

二维复式格子声子晶体带隙结构特性^{*}

赵 芳 苑立波[†]

(哈尔滨工程大学理学院 物理系 哈尔滨 150001)

(2005 年 1 月 14 日收到 2005 年 2 月 21 日收到修改稿)

借助于平面波展开法分析了二维复式格子声子晶体能带结构, 计算了铝合金柱体按周期性结构排列在空气中形成的二维固/气复合体系的声子晶体, 给出了复式蜂窝格子和复式 Kagome 格子的能带结构, 进而对比分析了复式格子和简单格子的能带结构特性. 结果表明, 与简单格子相比, 复式格子的带隙出现在频率相对较低的位置, 在 $f = 0.091-0.6046$ 范围内, 将声子晶体排列为复式格子要优于简单格子, 可以得到更宽带隙. 此外, 引入了带隙分布图, 讨论了填充系数 f 对带隙数目、带隙宽度以及带隙上下边界频率的影响.

关键词: 声子晶体, 复式格子, 带隙, 平面波算法

PACC: 0340K, 6320D, 0260, 8160H

1. 引 言

1992 年, Sigalas 和 Economou 首次在理论上证实球形散射体埋入某一基体材料中形成三维周期性点阵结构具有弹性波禁带特性^[1]. 1993 年, Kushwaha 等人首次明确提出了声子晶体(phononic crystals)概念, 并对水银柱在铝合金基体中形成的复合介质采用平面波方法计算获得了在剪切极化方向上的弹性波禁带^[2]. 1995 年, Martinez-Sala 等人在对西班牙马德里的一座 200 多年前制作的雕塑“流动的旋律”进行声学特性研究时, 首次从实验角度证实了弹性波禁带的存在^[3]. 从此声子晶体的研究引起了极大关注.

目前, 声子晶体的研究工作主要集中在声子晶体带隙的计算^[2, 4-13]、缺陷态的研究^[13-19]以及实验研究方面^[3, 19-24], 而应用探索方面^[25-27]刚刚起步.

在声子晶体禁带的计算方面, 多数文献都是以正方格子、三角格子为研究对象^[10-13], 文献 [5] 研究了液相体系声子晶体排列为长方格子时的能带结构, 结果表明在某些情况下长方格子与正方格子相比可以获得更宽的带隙. 以上论文中的共同特点是研究对象都属于基元只包含一个“原子”的简单格子, 而没有对复式格子结构的情况加以研究.

在以上这些工作的基础上, 本文研究了复式格子声子晶体的能带结构特性, 给出了平面波法(PWM)计算复式格子声子晶体能带结构的理论方法, 采用二维铝合金/空气体系, 计算了以蜂窝格子和 Kagome 格子为代表的复式格子的能带结构, 然后与以正方格子和三角格子为代表的简单格子的情况作了对比分析, 结果表明, 在 $f = 0.091-0.6046$ 范围内, 将声子晶体排列为复式格子要优于简单格子, 可以得到更宽的带隙. 此外, 本文还引入了带隙分布图, 反映前 15 个能带间带隙的分布情况. 借助于带隙分布图, 分析了带隙数目、带隙宽度以及带隙上下边界频率随填充系数 f 的变化情况.

2. 平面波展开法计算复式格子能带结构的分析过程

本文的研究对象属于固/气体系, 由于在气体中只存在纵波的传播, 但在固体中既有纵波又有横波且存在耦合, 这给平面波展开法(PWM)的使用带来了一定的困难. 文献 [21-22] 采用以下近似方法: 考虑到固体的声阻抗远大于空气, 当声波由空气入射到固体散射体时, 在界面处会发生声波全反射, 固体内部压强只是分界面处压强的静压传递, 并不是疏密交替的声压, 即不存在声波传播, 所以相对于空

^{*} 国家自然科学基金(批准号 50179007)和教育部高校优秀青年教师教学科研奖励计划项目资助的课题.

