

基于集中质量法的一维声子晶体弹性波带隙计算^{*}

温激鸿 王 刚 刘耀宗 郁殿龙

(国防科技大学三院机电工程研究所, 长沙 410073)

(2003 年 11 月 13 日收到, 2004 年 2 月 5 日收到修改稿)

通过将一维声子晶体中的原胞简化为有限多个自由度的弹簧振子结构, 引入了一种基于集中质量法的一维声子晶体弹性波带隙计算方法. 与传统平面波展开法相比, 该方法的计算结果与之相符合, 而且在收敛性方面较之有很大改善. 通过使用集中质量法, 可在得到同样计算精度的条件下, 显著降低计算量, 提高计算速度.

关键词: 声子晶体, 弹性波带隙, 集中质量法, 平面波展开法

PACC: 4320, 4335, 0260, 8160H

1. 引 言

半导体的原子势场呈周期性排列. 电子在半导体中传播时, 电子与原子周期势场相互作用使得半导体具有电子禁带, 能够操控电子的流动. 以硅晶体为代表的半导体技术对人类文明的进步产生了深远的影响^[1-4]. 近年来, 模拟天然晶体原子排列的人造周期性复合结构中经典波(电磁波和弹性波)传播的研究受到广泛关注^[5-25]. 介电常数(弹性常数)周期性分布的复合结构被称为光子(声子)晶体^[5-8]. 当电磁波(弹性波)在受到介电常数(弹性常数)的周期性调制时, 可能会产生光子(声子)带隙, 即一定频率范围的电磁波(弹性波)的传播被抑制或禁止. 光子(声子)晶体的这种特性具有极大的理论价值和应用前景.

声子晶体在无源隔音、精密减振平台、声波及振动过滤器等新型功能材料方面具有广泛的应用前景, 其带隙特性的研究正在成为一个新的热点^[9-23]. 国内外对声子晶体的研究主要集中在二维及三维声子晶体上, 对一维声子晶体的研究相对较少. 事实上, 由于一维声子晶体结构简单且易于获得较宽的带隙, 因此有可能在减振降噪等领域得到广泛的应用^[24, 25].

一维声子晶体弹性波带隙计算方法主要有平面

波展开法^[9-12]、传递矩阵法^[24]. 传递矩阵法只能计算有限结构的透射反射等特性, 无法求解周期结构中的带结构. 平面波展开法应用最为广泛, 易于理解, 计算相对简单, 但存在收敛慢的问题.

本文首先介绍了基于平面波展开法的一维声子晶体弹性波带隙计算方法, 然后采用集中质量法^[26]. 通过把一维声子晶体中的原胞简化为有限多个自由度的弹簧振子结构, 将一维声子晶体弹性波带隙的计算简化为计算周期弹簧振子结构的弹性波带隙. 通过实例对两种方法的计算结果及计算性能进行了分析比较.

我们注意到文献^[27]在周期弹簧振子结构带结构的求解方法上与本文工作有类似之处, 其原因是这种算法的核心思想都来源于固体物理学中一维原子链的振动频谱求解. 本文与该文献的研究出发点和着眼点不同. 本文着眼于针对传统平面波展开法的算法改进, 而该文献着重证明在一维和二维周期弹簧振子结构中存在着与一般声子晶体类似的禁带特性. 采用振动力学方法将一维声子晶体转化为周期弹簧振子结构的思想和具体处理方法是本文的核心内容之一, 在该文献中未曾讨论. 具体的说, 本文采用集中质量法对声子晶体的单个原胞进行了离散, 离散后的振子质量及弹簧刚度有明确的物理意义, 能与实际模型相对应. 另外, 在周期弹簧振子结构带结构求解方法上, 本文算法通用性强于该文献算法.

^{*} 国家重点基础研究发展规划(批准号 51307)资助的课题.

