

基于平面波算法的二维声子晶体带结构的研究

齐共金[†] 杨盛良 白书欣 赵 恂

(国防科技大学航天与材料工程学院,长沙 410073)

(2002 年 5 月 12 日收到 2002 年 7 月 28 日收到修改稿)

介绍了平面波算法计算声子晶体带结构的分析过程,计算了二维双组分液相体系声子晶体的带结构.结果表明,四氯化碳/水银体系比水银/四氯化碳体系更容易产生带隙.随分散相填充分数 f 的增加,四氯化碳/水银体系声子晶体带隙宽度 $\Delta\Omega$ 先增加,后减小,当 $f=0.229$ 时,有最大值 $\Delta\Omega=0.549$;水银/四氯化碳体系的带隙宽度一直增大,当 $f=0.554$ 时,有最大值 $\Delta\Omega=0.515$; f 一定时,改变分散相单元的几何尺寸和点阵常数,带隙宽度 $\Delta\Omega$ 保持不变.

关键词:声子晶体,声子带隙,平面波算法,带结构

PACC:6320D,6780C,7115B

1. 引言

半导体超晶格^[1,2]、量子阱^[3]等相关材料和器件的成功应用,使能带理论突破了以固有材料为研究对象的限制,进入了通过能带设计来模拟实际晶格以获得新型功能材料和器件的新阶段.近年来,模拟天然晶体中原子排列的人造周期性结构的研究成为一个新的热点.如果人工调制的对象是介电常数,这种周期性结构就是光子晶体^[4,5].如果人工调制的对象是弹性常数,就形成了声子晶体.与电子在晶格周期性势场中一样,当声波在声子晶体中传播时会形成能带结构,分裂成导带和禁带,只有位于导带中的声波才能在晶体中传播^[6].声子晶体的这些新性质不仅在新型隔振降噪材料、超声换能器、声波导、声透镜、定向声源等研究方面有重要的应用价值^[7-10],而且对深入研究声波异质结构中声子的安德森局域化、缺陷态、表面态等方面也有很重要的理论研究价值^[11-15].

近 10 年来,声子晶体的研究已经取得了较大进展,如一维离子型声子晶体^[16]和三维局域共振型声子晶体^[17]的研究.目前,声子晶体带结构的理论计算方法有有限元法^[6]、传递矩阵法^[12,22]、多重散射

法^[17]、平面波法^[18-21]等.总体看来,三维声子晶体虽然有很大潜力,但是三维周期性结构制备技术要求高,精度难以保证.比较而言,二维声子晶体的制备相对容易,同时它在声波反射镜、声透镜和缺陷态等方面也有重要的研究价值,特别是液相体系声子晶体极有可能与水声学等联系起来,是一个很有潜力的发展方向^[10,13,18].

本文首先介绍平面波算法研究声子晶体带结构的理论计算过程,并对几种液相体系声子晶体进行了带结构的计算和分析.

2. 计算模型与过程

平面波法的基本思想是,将材料的密度和弹性常数在倒格矢空间中以平面波叠加的形式展开为傅里叶级数,把声波波动方程转化为一个本征方程,然后求解本征值得到色散关系.

假设声子晶体是由圆柱体 A 以正方点阵形式排列于基体 B 中组成的二维双组分复合材料体系,使圆柱体 A 的轴线平行于笛卡尔坐标系 $(0x_1x_2x_3)$ 中的 x_3 轴,则在与圆柱垂直的 (x_10x_2) 平面上就形成了二维正方晶格的周期性排列,如图 1 所示.设圆柱体 A 的半径为 R ,晶格点阵常数 a ,圆柱体 A 的

[†]E-mail: qgj@163.net

填充分数 f , B 为 $(1-f)$, 且 $f = \pi R^2/a^2$.