[†] 通信地址: E-mail: lbyuan@vip.sina.com

气固体的刚度可认为是无穷大.因此,可以把固体散射体假想成与其具有相同密度和纵波速度的液柱,从而可方便地使用平面波展开法求解.本文采用该简化模型,将固/气体系转化为液/气体系.液/气体系中,介质的弹性波方程如下:

$$\rho(\mathbf{r}) \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = \nabla [C_{11}(\mathbf{r}) \nabla \cdot \mathbf{u}] \quad (1)$$

其中, \mathbf{r} 为坐标矢量, $C_{11}(\mathbf{r})$ 为纵弹性常数, $\rho(\mathbf{r})$ 为材料密度, $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ 是与坐标和时间有关的位移矢量.定义标量 $\rho \mathbf{u} = \nabla \Phi$, 方程(1)可以变为如下波动方程:

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

由布洛赫定理(2)式中的 $\Phi(\mathbf{r}, t)$ 可写成如下形式:

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \exp[i(\mathbf{K} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \Phi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) \quad (3)$$

式中波矢 \mathbf{K} 被限制于第一布里渊区(1stBZ), ω 为波的角频率,而 $\Phi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r})$ 为与 $1/C_{11}(\mathbf{r}), 1/\rho(\mathbf{r})$ 具有相同周期的函数,它们都可以展开成二维傅里叶级数,这里统一用 $\zeta(\mathbf{r})$ 来表示上面的量:

$$\zeta(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \zeta_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \quad (4)$$

其中 \mathbf{G} 为二维晶格的倒格矢.

下面我们着重分析如何获得复式格子的傅里叶变换系数 $\zeta_{\mathbf{G}}$:

首先考虑单个‘原子’,其傅里叶系数 $\zeta_{\mathbf{G}}$ 为:

$$\zeta_{\mathbf{G}} = S^{-1} \int d^2 r \zeta(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) = \begin{cases} \zeta_A f + \zeta_B (1-f) = \bar{\zeta} & \mathbf{G} = 0 \\ (\zeta_A - \zeta_B) F(\mathbf{G}) = (\Delta \zeta) F(\mathbf{G}) & \mathbf{G} \neq 0 \end{cases} \quad (5)$$

式中 S 为单胞的面积, f 为填充系数, $F(\mathbf{G})$ 称为结构因子,仅仅与散射体 A 的几何形状有关,而与具体的排列无关.对于横截面为圆形的柱体

$$F(\mathbf{G}) = 2fJ_1(GR) / (GR) \quad (6)$$

式中 R 为圆柱体的半径, J_1 为一阶第一类 Bessel 函数.

根据傅里叶变换的平移特性,如果 $\zeta(\mathbf{r})$ 平移了一个增量 \mathbf{r}_0 ,那么它的傅里叶变换相应要倍乘上一个因子 $e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_0}$,即

$$\zeta(\mathbf{r} + \mathbf{r}_0) \leftrightarrow e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_0} \zeta_{\mathbf{G}} \quad (7)$$

因此,对于基元包含多个‘原子’的复式格子,傅里叶变换可以通过简单的求和来获得:

$$\sum_i \zeta(\mathbf{r} + \mathbf{r}_i) \leftrightarrow \sum_i e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_i} \zeta_{\mathbf{G}} \quad (8)$$

式中 \mathbf{r}_i 为各‘原子’在基元中的位置矢量.

最后(2)式变为

$$\sum_{\mathbf{G}} [\omega^2 C_{11}^{-1} - \rho_{G-G}^{-1} (\mathbf{K} + \mathbf{G}') \cdot (\mathbf{K} + \mathbf{G}')] \Phi_{\mathbf{K}\mathbf{G}} = 0 \quad (9)$$

令波矢 \mathbf{K} 扫描整个不可约布里渊区,求(9)式的本征解后可得到能带结构 $\omega_n(\mathbf{K})$,其中参数 n 为不同能带的标志.

已知晶格常数为 a ,考虑图1和图2所示的几种不同的晶格:

(1) 正方格子,散射体填充系数为 $f = \pi R^2 / a^2$, 并且有 $0 \leq f \leq 78.54\%$;

(2) 三角格子,散射体填充系数为 $f = 2\pi R^2 / \sqrt{3} a^2$, 并且有 $0 \leq f \leq 90.69\%$;

(3) 蜂窝格子,如图2(a)所示,基元中包含两个‘原子’,取两个‘原子’连接线的中心为原点,相应位置矢量分别为 $\mathbf{r}_1 = (a/2, 0), \mathbf{r}_2 = (-a/2, 0)$, 结构因子为 $F_{hc}(\mathbf{G}) = \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_1) F(\mathbf{G})$, 其中 $F(\mathbf{G})$ 由(6)式给出.散射体填充系数为 $f = 4\pi R^2 / 3\sqrt{3} a^2$, 并且有 $0 \leq f \leq 60.46\%$;

