

二维组合宽带隙材料的研究*

李晓春† 梁宏宇 易秀英 肖清武 赵保星

(中南大学物理科学与技术学院,长沙 410083)

(2006 年 8 月 30 日收到,2006 年 9 月 13 日收到修改稿)

运用 FDTD(时域有限差分法)研究了弹性波/声波通过二维正方形排列的铁/水声子晶体的传播特性.发现铁/水声子晶体在高频范围存在完全带隙,软包层铁/水声子晶体在低频范围出现共振带隙,它们分别对应于不同的带隙形成机理.通过铁/水声子晶体和软包层铁/水声子晶体的组合,可以得到从高频到低频的组合宽带隙结构,从而达到在更宽频范围内控制弹性波传播的目的,而且通过调整包层的厚度、铁芯的大小、以及填充率等结构参数,可以有效地调节组合宽带隙的频率结构.

关键词:声子晶体,局域共振,组合结构,宽带隙

PACC:4320,6320

1. 引言

近年来,随着半导体、光子晶体以及与其相关的材料和器件的深层研究和成功应用^[1,2],人们对弹性常数呈周期性排列的人工复合材料——声子晶体产生了浓厚的兴趣^[3-6].因为结构的周期性,声波和弹性波在声子晶体中传播时会形成与传统晶体和光子晶体类似的带结构,只有频率位于导带中的声波或弹性波才能在声子晶体中传播,位于禁带中的波则不能传播.声子晶体的这些性质使得其在新型隔振降噪材料,超声换能器,声波导,声透镜,定向声源等方面有潜在的重大应用价值.同时,由于声子晶体构造简易、实验观察方便,它的研究可望对光子晶体的特性以及一些经典的物理问题,如局域化问题,提供更好的诠释.

一般来讲,二组元完整结构声子晶体的带隙频率位置都比较高,而带有软包裹层的三组元完整结构声子晶体的带隙在低频区,它们分别对应于不同的产生机理:前者为 Bragg 散射,后者为局域共振^[7-16].目前,基于单一机理的研究比较多,而对于组合结构的研究则相对较少.本文试图通过组合结构的研究对声子晶体带隙产生的两种机理提供进一步解释,并提出一种基于组合结构的宽带隙构造

模式.

2. 理 论

FDTD 是一种直接在时域和空域上把波动偏微分方程离散为差分方程,继而采用数值计算方法,求解波传播过程中各个离散点的所有振动参数与时间的函数关系.

对于一个局域各向同性的介质而言,弹性波波方程为

$$\frac{\partial^2 u^i}{\partial t^2} = \frac{1}{\rho} \left\{ \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial u^i}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u^i}{\partial x_j} + \frac{\partial u^j}{\partial x_i} \right) \right] \right\}, \quad (1)$$

式中 $u(\mathbf{r})$ 是位移矢量, $\lambda(\mathbf{r})$ 和 $\mu(\mathbf{r})$ 是 Lamé 系数, $\rho(\mathbf{r})$ 是介质的质量密度,且纵波波速 $C_l = \sqrt{(\lambda + 2\mu)/\rho}$, 横波波速 $C_t = \sqrt{\mu/\rho}$.

二维声子晶体中,设波在垂直于 Z 轴的 XY 平面传播,这时弹性波波方程可以分解成相互独立的两个方程组,分别称为 XY 模和 Z 模^[17].文中首先用速度矢量 (v_x, v_y) 替代位移矢量 (u_x, u_y) ,将 XY 模转化成速度矢量表示的一阶双曲型波动方程组^[18],然后令 $x = i\Delta x$, $y = j\Delta y$, $t = k\Delta t$,接着再差分,即可得到二维各向同性介质交错网格 FDTD 算法的递推公式

* 湖南省自然科学基金(批准号 04JJ3079)资助的课题.

