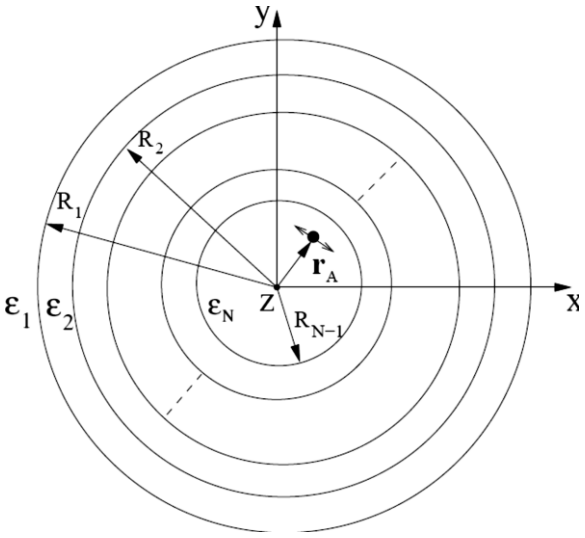
PHƯƠNG PHÁP SỐ CHO HỆ CẤU TRÚC HÌNH TRỤ PHÂN LỚP

TRẦN MINH HIẾN
Khoa Công nghệ Cơ khí, Trường Đại học Công nghiệp Thành phố Hồ Chí Minh
tranminhhien@iuh.edu.vn
DOIs: https://doi.org/10.46242/jstiuh.v69i03.5131

Tóm tắt: Nhằm mục đích khảo sát các quá trình vật lý của hệ nguyên tử, phân tử khi đặt trong môi trường, cụ thể, ở đây, chúng tôi khảo sát hệ trong môi trường có cấu trúc hình trụ phân lớp. Biểu thức hàm Green của hệ trụ phức tạp hơn so với các hệ cấu trúc cầu hay phẳng. Việc tính toán hàm Green của hệ cũng khó khăn hơn do hàm Green vừa chứa một tổng vô hạn các mode *n* vừa chứa một tích phân theo toàn bộ số sóng *k*. Quá trình tính toán số đòi hỏi phải xử lý các over- và under-flow của các hàm bessel, hankel biến số phức, khi biến số lớn và/hoặc chỉ số *n* lớn. Ngoài ra trong biểu thức của hàm Green chứa các hệ số C_i. Các hệ số C_i này có thể tiến về giới hạn 0/0 hoặc ∞/∞, làm cho việc tính số không thể thực hiện được. Trong bài báo này, chúng tôi đề xuất một kỹ thuật biến đổi các ma trận T_i trong hệ thức truy toán nhằm khử các dạng 0/0 hoặc ∞/∞ của các hệ số C_i. Việc biến đổi này làm thay đổi giá trị của mỗi ma trận T_i nhưng kết quả cuối cùng không làm thay đổi giá trị hàm Green của hệ. Các biến đổi này đúng cho hệ trụ *N* lớp bất kỳ.
Từ khóa. Hệ trụ phân lớp, Cộng hưởng quang học.

1. GIỚI THIỆU

Từ năm 1946 Purcell đã cho thấy rằng, với môi trường bao quanh phù hợp, các quá trình vật lý của hệ vi mô như nguyên tử, phân tử sẽ bị ảnh hưởng đáng kể [1], chẳng hạn như mức năng lượng của nguyên tử bị dịch chuyển, tốc độ rã trạng thái cũng thay đổi. Tương tự như tốc độ rã trạng thái, tốc độ truyền năng lượng cộng hưởng cũng bị ảnh hưởng bởi môi trường [2]. Các quá trình vật lý nêu trên đã được khảo sát cả về lý thuyết lẫn thực nghiệm trong các hệ cấu trúc phẳng [2], hệ cầu [3,4,5], sợi nano [6], khối trụ 2 lớp [7] … cả cho vật chất điện môi, kim loại và cho cả graphene [8]. Hệ trụ là một mô hình rất gần với thực tế, hiện nay với sự phát triển của công nghệ, người ta có thể chế tạo các dây nano cacbon, sợi nano thủy tinh …. Hiện nay, dây nano thường xuyên được sử dụng trong các tinh thể hai chiều. Vì thế, các quá trình vật lý của hệ vi mô như phân tử nguyên tử được đặt trong cấu trúc hình học dạng trụ nhiều lớp thu hút sự quan tâm quan tâm đặc biệt trong cộng đồng khoa học.



Hình 1: Mô hình khối trụ nhiều lớp.

Trên thực tế, để tạo được một buồng cộng hưởng có khả năng giam nhốt tốt, người ta cần đến hệ cấu trúc nhiều lớp. Vấn đề khó khăn hiện nay là làm thế nào để có thể tính số được hàm Green của hệ trụ nhiều lớp. Các cộng hưởng quang học trong hệ này có thể dẫn đến hiện tượng over- và under-flow làm cho việc tính

© 2024 Trường Đại học Công nghiệp Thành phố Hồ Chí Minh

toán hàm Green của hệ trở nên bất khả thi. Đó cũng chính là lý do hiện nay các nhóm nghiên cứu trên thế giới chỉ dừng việc khảo sát hệ ở ba lớp. Gần đây chúng tôi đã phát triển một kỹ thuật cho phép tính được hàm Green của hệ trụ N lớp bất kỳ. Với sự giúp sức của kỹ thuật này, chúng tôi cũng đã thực hiện các tính toán và công bố kết quả khảo sát tốc độ truyền năng lượng cộng hưởng giữa hai nguyên tử khi đặt trong hệ trụ điện môi nhiều lớp [9].