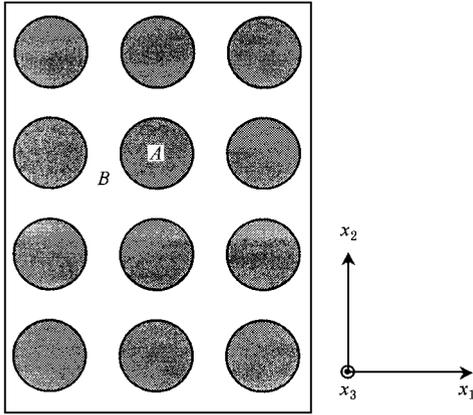


图 1 二维声子晶体的横截面示意图

在不受外力作用条件下, 二维双组分固相复合材料体系中的声波运动方程为^[19]

$$\rho(\mathbf{r}) \frac{\partial^2 \mathbf{u}_i}{\partial t^2} = \nabla \cdot [C_{44}(\mathbf{r}) \nabla \mathbf{u}_i] + \nabla \cdot \left[C_{44}(\mathbf{r}) \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_i} \right] + \frac{\partial}{\partial x_i} [(C_{11}(\mathbf{r}) - 2C_{44}(\mathbf{r})) \nabla \cdot \mathbf{u}], \quad (1)$$

其中 $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ 为与位置和时间相关的位移矢量, 它的分量是 u_i ($i=1, 2, 3$), ρ, C_{44}, C_{11} 为各组分材料的密度和弹性常数.

假设声子晶体是由水银和四氯化碳组成的二维双组分液相体系, 因为声波在流体中传播时只有纵波 ($C_{44}=0$), 所以波动方程 (1) 可表示为

$$\rho(\mathbf{r}) \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = \nabla [C_{11}(\mathbf{r}) \nabla \cdot \mathbf{u}]. \quad (2)$$

此时, 可定义一个标量势 $\Phi(\mathbf{r}, t)$, 它与位移场 $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ 的关系为

$$\rho \mathbf{u} = \nabla \Phi, \quad (3)$$

于是方程 (2) 变为

$$\left(\frac{1}{C_{11}(\mathbf{r})} \right) \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} = \nabla \cdot \left(\left(\frac{1}{\rho(\mathbf{r})} \right) \nabla \Phi \right). \quad (4)$$

该方程的解可写为

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \exp[i(\mathbf{K} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \sum_{\mathbf{G}} \Phi_{\mathbf{K}}(\mathbf{G}) \exp[i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}], \quad (5)$$

其中 $\mathbf{K} = (k_{x1}, k_{x2})$ (即 $k_{x3}=0$) 为 (x_1, x_2) 面内的二维布洛赫波矢, ω 为波的角频率.

利用密度和弹性常数在 (x_1, x_2) 面上随位置矢量 $\mathbf{r}(x_1, x_2)$ 变化的二维周期性, 把 $1/\rho(\mathbf{r})$ 和 $1/C_{11}(\mathbf{r})$ 在倒易空间中展开为傅里叶级数

$$\zeta(\mathbf{r}) = \zeta(x_1, x_2) = \sum_{\mathbf{G}} \zeta(\mathbf{G}) \exp[i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}], \quad (6)$$

其中 \mathbf{r} 为位置矢量, \mathbf{G} 为二维晶格的倒格矢, ζ 代表 $1/\rho(\mathbf{r})$ 和 $1/C_{11}(\mathbf{r})$, 傅里叶系数为

$$\zeta(\mathbf{G}) = \frac{1}{A_{cw}} \iint d^2 r \zeta(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}). \quad (7)$$

积分在元胞面积 $A_c = a^2$ 上进行, 结果为

$$\zeta(\mathbf{G} = 0) = \bar{\zeta} = \zeta_A f + \zeta_B (1-f), \quad (8a)$$

$$\zeta(\mathbf{G} \neq 0) = (\zeta_A - \zeta_B) F(\mathbf{G}) = (\Delta \zeta) F(\mathbf{G}), \quad (8b)$$

其中 $F(\mathbf{G})$ 为圆柱体 A 的结构因子, 它定义为

$$F(\mathbf{G}) = \frac{1}{A_{cw}} \iint_A d^2 r \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) = 2f J_1(\mathbf{G}R) / \mathbf{G}R, \quad (9)$$

其中积分仅在圆柱体 A 上进行, 基体 B 不计入内, $J_1(x)$ 为一阶第一类 Bessel 函数, R 为圆柱体 A 的半径.