(4) Kagome 格子,如图2(b)所示,基元中包含五个‘原子’,将原点取在中心‘原子’处,相应位置矢量分别为 $\mathbf{r}_1 = (0, 0), \mathbf{r}_2 = (a, 0), \mathbf{r}_3 = (-a, 0), \mathbf{r}_4 = (a/2, \sqrt{3}a/2), \mathbf{r}_5 = (-a/2, -\sqrt{3}a/2)$, 则结构因子为 $F_k(\mathbf{G}) = ((1 + \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_2) + \cos(\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_4)) / 3) F(\mathbf{G})$, 其中 $F(\mathbf{G})$ 由(6)式给出.散射体填充系数为 $f = \sqrt{3}\pi R^2 / 2a^2$, 并且有 $0 \leq f \leq 68.02\%$.

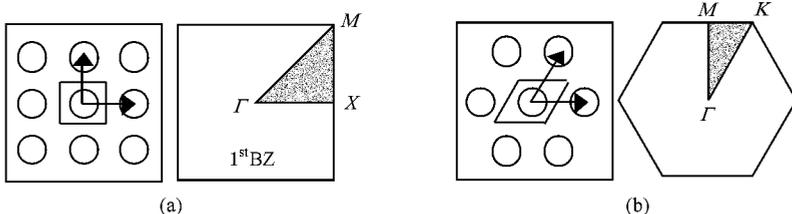


图1 二维正方格子(a)三角格子(b)基元、基矢及布里渊区示意图

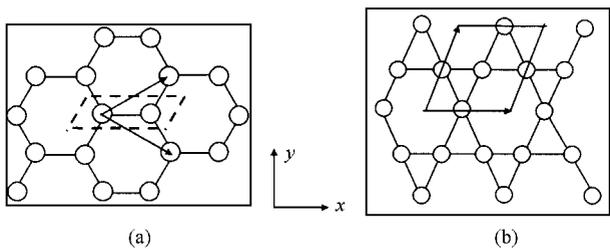


图 2 二维复式蜂窝格子 (a) 和 Kagome 格子 (b) 基元、基矢示意图, 布里渊区同三角格子

3. 数值计算结果及分析

我们以二维铝合金/空气体系作为研究对象, 铝合金 (空气) 的相关物理参数为: $\rho = 2700(1.21) \text{ kg/}$

$\text{m}^3, C_l = 6260(343) \text{ m/s}$. 倒格式 $\mathbf{G} = n_1 \mathbf{b}_1 + n_2 \mathbf{b}_2 = 2\pi(n_1 \mathbf{e}_1 + n_2 \mathbf{e}_2) / a$, 其中 n_1, n_2 为整数. 计算时取 $-10 \leq n_1, n_2 \leq 10$, 用 441 个平面波和 31 个 k 点求解. 此时所得的解有很好的收敛性. 图 3 为二维复式格子的能带结构图, 纵坐标为归一化频率 $\Omega = \omega a / 2\pi C_0$, 其中 $C_0 = \sqrt{\rho^{-1} / \lambda^{-1}}$, 横坐标取布洛赫波矢 $k = Ka / 2\pi$, 计算参数为 $a = 10.5 \text{ mm}, R = 4 \text{ mm}$. 图 3(a) 为复式蜂窝格子, 对应填充系数 $f = 0.351$; 图 3(b) 为复式 Kagome 格子, 对应填充系数 $f = 0.3948$. 为了进行对比分析, 我们还采用相同的计算参数, 计算了简单格子的能带结构 (如图 4 所示). 图 4(a) 为正方形格子, 对应填充系数 $f = 0.4559$; 图 4(b) 为三角格子, 对应填充系数 $f = 0.5265$.