2. CÁC PHƯƠNG TRÌNH CƠ BẢN

Hàm Green cho hệ trụ trải dài tới vô hạn và có số lớp bất kỳ đã được rút ra một cách tổng quát [10]. Ở đây chúng tôi sẽ viết hàm Green ở dạng tường minh để chuẩn bị cho các bước biến đổi nhằm chuẩn bị cho việc tính toán số tiếp theo. Giả sử điểm nguồn được đặt ở lớp s $(s=1,2,...,N)$ và điểm trường được đặt ở lớp f $(f=1,2,...,N)$, hàm Green cho khối trụ nhiều lớp thỏa những điều kiện biên sau đây

$$\hat{\mathbf{r}}\times G^{fs}=\hat{\mathbf{r}}\times G^{(f+1)s}, \tag{1}$$

$$\frac{1}{\mu_f}\hat{\mathbf{r}}\times\nabla\times G^{fs}=\frac{1}{\mu_{f+1}}\hat{\mathbf{r}}\times G^{(f+1)s}, \tag{2}$$

Để tìm được dạng của hàm Green G^{fs} chúng ta sử dụng phương pháp tổ hợp các sóng. Hàm Green được tách thành hai phần gồm hàm Green không biên G_{0e} và hàm Green tán xạ G_{es}^{fs}.

$$G^{fs}(\mathbf{r},\mathbf{r}')=G_{0e}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\delta_f^s+G_{es}^{fs}(\mathbf{r},\mathbf{r}'). \tag{3}$$

Hàm Green không biên G_{0e} có dạng

$$G_{0e}(\mathbf{r},\mathbf{r}')=-\frac{\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}{k_s^2}+\frac{i}{8\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}dh\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2-\delta_n^0)}{\eta_s^2}$$
$$\times\begin{cases}\mathbf{M}_{\substack{e\\o}n\eta_s}^{(1)}(h)\mathbf{M}'_{\substack{e\\o}n\eta_s}(-h)+\mathbf{N}_{\substack{e\\o}n\eta_s}^{(1)}(h)\mathbf{N}'_{\substack{e\\o}n\eta_s}(-h) & r>r'\\ \mathbf{M}_{\substack{e\\o}n\eta_s}(h)\mathbf{M}'^{(1)}_{\substack{e\\o}n\eta_s}(-h)+\mathbf{N}_{\substack{e\\o}n\eta_s}(h)\mathbf{N}'^{(1)}_{\substack{e\\o}n\eta_s}(-h) & r<r'.\end{cases} \tag{4}$$

Thành phần mô tả tán xạ do sự có mặt của hệ trụ có dạng

$$G_{es}^{fs}(\mathbf{r},\mathbf{r}')=\frac{i}{8\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}dh\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2-\delta_n^0)}{\eta_s^2}$$
$$\Big\{(1-\delta_f^N)\mathbf{M}_{\substack{e\\o}n\eta_f}^{(1)}(h)\Big[(1-\delta_s^1)C_{1H}^{fs}\mathbf{M}'_{\substack{e\\o}n\eta_s}(-h)+(1-\delta_s^N)C'^{fs}_{1H}\mathbf{M}'^{(1)}_{\substack{e\\o}n\eta_s}(-h)\Big]$$
$$+(1-\delta_f^N)\mathbf{N}_{\substack{e\\o}n\eta_f}^{(1)}(h)\Big[(1-\delta_s^1)C_{1V}^{fs}\mathbf{N}'_{\substack{e\\o}n\eta_s}(-h)+(1-\delta_s^N)C'^{fs}_{1V}\mathbf{N}'^{(1)}_{\substack{e\\o}n\eta_s}(-h)\Big]$$
$$+(1-\delta_f^N)\mathbf{N}_{\substack{o\\e}n\eta_f}^{(1)}(h)\Big[(1-\delta_s^1)C_{2H}^{fs}\mathbf{M}'_{\substack{e\\o}n\eta_s}(-h)+(1-\delta_s^N)C'^{fs}_{2H}\mathbf{M}'^{(1)}_{\substack{e\\o}n\eta_s}(-h)\Big]$$
$$+(1-\delta_f^N)\mathbf{M}_{\substack{o\\e}n\eta_f}^{(1)}(h)\Big[(1-\delta_s^1)C_{2V}^{fs}\mathbf{N}'_{\substack{e\\o}n\eta_s}(-h)+(1-\delta_s^N)C'^{fs}_{2V}\mathbf{N}'^{(1)}_{\substack{e\\o}n\eta_s}(-h)\Big]$$
$$+(1-\delta_f^1)\mathbf{M}_{\substack{e\\o}n\eta_f}(h)\Big[(1-\delta_s^1)C_{3H}^{fs}\mathbf{M}'_{\substack{e\\o}n\eta_s}(-h)+(1-\delta_s^N)C'^{fs}_{3H}\mathbf{M}'^{(1)}_{\substack{e\\o}n\eta_s}(-h)\Big]$$
$$+(1-\delta_f^1)\mathbf{N}_{\substack{e\\o}n\eta_f}(h)\Big[(1-\delta_s^1)C_{3V}^{fs}\mathbf{N}'_{\substack{e\\o}n\eta_s}(-h)+(1-\delta_s^N)C'^{fs}_{3V}\mathbf{N}'^{(1)}_{\substack{e\\o}n\eta_s}(-h)\Big]$$

$$+(1-\delta_f^1)\mathbf{N}_{\substack{o\\e}n\eta_f}(h)\left[(1-\delta_s^1)C_{4H}^{fs}\mathbf{M}'_{\substack{e\\o}n\eta_s}(-h)+(1-\delta_s^N)C'^{fs}_{4H}\mathbf{M}'^{(1)}_{\substack{e\\o}n\eta_s}(-h)\right]$$
$$+(1-\delta_f^1)\mathbf{M}_{\substack{o\\e}n\eta_f}(h)\left[(1-\delta_s^1)C_{4V}^{fs}\mathbf{N}'_{\substack{e\\o}n\eta_s}(-h)+(1-\delta_s^N)C'^{fs}_{4V}\mathbf{N}'^{(1)}_{\substack{e\\o}n\eta_s}(-h)\right]\Bigg\}, \quad (5)$$

