

# 三组元声子晶体中的缺陷态<sup>\*</sup>

李晓春<sup>†</sup> 易秀英 肖清武 梁宏宇

(中南大学物理科学与技术学院,长沙 410083)

(2005 年 10 月 8 日收到,2005 年 10 月 31 日收到修改稿)

运用基于平面波的超元胞方法,研究作为缺陷引入的第三组元材料(四氯化碳、水)对二维二组元声子晶体(水/水银、四氯化碳/水银)带结构的影响.结果表明,二组元声子晶体在引入第三组元点缺陷/线缺陷后,在原来的带结构中会出现缺陷态/带,原带隙的位置、宽度变化不大,缺陷态/带频率主要受第三组元材料物性参数的影响,这些缺陷态都是局域化的.因此,在具有宽带隙的二组元体系中引入适当的第三组元点缺陷/线缺陷,让缺陷态/带频率落在二组元体系的带隙中,就可以形成特殊的滤声态/波导态.声子晶体的这一特性对于声波/弹性波的传播和新的声学应用具有重要意义.

关键词:声子晶体,三组元,点缺陷,线缺陷

PACC:4320,6320,7155

## 1. 引 言

近年来,经典波在周期性复合介质中传播的研究极其活跃<sup>[1-16]</sup>,并把具有弹性波禁带的周期性结构功能材料称为声子晶体<sup>[1]</sup>.类似于电子在固体中的运动,弹性波在声子晶体中传播时,也会产生所谓的“能带”结构.在声子晶体的带隙中,弹性波或声波不能传播.因此,声子晶体在隔声、隔振、军事隐身方面有着重要的应用,可用来制作声滤波器、声波导、声分离器等.同时,声子晶体的许多应用是基于缺陷的,对于缺陷态研究<sup>[2-13]</sup>,更是引起了人们广泛的注意.

目前,有关声子晶体缺陷态方面的工作已有所报道.其中,文献[9-11]研究了由圆柱或方柱水/水银组成的点缺陷和线缺陷的情况;文献[12,13]研究了在圆柱水/水银结构中由于空腔分子的耦合特性所形成的点缺陷,以及不同形状线缺陷的情况.而有关于由三组元所组成的二维声子晶体的研究主要集中在镀层方面<sup>[11-16]</sup>.

本文运用基于平面波的超元胞方法,研究了作为缺陷引入的第三组元材料(四氯化碳、水)对二维二组元声子晶体(水/水银、四氯化碳/水银)带结构

的影响.液体/液体体系中弹性波运动方程为

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

其中  $P$  为压强,计算时,超胞大小取为  $7 \times 7$ ,插入体为方柱,按正方形排列,且填充率为 0.36,其他的物理参数分别为水的密度  $\rho_{\text{H}_2\text{O}} = 1.0 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$ ,速度  $C_{\text{H}_2\text{O}} = 1.48 \times 10^3 \text{ m/s}$ ;水银的密度  $\rho_{\text{Hg}} = 13.5 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$ ,速度  $C_{\text{Hg}} = 1.45 \times 10^3 \text{ m/s}$ ;四氯化碳的密度  $\rho_{\text{CCl}_4} = 1.595 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$ ,速度  $C_{\text{CCl}_4} = 0.938 \times 10^3 \text{ m/s}$ .

## 2. 二组元水/水银和四氯化碳/水银体系的缺陷结构

图 1 给出了二维二组元声子晶体结构截面示意图.插入体方柱  $A$  以正方形排列插入基体  $B$ (水银)中. $A$  代表水或四氯化碳方柱,分别构成水/水银或四氯化碳/水银声子晶体.空腔点缺陷是通过移除中央行插入体形成的,移除中央行插入体则形成空腔线缺陷.

图 2 给出了水/水银和四氯化碳/水银两体系中的空腔点缺陷、空腔线缺陷以及完整体系的带结构.图 2(a)右图表明,水/水银完整体系存在一个较大的完全带隙,其频率范围为 0.2894 至 0.7613.其空腔

<sup>\*</sup> 湖南省自然科学基金(批准号 D4JJ3079)资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: lxc4805@yahoo.com.cn

点缺陷结构在最低完全带隙中出现了两个点缺陷态,频率分别为 0.5198 和 0.7405,且后者是二重简并的(见图 3(a)左图).带隙中的缺陷态可以用来滤声,构造滤波器.水/水银空腔线缺陷结构中(图 3(a)中图),由于相邻点缺陷之间的耦合作用,点缺陷的两个缺陷态扩展为两个缺陷带,较低的缺陷带频率从 0.3751 变化到 0.5877,较高的缺陷带频率则从 0.6222 变化到 0.7520<sup>[12,13]</sup>,这些缺陷态都应该表现出波导态的特征.

