδίου παντού στο χώρο με εφαρμογή κατάλληλων οριακών και συνοριακών συνθηκών.

Σχ. Γ.1 : Σφαίρα ακτίνας r_2 καλυμμένη με σφαιρικό κέλυφος ακτίνας r_1 μέσα σε ομογενές μέσο (περιοχή I). Τα ρ , c_1 , c_i χαρακτηρίζουν αντίστοιχα την πυκνότητα και τη διαμήκη κι εγκάρσια ταχύτητα.



Για προσπίπτον τόσο διαμήκως κύμα όσο και εγκάρσιο (πολωμένο στον \hat{x} άξονα) που διαδίδονται κατά τον άξονα \hat{z} το πεδίο στην περιοχή I (έξω από τις σφαίρες) και στην περιοχή III (στην εσωτερική σφαίρα) θα δίδεται από τις αντίστοιχες εκφράσεις για το πεδίο μέσα κι έξω από τη σφαίρα στο πρόβλημα της σκέδασης από μια μόνο σφαίρα (με τα κυματανύσματα να έχουν αντικατασταθεί από τα κυματανύσματα στα αντίστοιχα υλικά). Συγκεκριμένα για πρόσπτωση διαμήκους κύματος το σκεδαζόμενο κύμα θα δίδεται από την έκφραση

$$\mathbf{u}^{sc}(\mathbf{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} i^n (2n+1) [A_{en0} \mathbf{l}_{en0}(h, k_{l1}) + C_{en0} \mathbf{n}_{en0}(h, k_{t1})] \quad (\Gamma.1)$$

ενώ το κύμα στην εσωτερική σφαίρα από την

$$\mathbf{u}^{\text{III}}(\mathbf{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} i^n (2n+1) [E_{en0} \mathbf{l}_{en0}(j, k_{l3}) + G_{en0} \mathbf{n}_{en0}(j, k_{t3})] \quad (\Gamma.2)$$

Ανάλογα, για πρόσπτωση εγκάρσιου, το σκεδαζόμενο και το κύμα στην εσωτερική σφαίρα θα δίδονται από τις εκφράσεις

$$\mathbf{u}^{sc}(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} [A_{en1} \mathbf{l}_{en1}(h, k_{l1}) + B_{on1} \mathbf{m}_{on1}(h, k_{t1}) + C_{en1} \mathbf{n}_{en1}(h, k_{t1})] \quad (\Gamma.3)$$

$$\mathbf{u}^{\text{III}}(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} [E_{en1} \mathbf{l}_{en1}(j, k_{t3}) + F_{on1} \mathbf{m}_{on1}(j, k_{t3}) + G_{en1} \mathbf{n}_{en1}(j, k_{t3})] \quad (\Gamma.4)$$

Το κύμα στην περιοχή II (μεταξύ των δύο σφαιρών) θα είναι άθροισμα του κύματος που θα υπήρχε αν δεν υπήρχε η εσωτερική σφαίρα και του σκεδαζόμενου από την επιφάνεια ακτίνας r_2 κύματος. Έτσι το πεδίο στην περιοχή II για διαμήκεις προσπίπτον κύμα μπορεί να γραφεί σαν

$$\mathbf{u}^{\text{II}}(\mathbf{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} i^n (2n+1) [H_{en0} \mathbf{l}_{en0}(j, k_{t2}) + J_{en0} \mathbf{n}_{en0}(j, k_{t2}) + L_{en0} \mathbf{l}_{en0}(h, k_{t2}) + N_{en0} \mathbf{n}_{en0}(h, k_{t2})] \quad (\Gamma.5)$$

ενώ για εγκάρσιο προσπίπτον σαν

$$\mathbf{u}^{\text{II}}(\mathbf{r}) = \sum_{n=0}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} [H_{en1} \mathbf{l}_{en1}(j, k_{t2}) + I_{on1} \mathbf{m}_{on1}(j, k_{t2}) + J_{en1} \mathbf{n}_{en1}(j, k_{t2}) + L_{en1} \mathbf{l}_{en1}(h, k_{t2}) + M_{on1} \mathbf{m}_{on1}(h, k_{t2}) + N_{en1} \mathbf{n}_{en1}(h, k_{t2})] \quad (\Gamma.6)$$

Σε όλες τις παραπάνω σχέσεις $k_{li} = \omega/c_{li}$ και $k_{ti} = \omega/c_{ti}$ ($i = 1, 2, 3$). Οι διανυσματικές σφαιρικές αρμονικές \mathbf{l} , \mathbf{m} , \mathbf{n} ορίζονται στο παράρτημα Α ενώ οι συντελεστές που τις πολλαπλασιάζουν υπολογίζονται από εφαρμογή των συνοριακών συνθηκών 2.8 και 2.9 στις επιφάνειες ακτίνας r_1 και r_2 .

Εφαρμόζοντας τις συνοριακές συνθήκες καταλήγουμε για πρόσπτωση διαμήκους κύματος σε ένα 8x8 γραμμικό σύστημα εξισώσεων της μορφής

$$a_{ij} X_j^l = b_j^l \quad \text{με} \quad \tilde{X}^l = [A_{en0}, C_{en0}, H_{en0}, J_{en0}, L_{en0}, N_{en0}, E_{en0}, G_{en0}] \quad (\Gamma.7)$$

Για πρόσπτωση εγκάρσιου καταλήγουμε σε ένα 8x8 κι ένα 4x4 σύστημα. Από τη λύση του πρώτου υπολογίζονται οι συντελεστές που πολλαπλασιάζουν τις \mathbf{l} και \mathbf{n} διανυσματικές σφαιρικές αρμονικές ενώ από τη λύση του δεύτερου οι συντελεστές που πολλαπλασιάζουν την \mathbf{m} . Το 8x8 σύστημα είναι της μορφής

$$a_{ij} X_j^t = b_j^t \quad \text{με} \quad \tilde{X}^t = [A_{en1}, C_{en1}, H_{en1}, J_{en1}, L_{en1}, N_{en1}, E_{en1}, G_{en1}] \quad (\Gamma.8)$$

ενώ το 4x4 της μορφής

$$e_{ij} Y_j^t = c_j^t \quad \text{με} \quad \tilde{Y}^t = [B_{on1}, I_{on1}, M_{on1}, F_{on1}] \quad (\Gamma.9)$$

Το σύμβολο $\tilde{\cdot}$ στις παραπάνω εκφράσεις δηλώνει τον ανάστροφο πίνακα. Οι αναλυτικές εκφράσεις των στοιχείων a_{ij} , e_{ij} , b_j^l , b_j^t και c_j^t αναφέρονται στο τελευταίο μέρος του παραρτήματος.

Ενεργός διατομή : Η ενεργός διατομή σκέδασης υπολογίζεται κι εδώ με τον ίδιο τρόπο όπως στο πρόβλημα της σκέδασης από μία μόνο σφαίρα. Οι εκφράσεις που

προκύπτουν είναι ανάλογες των τύπων 2.13 και 2.14. Η τελική έκφραση για την ενεργό διατομή, σ_l , όταν το προσπίπτον κύμα είναι διαμήκες είναι η

$$\hat{\sigma}_l = \frac{\sigma_l}{\pi a^2} = \sum_{n=0}^{\infty} 4(2n+1) \left[\frac{|A_{\epsilon n 0}|^2}{|Z_{l11}|^2} + n(n+1) \left(\frac{Z_{l11}}{Z_{t11}} \right) \frac{|C_{\epsilon n 0}|^2}{|Z_{t11}|^2} \right] \quad (\Gamma.10)$$

με $Z_{l11} = k_{l1}r_1$ και $Z_{t11} = k_{t1}r_1$. Για εγκάρσιο προσπίπτον η αντίστοιχη έκφραση για την σ_t είναι η

$$\hat{\sigma}_t = \frac{\sigma_t}{\pi a^2} = \sum_{n=0}^{\infty} 2(2n+1) \left[\frac{1}{n(n+1)} \left(\frac{Z_{t11}}{Z_{l11}} \right) \frac{|A_{\epsilon n 1}|^2}{|Z_{l11}|^2} + \frac{|B_{on1}|^2}{|Z_{t11}|^2} + \frac{|C_{\epsilon n 1}|^2}{|Z_{t11}|^2} \right] \quad (\Gamma.11)$$

Γ.2 Ενέργεια

Όπως εύκολα παρατηρεί κανείς το πεδίο, \mathbf{u} , σε κάθε περιοχή του χώρου έχει την ίδια μορφή με εκείνη που περιγράφεται στις εκφράσεις B.8-B.11 του παραρτήματος Β. Το γεγονός αυτό δίνει σαν ολική πυκνότητα ενέργειας το άθροισμα των εκφράσεων B.13, B.14 και B.16 του ίδιου παραρτήματος (B).

Γ.3 Αναλυτικός υπολογισμός του πεδίου

Στο τελευταίο αυτό μέρος του παραρτήματος αναφέρονται οι αναλυτικές εκφράσεις των a_{ij} , e_{ij} , b_j^l , b_j^t και c_j^t όπως προκύπτουν από εφαρμογή των συνοριακών συνθηκών στις επιφάνειες ακτίνας r_1 και r_2 .

$$\begin{aligned} a_{11} &= h'_n(Z_{l11}) & a_{21} &= h_n(Z_{l11})/Z_{l11} \\ a_{12} &= n(n+1)h_n(Z_{t11})/Z_{t11} & a_{22} &= h'_n(Z_{t11}) + h_n(Z_{t11})/Z_{t11} \\ a_{13} &= -j'_n(Z_{l21}) & a_{23} &= -j_n(Z_{l21})/Z_{l21} \\ a_{14} &= -n(n+1)j_n(Z_{t21})/Z_{t21} & a_{24} &= -j'_n(Z_{t21}) - j_n(Z_{t21})/Z_{t21} \\ a_{15} &= -h'_n(Z_{l21}) & a_{25} &= -h_n(Z_{l21})/Z_{l21} \\ a_{16} &= -n(n+1)h_n(Z_{t21})/Z_{t21} & a_{26} &= -h'_n(Z_{t21}) - h_n(Z_{t21})/Z_{t21} \\ a_{17} &= 0 & a_{27} &= 0 \\ a_{18} &= 0 & a_{28} &= 0 \\ b_1^l &= i j'_n(Z_{l11}) & b_2^l &= i j_n(Z_{l11})/Z_{l11} \\ b_1^t &= i n(n+1)j_n(Z_{t11})/Z_{t11} & b_2^t &= i [j'_n(Z_{t11}) + j_n(Z_{t11})/Z_{t11}] \end{aligned} \quad (\Gamma.12)$$

$$\begin{aligned} a_{31} &= Z_{l11}[2\mu_1 h_n''(Z_{l11}) - \lambda_1 h_n(Z_{l11})] \\ a_{32} &= 2n(n+1)\mu_1 [h'_n(Z_{t11}) - h_n(Z_{t11})/Z_{t11}] \\ a_{33} &= -Z_{l21}[2\mu_2 j_n''(Z_{l21}) - \lambda_2 j_n(Z_{l21})] \\ a_{34} &= -2n(n+1)\mu_2 [j'_n(Z_{t21}) - j_n(Z_{t21})/Z_{t21}] \\ a_{35} &= -Z_{l21}[2\mu_2 h_n''(Z_{l21}) - \lambda_2 h_n(Z_{l21})] \\ a_{36} &= -2n(n+1)\mu_2 [h'_n(Z_{t21}) - h_n(Z_{t21})/Z_{t21}] \\ a_{37} &= 0 \end{aligned} \quad (\Gamma.13)$$

$$\begin{aligned}
a_{38} &= 0 \\
b_3^l &= \iota Z_{l11}[2\mu_1 j_n''(Z_{l11}) - \lambda_1 j_n(Z_{l11})] \\
b_3^t &= 2\iota n(n+1)\mu_1[j_n'(Z_{t11}) - j_n(Z_{t11})/Z_{t11}] \\
\\
a_{41} &= 2\mu_1[h_n'(Z_{l11}) - h_n(Z_{l11})/Z_{l11}] \\
a_{42} &= \mu_1[Z_{t11}h_n''(Z_{t11}) + (n-1)(n+2)h_n(Z_{t11})/Z_{t11}] \\
a_{43} &= -2\mu_2[j_n'(Z_{l21}) - j_n(Z_{l21})/Z_{l21}] \\
a_{44} &= -\mu_2[Z_{t21}j_n''(Z_{t21}) + (n-1)(n+2)j_n(Z_{t21})/Z_{t21}] \\
a_{45} &= -2\mu_2[h_n'(Z_{l21}) - h_n(Z_{l21})/Z_{l21}] \\
a_{46} &= -\mu_2[Z_{t21}h_n''(Z_{t21}) + (n-1)(n+2)j_n(Z_{t21})/Z_{t21}] \\
a_{47} &= 0 \\
a_{48} &= 0 \\
b_4^l &= 2\iota\mu_1[j_n'(Z_{l11}) - j_n(Z_{l11})/Z_{l11}] \\
b_4^t &= \iota\mu_1[Z_{t11}j_n''(Z_{t11}) + (n-1)(n+2)j_n(Z_{t11})/Z_{t11}]
\end{aligned} \tag{Γ.14}$$

$$\begin{aligned}
a_{51} &= 0 & a_{61} &= 0 \\
a_{52} &= 0 & a_{62} &= 0 \\
a_{53} &= j_n'(Z_{l22}) & a_{63} &= j_n(Z_{l22})/Z_{l22} \\
a_{54} &= n(n+1)j_n(Z_{t22})/Z_{t22} & a_{64} &= j_n'(Z_{t22}) + j_n(Z_{t22})/Z_{t22} \\
a_{55} &= h_n'(Z_{l22}) & a_{65} &= h_n(Z_{l22})/Z_{l22} \\
a_{56} &= n(n+1)h_n(Z_{t22})/Z_{t22} & a_{66} &= h_n'(Z_{t22}) + h_n(Z_{t22})/Z_{t22} \\
a_{57} &= -j_n'(Z_{l32}) & a_{67} &= -j_n(Z_{l32})/Z_{l32} \\
a_{58} &= -n(n+1)j_n(Z_{t32})/Z_{t32} & a_{68} &= -(j_n'(Z_{t32}) + j_n(Z_{t32})/Z_{t32}) \\
b_5^l &= 0 & b_6^l &= 0 \\
b_5^t &= 0 & b_6^t &= 0
\end{aligned} \tag{Γ.15}$$

$$\begin{aligned}
a_{71} &= 0 \\
a_{72} &= 0 \\
a_{73} &= Z_{l22}[2\mu_2 j_n''(Z_{l22}) - \lambda_2 j_n(Z_{l21})] \\
a_{74} &= 2n(n+1)\mu_2[j_n'(Z_{t22}) - j_n(Z_{t22})/Z_{t22}] \\
a_{75} &= Z_{l22}[2\mu_2 h_n''(Z_{l22}) - \lambda_2 h_n(Z_{l22})] \\
a_{76} &= 2n(n+1)\mu_2[h_n'(Z_{t22}) - h_n(Z_{t22})/Z_{t22}] \\
a_{77} &= -Z_{l32}[2\mu_3 j_n''(Z_{l32}) - \lambda_3 j_n(Z_{l32})] \\
a_{78} &= -2n(n+1)\mu_3[j_n'(Z_{t32}) - j_n(Z_{t32})/Z_{t32}] \\
b_7^l &= 0 \\
b_7^t &= 0 \\
\\
a_{81} &= 0 \\
a_{82} &= 0
\end{aligned} \tag{Γ.16}$$

$$\begin{aligned}
a_{83} &= 2\mu_2[j'_n(Z_{l22}) - j_n(Z_{l22})/Z_{l22}] \\
a_{84} &= \mu_2[Z_{t22}j''_n(Z_{t22}) + (n-1)(n+2)j_n(Z_{t22})/Z_{t22}] \\
a_{85} &= 2\mu_2[h'_n(Z_{l22}) - h_n(Z_{l22})/Z_{l22}] \\
a_{86} &= \mu_2[Z_{t22}h''_n(Z_{t22}) + (n-1)(n+2)j_n(Z_{t22})/Z_{t22}] \\
a_{87} &= -2\mu_3[j'_n(Z_{l32}) - j_n(Z_{l32})/Z_{l32}] \\
a_{88} &= -\mu_3[Z_{t32}j''_n(Z_{t32}) + (n-1)(n+2)j_n(Z_{t32})/Z_{t32}] \\
b_8^l &= 0 \\
b_8^t &= 0
\end{aligned} \tag{Γ.17}$$

$$\begin{aligned}
e_{11} &= h_n(Z_{t11}) & e_{21} &= \mu_1[Z_{t11}h'_n(Z_{t11}) - h_n(Z_{t11})] \\
e_{12} &= -j_n(Z_{t21}) & e_{22} &= -\mu_2[Z_{t21}j'_n(Z_{t21}) - j_n(Z_{t21})] \\
e_{13} &= -h_n(Z_{t21}) & e_{23} &= -\mu_2[Z_{t21}h'_n(Z_{t21}) - h_n(Z_{t21})] \\
e_{14} &= 0 & e_{24} &= 0 \\
c_1^t &= -j_n(Z_{t11}) & c_2^t &= -\mu_1[Z_{t11}j'_n(Z_{t11}) - j_n(Z_{t11})]
\end{aligned} \tag{Γ.18}$$

$$\begin{aligned}
e_{31} &= 0 & e_{41} &= 0 \\
e_{32} &= j_n(Z_{t22}) & e_{42} &= \mu_2[Z_{t22}j'_n(Z_{t22}) - j_n(Z_{t22})] \\
e_{33} &= h_n(Z_{t22}) & e_{43} &= \mu_2[Z_{t22}h'_n(Z_{t22}) - h_n(Z_{t22})] \\
e_{34} &= -j_n(Z_{t32}) & e_{44} &= -\mu_3[Z_{t32}j'_n(Z_{t32}) - j_n(Z_{t32})] \\
c_3^t &= 0 & c_4^t &= 0
\end{aligned} \tag{Γ.19}$$

Στις παραπάνω εκφράσεις $Z_{lij} = k_{li}r_j$, $Z_{tij} = k_{ti}r_j$ ($i = 1, 2, 3$), ($j = 1, 2$) και $i = \sqrt{-1}$. Οι $\lambda (= \rho(c_l^2 - 2c_t^2))$, $\mu (= \rho c_t^2)$ είναι οι σταθερές Lamé ενώ οι δείκτες 1, 2, 3 στα κυματανύσματα και στις σταθερές Lamé χαρακτηρίζουν τις περιοχές I, II και III αντίστοιχα του σχήματος Γ.1.



Δημοσιεύσεις (Publications)

- Δ.1 Interpretation of the Band Structure Results for Elastic and Acoustic Waves by Analogy with the LCAO Approach**
- Δ.2 Elastic Wave Band Gaps in 3-D Periodic Polymer Matrix Composites**
- Δ.3 Elastic Waves in Periodic Composite Materials**
- Δ.4 Acoustic Waves in Random Media**
- Δ.5 Spectral gaps for Electromagnetic and Scalar waves: Possible explanation for certain differences**

Βιβλιογραφία

- [1] Landau and Lifshitz, *Theory of Elasticity*, 3rd Edition, (Pergamon Press, Oxford, 1986).
- [2] N. Einspruch and R. Truell, *J. Appl. Phys.* **31**, 806 (1960).
- [3] J. A. Straton, *Electromagnetic Theory*, (McGraw-Hill, New York, 1941).
- [4] Morse and Feshbach, *Methods of Theoretical Physics* (McGraw-Hill, New York, 1953) p.142-150.
- [5] M. M. Sigalas and E. N. Economou, *J. Sound Vibr.* **158**, 377 (1992).
- [6] M. M. Sigalas and E. N. Economou, *Sol. St. Comm.* **86**, 141 (1993).
- [7] E. N. Economou and M. M. Sigalas, in *Photonic Band Gaps and Localization*, edited by C. M. Soukoulis (Plenum, New York, 1993), pp.317-338.
- [8] M. M. Sigalas, E. N. Economou, and M. Kafesaki, *Phys. Rev. B* **50**, 3393 (1994).
- [9] E. N. Economou and M. M. Sigalas, *J. Acoust. Soc. Am.* **95**, 1734 (1994).
- [10] M. Kafesaki, M. M. Sigalas and E. N. Economou, *Sol. St. Commun.* **96**, 285 (1995).
- [11] M. Kafesaki, E. N. Economou and M. M. Sigalas, in *Photonic Band Gap Materials*, edited by C. M. Soukoulis (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1996), pp.143-164.
- [12] J. O. Vasseur, B. Djafari-Rohani, L. Dobrzynski, M. S. Kushwaha and P. Halevi, *J. Phys. : Cond. Mat.* **6**, 8759 (1994).
- [13] M. Kafesaki and E. N. Economou, *Phys. Rev. B* **52**, 13317 (1995).
- [14] S. Datta, C. T. Chan, K. M. Ho, C. M. Soukoulis, E. N. Economou, in *Photonic Band Gaps and Localization*, edited by C. M. Soukoulis, (Plenum, New York, 1993), p.289.
- [15] C. F. Yiang and R. Truell, *J. Appl. Phys.* **27**, 1086 (1956).
- [16] G. Johnson and R. Truell, *J. Appl. Phys.* **36**, 3467 (1965).
- [17] D. W. Kraft and M. C. Franzblau, *J. Appl. Phys.* **42**, 3019 (1971).
- [18] G. Gaunaurd and H. Uberall, *J. Appl. Phys.* **50**, 4642 (1979).
- [19] G. Gaunaurd and H. Uberall, *J. Acoust. Soc. Am.* **67**, 1432 (1980).

- [20] D. Brill, G. Gaunaurd and H. Uberall, *J. Acoust. Soc. Am.* **67**, 414 (1980).
- [21] D. Brill, G. Gaunaurd and H. Uberall, *J. Appl. Phys.* **52**, 3205 (1981).
- [22] D. Brill and G. Gaunaurd, *J. Acoust. Soc. Am.* **81**, 1 (1987).
- [23] L. Flax, G. Gaunaurd and H. Uberall, in *Physical Acoustics*, edited by W. P. Mason (Academic, New York, 1981), vol. XV.
- [24] M. Abramowitz and I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover Publications, Inc., New York, 1970).
- [25] V. V. Varadan, V. K. Varadan, in *Acoustic Electromagnetic and Elastic Wave Scattering - Focus on the T-Matrix Approach*, edited by V. K. Varadan, V. V. Varadan (Pergamon Press, New York, 1979), p.3.
- [26] P. Sheng, editor, *Scattering and Localization of Classical Waves in Random Media* (World Scientific, Singapore, 1990).
- [27] C. M. Soukoulis, editor, *Photonic Band Gaps and Localization* (Plenum, New York, 1993).
- [28] C. M. Soukoulis, editor, *Photonic Band Gap Materials* (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1996).
- [29] P. Sheng, *Introduction to Wave Scattering, Localization and Mesoscopic Phenomena* (Academic Press, San Diego, 1995).
- [30] E. N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics* (Springer-Verlag, Berlin, 1983).
- [31] Ad Lagendijk, B. A. van Tiggelen, *Physics Reports* **270** 145 (1996).
- [32] M. P. van Albada, B. A. van Tiggelen, Ad Lagendijk, A. Tip, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 3132 (1991).
- [33] A. Z. Genack, J. H. Li, N. Garcia, A. A. Lisyansky, in [27], pp.23-55.
- [34] B. A. van Tiggelen, Ad Lagendijk, M. P. van Albada and A. Tip, *Phys. Rev. B* **45**, 12233 (1992).
- [35] B. A. van Tiggelen, Ad Lagendijk, *Eur. Phys. Lett.* **23**, 311 (1993).
- [36] C. M. Soukoulis, S. Datta and E. N. Economou, *Phys. Rev. B* **49**, 3800 (1994).
- [37] K. Bush, C. M. Soukoulis and E. N. Economou, *Phys. Rev. B* **52**, 10834 (1995).
- [38] K. Bush and C. M. Soukoulis, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3442 (1995).
- [39] K. Bush, *Transport Properties of Classical Waves in Disordered Media* (PhD thesis, Karlsruhe, 1996).
- [40] V. K. Kinra, E. L. Ker and S. K. Datta, *Mech. Res. Commun* **9**, 109 (1982).

- [41] V. K. Kinra and E. L. Ker, *Int. J. Solids Structures* **19**, 393 (1983).
- [42] V. K. Kinra and P. Li, *Int. J. Solids Structures* **22**, 1 (1986).
- [43] L. Schwartz and T. J. Plona, *J. Appl. Phys.* **55**, 3971 (1984).
- [44] J. H. Page, H. P. Schriemer, A. E. Bailey and D. A. Weitz, *Phys. Rev. E* **52**, 3106 (1995).
- [45] J. H. Page, P. Sheng, H. P. Schriemer, I. Jones, X. Jing and D. A. Weitz, *Science* **271**, 634 (1996).
- [46] E. N. Economou and C. M. Soukoulis, *Phys. Rev. B* **40**, 7977 (1989).
- [47] K. Bush, C. M. Soukoulis and E. N. Economou, *Phys. Rev. B* **50**, 93 (1994).
- [48] E. N. Economou, C. M. Soukoulis and A. Zdetsis, *Phys. Rev. B* **30**, 1686 (1984).
- [49] E. N. Economou, C. M. Soukoulis, M. H. Cohen and A. Zdetsis, *Phys. Rev. B* **31**, 6172 (1985).
- [50] E. N. Economou and C. M. Soukoulis, in [26], pp.404-421.
- [51] J. E. Gubernatis, E. Domany and J. A. Krumhansl, *J. Appl. Phys.* **48**, 2804 (1977).
- [52] A. J. Devaney, *J. Math. Phys.* **21**, 2603 (1980).
- [53] J-Y Kim, J-G Ih and B-H Lee, *J. Acoust. Soc. Am.* **97**, 1380 (1995).
- [54] J. G. Berryman, *J. Acoust. Soc. Am.* **68**, 1809 (1980).
- [55] P. N. Sen and D. L. Johnson, *Phys. Rev. B* **27**, 3133 (1983).

Interpretation of the Band Structure Results for Elastic and Acoustic Waves by Analogy with the LCAO Approach

M. Kafesaki and E. N. Economou

*Research Center of Crete, FORTH, P.O. Box 1527, 71110 Heraklio, Crete, Greece
and Department of Physics, University of Crete.*

The band structure results for elastic and acoustic waves propagating in a composite (consisting of periodically placed spheres in a host material) are analyzed by employing the frequency dependence of the scattering cross-section from a single sphere. Two limiting modes of propagation can be visualized. According to the first the wave propagates mainly through the host material; according to the second the wave hops coherently from a sphere to its neighbors using the resonances in the single sphere scattering cross-section. This second mode is the analog of the linear combination of atomic orbitals (LCAO) in electronic propagation, with the atomic orbitals replaced by the resonances.

PACS no : 0.3.40.Kf , 62.30.+d

I. INTRODUCTION

There is a growing interest in recent years for the propagation of classical waves^{1,2} (CW) such as electromagnetic³⁻¹⁴ (EM) , acoustic¹⁵⁻¹⁶ (AC, in fluids) and elastic¹⁵⁻²⁰ (EL, in solids) in composite materials either periodic or random. The interest for CW in periodic materials, is mainly connected to the question of the existence or not of spectral gaps (stop bands). This same question applied to the electron waves, constitutes the heart of solid state physics and has been studied extensively over the last sixty-five years.

However, CW propagating in composites, where each component allows free propagation, present novel aspects not encountered in electron waves: i) The classical wave equation, $\nabla^2\phi + (\omega^2/c^2(\mathbf{r}))\phi = 0$, is equivalent with Shrödinger's equation, $\nabla^2\phi + 2(E - V(\mathbf{r}))\phi = 0$, if and only if, the corresponding electronic energy, E , is higher than the maximum value of the potential $V(\mathbf{r})$. In that energy region localization of the electrons (for random systems) or spectral gaps (for periodic systems) do not appear easily, although systematic examination of the problem has not been done (at least for the random case). ii) The vector character of EM and EL waves plays an important and novel role in connection with the question of spectral gaps iii) The spatial variation of the mass density entering the equations for AC and EL waves, modifies the wave equation in a non-trivial way introducing the possibility of novel behavior such as the exclusion of the wave from one of the two components of the binary by allowing the density ratio to be much larger or much smaller than unity (while the velocity ratio remains fixed). The interest in spectral gaps for CW stems from the possibility of tailoring the EM, AC and EL spectrum and thus possibly repeating with photons or even phonons some of the wonderful things we did with electrons in semiconductors.

CW possess also many advantages over electron waves for the study of their propagation in random media and especially for checking experimentally the disorder induced transition from propagating to localized eigenstates. Such a transition although very important for the transport properties of many materials, cannot be studied experimentally in an unambiguous way for electron waves because of the difficulty of fixing the electronic energy and because of the interactions among electrons and phonons. In contrast, for CW, the frequency can be chosen accurately and easily and the complications due to interactions are absent (at least for weak fields). However, one has to overcome the difficulty of constructing composites sustaining localized CW.

The solution of this last problem was greatly facilitated by the suggestion by John and Rangarajan¹ and by Economou and Zdetsis² that the existence of a band of localized eigenstates in a random system is directly related with the existence of spectral gaps in a periodic system since both are due to destructive interference of multiple scattered waves. Indeed, by gradually disordering a periodic system possessing gaps, we create tails of localized eigenstates within the gap. This was the main reason for the initial revival of interest in CW propagating within periodic media.

Scalar waves were the first to be studied^{3,21}. It was found^{1,2,21,22} that the main parameters determining the appearance or not of band gaps and of bands of localized eigenstates were the *volume fraction* of one of the components of the binary composite structure and the *ratio of velocities* of propagation in each component of the system. Indeed, the velocity of propagation ratio between the two components of the composite medium must exceed a certain threshold value and the volume fraction of the low velocity

component must be in a certain range which depends on the topology and the geometry of the composite structure for gaps to appear.

Other factors such as the topology (whether the low velocity component consists of isolated inclusions - cermet topology - or forms a continuous network - network topology), the lattice structure and other geometrical characteristics were found to play a role too.

Led by the pioneer experiment of Yablonovitch and Gmitter⁵, attention was directed to the possible existence of gaps in the propagation of EM waves in periodic composite structures (where one of the components may be just air). Although the conditions for gaps in the EM case were more severe than those in the scalar case, structures were found computationally⁶⁻⁸ and constructed experimentally (see e.g. the article by E. Yablonovitch in ref. 11), exhibiting gaps up to the 10^{12} Hz range²³. The coupling between the two components of the EM wave, through a term involving $\nabla \cdot \mathbf{E}$, seems²⁰ to be responsible for some notable differences from the scalar case such as the preference for the network topology.

Acoustic (ACW) and elastic waves (ELW) attracted attention in connection with the gap or localization possibility^{15,16} not only because of their many application but for their rich physics as well. The latter stems from the enormous variety of easily constructed structures, the appearance of a term proportional to $\nabla \rho \nabla \cdot \mathbf{u}$ (where \mathbf{u} is the acoustic field displacement and ρ is the mass density) and the full vector character of the elastic case with various velocity ratio between the longitudinal and the transverse components. The wealth of computational^{15,16,18-20} and experimental^{24,25,17} data which have been accumulated regarding the midgap frequency, the size of the gap and its dependence on the various parameters need further physical interpretations.

For all types of CW it has been found that:

i) The material corresponding to low propagation velocity embedded in a high propagation velocity matrix is a more efficient scatterer than the inverse arrangement, *everything else being the same*. This is not surprising since low propagation velocity corresponds to negative potential in the electronic case. It is well known (in the electronic case) that a negative scattering potential may exhibit strong peaks (resonances) in the scattering cross-section.

ii) The higher the velocity ratio between the two components of the composite, the more favorable the condition for gaps (although saturation appears for very high values of this ratio).

iii) The volume fraction occupied by the low velocity component must be in certain range for gaps to exist. For AC and EL waves, in three dimensional structures, this range is usually around the 10% to 20% mark (although higher values have been observed¹⁷), while for EM higher values up to 50% have been found. The higher the ratio $\omega_g a/c$ the higher the favorable volume fraction tends to be (ω_g is the midgap frequency, a is the sphere radius, and c is the wave velocity).

iv) AC and EL waves seem to prefer in most cases the cermet topology while the network topology gives better results for EM waves.

v) For AC and EL waves besides the velocity contrast, the density contrast is very important. However, for AC waves low density scatterers (i.e. low density inclusions in high density matrix) is favoring gaps, while for EL waves high density inclusions in a low density matrix is the preferable set-up.

vi) For EL waves the ratio of longitudinal to transverse velocities (c_l/c_s) in each component is another parameter; usually the smaller this ratio the better for gap creation although the dependence on this parameter in some cases appears more complicated and less clear.

Considerable success in understanding the above results for simple scalar classical waves (corresponding to ACW and constant density) was achieved by considering a plane wave scattered by a single inclusion and by connecting the strong resonances in this scattering cross-section with the appearance of gaps. In this way the position as well as the size of the gap can be estimated^{2,26} by the position and the magnitude of the first few strong resonances which occur when half the wave length within the inclusion medium is comparable to an integer times its linear size. By considering also the condition for Bragg interference of these strongly scattered waves, one obtains a rough estimate of the optimum volume fraction. Similar analysis was used to interpret the appearance and the size of the gaps for EM wave propagation²⁶ although the connection is more complicated probably because of the vector character of the EM waves.

In the present paper we attempt the same approach of connecting the multiple scattering induced gaps with strong resonances in the single scattering cross-section for AC and EL waves. For this purpose we calculate the scattering cross-section for a plane ACW and ELW scattered by a single spherical inclusion. We compare the features of this cross-section with previous band structure results¹⁸⁻²⁰ in periodic composites, checking thus the connection between the two and possibly interpreting the existing results, especially the puzzling observation of the mass density contrast in fluids and in solids.