trong đó s và f là thứ tự của các lớp chứa nguồn và trường. Chỉ số trên N trong δ_s^N là số lớp của khối trụ. Các hệ số $C_{1H}^{fs}, C_{1V}^{fs}...$ được xác định từ các điều kiện biên (1) và (2) và được viết dưới dạng nghiệm của các phương trình hồi quy [10]. Trong biểu thức của hàm Green ở công thức (5), $\mathbf{M}_{\substack{e\\o}n\eta_f}$ và $\mathbf{N}_{\substack{e\\o}n\eta_f}$ là các hàm cơ sở của sóng trụ cho bởi [11]

$$\mathbf{M}^{(1)}_{\substack{e\\o}n\eta_f}(h)=\nabla\times\left[Z_n^{(1)}(\eta_j r_A)^{\cos}_{\sin}(n\phi)e^{ihz}\hat{\mathbf{z}}\right]$$
$$=\left[\mp\frac{nZ_n^{(1)}(\eta_j r_A)}{r}{}^{\sin}_{\cos}(n\phi)\hat{\mathbf{r}}-\frac{\partial Z_n^{(1)}(\eta_j r_A)}{\partial r}{}^{\cos}_{\sin}(n\phi)\hat{\boldsymbol{\phi}}\right]e^{ihz}, \quad (6)$$

$$\mathbf{N}^{(1)}_{\substack{e\\o}n\eta_f}(h)=\frac{1}{\sqrt{h^2+n_f^2}}\nabla\times\left[Z_n^{(1)}(\eta_j r_A)^{\cos}_{\sin}(n\phi)e^{ihz}\hat{\mathbf{z}}\right]$$
$$=\frac{1}{\sqrt{h^2+n_f^2}}\left[\frac{\partial Z_n^{(1)}(\eta_j r_A)}{\partial r}{}^{\cos}_{\sin}(n\phi)\hat{\mathbf{r}}\mp\frac{ihn}{r}Z_n^{(1)}(\eta_j r_A)^{\sin}_{\cos}(n\phi)\boldsymbol{\phi}+\eta_f^2 Z_n^{(1)}(\eta_j r_A)^{\cos}_{\sin}(n\phi)\hat{\mathbf{z}}\right]e^{ihz}. \quad (7)$$

Trong các công thức (6) và (7), khi nguyên tử ở bên ngoài $Z_n^{(1)}(\eta_j r_A)$ là hàm Hankel loại một, khi nguyên tử ở bên trong $Z_n^{(1)}(\eta_j r_A)$ là hàm Bessel loại một. Trị riêng η_f và hằng số truyền k_f ở lớp f có dạng

$$h^2=k_f^2-\eta_f^2,$$
$$k_f^2=\omega^2\mu_f\varepsilon_f, \quad (8)$$

trong đó μ_f và ε_f là độ từ thẩm và hằng số điện môi ở lớp thứ f.

Để tính toán số, ta cần biết dạng tường minh của các hệ số phản xạ C trong (5). Chúng là nghiệm của các phương trình hồi quy, với các phân cực TE và TM được kí hiệu bởi H và V,

$$\boldsymbol{F}^{(H,V)}_{(f+1)f}\left[\boldsymbol{C}^{(H,V)}_{(f+1)s}+\delta^s_{f+1}\boldsymbol{A}_1\right]=\boldsymbol{F}^{(H,V)}_{ff}\left[\boldsymbol{C}^{(H,V)}_{fs}+\delta^s_f\boldsymbol{A}_2\right], \quad (9)$$

ở đây các ma trận cho hệ số C là

$$\boldsymbol{C}^{H,V}_{fs}=\begin{bmatrix}1-\delta_f^N & 1-\delta_s^1 & C^{fs}_{1\,H,V} & 1-\delta_f^N & 1-\delta_s^N & C'^{fs}_{1\,H,V}\\ 1-\delta_f^N & 1-\delta_s^1 & C^{fs}_{2\,H,V} & 1-\delta_f^N & 1-\delta_s^N & C'^{fs}_{2\,H,V}\\ 1-\delta_f^1 & 1-\delta_s^1 & C^{fs}_{3\,H,V} & 1-\delta_f^1 & 1-\delta_s^N & C'^{fs}_{3\,H,V}\\ 1-\delta_f^1 & 1-\delta_s^1 & C^{fs}_{4\,H,V} & 1-\delta_f^1 & 1-\delta_s^N & C'^{fs}_{4\,H,V}\end{bmatrix}; \quad (10)$$

các ma trận

$$\boldsymbol{A}_1=\begin{bmatrix}1&0\\0&0\\0&0\\0&0\end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{A}_2=\begin{bmatrix}0&0\\0&0\\0&1\\0&0\end{bmatrix}; \quad (11)$$

và các ma trận $\boldsymbol{F}$ cho bởi

$$\boldsymbol{F}_{jm}^{H}=\begin{bmatrix} \dfrac{\partial\left[H_n^{(1)}\left(\eta_j a_m\right)\right]}{\partial a_m} & \mp\dfrac{\zeta_j H_n^{(1)}\left(\eta_j a_m\right)}{a_m} & \dfrac{\partial\left[J_n\left(\eta_j a_m\right)\right]}{\partial a_m} & \mp\dfrac{\zeta_j J_n\left(\eta_j a_m\right)}{a_m} \\ 0 & \rho_j H_n^{(1)}\left(\eta_j a_m\right) & 0 & \rho_j J_n\left(\eta_j a_m\right) \\ \pm\dfrac{\zeta_j\tau_j H_n^{(1)}\left(\eta_j a_m\right)}{a_m} & \dfrac{\tau_j\partial\left[H_n^{(1)}\left(\eta_j a_m\right)\right]}{\partial a_m} & \pm\dfrac{\zeta_j\tau_j J_n\left(\eta_j a_m\right)}{a_m} & \dfrac{\tau_j\partial\left[J_n\left(\eta_j a_m\right)\right]}{\partial a_m} \\ \tau_j\rho_j H_n^{(1)}\left(\eta_j a_m\right) & 0 & \tau_j\rho_j J_n\left(\eta_j a_m\right) & 0 \end{bmatrix}, \tag{12a}$$