类似地,图 3(b)给出了四氯化碳/水银体系中空腔点缺陷、空腔线缺陷和完整体系的带结构.完整体

系中,最低完全带隙的频率宽度从 0.2250 变化到 0.521(图 3(b)右图).对应点缺陷结构中,在最低完全带隙中出现一个频率为 0.4731 的缺陷态(图 3(b)左图),在线缺陷结构中,出现频率范围从 0.3526 到 0.5162 的缺陷带(图 3(b)中图).与水/水银体系相比,尽管基体相同,但由于插入体不同,四氯化碳/水银体系所得到的带隙宽度要窄,缺陷带的频率位置也相应要低些.由此可见,声子晶体的带隙宽度和中心频率、缺陷带的频率等与体系的物质组成关系是十分密切的,这种密切关系在引入第三组元缺陷时表现将更为明显.

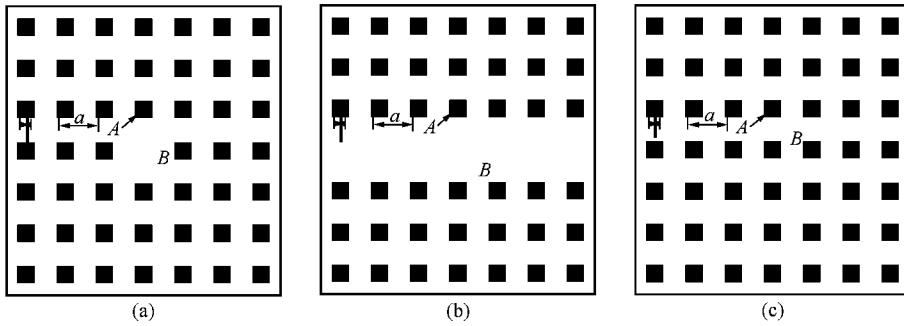


图 1 二组元体系结构截面示意图(A 代表水或四氯化碳方柱,B 为基体水银,l 为方柱的边长,a 为晶格常数,方柱的填充率  $f = l^2/a^2 = 0.36$ ) (a) 空腔点缺陷 (b) 空腔线缺陷 (c) 完整结构

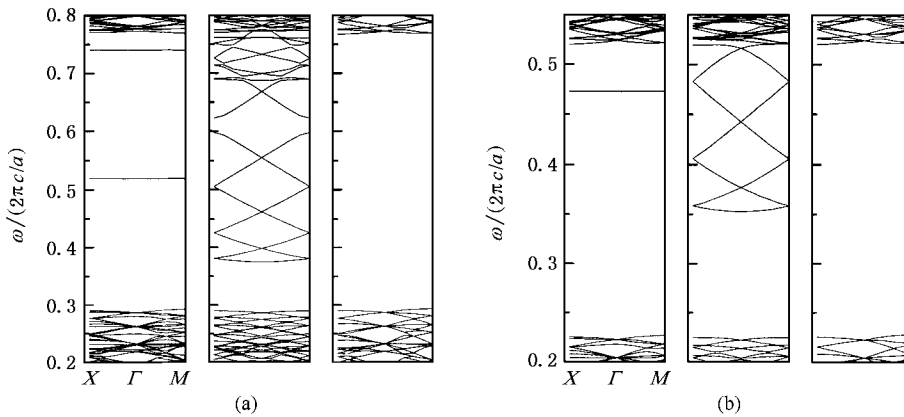


图 2 二组元体系带结构图(其中  $\omega$  为频率,单位为  $2\pi c/a$ ,c 为声波在水银中的传播速度) (a) 水/水银体系 (b) 四氯化碳/水银体系.左图:空腔点缺陷;中图:空腔线缺陷;右图:完整结构