II. MODEL AND METHODS OF CALCULATION

As was mentioned above, the main part of the present work is the calculation of the scattering cross-sections by a single spherical inclusion and their possible connection with spectral gaps in periodic composites.

This calculation was first done by Yiang and Truell²⁷⁻²⁹. Also G. Gaunard and H. Uberall³⁰⁻³¹ (see also ref.32) have worked extensively on the scattering from a single spherical inclusion.

Here, we calculate this cross-section following mainly Straton's³³ notation and formulae. We apply these formulae, among other systems, to combination of matrix-scatterer for which band structure results in composites are available^{15,16,18-20,34}. In Appendix B we write explicitly the rather complicated formulae for the cross-section for completeness (and because of a few misprints in the existing literature regarding these formulae).

We shall present the analytical results for the case where the two materials (matrix - inclusion) are solids. Liquids, in computational work, can be treated as solids with shear wave velocity almost equal to zero.

We consider two types of incident wave propagating in the $\hat{\mathbf{z}}$ - direction and incident on the surface of the sphere.

- a) a longitudinal plane wave (L- scattering),
- b) a shear (transverse) plane wave polarized in the $\hat{\mathbf{x}}$ -direction (S-scattering).

For the calculation of the scattering cross-section which is defined as the scattered energy flux to the incident energy flux per unit area, the knowledge of the scattered wave and the wave inside the sphere is necessary. The above waves result from partial solutions of the elastic wave equation with application of proper boundary conditions on the surface of the sphere.

Assuming a time dependence of the form $e^{-i\omega t}$, the time independent elastic wave equation in a homogeneous medium can be written as:

$$(\lambda + 2\mu)\nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \mu\nabla \times \nabla \times \mathbf{u} + \rho\omega^2 \mathbf{u} = 0 \quad (2.1)$$

where \mathbf{u} is the displacement vector, ρ the mass density and λ, μ the so called Lamé coefficients of the medium³⁵.

This equation gives rise to uncoupled longitudinal and shear waves with velocities $c_l = \sqrt{(\lambda + 2\mu)/\rho}$ and $c_s = \sqrt{\mu/\rho}$ respectively. These waves are mixed through the scattering process.

The solution of (2.1) in spherical coordinates can be reduced to the solution of three scalar Helmholtz equations (see Straton³³, p.392-423) and has the following general form:

$$\mathbf{u} = \mathbf{l} + \mathbf{m} + \mathbf{n} \quad (2.2)$$

where $\mathbf{l}, \mathbf{m}, \mathbf{n}$ are three independent vector solutions of (2.1). Each of them is obtained as a linear combination of vectors $\mathbf{l}_{\sigma nm}, \mathbf{m}_{\sigma nm}, \mathbf{n}_{\sigma nm}$ (see Appendix A) each one of which comes from a solution of the scalar Helmholtz equation (see Straton³³).

In the following discussion the subscript "o" (out) in the velocities (c), wave vectors (k), and Z 's (see below) is referred to the medium of the matrix and the subscript "i" (in) to the medium of the scatterer. In the vector spherical harmonics $\mathbf{l}, \mathbf{m}, \mathbf{n}$, and the constants which appeared in the formulae for the cross-sections (A, B, \dots) the subscripts "e", "o" mean even and odd respectively (note the double use of "o").

In case (a) we consider a plane longitudinal incident wave of the form:

$$\mathbf{u}^{inc}(\mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{k}_{lo}\mathbf{r})}\hat{\mathbf{z}}, \quad k_{lo} = \omega/c_{lo}, \quad (2.3)$$

propagating in the $\hat{\mathbf{z}}$ -direction ($\mathbf{k}_{lo} = k_{lo}\hat{\mathbf{z}}$).

This involves the $m=0$, even \mathbf{l} components only and can be written as:

$$\mathbf{u}^{inc} = \sum_{n=0}^{\infty} (-i^{n+1})(2n+1)\mathbf{l}_{en0}(j, k_{lo}) \quad (2.4)$$

The scattered wave and the wave inside the sphere result from the solution of (2.1) in each region and the boundary conditions on the surface of the sphere (see Appendix A) and have the form:

$$\mathbf{u}^{sc} = \sum_{n=0}^{\infty} i^n (2n+1) [A_{en0}\mathbf{l}_{en0}(h, k_{lo}) + C_{en0}\mathbf{n}_{en0}(h, k_{so})] \quad (2.5)$$

and

$$\mathbf{u}^{in} = \sum_{n=0}^{\infty} i^n (2n+1) [E_{en0}\mathbf{l}_{en0}(j, k_{li}) + G_{en0}\mathbf{n}_{en0}(j, k_{si})] \quad (2.6)$$

The coefficients A_{en0}, C_{en0} , are determined in Appendix B. The symbols in the parentheses of \mathbf{l}, \mathbf{n} (or \mathbf{m}) denote the kind of Bessel function the first, and the wavevector the second which contained in

the definition of \mathbf{l} , \mathbf{n} (or \mathbf{m}); h : the spherical Hankel function of the first kind, j : the spherical Bessel function and $k_{so} = \omega/c_{so}$, $k_{li} = \omega/c_{li}$, $k_{si} = \omega/c_{si}$.

The dimensionless scattering cross-section ($\hat{\sigma}_l$) for the case of eq.(2.3) is given by:

$$\hat{\sigma}_l = \frac{\sigma_l}{\pi a^2} = \sum_{n=0}^{\infty} 4(2n+1) \left[\frac{|A_{en0}|^2}{|Z_{lo}|^2} + n(n+1) \left(\frac{Z_{lo}}{Z_{so}} \right) \frac{|C_{en0}|^2}{|Z_{so}|^2} \right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\sigma_l(n)}{\pi a^2} \quad (2.7)$$

where a is the radius of the sphere, $Z_{lo} = k_{lo}a$ and $Z_{so} = k_{so}a = (\omega/c_{so})a$. $\sigma_l(n)$ are the partial scattering cross-sections for each mode (n). Each of them, as can be seen from the above formula, is a sum of two terms; the first arises from the longitudinal and the second from the shear scattered wave. For the derivation of $\hat{\sigma}_l$ see Appendix A.

In case (b) we consider a shear $\hat{\mathbf{x}}$ - polarized incident wave of the form:

$$\mathbf{u}^{inc}(\mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{k}_{so}\mathbf{r})} \hat{\mathbf{x}} = \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} [\mathbf{m}_{on1}(j, k_{so}) - i \mathbf{n}_{en1}(j, k_{so})] \quad (2.8)$$

propagating in the $\hat{\mathbf{z}}$ -direction ($\mathbf{k}_{so} = k_{so}\hat{\mathbf{z}}$).

In this case the scattered wave is:

$$\mathbf{u}^{sc} = \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} [A_{en1} \mathbf{l}_{en1}(h, k_{lo}) + B_{on1} \mathbf{m}_{on1}(h, k_{so}) + C_{en1} \mathbf{n}_{en1}(h, k_{so})] \quad (2.9)$$

the wave inside the sphere is:

$$\mathbf{u}^{in} = \sum_{n=1}^{\infty} i^n \frac{2n+1}{n(n+1)} [E_{en1} \mathbf{l}_{en1}(j, k_{li}) + F_{on1} \mathbf{m}_{on1}(j, k_{si}) + G_{en1} \mathbf{n}_{en1}(j, k_{si})] \quad (2.10)$$

and the dimensionless S-scattering cross-section ($\hat{\sigma}_s$) is given by (see Appendix A):

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_s &= \frac{\sigma_s}{\pi a^2} = \sum_{n=1}^{\infty} 2(2n+1) \left[\frac{1}{n(n+1)} \left(\frac{Z_{so}}{Z_{lo}} \right) \frac{|A_{en1}|^2}{|Z_{lo}|^2} + \frac{|B_{on1}|^2}{|Z_{so}|^2} + \frac{|C_{en1}|^2}{|Z_{so}|^2} \right] \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sigma_s(n)}{\pi a^2} \end{aligned} \quad (2.11)$$

$A_{en1}, B_{on1}, C_{en1}$, are also determined in Appendix B. In the case of S-scattering, each partial cross-section ($\sigma_s(n)$) is a sum of three terms. The first one is the contribution of the longitudinal scattered wave and the second and third the contribution of the transverse \mathbf{m} and \mathbf{n} scattered waves respectively.

The infinite sums appearing in the definition of $\hat{\sigma}_l, \hat{\sigma}_s$, in all of our calculations have been approximated with finite sums (by using a truncation criterion) containing, at most, 15 terms. For small frequencies ($Z_l, Z_s < 1$), in most of the cases, three or four terms are able to give satisfactory accuracy. In all cases the relative truncation error is less than 10^{-4} .

III. RESULTS AND DISCUSSION

As was mentioned earlier, a systematic examination of the elastic wave propagation through various periodic lattices each one consisting of scatterers periodically embedded in a homogeneous matrix - with emphasis in the case of spherical scatterers - has been done and the optimal conditions for gap creation have been extensively studied^{15-20,34}.

Here, we try to connect the appearance of a gap and other characteristics of the band structure in a periodic system consisting of spherical inclusions in an homogeneous matrix with the form of the cross-section from a single inclusion. This connection determines to what extent single sphere scattering is an important factor in determining some characteristic features in the band structure and how it can be used to predict the possible existence of gaps.

For this reason we calculated the cross-section from a single scatterer and examined its dependence on:

- i) the velocity contrast of the two materials (sphere and matrix),
- ii) the ratio of longitudinal to shear wave velocity in each of them,
- iii) the density contrast of the two materials for both the liquid and the solid case.

We compared this dependence with the aforementioned dependence of some features of the band structure on the same parameters and we connected the position of the resonances with flat bands and possibly with gap positions.

The central idea is to check whether the approach of linear combination of atomic-like orbitals (LCAO or tight binding method), which is so fruitful for analyzing the electronic band structure in crystalline

solids, can be extended to the case of CW propagating in periodic composite media. Cross-section resonances in the CW case are expected to be the analogs of the atomic like orbitals in the electronic case.

In attempting this extension of the LCAO approach to CW, one should keep in mind some important differences between the two cases: (i) Resonances are not true eigenstates, rigorously localized inside and around each scatterer as the atomic-like orbitals; actually, as will be discussed later on, there are some broad “resonances” associated with a *depletion* of energy distribution within the scattering sphere. (ii) Because of the vector character of EL waves there is much higher degeneracy or near degeneracy than in the electronic case (e.g. the $n = 1$ resonant modes corresponding to the three p orbitals in the electronic case are now in general nine); as a result the problem of possible hybridization of the resonances is much more complicated in the EL wave case. (iii) Because ω^2 corresponds to the case where the electronic energy is higher than the maximum of the potential, there is an additional (besides the hopping from resonances of one sphere to resonances of neighboring spheres) mode of propagation employing mainly (or at least on equal basis) the host material. It means that resonant states for CW are states embedded in the continuum; this is a novel aspect of the problem not encountered in the electronic case. (iv) Another novel aspect of the EL (and AC) case is associated with the role of the mass density contrast between host and scatterer which seems to be equally important as the velocity contrast.

In Fig.1 we show the dimensionless total scattering cross-sections $\hat{\sigma}_l$ (a) and $\hat{\sigma}_s$ (b) for longitudinal and shear incident wave respectively (L- and S-scattering). The parameters are as follows: $\rho_o/\rho_i = 1$, $c_l/c_s = \sqrt{2}$ (“extreme” solids both in and out) and $c_{l_o}/c_{i_s} = 5.48$. The number next or above each resonance denote the partial wave the scattering of which causes the appearance of the corresponding resonance (note that in the shear incident wave the $n = 0$ mode does not exist). The height of the very narrow resonances (presented as a single vertical line) may be larger than shown in the figures throughout the present work, because our finite mesh points do not always coincide with the maximum for such sharp peaks.

In the case of Fig.1 the first resonance (appearing in $k_{l_o}a = 0.45$) arises from the $n = 1$ mode. We found that this happens in all cases of materials with small c_l/c_s ratio which we have examined. Another common characteristic of these materials (“hard” solids) is that the higher contribution in all resonances is due to the shear scattered wave.

It is also noticeable that in Fig.1 and in all other cases examined, the position of the resonances in the L-scattering case (with the exception of the $n = 0$ resonances) coincides with the position of the **l** and **n** resonances in the S-scattering. See for example that the first and third resonance in Fig.1b, which are both due to the **l** and **n** scattered waves, coincide in position with the first and second (at $k_{l_o}a = 0.65$) resonance respectively of Fig.1a. In the S-scattering, there are additional, in most of the cases very narrow peaks, corresponding to the **m** scattered wave; see the second (at $k_{l_o}a = 0.57$), fourth, and seventh resonances in Fig.1b. We shall comment on these sharp resonances later on.

The matrix - spherical inclusions combination shown in Fig.1 has been studied¹⁸ for various periodic lattice structures: *sc* with inclusion volume fraction $x = 0.144$, *bcc* with $x = 0.144$, *fcc* with $x = 0.144$ and simple hexagonal with $c/a' = 3/4$ and $x = 0.144$ (a' is the lattice constant to be distinguished from the sphere radius a used throughout in the present work). In all these cases a narrow gap appears at midgap frequency ω_g such that $k_{l_o}a = \omega_g a/c_{l_o} \approx 0.54$ for all lattices. The position of the midgap frequency is denoted by a double arrow in Fig.1. Furthermore, the EL wave band structure exhibits¹⁸ flat bands corresponding to rather sharp peaks in the density of states (DOS); their positions are denoted by single arrows in Fig.1. It must be stressed that these flat bands appear at $k_{l_o}a = \omega a/c_{l_o} \approx 0.52 \pm 0.01$, 0.54 ± 0.01 and 0.66 ± 0.01 , *independently* of the lattice structure. This, strongly suggests that the positions of the flat bands are not influenced appreciably by multiple scattering and are mainly dependent on the single scattering resonances. Indeed, this seems to be the case as evidenced by the close correlation of the arrows with the resonances in the scattering cross-sections. It is worthwhile to note that the first flat band is above the first resonance (by a non-negligible margin) while the second is just below the second resonance (Fig.1b); the third flat band is again above the third resonance (although the margin is now smaller). The gap lies between the first and the second resonance. Let us mention that one should not expect an exact coincidence between flat bands and resonances because of “level” repulsion and hybridization.

As it was noticed above, in the S-scattering, there are some extremely sharp peaks in the cross-section (see Fig.1b). Sharp peaks correspond to very long life times, i.e. extremely low radiation which in turn means very weak scattering field (relative to the field inside the sphere). On the basis of this argument, to be substantiated later on, one expects that very sharp peaks in the single scattering cross-section may not influence appreciably the band structure.

In Fig.2 we plot the total cross-section for incident longitudinal wave and for gold sphere in silicon matrix (a) or lead sphere in silicon matrix (b) or lead sphere in beryllium matrix (c). The cross-sections for shear incident wave are shown in Fig.3.

The general features of these cross-sections follow what have been mentioned in the description of Fig.1 (see for example the extra narrow peaks in the S-scattering cross-section). Also, here, next or above each resonance appear in some cases more than one indices. This denotes coincidence in the resonances of two or more modes.

The band structure of all combinations of Figs 2, 3 for *fcc* lattice (with the volume fraction of the spheres being just below 10%) has been calculated¹⁹ and the results for the flat bands (arrows) and the gap (double arrow) are indicated in these figures (Figs 2, 3). Again we observe a correlation between the resonances and the flat bands although a flat band in the Pb/Be combination (Fig.2c,3c) appearing in the middle of the gap does not seem to be related with a resonance.

In all cases shown in Figs 2 and 3 the first flat band is located above the first resonance and the second below the second resonance (if we ignore the sharp resonances appearing in the shear case). The gap lies between the first and the second resonance.

In Fig.4 we plot the trajectory of the first few flat bands and the two midgaps vs volume fraction of the spheres for an *fcc* lattice consisting of lead spheres ($\rho = 11.357 \text{ g/cm}^3$, $c_l = 2.158 \text{ km/s}$, $c_s = 0.860 \text{ km/s}$) embedded in epoxy ($\rho = 1.180 \text{ g/cm}^3$, $c_l = 2.540 \text{ km/s}$, $c_s = 1.160 \text{ km/s}$); in the same picture we indicate the position of the first four resonances. We see that the dependence on the volume fraction, x , occupied by the spheres is weak for $0.2 \leq x \leq 0.5$ with a downwards tendency for smaller values of x . For very small values of x the gap disappears while the flat bands tend to coincide with the resonances. The weak dependence on x at intermediate volume fractions is an indication that the multiple scattering is not so important in determining the midgap frequency and the flat bands. The downwards tendency for small x and finally the disappearance of the gap is the same with what has been observed for scalar waves²⁶. This downwards tendency is expected because at very low concentrations the wave propagates mainly through the host and the spheres just obstruct its propagation. As the concentration increases, the resonances can be mixed, broaden into bands and become the preferable channels of propagation at least at certain frequency regions. Thus the gap tend to be opened near a resonant mode (area of strong individual scattering) at very low concentration of scatterers and move away from it as the concentration increases and the resonances offer themselves for the propagation.

In Figs 5 and 6 we plot the cross-sections for a steel sphere ($\rho = 7.8 \text{ g/cm}^3$, $c_l = 5.94 \text{ km/s}$, $c_s = 3.22 \text{ km/s}$) in an epoxy matrix and vice versa. For the case of steel sphere in epoxy there is some experimental evidence¹⁷ of spectral gaps; also recent preliminary theoretical results³⁶ indicate wide gaps. The cross-sections for a steel sphere in epoxy are shown in Fig.5 (panels (a) for longitudinal and (a') for shear incident wave). We see that the resonances appear weak buried in a strong background.

Following the analysis of references 30-32 we calculate the scattering cross-sections for a rigid sphere in a place of the steel sphere (Figs 5b, 5b'). A rigid sphere is one for which $\rho_i \rightarrow \infty$, $\mu_i \rightarrow \infty$, $\lambda_i \rightarrow \infty$, $c_{li} \rightarrow 0$, $c_{si} \rightarrow 0$, so that the displacement field inside and at the surface of the sphere is zero.

In Figs 5c, 5c' we plot the cross-sections calculated by subtracting from the steel scattering amplitudes the rigid sphere scattering amplitudes. Then the background disappears (except at very low frequencies) and the two widely separated resonances emerge very clearly. (in Fig.5c' the lowest resonance is a double one). Fig.5 suggests that in the spectral regions where the cross-sections of the steel sphere and the rigid sphere are almost identical (e.g. $1.5 \leq k_{l_0} a \leq 2.5$), the field will hardly penetrate inside the steel sphere.

We had verified this point by calculating the total field energy density (averaged over the angles) vs r (the distance from the center of the steel sphere); see the dotted line in Fig.7 corresponding to $k_{l_0} a = 1.6$. This exclusion of the field from the interior of the sphere implies that in the periodic composite (steel spheres in epoxy) and for these spectral regions (e.g. $1.5 \leq k_{l_0} a \leq 2.5$) the propagation, if any, must take place almost exclusively through the matrix material (epoxy); this, combined with the large cross-section (more than twice the geometrical cross-section) strongly suggests that a gap may appear.

Indeed, preliminary results³⁶ show a rather wide gap (see Fig.5c) surrounded by flat bands as indicated by arrows in Fig.5c. These flat bands may be associated with hopping propagation (linear combination of resonance "orbitals") from one steel sphere to its neighbors using the resonances (linear combination of resonance "orbitals").

This picture is also supported by the results shown in Fig.7, where the solid line corresponds to $k_{l_0} a = 0.31$ (i.e. the maximum of the rather broad first peak in Fig.5) and the dashed line to $k_{l_0} a = 0.867$ (i.e. to the sharp first peak in Fig.6). We see that the resonances correspond to a field distribution strongly localized inside the sphere (the sharper the peak the stronger the localization) with some weak leakage outside (the sharper the peak the weaker the leakage and the less probable the hopping propagation).

From Fig.7 one can obtain a *rough* estimate of the optimum volume fraction for wide gap: the neighboring spheres must be close enough to overlap with the broad maximum of the dotted line (as to make the propagation through the matrix material more difficult) and far apart to avoid the strong broadening of the resonance-based bands. Keeping the neighboring spheres apart by a distance equal to $0.5a$ to a seems to be a reasonable compromise on the basis of Fig.7. This implies an optimum volume fraction between 37.9% and 21.9% (assuming a close-packed type of lattice).

In Fig.6 we show the results of the same analysis for the case of an epoxy sphere in a steel matrix. In this case instead of a rigid sphere, the background (which was calculated (Figs 6b, 6b') and subtracted (Figs 6c, 6c')) refers to a "soft" sphere, defined by $\rho_i \rightarrow 0$, $\mu_i \rightarrow 0$, $\lambda_i \rightarrow 0$, $c_{li} \rightarrow 0$, $c_{si} \rightarrow 0$.

With the subtraction of the background the many sharp resonances (characteristic of the large c_{lo}/c_{li} ratio) emerge very clearly.

On the basis of the arguments developed in connection with Fig.5, one expects that the periodic composite, epoxy spheres in steel matrix, is not favorable for producing a wide gap because of the many closely spaced resonances, which would probably produce overlapping bands. The best chance is for a narrow band around $k_{lo}a \approx 1$. Even that is doubtful, because the background cross-section around $k_{lo}a$ is not as large as in the case of Fig.5.

In Fig.8 we show the effect of the velocity contrast on the cross-section for the shear incident wave and for a case where $\rho_o/\rho_i = 1/4$, $c_{lo}/c_{so} = c_{li}/c_{si} = \sqrt{2}$ ("extreme" solid). In Fig.8a the velocity ratio $c_{lo}/c_{li} = 4$. The low velocity scatterer produces many sharp resonances in the present elastic case as in the electromagnetic and scalar cases. These sharp resonances disappear when $c_{lo}/c_{li} = 1$ (Fig.8b) or when $c_{lo}/c_{li} = 1/4$ (Fig.8c). For a longitudinal incident wave the cross-section is smaller, smoother and with fewer peaks (in agreement with what has been noticed above). The rigid sphere background (not shown here) is almost constant and large (about four (three) times the geometrical cross-section for a shear (longitudinal) incident wave) but does not dominate the cross-section at any spectral region. No results for the corresponding periodic case are available. On the basis of the analysis developed in the present work one would guess that there is a small chance for a narrow gap between the first and second (or possibly between the second and third) peak of Fig.8a.

In Fig.9 we show the effects on the longitudinal incident wave cross-section of increasing the ratio of the longitudinal to shear velocity for the case presented in Fig.1a. For the upper panels the ratio $c_l/c_s = 2$ and for the lower panels the ratio $c_l/c_s = 2.83$.

The background cross-sections (panels b and b') refer to a soft sphere. For the shear incident wave the picture is more complicated with many additional peaks.

Fig.9 shows that these combinations are not favorable for a spectral gap, because the separation between the first two peaks is not large and the value of the background in between is not so large. Comparing Fig.1a and Figs 9a, 9a' we see that by increasing the ratio c_l/c_s (in both matrix and sphere) the separation of the first two peaks is reduced making it more and more difficult for a gap to appear. The actual calculation¹⁸ verify this "educated" guess : indeed the narrow gap of the case in Fig.1a disappears in the cases of Figs 9a and 9a' because of the overlap of the first and second flat bands (their midfrequencies are indicated by arrows in Figs 9a and 9a'). Note that the first two flat bands in the cases of Figs 9a and 9a' conform with the general picture discussed earlier, i.e. they are located above and below the first and the second resonance respectively.

In Figs 10-15 we show results concerning the role of the mass density contrast and its opposite effect on solids and fluids periodic media which constitutes a puzzling and unresolved issue. In Figs 10 (longitudinal incident wave) and 11 (shear incident wave) we examine a case for which $c_l/c_s = \sqrt{2}$ for both the sphere and the matrix, $c_{lo}/c_{li} = 8.66$ and for which $\rho_o/\rho_i = 1/4$ (Figs 10a,11a), $\rho_o/\rho_i = 1$ (Figs 10b,11b) and $\rho_o/\rho_i = 4$ (Figs 10c,11c).

The periodic problem (with volume fraction $x = 0.144$ and *fcc* lattice) has been already studied; the "flat" bands (arrows) and the gap (double arrow) are indicated in Fig.10. The main feature of the increase of the density ratio ρ_o/ρ_i is that the peaks become narrower (sometimes to the point of disappearance) without their maximum value becoming lower.

Taking into account that the cross-section between peaks is very small, the reduction of the strength of the peaks with increasing ρ_o/ρ_i implies easier propagation and the eventual disappearance of any gaps in agreement with the actual results.

In Fig.12 we show results for the total cross-section of the corresponding $c_{lo}/c_{li} = 8.66$ fluid ($c_s = 0$ in both the sphere and the matrix) case with $\rho_o/\rho_i = 1/4, 1, 4$ for panels (a), (b) and (c) respectively (note the change of the vertical scale).

What distinguishes the fluid from the solid case is the dominant role of the isotropic oscillation ($n = 0$) component. In the solid case the $n = 0$ component makes a relatively insignificant contribution at high

frequency and for the longitudinal component only (see Fig.10). On the other hand, for the fluid case the $n = 0$ component dominates the background and produces a strong first resonance. This resonance can be studied analytically (see Appendix C) and in the high ρ_o/ρ_i limit the resonance frequency is given by $\omega_o = (c_i/a)\sqrt{3\rho_i/\rho_o}$. Both the background and the first resonance, in contrast to the solid case, become larger as the ratio ρ_o/ρ_i increases (see Fig.13). This basic difference is shown in Fig.14 where in panel (a) the area under the first $n = 0$ resonance of the fluid case is plotted vs ρ_o/ρ_i , while in panel (b) the areas under the lowest ($n = 1$) resonance for longitudinal (solid line) and shear (dashed line) incident wave are exhibited. The conclusion is that a large density ratio ρ_o/ρ_i is indeed very favorable for gap creation in fluid periodic media because of the $n = 0$ component.

In Fig.15 we show the cross-section for a fluid sphere in a fluid matrix with velocity contrast $c_{to}/c_{ti} = 2.65$ and density contrast $\rho_o/\rho_i = 1/5$ (panel (a)), 1 (panel (b)) and 15 (panel (c)). The corresponding periodic case has been studied before¹⁵. The case of Fig.15a exhibits no gaps but show sharp peaks in the density of states (arrows in Fig.15a). The case of Fig.15b develops two gaps: a relatively wide one between the first and the second “flat” band (arrows) and a narrow one just above the third “flat” band. The case of Fig.15c has three gaps: a very wide one extending from the first to second arrow, a second one extending from $ka \approx 1.25$ to $ka \approx 1.5$ and a third one above the fourth arrow. Note also the correspondence between the resonances and the “flat” bands with the exception of the second resonance which was expected to produce a flat band in the middle (approximately) of the very wide gap; such a band does not appear in the results of ref.15.

The large gaps associated with the case $\rho_o/\rho_i = 15$ is again due to the strong scattering (both the low lying resonance and the background) associated with the isotropic ($n = 0$) oscillation.

In view of the above results, it is interesting to examine what happens in the mixed cases of a solid sphere in a fluid host or a fluid sphere in a solid matrix. Preliminary results indicate that the solid sphere in fluid behaves similarly to the fluid in fluid case, while the fluid sphere in solid follows the solid in solid behavior. This is not surprising, since for the $n = 0$ mode (which is purely compressional) there is not difference between a solid and a fluid sphere with the same ρ_i and $B_i = \lambda_i + (2/3)\mu_i$.

IV. CONCLUDING REMARKS

We have examined the dependence of the cross-sections of an elastic sphere embedded in an infinite homogeneous elastic medium on various parameters such as velocity contrast c_{to}/c_{ti} , mass density contrast, “solidity” of the sphere (c_{ti}/c_{si}) and the host (c_{to}/c_{so}).

We have paid particular attention to the various resonances appearing in the cross-section and we have connected them with specific spherical harmonic modes. In many cases it was useful to calculate and subtract the cross-section and the scattering amplitude (respectively) corresponding to a rigid or soft sphere. We have connected the above data for the scattering from a single sphere with the features of the band structure associated with the propagation of elastic waves in a periodic medium consisting of spheres embedded in an homogeneous matrix. In particular we were interested in “flat” bands (peaks in the density of states) and spectral gaps. We found that the resonances in the single scattering were closely associated with the “flat” bands supporting thus the idea of a linear combination of resonance states (in analogy with the LCAO approach in the electronic propagation in solids).

In addition to this hopping propagation from sphere to sphere (utilizing the resonances) there is another mode of propagation utilizing mainly the host material. The analysis through the rigid or soft sphere is helpful in deciding whether one of the two modes of propagation (hopping or through the host) is dominant or whether the wave utilizes both the host and the spheres for its propagation.

We have developed some criteria for the appearance of gaps in the periodic case on the basis of the single sphere scattering, e.g. widely separated resonances (especially the lowest ones) with a strong background in between (due to the rigid or soft sphere) is very favorable for wide gaps and consequently for localized states in a disordered composite medium.

ACKNOWLEDGMENTS

The present work was supported by *GSRT-Hellas* grant 91EΔ556 and by *EU* grants *SCC-CT90-0020*, *ERBCHRX-CT93-0136-0331-0332* and *MAS2-CT92-0019*. We thank M. Sigalas for useful discussions and for providing us with his band structure computer programs. Useful communications with G. Gaunard are also acknowledged.

APPENDIX A

In this Appendix, we present the general solution of the elastic wave equation in spherical coordinates, the boundary conditions on the surface of the sphere and the formulae used for the derivation of the scattering cross-sections.

The time dependent elastic wave equation in an homogeneous medium is

$$(\lambda + 2\mu)\nabla(\nabla \cdot \mathbf{U}) - \mu\nabla \times \nabla \times \mathbf{U} = \rho \frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial t^2} \quad (A1)$$

Assuming the time dependence to be of the form $e^{-i\omega t}$, the general solution of (A1) in spherical coordinates (r, θ, ϕ) can be written as:

$$\mathbf{U} = e^{-i\omega t} \mathbf{u} \quad (A2)$$

with

$$\mathbf{u} = \mathbf{l} + \mathbf{m} + \mathbf{n} \quad (A3)$$

where:

$$\mathbf{l} = \sum_{\varepsilon n, m} Z_{\varepsilon nm} \mathbf{l}_{\varepsilon nm}, \quad \mathbf{m} = \sum_{\varepsilon n, m} H_{\varepsilon nm} \mathbf{m}_{\varepsilon nm}, \quad \mathbf{n} = \sum_{\varepsilon n, m} \Theta_{\varepsilon nm} \mathbf{n}_{\varepsilon nm} \quad (A4)$$

and:

$$\begin{aligned} \mathbf{l}_{\varepsilon nm} = & \frac{1}{k_l} \frac{\partial}{\partial r} R_n(k_l r) P_n^m(\cos \theta) \frac{\cos}{\sin} m\phi \hat{\mathbf{r}} + \frac{1}{k_l r} R_n(k_l r) \frac{\partial}{\partial \theta} P_n^m(\cos \theta) \frac{\cos}{\sin} m\phi \hat{\boldsymbol{\theta}} \\ & + \frac{m}{k_l r \sin \theta} R_n(k_l r) P_n^m(\cos \theta) \frac{\sin}{\cos} m\phi \hat{\boldsymbol{\phi}} \end{aligned} \quad (A5)$$

$$\mathbf{m}_{\varepsilon nm} = \frac{m}{\sin \theta} R_n(k_s r) P_n^m(\cos \theta) \frac{\sin}{\cos} m\phi \hat{\boldsymbol{\theta}} - R_n(k_s r) \frac{\partial}{\partial \theta} P_n^m(\cos \theta) \frac{\cos}{\sin} m\phi \hat{\boldsymbol{\phi}} \quad (A6)$$

$$\mathbf{n}_{\varepsilon nm} = \frac{n(n+1)}{k_s r} R_n(k_s r) P_n^m(\cos \theta) \frac{\cos}{\sin} m\phi \hat{\mathbf{r}} + \frac{1}{k_s r} \frac{\partial}{\partial r} [r R_n(k_s r)] \frac{\partial}{\partial \theta} P_n^m(\cos \theta)$$

$$\frac{\cos}{\sin} m\phi \hat{\boldsymbol{\theta}} + \frac{m}{k_s r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial r} [r R_n(k_s r)] P_n^m(\cos \theta) \frac{\sin}{\cos} m\phi \hat{\boldsymbol{\phi}} \quad (A7)$$

$\hat{\mathbf{r}}, \hat{\boldsymbol{\theta}}, \hat{\boldsymbol{\phi}}$ are the spherical unit vectors;

$k_l = \omega/c_l$, $k_s = \omega/c_s$ with ω the frequency, c_l the longitudinal and c_s the shear wave velocity in the medium;

$\lambda = \rho(c_l^2 - 2c_s^2)$, $\mu = \rho c_s^2$ are the Lamé coefficients of the medium (ρ is the mass density);

R_n is an appropriate Bessel function (chosen from the boundary conditions at $r \rightarrow 0$ or $r \rightarrow \infty$);

P_n^m are the associated Legendre polynomials.

The subscripts “e” and “o” which appear in the definition of $\mathbf{l}_{\varepsilon nm}$, $\mathbf{m}_{\varepsilon nm}$, $\mathbf{n}_{\varepsilon nm}$, and in the coefficients $Z_{\varepsilon nm}$, $H_{\varepsilon nm}$, $\Theta_{\varepsilon nm}$ (see (A4)), mean even and odd respectively and the subscripts n and m are integers going from zero to infinity the first and from zero to n the second.