$$\boldsymbol{F}_{jm}^{V}=\begin{bmatrix} \pm\dfrac{\zeta_j H_n^{(1)}\left(\eta_j a_m\right)}{a_m} & \dfrac{\partial\left[H_n^{(1)}\left(\eta_j a_m\right)\right]}{\partial a_m} & \pm\dfrac{\zeta_j J_n\left(\eta_j a_m\right)}{a_m} & \dfrac{\partial\left[J_n\left(\eta_j a_m\right)\right]}{\partial a_m} \\ \rho_j H_n^{(1)}\left(\eta_j a_m\right) & 0 & \rho_j J_n\left(\eta_j a_m\right) & 0 \\ \dfrac{\tau_j\partial\left[H_n^{(1)}\left(\eta_j a_m\right)\right]}{\partial a_m} & \mp\dfrac{\zeta_j\tau_j H_n^{(1)}\left(\eta_j a_m\right)}{a_m} & \dfrac{\tau_j\partial\left[J_n\left(\eta_j a_m\right)\right]}{\partial a_m} & \mp\dfrac{\zeta_j\tau_j J_n\left(\eta_j a_m\right)}{a_m} \\ 0 & \tau_j\rho_j H_n^{(1)}\left(\eta_j a_m\right) & 0 & \tau_j\rho_j J_n\left(\eta_j a_m\right) \end{bmatrix}, \tag{12b}$$

với $j=1,2,...,N$ và $m=1,2,...,N-1$ là chỉ số của các lớp và a_m là bán kính của khối trụ tương ứng với lớp đó và

$$\tau_j=\sqrt{\frac{\varepsilon_j}{\mu_j}}, \qquad \zeta_j=\frac{ihn}{k_j}, \qquad \rho_j=\frac{\left(\eta_j\right)^2}{k_j}. \tag{13}$$

Trong (12a) và (12b) dấu phía trên dành cho hàm chẵn và dấu phía dưới dành cho hàm lẻ. Các phương trình (5) cho hàm Green, và (10) cho các hệ số phản xạ là các phương trình tổng quát cho hệ trụ có số lớp bất kỳ.

3. CÁC BIẾN ĐỔI TƯƠNG ĐƯƠNG CHO HỆ THỨC TRUY HỒI

Từ phương trình (7) của L. W. Li [10], chúng ta có thể viết lại hệ thức truy hồi ở dạng

$$\begin{aligned} \boldsymbol{C}_{(g+1)s}^{(H,V)} &= \mathrm{T}_{g}^{(H,V)}\left[\boldsymbol{C}_{gs}^{(H,V)}+\delta_g^s\boldsymbol{A}_2\right]-\delta_{g+1}^s\boldsymbol{A}_1, \\ \boldsymbol{C}_{gs}^{(H,V)} &= \mathrm{T}_{g-1}^{(H,V)}\left[\boldsymbol{C}_{(g-1)s}^{(H,V)}+\delta_{(g-1)}^s\boldsymbol{A}_2\right]-\delta_g^s\boldsymbol{A}_1, \\ \boldsymbol{C}_{(g-1)s}^{(H,V)} &= \mathrm{T}_{g-2}^{(H,V)}\left[\boldsymbol{C}_{(g-2)s}^{(H,V)}+\delta_{(g-2)}^s\boldsymbol{A}_2\right]-\delta_{g-1}^s\boldsymbol{A}_1. \end{aligned} \tag{14}$$

Với hệ trụ *N* lớp ta có

$$\boldsymbol{C}_{Ns}^{(H,V)}=\mathrm{T}_{N-1}\left[\boldsymbol{C}_{(N-1)s}^{(H,V)}+\delta_{(N-1)}^s A_2\right]-\delta_N^s A_1, \tag{15}$$

$$\Im^{(k)}=[T_{ij}^{(k)(H,V)}]_{4\times4}=\mathrm{T}_{N-1}^{(H,V)}\mathrm{T}_{N-2}^{(H,V)}...\mathrm{T}_{k+1}^{(H,V)}\mathrm{T}_{k}^{(H,V)}. \tag{16}$$

Với *s=1* và *f=N* (nguồn ở lớp thứ nhất và trường ở lớp thứ *N*), chúng ta có phương trình sau

$$\begin{bmatrix} \left(1-\delta_N^N\right)\left(1-\delta_1^1\right)C_{1(H,V)}^{N1} & \left(1-\delta_N^N\right)\left(1-\delta_1^N\right)C_{1(H,V)}^{\prime N1} \\ \left(1-\delta_N^N\right)\left(1-\delta_1^1\right)C_{2(H,V)}^{N1} & \left(1-\delta_N^N\right)\left(1-\delta_1^N\right)C_{2(H,V)}^{\prime N1} \\ \left(1-\delta_N^1\right)\left(1-\delta_1^1\right)C_{3(H,V)}^{N1} & \left(1-\delta_N^1\right)\left(1-\delta_1^N\right)C_{3(H,V)}^{\prime N1} \\ \left(1-\delta_N^1\right)\left(1-\delta_1^1\right)C_{4(H,V)}^{N1} & \left(1-\delta_N^1\right)\left(1-\delta_1^N\right)C_{4(H,V)}^{\prime N1} \end{bmatrix}$$

$$=\left[\mathfrak{I}^{(1)}\right]\left\{\begin{bmatrix} \left(1-\delta_1^N\right)\left(1-\delta_1^1\right)C_{1(H,V)}^{11} & \left(1-\delta_1^N\right)\left(1-\delta_1^N\right)C_{1(H,V)}^{\prime 11} \\ \left(1-\delta_N^N\right)\left(1-\delta_1^1\right)C_{2(H,V)}^{11} & \left(1-\delta_1^N\right)\left(1-\delta_1^N\right)C_{2(H,V)}^{\prime 11} \\ \left(1-\delta_1^1\right)\left(1-\delta_1^1\right)C_{3(H,V)}^{11} & \left(1-\delta_1^1\right)\left(1-\delta_1^N\right)C_{3(H,V)}^{\prime 11} \\ \left(1-\delta_1^1\right)\left(1-\delta_1^1\right)C_{4(H,V)}^{11} & \left(1-\delta_1^1\right)\left(1-\delta_1^N\right)C_{4(H,V)}^{\prime 11} \end{bmatrix}+\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}\right\}, \tag{17}$$