2. 基于平面波展开法的一维声子晶体弹性波带隙计算

对于一维声子晶体,通常可以采用平面波展开法计算弹性波带隙.平面波展开法就是将波动方程中的位移、弹性参数等物理量在倒格子空间以平面波叠加的形式展开,将波动方程化解为一个本征方程,求解本征方程得到传播的本征频率.

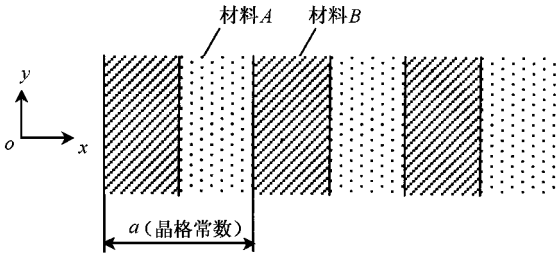


图1 一维声子晶体结构示意图

图1为一维声子晶体结构示意图,图中两种不同弹性常数和密度的无限大平板材料A和B在x方向上交替排列形成一维层状周期结构(当平板材料的外形尺寸远大于其厚度时,两种平板材料交替排列形成的一维层状周期结构也可视为一维声子晶体).在此一维层状周期结构中,沿x方向传播的纵波及横波分别满足如下波动方程^[26]:

$$\rho(x) \frac{\partial^2 u_x(x, t)}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ [\lambda(x) + 2\mu(x)] \frac{\partial u_x(x)}{\partial x} \right\}, \quad (1)$$

$$\rho(x) \frac{\partial^2 u_y(x, t)}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu(x) \frac{\partial u_y(x)}{\partial x} \right], \quad (2)$$

式中 $\rho(x)$, $\lambda(x)$, $\mu(x)$ 在 x 方向上具有相同的周期性,对它们按傅里叶级数展开并写成统一的形式

$$f(x) = \sum_{G_1} f_{G_1} e^{iG_1 x}. \quad (3)$$

对于无限周期结构,根据 Bloch 定理^[1] (1)(2) 式的解的形式为

$$u_l(x) = e^{i(kx - \omega t)} u_l^l(x), \quad l = x, y, \quad (4)$$

其中

$$u_l^l(x) = \sum_{G_2} e^{iG_2 x} u_{k+G_2}^l, \quad (5)$$

即

$$u_l(x) = \sum_{G_2} e^{i(G_2 x + kx - \omega t)} u_{k+G_2}^l. \quad (6)$$

G_1 和 G_2 均为倒空间上的倒格矢, k 为波矢,被

限制于第一 Brillouin 区, ω 为波的角频率.将(3), (6)式代入(1)(2)式,并令 $G_3 = G_1 + G_2$, 整理可得

$$\begin{aligned} & \omega^2 \sum_{G_2} u_{k+G_2}^x \rho_{G_3-G_2} \\ &= \sum_{G_2} u_{k+G_2}^x (G_2 + k) \chi (G_3 + k) \chi \lambda_{G_3-G_2} + 2\mu_{G_3-G_2}, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} & \omega^2 \sum_{G_2} u_{k+G_2}^y \rho_{G_3-G_2} \\ &= \sum_{G_2} u_{k+G_2}^y (G_2 + k) \chi (G_3 + k) \mu_{G_3-G_2}. \end{aligned} \quad (8)$$

倒格矢在倒空间上周期无限延拓,为了得到具有一定精度的解,可以在倒空间原点周围对称选取有限多个倒格矢的值 G_3 和 G_2 . 这样(7)(8)式可分别写成有限个方程组成的方程组,波动方程式(1), (2)的求解也就转化为有限规模矩阵的特征值 ω^2 的求解问题.

给定一个波矢 k ,可以得到一系列的特征频率值,而其中的每一个特征频率值对应的特征向量 u_{k+G_2} 代表了倒格子空间中一种特定的波传播模式,由(6)式将这种模式由倒格子空间转化到正格子空间中,就可得到与特定波矢 k 以及特定频率对应的弹性波传播形式.