于是, 方程 (4) 变为

$$\sum_{\mathbf{G} \neq \mathbf{G}'} F(\mathbf{G} - \mathbf{G}') [\Delta \rho^{-1} (\mathbf{K} + \mathbf{G}) \cdot (\mathbf{K} + \mathbf{G}') - \Delta C_{11}^{-1} \omega^2] \Phi_{\mathbf{K}}(\mathbf{G}') + (\overline{\rho^{-1}} | \mathbf{K} + \mathbf{G} |^2 - \overline{C_{11}^{-1}} \omega^2) \Phi_{\mathbf{K}}(\mathbf{G}) = 0. \quad (10)$$

方程 (10) 可以变为标准特征值方程

$$\sum_{\mathbf{G}'} \mathbf{A}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \Phi_{\mathbf{K}}(\mathbf{G}') = \omega^2 \Phi_{\mathbf{K}}(\mathbf{G}), \quad (11)$$

其中矩阵 $\mathbf{A} = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{N}$, 而矩阵 \mathbf{M} 和 \mathbf{N} 分别定义为

$$\mathbf{M}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} = F(\mathbf{G} - \mathbf{G}') [\Delta C_{11}^{-1} (1 - \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}) + \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \overline{C_{11}^{-1}}], \quad (12a)$$

$$\mathbf{N}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} = [F(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \Delta \rho^{-1} (1 - \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}) + \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \overline{\rho^{-1}} (\mathbf{K} + \mathbf{G}) \cdot (\mathbf{K} + \mathbf{G}')], \quad (12b)$$

其中 $\delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}$ 为 Kronecker 符号.

方程 (10) 变为标准特征值方程后, 令波矢 \mathbf{K} 扫描整个不可约布里渊区, 求解矩阵 \mathbf{A} 的特征值得到带结构 $\omega_n(\mathbf{K})$, 其中参数 n 为不同能带的标志.

3. 计算结果

图 2 为两种二维正方点阵声子晶体的带结构. 图 2(a) 为水银/四氯化碳体系, $a = 4\text{cm}$, $R = 0.3a$, 即填充分数 $f = 0.283$. (b) 为四氯化碳体/水银体系, $a = 4\text{cm}$, $R = 0.25a$, 即填充分数 $f = 0.196$. 图 2 纵坐标为归一化频率 $\Omega = \omega a / 2\pi C_0$, 其中 $C_0 = \sqrt{\rho^{-1} / C_{11}^{-1}}$. 横坐标取布洛赫波矢 $\mathbf{k} = \mathbf{K} a / 2\pi$. 可以

看出,水银/四氯化碳体系声子晶体带隙较小,而四氯化碳/水银体系在低能区出现了很宽的带隙,高能区还有一个较小的带隙.如图2阴影部分所示.二维正方晶格点阵的倒格矢 $G = h_1 b_1 + h_2 b_2 = 2\pi(h_1 e_1 + h_2 e_2)/a$,其中 h_1, h_2 为整数.计算时取 $-10 \leq h_1, h_2 \leq 10$,用 441 个平面波和 71 个 k 点求解.为了验证结果的收敛性,还计算了 841 个平面波的情况,发现直到第 8 个波段的特征值误差小于 0.1%,说明 441 个平面波既能保证特征值的收敛,又有一定的

精度和计算效率.计算所用的材料声学常数见表 1.

表 1 几种材料的声学常数^[23]

	ρ ($\times 10^3 \text{ kg/m}^3$)	C_l ($\times 10^3 \text{ m/s}$)	$C_{11} = \rho C_l^2$ ($\times 10^9 \text{ kg/m} \cdot \text{s}^2$)
氯仿	1.487	1.001	1.490
四氯化碳	1.594	0.938	1.402
水银	13.6	1.451	28.633