† E-mail: lxc4805@yahoo.com.cn

$$\begin{aligned} \rho^{i,j} \frac{v_x^{i,j;k+1/2} - v_x^{i,j;k-1/2}}{\Delta t} &= \frac{\tau_{xx}^{i+1/2,j;k} - \tau_{xx}^{i-1/2,j;k}}{\Delta x} + \frac{\tau_{xy}^{i,j+1/2;k} - \tau_{xy}^{i,j-1/2;k}}{\Delta y}, \\ \rho^{i+1/2,j+1/2} \frac{v_y^{i+1/2,j+1/2;k+1/2} - v_x^{i+1/2,j+1/2;k-1/2}}{\Delta t} &= \frac{\tau_{xy}^{i+1,j+1/2;k} - \tau_{xy}^{i,j+1/2;k}}{\Delta x} + \frac{\tau_{yy}^{i+1/2,j+1;k} - \tau_{yy}^{i+1/2,j;k}}{\Delta y}, \\ \frac{\tau_{xx}^{i+1/2,j;k+1} - \tau_{xx}^{i+1/2,j;k}}{\Delta t} &= (\lambda + 2\mu)^{i+1/2,j} \frac{v_x^{i+1,j;k+1/2} - v_x^{i,j;k+1/2}}{\Delta x} + \lambda^{i+1/2,j} \frac{v_y^{i+1/2,j+1/2;k+1/2} - v_y^{i+1/2,j-1/2;k+1/2}}{\Delta y}, \\ \frac{\tau_{yy}^{i+1/2,j;k+1} - \tau_{yy}^{i+1/2,j;k}}{\Delta t} &= (\lambda + 2\mu)^{i+1/2,j} \frac{v_y^{i+1/2,j+1/2;k+1/2} - v_y^{i+1/2,j-1/2;k+1/2}}{\Delta y} + \lambda^{i+1/2,j} \frac{v_x^{i+1,j;k+1/2} - v_x^{i,j;k+1/2}}{\Delta x}, \\ \frac{\tau_{xy}^{i,j+1/2;k+1} - \tau_{xy}^{i,j+1/2;k}}{\Delta t} &= \mu^{i,j+1/2} \left[\frac{v_y^{i+1/2,j+1/2;k+1/2} - v_y^{i-1/2,j+1/2;k+1/2}}{\Delta x} + \frac{v_x^{i,j+1,k+1/2} - v_x^{i,j,k+1/2}}{\Delta y} \right]. \end{aligned}$$

上面的递推公式中, v_x, v_y 和 $\tau_{xx}, \tau_{yy}, \tau_{xy}$ 在时间上交错分步, 各分量在空间上又交错分布, 构成了交错的空间和时间网格^[18].

用 FDTD 算法对声子晶体实际模型进行求解时, 只能在一个有限的空间区域内进行计算, 要模拟无限周期结构, 需要对所计算的区域边界进行边界处理, 本文对于传播方向边界引入了吸收边界条件, 垂直方向引入周期性边界条件.

3. 结果与讨论

图 1 给出了 5×5 二维声子晶体结构截面示意图, 圆柱以正方形排列方式插入基体水中, 晶格常数

$a = 5 \text{ mm}$, 包有包裹层的圆柱是在铁圆柱外面包了一层软橡胶. 其中, 图 1(a) 为铁圆柱构成的完整结构, 图 1(b) 为包层铁圆柱构成的完整结构, 图 1(c), 图 1(d) 为它们的混合结构. 图 1(c) 中, 中央铁圆柱被包层铁圆柱取代, 形成包层铁柱线缺陷结构; 图 1(d) 中, 中央包层铁圆柱被铁圆柱取代, 形成图 1(c) 的反结构, 即铁柱线缺陷结构. 计算模型所用到的材料的物理参数分别为铁的质量密度 $\rho = 7.78 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$, 横波波速 $c_t = 3226 \text{ m/s}$ 和纵波波速 $c_l = 5825 \text{ m/s}$, 水的质量密度 $\rho = 1.0 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$, 纵波波速 $c_l = 1490 \text{ m/s}$, 软橡胶的质量密度 $\rho = 1.3 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$, 横波波速 $c_t = 5 \text{ m/s}$, 纵波波速 $c_l = 33 \text{ m/s}$.

图 2 给出了图 1 相应结构的传播系数-频率图.