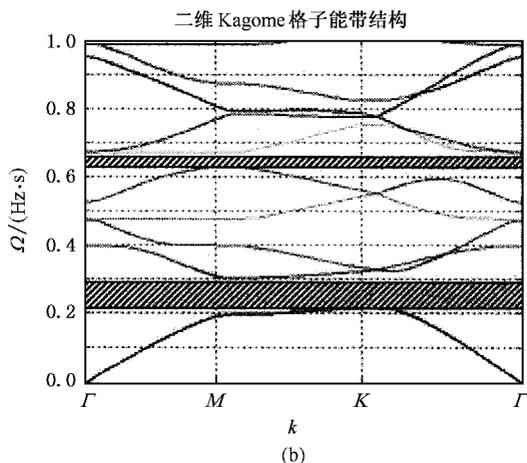
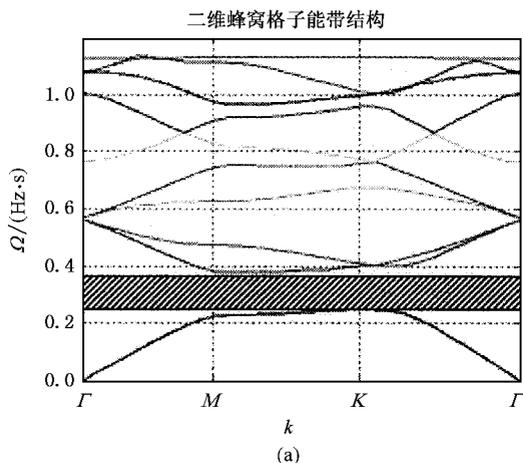


图 3 二维复式格子声子晶体能带结构 (a) 蜂窝格子 (b) Kagome 格子

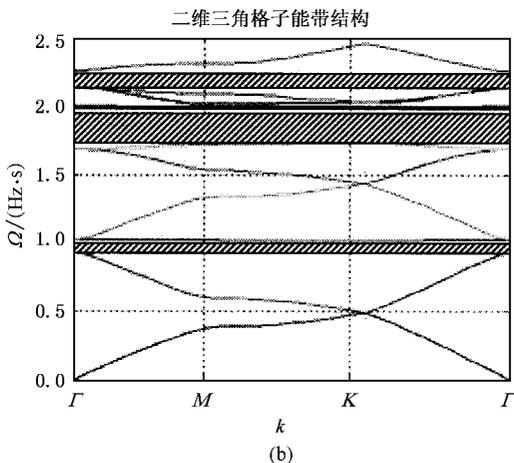
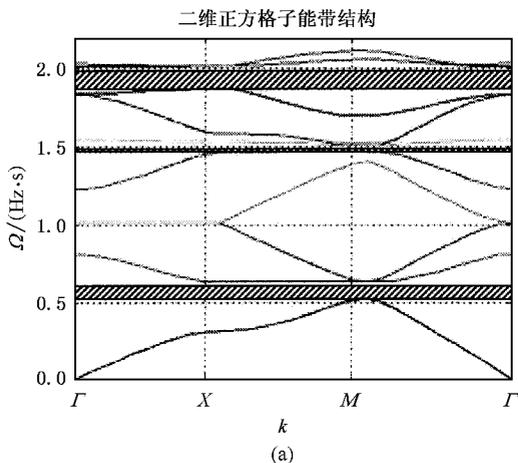


图 4 二维简单格子声子晶体能带结构 (a) 正方形格子; (b) 三角格子



由表 1 可以看出,蜂窝格子的第一条带隙宽度最宽为 $\Delta\Omega = 0.1271$;三角格子最小为 $\Delta\Omega = 0.0849$. 比较各晶格结构第一条带隙的归一化中心频率,发

现复式蜂窝格子和复式 Kagome 格子带隙的归一化中心频率低于正方格子和三角格子. 说明与简单格子相比,复式格子的带隙出现在频率相对较低的位置.

表 1 $a = 10.5\text{mm}$, $R = 4\text{mm}$ 各晶格第一条带隙情况对比

晶格结构	蜂窝格子	Kagome 格子	正方格子	三角格子
填充系数 f	0.351	0.3948	0.4559	0.5265
第一条带隙宽度 $\Delta\Omega$ (Hz/s)	0.1271	0.0858	0.1053	0.0849
第一条带隙归一化中心频率 (Hz/s)	0.3124	0.2609	0.5778	0.9795