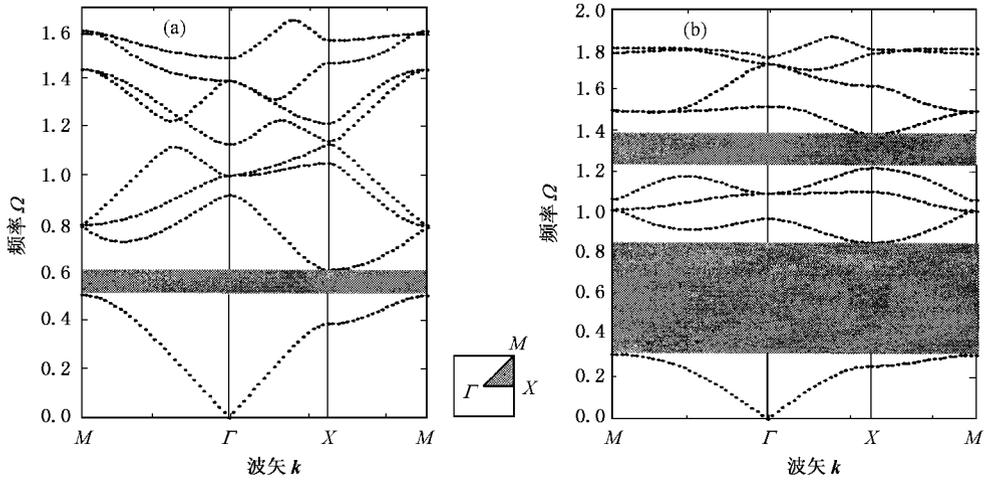


图 2 两种液相体系声子晶体的带结构

图 3 为氯仿/四氯化碳体系的带结构,无论怎样改变填充分数,都没有带隙出现.一般而言,声子晶体中各组分材料的声学常数相差越大,入射声波在晶体中的布拉格散射越强烈,越容易产生带隙.而氯仿和四氯化碳的密度和弹性常数相近,所以不会有带隙出现.

随填充分数 f 的变化,声子晶体的带隙宽度 $\Delta\Omega$ 会发生变化,如图 4 所示.图 4 曲线 a 为四氯化碳/水银体系,随填充分数 f 的增大,带隙逐渐变宽,然后变窄,当 $f = 0.229$ 时,有最大值 $\Delta\Omega = 0.549$.曲线 b 为水银/四氯化碳体系,随填充分数 f 的增大,带隙逐渐变宽,当 $f = 0.554$ 时,有最大值 $\Delta\Omega = 0.515$.

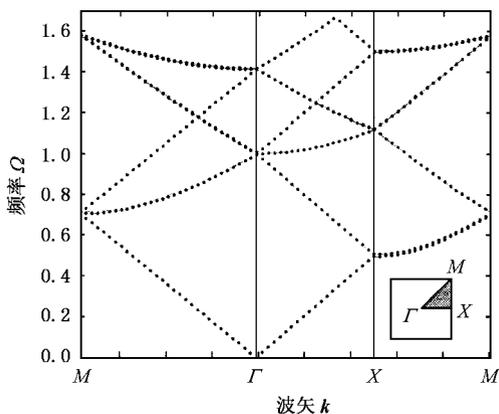


图 3 氯仿/四氯化碳体系的带结构

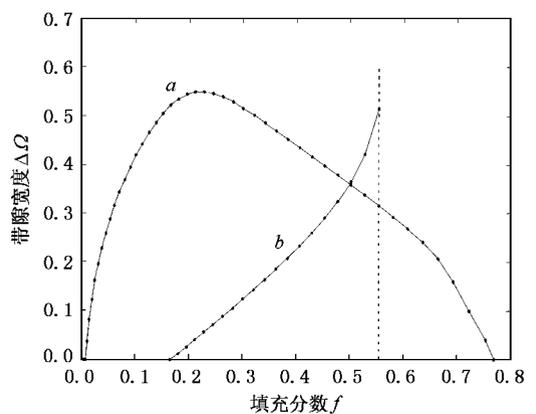


图 4 声子带隙宽度的变化曲线

4. 结 论

对氯仿/四氯化碳和四氯化碳/水银体系带结构的比较表明,声子晶体中各组分之间的密度和弹性常数相差越大,就越容易产生带隙.而且,四氯化碳/水银体系比水银/四氯化碳体系更容易产生带隙.所以,对液相体系声子晶体,密度小的分散相结合密度大的基体容易产生带隙.