The boundary conditions on the surface of the sphere ($r = a$) which are the continuity of normal and tangential displacements and of normal and tangential stresses, can be expressed as:

(a) Continuity of the displacements:

$$u_i^{inc}|_{r=a} + u_i^s|_{r=a} = u_i^n|_{r=a} \quad i : (r, \theta, \phi) \quad (A8)$$

(b) Continuity of the stresses:

$$P_i^{inc}|_{r=a} + P_i^{sc}|_{r=a} = P_i^{in}|_{r=a} \quad i : (r, \theta, \phi) \quad (A9)$$

where:

$$P_i = \sum_j \sigma_{ij} n_j, \quad i, j : (r, \theta, \phi), \quad (A10)$$

with n_j the components of the outgoing unit vector normal to the surface of the sphere which in our case is the \hat{r} .

$$\sigma_{ij} = 2\rho c_s^2 u_{ij} + \rho(c_t^2 - 2c_s^2)\delta_{ij} \sum_l u_{ll} \quad i, j : (r, \theta, \phi). \quad (A11)$$

are the stress tensor elements³⁵ and u_{ij} the strain tensor elements which result from the components of the displacement vector (for the calculation of u_{ij} in the spherical coordinate system see ref.35, p.3). The superscripts *inc*, *sc*, *in*, denote the incident, the scattered and the inner field respectively.

The *total scattering cross-section* for an incident plane wave propagating in the \hat{z} direction and scattered by a sphere is given by:

$$\sigma = \int \frac{j_r^{sc} r^2}{j_z^{inc}} d\Omega \quad \text{for } r \rightarrow \infty, \quad (A12)$$

$$\text{where } j_i^a = \langle \sum_j \text{Re}(\sigma_{ij}^a) \text{Re}(u_j^a) \rangle \quad (A13)$$

$$= \frac{1}{2} \omega \sum_j \text{Im}[(\sigma_{ij}^a)^* u_j^a] \quad i, j : (r, \theta, \phi) \text{ or } i, j : (x, y, z) \quad (A14)$$

$a : sc \text{ or } inc$

The symbols $\langle \rangle$ denote time average and the *Im*, (*) and ($\bar{}$), imaginary part, complex conjugate and time derivative respectively while the (A14) is valid only for a wave with time dependence of the form $e^{-i\omega t}$.

APPENDIX B

In this Appendix, we present the results from the calculations of the coefficients $A_{en0}, C_{en0}, A_{en1}, B_{on1}, C_{en1}$ which appeared in the formulas for the cross-sections (see 2.7 and 2.11).

We present them for completeness and because of a few misprints which were found in papers where these coefficients are given. Furthermore, here, both the longitudinal and the shear incident wave scattering expressions are given under a single heading - something that could be useful for the interested reader.

The unknown coefficients $A_{en0}, C_{en0}, A_{en1}, B_{on1}, C_{en1}$ (with the subscripts “e” and “o” to mean even and odd respectively and the subscript n to go from zero to infinity) are given by:

$$A_{en0} = \frac{1}{D_n} \begin{vmatrix} a_{15}^l & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{25}^l & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{35}^l & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{45}^l & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{vmatrix} \quad C_{en0} = \frac{1}{D_n} \begin{vmatrix} a_{11} & a_{15}^l & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{25}^l & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{35}^l & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{45}^l & a_{43} & a_{44} \end{vmatrix} \quad (B1)$$

$$A_{en1} = \frac{1}{D_n} \begin{vmatrix} a_{15}^s & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{25}^s & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{35}^s & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{45}^s & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{vmatrix} \quad C_{en1} = \frac{1}{D_n} \begin{vmatrix} a_{11} & a_{15}^s & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{25}^s & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{35}^s & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{45}^s & a_{43} & a_{44} \end{vmatrix} \quad (B2)$$

$$B_{on1} = [e_{13}e_{22} - e_{23}e_{12}]/[e_{11}e_{22} - e_{21}e_{12}] \quad D_n = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{vmatrix} \quad (B3)$$

a_{ij}, e_{ij} result from the boundary conditions on the surface of the sphere and have the following form:

$$\begin{aligned} a_{11} &= h'_n(Z_{lo}) \\ a_{12} &= n(n+1)h_n(Z_{so})/Z_{so} \\ a_{13} &= -j'_n(Z_{li}) \\ a_{14} &= -n(n+1)j_n(Z_{si})/Z_{si} \\ a_{15}^l &= \imath j'_n(Z_{lo}) \\ a_{15}^s &= \imath n(n+1)j_n(Z_{so})/Z_{so} \end{aligned} \quad (B4)$$

$$\begin{aligned} a_{21} &= h_n(Z_{lo})/Z_{lo} \\ a_{22} &= h'_n(Z_{so}) + h_n(Z_{so})/Z_{so} \\ a_{23} &= -j'_n(Z_{li})/Z_{li} \\ a_{24} &= -j'_n(Z_{si}) - j_n(Z_{si})/Z_{si} \\ a_{25}^l &= \imath j'_n(Z_{lo})/Z_{lo} \\ a_{25}^s &= \imath [j'_n(Z_{so}) + j_n(Z_{so})/Z_{so}] \end{aligned} \quad (B5)$$

$$\begin{aligned} a_{31} &= Z_{lo}[2\mu_o h''_n(Z_{lo}) - \lambda_o h_n(Z_{lo})] \\ a_{32} &= 2n(n+1)\mu_o [h'_n(Z_{so}) - h_n(Z_{so})/Z_{so}] \\ a_{33} &= -Z_{li}[2\mu_i j''_n(j_{li}) - \lambda_i j_n(Z_{li})] \\ a_{34} &= -2n(n+1)\mu_i [j'_n(Z_{si}) - j_n(Z_{si})/Z_{si}] \\ a_{35}^l &= \imath Z_{lo}[2\mu_o j''_n(Z_{lo}) - \lambda_o j_n(Z_{lo})] \\ a_{35}^s &= 2\imath n(n+1)\mu_o [j'_n(Z_{so}) - j_n(Z_{so})/Z_{so}] \end{aligned} \quad (B6)$$

$$\begin{aligned} a_{41} &= 2\mu_o [h'_n(Z_{lo}) - h_n(Z_{lo})/Z_{lo}] \\ a_{42} &= \mu_o [Z_{so} h''_n(Z_{so}) + (n-1)(n+2)h_n(Z_{so})/Z_{so}] \\ a_{43} &= -2\mu_i [j'_n(Z_{li}) - j_n(Z_{li})/Z_{li}] \\ a_{44} &= -\mu_i [Z_{si} j''_n(Z_{si}) + (n-1)(n+2)j_n(Z_{si})/Z_{si}] \\ a_{45}^l &= 2\imath \mu_o [j'_n(Z_{lo}) - j_n(Z_{lo})/Z_{lo}] \\ a_{45}^s &= \imath \mu_o [Z_{so} j''_n(Z_{so}) + (n-1)(n+2)j_n(Z_{so})/Z_{so}] \end{aligned} \quad (B7)$$

$$\begin{aligned} e_{11} &= h_n(Z_{so}) \\ e_{12} &= -j_n(Z_{si}) \\ e_{13} &= -j_n(Z_{so}) \\ e_{21} &= \mu_o Z_{so} (h'_n(Z_{so}) - h_n(Z_{so})/Z_{so}) \\ e_{22} &= -\mu_i Z_{si} [j'_n(Z_{si}) - j_n(Z_{si})/Z_{si}] \\ e_{23} &= -\mu_o Z_{so} [j'_n(Z_{so}) - j_n(Z_{so})/Z_{so}] \end{aligned} \quad (B8)$$

where:

$$Z_{l\ell} = k_{l\ell} a = \frac{\omega}{c_{l\ell}} a, \quad Z_{s\ell} = k_{s\ell} a = \frac{\omega}{c_{s\ell}} a$$

$$\begin{aligned} \mu_\ell &= \rho_\ell c_{s\ell}^2 \\ \lambda_\ell &= \rho_\ell (c_{l\ell}^2 - 2c_{s\ell}^2) \end{aligned}$$

$\ell = o$ (out)*, i (in)**

The subscripts “o” (out) and “i” (in), refer to the medium of the matrix and the scatterer respectively, ρ_ℓ is the mass density, $c_{l\ell}$ and $c_{s\ell}$ are the longitudinal and the shear wave velocity in the medium $\ell (= o, i)$, j_n denotes the spherical Bessel function and h_n the spherical Hankel function of the first kind ($h_n^{(1)}$).

* note the different meaning of subscript “o” in the definition of B_{on1} .

** note the difference between “i” (in) (used as subscript in this appendix) with $\imath = \sqrt{-1}$.

APPENDIX C

In this appendix we will calculate the scattering cross-sections for a longitudinal wave, scattered in a liquid sphere embedded in a liquid host. We will derive analytical expressions for some limited cases.

We assume the incident wave displacement field to have the form $\mathbf{U} = e^{-i\omega t} \mathbf{u}$ with $\mathbf{u} = e^{i\mathbf{k}_o \mathbf{r}} \hat{\mathbf{z}}$ and $\mathbf{k}_o = k_o \hat{\mathbf{z}} = \omega/c_o \hat{\mathbf{z}}$. c_o is the wave velocity in the host (out) while with c_i (see below) we denote the wave velocity in the medium of sphere (in)***.

The incident wave - in terms of spherical waves - can be written as (see Eq.(2.4) and Appendix A):

$$u^{inc} = \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^{n+1} (2n+1) \mathbf{l}_{\epsilon n 0}(j, k_o) \quad (C1)$$

The scattered wave and the wave inside the sphere will have the form:

$$u^{sc} = \sum_{n=0}^{\infty} i^n (2n+1) A_{\epsilon n 0} \mathbf{l}_{\epsilon n 0}(h, k_o) \quad (C2)$$

$$u^{in} = \sum_{n=0}^{\infty} i^n (2n+1) B_{\epsilon n 0} \mathbf{l}_{\epsilon n 0}(j, k_i) \quad (C3)$$

For the definition of $\mathbf{l}_{\epsilon n 0}$ see Appendix A. The symbols in the parentheses of $\mathbf{l}_{\epsilon n 0}$ denote the kind of bessel function and the wave vector which contained in the expressions for the $\mathbf{l}_{\epsilon n 0}$; $k_o = \omega/c_o$, $k_i = \omega/c_i$ and j, h are the spherical bessel function and the spherical hankel function of the first kind respectively.

The unknown coefficients $A_{\epsilon n 0}, B_{\epsilon n 0}$ can be determined from the boundary conditions on the surface of the sphere which are the continuity of normal displacements, u_r in this case, and the continuity of normal stresses, σ_{rr} .

σ_{rr} can be calculated as described in Appendix A and has the form:

$$\sigma_{rr}^{\ell} = - \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) i^n \lambda^{\ell} k^{\ell} D^{\ell} R_n^{\ell}(k^{\ell} r) P_n(\cos \theta) \quad (C4)$$

The superscript ℓ means *inc*, *sc* or *in*. For the incident field $D^{\ell} = -i$, $R_n^{\ell} = j_n$, $k^{\ell} = k_o$ and $\lambda^{\ell} = \rho_o c_o^2$; for the scattered field $D^{\ell} = A_{\epsilon n 0}$, $R_n^{\ell} = h_n$, $k^{\ell} = k_o$ and $\lambda^{\ell} = \rho_o c_o^2$; for the inner field $D^{\ell} = B_{\epsilon n 0}$, $R_n^{\ell} = j_n$, $k^{\ell} = k_i$ and $\lambda^{\ell} = \rho_i c_i^2$ (ρ_o, ρ_i : the mass density out and in respectively). P_n are the Legendre polynomials.

The application of the boundary conditions on the surface of the sphere ($r = a$) gives for the $A_{\epsilon n 0}$:

$$A_{\epsilon n 0} = i \frac{\psi \Delta j_n(Z_o) j_n'(Z_i) - j_n(Z_i) j_n'(Z_o)}{\psi \Delta h_n(Z_o) j_n'(Z_i) - j_n(Z_i) h_n'(Z_o)} \quad (C5)$$

$Z_o = k_o a$, $Z_i = k_i a$, $\Delta = \rho_o / \rho_i$ (the density contrast of the two materials) and $\psi = c_o / c_i = Z_i / Z_o$ (the velocity contrast).

The dimensionless cross-section is given by (see Eq.(2.7)):

$$\hat{\sigma}_l = \frac{\sigma_l}{\pi a^2} = \sum_{n=0}^{\infty} 4(2n+1) \frac{|A_{\epsilon n 0}|^2}{|Z_o|^2} \quad (C6)$$

Taking in to account that $h_n = j_n + iy_n$ we see that $|A_{\epsilon n 0}| \leq 1$; the equality is obtained when

$$\psi \Delta y_n(Z_o) j_n'(Z_i) = j_n(Z_i) y_n'(Z_o) \quad (C7)$$

Equation (C7), which can be rewritten as,

$$\frac{y_n'(Z_o)}{y_n(Z_o)} = \psi \Delta \frac{j_n'(Z_i)}{j_n(Z_i)} \quad (C8)$$

is also the condition for a resonance to appear.

We are interested in finding the low lying resonances for which $Z_o, Z_i \ll 1$. In this case the Bessel functions can be expanded:

$$\frac{y_n'(Z_o)}{y_n(Z_o)} \approx -\frac{n+1}{Z_o} + \frac{n}{1-2n} Z_o, \quad \frac{j_n'(Z_i)}{j_n(Z_i)} \approx \frac{n}{Z_i} - \frac{1}{2n+3} Z_i \quad (C9)$$

Substituting (C9) in (C8) we see that there is no solution for $n \neq 0$, which means that the lowest $n \neq 0$ resonances do not satisfy the conditions $Z_o, Z_i \ll 1$.

For $n = 0$, we have from (C9) and (C8): $Z_i^2 = \frac{3}{\Delta}$

which is valid only if $\Delta \gg 3$ and $\psi^2 \Delta \gg 3$.

Under these conditions there is a low lying resonance at

$$k_i a \approx \sqrt{\frac{3\rho_i}{\rho_o}} \quad (C10)$$

or

$$\omega \approx \frac{c_i}{a} \sqrt{\frac{3\rho_i}{\rho_o}} \quad (C11)$$

*** note the difference between i (in), used as a subscript in this appendix and $\iota = \sqrt{-1}$.

REFERENCES

- ¹ S. John and R. Rangarajan, Phys. Rev. B **38**, 10101 (1988).
- ² E. N. Economou and A. Zdetsis, Phys. Rev. B **40**, 1334 (1989).
- ³ C. M. Soukoulis and E. N. Economou, G. S. Grest and M. H. Cohen, Phys. Rev. Lett. **62**, 575 (1989).
- ⁴ J. M. Drake and A. Z. Genack, Phys. Rev. Lett. **63**, 259 (1989).
- ⁵ E. Yablonovitch and T. J. Gmitter, Phys. Rev. Lett. **63**, 1950 (1989).
- ⁶ K. M. Ho, C. T. Chan and C. M. Soukoulis, Phys. Rev. Lett. **65**, 3152 (1990).
- ⁷ K. M. Leung and Y. F. Liu, Phys. Rev. Lett. **65**, 2646 (1990).
- ⁸ Z. Zhang and S. Satpathy, Phys. Rev. Lett. **65**, 2650 (1990).
- ⁹ J. Maddox, Nature, **348**, 481 (1990).
- ¹⁰ P. St. J. Russel, Physics World, August 1992, 37 (1992).
- ¹¹ C.M.Soukoulis, editor, *Photonic Band Gaps and Localization*, (Plenum, New York, 1993).
- ¹² P. Sheng, editor, *Scattering and localization of Classical Waves in Random Media* (World Scientific, Singapore, 1990).
- ¹³ P. Sheng, *Introduction to Wave Scattering, Localization and Mesoscopic Phenomena* (Academic Press, San Diego, 1995).
- ¹⁴ J. Joannopoulos, R. Meade, J. Winn, *Photonic Crystals* (Princeton University Press, 1995).
- ¹⁵ M. M. Sigalas and E. N. Economou, J. Sound Vibr. **158**, 377 (1992).
- ¹⁶ M. M. Sigalas and E. N. Economou, Sol. St. Comm. **86**, 141 (1993).
- ¹⁷ V. K. Kinra and E. L. Ker, Int. J. Solids Structures, **19**, 393 (1983).
- ¹⁸ E. N. Economou and M. Sigalas, in *Photonic Band Gaps and Localization*, edited by C. M. Soukoulis (Plenum, New York, 1993), p.317.
- ¹⁹ E. N. Economou and M. Sigalas, J. Ac. Soc. Am. **95**, 1734 (1994).
- ²⁰ M. M. Sigalas, E. N. Economou and M. Kafesaki, Phys. Rev. B **50**, 3393 (1994).
- ²¹ S. John, Phys. Rev. Lett. **53**, 2169 (1983).
- ²² P. Sheng and Z. Q. Zhang, Phys. Rev. Lett. **57**, 1879 (1986).
- ²³ K. M. Ho, C. T. Chan, C. M. Soukoulis, R. Biswas, M Sigalas, Sol. St. Comm. **89**, 413 (1994).
- ²⁴ G. Cody, L. Ye, M. Zhou, P. Sheng and A. N. Norris, chapter in ref.11, p.339.
- ²⁵ See, e.g. The J. Ac. Soc. Am., **93**, 2291-2292, 2310-2312 (1993).
- ²⁶ S. Datta, C. T. Chan, K. M. Ho, C. M. Soukoulis, E. N. Economou, edited by C. M. Soukoulis (Plenum, New York, 1993), p.289.
- ²⁷ C. F. Yiang and R. Truell, J. Appl. Phys. **27**, 1086 (1956).
- ²⁸ N. Einspruch and R. Truell, J. Appl. Phys. **31**, 806 (1960).
- ²⁹ G. Johnson and R. Truell, J. Appl. Phys. **36**, 3467 (1965).
- ³⁰ G. Gaunard and H. Uberall, J. Ac. Soc. Am. **67**, 1432 (1980).

- ³¹ D. Brill and G. Gaunaurd, *J. Ac. Soc. Am.* **81**, 1 (1987).
- ³² L. Flax, G. Gaunaurd and H. Uberall, in *Physical Acoustics*, edited by W. P. Mason (Academic, New York, 1981), vol. XV.
- ³³ J.A.Straton, *Electromagnetic Theory*, (McGraw-Hill, New York, 1941), p. 392.
- ³⁴ J. O. Vasseur, B. Djafari-Rohani, L. Xobrzynski, M. S. Kushwaha and P. Halevi, *J. Phys. : Cond. Mat.* **6**, 8759 (1994).
- ³⁵ Landau and Lifshitz, *Theory of Elasticity*, 3rd Edition, (Pergamon Press, Oxford, 1986).
- ³⁶ M. Kafesaki M. M. Sigalas and E. N. Economou, unpublished.

FIGURE CAPTIONS

- Fig. 1. Total dimensionless cross-section vs $k_{l_0}a$ for longitudinal (a) and shear (b) incident wave; $c_l/c_s = \sqrt{2}$ for both sphere (in) and matrix (out), $\rho_o/\rho_i = 1$ and $c_{l_0}/c_{l_i} = 5.48$. a is the radius of the sphere and $k_{l_0} = \omega/c_{l_0}$ the longitudinal wave number in the medium of the matrix. The number next or above each resonance denotes the spherical harmonic responsible for this resonance. The height of the very narrow resonances maybe larger than indicated. The arrows indicate the positions of the flat bands and the double arrow the position of the gap in the corresponding fcc periodic composite with volume fraction of the spheres $x = 0.144$.
- Fig. 2. Total dimensionless cross-section vs $k_{l_0}a$ for Au spheres in Si matrix (a), Pb spheres in Si matrix (b), and Pb spheres in Be matrix (c). The incident wave is longitudinal; a is the radius of the sphere and $k_{l_0} = \omega/c_{l_0}$ is the longitudinal wave number in the medium of the matrix. The numbers have the same meaning as in Fig.1; the arrows indicate the positions of the flat bands and the double arrow the position of the gap in the corresponding fcc periodic composites with volume fraction of the spheres 10% for (a), 9.8% for (b) and 8.23% for (c).
- Fig. 3. Total dimensionless cross-section vs $k_{l_0}a$ for the cases of Fig.2 but shear incident wave.
- Fig. 4. Midgap frequency (open circles) and “flat” band position (crosses) vs volume fraction of the scatterers for lead spheres in epoxy matrix and fcc structure. “Flat” bands correspond to peaks in the density of states (which may occasionally merge together or become ill-defined). d is the diameter of the sphere ($d = 2a$) and $\lambda_{l_i} = 2\pi/k_{l_i}$ the longitudinal wave length in the medium of the sphere. The dashed horizontal lines correspond to the first four single sphere resonances.
- Fig. 5. Total dimensionless cross-sections vs $k_{l_0}a$ for steel sphere in epoxy matrix (a, a'), rigid sphere in epoxy matrix (b, b'). The third column (c, c') represents the cross-section calculated by subtracting from the steel sphere scattering amplitudes the rigid sphere scattering amplitudes. The upper panels correspond to longitudinal incident wave and the lower to shear incident wave. a is the radius of the sphere and $k_{l_0} = \omega/c_{l_0}$ the longitudinal wave number in the medium of the matrix. The arrows indicate the positions of the flat bands and the double arrow (with the symbol G inside) the position of the gap in the corresponding fcc periodic composite with volume fraction of the spheres $x = 0.4524$. The numbers have the same meaning as in Fig.1.
- Fig. 6. Total dimensionless cross-section vs $k_{l_0}a$ for the case of epoxy sphere in steel matrix (a, a'). The upper panels correspond to longitudinal incident wave and the lower to shear incident wave. The second column (b, b') represents the soft sphere in steel matrix cross-section and the third (c, c') the cross-section calculated by subtracting from the epoxy sphere scattering amplitudes the soft sphere scattering amplitudes. a is the radius of the sphere and $k_{l_0} = \omega/c_{l_0}$ the longitudinal wave number in the medium of the matrix. The numbers have the same meaning as in Fig.1 and the arrows indicate the positions of the flat bands in the corresponding sc periodic composite with volume fraction of the spheres $x = 0.268$.
- Fig. 7. Total energy density vs r (the distance from the center of the sphere) on a “wide” resonance (first resonance of Fig.5c - solid line), on a “narrow” resonance (first resonance of Fig.6c - dashed line) and “off” resonance (between the two resonances in Fig.5c - dotted line). The energy is in the incident wave energy density units and the r in units of the sphere radius (a).
- Fig. 8. Total dimensionless cross-section vs $k_{l_0}a$ for $c_l/c_s = \sqrt{2}$ (for both sphere and matrix), $\rho_o/\rho_i = 1/4$ and $c_{l_0}/c_{l_i} = 4$ (a), 1 (b), 1/4 (c). The incident wave is shear; a is the sphere radius and $k_{l_0} = \omega/c_{l_0}$. The numbers next or above each resonance denote its origin (the corresponding modes).
- Fig. 9. Total dimensionless cross-section vs $k_{l_0}a$ for $c_{l_0}/c_{l_i} = 5.48$, $\rho_o/\rho_i = 1$ and $c_l/c_s = 2$ (a), and 2.88 (a') (for both sphere and matrix). The incident wave is longitudinal. In the second column (b, b') the above sphere has been replaced by a soft sphere and in the third (c, c') the cross-section was calculated by a subtraction similar to what described Fig.5. a is the radius of the sphere and $k_{l_0} = \omega/c_{l_0}$ the longitudinal wave number in the medium of the matrix. The numbers and the arrows have the same meaning as in Fig.1.

- Fig. 10. Total dimensionless cross-section vs $k_{l_o}a$ for $c_{l_o}/c_{l_i} = 8.66$, $c_l/c_s = \sqrt{2}$ for both sphere and matrix and $\rho_o/\rho_i = 1/4$ (a), 1 (b), 4(c). a is sphere radius and $k_{l_o} = \omega/c_{l_o}$. The incident wave is longitudinal; the numbers, arrows, and the double arrow have the same meaning as in Fig.1.
- Fig. 11. Total dimensionless cross-section vs $k_{l_o}a$ for the cases of Fig.10 and for shear incident wave.
- Fig. 12. Dimensionless scattering cross-section vs ka for $c_{l_o}/c_{l_i} = 8.66$, $c_{s_o} = c_{s_i} = 0$ (liquid case) and $\rho_o/\rho_i = 1/4$ (a), 1 (b), 4 (c). a is the radius of the sphere, $k = \omega/c_{l_o}$. The number above each resonance indicates the spherical harmonic responsible for the resonance.
- Fig. 13. Dimensionless $n = 0$ partial cross-section vs ka for the cases of Fig.12.
- Fig. 14. (a) : Area under the dominant $n = 0$ first resonance vs ρ_o/ρ_i for $c_l/c_s = 10$ for both matrix and sphere (fluid-like case). (b) : Area under the dominant $n = 1$ first resonance vs ρ_o/ρ_i for $c_l/c_s = \sqrt{2}$ for both matrix and sphere (extreme solid case). The solid line corresponds to longitudinal incident wave and the dashed line to shear incident wave. For both panels $c_{l_o}/c_{l_i} = 8.66$.
- Fig. 15. Dimensionless scattering cross-section vs ka for $c_{l_o}/c_{l_i} = 2.65$, $c_{s_o} = c_{s_i} = 0$ (liquid case) and $\rho_o/\rho_i = 1/5$ (a), 1 (b), 15 (c). a is the sphere radius and $k = \omega/c_{l_o}$. The numbers have the same meaning as in Fig.1 and the arrows indicate the positions of the peaks in the density of states of the corresponding *fcc* periodic system with volume fraction of the spheres $x = 0.144$.

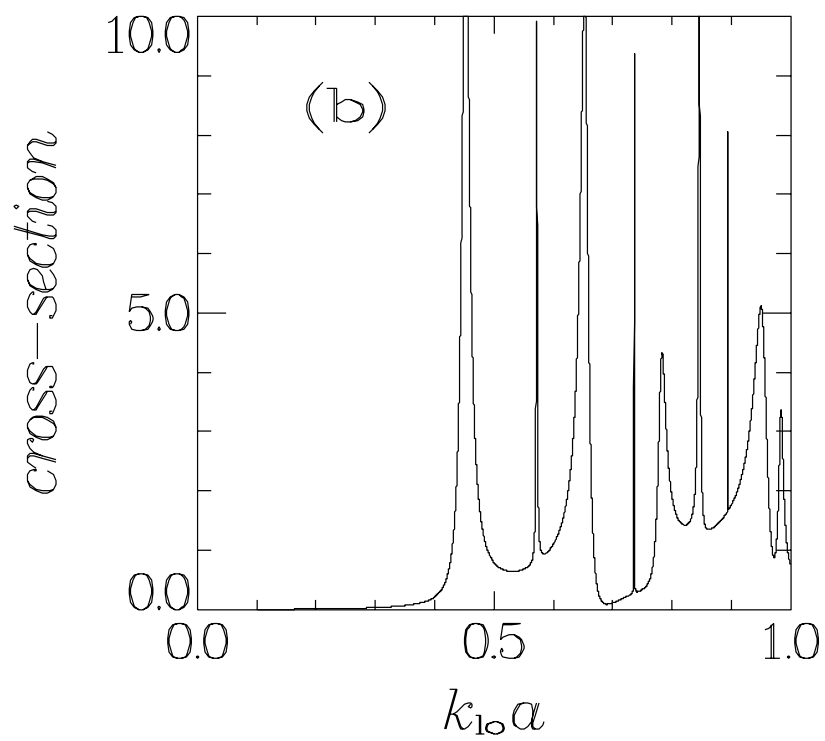
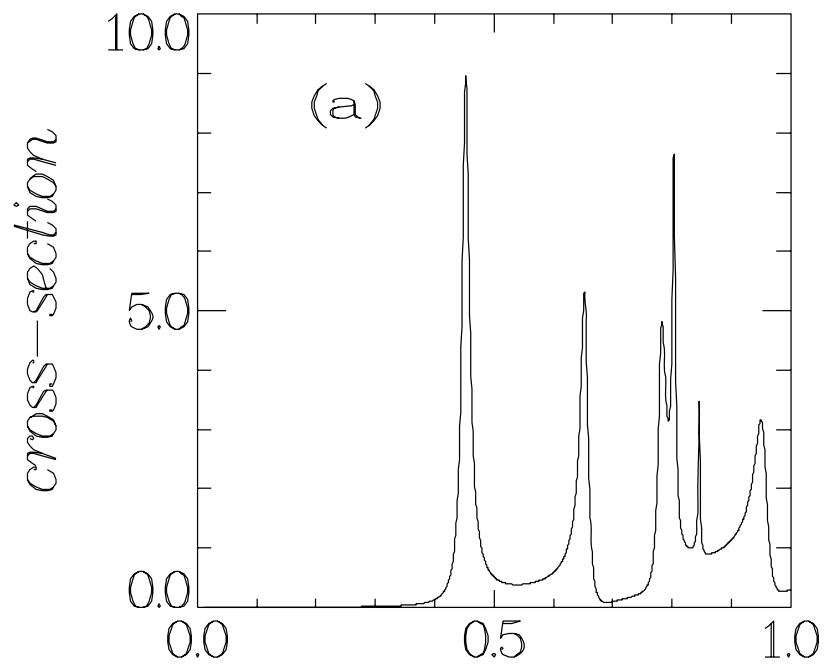