图 3 是与图 2 相对应体系中部分缺陷态  $\Gamma$  点处的压强幅度分布图.图 3(a)为水/水银体系中空腔点缺陷态的压强幅度分布图,图中表明,在缺陷柱位置出现了 s 型点缺陷态(左图)和 p 型点缺陷态(中图和右图),它们都是局域化的,而水/水银体系中部

分线缺陷态的压强幅度分布则都是很好的波导态(如图 3(b)).图 3(c)(d)为四氯化碳/水银体系中空腔缺陷态的压强幅度分布图,空腔点缺陷在最低带隙中仅出现 s 型缺陷态(见图 3(c)),线缺陷则表现出了良好的波导态的特征(见图 3(d)).

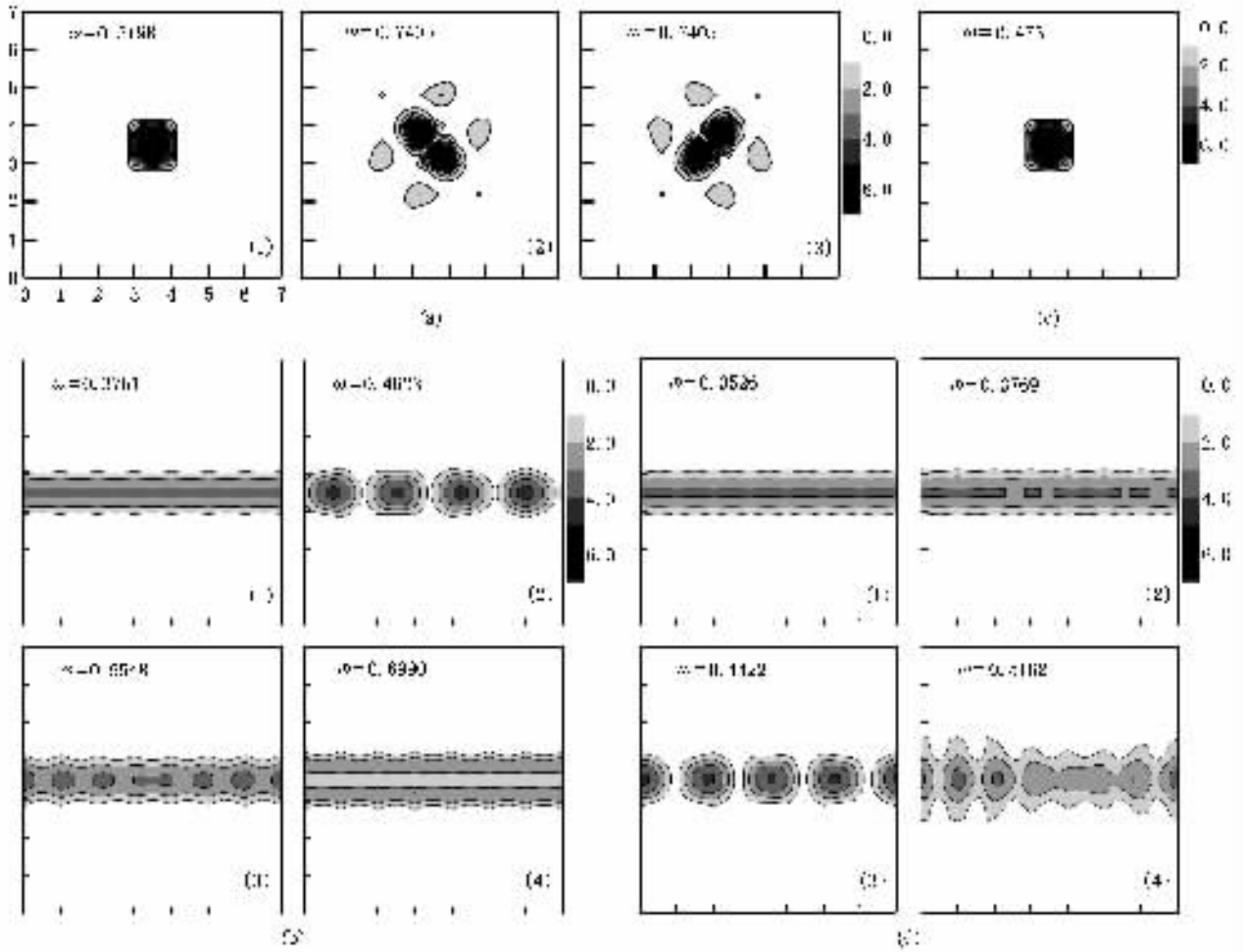


图 3 与图 2 相对应结构中缺陷带  $\Gamma$  点处的压强幅度分布图

改变填充率的大小<sup>[11,12]</sup>,缺陷态的频率会随之发生改变,但缺陷态依然具有以上的幅度分布特征.由此可知,缺陷态的形成主要取决于体系中材料的组合情况,尽管基体材料一致,但当插入体材料不同时,所形成的缺陷带的数目、频率位置以及态的分布都存在有一定的差异.

### 3. 第三组元缺陷态

图 4 给出了三组元体系截面示意图.第三组元,即水/水银体系中的四氯化碳方柱和四氯化碳/水银体系中的水方柱分别取代原插入体,形成第三组元的点缺陷或线缺陷结构.第三组元插入体的形状和单胞填充率与原插入体完全相同,排列方式也相同,只是材料不同.对于这种结构的研究,可以明显看出第三组元的物性参数对缺陷态的影响.

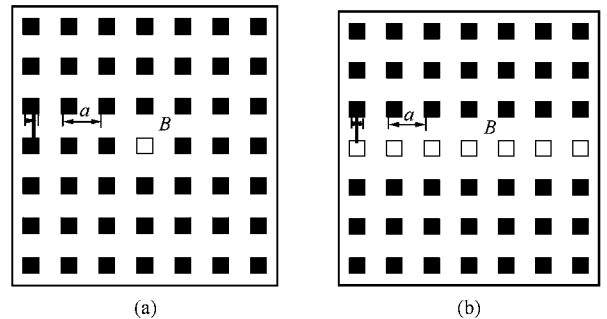


图 4 三组元体系截面示意图(■代表正常插入体(水或四氯化碳方柱),□代表第三组元(四氯化碳或水方柱), $B$  为基体水银, $l$  为方柱的边长, $a$  为晶格常数,方柱的填充率  $f = l^2/a^2 = 0.36$ ) (a)点缺陷 (b)线缺陷