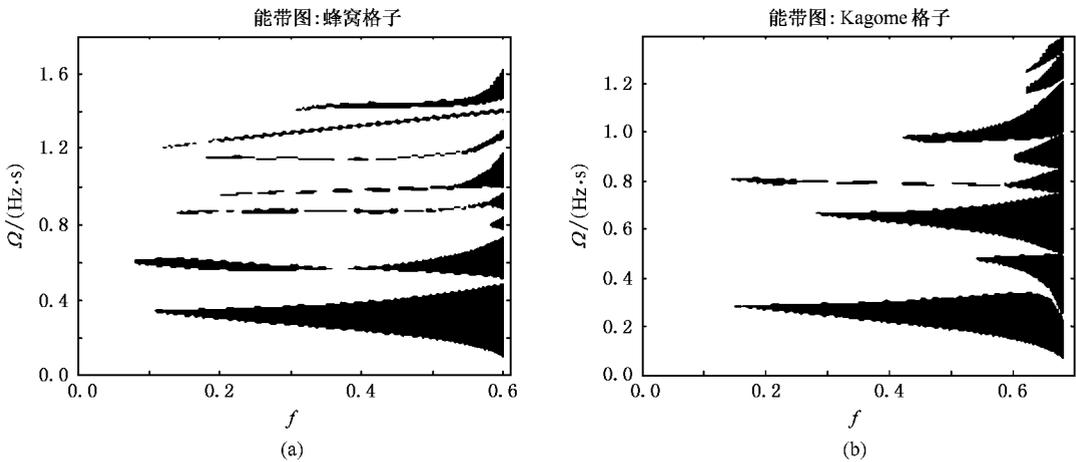


图 5 二维复式格子声子晶体带隙分布图 (a)蜂窝格子 (b)Kagome 格子

图 5 给出了复式格子的带隙分布图,它反映了频率最低的 15 个能带间带隙的分布情况. 其中图 5 (a) & (b) 分别为复式蜂窝格子和 Kagome 格子的情况. 而对于正方格子和三角格子对应的情形,其带隙分布由图 6 (a) & (b) 分别给出. 从中可以发现,对复式蜂窝格子而言,在 $f = 0.062\text{--}0.6046$ 时均有带隙

出现,并且在 $f = 0.5747$ 时带隙数目达到最大为 8 条;对复式 Kagome 格子而言,在 $f = 0.125\text{--}0.6802$ 时均存在带隙,并且在 $f = 0.601$ 时出现的带隙最多为 8 条;而对简单正方格子而言,带隙在 $f = 0.2552\text{--}0.7854$ 之间存在,在 $f = 0.753$ 时存在带隙最多为 6 条;对简单三角格子而言,带隙在 $f =$

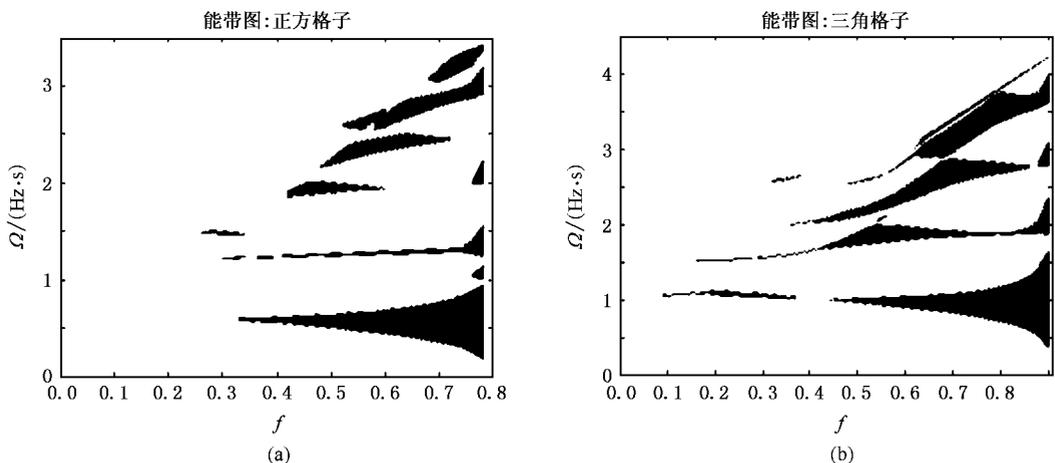


图 6 二维简单格子声子晶体带隙分布图 (a)正方格子;(b)三角格子

0.073—0.9069 之间出现,并且最多可出现 5 条.观察图 5 和图 6 中各晶格结构的第一条带隙,可以看出除 Kagome 格子外,其它格子带隙的下边带频率均随着 f 的增大单调减小,而带隙的上边带频率、带隙宽度均是随着 f 的增大单调增大. Kagome 格子的下边带频率也是随着 f 的增大单调减小,但上边带频率随着 f 的增大先逐渐增大后减小,在 $f = 0.612$ 时达到最大值.