Fig. 1

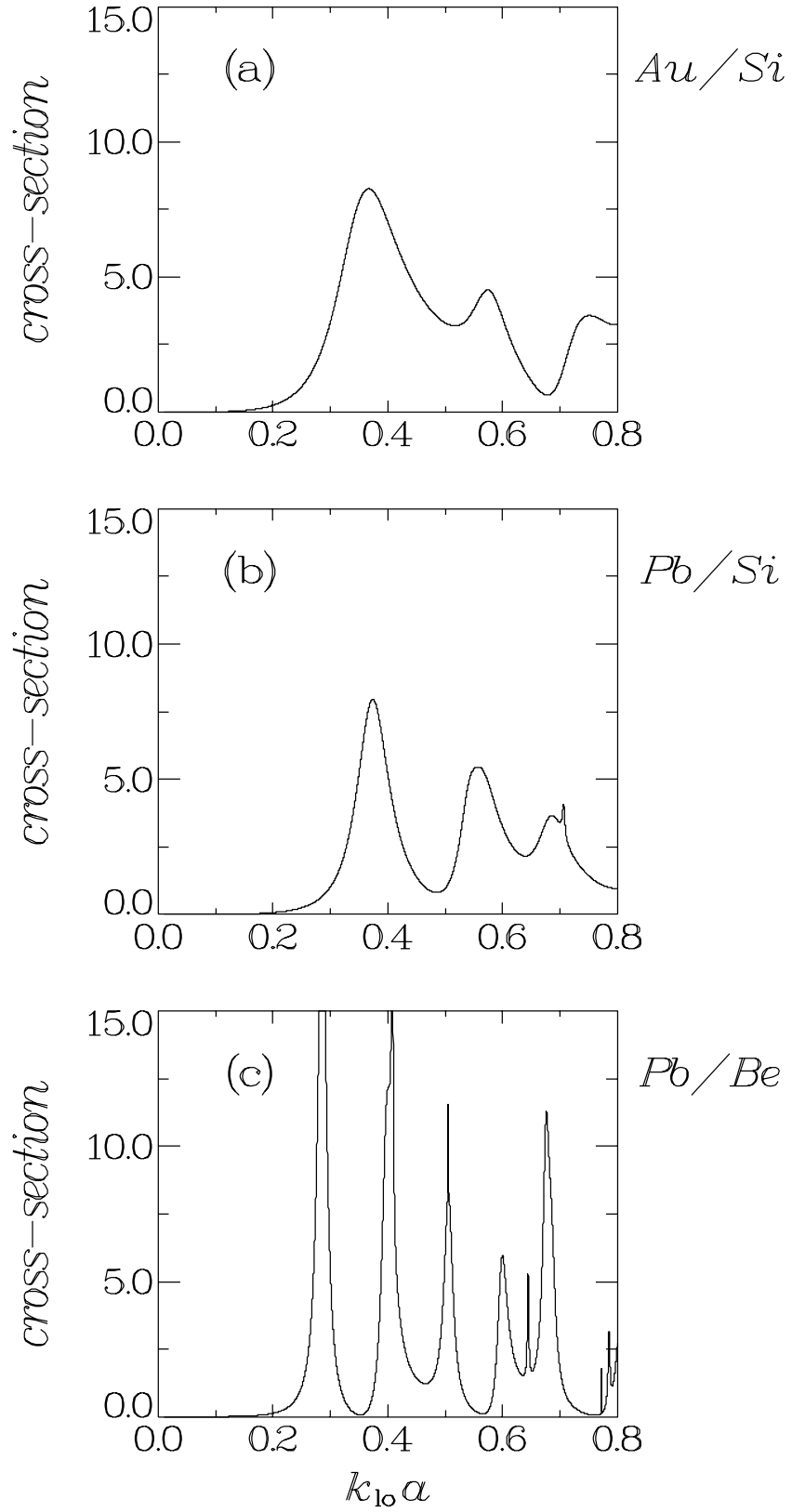


Fig. 2

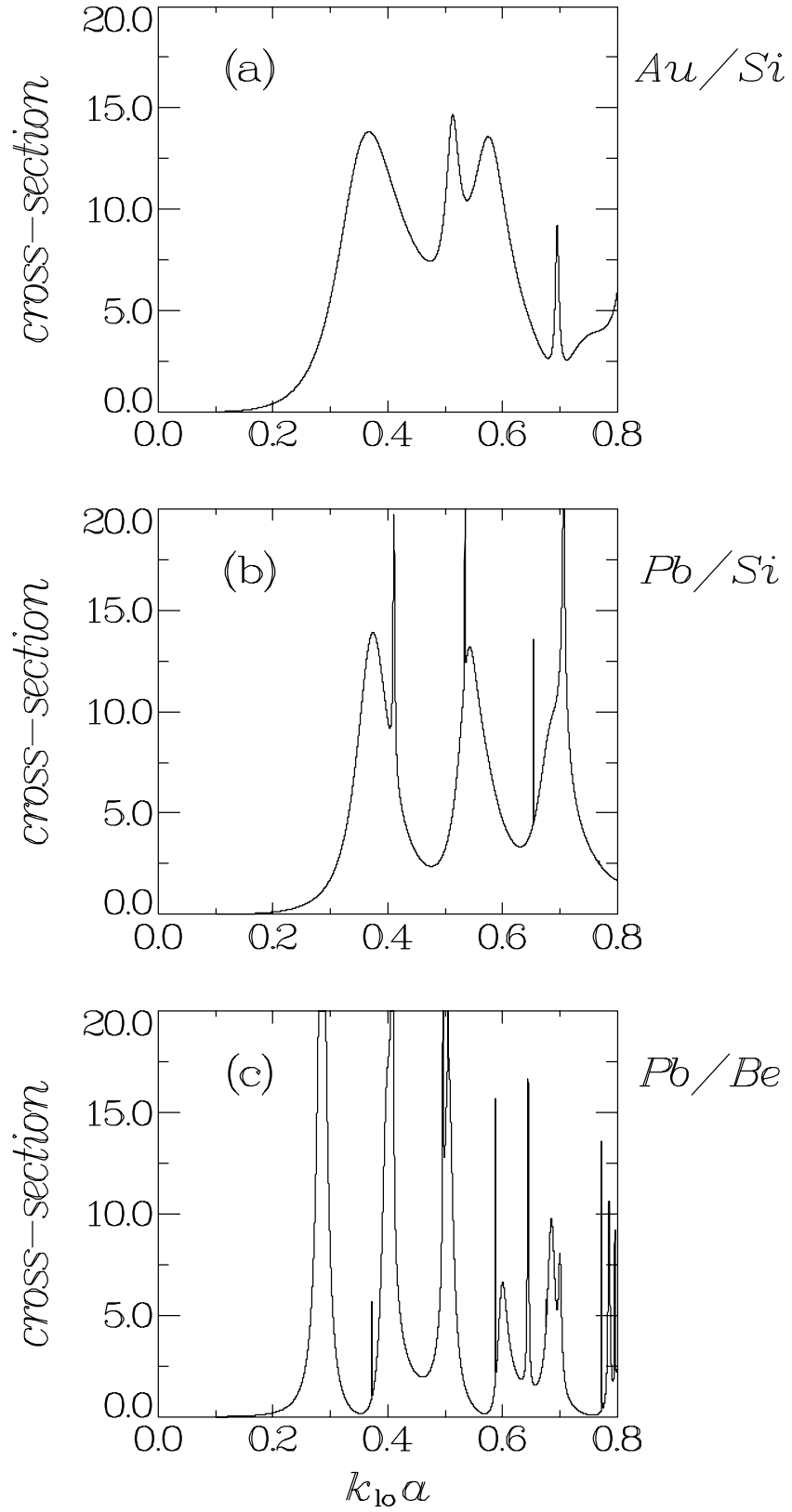


Fig. 3

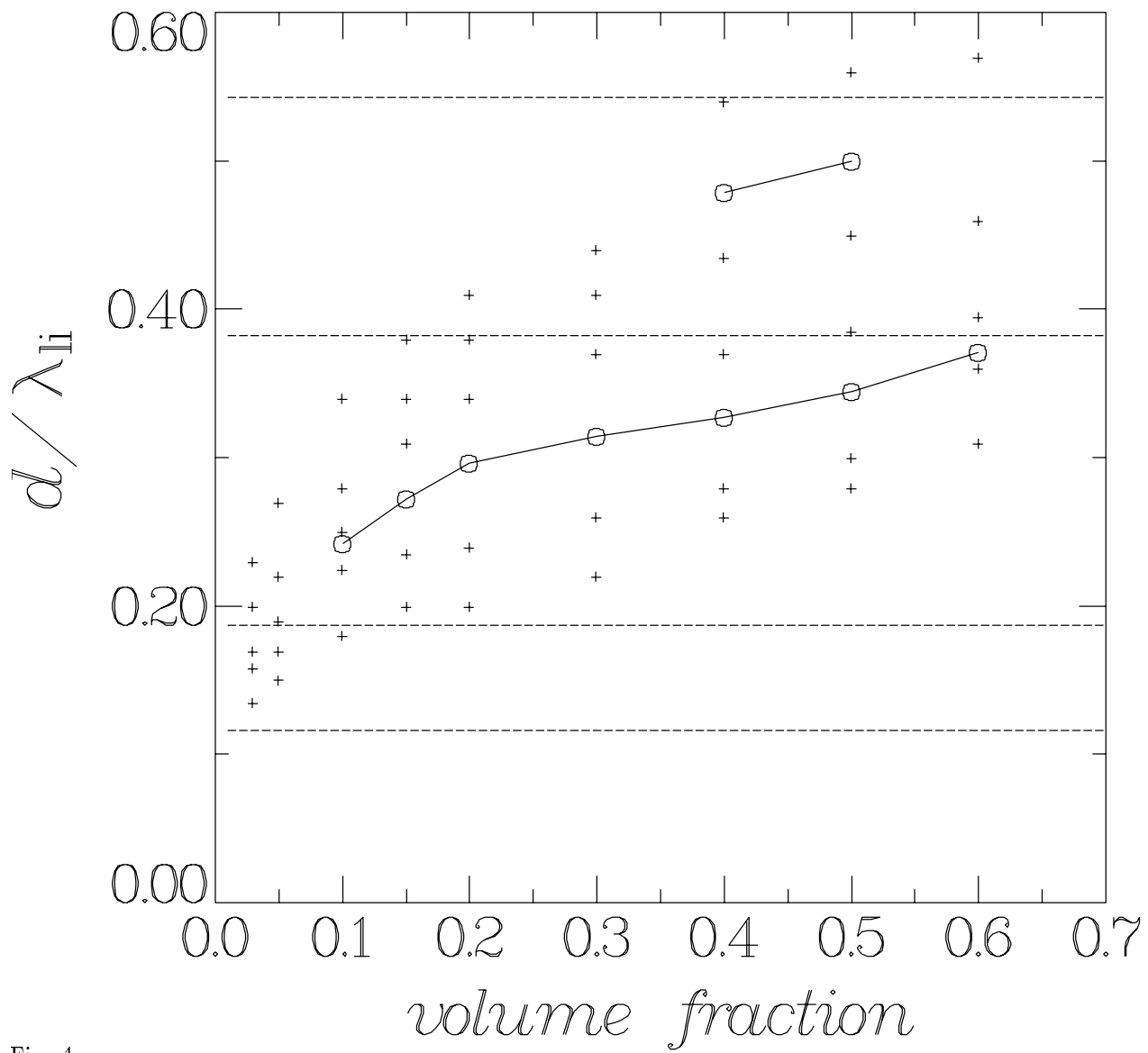


Fig. 4

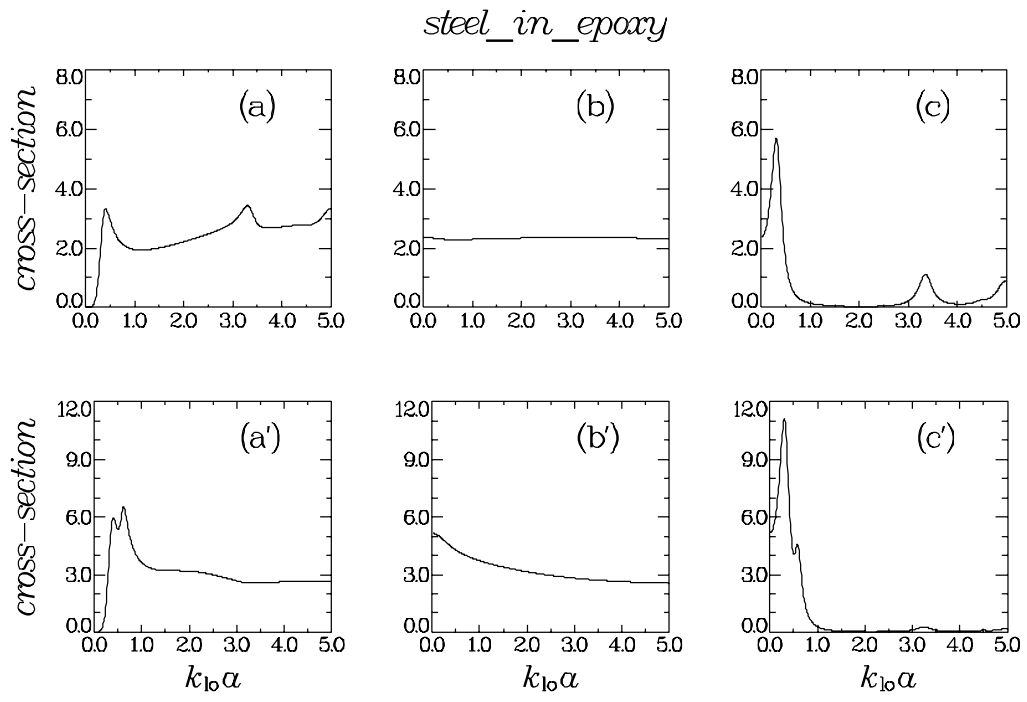


Fig. 5

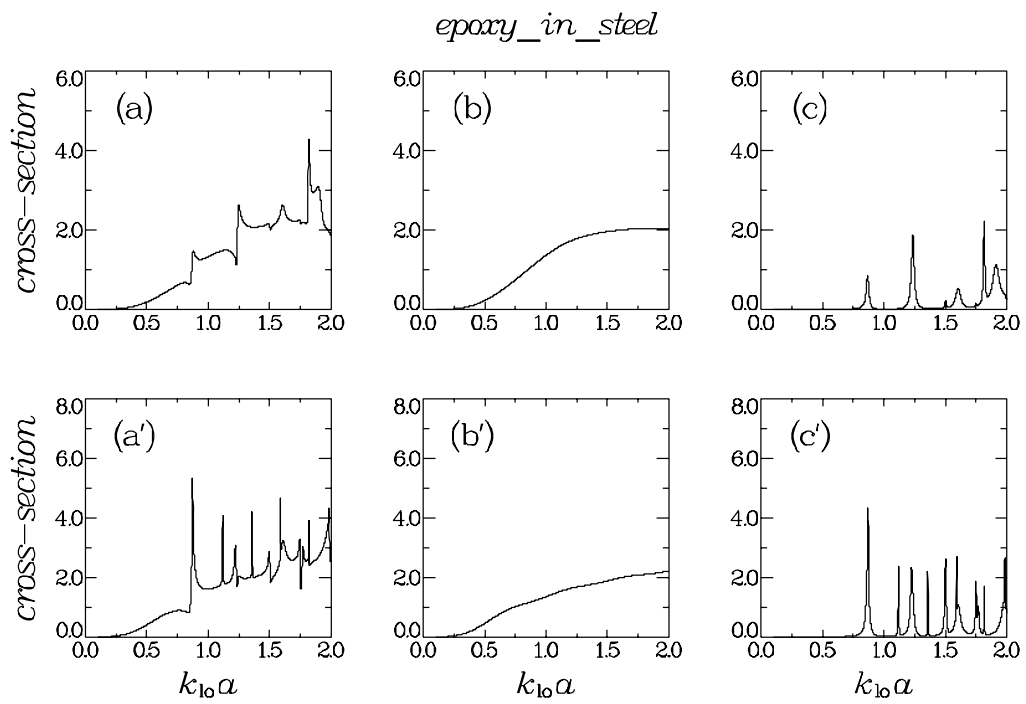


Fig. 6

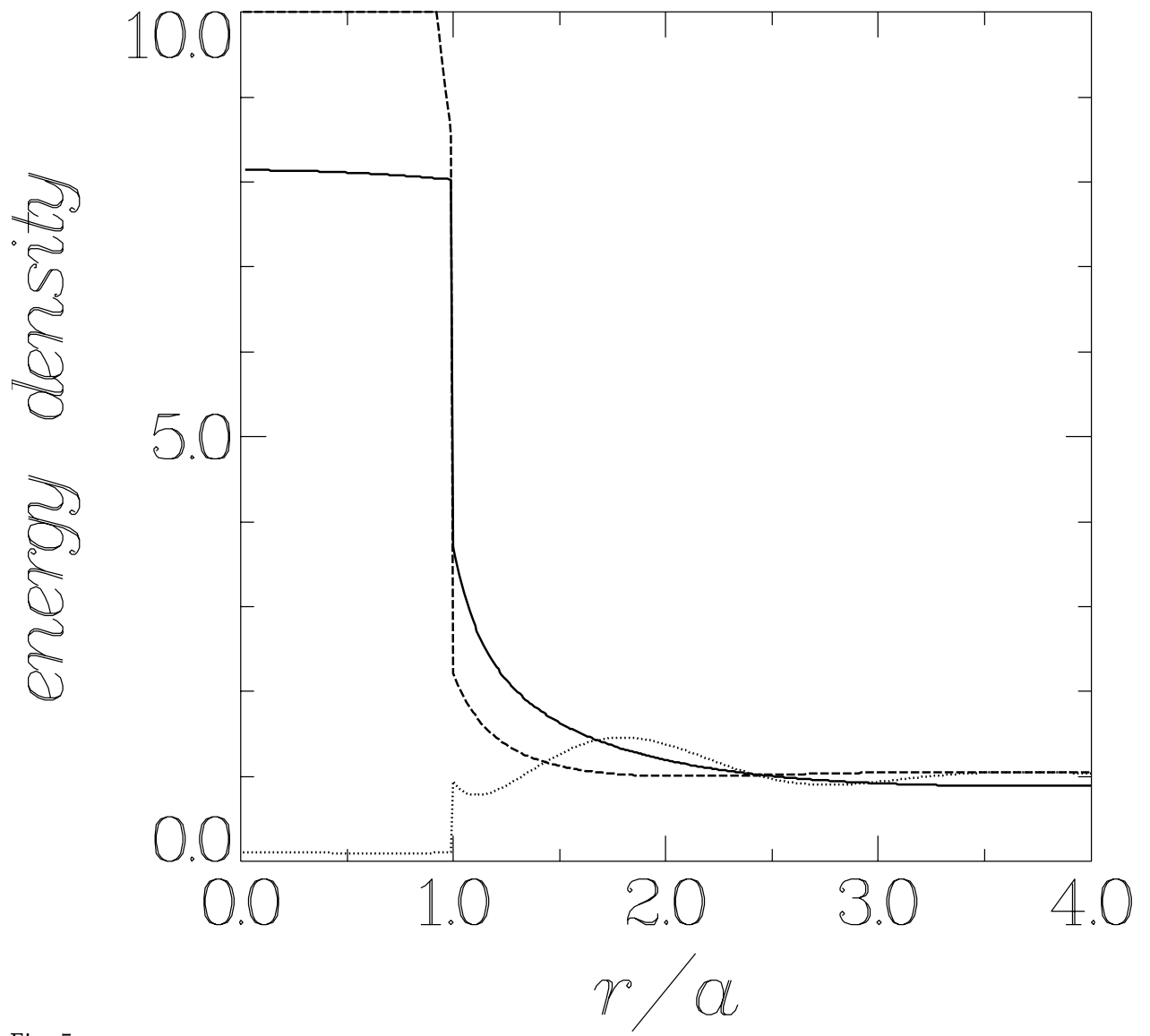


Fig. 7

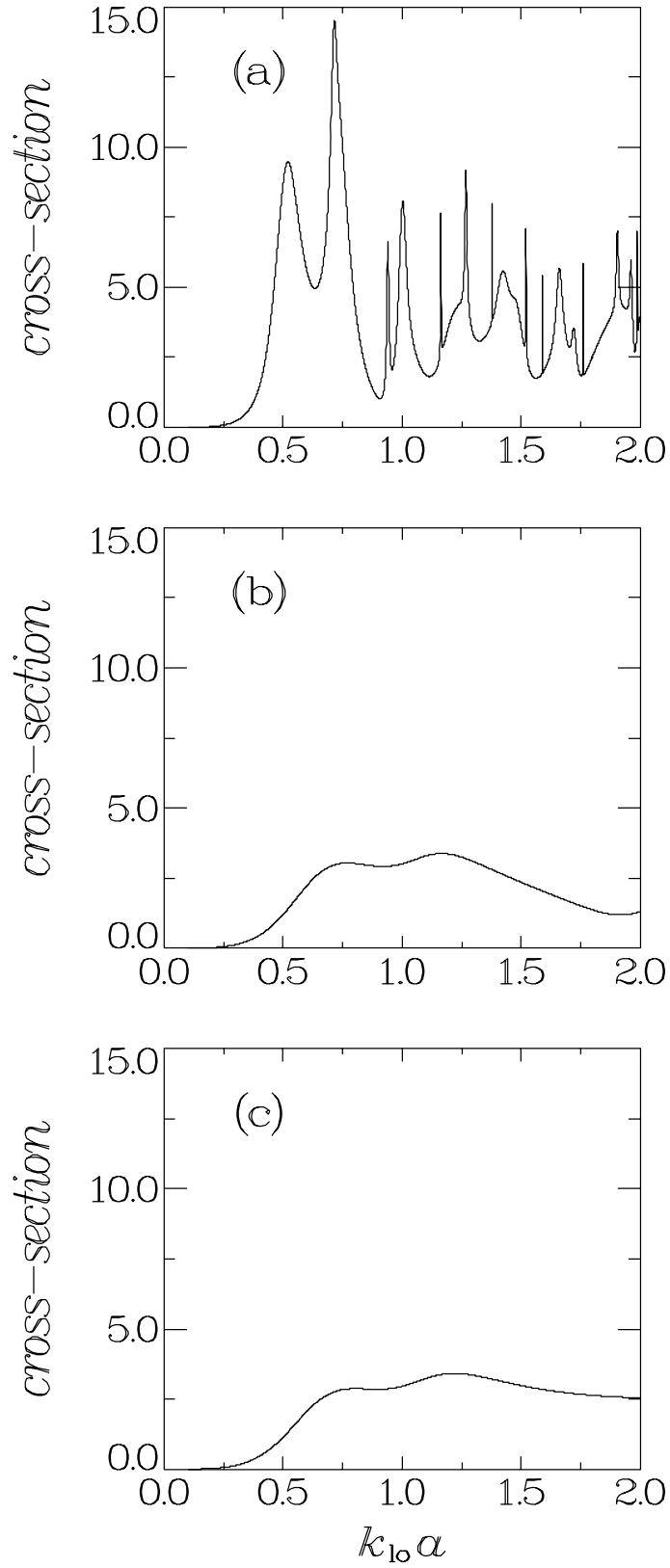


Fig. 8

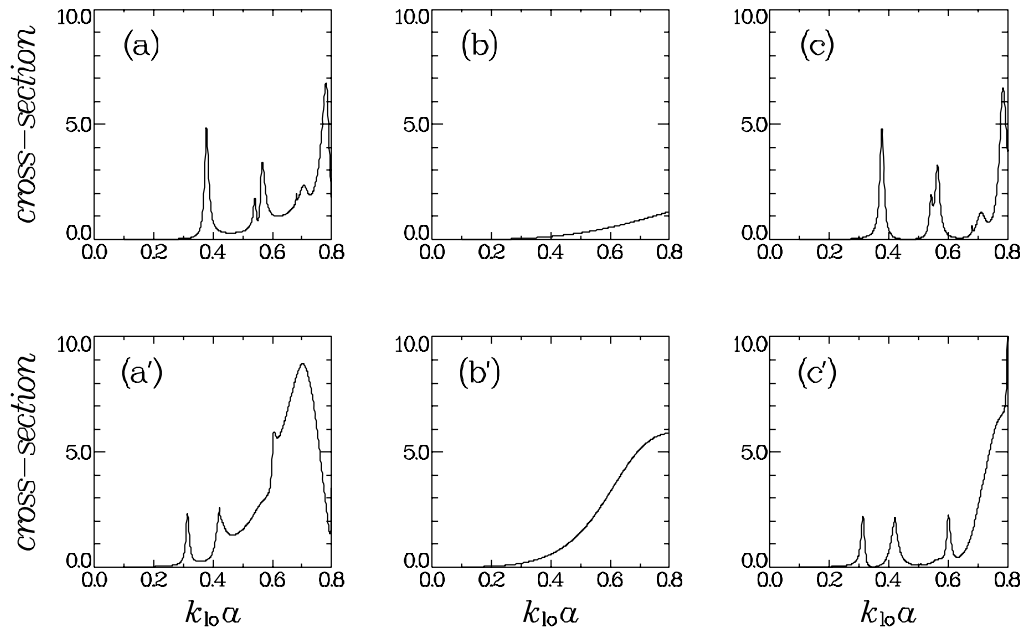


Fig. 9

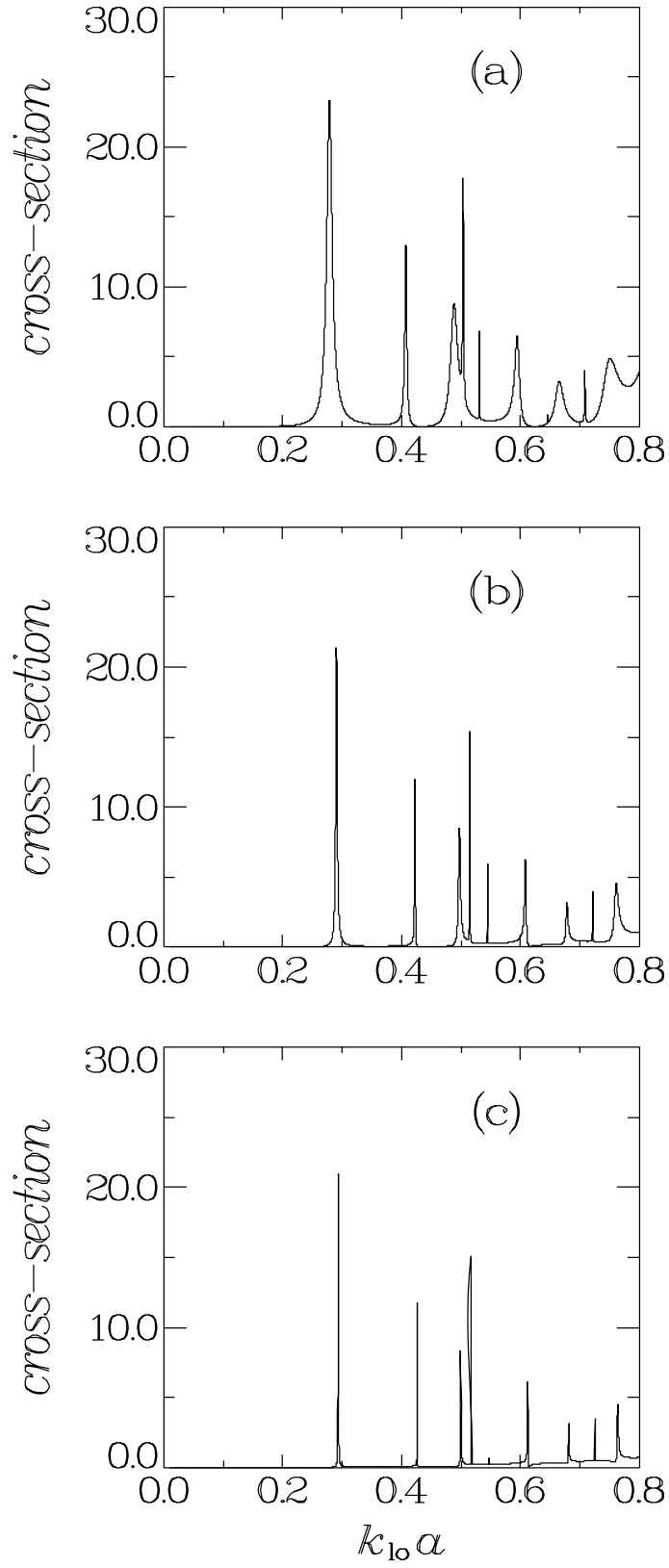


Fig. 10

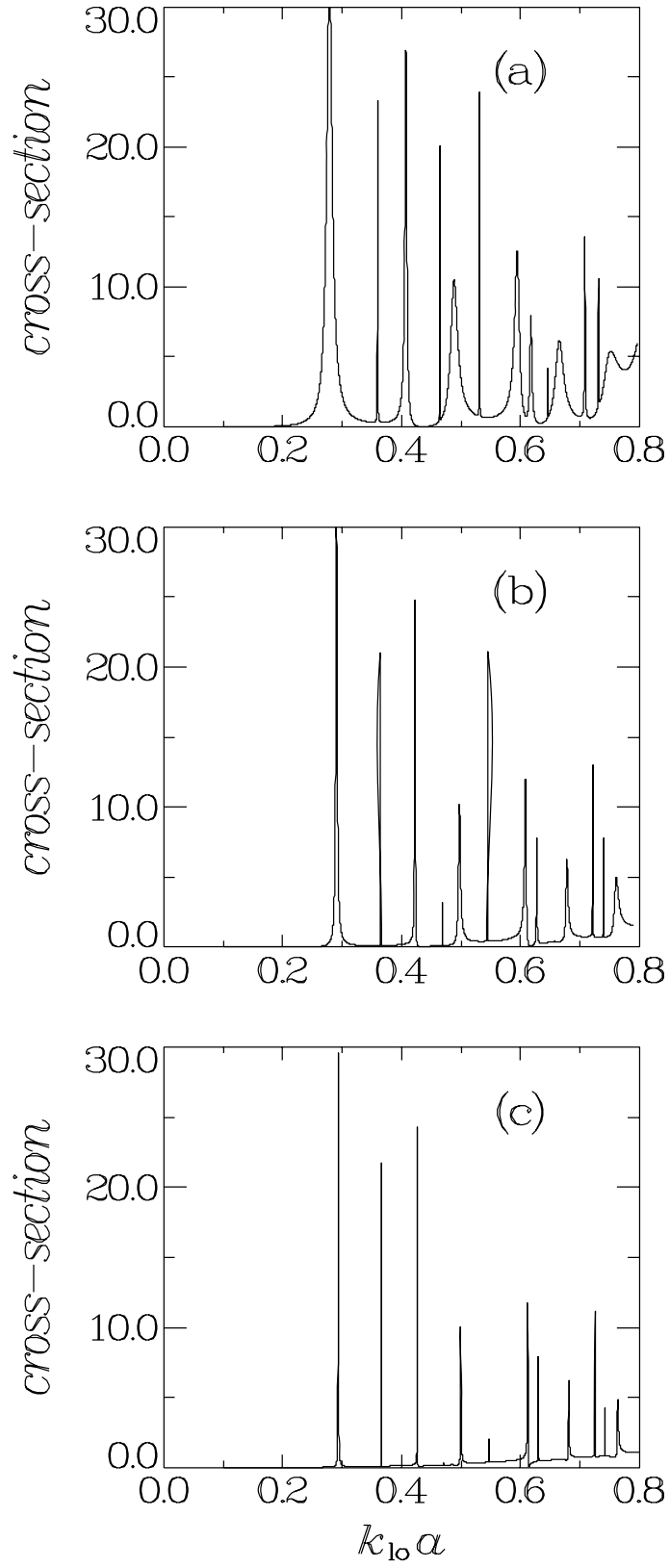


Fig. 11

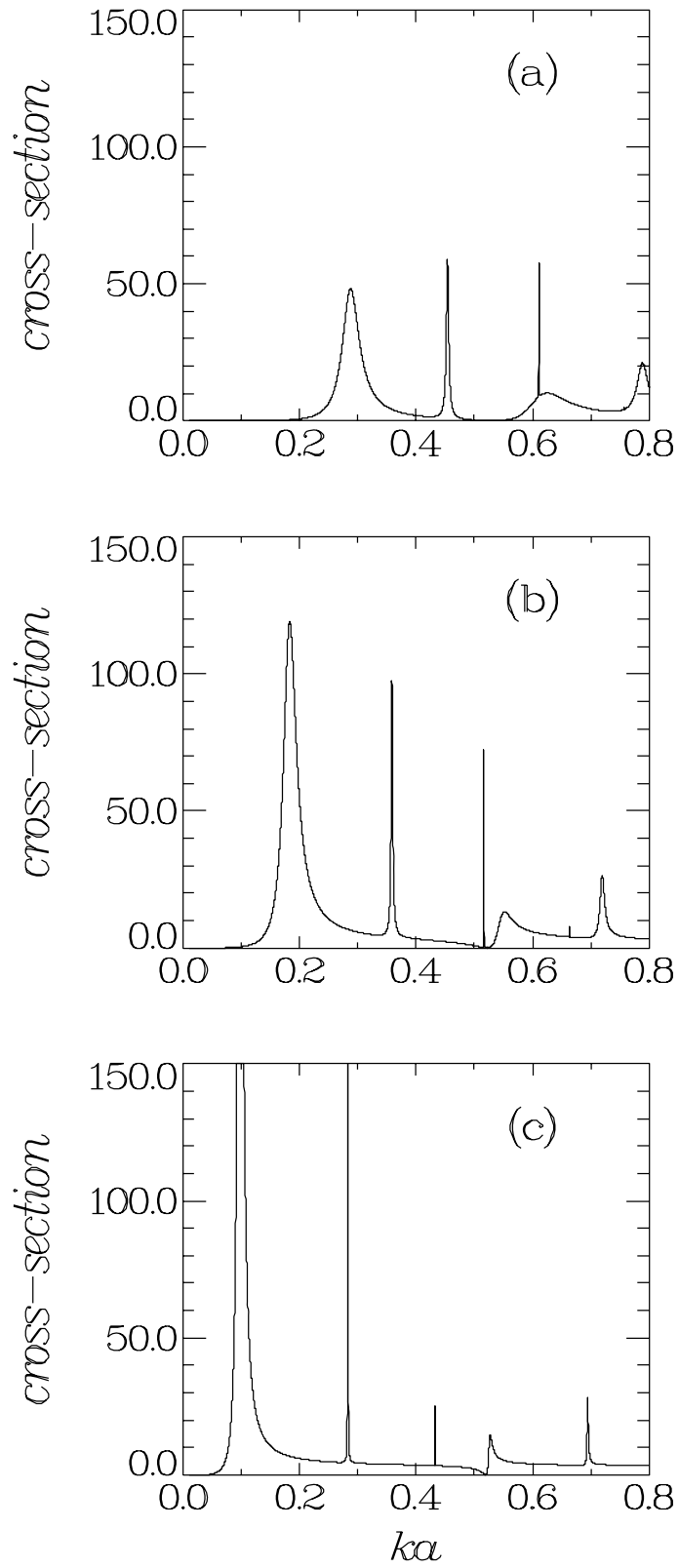


Fig. 12

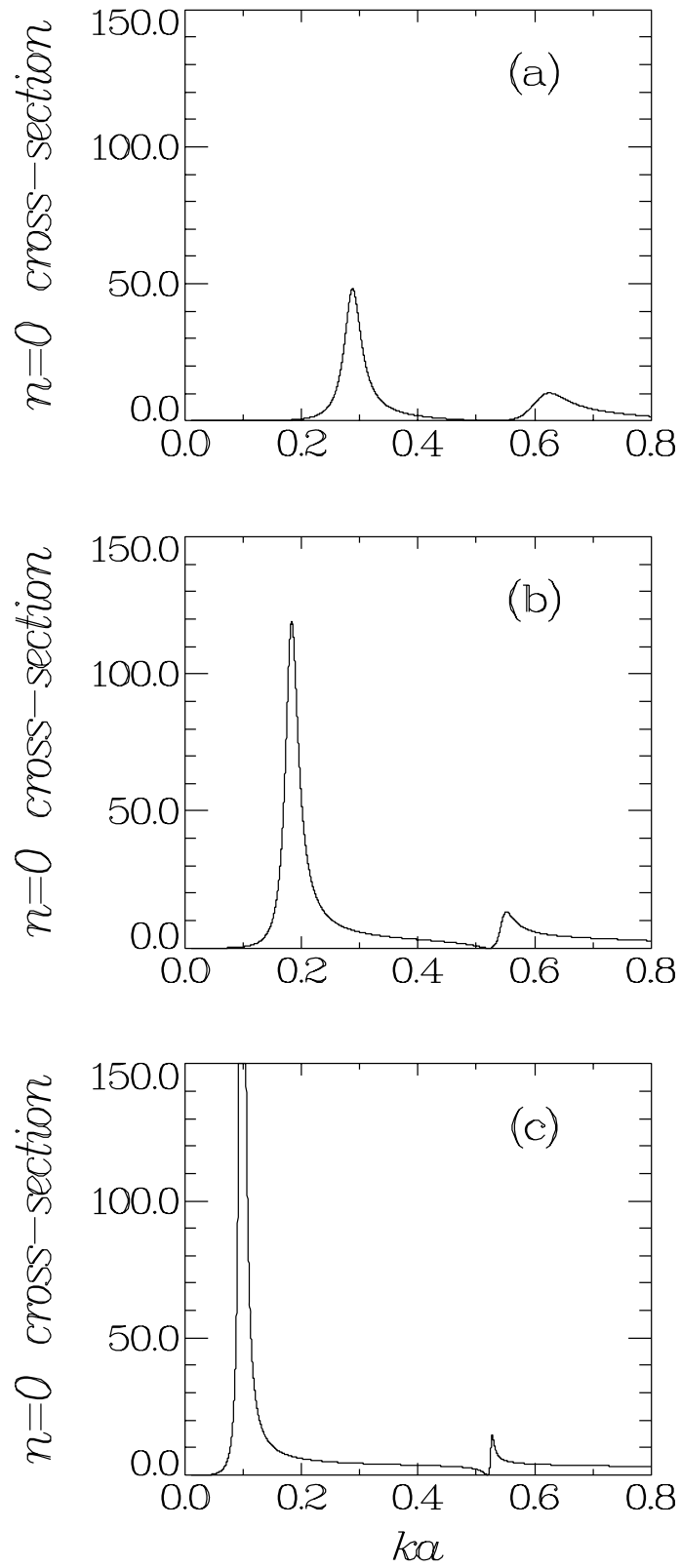


Fig. 13

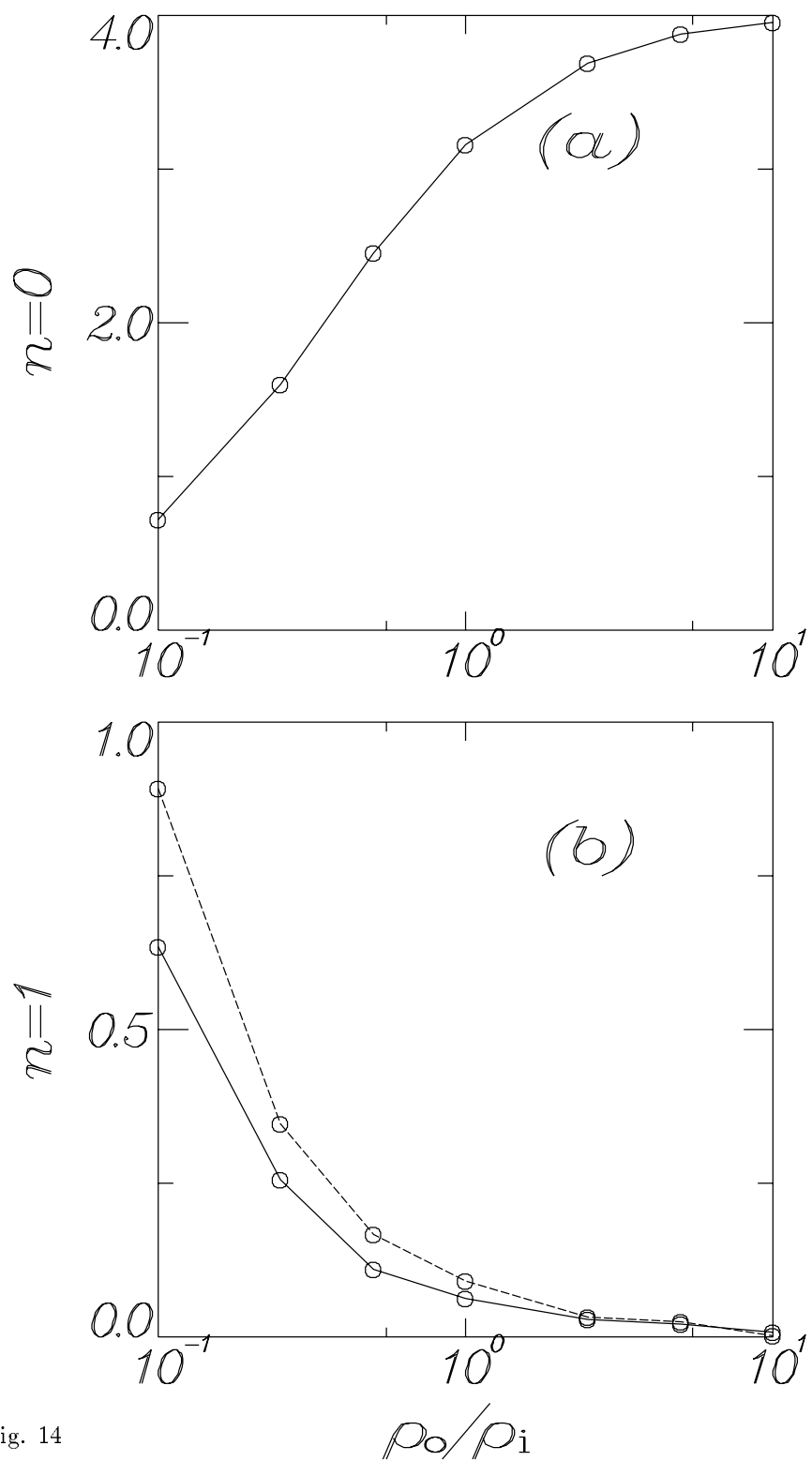


Fig. 14

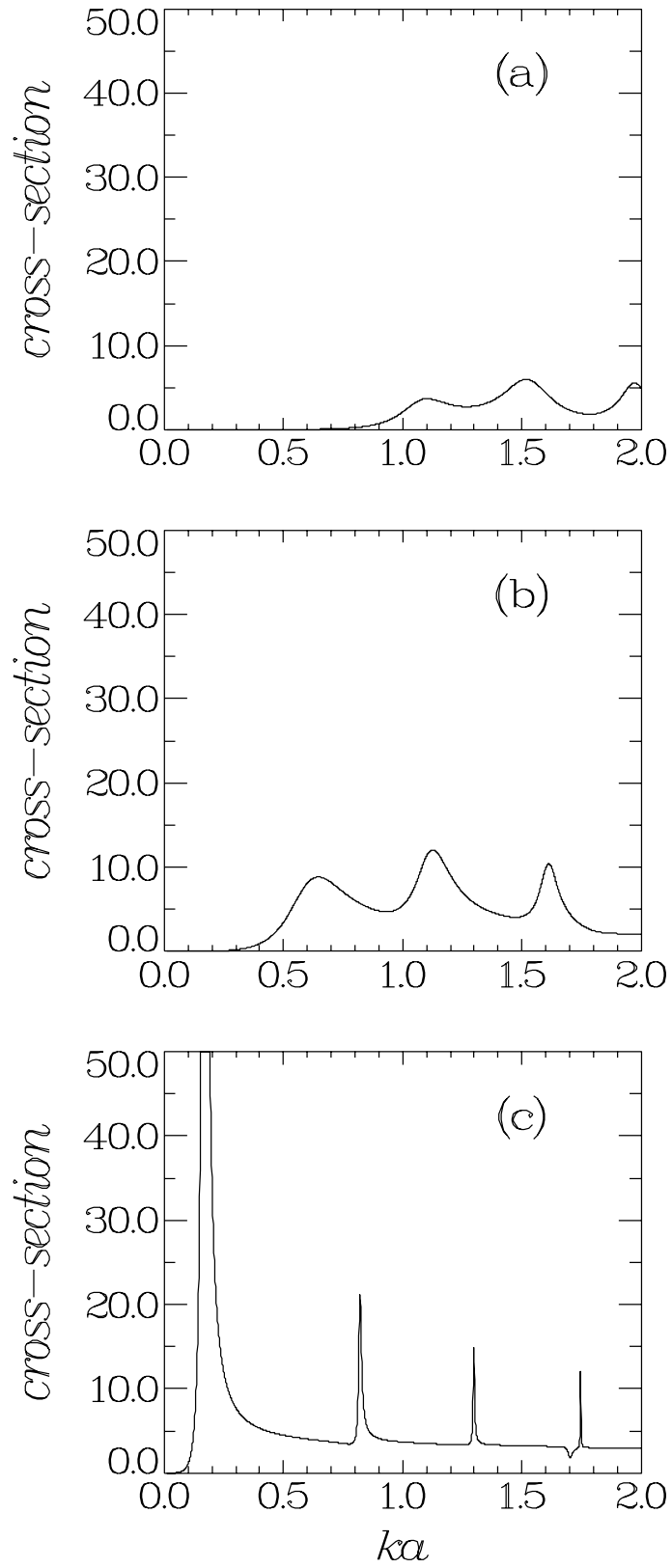


Fig. 15

ELASTIC WAVE BAND GAPS IN 3-D PERIODIC POLYMER MATRIX COMPOSITES

M. Kafesaki*, M. M. Sigalas** and E. N. Economou*

**Research Center of Crete, FORTH, P.O. Box 1527, 71110 Heraklio, and
Department of Physics, University of Crete.*

***Ames Laboratory and Department of Physics and Astronomy Iowa State
University, Ames IA 50011.*

Keywords: D. acoustic properties D. elasticity

Abstract

We present band structure results for elastic waves in periodic composite materials consisting of scatterers (spheres, cubes, or rods) embedded in a homogeneous polymer matrix. The material of the scatterers is a high density material (such as Steel, Ni, Pb, Cu, etc.). In all cases, we find wide full band gaps in fcc, bcc and sc structures for a wide range of filling ratios. We show that the existence of these wide gaps can be analyzed and predicted by using the single scattering results.

There is a growing interest in recent years for the propagation of elastic (EL) and acoustic (AC) waves in random and periodic composite materials [1] - [14]. The interest among solid state physicists is mainly connected to the question of the existence or not of spectral gaps in periodic systems or localized waves in disordered systems in analogy with what happens to the electrons in solids. The attention to the acoustic and elastic waves in connection with gaps or localization is not only due to their many applications (in geophysics, medicine, oil exploration, etc.) [15,16] but to their rich physics as well: EL waves are full vector waves with different velocity of propagation between the longitudinal and the transverse component; in the EL and AC wave equation there is a term proportional to the mass density variation which may cause the appearance of novel behavior. Furthermore, ACW and ELW in structures exhibiting localized eigenwaves (i.e. mobility gaps) offer themselves for an accurate experimental investigation of open questions regarding the problem of disorder induced localization.

The difficulty to construct composites sustaining localized eigenstates, was greatly reduced following the suggestion by John and Rangarajan [17] and by Economou and Zdetsis [18]; they pointed out that the existence of bands of localized eigenstates in ran-

dom systems is directly related to the existence of gaps in periodic systems since both are due to destructive interference of the multiple scattered waves. For this reason attention has been focused on the easier problem of ACW and ELW propagation in *periodic* systems for which one can employ computational methods that have been already developed for the electronic propagation in periodic crystals.

The study of acoustic and elastic wave propagation in periodic binary composites consisting of spheres embedded in a host (3-D) or from cylinders embedded in a host (2-D), shows [4,8,9,11,12] that gaps can exist under rather extreme conditions. These conditions concern mainly the density and velocity contrast of the components of the composite, the volume fraction of one of the two components, the lattice structure and the topology [11,12]; they are realized in a Be or Si or SiO₂ matrix with embedded Au or Pb spheres placed periodically in an fcc lattice [12]. For 2-D square lattice, full band gaps have been found only in Au cylinders in Be host [8]. However, the 2-D hexagonal lattices have proven more favorable for the creation of the gaps; in particular, rods from Mo, Al₂O₃, Fe, and steel embedded in Lucite host exhibit relatively wide gaps [11]. From the experimental point of view, Kinra and Ker [3] have measured the phase velocity of longitudinal waves through 3-D periodic polymer matrix composites as a function of frequency. Vasseur et. al. [23] studied numerically the elastic band structure of 2-D commercially available composite materials such as epoxy reinforced C or glass fibres and they found several extremely large complete band gaps in those systems.

Recently, considerable progress was achieved in understanding the above results and in predicting favorable material combinations [19]. Whenever the scattering cross-section from a *single* spherical inclusion exhibits *strong* and *well-separated* resonances with a *considerable background in between* attributed to either a *rigid* or *soft* sphere (in either case the field inside the inclusion is zero), a wide gap is expected. One can understand this basic result by considering two limiting channels of propagation in a composite: one is using the host material and avoids the inclusions; the other is employing the inclusions and hops coherently among them by a linear combination of the resonances in analogy with the LCAO in molecules and solids. In the spectral region of high background between two well-separated resonances neither channel is operational and consequently no propagation is expected to take place. This explanation was confirmed by comparing single sphere cross-sections with band structure results under various conditions [19].

In Fig.1 we show a case (Pb spherical inclusion in an epoxy host) which according to the previous reasoning is expected to exhibit as a periodic composite wide spectral gaps. Fig.1a shows the total cross-section of a transverse plane wave scattered by a Pb spherical inclusion embedded in epoxy. In Fig.1b the Pb sphere has been replaced by a rigid sphere ($\rho \rightarrow \infty$, $\mu \rightarrow \infty$, $\lambda \rightarrow \infty$, $c_\ell \rightarrow 0$, $c_t \rightarrow 0$) where ρ is the density, μ and λ are the Lamé elastic coefficients and c_ℓ , c_t the longitudinal and the transverse velocities : $c_\ell^2 = (\lambda + 2\mu)/\rho$, $c_t^2 = \mu/\rho$; Fig.1c shows the cross-section calculated by subtracting from the Pb scattering amplitude the rigid sphere scattering amplitude [26,27,19].

There are two broad resonances (the first is a double one) in the Pb sphere - epoxy matrix cross-section (Fig.1a), well separated by a region of non negligible scattering. This strong background scattering cross-section in the region between the resonances is due to the

contribution of the rigid sphere as the results of the subtraction of this contribution show (Fig.1c). In the longitudinal incident wave scattering concerning the same system, the cross-sections - not presented here - have almost the same form with those of Fig.1. An exception is that the first resonance is not a double one and that the peaks are a little lower. The previous reasoning suggests that a wide gap is expected between first and second resonance with its width to be narrower than the spectral distance between them. Also, the resonances are expected to coincide in position with the flat bands of the system (due to level repulsion and hybridization some deviations are expected). Indeed, as will be discussed below, this turned out to be the case. The half arrows in Fig.1a (with the G in between) show the position and the width of the gap and the regular arrows indicate the positions of flat bands (see Fig.2).

The single sphere scattering cross-section for the opposite case of Pb as matrix and epoxy as sphere was also calculated. What was found is that in the longitudinal incident wave scattering case the result of the subtraction of the corresponding background (soft sphere) is two very low resonances, while in the transverse incident wave case the cross-section is very smooth and low. These results are not favorable for gap creation. Indeed, explicit band structure calculations show no gaps in this case.

The conclusion of the above discussion is that periodic composites consisting of polymers (such as epoxy) as a host with high density metal inclusions (such as Pb) are expected to produce wide spectral gaps in ELW propagation. An additional advantage is that polymer materials are easily fabricated. Below we present EL wave band structure computational results for 3-D periodic composites consisting of inclusions formed by a high density metal such as steel, Pb and W and embedded in epoxy.

For a locally isotropic medium, the elastic wave equation is [25]:

$$\frac{\partial^2 u^i}{\partial t^2} = \frac{1}{\rho} \left\{ \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial u^\ell}{\partial x_\ell} \right) + \frac{\partial}{\partial x_\ell} \left[\mu \left(\frac{\partial u^i}{\partial x_\ell} + \frac{\partial u^\ell}{\partial x_i} \right) \right] \right\} \quad (1)$$

where u^i is the i -th component of the displacement vector $\vec{u}(\vec{r})$; $\lambda(\vec{r})$ and $\mu(\vec{r})$ are the Lamé coefficients [25] and $\rho(\vec{r})$ is the density. For periodic media $f(\vec{r})$ ($f \equiv \mu, \lambda$ or ρ^{-1}) can be expanded in terms of its Fourier components f_G . The displacement vector $\vec{u}(\vec{r})$ which satisfies Bloch's theorem can be expanded in terms of plane waves: $\vec{u}(\vec{r}) = \sum_{\vec{K}} \vec{u}_{\vec{K}} e^{i\vec{K}\vec{r}}$ where $\vec{K} = \vec{k} + \vec{G}$, and the summation is over \vec{G} . Keeping N reciprocal vectors, \vec{G} , in the previous sum and substituting in Eq.(2.1), we get a $3N \times 3N$ matrix eigenvalue equation for the $3N$ unknown coefficients $\vec{u}_{\vec{K}}$. The number N is increased until the desired convergence is achieved. In the present calculations we kept $N=400$ \vec{G} vectors to achieve convergence better than 5%.

Fig.2 shows the band structure of elastic waves propagating in an fcc lattice consisting of Pb spheres ($\rho = 11.357 \text{ g/cm}^3$, $c_\ell = 2.158 \text{ km/s}$ $c_t = 0.860 \text{ km/s}$) embedded in epoxy ($\rho = 1.180 \text{ g/cm}^3$, $c_\ell = 2.540 \text{ km/s}$ $c_t = 1.160 \text{ km/s}$); the radius of the spheres is 0.25 of the lattice constant corresponding to filling ratio 0.262. There is a complete band gap for all the directions in the Brillouin zone between the 6th and 7th bands. The lower edge of