#### 3.1. 四氯化碳-水/水银体系中的点缺陷和线缺陷

图 5 是四氯化碳-水/水银三组元体系中点缺陷和线缺陷的带结构图.在点缺陷的带结构中(如图 5

(a))所形成的带隙宽度与图 2(a)右图中存在的完全带隙的宽度基本是相同的,只是在带隙中存在一个频率为 0.5703 的缺陷态,且这个缺陷态是二重简并的,且缺陷态的频率比图 2(a)左图中的空腔点缺陷态频率要低,可见,这个缺陷态应该是由第三组元四氯化碳形成的缺陷态。

在四氯化碳形成的线缺陷结构中,由于相邻点缺陷之间的耦合作用,点缺陷态扩展为频率从 0.5433 变化到 0.6003 的线缺陷带(见图 5(b)).与图 2(a)中图中的空腔线缺陷相比,四氯化碳缺陷带的频率宽度明显要窄.水/水银体系中的四氯化碳线缺陷的缺陷态频率与四氯化碳/水银体系中最低带隙的上边(见图 2(b))带频率位置相近,但所形成态的幅度场分布却具有完全不同的特征.四氯化碳/水银体系中最低带隙的上边带频率态的幅度场分布是随机的、广域的,而水/水银体系中四氯化碳线缺陷态是局域的(后述的幅度场分布将说明这一点),这也说明水/水银体系中第三组元四氯化碳的特征更趋向于缺陷的特征。

图 6 是与图 5 相对应体系中部分缺陷态在  $\Gamma$  点处的压强幅度分布图.图 6(a)为四氯化碳点缺陷态的压强幅度分布图,发现都局限在四氯化碳缺陷柱位置上,具有 p 型态的特征,态的长轴方向分别在 (1,1)和 (1,-1)方向,它们都是很好的局域态.图 6(b)则为四氯化碳线缺陷态的压强幅度分布图,它们也具有很好的局域化特征,详细分析图 6(b)中所有的缺陷态,发现它们都是沿着四氯化碳线缺陷位置