3. 一维声子晶体模型简化——集中质量法

图1所示一维声子晶体中,原胞由两种材料A, B组成,原胞在弹性波传播方向上周期排列形成一维声子晶体.一维声子晶体中的原胞是有无限多自由度的连续系统,采用集中质量法,可以将其分解为有限个集中质量,而集中质量间的连接则简化为无质量的弹簧连接,由此,原胞就简化为有限个自由度的弹簧振子结构,而一维声子晶体则简化为无限周期弹簧振子结构.简化的弹簧振子结构的自由度数目越多,越接近于实际的原胞,计算精度越高.图2

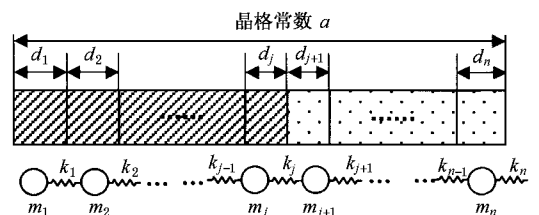


图2 原胞简化为 n 个自由度的弹簧振子结构示意图

给出了一维声子晶体原胞简化为弹簧振子结构示意图. 图中, 每个划分单元的长度为 d_j , 每个划分单元只能包含一种材料. 按照质心不变的原则, 每个振子位于简化单元的中心, 振子两侧为等刚度的弹簧. 弹簧振子结构参数 m 可由下式确定:

$$m_j = \rho S d_j, \quad j = 1 \dots n, \quad (9)$$

式中的 S 为声子晶体截面面积, ρ 为划分单元的材料密度.

同时, 对于每半个划分单元, 沿 x 方向的正应力及沿 y 方向的剪切应力与对应方向的应变成正比, 即有

$$\frac{F_i^x}{S} = (\lambda + 2\mu) \frac{\Delta x}{d_j/2}, \quad (10)$$

$$\frac{F_i^y}{S} = \mu \frac{\Delta y}{d_j/2},$$

式中 Δx , Δy 为此半个划分单元沿 x 方向及 y 方向的拉压及剪切位移. 沿某方向的作用力与在此作用力下沿该方向的位移的比值定义为刚度^[26]. 因此对于每个划分单元, 振子两侧弹簧的拉压刚度及剪切刚度分别为

$$c_i^x = \frac{\chi(\lambda + 2\mu)S}{d_j}, \quad (11)$$

$$c_i^y = \frac{2\mu S}{d_j}.$$

相邻振子间的弹簧连接可以看成是相邻两个振子相邻侧弹簧的串联, 即当相邻两个划分单元为同种材料时, 沿 x 方向的拉压刚度及沿 y 方向的剪切刚度为

$$k_i^x = \frac{c_i^x c_{i+1}^x}{c_i^x + c_{i+1}^x} = \frac{\chi(\lambda + 2\mu)S}{d_{j+1} + d_j}, \quad (12)$$

$$k_i^y = \frac{c_i^y c_{i+1}^y}{c_i^y + c_{i+1}^y} = \frac{2\mu S}{d_{j+1} + d_j}.$$

同理, 当相邻两个划分单元为不同种材料时, 沿 x 方向的拉压刚度及沿 y 方向的剪切刚度为

$$k_i^x = \frac{\chi(\lambda_A + 2\mu_A)\chi(\lambda_B + 2\mu_B)S}{(\lambda_A + 2\mu_A)d_{j+1} + (\lambda_B + 2\mu_B)d_j}, \quad (12)$$

$$k_i^y = \frac{2\mu_A\mu_B S}{\mu_A d_{j+1} + \mu_B d_j}.$$

对于原胞中包含多种材料叠合的情况, 仍可类似地按上述集中质量法进行简化处理.

4. 无限周期弹簧振子结构的弹性波带隙计算

图 3(a) 所示为一个无限周期弹簧振子结构. 其

中, 单个周期由 n 个弹簧 $k_1 \dots k_n$ 以及相应的质点 $m_1 \dots m_n$ 串联而成, 振子间距为 d_j , 周期间距(即晶格常数)为 a . 图 3(b) 为单个周期内的弹簧振子结构, x_j 为对应振子 m_j 的位移.