the gap is at Γ point, the upper edge of the gap is at W point and the width of the gap over the midgap frequency, $\Delta\omega/\omega_g$, is 0.24.

Fig.3 shows the $\Delta\omega/\omega_g$ vs the filling ratio for a Pb spheres-epoxy matrix system for three different structures: fcc, bcc, and sc. The curves are almost the same for both fcc and bcc structures; the maximum $\Delta\omega/\omega_g$ is almost 0.24 at filling ratios around 0.25. For sc structure, the maximum $\Delta\omega/\omega_g$ is 0.2 at filling ratio 0.28. The gap appears for filling ratios between 0.1 and 0.57 for both fcc and bcc structures while for sc structure there is gap for filling ratios between 0.13 and 0.46. This is consistent with the empirical observation which states that the cermet topology is better for gap appearance than the network topology [10,11]. In the case of spherical scatterers, the cermet topology exists for filling ratios less than 0.74, 0.68, and 0.52 in fcc, bcc, and sc structures respectively (for filling ratios greater than those values the spheres overlap which corresponds to network topology). Thus, in sc structures the transition from cermet to network topology appears at smaller filling ratios than for both fcc and bcc structures.

Comparing the results of the sc structure with scatterers either cubes or spheres, we found that the maximum value of $\Delta\omega/\omega_g$ appears for spheres. On the other hand, the gaps appear in a wider range of filling ratios for the case of cubes. This can be explained by noting that the transition from the cermet to network topology appears at the filling ratio 1 (the cubes are touching each other only in the extreme case where the edge is equal to the lattice constant).

There are no gaps in systems consisting of isolated epoxy scatterers in Pb background which is in accordance with the previously mentioned requirements for the appearance of gaps. We also studied structures consisting of tetragonal rods connecting nearest neighbors in sc lattice [24]. We did not find any gaps for either Pb rods in epoxy or epoxy rods in Pb background. This is further support the empirical requirement which states that the cermet topology is more favorable for the appearance of the gaps [10,11].

Full band gaps were found for several other systems. In all the cases, the fcc structures give slightly wider band gaps than the bcc structures while the sc lattices give even smaller gaps. Plastics, such as epoxy or PMMA, are ideal materials for the background medium and the maximum value of $\Delta\omega/\omega_g$ appeared for filling ratios of the isolated spherical scatterers between 0.25 to 0.5. As scatterer material, we used W, Ni, Fe, Cu, Steel, and Ag. The densities and velocities of these materials as well as the maximum value of $\Delta\omega/\omega_g$ for epoxy host and fcc lattice are given in the following table.

	c_ℓ (km/s)	c_t (km/s)	ρ (g/cm ³)	$max(\Delta\omega/\omega_g)$
W	5.233	2.860	18.700	0.75
Ni	5.894	3.219	8.968	0.55
Fe	6.064	3.325	7.860	0.50
Cu	4.726	2.298	8.960	0.50
Steel	5.940	3.220	7.800	0.50
Ag	3.789	1.950	10.635	0.50

For all these systems the gap appears between the 6th and 7th bands. Also, the scatterer is the high density material in accordance with the previous experience. On the other hand, the velocities of the scatterers are either smaller (for the Pb) or higher (for all the other materials) than those of the matrix material. From the present results, it seems that *high density scatterers in a low density background is the most important condition* for the appearance of gaps.

It is worth mentioning that experiments on two systems similar with those that we have studied in the present work have already been done [3]. The first system consists of Steel spheres embedded in plastic (PMMA) forming a tetragonal lattice and the second one consists of Glass spheres in plastic (epoxy) forming a sc lattice. The results from our calculations for the dispersion curve of the longitudinal-like waves (these are the only modes that have been measured in the experiments) are in good agreement with the measurements (the differences are less than 15 %) However, our calculations show that none of those systems exhibit a full band gap, although, in particular for the Steel in PMMA system, full band gaps can be found in sc structures instead the tetragonal structure that they used in the original experiment [3].

In all examined cases (epoxy as host and W, Ag, Fe, Ni, Cu as sphere material) for which wide gaps were found, the single scattering study gave cross-sections similar to that shown in Fig.1 with the two broad resonances and the noticeable contribution of the background between them. In all these cases the single-scattering study gave also good estimations for the position of the gap as obtained from the corresponding band structure calculations.

Finally, the above mentioned as well as additional single scattering results, strongly indicate that the density contrast of the two materials (scatterer - matrix) is a much more important parameter for the appearance of a gap than the velocity contrast.

Acknowledgment - Ames Laboratory is operated by the U.S. Department of Energy by Iowa State University under Contract No. W-7405-Eng-82.

References

- [1] P. Sheng, ed., *Scattering and Localization of Classical Waves in Random Media*, (World Scientific, Singapore, 1990).
- [2] See the proceedings of the NATO ARW, *Photonic Band Gaps and Localization*, ed. C. M. Soukoulis, (Plenum, New York, 1993).
- [3] V. K. Kinra and E. L. Ker, *Int. J. Solids Structures* **19**, 393 (1983).
- [4] M.M. Sigalas and E.N. Economou, *J. Sound Vibration* **158**, 377 (1992).
- [5] J. P. Dowling, *J. Acoust. Soc. Am.* **91**, 2539 (1992).
- [6] L. Ye, G. Cody, M. Zhou, P. Sheng, and A. N. Norris, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 3080 (1992).
- [7] M.S. Kushwaha, P. Halevi, L. Xobrzynski, and B. Djafari-Rouhani, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2022 (1993).
- [8] M.M. Sigalas and E.N. Economou, *Solid State Commun.* **86**, 141 (1993).
- [9] E.N. Economou and M.M. Sigalas, in *Photonic Band Gaps and Localization* ed. by C.M. Soukoulis (Plenum Press, New York, 1993), pp. 317-338.
- [10] E.N. Economou and M.M. Sigalas, *Phys. Rev. B* **48**, 13434 (1993).
- [11] M.M. Sigalas, E.N. Economou, and M. Kafesaki, *Phys. Rev. B* **50**, 3393 (1994).
- [12] E.N. Economou and M.M. Sigalas, *J. Acoust. Soc. Am.* **95**, 1734 (1994).
- [13] M.S. Kushwaha, and P. Halevi, *Appl. Phys. Lett.* **64**, 1085 (1994).
- [14] M.S. Kushwaha, P. Halevi, G. Martinez, L. Xobrzynski, and B. Djafari-Rouhani, *Phys. Rev. B* **49**, 2313 (1994).
- [15] W. A. Smith and B. A. Auld, *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectrics, Frequency Control* **38**, 40 (1991).
- [16] B. A. Auld, Y. A. Shui, and Y. Wang, *J. de Physique, Colloque C5, suppl. No.4*, **45** (1984).
- [17] S. John and R. Rangarajan, *Phys. Rev. B* **38**, 10101 (1988).
- [18] E. N. Economou and A. Zdetsis, *Phys. Rev. B* **40**, 1334 (1989).
- [19] M. Kafesaki and E. N. Economou, unpublished.
- [20] S. John, *Physics Today* **40**, 32 (1991); Philip St. J. Russel, *Physics World* **37**, August 1992; J. Maddox, *Nature* **348**, 481 (1990).
- [21] See the special issue of the *J. Opt. Soc. Amer.* **B 10**, 208-408 (1993) on *Development and Applications of Materials Exhibiting Photonic Band Gaps*.
- [22] S. John, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2486 (1987).
- [23] J. O. Vasseur, B. Djafari-Rohani, L. Xobrzynski, M.S. Kushwaha, and P. Halevi, *J. Phys.:Condens. Matter* **6**, 8759 (1994).

- [24] H. S. Sozuer and J. W. Haus, *J. Opt. Soc. Am. B* **10**, 296 (1993).
- [25] Landau, L. D., and Lifshitz, E. M., 1959, "*Theory of Elasticity*", (Pergamon, London, 1959).
- [26] G. Gaunard and H. Uberall, *J. Acoust. Soc. Am.* **67**, 1432 (1980).
- [27] L. Flax, G. Gaunard and H. Uberall, in *Physical Acoustics*, edited by W. P. Mason (Academic, New York, 1981), vol XV.

FIGURE CAPTIONS

Fig. 1. Total dimensionless cross-sections vs $k_{to}a$ for Pb sphere in epoxy matrix (a), rigid sphere in epoxy matrix (b). The third panel (c) represents the cross-section calculated by subtracting from the Pb sphere scattering amplitude the rigid sphere scattering amplitude. The incident wave is transverse, a is the radius of the sphere and $k_{to} = \omega/c_{to}$ the transverse wave number in the medium of the matrix. The arrows indicate the positions of the flat bands and the half arrows (with the symbol G in between) the position of the gap in the corresponding fcc periodic composite with volume fraction of the spheres $x=0.262$.

Fig. 2. Elastic wave band structure for a fcc periodic composite consisting of Pb spheres in epoxy matrix. The volume fraction of the spheres is 0.262; ω is the frequency, a is the lattice constant and c the transverse wave velocity in the epoxy (c_{to}).

Fig. 3. The width of the gap over the midgap frequency vs filling ratio for a periodic composite consisting of Pb spheres in epoxy matrix and fcc (solid line), bcc (dotted line) and sc (dashed line) structure. The dotted-long dashed line corresponds to Pb cubes in epoxy matrix and sc structure.

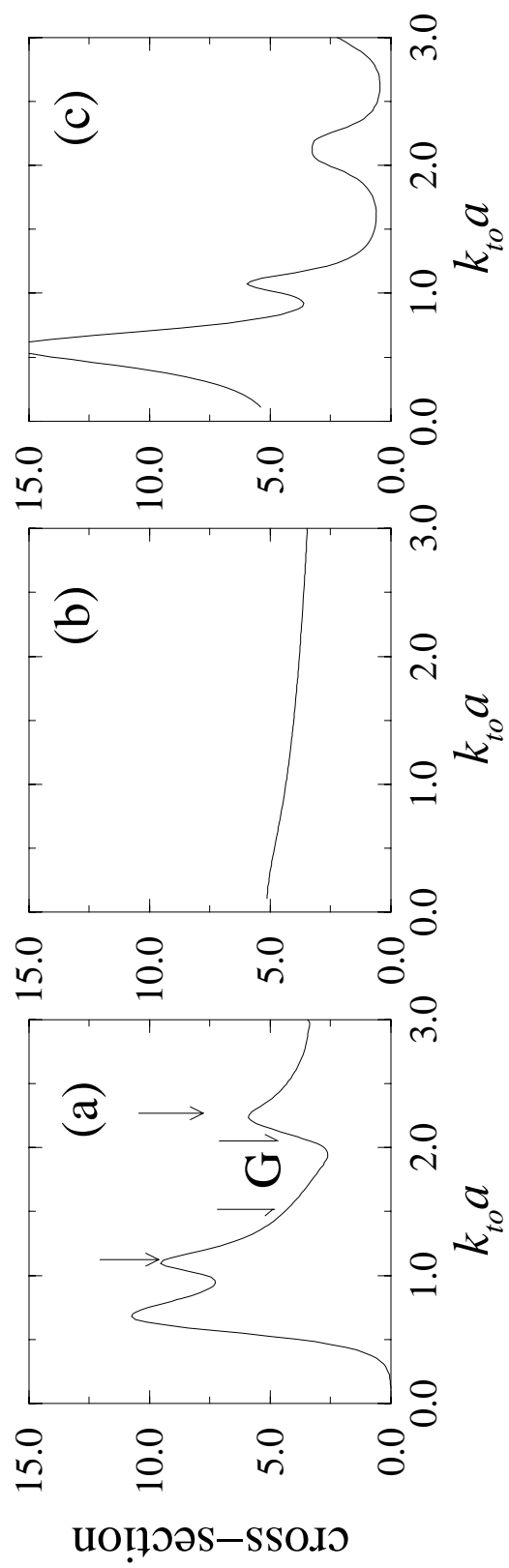
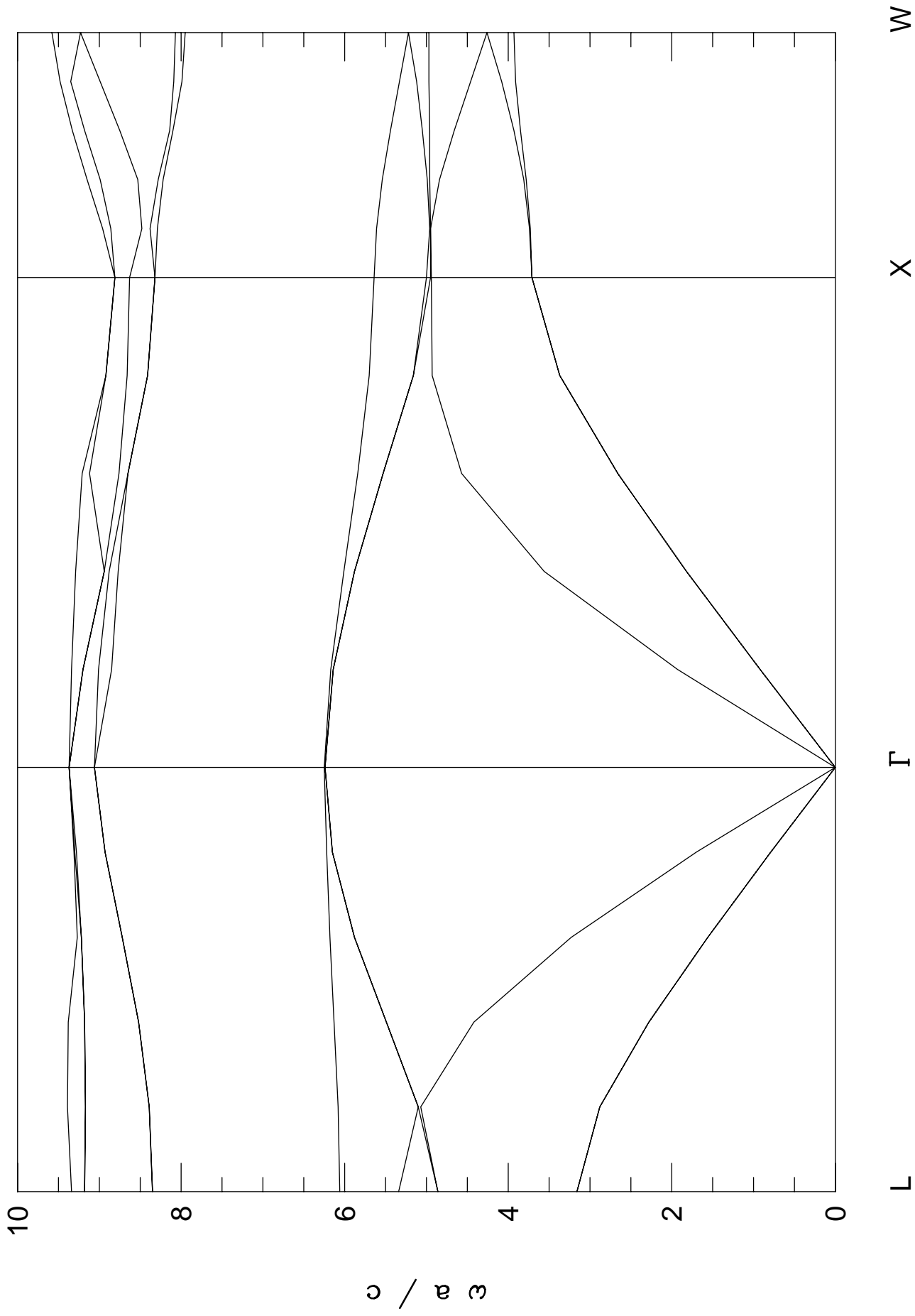
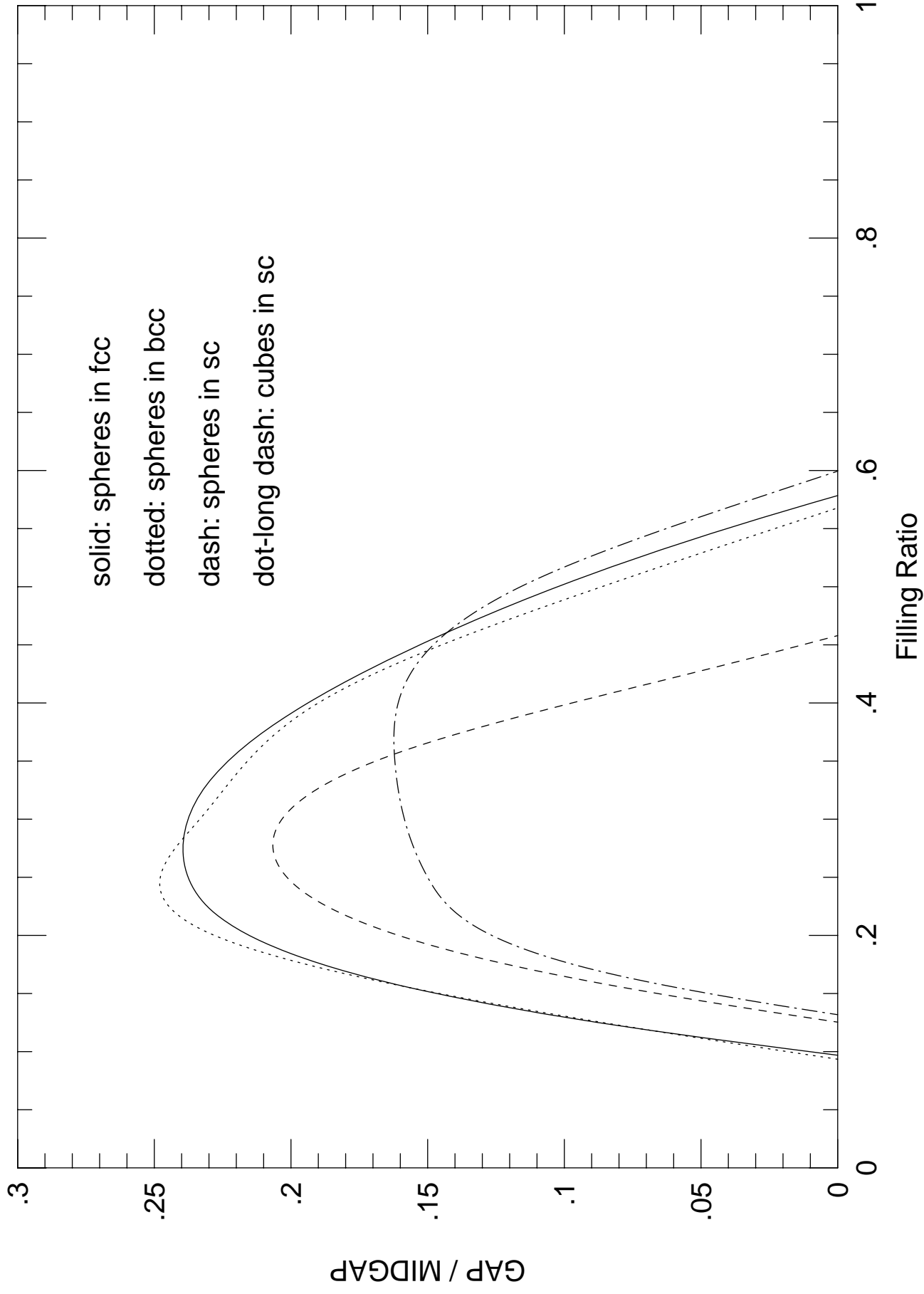


Fig.1

Pb spheres in epoxy, fcc, $f=0.262$



Pb scatterers in Epoxy matrix



ELASTIC WAVES IN PERIODIC COMPOSITE MATERIALS

M. KAFESAKI¹, E. N. ECONOMOU¹, AND M. M. SIGALAS²

^[1] *Research Center of Crete, FORTH, P.O. Box 1527, 71110 Heraklio, Crete, Greece, and Department of Physics, University of Crete.*

AND

^[2] *Ames Laboratory and Department of Physics and Astronomy Iowa State University, Ames IA 50011.*

1. Introduction

There is a growing interest in recent years for the propagation of acoustic (AC) and elastic (EL) waves in random and periodic composite materials [1-15]. The interest among solid state physicists is mainly connected to the question of existence or not of spectral gaps in periodic systems or localized states in disordered systems in analogy with what happens to the electron wave propagation.