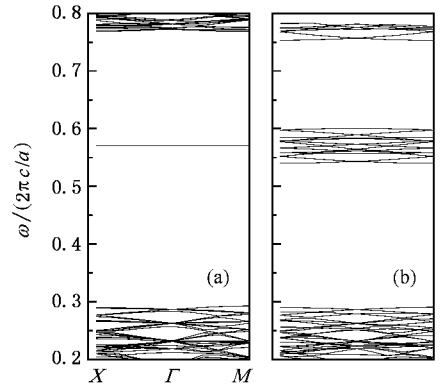


图 5 四氯化碳-水/水银体系带结构图(其中  $\omega$  为频率,单位为  $2\pi c/a$ ,  $c$  为声波在水银中的传播速度) (a) 四氯化碳点缺陷; (b) 四氯化碳线缺陷

局域化的,因此可以用作声波导.水/水银体系中,作为第三组元的四氯化碳线缺陷态的局域化是明显区别于四氯化碳/水银体系中最低带隙上边带频率态的幅度场的随机性和广域分布.这正是水/水银体系中,第三组元四氯化碳作为缺陷的特征。

可见,三组元体系中的缺陷态/带受第三组元材料的影响较大,改变第三组元的物性参数,缺陷态的频率和带的宽度也会随之改变。

### 3.2. 水-四氯化碳/水银体系中的点缺陷和线缺陷

作为比较,我们进一步讨论了水-四氯化碳/水银体系,其中水柱是作为第三组元引入到四氯化碳/水银体系中的,构造的方式和有关参数同上。

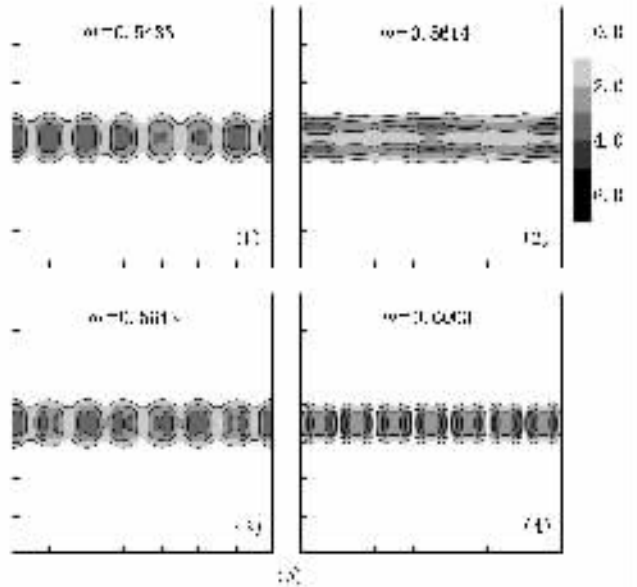
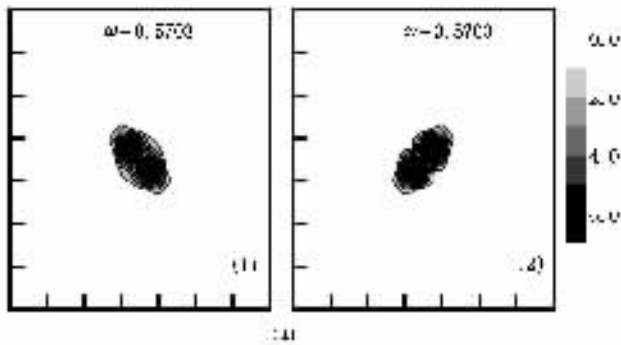


图 6 与图 5 相对应结构中的部分缺陷态  $\Gamma$  点处的压强幅度分布图

图 7 是三组元水-四氯化碳/水银体系中点缺陷和线缺陷的带结构图.从图 7 中可以看出,最低带隙的宽度与图 2(b)中的一致,但第三组元水柱所形成的缺陷态/带的频率位置都靠近原四氯化碳/水银体