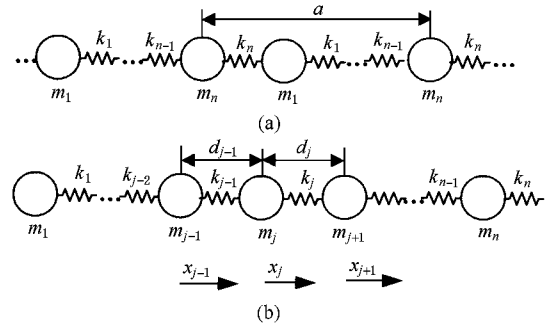


图 3 (a)无限周期的弹簧振子结构 (b)单个周期的弹簧振子结构

图 3(b) 中第 j 个质点的运动方程为

$$m_j \ddot{x}_j = k_j(x_{j+1} - x_j) - k_{j-1}(x_j - x_{j-1}), \quad j = 1 \dots n. \quad (14)$$

根据 Bloch 定理^[1], 在周期边界条件下, 该质点运动方程的解可写为振幅为 A_j 、角频率为 ω 的简谐振动

$$x_j = A_j e^{i(q \sum_{j=1}^j d_j - \omega t)}, \quad (15)$$

式中 $q \sum_{j=1}^j d_j$ 表示第 j 个振子的位相因子, d_j 表示第 j 和第 $j+1$ 个振子的间距. q 为波矢, 在第一 Brillouin 区取值, 即 $(-\pi/a, \pi/a)$, 其中 $a = \sum_{j=1}^n d_j$. 将 (15) 式代入 (14) 式, 化简后可得

$$\left(\frac{k_j + k_{j-1}}{m_j} - \omega^2 \right) A_j = \frac{k_j}{m_j} e^{iqd_{j+1}} A_{j+1} + \frac{k_{j-1}}{m_j} e^{-iqd_j} A_{j-1}. \quad (16)$$

由于弹簧振子结构周期排列, 在周期边界条件下有

$$\begin{aligned} k_0 &= k_n, \quad k_1 = k_{n+1}, \\ m_0 &= m_n, \quad m_1 = m_{n+1}, \\ d_0 &= d_n, \quad d_1 = d_{n+1}, \\ A_0 &= A_n, \quad A_1 = A_{n+1}. \end{aligned} \quad (17)$$

将 (17) 式代入 (16) 式, 并用矩阵形式表示该线性方程组

$$(\mathbf{X} q) - \omega^2 \mathbf{I} \mathbf{A} = \mathbf{0}, \quad (18)$$

式中 $\mathbf{A} = [A_1, A_2, \dots, A_n]^T$. (16) 式中若 \mathbf{A} 有异于零的解, 则其系数行列式必须等于零, 对 (18) 式的求解转化为求解 $n \times n$ 的一般矩阵 \mathbf{X} 的特征值问题, 由

此可得到上述周期弹簧振子结构的弹性波带结构.

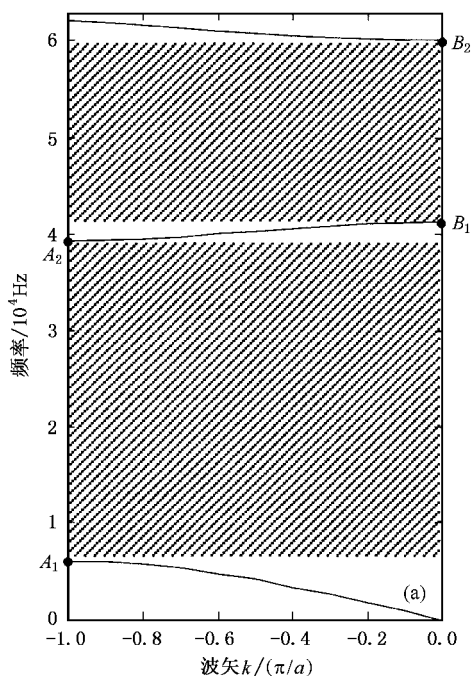
5. 实例计算及结果分析

分别采用集中质量法及平面波展开法计算了铅/树脂组成的一维声子晶体弹性波带隙结构(纵波模式),该声子晶体晶格尺寸为 0.03m ,材料组分为 $2:1$ (材料组分量 = 原胞中铅板厚度/树脂厚度),材料特性如表 1 所示.