Apart from the many applications of the AC and EL waves (in geophysics, medicine, oil exploration, etc.), their advantages for experimental study as well as their rich physics, are the other two poles of attraction for the solid state physicists.

The rich physics stems from: *i*) the full vector character of EL waves with the different propagation velocity of the longitudinal and the transverse component; these two components, while travel independently in a homogeneous medium, are mixed together when the wave passes through inhomogeneities, *ii*) the term proportional to the mass density variation ($\nabla\rho$) appearing in the AC and EL wave equation which may cause the appearance of novel behavior, *iii*) the richness in parameters of the AC and EL wave propagation (on this we will return in more detail later on).

The advantages for experimental study - common for any type of classical waves (CW) - have to do with the absence of the complicated non linear interactions (such as electron-electron or electron-phonon interactions which appear in the study of the electrons) as well as from the fact that CW frequency can be controlled accurately and easily.

There is, however, the problem of the absorption and the problem of the difficulty to construct composites sustaining localized eigenstates. The solution of the latter was greatly facilitated by a suggestion by John and Rangarajan [16] and by Economou and Zdetsis [17]. They connected the spectral gaps of a periodic system with the mobility gaps (bands of localized eigenstates) of a random system by pointing out that when we gradually randomize a periodic system possessing gaps, tails of localized eigenstates start to appear inside the gap, changing it gradually to a band of localized eigenstates of the resulting random system. This connection is not surprising because both gap and localized states are due to the same mechanisms, i.e., multiple scattering and the destructive interference of the waves.

Following the above suggestion, attempts were focused in the examination of CW wave propagation in periodic systems. The study of the periodic systems is greatly facilitated due to the strong symmetry of the periodicity and to the computational experience from the study of the electrons in crystalline materials.

These periodic systems are binary composites consisting of scatterers, in most of the cases spheres or cylinders, embedded in a host material (matrix).

The two components of the composite can be either both connected to form a continuous network (network topology) or one of the two (the scatterers) can be completely surrounded by the other (cermet topology). The study of the classical wave propagation in periodic systems concerns mainly the examination of the possible existence of spectral gaps (frequency regions where no propagation of the wave exists) and the determination of the optimal conditions for the appearance of these gaps. Although the appearance of a gap in the electron wave propagation is something a priori guaranteed, the same is not true for CW (such as ACW and ELW). CW correspond to electron waves with energy higher than the maximum value of the potential as can be seen from the comparison of scalar classical wave equation with Schrödinger's equation. In such energy region, gaps appear under rather extreme conditions, as shown for both simple scalar waves (SSW) [5,15-19] and EM waves [5,15,18,20-23] which were the first studied experimentally [24]. In the EMW case it was found that gap appears with greater difficulty than in the scalar case due to their vector character [2]. On the basis of this result, elastic waves are expected to resist even more than EMW the opening of gaps due to their full vector character, as a result of which each of the longitudinal and the transverse component must develop gaps overlapping with each other in order for a full band gap to exist [5, 6]. The different propagation velocity of the longitudinal and the transverse component makes this overlapping more difficult and thus the situation more problematic.

However, the many parameters of the problem, and in particular the density contrast, offer the possibility for the gap to be opened. Indeed, computational and experimental data [3-6,15] concerning AC and EL wave propagation in periodic systems consisting mainly from spheres embedded in a host (3D) or from cylinders embedded in a host (2D) showed gaps under proper conditions. These conditions concern mainly the density and velocity contrast of the components of the composite, the volume fraction of one of the two components, the lattice structure and the topology; they are realized numerically in a Be or Si or SiO₂ matrix with embedded Au or Pb spheres placed periodically in an *fcc* lattice [6]. For a 2D square lattice, full band gaps have been found in Au cylinders in the Be host [4]. For 2D hexagonal lattices, Mo, Al₂O₃, Fe, and steel rods embedded in a Lucite host gave relatively wide gaps [18]. Recent numerical studies of the elastic wave band structure of 2D and 3D composite materials such as C or glass fibers or Pb spheres in epoxy host gave extremely large complete band gaps in those systems [7, 8]. From the experimental point of view, Kinra and Ker [9] have measured the phase velocity of longitudinal waves through 3D periodic polymer matrix composites as a function of frequency. Their results are consistent with the existing numerical results.

Recently, considerable progress in understanding the above results and in predicting favorable (for gap) material combinations were achieved by considering a plane AC or EL wave scattered by a single scatterer and by connecting the resonances of the single scattering cross-section with the gap and the other characteristics of the band structure [25]. The main idea was the qualitative extension of the linear combination of atomic orbitals (LCAO) method, well known from the study of the electrons, in the AC and EL wave case with the resonance to play the role of the eigenstates. The simplicity of the single scattering problem gave the possibility to understand physically some of the open problems of the study of the periodic systems. Also, single scattering results predicted new systems with extremely wide gaps [8].

In this paper we present first a review of previous results in combination with some recent results concerning the dependence of the AC and EL wave spectral gaps on various parameters of the problem. We sum up what we already know for the AC and EL wave propagation in periodic composites focusing on some unanswered questions. Since the single scattering may give the key for these questions, we will attempt to interpret some of the above results by using single scattering analysis. It is shown that single scattering can predict the basic characteristics of the band structure giving, also, some optimal conditions for the appearance of the gaps. In what follows, we present first the basic equations governing AC and EL wave propagation as well as a summary of our methods of calculation.

2. Equations and Methods of Calculation

The general equation of motion for an elastic solid can be written as :

$$\rho \frac{\partial^2 u^i}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k}, \quad (1)$$

where u^i is the i -th component of the displacement vector, $\mathbf{u}(\mathbf{r})$, and $\rho(\mathbf{r})$ the mass density; σ_{ij} is *stress* tensor [26] which is related with the *strain* tensor

$$u_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u^i}{\partial x_j} + \frac{\partial u^j}{\partial x_i} \right) \quad (2)$$

by:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} u_{kl} \quad (3)$$

C_{ijkl} is the elasticity tensor.

For a *locally isotropic* medium the stress-strain relation (3) becomes :

$$\sigma_{ij} = 2\mu u_{ij} + \lambda u_{\ell\ell} \delta_{ij}, \quad (4)$$

where λ and μ are the so called Lamé coefficients of the medium [26]. The elastic wave equation (1) in this case can be written as:

$$\frac{\partial^2 u^i}{\partial t^2} = \frac{1}{\rho} \left\{ \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial u^\ell}{\partial x_\ell} \right) + \frac{\partial}{\partial x_\ell} \left[\mu \left(\frac{\partial u^i}{\partial x_\ell} + \frac{\partial u^\ell}{\partial x_i} \right) \right] \right\}. \quad (5)$$

For homogeneous media ($\lambda, \mu = \text{constant}$) Eq. (5) gives rise to uncoupled longitudinal and transverse waves with velocities $c_l = \sqrt{(\lambda + 2\mu)/\rho}$ and $c_t = \sqrt{\mu/\rho}$, respectively.

For liquids, $\mu = 0$ (only longitudinal waves exist), and by introducing the pressure, $p = -\lambda \nabla \cdot \mathbf{u}$, Eq.(5) can be rewritten as

$$\frac{\partial^2 p}{\partial t^2} = \lambda \nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right) \quad (6)$$

which for $\rho = \text{constant}$ is reduced to a scalar Helmholtz equation.

In all the above formulae, repeated indices denote summation. Also, the indices are referred to a general coordinate system with the exception of (2) and consequently (5) which are valid only for cartesian coordinates (for the expression of u_{ij} in cylindrical or spherical coordinates see ref. 26 page 3).

For *periodic media* the displacement vector \mathbf{u} which satisfies Bloch's theorem can be written as $\mathbf{u} = \mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, where $\mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ is a periodic function with the same periodicity as $\lambda(\mathbf{r})$, $\mu(\mathbf{r})$ and $\rho^{-1}(\mathbf{r})$ (see Eq.(5)). All these periodic functions can be expanded into a Fourier series (plane waves) with corresponding coefficients $\mathbf{u}_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}$, $\lambda_{\mathbf{G}}$, $\mu_{\mathbf{G}}$ and $\rho_{\mathbf{G}}^{-1}$ respectively. \mathbf{G} is a vector of the reciprocal lattice.

Approximating the infinite sums in the Fourier series by finite sums containing N terms, Eq. (5) and Eq. (6)) reduce to a $3N \times 3N$ ($N \times N$) arithmetically solvable matrix eigenvalue equation for the $3N$ (N) unknown coefficients $\mathbf{u}_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}$ [5].

The above procedure is known as the PW (plane waves) method. The number N is increased until the desired convergence is achieved. In the calculations which we will present in this work, we kept $N=400$ \mathbf{G} vectors to achieve convergence better than 5%.

The study of the *single scattering* is based on the calculation of the scattering cross-section for either a longitudinal or a transverse plane wave scattered by a homogeneous scatterer embedded in a homogeneous host.

The main step for the calculation of the cross-section is the calculation of the wave, \mathbf{u} , inside and outside the scatterer. These waves are obtained from the general solution of the elastic wave equation in each region [25, 27] with the application of proper boundary conditions on the surface of the scatterer. The boundary conditions concern the continuity of the displacement vector \mathbf{u} as well as the continuity of the stress vector, \mathbf{P} (with components $P_i = \sigma_{ij}n_j$, where \mathbf{n} is the outgoing unit vector normal to the surface of the scatterer) [25, 28-30].

The scattering cross-section for an incident plane wave propagating in the \mathbf{m} -direction is given by [25, 31]

$$\sigma = \int \frac{\langle n_i Re(\sigma_{ij}^{sc}) Re(\dot{u}_j^{sc}) \rangle}{\langle m_i Re(\sigma_{ij}^{inc}) Re(\dot{u}_j^{inc}) \rangle} r^2 d\Omega \quad for \quad r \rightarrow \infty. \quad (7)$$

The angular brackets denote time average, the dot denotes time derivative, and the superscripts *sc* and *inc* refer to the scattered and the incident (which can be either longitudinal or transverse) fields, respectively. The quantities m_i are the components of the \mathbf{m} unit vector; the symbol “*Re*” denotes the real part and the repeated indices indicate summation.

The single scattering calculations presented in this work are restricted to the case of spherical scatterers. In this case the spherical coordinate system is the most convenient. The displacements and the stresses of Eq. (7) are expanded into spherical waves giving the cross-section in the form of an infinite sum of partial cross-sections, each from the contribution of each partial spherical wave.

In all of our calculations, these infinite sums have been approximated by finite sums (by using a truncation criterion) containing, at most, 15 terms. For small frequencies, three or four terms were usually plenty to give satisfactory accuracy. The relative truncation error in all cases was less than 10^{-4} .

3. Study of the Periodic Systems

As mentioned earlier an extensive study of the acoustic and elastic wave propagation through periodic composites has been done concerning the dependence of the gap on various parameters of the composite [3-6, 15]. We will present some of the main results of these studies which show the dependence of the gap on parameters such as the topology, the solidity of the scatterers and host, the density and velocity contrast between the two materials, the volume fraction, the lattice structure, and the shape of the scatterers.

Let us first discuss the role of the *topology* in the appearance of a gap. In Fig. 1 we show the band structure of a *sc* periodic composite consisting of steel spheres ($\rho = 7.8 \text{ g/cm}^3$, $c_l = 5.94 \text{ km/s}$, $c_t = 3.22 \text{ km/s}$) embedded in epoxy ($\rho = 1.180 \text{ g/cm}^3$, $c_l = 2.540 \text{ km/s}$, $c_t = 1.160 \text{ km/s}$). The volume fraction occupied by the spheres is 0.268, i.e., the spheres are unconnected (cermet topology). There is a complete band gap between the 6th and 7th band. The midgap frequency is $\omega_g a / c_{to} \approx 6.3$ with “*a*” being the lattice constant and c_{to} the transverse wave velocity in epoxy. The upper edge of the gap is at the M point while the lower edge is at the Γ point (indirect gap). The three lowest lying branches below the gap are the so-called acoustic branches. They are characterized by the fact that at the Γ point (long wave length limit) they tend linearly to zero. For high symmetry directions the two lowest lying acoustic branches are degenerate and are pure transverse waves while the third is pure longitudinal wave. For an arbitrary direction of \mathbf{k} there is small admixture of the other polarization (compare the ΓX with the ΓM direction). The other, almost flat branches, corresponding to sharp peaks in the density-of-states, are the so-called optical branches and, in most of the cases, they have both

longitudinal and transverse character. We note the above characteristics (acoustic and optical branches) are common characteristics in the elastic wave band structures of periodic composites with one scatterer in each primitive shell.

In Fig. 2 the steel spheres of Fig. 1 have been replaced by steel tetrahedral rods connecting nearest neighbors. This arrangement produces a network topology. We can see here that the wide gap of Fig. 1 has disappeared.

Figures 1 and 2, as well as, a variety of other computational data [4, 15] indicate that the preferable topology for the gap in both acoustic and elastic wave propagation is the cermet topology in contrast to the electromagnetic waves which seem to prefer the network. The most unexpected point in these results is that elastic waves are closer to the AC rather than to the EM waves, although one would expect the opposite (due to the vector character of both EL and EM waves). The isotropic scattering present in both the AC and EL case and absent in the EM case does not seem to explain this behavior because in the “hard” (with high c_t/c_l) solids, the role of this component is negligible as we will show later on. In the following, we will restrict ourselves to the structures with cermet topology. The subscript “o” (out) will denote the matrix material and the subscript “i” (in) will denote the scatterers.

Next, we discuss the effects of non constant *solidity* (ratio of the transverse to the longitudinal wave velocity, c_t/c_l) for scatterers and host. Although the role of this parameter seems to be not decisive for the gap, the existing results [5] seem to suggest that gap is slightly favored from the largest possible ratio c_t/c_l ($= 1/\sqrt{2}$) for both materials. This is not surprising because in high solidity materials due to the similar velocity of the longitudinal with the transverse mode, the stronger mixing of these modes occurs.

A very important parameter for the appearance of a gap, which is absent in the EM as well as in the simple scalar case, is the *density contrast*, ρ_i/ρ_o , between scatterers and host. This ratio gives the possibility for the gap in the ELW propagation to appear in many cases more easily than in the EMW propagation inspite of the full vector character of the elastic waves. What has been found [3-5] is that, for solids, the gap is favored from the largest ratio ρ_i/ρ_o , i.e., high density inclusions in a low density matrix, for liquids the opposite condition is required; thus, low density inclusions in a high density matrix is the ideal combination for a wide gap. To this strange and unexpected difference between liquids and solids we will return later on for a possible explanation.

Another parameter which affects the gap in a unclear way is the *velocity contrast* between scatterers and host. Here, we consider first the effects of velocity contrast in the absence of density contrast. In Fig. 3 we show the gap over midgap vs $r_c^2 = c_o^2/c_i^2$ for a 2D periodic composite consisting of liquid circular rods embedded in a liquid host in a square (B) or hexagonal (C) arrangement. The density of the rods are the same with the density of the host and the volume fraction occupied by the rods is 0.25. From Fig. 3 a critical value of r_c (r_c^{cr}) can be seen above where the first appearance of a gap occurs. As the ratio r_c increases from this critical value, the gap gets wider approaching a saturation in higher values of r_c . A gap has also been found for values of r_c less than one. In this case though, the critical velocity contrast ($1/r_c^{cr}$) for the first appearance of the gap is higher than that of the previous case, i.e., gap appears with more difficulty [4, 5]. The above tendencies have also been observed for spherical scatterers as well as for the full elastic case (ELW in solids) [5]. Considering the dependence of the critical value r_c^{cr} on the concentration of the scatterers and the lattice structure, it has been found [3-5] that r_c^{cr} has no strong dependence on the lattice structure while it remains nearly constant for a range of filling ratios around an optimum one, which depends on many factors; this optimum filling ratio is as low as 10% for elastic waves in composites such as Au in SiO₂ [6] and as high as 55% for W spheres in epoxy [8].

The widening of the gap as the velocity contrast increases is not unexpected because in the absence of density contrast, the impedance mismatch between the two materials (which gives the strong scattering and consequently the gap) is exclusively due to the velocity contrast.

Although the role of the velocity contrast in the absence of density contrast is rather clear, the same is not true if density contrast is present as well. According to the above discussion, one would expect a material combination of high density combined with high velocity contrast will be the ideal for the appearance of a gap. However, *wider* gaps were found [7, 8] in cases where r_c is far from its values considered as optimum according to the above. In Fig. 4 we show the band structure for an *fcc* periodic composite consisting of Ag spherical scatterers ($\rho = 10.635 \text{ g/cm}^3$, $c_l = 3.789 \text{ km/s}$, $c_t = 1.950 \text{ km/s}$) embedded in epoxy. The volume fraction of the scatterers is 0.35. We can see here an extremely wide gap with midgap frequency $\omega_g a/c_{to} \approx 10$ which appears between 6th and 7th band. Note also, the multitude of very flat bands corresponding to very sharp peaks in the elastic wave density-of-states. The Ag in epoxy case is a case of a wide gap, although the velocity contrast r_c is not that different from one. Some other results on this point are listed in Table 1 where with $max(\Delta\omega/\omega_g)$ we denote the width of the gap over the midgap frequency. These results concern spherical scatterers in *fcc* structures.

TABLE 1.

sphere/matrix	ρ_i/ρ_o	c_{lo}/c_{li}	c_{to}/c_{ti}	$max(\Delta\omega/\omega_g)$
W/Epoxy	15.85	0.49	0.41	0.750
Ni/Epoxy	7.60	0.43	0.36	0.550
Fe/Epoxy	6.66	0.42	0.35	0.500
Cu/Epoxy	7.60	0.54	0.50	0.500
Steel/Epoxy	6.61	0.43	0.36	0.500
Ag/Epoxy	8.77	0.67	0.59	0.500
Pb/Epoxy	9.62	1.18	1.35	0.500
Au/Si	8.36	2.63	4.35	0.055
Pb/Si	4.88	4.17	6.20	0.033

In the last two cases of Table 1 (Au/Si, Pb/Si), the gap appears between the higher acoustic branch and the lower optical [6], i.e., between the third and fourth branch as in all cases with r_c much larger than one which we have examined. The other cases in the table follow the Ag in epoxy system of Fig. 4 (i.e., the gap appears between the 6th and 7th band). What distinguishes the last two cases from the others is that in the last cases the high values of r_c give Lamé coefficients of the matrix higher than those of the scatterers, while the density contrast contributes in the opposite direction.

The above results indicate that in the presence of strong density contrast the velocity contrast, r_c , not only ceases as the dominant parameter for the gap, but it may affect its appearance in the opposite way than in the absence of density contrast. Later we will try to make this point clearer and to give a physical interpretation for the complicated case of the coexistence of density and velocity contrast.

In the following, we will discuss the role for the gap of the *volume fraction*, the *lattice structure*, and the *scatterer shape*.

In Fig. 5 we show the width of the gap over the midgap frequency vs volume fraction of the scatterers for a system consisting of gold (Au : $\rho = 19.49 \text{ g/cm}^3$, $c_l = 3.36 \text{ km/s}$, $c_t = 1.24 \text{ km/s}$) scatterers arranged in an *fcc* structure within a silicon (Si : $\rho = 2.33 \text{ g/cm}^3$, $c_l = 8.94 \text{ km/s}$, $c_t = 5.34 \text{ km/s}$) matrix. The scatterers are either spheres (A) or cubes (B) or cylinders with height over diameter being 0.92 (C) or 0.5 (D).

In Fig. 6 we show the gap over midgap vs volume fraction for Ag spheres in an epoxy matrix composite in *fcc* (solid line), *bcc* (dotted line), and *sc* (dashed line) structure. The dotted-long dashed line corresponds to an *sc* structure in which the Ag spheres have been replaced by Ag cubes.

As can be seen in Fig. 5, spherical scatterers exhibit wider gaps than cylindrical or cubic. In most of the cases of our existing results, the more isotropic scatterer produces the wider gap [6]. There are some exceptions concerning mainly the *sc* structure in cases with r_c less than unity, where the cubic scatterers give a wider gap than the spheres (see Fig. 6). Comparing the results for the *sc* structure with scatterers, either spheres or cubes (see Fig.6), one can see, also, that cubes produce gaps in a wider range of filling ratios than the spheres. This is consistent with the preference of the cermet topology. The transition from the cermet to the network topology for the cubes in the *sc* structure occurs at filling ratio 1, thus, giving the chance for the gap to preserve itself for a wide range of filling ratios.

Considering the role of the lattice structure in the 3D case, *fcc*, *bcc* and diamond lattices seem to give better results than the *sc* (see Fig. 6), while the differences among them, especially in the cases with r_c larger than unity, are not dramatic. In the 2D case, hexagonal lattices have proven the most favorable for the gap (see Fig. 3).

Finally, we will consider the role of the volume fraction of the scatterers. As can be seen in Fig. 6 the optimum for the gap filling ratio for all structures except *sc*, is almost 0.4, while for *sc* it is around 0.3. In Fig.5, the wider gap appears for filling ratios less than 0.1. In all cases which we examined, the optimum for the gap filling ratio was between 0.05 and 0.5 (the EM waves gap is favored for values of filling ratio closer to 0.5 [2]). Usually the higher the number of branches below the midgap frequency, the larger the optimum filling ratio. For the *sc* structure, the wider gap usually appears in lower filling ratios than for the other structures, while the range of filling ratios in which gaps exist is narrower than that of the others. This last remark can be explained also by noting that the transition from the cermet to the network topology for the *sc* structure and spherical scatterers occurs at a lower concentration than for the other structures.

Considering the position of the gap vs filling ratio, it was found [25] that in the range in which a gap already exists, its position is almost independent from this parameter. The same almost independence is followed also by the flat bands of the periodic system (more detailed results on this point will be presented later). This relative independence is an indication that the multiple scattering does not influence appreciably this aspect of the band structure.

4. Single Scattering Study

The attempts to understand the above results and to find a simple way to predict optimum conditions for gap creation were focused on the examination of the single scattering. The relative insensitivity of certain important features of the band structure results on both the volume fraction of the scatterers and the lattice structure, as well as the flatness of certain bands, provide strong evidence for the dominant role of the single scattering in determining the positions of the flat bands and the gap(s). Furthermore, the conceptual and calculational simplicity of the single scattering allows a physical picture to emerge and an understanding to be achieved.

In the single scattering results which are presented in this work we have restricted ourselves to the case of spherical scatterer. Considering a plane wave scattered by a single spherical inclusion embedded in a homogeneous host (matrix), we calculated the total and the partial scattering cross-sections. We compared these cross-sections with certain features of the corresponding band structure results.

The main idea, as mentioned in the introduction, is to check the possible connection between the resonances of the cross-section and the flat bands or other characteristics of the band structure, to examine the possible extension of the LCAO method, in the AC and EL wave case with the resonances to play the role of the eigenstates. More specifically, the idea is to express the periodic field pattern $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ as a linear combination, $\sum_{\ell,a} c_{\ell,a} \mathbf{u}_a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_\ell)$, of the single resonance states $\mathbf{u}_a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_\ell)$, where a refers to the various resonances from a single scatterer

and \mathbf{R}_ℓ are the lattice vectors determining the position of the center of each scatterer in the periodic system. Two important differences from the corresponding electronic method should be stressed : *i*) Resonance states are not localized (i.e., decay too slowly, as $1/r$ as $r \rightarrow \infty$), and this may lead to divergences. *ii*) Besides the resonance states in the present problem, there is another channel of propagation employing at least partially, if not mainly, the host material. Both of these complications arise because in the classical wave case, as opposed to the electronic case, the host medium supports propagating solutions for every value of the frequency. Proper inclusion of the host propagation channel must face the formal problem of orthogonality to the resonance states and may possibly cancel any divergence due to the long range nature of the resonances. In the present work, we shall not deal with the mathematical formulation of the linear combination of resonance modes (LCRM). We restrict ourselves to provide evidence supporting the proposition that an LCRM may work.

To establish a connection between the resonances and the flat bands, one must examine if there are some correspondences between them as well as if they depend in the same way on the parameters of the problem (it should be noted that by the term “flat bands,” we denote peaks in the density-of-states rather than exact flatness).

Below, we discuss the relative dependence of resonances and flat bands on parameters like velocity or density contrast of the two materials, mentioning, also, some of the main characteristics of the cross-section and attempting to answer some of the open questions from the band structure study.

In Fig. 7 we show the single scattering cross-section in a case of “hard” solids (with $c_t/c_l \approx 1/\sqrt{2}$) with the density of the scatterers to be the same as the density of the host and $c_{lo}/c_{li} = 8.66$ (a), (a') and $1/8.66$ (b), (b'). The upper panels (a, b) correspond to longitudinal incident waves while the lower (a', b') to transverse waves.

In the left panels of Fig. 7 one can see very sharp resonances in the cross-section. Each is due to the contribution of a partial spherical wave (mode) denoted by a number next or above the resonance; note that in the transverse incident case the pure longitudinal, $n = 0$, (spherically symmetric) mode does not exist. All the resonances of the longitudinal incident wave case are in the same position as the resonances of the transverse incident case. Both are associated with the same mode as indicated by the numbers. However, in the transverse incident wave case (see 7a'), there are additional resonances not present in the longitudinal case, which usually are very narrow. These narrow peaks correspond to long life times, i.e., low radiation field which means the scattered field is weak as compared with the field inside the sphere [25]. In all of the resonances, the higher amount of the scattered energy is of the form of transverse waves. The above features are common characteristics of the cross-sections in the case of solids with a high c_t/c_l ratio. The first resonance is usually due to the $n = 1$ oscillation, while the contribution of the $n = 0$ mode is negligible (see Fig. 7a). In the right panels of Fig.7 the cross-sections are very low and featureless.

The conclusion from Fig. 7 (comparison of Fig. 7a (7a') with Fig. 7b (7b')) and from other computational data on this point [25] is the role of the velocity contrast, c_{lo}/c_{li} , in the absence of density contrast is to form sharp, *closely placed resonances*. As the ratio c_{lo}/c_{li} decreases, these resonances move to higher frequencies and become lower and more well-separated, while the small background cross-section between them starts to grow. In the $c_{lo}/c_{li} = 1$ limit, the resonances as well as the background disappear (due to the absence of any contrast) and in the opposite direction, $c_{lo} < c_{li}$ (not completely examined), a very low and smooth cross-section is formed which remains almost unaffected after certain values of the contrast.

The existence of strong resonances in the low velocity scatterer case is not surprising because low velocity scatterers in the classical case correspond to deep potential wells in the electronic case. As is well known, deep potential wells in the electronic problem exhibit strong peaks in the scattering cross-section. The lowering of the resonances as the c_{lo}/c_{li} decreases is also expected due to the decreasing of the contrast between the two materials.

In order to examine the role of the velocity contrast in the presence of density contrast, we repeated the above calculations in the presence of a small density contrast. What was observed is that the role of velocity contrast (at least in the most well examined region of $c_{lo}/c_{li} \geq 1$) remains almost the same as what has been noticed above. In the $c_{lo}/c_{li} = 1$ limit, the scattering does not vanish in this case.

In summary, one can say that the *role of the velocity contrast*, c_o/c_i , is to form (by its increase) sharp, closely placed resonances, to move them to lower frequencies and to reduce the background scattering.

For the matrix-spherical inclusion combination shown in Figs. 7a and 7a', the corresponding *fcc* periodic problem has been studied with volume fraction of the spheres 0.144 [5]. A relatively narrow gap has been found with midgap frequency $\omega_g a/c_{lo} \approx 0.36$ (a : sphere radius) which is denoted by a double arrow in Figs. 7a and 7a'. This band structure was found also to exhibit flat bands (corresponding to rather sharp peaks in the density of states) which in Figs. 7a and 7a' are denoted by single arrows. We see the position of the gap is between the first and second resonance of Fig. 7a and between first and third resonance of Fig. 7a'. The width of the gap is much smaller than the frequency distance between these resonances. The first flat band is above the first resonance of Figs. 7a and 7a' and the second below the second resonance of 7a and the third of 7a'. The second resonance of 7a' is not connected with the characteristics of the band structure due to its extremely weak strength. For this reason, we ignore such very sharp resonances in many points of this discussion.

By lowering the density contrast from 8.66 to 5.48, flat bands, the gap, and the resonances moved in such a way as to retain their relative positions. [5, 25].

The existence of the gap between the first and second resonance in this range of filling ratios is something observed in all of the cases in which band structure results have been compared with the corresponding single scattering data. The flat bands in all these cases have been found to appear very close to the resonances, while the flatter the band the better the coincidence which has been observed (due to level repulsion and hybridization, an exact coincidence is not expected).

Extensive study of the position of the gap and the flat bands vs volume fraction [25] showed the first appearance of the gap (in the very low filling ratio limit) occurs very close to the first resonance. As the concentration increases, the gap moves away from this resonance approaching the midresonance position. These results - similar to what has been observed for scalar waves [35] - are consistent with the main idea of LCRM. The appearance of the gap very close to a resonance in the low concentration limit can be attributed to the fact that in these low concentrations the propagation of the wave takes place mainly through the host material and the scatterers only obstruct its propagation. As the concentration increases, the resonances of the neighboring spheres are mixed together and are broadened into bands giving the wave another, preferable in this range, channel of propagation. Thus, the resonances create flat bands and consequently, the gap (if any) moves to the region between them.

We will discuss next the role of the density contrast and its puzzling opposite effect on fluids and solids periodic media. In Fig. 8 we show the total scattering cross-section for longitudinal incident wave and for materials with $c_o/c_i = 4$ and $\rho_i/\rho_o = 10$ (upper panels) and 0.1 (lower panels). The left panels correspond to the "hard" solid case (with $c_t/c_l \approx 1/\sqrt{2}$), while the right panels to the fluid case (with $c_t \approx 0$). What distinguishes the solid from the fluid case, as Fig. 8 shows, is the role of the $n = 0$ mode. In the solid case the $n = 0$ mode has an insignificant contribution to the cross-section, while in the liquid case both the first resonance and the background (cross-section between the resonances) are due to $n = 0$ contribution.

What can be seen also from Fig. 8 is that in the solid case the resonances become significantly lower and narrower as the ratio ρ_i/ρ_o decreases. On the other hand, in the fluid case there is the opposite trend due again to the dominant role of the $n = 0$ mode. As ρ_i/ρ_o decreases, both the resonances and the background become significantly higher (note the change of the vertical

scale). The most dramatic enhancement occurs for the first resonance (this resonance has been studied analytically [25] and in the low ρ_i/ρ_o limit its frequency is given by $\omega_o = (c_i/a)\sqrt{3\rho_i/\rho_o}$).

The dependence of the cross-section on the density ratio is consistent with the dependence of the gap on this ratio. The stronger single scattering corresponds to the wider gap. For the liquid case, the growth of the cross-section as the density ratio ρ_i/ρ_o decreases is due to the enormous increase of the $n = 0$ scattering which dominates the liquid case cross-section and is almost absent in solids (in solids, due to the high c_t , the transverse wave scattering dominates the cross-section). Thus, this enhanced $n = 0$ scattering must be responsible for the appearance of the gap for the liquids in the low ρ_i/ρ_o limit.

Corresponding band structure results for the specific cases of Fig. 8 do not exist. In some other cases of materials in which high density was combined with high velocity contrast, in which both band structure and single scattering results existed, the band structure results gave wide gaps [5]. The position of these gaps was usually between the first and second resonance of the corresponding single scattering cross-section. There were also flat bands very close in position with these resonances [25].

As discussed earlier, the surprising result on this point is that wider than the above gaps were found in cases with high density contrast, but velocity contrast was not much different from one (see Table 1).

In Fig. 9 we show the cross-section for Ag sphere in epoxy matrix (Fig. 9a) and for longitudinal incident wave. The Ag epoxy case (as show in Fig. 4) has an extremely wide gap, although the velocity contrast is not that large. In the second panel of Fig. 9, (b), the Ag sphere has been replaced by a rigid sphere ($\rho \rightarrow \infty$, $\mu \rightarrow \infty$, $\lambda \rightarrow \infty$, $c_l \rightarrow 0$, $c_t \rightarrow 0$), and in the third panel (c) the cross-section calculated by subtracting from the Ag sphere scattering amplitudes the rigid sphere scattering amplitudes are presented. The arrows in Fig.9c and the half arrows with the symbol “G” inside denote the flat bands and the gap, respectively, of the Ag in epoxy *fcc* periodic system with volume fraction of the spheres 0.35 (see Fig. 4).

appearance.