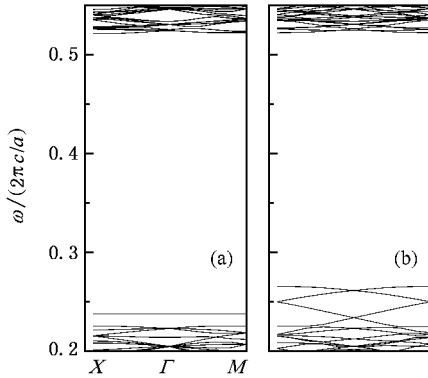


图 7 三组元水-四氯化碳/水银体系中的点缺陷和线缺陷的带结构图

系的最低带隙下边带频率,点缺陷态的频率为 0.237 $\alpha$  (如图 7(a)) 线缺陷带的频率从 0.2337 变化到 0.261 $\alpha$  (如图 7(b)), 这比图 2(b)中的空腔缺陷态/带的频率明显要低一些.可见,第三组元材料的物性参数对缺陷态/带的频率影响是很大的.

图 8 是与图 7 相对应结构的部分缺陷态  $\Gamma$  点处的压强幅度分布图.图 8(a)对应点缺陷情况,压强幅度分布局域在点缺陷柱位置上,具有 s 型分布特征.图 8(b)对应线缺陷情况,压强幅度分布局域在线缺陷柱位置上,可视为点缺陷态耦合而成.

因此,对于同样的三种材料,当它们的组合方式不同时,所得到的带隙位置、宽度、缺陷态/带的频率以及压强幅度分布情况都将存在很大的差异.完整晶体中的空腔线缺陷可以用作波导,在完整晶体中引入第三组元实柱线缺陷也可以实现波导结构,但第三组元的可选择性和缺陷态频率可调性较之空腔线缺陷更具应用上的方便性.

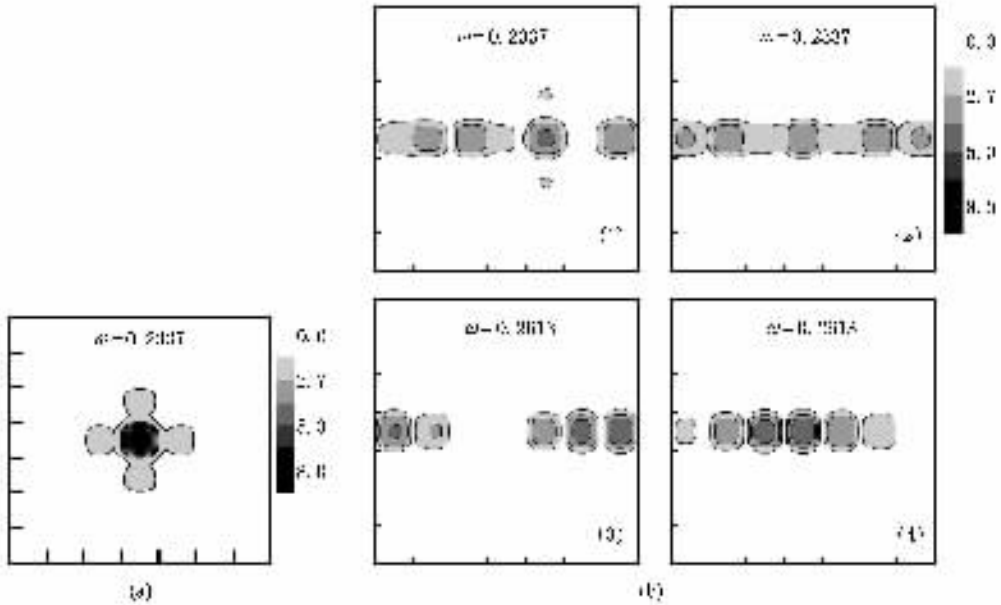


图 8 与图 7 相对应结构的部分缺陷态  $\Gamma$  点处压强幅度分布

## 4. 结 论

本文运用基于平面波的超元胞方法,研究了作为缺陷引入的第三组元材料(四氯化碳、水)对二维二组元声子晶体(水/水银,四氯化碳/水银)带结构的影响.研究表明,无论二组元还是三组元,当正常插入体和基体的组合相同时,无论第三组元缺

陷的材料如何,其带隙的频率宽度都是稳定的,即稳定的二组元体系提供了一个稳定的带隙平台;在二组元体系中引入第三组元材料后,第三组元作为缺陷的特征是明显的,第三组元的缺陷态频率受材料的物性参数影响较大,改变第三组元的物性参数,缺陷态的频率和带的宽度也会随之改变;无论是空腔缺陷结构还是第三组元实柱缺陷结构,其本征缺陷态都是局域化的,因此,其点缺陷可用作声滤波,线缺陷可用作声波导;对于同样的三种材料,当它们的

组合方式不同时, 所得到的带隙位置、带隙宽度、缺陷态/带频率及压强幅度分布情况都将存在很大的差异.