表 1 所用材料特性参数

材料	密度(kg/m^3)	λ (kg/ms^2)	μ (kg/ms^2)
铅	11600	4.23×10^{10}	1.49×10^{10}
树脂	1180	4.43×10^8	1.59×10^8

图 4(a)所示为采用本文中集中质量法计算得到的一维声子晶体弹性波带隙结构图,及其相应的第一、二带隙.计算中每个原胞简化为自由度为 30 的弹簧振子结构,其中每层介质简化为相同自由度



数的弹簧振子结构.图中 A_1, A_2, B_1, B_2 为带结构中第一、第二带隙的起始频率及截止频率点.这些点决定了带隙的位置及大小.图 4(b)比较了分别采用平面波展开法和集中质量法对这些点上频率计算中的算法收敛性,从中可以看出,集中质量法计算结果从低到高逐渐收敛,平面波展开法计算结果从高到低逐渐收敛,两种算法计算结果有较好的一致性,但集中质量法的收敛性明显优于平面波展开法.以第一带隙的起始频率点 A_1 为例,采用平面波展开法时需要引入 121 个平面波才能满足 1% 的计算精度,而集中质量法仅需将原胞简化为自由度为 20 的弹簧振子结构即可满足要求.此时,平面波展开法需要计算 121×121 的一般矩阵特征值问题,而集中质量法仅需计算 20×20 的一般矩阵特征值问题.由此可见,在满足同样精度的要求下,集中质量法的计算量明显小于平面波展开法.

集中质量法对横波模式的带结构计算同样有效,由于其与纵波模式处理方法类似,在此不作赘述.

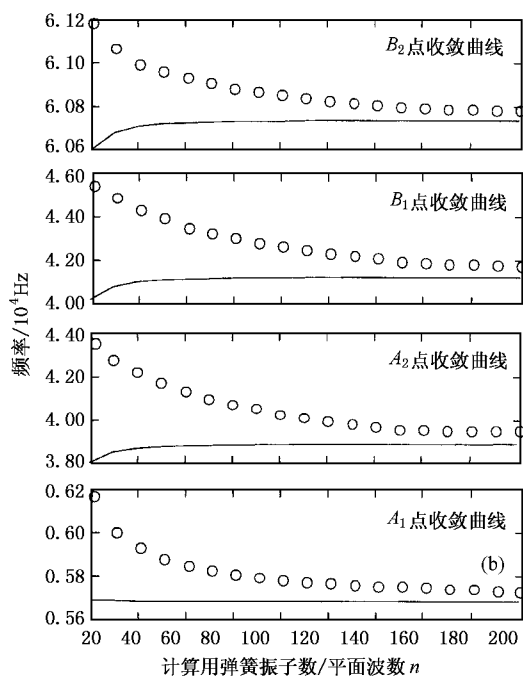


图 4 (a)采用集中质量法计算的带结构 (b)两种算法对带结构中 A_1, A_2, B_1, B_2 点收敛性比较,图中实线及离散点分别为集中质量法及平面波展开法计算结果

6. 结 论

本文引入了一种基于集中质量法的一维声子晶体弹性波带隙计算方法,该方法通过将一维声子晶

体中的原胞简化为有限多个自由度的弹簧振子结构,从而把一维声子晶体弹性波带隙的计算简化为周期弹簧振子结构的弹性波带隙计算.该方法的计算结果与传统的平面波展开法一致,并且具有较平面波展开法好得多的收敛性,即在满足计算精度的

前提下,该方法的计算速度明显优于传统方法.