$$\Leftrightarrow\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & C_{3(H,V)}^{\prime N1} \\ 0 & C_{4(H,V)}^{\prime N1} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} T_{11}^{(H,V)} & T_{12}^{(H,V)} & T_{13}^{(H,V)} & T_{14}^{(H,V)} \\ T_{21}^{(H,V)} & T_{22}^{(H,V)} & T_{23}^{(H,V)} & T_{24}^{(H,V)} \\ T_{31}^{(H,V)} & T_{32}^{(H,V)} & T_{33}^{(H,V)} & T_{34}^{(H,V)} \\ T_{41}^{(H,V)} & T_{42}^{(H,V)} & T_{43}^{(H,V)} & T_{44}^{(H,V)} \end{bmatrix}\left\{\begin{bmatrix} 0 & C_1^{\prime 11} \\ 0 & C_2^{\prime 22} \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}+\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}\right\}$$

Từ đó ta thu được các hệ số

$$\begin{aligned} C_{1(H,V)}^{\prime 11} &= \frac{T_{12}^{(H,V)}T_{23}^{(H,V)}-T_{13}^{(H,V)}T_{22}^{(H,V)}}{T_{11}^{(H,V)}T_{22}^{(H,V)}-T_{12}^{(H,V)}T_{21}^{(H,V)}}, \\ C_{2(H,V)}^{\prime 11} &= \frac{T_{13}^{(H,V)}T_{21}^{(H,V)}-T_{11}^{(H,V)}T_{23}^{(H,V)}}{T_{11}^{(H,V)}T_{22}^{(H,V)}-T_{12}^{(H,V)}T_{21}^{(H,V)}}, \\ C_{3(H,V)}^{\prime N1} &= T_{31}^{(H,V)}C_{1(H,V)}^{\prime 11}+T_{32}^{(H,V)}C_{2(H,V)}^{\prime 11}+T_{33}^{(H,V)}, \\ C_{4(H,V)}^{\prime N1} &= T_{41}^{(H,V)}C_{1(H,V)}^{\prime 11}+T_{42}^{(H,V)}C_{2(H,V)}^{\prime 11}+T_{43}^{(H,V)}. \end{aligned} \tag{18}$$

Ta có thể thấy rằng, để tính được hàm Green của hệ cần phải tính được các hệ số $C_{(H,V)}$ cho bởi (18). Tuy nhiên, chúng ta thấy rằng, các hệ số này được biểu diễn thông qua các phần tử của ma trận truy hồi $\mathfrak{I}^{(k)}=[T_{ij}^{(k)(H,V)}]_{4x4}=T_{N-1}^{(H,V)}T_{N-2}^{(H,V)}...T_{k+1}^{(H,V)}T_k^{(H,V)}$, các phần tử của ma trận $\mathfrak{I}^{(k)}$ lại biến thiên rất lớn khiến cho các hệ số $C_{(H,V)}$ có thể tiến về giới hạn 0/0 hoặc hữu hạn/0 hoặc ∞/∞, làm cho việc tính toán số trở nên bất khả thi. Khi số lớp của hệ đủ lớn, hoặc khi nguyên tử càng gần bề mặt khối trụ, việc thực hiện tính số càng trở nên khó khăn hơn. Ở đây, chúng tôi đề xuất một kỹ thuật biến đổi các ma trận thành phần T_i trong hệ thức truy toán (15), việc làm này sẽ làm cho từng ma trận T_i không còn có giá trị như ban đầu nữa, tuy nhiên, việc biến đổi đó giúp chúng ta có thể tính được giá trị của các hệ số $C_{(H,V)}$ mà không làm sai khác đi nghiệm của bài toán. Nói cách khác, kỹ thuật biến đổi này không làm thay đổi biểu thức giải tích chính xác của hàm Green của hệ.

Đối với hệ trụ N lớp chúng ta có

$$\mathrm{T}^{(H,V)}=\prod_{m=1}^{N-1}\frac{1}{\bar{\Theta}_m}\mathrm{T}_{N-1}^{(H,V)}\mathrm{T}_{N-2}^{(H,V)}....\mathrm{T}_1^{(H,V)}\ . \tag{19}$$

Với $\bar{\Theta}_m=\bar{z}_{jm}\bar{\eta}_j^2\left(H'_{jm}J_{jm}-H_{jm}J'_{jm}\right)$ và $J_{jm}\equiv J_n\left(z_{jm}\right), H_{jm}\equiv H_n^{(1)}\left(z_{jm}\right)$ lần lượt là các hàm Bessel và hàm Hankel loại một, với $\bar{z}_{jm}=2\pi\omega\bar{\eta}_j\bar{a}_m,\ j=m+1.$

$$A_m = \overline{\eta}_m \overline{\eta}_j \overline{z}_{jm},$$

$$B_m = \overline{\eta}_m^2 \frac{\mu_j}{\mu_m} \overline{z}_{jm},$$

$$C_m = \frac{in\overline{h}}{\sqrt{\varepsilon_m \mu_m}} \left(\overline{\eta}_j^2 - \overline{\eta}_m^2 \right),$$

Gọi

$$D_m = \frac{in\overline{h}}{\mu_m} \sqrt{\frac{\mu_j}{\varepsilon_j}} \left(\overline{\eta}_j^2 - \overline{\eta}_m^2 \right), \tag{20}$$

$$E_m = A_m \sqrt{\frac{\varepsilon_m \mu_j}{\varepsilon_j \mu_m}},$$

$$F_m = \overline{\eta}_m^2 \sqrt{\frac{\varepsilon_j \mu_j}{\varepsilon_m \mu_m}} \overline{z}_{jm}.$$