There are some broad resonances in the Ag in epoxy cross-section well separated by a region of non negligible scattering. The scattering in this region is almost exclusively due to the contribution of the rigid sphere (for this analysis see ref. [32-34]) as can be seen in panel (c) where this contribution has been subtracted and the resonances emerge clearly.

This analysis clearly indicates that in the spectral region between the resonances, the wave can hardly penetrate the sphere (note that for a rigid sphere, the field inside and at the surface is zero). Calculations of the total elastic energy vs the distance from the center of the sphere in this spectral region verified this statement [25]. The same calculation showed that at the broad peaks (like those of Fig. 9) the higher amount of the energy is concentrated inside the sphere, although a significant leakage outside exists. The narrower the peak, the smaller the leakage.

Similar analysis, through single scattering of the other material combinations of Table 1 which exhibit extremely wide gaps, showed similar to Ag in epoxy cross-sections (with the broad and well separated resonances and the high background between them; the latter is associated with a rigid sphere) [8, 25].

It was noticed that the contribution of the background in these cases is not unexpected. From both density and velocity, and also from the Lamé coefficients contrast (the Lamé coefficients of the matrix are lower in these cases than those of the scatterer), one can see these composites are closer to the rigid sphere in epoxy composite than any system with very high or very low velocity contrast (c_o/c_i).

The above results strongly suggest that in order to obtain a wide gap in a composite periodic structure, a combination of inclusion-host is required such that the single inclusion cross-section exhibits *strong* and *well separated resonances* with a *considerable background in between*, attributed to either a rigid or maybe soft sphere (on this we will comment later on).

This basic result can be understood by considering two limiting channels of propagation in a composite. The first is mainly through the host material. The second is by hopping from scatterer to scatterer through the overlapping resonance modes (LCRM) (in most cases both channels seem to be operational).

On the basis of this argument, in the spectral region between first and second resonance of Fig. 9a, the wave can use neither the spheres for its propagation (since no resonances are nearby) nor the host (because of the high cross-section). Thus, it will be natural for a gap to open in that region. The fact that the peaks are well-separated (due to the absence of high velocity contrast) permits the appearance of a wide gap (note that the width of the gap is usually considerably less than the distance between the two resonances). On the other side, the considerable width of the resonances indicates strong leakage of the field outside each sphere and consequently a strong overlap and easy propagation through the resonance modes.

According to the above picture, one expects similar results in the cases for which well-separated strong resonances sandwich a high background due to a soft sphere contribution. This occurs because for a soft sphere ($\rho, \mu, \lambda, c_t, c_l \rightarrow 0$) the field inside and at the surface is zero as in a rigid sphere. This situation may arise in the case of low density, low velocity scatterers in a high density, high velocity matrix, although the results of Fig. 8 indicate the resonances in this case may be neither strong nor well separated (for solid composites).

We will close this discussion with few comments concerning the role of the solidity, c_t/c_l . Most of our single scattering results seem to be much more sensitive to the solidity of the matrix than to the solidity of the scatterer. A solid sphere in a solid (liquid) host combination seems to give similar cross-sections with a liquid sphere in the same solid (liquid) host (with the velocity and density contrast between the two materials remaining the same). On the basis of this result, we expect for the characteristics of the band structure a similar insensitivity on the solidity of the scatterers.

The present work was supported by the EU grants ERBCHRX-CT93-0136, -0331, -0332, and MAS2-CT92-0019. Ames Laboratory is operated for the U. S. Department of Energy by Iowa State University under contract No. W-7405-ENG-82.

References

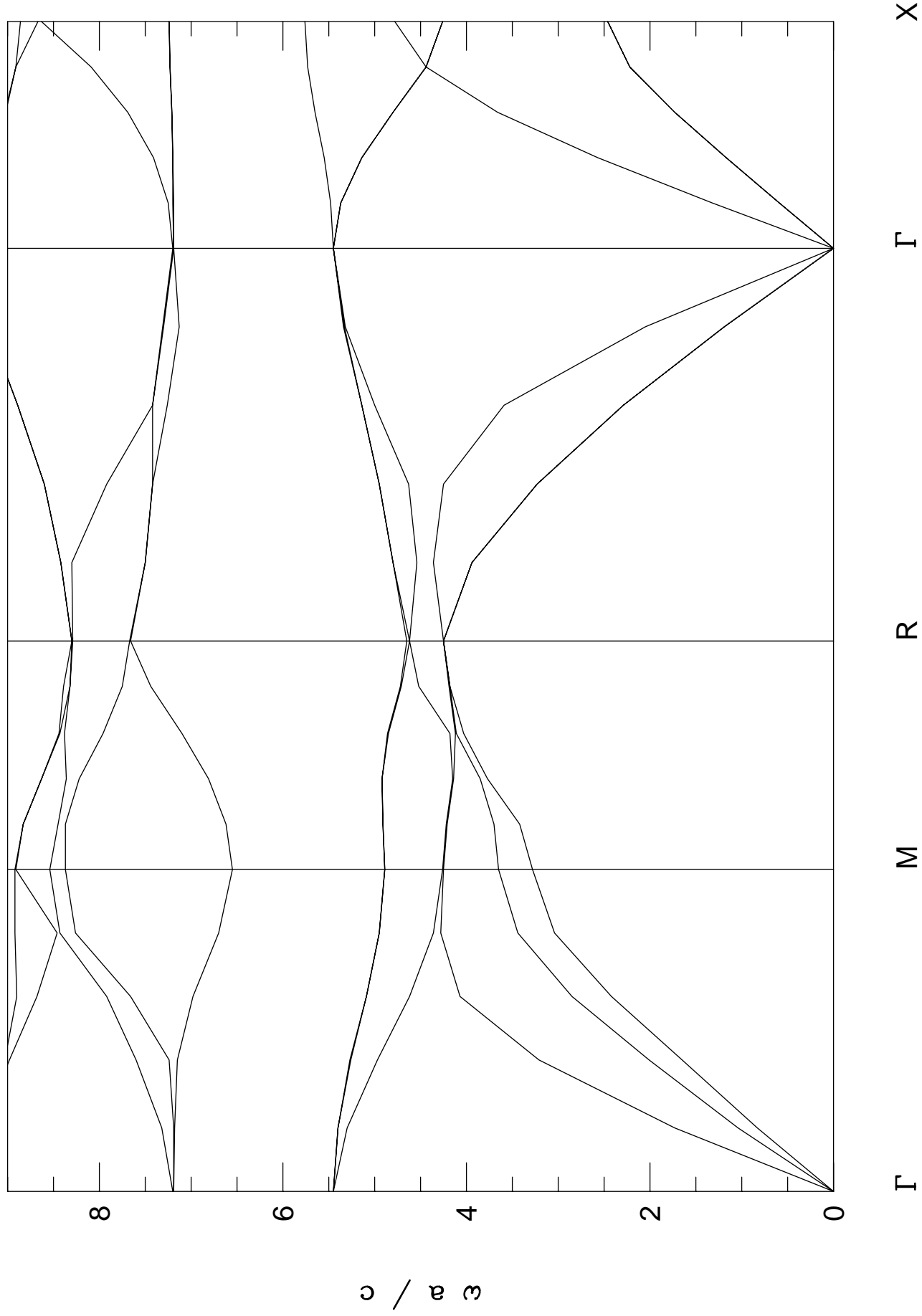
- [1] Sheng, P. (ed.) (1990) *Scattering and Localization of Classical Waves in Random Media*, World Scientific, Singapore.
- [2] Soukoulis, C.M. (ed.) (1993) *Photonic Band Gaps and Localization*, Plenum Press, New York (proceedings of the NATO ARW).
- [3] Sigalas, M.M. and Economou, E.N. (1992) *J. Sound Vibration* **158**, 377.
- [4] Sigalas, M.M. and Economou, E.N. (1993) *Solid State Commun.* **86**, 141.
- [5] Economou, E.N. and Sigalas, M.M. (1993) in Soukoulis, C.M. (ed.), *Photonic Band Gaps and Localization*, Plenum Press, New York, pp. 317-338.
- [6] Economou, E.N. and Sigalas, M.M. (1994) *J. Acoust. Soc. Am.* **95**, 1734.
- [7] Vasseur, J.O., Djafari-Rohani, B., Dobrzynski, L., Kushwaha, M.S., and Halevi, P. (1994) *J. Phys.: Condens. Matter* **6**, 8759.
- [8] Kafesaki, M., Sigalas, M.M. and Economou, E.N. (in press) *Sol. State. Comm.*
- [9] Kinra, V.K. and Ker, E.L. (1983) *Int. J. Solids Structures* **19**, 393.
- [10] Dowling, J.P. (1992) *J. Acoust. Soc. Am.* **91**, 2539.
- [11] Ye, L., Cody, G., Zhou, M., Sheng, P., and Norris, A.N. (1992) *Phys. Rev. Lett.* **69**, 3080.
- [12] Kushwaha, M.S., Halevi, P., Dobrzynski, L., and Djafari-Rouhani, B. (1993) *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2022.
- [13] Kushwaha, M.S. and Halevi, P. (1994) *Appl. Phys. Lett.* **64**, 1085.

- [14] Kushwaha, M.S., Halevi, P., Martinez, G., Dobrzynski, L., and Djafari-Rouhani, B. (1994) *Phys. Rev. B* **49**, 2313.
- [15] Economou, E.N. and Sigalas, M.M. (1993) *Phys. Rev. B* **48**, 13434.
- [16] John, S. and Rangarajan, R. (1988) *Phys. Rev. B* **38**, 10101.
- [17] Economou, E.N. and Zedetsis, A. (1989) *Phys. Rev. B* **40**, 1334.
- [18] Sigalas, M.M., Economou, E.N., and Kafesaki, M. (1994) *Phys. Rev. B* **50**, 3393.
- [19] Satpathy, S., Zhang, Z., and Salehpour, M.R. (1990) *Phys. Rev. Lett.* **64**, 1239.
- [20] Ho, K.M., Chan, C.T., and Soukoulis, C.M. (1990) *Phys. Rev. Lett.* **65**, 3152.
- [21] Leung, K.M. and Liu, Y.F. (1990) *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2646.
- [22] Zhang, Z. and Satpathy, S. (1990) *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2650.
- [23] Joannopoulos, J., Meade, R., Winn, J. (1995) *Photonic Crystals*, Princeton University Press.
- [24] Yablonovitch, E. and Gmitter, T.J. (1989) *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1950.
- [25] Kafesaki, M. and Economou, E.N. (in press) *Phys. Rev. B*.
- [26] Landau, L.D. and Lifshitz, E.M. (1959) *Theory of Elasticity*, Pergamon, London.
- [27] Stratton, J.A. (1941) *Electromagnetic Theory*, McGraw-Hill, New York, pp. 392.
- [28] Ying, C.F. and Truell, R. (1956) *J. Appl. Phys.* **27**, 1086.
- [29] Einspruch, N., Witterhold, E., and Truell, R. (1960) *J. Appl. Phys.* **31**, 806.
- [30] Johnson, G. and Truell, R. (1965) *J. Appl. Phys.* **36**, 3467.
- [31] Gubernatis, J.E., Domany, E., and Krumhansl, J.A. (1977) *J. Appl. Phys.* **48** 2804.
- [32] Brill, D. and Gaunard, G. (1987) *J. Acoust. Soc. Am.* **81**, 1.
- [33] Flax, L., Gaunard, G. and Überall, H. (1981) in Mason, W.P. (ed.), *Physical Acoustics*, Academic, New York, vol. XV, pp. 191-294.
- [34] Gaunard, G. and Überall, H. (1987) *J. Appl. Phys.* **50**, 4642.
- [35] Datta, S., Chan, C.T., Ho, K.M., Soukoulis, C.M., and Economou, E.N. (1993) in Soukoulis, C.M. (ed), *Photonic Band Gaps and Localization*, Plenum, New York, pp. 289-297.

FIGURE CAPTIONS

- Figure 1.* Elastic wave band structure for a *sc* periodic composite consisting of steel spheres in epoxy matrix. The volume fraction of the spheres is 0.268; ω is the frequency, a is the lattice constant and c the transverse wave velocity in the epoxy (c_{to}).
- Figure 2.* Elastic wave band structure for a *sc* periodic composite consisting of steel tetrahedral rods connecting nearest neighbors and embedded in epoxy. The volume fraction of the rods is 0.268; ω is the frequency, a is the lattice constant and c the transverse wave velocity in the epoxy (c_{to}).
- Figure 3.* The width of the gap over the midgap frequency vs the velocity contrast $r_c^2 = c_o^2/c_i^2$ for a 2D periodic composite consisting of liquid circular columns embedded in a liquid in a square (B) or hexagonal (C) arrangement. Volume fraction of the columns = 0.25 and $\rho_i/\rho_o = 1$.
- Figure 4.* Elastic wave band structure for a *fcc* periodic composite consisting of Ag spheres in an epoxy matrix. The volume fraction of the spheres is 0.35; ω , a and c are the frequency, the lattice constant and the transverse wave velocity in the epoxy (c_{to}) respectively.
- Figure 5.* The width of the gap over the midgap frequency vs filling ratio, x , for a *fcc* periodic composite consisting of gold scatterers in a silicon matrix. The scatterers are spheres (A), cubes (B), or cylinders with height over diameter 0.92 (C), or 0.5 (D).
- Figure 6.* The width of the gap over the midgap frequency vs filling ratio for a periodic composite consisting of Ag spheres in epoxy matrix in a *fcc* (solid line), *bcc* (dotted line) and *sc* (dashed line) structure. The dotted-long dashed line corresponds to Ag cubes in epoxy matrix and *sc* structure.
- Figure 7.* Total dimensionless cross-section, $\sigma/\pi a^2$, vs $k_{lo}a$ for longitudinal (upper panels) and transverse (lower panels) incident wave; $c_t/c_l = 1/\sqrt{2}$ for both sphere and matrix, $\rho_i/\rho_o = 1$ and $c_{lo}/c_{li} = c_{to}/c_{ti} = 8.66$ for (a) and (a') and $1/8.66$ for (b), (b'). a is the radius of the sphere and $k_{lo} = \omega/c_{lo}$ the longitudinal wave number in the matrix. The number next or above each resonance denotes the spherical harmonic responsible for its appearance. The arrows indicate the positions of the flat bands and the double arrow the position of the gap in the corresponding *fcc* periodic composite with volume fraction of the spheres 0.144.
- Figure 8.* Total dimensionless cross-section, $\sigma/\pi a^2$, vs $k_{lo}a$ for $c_{lo}/c_{li} = 4$, $\rho_i/\rho_o = 10$ (a), (b) and 0.1 (a'), (b'). The left panels (a, a') correspond to a solid case with $c_t/c_l = 1/\sqrt{2}$ for both sphere and matrix and the right panels (b, b') to a fluid case ($c_t = 0$ for both materials). a : sphere radius; $k_{lo} = \omega/c_{lo}$. The incident wave is longitudinal and the number next or above each resonance denotes the corresponding spherical harmonic.
- Figure 9.* Total dimensionless cross-sections, $\sigma/\pi a^2$, vs $k_{lo}a$ for an Ag sphere in epoxy matrix (a) and a rigid sphere in epoxy matrix (b). The third panel (c) represents the cross-section calculated by subtracting from the Ag sphere scattering amplitude the rigid sphere scattering amplitude. The incident wave is longitudinal, a is the radius of the sphere and $k_{lo} = \omega/c_{lo}$ the longitudinal wave number in the epoxy. The arrows indicate the positions of the flat bands and the half arrows (with the symbol G in between) the position of the gap in the Ag spheres in epoxy *fcc* periodic composite with volume fraction of the spheres 0.35. The number above each resonance indicates the mode responsible for its appearance.

Steel spheres in epoxy, s.c., $f=0.268$



Steel tetr. rods conn. near. neighb. in sc, epoxy matrix, f=0.268

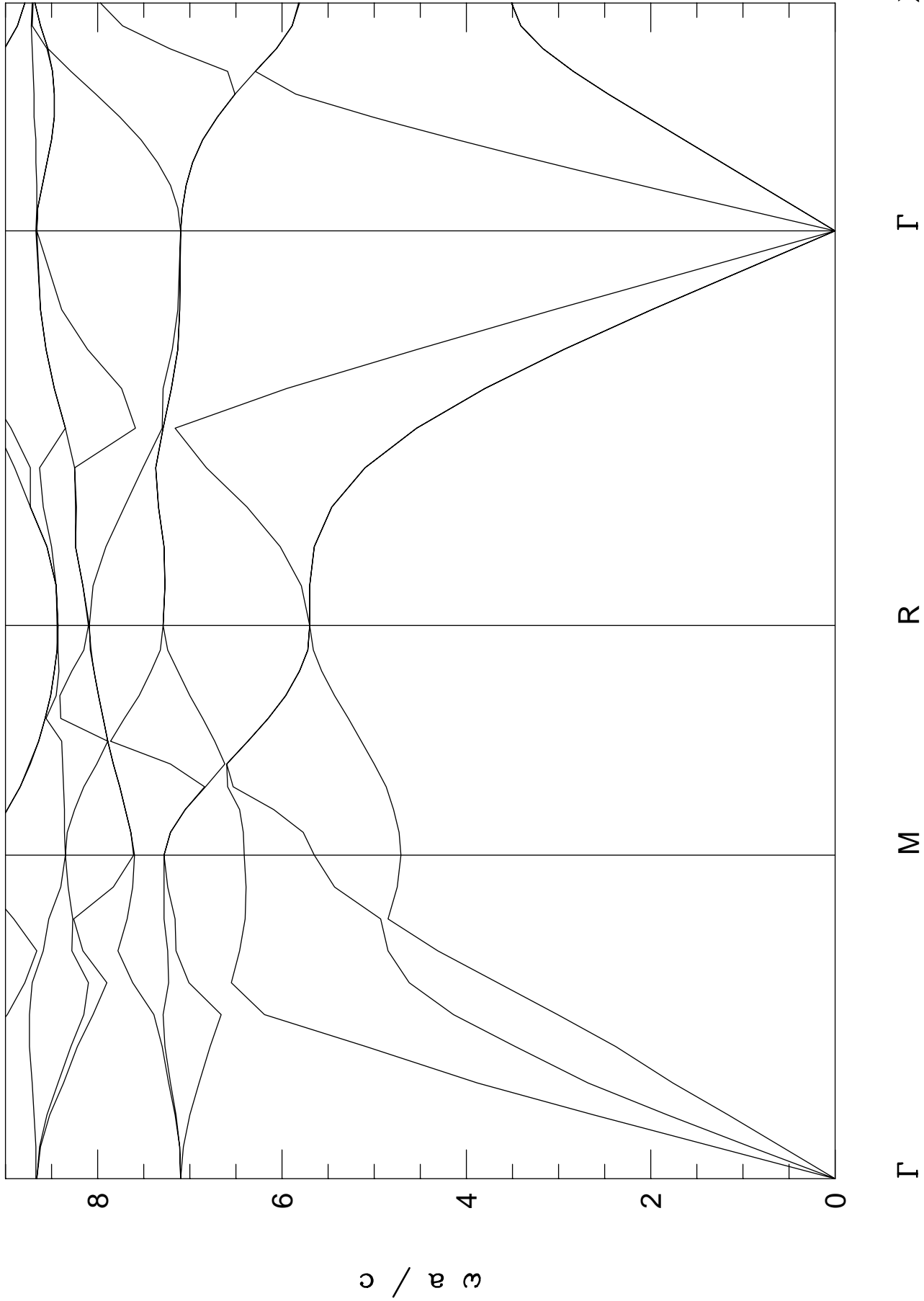
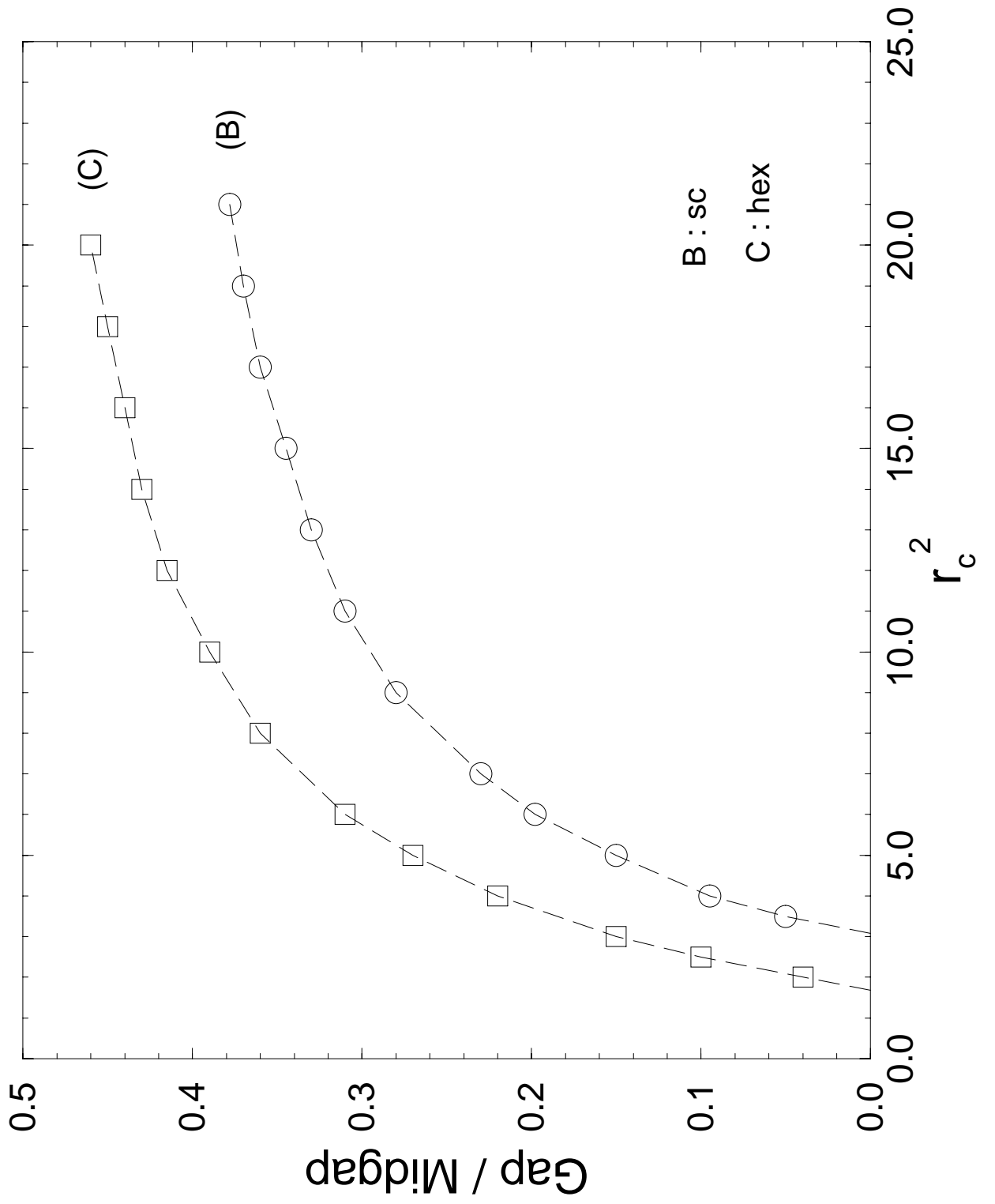


Fig. 3



Ag spheres in epoxy, fcc, $f=0.35$

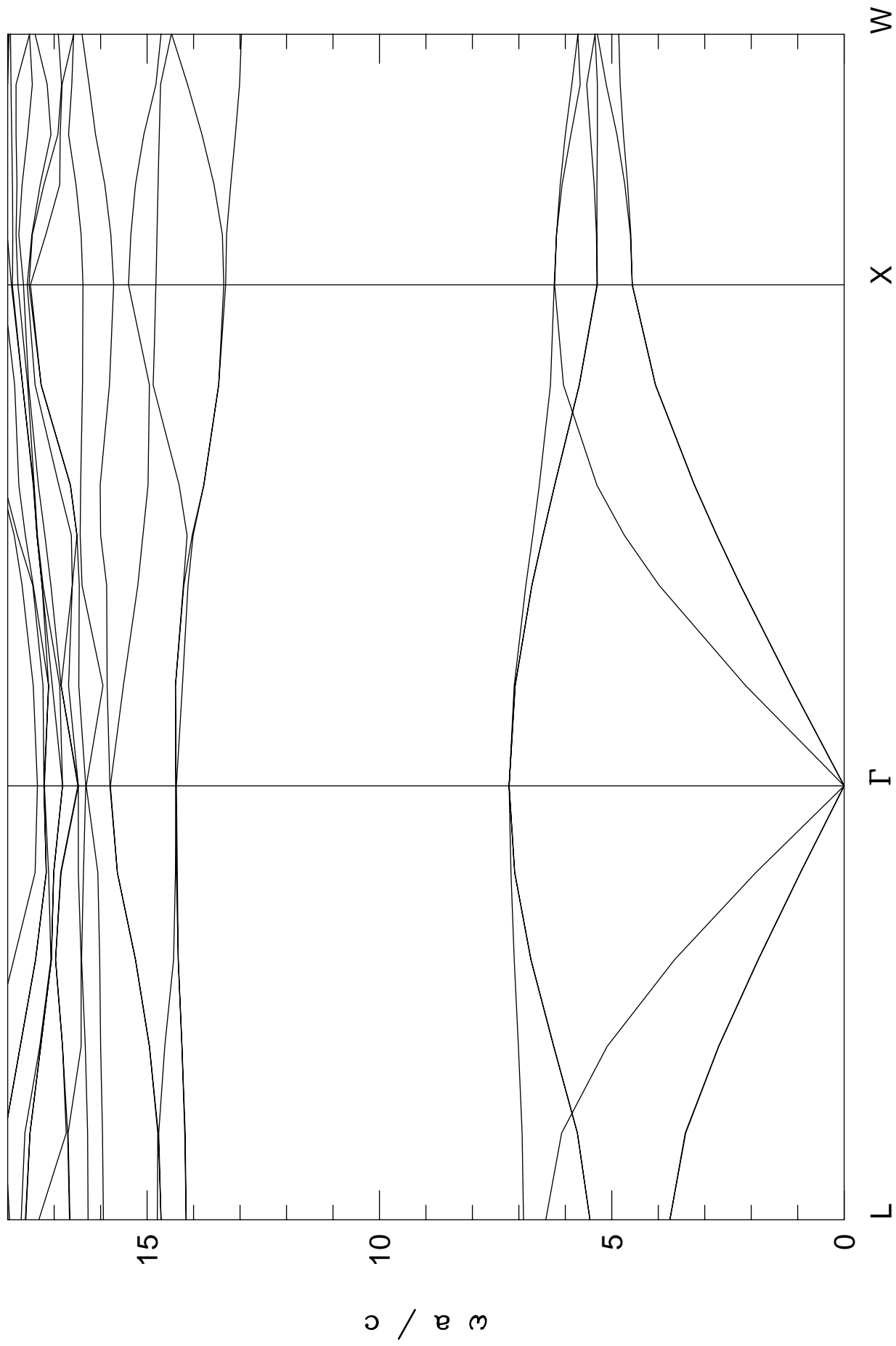


Fig.5 It does not exist in postscript form.

Fig.6

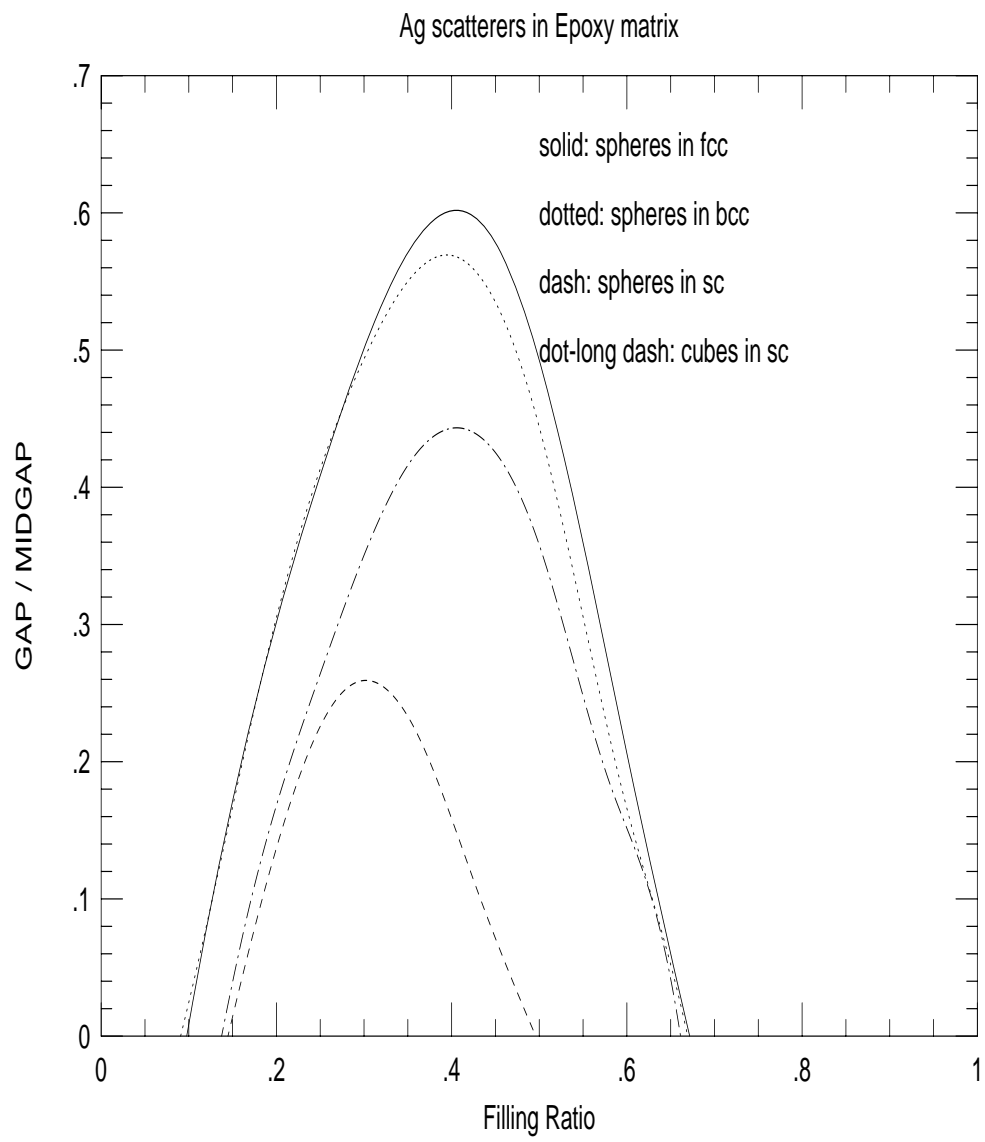


Fig. 7

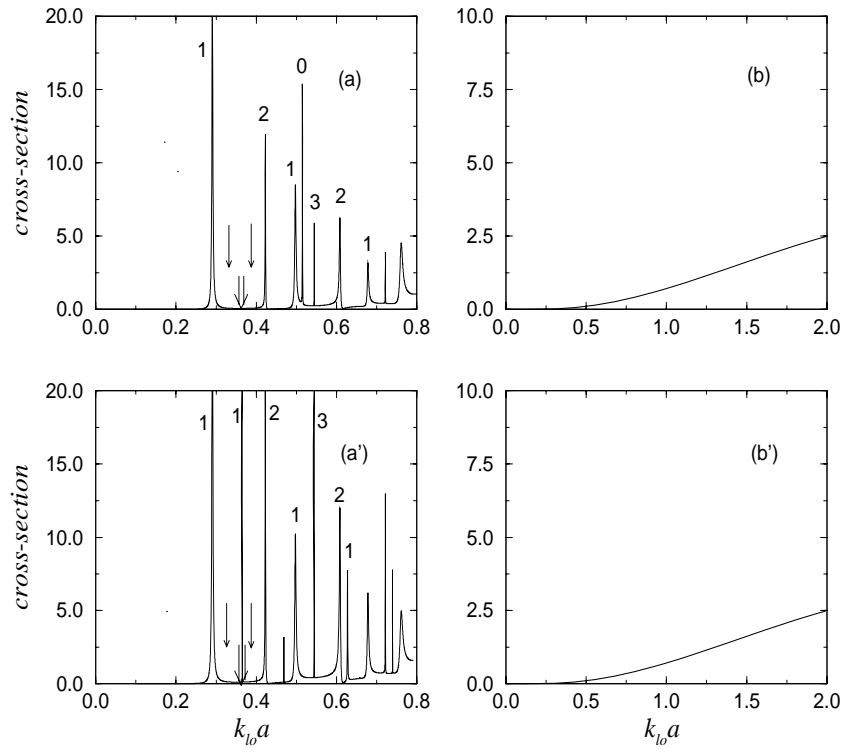


Fig. 8

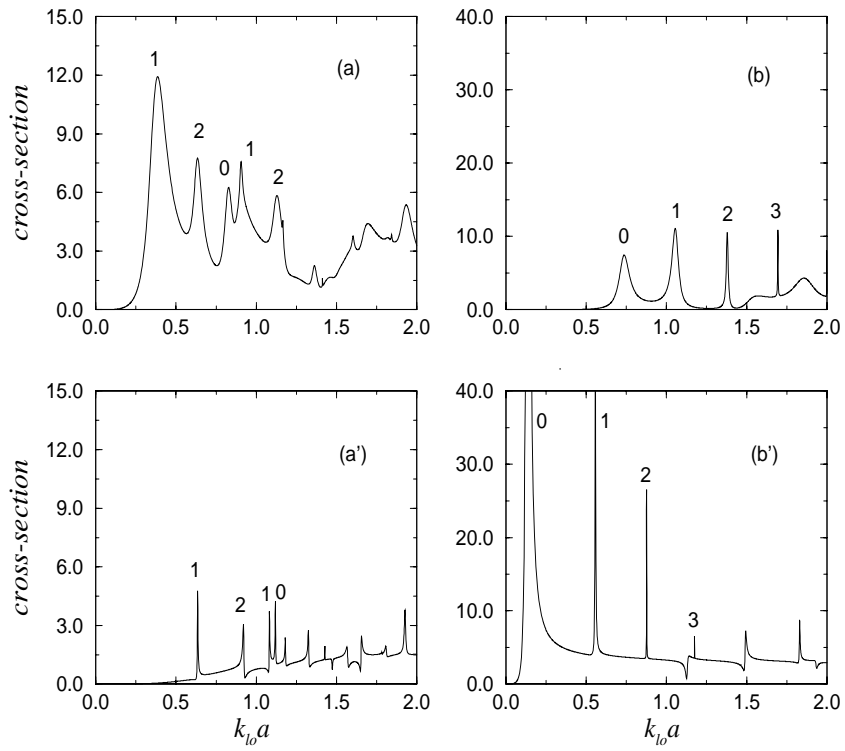
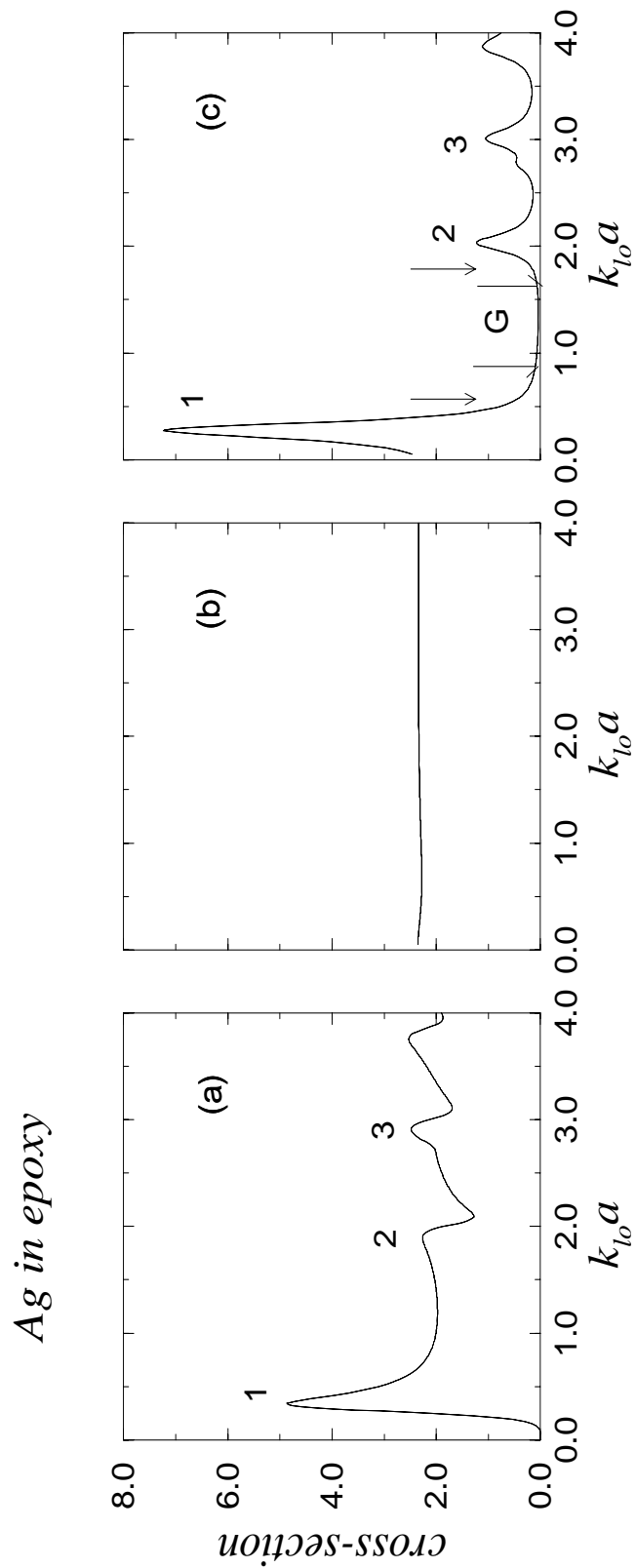


Fig.9



Acoustic Waves in Random Media

M. KAFESAKI, E. N. ECONOMOU

Research Center of Crete, FORTH, P.O. Box 1527, 71110 Heraklion, and Department of Physics, University of Crete.