图 7 为各晶格第一条带隙宽度 $\Delta\Omega$ 随填充系数 f 的变化曲线,标记为菱形、圆形、正方形和三角形的曲线分别代表蜂窝格子、Kagome 格子、正方格子和三角格子.复式蜂窝格子、正方格子和三角格子的带隙宽度都是随填充系数的增大单调增大,并且在最大填充系数处获得最大的带隙宽度,对复式蜂窝格子最大值为 $\Delta\Omega = 0.4054$;对简单正方格子最大值为 $\Delta\Omega = 0.8237$;对简单三角格子最大值为 $\Delta\Omega = 1.5001$.而复式 Kagome 格子最大值不在最大填充系数处,在 $f = 0.6515$ 处 $\Delta\Omega = 0.2153$.可见,三角格子可以获得最大的带隙宽度.比较各晶格在不同填充系数处的带隙宽度,发现在 $f = 0.091—0.6046$ 的范围内,复式蜂窝格子带隙宽度大于正方格子和三角格子,说明填充系数在此变化范围内,将声子晶体排列为复式蜂窝格子要优于排列为简单格子.

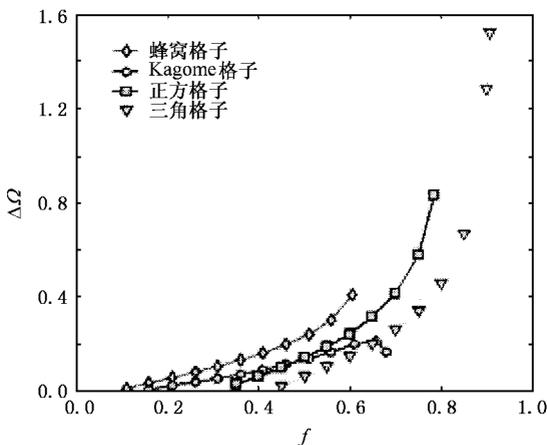


图 7 各晶格结构第一条带隙宽度 $\Delta\Omega$ 随填充系数 f 的变化曲线

4. 结 论

本文对比简单正方格子和简单三角格子,研究了将二维铝合金/空气复合体系声子晶体排列为复式蜂窝格子和复式 Kagome 格子时的能带结构.结果表明,与简单格子相比,复式格子的能带结构存在以下特性:1) 带隙出现在频率相对较低的位置.2) 前 15 条能带中复式格子的带隙分布相对比较密集,最多有 8 条带隙.3) 与简单晶格的情况相同,复式蜂窝格子第一条带隙的下边带频率随着 f 的增大单调减小,而带隙的上边带频率、带隙宽度随着 f 的增大单调增大,并且在最大填充系数处带隙宽度达到最大值.复式 Kagome 格子的变化规律也类似,只是上边带频率随着 f 的增大先逐渐增大,在 $f = 0.612$ 达到最大而后开始减小,相应,带隙宽度的最大值也不在最大填充系数处,而是在 $f = 0.6515$ 处.其中三角格子的最大带隙宽度可达 $\Delta\Omega = 1.5001$,而 Kagome 格子的最大带隙宽度仅为三角格子的 1/7 左右,是所有晶格结构中最小的.

4) 在 $f = 0.091—0.6046$ 的范围内,复式蜂窝格子第一条带隙宽度大于正方格子和三角格子.说明填充系数在此变化范围内,将声子晶体排列为复式蜂窝格子要优于排列为简单格子.

5) 在散射体半径 R 、填充系数 f 一定时,设三角格子的晶格常数为 a_t ,则正方格子 $a_s = 0.931a_t$,复式蜂窝格子 $a_{hc} = 0.816a_t$,复式 Kagome 格子 $a_k = 0.866a_t$.说明在散射体半径 R 一定时,若要获得相同的填充系数,复式格子的晶格常数要小于简单格子,即复式格子声子晶体的尺寸小于简单格子声子晶体.以三角格子 $a_t = 10\text{cm}$ 为例,则复式蜂窝格子 $a_{hc} = 8.16\text{cm}$.尺寸的减小使得复式格子在实验和实际应用中更具优势.

上述结论对实际声子晶体的设计具有一定的参考意义.