总之, 构成声子晶体缺陷结构的方式是多样的, 影响声子晶体缺陷态的因素也是多样的. 本文通过在二组元体系中引入适当的第三组元材料形成了缺

陷结构, 并讨论了第三组元材料物性对缺陷态的影响. 其他如几何构型、填充率等对缺陷态的影响也是可预期的. 选择不同的第三组元缺陷材料形成了对声子晶体缺陷态的不同设计, 声子晶体的这一特性对于声波/弹性波的传播和新的声学应用具有重要意义.

- [ 1 ] Kushwaha M S , Halevi P , Dobrzynski L , Djafari-Rouhani B 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 2022
- [ 2 ] Khelif A , Djafari-Rouhani B , Vasseur J O , Deymier P A , Lambin Ph , Dobrzynski L 2002 *Phys. Rev. B* **65** 174308
- [ 3 ] Sigalas M M 1998 *J. Appl. Phys.* **84** 3026
- [ 4 ] Kafesaki M , Sigalas M M , Garcia N 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 4044
- [ 5 ] Sigalas M M 1997 *J. Acoust. Soc. Am.* **101** 1256
- [ 6 ] Kafesaki M , Sigalas M M , Garcm H N 2001 *Phys. B* **296** 190
- [ 7 ] Khelif A , Djafari-Rouhani B , Vasseur J O , Deymier P A 2003 *Phys. Rev. B* **68** 024302
- [ 8 ] Wu F G , Liu Y Y 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1434 ( in Chinese ) 吴福根、刘有延 2002 *物理学报* **51** 1434 ]
- [ 9 ] Wu F G , Liu Z Y , Liu Y Y 2004 *Phys. Rev. E* **69** 066609
- [ 10 ] Wu F G , Hou Z L , Liu Z Y , Liu Y Y 2001 *Phys. Lett. A* **292** 198
- [ 11 ] Zhang X , Liu Z Y , Liu Y Y , Wu F G. 2004 *Sol. Stat. Commun.* **130** 67
- [ 12 ] Li X C , Liu Z Y 2005 *Sol. Stat. Commun.* **133** 397
- [ 13 ] Li X C , Liu Z Y 2005 *Phys. Lett. A* **338** 413
- [ 14 ] Liu Z Y , Zhang X X , Mao Y W , Zhu Y Y , Yang Z Y , Chan C T , Sheng P 2000 *Science* **289** 1734
- [ 15 ] Zhang X , Liu Y Y , Wu F G , Liu Z Y 2003 *Phys. Lett. A* **317** 144
- [ 16 ] Lambin Ph , Khelif A , Vasseur J O , Dobrzynski L , Djafari-Rouhani B 2001 *Phys. Rev. E* **63** 066605

## Defect states in three-component phononic crystal \*

Li Xiao-Chun<sup>†</sup> Yi Xiu-Ying Xiao Qing-Wu Liang Hong-Yu

( School of Physics Science and Technology , Central South University , Changsha 410083 , China )

( Received 8 October 2005 ; revised manuscript received 31 October 2005 )

### Abstract

Using the supercell plane wave method , we investigated the effect of the third component material as defects modifying band structure of two-dimension two-component phononic crystal ( PC ). It is shown that adding the third material as point defect/linear defects in the two-component PC , defect states/bands can appear in the original band gap whose position and width would have only minor changes. The frequency of the defect states/bands are affected by the third material 's characteristics ; and all the defect states are localized. Therefore , adding proper third material as point/linear defects to the two-component system with wide band gap where defect states/bands will fall in , some special filtered/guided states will be formed. This property has important significance in acoustic /elastic wave propagating and new acoustic applications.

**Keywords :** phononic crystals , three-component , point defect , linear defect

**PACC :** 4320 , 6320 , 7155

\* Project supported by the Natural Science Foundation of Hunan Province , China ( Grant No. 04JJ3079 ).

<sup>†</sup> E-mail : lxc4805@yahoo.com.cn