填充分数对声子晶体带隙宽度影响很大.随填充分数的增加,四氯化碳/水银体系声子晶体的带隙宽度先增大后减小,当填充分数 $f = 0.229$ 时,有最大值 $\Delta\Omega = 0.549$;水银/四氯化碳体系的带隙宽度一直增大,当 $f = 0.554$ 时,有最大值 $\Delta\Omega = 0.515$.在材料体系和填充分数一定的情况下,改变点阵单元的几何尺寸和点阵常数,发现声子晶体带隙宽度 $\Delta\Omega$ 没有变化.

- [1] Jia Y *et al* 2002 *Chin. Phys.* **11** 58
- [2] Xu X H and Shen J 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 2142 [in Chinese] 徐晓虎、沈 剑 1999 物理学报 **48** 2142]
- [3] Li N *et al* 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 797 [李 娜等 2000 物理学报 **49** 797]
- [4] Yablonovitch E 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2059
- [5] Zhuang F *et al* 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 355 [in Chinese] [庄 飞等 2002 物理学报 **51** 355]
- [6] Lu Y Q *et al* 2000 *Physics* **29** 193 [in Chinese] [陆延青等 2002 物理 **29** 193]
- [7] Kushwaha M S *et al* 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 2022
- [8] Kushwaha M S and Halevi P 1997 *Japan. J. Appl. Phys.* **236** L1043
- [9] Kushwaha M S *et al* 1994 *Phys. Rev. B* **49** 2313
- [10] Suzuki T and Yu P K L 1996 *J. Appl. Phys.* **80** 5665
- [11] Parnley S *et al* 1995 *Appl. Phys. Lett.* **67** 777
- [12] Sigalas M M and Soukoulis C M 1995 *Phys. Rev. B* **51** 2780
- [13] Torres M *et al* 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 3054
- [14] Psarobas I E *et al* 2000 *Phys. Rev. B* **62** 278
- [15] Sigalas M M 1998 *J. Appl. Phys.* **84** 3026
- [16] Lu Y Q *et al* 1999 *Science* **284** 1822
- [17] Liu Z Y *et al* 2000 *Science* **289** 1734
- [18] Kushwaha M S and Djafari R B 1996 *J. Appl. Phys.* **80** 3191
- [19] Vasseur J O *et al* 1994 *J. Phys. Condens. Matter* **6** 8759
- [20] Vasseur J O *et al* 1997 *J. Phys. Condens. Matter* **9** 7327
- [21] Vasseur J O *et al* 1998 *J. Phys. Condens. Matter* **10** 6051
- [22] Esquivel S R and Noguez C 1997 *J. Appl. Phys.* **82** 3618
- [23] Du G H *et al* 1981 *The Basics of Acoustics* (Shanghai : Science and Technology Press [in Chinese] 杜功焕等 1981 声学基础 (上海 科技出版社))

A study of the band structure in two-dimensional phononic crystals based on plane-wave algorithm

Qi Gong-Jin Yang Sheng-Liang Bai Shu-Xin Zhao Xun

(College of Astronautics and Materials Engineering , National University of Defence Technology , Changsha 410073 , China)

(Received 12 May 2002 ; revised manuscript received 28 July 2002)

Abstract

In this paper , the calculating course of the plane-wave algorithm is introduced to solve the sound wave equation and the band structure of phononic crystals. The phononic crystals of two-dimensional binary liquid systems are studied. In conclusion , the $\text{CCl}_4/\text{mercury}$ system is easier to obtain the band-gap than the mercury/ CCl_4 system. With the increase of the filling fraction (f), the width of the band-gap becomes wider and then narrower. The widest band-gap of $\text{CCl}_4/\text{mercury}$ system appears at $f = 0.229$, where $\Delta\Omega_{\max} = 0.549$. While the width of the band-gap in mercury/ CCl_4 system increases consistently with the filling fraction , when $f = 0.554$ $\Delta\Omega_{\max} = 0.515$. Under the same filling fraction , the variation of the cylinder diameter and lattice constant does not affect the band-gap width $\Delta\Omega$.

Keywords : phononic crystal , phononic band-gap , plane wave algorithm , band structure

PACC : 6320D , 6780C , 7115B