Khi đó ta có thể viết lại biểu thức của $\mathrm{T}_m^{(H,V)}$ như sau

$$\mathrm{T}_m^{(H,V)} = \frac{1}{\overline{\Theta}_m} \begin{bmatrix} \mathrm{T}_m^{\square} & \mathrm{T}_m^{\bigcirc} \\ \mathrm{T}_m^{\Delta} & \mathrm{T}_m^{\nabla} \end{bmatrix},$$

$$\mathrm{T}_m^{\square} = \begin{bmatrix} A_m J_{jm} H'_{mm} - B_m H_{mm} J'_{jm} & -C_m J_{jm} H_{mm} \\ D_m J_{jm} H_{mm} & E_m J_{jm} H'_{mm} - F_m H_{mm} J'_{jm} \end{bmatrix},$$

$$\mathrm{T}_m^{\bigcirc} = \begin{bmatrix} A_m J_{jm} J'_{mm} - B_m J_{mm} J'_{jm} & -C_m J_{jm} J_{mm} \\ D_m J_{jm} J_{mm} & E_m J_{jm} J'_{mm} - F_m J_{mm} J'_{jm} \end{bmatrix},$$

$$\mathrm{T}_m^{\Delta} = \begin{bmatrix} B_m H_{mm} H'_{jm} - A_m H_{jm} H'_{mm} & C_m H_{jm} H_{mm} \\ -D_m H_{jm} H_{mm} & F_m H_{mm} H'_{jm} - E_m H_{jm} H'_{mm} \end{bmatrix},$$

$$\mathrm{T}_m^{\nabla} = \begin{bmatrix} B_m J_{mm} H'_{jm} - A_m H_{jm} J'_{mm} & C_m H_{jm} J_{mm} \\ -D_m H_{jm} J_{mm} & F_m J_{mm} H'_{jm} - E_m H_{jm} J'_{mm} \end{bmatrix}. \tag{21}$$

Ngoài ra, theo định nghĩa chúng ta có

$$J_n(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{i(z\sin t - nt)} dt = \frac{e^{|z_I|}}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{i(z_R \sin t - nt)} \frac{e^{-z_I \sin t}}{e^{|z_I|}} dt = e^{|z_I|} \tilde{J}_n(z),$$

$$H_n^{(1)}(z) = \frac{\left[(-1)^n - e^{-n\pi i} \right]}{i\sin(n\pi)} J_n(z) = \frac{e^{iz}}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{e^{iz\sin t}}{e^{iz}} \frac{\left[(-1)^n e^{-int} - e^{-in(\pi+t)} \right]}{i\sin(n\pi)} dt = e^{iz} \tilde{H}_n^{(1)}(z), \tag{22}$$

Trong đó

$$\tilde{J}_n(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{i(z_R \sin t - nt)} \frac{e^{-z_I \sin t}}{e^{|z_I|}} dt \ , \tag{23}$$

$$\tilde{H}_n^{(1)}(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{e^{iz\sin t}}{e^{iz}} \frac{\left[(-1)^n e^{-int} - e^{-in(\pi+t)} \right]}{i\sin(n\pi)} dt \, . \tag{24}$$

Từ đó, với $H_n'^{(1)}(z) = \dfrac{\partial H_n^{(1)}(z)}{\partial z}$, $J'_n(z) = \dfrac{\partial J_n(z)}{\partial z}$, ta có thể viết

$$
\begin{aligned}
H_n'^{(1)}(z) &= \frac{n}{z} H_n^{(1)}(z) - H_{n+1}^{(1)}(z) = e^{iz}\left[\frac{n}{z}\tilde{H}_n^{(1)}(z) - \tilde{H}_{n+1}^{(1)}(z)\right] \\
J_n'(z) &= \frac{n}{z} J_n(z) - J_{n+1}(z) = e^{|z_I|}\left[\frac{n}{z}\tilde{J}_n(z) - \tilde{J}_{n+1}(z)\right].
\end{aligned} \tag{25}
$$

Từ các biểu thức (21) đến (25) chúng ta có thể viết lại các phần tử của ma trận $\mathrm{T}_m^{(H,V)}$ như sau

$$
\begin{aligned}
T_{11}^m &= e^{|\bar{z}_{jm}^I|} e^{i\bar{z}_{mm}} \tilde{J}_n(\bar{z}_{jm}) \tilde{H}_n^{(1)}(\bar{z}_{mm}) X_m, \\
T_{13}^m &= e^{|\bar{z}_{jm}^I|} e^{|\bar{z}_{mm}^I|} \tilde{J}_n(\bar{z}_{jm}) \tilde{J}_n(\bar{z}_{mm}) Y_m, \\
T_{22}^m &= e^{|\bar{z}_{jm}^I|} e^{i\bar{z}_{mm}} \tilde{J}_n(\bar{z}_{jm}) \tilde{H}_n^{(1)}(\bar{z}_{mm}) K_m, \\
T_{24}^m &= e^{|\bar{z}_{jm}^I|} e^{|\bar{z}_{mm}^I|} \tilde{J}_n(\bar{z}_{jm}) \tilde{J}_n(\bar{z}_{mm}) T_m, \\
T_{31}^m &= e^{i\bar{z}_{jm}} e^{i\bar{z}_{mm}} \tilde{H}_n^{(1)}(\bar{z}_{jm}) \tilde{H}_n^{(1)}(\bar{z}_{mm}) M_m, \\
T_{33}^m &= e^{i\bar{z}_{jm}} e^{|\bar{z}_{mm}^I|} \tilde{H}_n^{(1)}(\bar{z}_{jm}) \tilde{J}_n(\bar{z}_{mm}) O_m, \\
T_{42}^m &= e^{i\bar{z}_{jm}} e^{i\bar{z}_{mm}} \tilde{H}_n^{(1)}(\bar{z}_{jm}) \tilde{H}_n^{(1)}(\bar{z}_{mm}) P_m, \\
T_{44}^m &= e^{i\bar{z}_{jm}} e^{|\bar{z}_{mm}^I|} \tilde{H}_n^{(1)}(\bar{z}_{jm}) \tilde{J}_n(\bar{z}_{mm}) Q_m.
\end{aligned} \tag{26}
$$