[1] Sigalas M M and Economou E N 1992 *J. Sound and Vibration* **158** 337
 [2] Kushwaha M S, Halevi P et al 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 2022
 [3] Martinez-Sala R et al 1995 *Nature* **378** 241
 [4] Wu F G, Liu Z Y et al 2002 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **35** 162

[5] Wu F G, Liu Z Y et al 2002 *Sol. Stat. Commun.* **123** 239
 [6] Cao Y J, Liu Z Y and Wu F G 2004 *Phys. Lett. A* **327** 247
 [7] Yukihiko Tanaka and Shin-ichiro Tamura 2002 *Phys. B* **316** 237
 [8] Caballero D and Sa' nchez-Dehesa J 2001 *Phys. Rev. B* **64** 064303
 [9] Kuang W M, Hou Z L and Liu Y Y 2004 *Phys. Lett. A* **332** 481

- [10] Zhang X , Liu Z Y , Wu F G *et al* 2003 *Phys. Lett. A* **317** 144
- [11] Qi G J , Yang S L *et al* 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 668 (in Chinese)
[齐共金、杨盛良等 2003 物理学报 **52** 668]
- [12] Qi G J , Yang S L *et al* 2003 *J. National University Defence Technology* **25** 103 (in Chinese) [齐共金、杨盛良等 2003 国防科技大学学报 **25** 103]
- [13] 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]
- [14] Miyashita T and Inoue C 2001 *Jpn. J. Appl. Phys.* **40** 3488
- [15] Sigalas M M 1997 *J. Acoust. Soc. Am.* **101** 1256
- [16] Sigalas M M 1998 *J. Appl. Phys.* **85** 3026
- [17] Wu F G , Liu Z Y *et al* 2001 *Phys. Lett. A* **292** 198
- [18] Zhang X , Liu Z Y *et al* 2004 *Sol. Stat. Commun.* **130** 67
- [19] Khelif A , Deymier P A *et al* 2003 *J. Appl. Phys.* **94** 1308
- [20] Vasseur J O , Deymier P A *et al* 2002 *Phys. Rev. E* **65** 056608
- [21] Zhao H G , Han X Y *et al* 2004 *J. Materials Science & Engineering* **22** 68 (in Chinese) [赵宏刚、韩小云等 2004 材料科学与工程学报 **22** 68]
- [22] Zhao H G , Liu Y Z *et al* 2004 *J. National University Defence Technology* **4** 77 (in Chinese) [赵宏刚、刘耀宗等 2004 国防科技大学学报 **4** 77]
- [23] Miyashita T 2002 *Jpn. J. Appl. Phys.* **41** 3170
- [24] Liu Z Y , Chan C T *et al* 2000 *Phys. Rev. B* **62** 2446
- [25] Cervera F , Sanchis L *et al* 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 023902
- [26] Diez A , Kakarantzas G *et al* 2000 *Appl. Phys. Lett.* **76** 3481
- [27] Goffaux C , Maseri F *et al* 2003 *Appl. Phys. Lett.* **83** 281

Characteristics of the band structure in two-dimensional phononic crystals with complex lattices^{*}

Zhao Fang Yuan Li-Bo[†]

(Department of Physics , Harbin Engineering University , Harbin 150001 , China)

(Received 14 January 2005 ; revised manuscript received 21 February 2005)

Abstract

The band structure of two-dimensional phononic crystals with complex lattices is analyzed using the plane-wave algorithm in this paper. Phononic crystals composed of two-dimensional arrays of periodic aluminium alloy cylinders in air are calculated. Band structures of two types of complex lattices , the honeycomb and the Kagome lattices , are presented. The band structures of complex lattices and simple lattices are compared. It is concluded that compared with simple lattices , the band-gap of complex lattices are located at lower frequency fields. When the filling fraction is between 0.091 and 0.6046 , the complex lattices have larger band gaps and gain an advantage over simple lattices. In addition , the gap map is introduced to illustrate the influences of the filling fraction on the number , the width and the limit frequency of the band-gap.

Keywords : phononic crystal , complex lattice , band-gap , plane wave-algorithm

PACC : 0340K , 6320D , 7115B , 8160H

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50179007) and the Teaching and Research Award Program for Outstanding Young Professors in Higher Education Institute MOE , China , to Harbin Engineering University.

[†] Corresponding author. E-mail : lbyuan@vip.sina.com