此外,从本文研究工作中还可以看出,一维声子晶体结构虽然简单,但却易于获得较宽的带隙,这为

声子晶体在减振降噪等领域的应用展现了良好的前景.对一维声子晶体的深入研究,将有助于推动声子晶体早日得到广泛应用.

- [1] Fang J Y and Lu D 1980 *Solid State Physics* (Shanghai : Science and Technology Press) [方俊鑫、陆 栋 1980 固体物理学(上海 : 上海科学技术出版社)]
- [2] Li N *et al* 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 797 (in Chinese) [李娜等 2000 物理学报 **49** 797]
- [3] 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]
- [4] Jia Yu *et al* 2002 *Chin. Phys.* **11** 58
- [5] Joannopoulos J D *et al* 1995 *Photonic crystals* (Princeton Univ. Press , Princeton)
- [6] Yablonovitch E 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2059
- [7] John S 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2486
- [8] Zhuang Fei *et al* 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 355 (in Chinese) [庄 飞等 2002 物理学报 **51** 355]
- [9] Wu F G and Liu Y Y 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1434 (in Chinese) [吴福根、刘有延 2002 物理学报 **51** 1434]
- [10] Wu F G *et al* 2002 *J. Phys. D : Appl. Phys.* **35** 162
- [11] Wu F G *et al* 2001 *Chin. Phys. Lett.* **18** 785
- [12] Wu F G *et al* 2001 *Acta Acustica* **26** 319 (in Chinese) [吴福根等 2001 声学学报 **26** 319]
- [13] Wang G *et al* 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1943 (in Chinese) [王 刚等 2003 物理学报 **52** 1943]
- [14] Kushwaha M S *et al* 1994 *Phys. Rev. B* **49** 2313
- [15] Kushwaha M S *et al* 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 2022
- [16] Vasseur J O *et al* 1998 *J. Phys-Condens. Mat.* **10** 6051
- [17] Liu Z Y *et al* 2000 *Phys. Rev. B* **62** 2446
- [18] Liu Z Y *et al* 2000 *Science* **289** 1734
- [19] Modinos A *et al* 2001 *Physica B* **296** 167
- [20] Kafesaki M *et al* 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 6050
- [21] Kafesaki M and Economou E N 1999 *Phys. Rev. B* **60** 11993
- [22] Kafesaki M *et al* 2001 *Conference on Photonic Crystals and Light Localization in the 21st Century* (Kluwer Academic Publishers , Dordrecht , Netherlands)
- [23] García-Pablos D *et al* 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 4349
- [24] Sigalas M M *et al* 1995 *Phys. Rev. B* **51** 2780
- [25] Jakob S J *et al* 2002 15th Nordic Seminar on Computational Mechanics
- [26] Liu YZ *et al* 1998 *Mechanic of Vibrations* (Beijing : High Education Press) [刘延柱等 1998 振动力学(北京 : 高等教育出版社)]
- [27] Jensen J S 2003 *Journal of Sound and Vibration* **266** 1053

Lumped-mass method on calculation of elastic band gaps of one-dimensional phononic crystals *

Wen Ji-Hong Wang Gang Liu Yao-Zong Yu Dian-Long

(Institute of Mechatronical Engineering , National University of Defense Technology , Changsha 410073 , China)

(Received 13 November 2003 ; revised manuscript received 5 February 2004)

Abstract

With each unit cell replaced by finite cascaded mass-spring oscillators , 1D phononic crystals (PCs) can be simplified to an infinite periodic mass-spring chain. Therefore , the elastic wave band structures of the 1D PCs can be calculated with a straightforward approach which we call lumped-mass method (LM). For comparison , the band structures of the same 1D PC calculated with this method and the well-known plane wave expansion method are both presented in this paper. The results of the two methods are in good agreement while the computation costs of LM method are much lower than that of PWE method.

Keywords : phononic crystals , elastic band gap , lump-mass method , plane wave expansion method (PWE)

PACC : 4320 , 4335 , 0260 , 8160H

* Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. 51307).