Với

$$
\begin{aligned}
X_m &= A_m\left[\frac{n}{\bar{z}_{mm}} - \frac{\tilde{H}_{n+1}^{(1)}(\bar{z}_{mm})}{\tilde{H}_n^{(1)}(\bar{z}_{mm})}\right] - B_m\left[\frac{n}{\bar{z}_{jm}} - \frac{\tilde{J}_{n+1}(\bar{z}_{jm})}{\tilde{J}_n(\bar{z}_{jm})}\right], \\
Y_m &= A_m\left[\frac{n}{\bar{z}_{mm}} - \frac{\tilde{J}_{n+1}(\bar{z}_{mm})}{\tilde{J}_n(\bar{z}_{mm})}\right] - B_m\left[\frac{n}{\bar{z}_{jm}} - \frac{\tilde{J}_{n+1}(\bar{z}_{jm})}{\tilde{J}_n(\bar{z}_{jm})}\right], \\
K_m &= E_m\left[\frac{n}{\bar{z}_{mm}} - \frac{\tilde{H}_{n+1}^{(1)}(\bar{z}_{mm})}{\tilde{H}_n^{(1)}(\bar{z}_{mm})}\right] - F_m\left[\frac{n}{\bar{z}_{jm}} - \frac{\tilde{J}_{n+1}(\bar{z}_{jm})}{\tilde{J}_n(\bar{z}_{jm})}\right], \\
T_m &= E_m\left[\frac{n}{\bar{z}_{mm}} - \frac{\tilde{J}_{n+1}(\bar{z}_{mm})}{\tilde{J}_n(\bar{z}_{mm})}\right] - F_m\left[\frac{n}{\bar{z}_{jm}} - \frac{\tilde{J}_{n+1}(\bar{z}_{jm})}{\tilde{J}_n(\bar{z}_{jm})}\right], \\
M_m &= B_m\left[\frac{n}{\bar{z}_{jm}} - \frac{\tilde{H}_{n+1}^{(1)}(\bar{z}_{jm})}{\tilde{H}_n^{(1)}(\bar{z}_{jm})}\right] - A_m\left[\frac{n}{\bar{z}_{mm}} - \frac{\tilde{H}_{n+1}^{(1)}(\bar{z}_{mm})}{\tilde{H}_n^{(1)}(\bar{z}_{mm})}\right], \\
O_m &= B_m\left[\frac{n}{\bar{z}_{jm}} - \frac{\tilde{H}_{n+1}^{(1)}(\bar{z}_{jm})}{\tilde{H}_n^{(1)}(\bar{z}_{jm})}\right] - A_m\left[\frac{n}{\bar{z}_{mm}} - \frac{\tilde{J}_{n+1}(\bar{z}_{mm})}{\tilde{J}_n(\bar{z}_{mm})}\right], \\
P_m &= F_m\left[\frac{n}{\bar{z}_{jm}} - \frac{\tilde{H}_{n+1}^{(1)}(\bar{z}_{jm})}{\tilde{H}_n^{(1)}(\bar{z}_{jm})}\right] - E_m\left[\frac{n}{\bar{z}_{mm}} - \frac{\tilde{H}_{n+1}^{(1)}(\bar{z}_{mm})}{\tilde{H}_n^{(1)}(\bar{z}_{mm})}\right], \\
Q_m &= F_m\left[\frac{n}{\bar{z}_{jm}} - \frac{\tilde{H}_{n+1}^{(1)}(\bar{z}_{jm})}{\tilde{H}_n^{(1)}(\bar{z}_{jm})}\right] - E_m\left[\frac{n}{\bar{z}_{mm}} - \frac{\tilde{J}_{n+1}(\bar{z}_{mm})}{\tilde{J}_n(\bar{z}_{mm})}\right].
\end{aligned} \tag{27}
$$

Ta thấy rằng mỗi phần tử của ma trận $\mathrm{T}_m^{(H,V)}$ đều chứa thừa số $1/\bar{\Theta}_m$ nên chúng ta hoàn toàn có thể cắt bỏ thừa số này ra khỏi các tính toán ma trận $\mathrm{T}^{(H,V)}$.

Với hệ trụ *N* lớp, chúng ta có thể biến đổi mỗi một ma trận $\mathrm{T}_m^{(H,V)}$ nhằm mục đích cho việc tính số như sau, với $1 < m < N-1$, ta nhân các dòng 3 và 4 với thừa số $e^{-iz_{m+1,m}} e^{-iz_{m,m}}$ và nhân các cột 3 và 4 cho thừa số $e^{iz_{m,m-1}} e^{iz_{m-1,m-1}}$ và thu được

$$\mathrm{T}_m^{\square} = e^{|z^I_{m+1,m}|} e^{iz_{m,m}} \tilde{J}_n\left(\bar{z}_{m+1,m}\right) \tilde{H}_n^{(1)}\left(\bar{z}_{mm}\right) \begin{bmatrix} X_m & -C_m \\ D_m & K_m \end{bmatrix},$$

$$\mathrm{T}_m^{\bigcirc} = e^{iz_{m,m-1}} e^{iz_{m-1,m-1}} e^{|z^I_{m+1,m}|} e^{|z^I_{m,m}|} \tilde{J}_n\left(\bar{z}_{m+1,m}\right) \tilde{J}_n\left(\bar{z}_{mm}\right) \begin{bmatrix} Y_m & -C_m \\ D_m & T_m \end{bmatrix},$$