(received 19 July 1996; accepted in final form 14 November 1996)

PACS. 62.30 – Mechanical and elastic waves.

PACS. 43.20.Mq – Velocity and attenuation of acoustic waves.

PACS. 43.35.Bf – Ultrasonic velocity, dispersion, scattering, diffraction
and attenuation in liquids, liquid crystals, suspensions and emulsions.

Abstract. – Motivated by recent experimental results we test how well various extensions of the well-known coherent potential approximation (CPA) determine the characteristics of the acoustic wave propagation through a random composite consisting of glass spheres in water. In spite of the approximate character of the methods, our results seem to be in reasonable agreement with recent experimental data.

The coherent potential approximation (CPA) method widely used for electrons in disordered solids has been extended in recent years to the problem of classical wave (CW) propagation through random systems [1, 2, 3]. The efforts to extend the CPA to the CW case gave rise to more than one versions of the method depending on the nature of the CW, the structure of the system, and the quantity to be calculated. Various versions of the CPA have been applied to simple scalar waves (SSW) and to electromagnetic waves (EMW) with results in reasonable agreement with the existing experimental data [1, 2, 3].

On the other hand acoustic (AC) and elastic (EL) waves have received less attention. Their study has been restricted mostly to periodic systems [4] or random systems in the low concentration or long wavelength limit [1, 5]. The main reasons for this scarcity of calculations are the theoretical difficulties of the problem combined with the absence of reliable experimental data. The theoretical difficulties stem from *i*) the full vector character of the ELW giving rise to scattering induced mode conversion; *ii*) the more than one parameter which characterize a homogeneous elastic medium (density and velocities) which require a larger number of equations for their calculation. Thus one has to find a set of equations which would produce optimum results without creating serious computational problems.

On the experimental side the difficulty is in the interpretation of velocity measurements in the very interesting and poorly understood regime of resonant multiple scattering. In this regime the study of the EMW and SSW has shown that the energy transport velocity, v_E , *i.e.* the velocity entering the diffusion constant, $D (= v_E l/3)$, is the appropriate velocity characterizing the propagation [6, 7, 8]. The velocity v_E , as a function of frequency, was found

to exhibit pronounced dips near the single scattering resonances at low concentrations while as the concentration increases its frequency dependence becomes smoother [3, 6, 7, 8, 9, 10]. The dips at low concentrations are attributed to the delay of the wave inside the scatterers near the resonances while the smoothness as the concentration increases is due to the fact that the scattering material now provides an additional path for propagation because of the coherent hopping of the wave from scatterer to nearby scatterers.

Recently, Page *et. al.* measured for the first time, to the best of our knowledge, the diffusion coefficient, the mean free paths (determining thus the transport velocity) as well as the phase and group velocity for ACW propagating through a suspension of glass beads of radius a immersed in water *in the strong scattering regime* [11, 12]. They determined velocities far from the velocity of glass although the volume fraction of the glass beads (63%) was near the close-packing. The present work is a brief presentation of calculational results motivated by their data [11, 12], which thus allow us to test various extensions of the CPA in the particular case examined by Page *et. al.*

We consider a random composite consisting of glass spheres (material i (in) of volume fraction $f_s = 63\%$) immersed in water host (material o (out)). We calculate the phase and energy velocity, the scattering mean free path and the localization parameter in the composite by the use of the simple CPA (S-CPA), the coated CPA (C-CPA) [2], and two versions of an energy based CPA (E-CPA1 and E-CPA2, see below) [9].

The basic idea of the S-CPA and C-CPA is the replacement of the random medium by a homogeneous effective medium with a complex propagation vector q_ϵ which is calculated self-consistently [10, 13] by requiring that the scattering arising from the local substitution of the effective medium by the actual medium should vanish on the average. Thus the effective vector q_ϵ is calculated by :

$$p_1 f_1(\mathbf{q}_\epsilon, \mathbf{q}_\epsilon) + p_2 f_2(\mathbf{q}_\epsilon, \mathbf{q}_\epsilon) = 0 \quad (1)$$

where $f_i(\mathbf{q}_\epsilon, \mathbf{q}_\epsilon)$ ($i = 1, 2$) is the forward scattering amplitude for an incident plane wave scattered by a scattering unit of the type i embedded in the effective medium with probability p_i .

Within the S-CPA the scattering unit of the type 1 (2) is regarded as a glass (water) sphere of radius a embedded in the effective medium with probability $p_1 = f_s$ ($p_2 = 1 - f_s$). Within the C-CPA the scattering unit of the type 1 is regarded as a coated sphere (the actual glass sphere coated with a water coating) of external radius r_1 and the scattering unit of the type 2 as a simple water sphere of radius r_2 (this choice reproduces the fact that the two materials are not topologically equivalent). The radii of the two scattering units and the corresponding probabilities throughout the present work are chosen either in the same way as in ref. [2] or by the relations : $p_1 = p_2 = 1/2$, $r_1 = 0.9386a/f_s^{1/3}$, $r_2 = 0.5572a/f_s^{1/3}$ with practically the same results in all cases which have been examined.

From q_ϵ one can calculate immediately the scattering mean free path $l_s = 0.5/Im(q_\epsilon)$, the phase velocity $c = \omega/Re(q_\epsilon)$ and the localization parameter $k_\epsilon l_s$.

The self-consistency condition for the determination of the real effective propagation constant, k_m , within the energy based CPA is that the total energy stored in a scattering unit embedded in the homogeneous medium to be equal with the energy stored in a region of the homogeneous medium of the same volume as this scattering unit [9]. The energies are calculated by considering an incident plane wave. The basic scattering unit is regarded either as a single coated sphere of radius $r_c^3 = a^3/f_s$ and concentration $n_1 = f_s/V_a$, where $V_a = 4\pi a^3/3$ (E-CPA1) or a coated sphere (of radius r_1 and concentration $n_1 = f_s/V_a$) and a simple sphere (of radius r_2 and concentration $n_2 = (1 - n_1 V_1)/V_2$) (E-CPA2). $V_j = 4\pi r_j^3/3$, $j = 1, 2$ and

r_1, r_2 are as in the C-CPA.

The complex effective propagation vector, q_e , within either E-CPA1 or E-CPA2 is determined by :

$$q_e^2 = k_m^2 - \Sigma(\omega) \quad (2)$$

where the self-energy $\Sigma(\omega)$ is obtained by using its low concentration expression [10] :

$$\Sigma(\omega) = -4\pi \sum_i n_i f_i(\mathbf{k}_m, \mathbf{k}_m) \quad (3)$$

In eq.(3), $f_i(\mathbf{k}_m, \mathbf{k}_m)$ is the forward scattering amplitude for an incident plane wave scattered by a scattering unit of the type i embedded in the homogeneous medium k_m .

Within the E-CPA1 or E-CPA2 approach the transport velocity, v_E , is calculated by [6, 7, 8, 3, 10] :

$$v_E = \frac{\omega}{k_m^2} \frac{\sqrt{k_m^2 - \text{Re}(\Sigma)}}{1 + \sum_i n_i \delta_i} \quad (4)$$

where the quantity δ_i is given by [6, 7, 8] :

$$\delta_i = 4\pi \text{Re} \left[\frac{\partial f_i(\mathbf{k}_m, \mathbf{k}_m)}{\partial k_m^2} \right] + \int d\Omega \frac{d\sigma^i}{d\Omega} \frac{\partial \phi_{\mathbf{k}_m \mathbf{k}'_m}^i}{\partial k_m} \quad (5)$$

$\phi_{\mathbf{k}_m \mathbf{k}'_m}^i$ is the phase of $f_i(\mathbf{k}_m, \mathbf{k}'_m)$ and $\frac{d\sigma^i}{d\Omega} = |f_i(\mathbf{k}_m, \mathbf{k}'_m)|^2$.

In contrast to the SS and the EM waves where only one material parameter, namely the velocity, defines the effective medium, for ACW one needs two parameters (*e.g.* velocity and density). Thus one more self-consistency condition besides eq.(1) is needed. For the S-CPA and C-CPA we attempted to put the average scattering amplitude in a direction other than the forward equal to zero as well. In several cases this led us to convergence difficulties and/or unphysical multiple solutions. We employed also an approximate expression for the effective density (instead of a self-consistent one) appropriate for the long wavelength limit [5] as well as the simple average $\bar{\rho} = f_s \rho_i + (1 - f_s) \rho_o$. In the cases where the two self-consistency conditions provide uniquely convergent solutions, the results were very close to those obtained by using eq.(1) and the approximate expression of ref. [5] for the effective density. In the E-CPA the density of the effective medium, ρ_m , was replaced either by the average density or by the long wavelength limit effective density [5] with practically the same results.

Recently, success in predicting and understanding the basic features of the ACW and ELW propagation in periodic systems was achieved by the use of the single scattering analysis [14]. Below, we apply this analysis in order to provide an explanation for of our CPA's results. We present first the total scattering cross section, σ , for a plane ACW scattered by a glass sphere immersed in water (fig.1 - solid line). One can see that the scattering cross section is not very large. We show also the scattering cross section, σ_h , by a rigid (hard) sphere immersed in the water (dashed line), and the cross section, σ_{sb} , calculated by subtracting from the glass sphere scattering amplitude the rigid sphere scattering amplitude (dotted line) [14, 15]. σ_{sb} is clearly lower than either σ or σ_h , especially at the (rather weak) resonances, which means that the wave does not penetrate appreciably within the glass sphere. This was verified directly by calculating the energy density as a function of the distance from the center of the glass sphere.

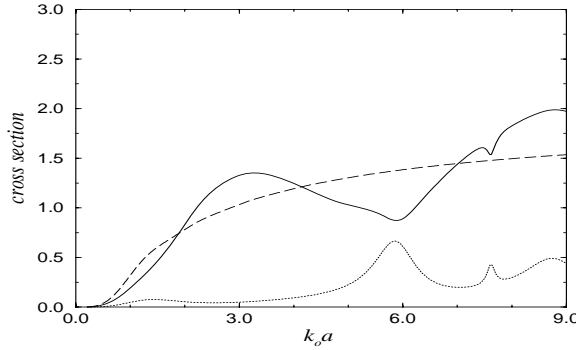


Fig. 1. – Total dimensionless cross section ($\sigma/\pi a^2$) vs $k_0 a = \omega a/c_0$ for a glass sphere (solid line) and for a rigid sphere (dashed line) both of radius a embedded in a water host. The dotted line represents the cross-section calculated by subtracting from the glass sphere scattering amplitude the rigid sphere scattering amplitude; ω is the frequency and c_0 the wave velocity in the water.

As a result we expect the propagation velocity to be close to that of water. Furthermore, its frequency variation is expected to be weak as a result of the rather smooth σ vs ω .

In fig.2a we show our results for v_E according to the E-CPA2 together with the experimental point [11]. The discrepancy is of the order of 10% or less. Note that the values of v_E are very close to c_0 and they do not exhibit any strong variation with frequency. Both of these features are consistent with our expectations based on the previous analysis of the single scattering. Furthermore, the weak dips of v_E at $k_0 a \approx 6$ and 7.7 can possibly be attributed to the delay of wave propagation due to its increased penetration inside the spheres as evidenced by the corresponding peaks in σ_{sb} . We have calculated v_E at lower concentrations as well and we found that the form of v_E vs ω is similar to that of fig.2a reinforcing thus our interpretation.

In fig.2b we present results for the phase velocity, c_{ph} , according to S-CPA, C-CPA and E-CPA2. The agreement with the experimental results, especially for the C-CPA, is very good to excellent with the exception of the frequency region around $k_0 a \approx 2.5$ ($k_0 = \omega/c_0$). We think that this discrepancy (which can be reduced slightly if we average over the fluctuation in the size of the glass spheres) is due to the *increase* of the multiple scattering in this frequency region. This increase is due (i) to the resonance in the single scattering and (ii) to the matching of the wavelength $\lambda_0 = 2\pi/k_0$ with the nearest neighbor separation $d \approx 2a$, at around $k_0 a \approx 2.5$. This matching makes the multiple scattering not only stronger but more coherent as well, making thus more difficult for the CPA to describe the effect.

In fig.3 we show the scattering mean free path as a function of frequency calculated by employing the same approximations for the effective density and the same configurations as in the case of fig.2. The triangles and the circles indicate Page's *et. al.* experimental result [12] while the dotted-dashed line shows the mean free path calculated by using the low concentration expression $l_s = 1/n\sigma$ (n is the number density of the scatterers in the actual material and σ the single glass sphere cross section; it is remarkable that this simple formula produces results not so different from the experimental ones in this very high concentration system).

We can see that the mean free path which is calculated within the C-CPA approximates better the experimental data than the S-CPA or the E-CPA2 mean free path. The discrepancy between C-CPA and experimental result at $k_0 a \approx 2.5$, as well as, the frequency shift of the theoretical curves compared to the experimental data can be attributed again to the increase of the strength and the coherent nature of the multiple scattering discussed in connection with

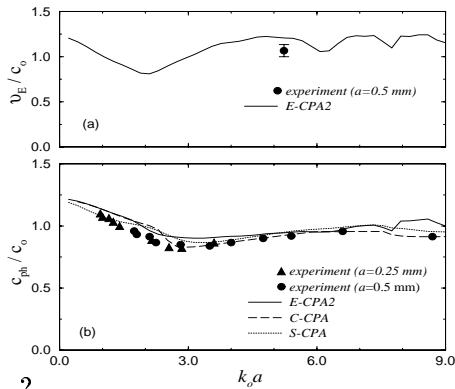


Fig. 2.

Fig. 2. – Energy transport velocity v_E (a), and phase velocity c_{ph} (b), versus the dimensionless frequency $k_o a = \omega a/c_o$ for glass spheres of volume fraction 63% randomly placed in water. The triangles and the circles indicate Page's *et. al.* experimental result for spheres of radius 0.25 mm and 0.5 mm respectively. The solid, dashed, and dotted lines indicate the velocities calculated within the E-CPA2, the C-CPA and the S-CPA respectively. c_o is the wave velocity in the water and a the sphere radius.

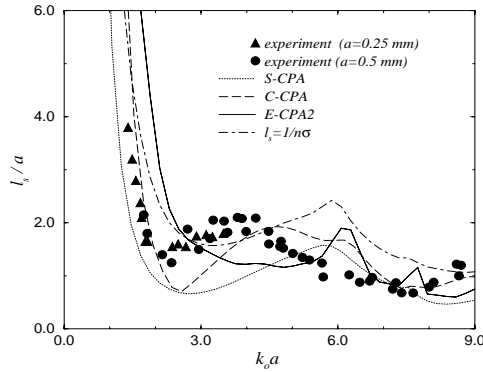


Fig. 3.

Fig. 3. – Scattering mean free path, l_s , (in units of the sphere radius a), versus the dimensionless frequency $k_o a = \omega a/c_o$ for glass spheres of volume fraction 63% randomly placed in water. The mean free path is calculated within the S-CPA (dotted line), the C-CPA (dashed line), the E-CPA2 (solid line) and by the low concentration expression $l_s = 1/n\sigma$ (dotted-dashed line). The triangles and the circles indicate Page's *et. al.* experimental result for spheres of radius 0.25 mm and 0.5 mm respectively. c_o is the wave velocity in the water.

fig.2. The discrepancies were reduced somehow when we took an average over slightly different sphere radii.

Concerning the differences between the E-CPA2 result and the others, one has to notice that the self-energy $\Sigma(\omega)$ (from which the E-CPA2 mean free path was obtained (see eq.(2))) was calculated by eq.(3) which is clearly a low concentration expression. In contrast, the S-CPA and C-CPA do not employ any explicit low concentration approximation for obtaining either velocity or mean free path. The above mentioned discrepancy becomes more pronounced if one employs E-CPA1. We point out that all the methods tend, as expected, to the same low concentration limit for the mean free path, $l_s = 1/n\sigma$.

Finally, we mention that the calculated values of the localization parameter $k_\epsilon l_s$ are not close to the localization threshold $(k_\epsilon l_s)_c = 0.84$ [16] (or $(k_\epsilon l_s)_c = 0.91$ [10]) (the minimum calculated value of $k_\epsilon l_s$ as the frequency varies is 1.98, *i.e.* far from the critical region). This implies the validity of the diffusion approximation in describing the energy propagation even at these high concentration regimes.

Useful discussions and communications with K. Busch are gratefully acknowledged. This work was supported by EU grants MAS2-CT92-0019, CHRX-CT93-138, INTAS94-3754 and GSRT-Hellas grant 91EΔ556.

REFERENCES

- [1] SHENG P. editor, *Scattering and Localization of Classical Waves in Random Media*, (World Scientific, Singapore) 1990; SOUKOULIS C. M editor, *Photonic Band Gaps and Localization*, (Plenum, New York) 1993.
- [2] SOUKOULIS C. M., DATTA S., ECONOMOU E. N., *Phys. Rev. B*, **49** (1994) 3800.
- [3] BUSCH K., SOUKOULIS C. M. and ECONOMOU E. N., *Phys. Rev. B*, **50** (1994) 93; *Phys. Rev. B*, **52** (1995) 10834.
- [4] ECONOMOU E. N. and SIGALAS M. M., in *Photonic Band Gaps and Localization* ed. by C. M. SOUKOULIS (Plenum Press, New York) 1993, p.317-338; *J. Sound Vibr.*, **158** (1992) 377.
- [5] SEN P. N. and JOHNSON D. L., *Phys. Rev. B*, **27** (1983) 3133.
- [6] ALBADA van M. P., van TIGGELEN B. A., LAGENDIJK AD, TIP A., *Phys. Rev. Lett.*, **66** (1991) 3132; *Phys. Rev. B*, **45** (1992) 12233.
- [7] van TIGGELEN B. A., LAGENDIJK AD, *Eur. Phys. Lett.*, **23** (1993) 311.
- [8] LAGENDIJK AD, van TIGGELEN B. A., *Physics Reports*, **270** (1996) 145.
- [9] BUSCH K. and SOUKOULIS C. M., *Phys. Rev. Lett.*, **75** (1995) 3442.
- [10] SHENG P., *Introduction to Wave Scattering, Localization and Mesoscopic Phenomena* (Academic Press, San Diego) 1995.
- [11] PAGE J. H., SCHRIEMER H. P., BAILEY A. E. and WEITZ D. A., *Phys. Rev. E*, **52** (1995) 3106.
- [12] PAGE J. H., SHENG P., SCHRIEMER H. P., JONES I., JING X. and WEITZ D. A., *Science*, **271** (1996) 634.
- [13] ECONOMOU E. N., *Green's Functions in Quantum Physics* (Springer-Verlag, Berlin) 1983.
- [14] KAFESAKI M. and ECONOMOU E. N., *Phys. Rev. B*, **52** (1995) 13317; see also the proceedings of the NATO ARW *Photonic Band Gap Materials*, ed. by SOUKOULIS C. M (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht) 1996, pp.143-164.
- [15] FLAX L., GAUNAURD G. and ÜBERALL H., in *Physical Acoustics*, edited by MASON W. P. (Academic, New York) 1981, vol XV.
- [16] ECONOMOU E. N., SOUKOULIS C. M., COHEN M. H. and ZDETSIS A., *Phys. Rev. B*, **31** (1985) 6172.

Spectral gaps for Electromagnetic and Scalar waves: Possible explanation for certain differences.

M. M. Sigalas and E. N. Economou*

Ames Laboratory and Department of Physics and Astronomy Iowa State University, Ames IA 50011

and

Maria Kafesaki

Research Center of Crete-FORTH, P.O. Box 1527, 711 10 Heraklion Crete, Greece
and Department of Physics, University of Crete, 714 09, Crete, Greece

Abstract

We study two different *scalar* wave equations: One of them exhibits the main gross features of the simple scalar and elastic wave propagation in periodic composite media. The other behaves similarly to the electromagnetic waves in preferring the network topology and the higher volume fractions for developing spectral gaps.

PACS no : 0.3.40.Kf , 62.30.+d

There is recently an increased interest in the propagation of classical waves (electromagnetic (EM), acoustic (AC), elastic (EL)) in composite materials both periodic and random. In the periodic case, attention has been focused on the composites which exhibit spectral gaps. In the random case, the interest stems from the question of Anderson localization; indeed if random non-absorbing composite materials are fabricated exhibiting spectral regions of localized eigenstates, several unsolved problems regarding Anderson localization can be studied experimentally under well controlled conditions and without the inevitable complications present in the electronic case (temperature effects, electron-electron and electron-phonon interactions, etc.).

In most cases the systems under considerations were binary composites (in many instances air was one of the two components). The low propagation velocity component will be called the scattering component (or material), while the high propagation velocity component will be referred to as the host material. The composite is characterized by several parameters. Among them the most important are:

(i) the propagation velocity ratio v_s/v_h (for EL waves there are three velocity ratios, since each material in general sustains both longitudinal and transverse waves with different propagation velocities; the subscripts s and h refer to the scattering and host component respectively);

(ii) the volume fraction, $f_s = V_s/V$, occupied by the scattering material, where V is the total volume of the composite; and

(iii) the topology which for our purposes can be classified either as a cermet topology (where the scattering material consists of isolated inclusions each of which is completely surrounded by the host material) or as network topology (where the scattering material is connected and forms a multiple self-intersecting continuous network running throughout the whole composite).

The theoretical and experimental studies especially in the periodic case show that the EM waves behave differently than the simple AC or EL waves. The two main differences are the following:

(i) for simple scalar (acoustic) and elastic waves it seems that the cermet topology is more favorable for spectral gap creation than the network topology¹⁻³; the opposite is true for EM waves^{1,3-5};

(ii) for simple scalar (acoustic) or elastic waves the optimum value of f_s for gap creation seems to be in the range 0.09 to 0.20, while for EM waves the range of optimum values of f_s is much broader, sometimes extending to

about 0.50 (the optimum value of f_s depends also on the lattice structure).

One is tempted to connect these differences with the vector character and in particular with the *transverse* vector character of the electromagnetic waves¹. As a result of these the scattering from a single sphere lacks an isotropic component, which, however, is present in both the scalar and the elastic waves. An isotropic scattering will be reinforced by a closed packed structure, which is consistent with a cermet topology, while a strongly anisotropic scattering may possibly favor the network topology¹. Another argument offered as a possible explanation for the increased ability of the network topology to create spectral gaps for EM waves is its supposedly unlimited polarizability. However, the polarizability is limited by the wavelength of the radiation which is comparable or smaller than the dimensions of the primitive cell (in the spectral gap regions); as a result of this the polarizability argument does not seem to be convincing¹.

In the present paper we analyze two different scalar wave equations. One of the two exhibits the main characteristics of the EM waves in spite of the fact that it is a scalar equation. This provides strong evidence that the explanation of the different behavior of the EM case is not mainly connected with its transverse vector character but with the specific mathematical structure of the corresponding differential equation:

$$\nabla \times (\epsilon^{-1} \nabla \times \vec{H}) = \frac{\omega^2}{c^2} \vec{H} \quad (1)$$

The first scalar equation we have studied is the ordinary simple scalar equation:

$$\nabla^2 \phi = -\frac{\omega^2}{v^2} \phi \quad (2)$$

where $v = v_s$ or v_h in the scattering and the host component respectively and ω is the (angular) frequency of the wave.

The methods of numerical calculation are described in ref. 1.

In Fig.1a we show the threshold ratio $r_c^2 = (v_h^2/v_s^2)_c$ (above which a spectral gap opens up) versus the volume fraction f_s (of the scattering, i.e. the low velocity component) for the cermet topology, i.e. for isolated spheres of the scattering component forming face centered (fcc) or body centered (bcc) or simple cubic (sc) periodic lattices. We see that the optimum values of f_s is around 0.20 and that the minimum value of r_c^2 is 3, 3.3, and 5.4 for fcc, bcc, and sc respectively. As shown in Fig. 1b the network topology (where

the host (high v) material is now the spheres (overlapping or not, depending on f_s) and the scattering material occupies the space among the spheres forming a continuous self-intersecting network) is clearly less favorable than the cermet topology of Fig.1a. Indeed, the minimum value of r_c^2 is now 4.7 and 6.2 for fcc and sc respectively.

In Figs 2a,b we show corresponding results but for the following wave equation:

$$\nabla(v^2\nabla\phi) = -\omega^2\phi \quad (3)$$

where again $v = v_s, v_h$ for the scattering and host material respectively.

Apart from the vector character Eq. (3) is similar to the EM equation (Eq. (1)).

We see in Fig. 2a that for Eq. (3), the cermet topology is not so favorable for spectral gap appearance since the minimum required value of r_c^2 is about 9 as opposed to 3 for the cermet case of Eq. (2). On the other hand, the network topology for Eq. (3) produces significantly lower values of r_c^2 than the cermet topology: 4.5, 8 (see Fig.2b) for fcc and bcc as opposed to 9.5 and 9 for the corresponding values of the cermet topology (Fig.2a). Furthermore, the optimum value for f_s is considerably higher as compared with those of Eq. (2) but they are comparable with those of EM waves^{1,4,5} (Eq. (1)); in particular for fcc the optimum f_s are 0.3 and 0.6 for the cermet and network topologies respectively; for bcc structure the optimum f_s are 0.4 and 0.7 for the cermet and network topologies respectively. Thus Eq. (3) behaves similarly to the EM equation regarding both its preference for the network topology as well as higher optimum values of f_s (close to 0.50). The sc structure seems to prefer the cermet topology since there are not gaps for the network topology, but the r_c^2 in that case are extremely high (greater than 13.5) so it does not seem to change the previous conclusion. Also, notice that for sc structure the cases with f_s greater than 0.52 belong to network topology and the optimum f_s (=0.40) is close to that value.

It must be pointed out, that these differences between Eqs (2) and (3) persist in two dimensional systems as well⁶.

A clue for the origin of these differences between Eqs (2), (3) may come by considering the scattering from a single sphere embedded in a uniform background with propagation velocity v_o .

In Fig. 3 we show the total scattering cross section for Eq.(2) (which corresponds to the boundary conditions on the surface of the sphere, both ϕ

and $\partial\phi/\partial r$ continuous). In Fig. 3a the propagation velocity inside the sphere $v_i = v_o/5$. This is the single scatterer version of the cermet topology. We see that the cross section is large on the average and in addition exhibits very large resonances. In contrast, for the case where $v_i = 5v_o$ (Fig. 3b) the cross section is small without any resonances.

The conclusion from this comparison is that much stronger scattering is produced for Eq. (2) if the high velocity material surrounds the low velocity material than vice versa. Hence, Eq. (2) would produce spectral gaps (in the periodic case) or localization (in the random case) easier in the case of the cermet topology than in the case of the network topology.

Fig. 4 shows that Eq. (3) (which corresponds to the boundary conditions, both ϕ and $v^2\partial\phi/\partial r$ continuous) behaves differently: In spite of the complicated resonance structure for the case where $v_i = v_o/5$ (Fig. 4a) the cross section on the average is about the same as in the case where $v_i = 5v_o$ (Fig. 4b) indicating that there is not any strong dependence on the velocity of the surrounding material. Thus one is led to expect that there is not any advantage to the cermet topology and that a topology consisting of two interpenetrating complicated networks (one for each of the two components) of about equal volume fraction may be closer to the optimum structure for which Eq. (3) develops spectral gaps. Fig. 2 as well as the data of ref. 1 tend to support this suggestion.

This work was partly supported by CEC grant SCC CT90-0020, NATO travel grand RG 769/87. Ames Laboratory is operated by the U.S. Department of Energy by Iowa State University under Contract No. W-7405-Eng-82.

* Permanent address: Research Center of Crete and Department of Physics, University of Crete.

1. E.N. Economou and M.M. Sigalas, to appear in Phys. Rev. B .
2. S. Datta, C.T. Chan, K.M. Ho, and C.M. Soukoulis, Phys. Rev. B46, 10650 (1992).
3. E.N. Economou and M.M. Sigalas, in *Localization and Propagation of Classical Waves in Random and Periodic Structures*, ed. by C.M. Soukoulis (Plenum Press, New York, 1993).

4. K.M. Ho, C.T. Chan, and C.M. Soukoulis, *Phys. Rev. Lett.* 65, 3152 (1990).
5. C.T. Chan, K.M. Ho, and C.M. Soukoulis, *Europhys. Lett.* 16, 563 (1991).
6. In ref. 1 the case of EM wave propagation in a composite system consisting of parallel cylinders embedded in a host material was studied. If the propagation vector is normal to the cylinders (which correspond to a 2D case), the wave equation for the E-polarized wave is described by Eq. (2) and the wave equation for the H-polarized wave is described by Eq. (3).

1 FIGURE CAPTIONS

FIG. 1. The threshold velocity ratio $r_c^2 = (v_h^2/v_s^2)_c$ for the appearance of a spectral gap vs the volume fraction f_s of the low velocity (v_s) component for Eq.(2). (a) The low velocity component consists of isolated spheres forming face centered (fcc), body centered (bcc) and simple cubic (sc) lattices. (b) The high velocity component consists of isolated spheres forming fcc or sc lattices.

FIG. 2. The threshold velocity ratio r_c^2 vs the volume fraction f_s of the low velocity (v_s) component for Eq.(3). (a) The low velocity component consists of isolated spheres forming fcc, bcc, and sc lattices. (b) The high velocity component consists of isolated spheres forming fcc or bcc lattices.

FIG. 3. The total scattering cross-section vs ka for a single sphere of radius a and propagation velocity $v_i = v_o/5$ (a) or $5v_o$ where v_o , k are the propagation velocity and the wave number of the surrounding material. The wave is described by Eq.(2).

FIG. 4. The same as Fig. 3, but the wave is described by Eq. (3).