Với

$$\mathrm{T}_m^{\Delta} = e^{-iz_{m+1,m}} e^{-iz_{m,m}} e^{iz_{m+1,m}} e^{iz_{m,m}} \tilde{H}_n^{(1)}\left(\bar{z}_{m+1,m}\right) \tilde{H}_n^{(1)}\left(\bar{z}_{mm}\right) \begin{bmatrix} M_m & C_m \\ -D_m & P_m \end{bmatrix} \quad (28)$$

$$= \tilde{H}_n^{(1)}\left(\bar{z}_{m+1,m}\right) \tilde{H}_n^{(1)}\left(\bar{z}_{mm}\right) \begin{bmatrix} M_m & C_m \\ -D_m & P_m \end{bmatrix},$$

$$\mathrm{T}_m^{\nabla} = e^{-iz_{m+1,m}} e^{-iz_{m,m}} e^{iz_{m,m-1}} e^{iz_{m-1,m-1}} e^{iz_{m+1,m}} e^{|z^I_{m,m}|} \tilde{H}_n^{(1)}\left(\bar{z}_{m+1,m}\right) \tilde{J}_n\left(\bar{z}_{mm}\right) \begin{bmatrix} O_m & C_m \\ -D_m & Q_m \end{bmatrix}.$$

Biểu thức (28) lúc này đã sẵn sàng cho việc tính số cho các hệ số $C'_{(H,V)}$ trong các biểu thức (18) mà không phải lo chuyện over- hoặc under-flow.

4. KẾT LUẬN

Từ những biến đổi trên chúng tôi đã làm cho từng ma trận trong biểu thức truy toán ma trận không còn như ban đầu nữa, tuy nhiên, tích của chúng vẫn thu được giá trị như ban đầu. Việc biến đổi này giúp chúng ta có thể thực hiện được việc tính số hàm Green của hệ trụ mà không còn lo lắng về vấn đề xuất hiện over- hoặc under-flow trong quá trình tính số.

Hiện nay, các nhóm nghiên cứu trong và ngoài nước, đối với hệ trụ phân lớp chỉ dừng lại ở hệ 3 lớp. Trên thực tế, để tạo được môi trường giam nhốt tốt cần thiết phải thực hiện hệ nhiều lớp. Tuy nhiên, vấn đề khó khăn trong các tính toán chính là công đoạn này. Bằng kỹ thuật này chúng tôi cũng đã thực hiện các tính toán về thế tương tác Casimir-Polder, tốc độ rã tự phát của nguyên tử, tốc độ truyền năng lượng cộng hưởng giữa hai nguyên tử trong hệ trụ nhiều lớp, các kết quả đó cũng đã được công bố trên các tạp chí quốc tế uy tín [9]. Việc thực hiện được quá trình tính số của hàm Green cho hệ trụ nhiều lớp sẽ thúc đẩy các nghiên cứu về các quá trình vật lý trong hệ trụ nhiều lớp của các nhóm nghiên cứu trong nước và quốc tế.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

[1] Purcell E. M., Spontaneous emission probabilities at radio frequencies, *Physical Review*, vol. 69, pp.674, 1946.
[2] H. T. Dung, Knöll L. and Welsch D.-G., Intermolecular energy transfer in the presence of dispersing and absorbing media, *Physical Review A*, vol. 65, pp.043813, 2002.
[3] Druger S. D., Arnold S. and Forlan L. M., Theory of enhanced energy transfer between molecules embedded in spherical dielectric particles, *Journal of Chemical Physics*, vol. 87, pp.2649, 1987.
[4] Fujiwara H., Sasaki K. and Masuhara H., Enhancement of Förster energy transfer within a microspherical cavity, *A European Journal of Chemical Physics and Physical Chemistry*, vol. 6, pp.2410, 2005.
[5] Klimov V. V. and Letokhov V. S., Resonance interaction between two atomic dipoles separated by the surface of a dielectric nanosphere, *Physical Review A*, vol. 58, vol.3235, 1998.
[6] Le Kien F., Gupta S. D., Nayak K. P. and Hakuta K., Nanofiber-mediated radiative transfer between two distant atoms, *Physical Review A*, vol. 72, pp.063815, 2005.
[7] Marocico C. A. and Knoester J., Intermolecular resonance energy transfer in the presence of a dielectric cylinder, *Physical Review A*, vol. 79, pp.053816, 2009.
[8] Kirill A. V., Tigran V. S., Long-range plasmon-assisted energy transfer over doped graphene, *Physical Review B*, vol. 86, pp.245432, 2012.
[9] Nguyen Van Phuoc, Nguyen Dung Chinh, and Tran Minh Hien, Influence of a cylindrical waveguide with a concentric photonic band-gap wall on interatomic resonance energy transfer, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, vol. 54, pp.115401-115411, 2021.
[10] L.-W. Li, M.-S. Leong, T.-S. Yeo, and P.-S. Kooi, Electromagnetic dyadic Green's functions in spectral domain for multilayered cylinders, *Journal of Electromagnetic Waves and Applications*, Vol. 14, pp.961-972, 2000.
[11] Tai, C. T., Dyadic Green's functions in electromagnetic theory, the 2nd edition, *IEEE Press, Piscataway*, New Jersey, 1994.

NUMERICAL MENTHOD FOR LAYERD CYLINDRICAL CONFIGURATION

TRAN MINH HIEN
Faculty of Mechanical Engineering, Industrial University of Ho Chi Minh City
tranminhhien@iuh.edu.vn

Abstract. For the purpose of investigating the physical processes of atomic and molecular systems placed in mediums, we consider a system of layered cylindrical structure. The Green function of cylindrical system is also more complicated then the one of spherical or planar system. It makes calculating the Green function of system more difficult because the Green function has an infinite sum of n-modes and an integral over the entire wave number. The process of numerical calculations requires handling arithmetic over- and under-flow of bessel and hankel functions of complex variables when variables and/or the order of functions are large. In addition, the expression of Green function has the C_i. These coefficients can approach the limit 0/0 or infinity/infinity, it making numerical calculations impossible. In this article, we propose the proceduce to transform T_i matrices in the recurrence-matrices relation to eliminate 0/0 and infinity/infinity forms of coefficients C_i. By doing so, it makes the values of the T_i-matrices no longer the same as their original values but the final result does not change the Green function of system. These transforms are general for any N-layers of cylindrical configuration.

Keywords. Cylindrical waveguide, Optical resonance.

Ngày gửi bài: 02/01/2024
Ngày chấp nhận đăng: 14/03/2024