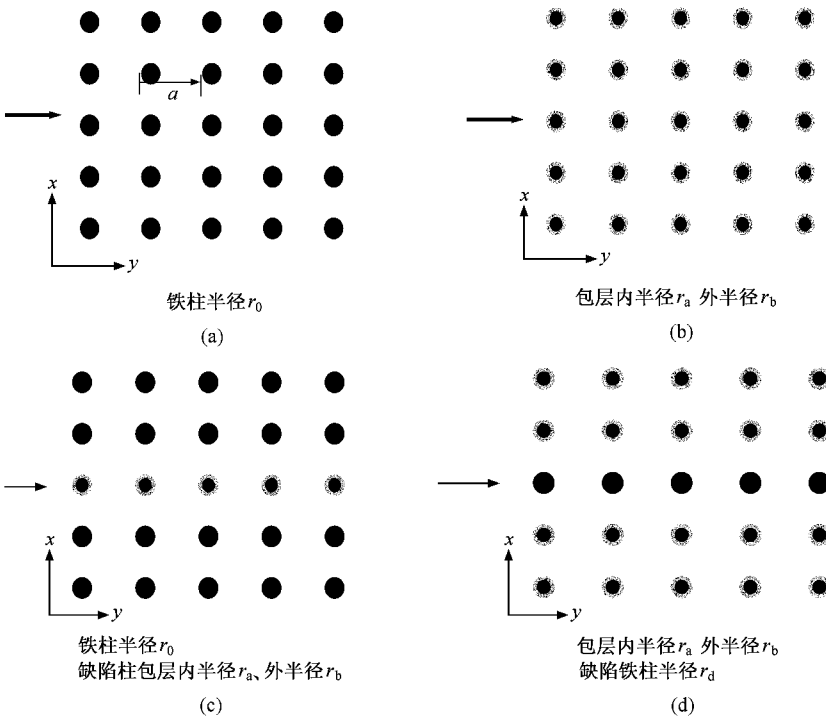


图 1 二维铁/水声子晶体横截面图 (a)完整结构 (b)包层完整结构 (c)包层铁柱线缺陷结构 (d)铁柱线缺陷结构



其中图 2(a) 是铁/水完整结构的传播系数-频率图, 带隙在高频区(100—200 kHz)出现, 很显然, 这是由于 Bragg 散射引起的带隙, 这种带隙的产生与结构的晶格常数、周期性排列方式、填充率以及波的传播速度等因素有关. 图 2(b) 是包层铁/水完整结构的传播系数-频率图, 在低频范围内出现两个带隙, 一个频率位于 5—35 kHz, 另一个位于 36—103 kHz, 在更高的频率区域内未见有带隙. 这种低频带隙应该是基于局域共振机理的, 带隙的产生主要与散射单元中的材料有关(铁芯与包层), 而与柱体的排列方式无关. 图 1(a) 中央铁柱被包层铁柱取代后形成了图 1(c) 的结构, 相当于在原完整结构中引入了包层铁柱线缺陷, 这时, 图 1(c) 的带结构是在原完整结构的高频带隙基础上, 增加了一低频带隙, 频率在

5—35 kHz 范围内(见图 2(c)), 即图 1(c) 中铁柱和包层铁柱的组合结构导致了它们对应的带结构的组合. 因此, 基于结构的组合, 提供了一种拓宽带隙的方法. 进一步的计算表明: 若图 1(a) 中两行或更多行铁柱被包层铁柱取代, 由于局域共振态之间的耦合, 低频带隙还会展宽, 从而有可能实现高、低频带隙的衔接, 形成宽带隙材料. 这一猜想在计算图 1(d) 结构的传播系数-频率图后得到印证. 图 1(d) 是在以包层铁柱为主的结构中引入了铁柱线缺陷, 图 2(d) 即为图 1(d) 结构的带隙图. 从图 2(d) 中可以看出, 除了 170 kHz 附近的铁柱缺陷引入的缺陷态外, 在 5—200 kHz 范围内基本视为一宽带隙, 出现了带隙的更大组合趋势. 至于图 2(d) 中 200 kHz 以上带隙可视为原高频带隙在引入铁柱缺陷后的正常变化.

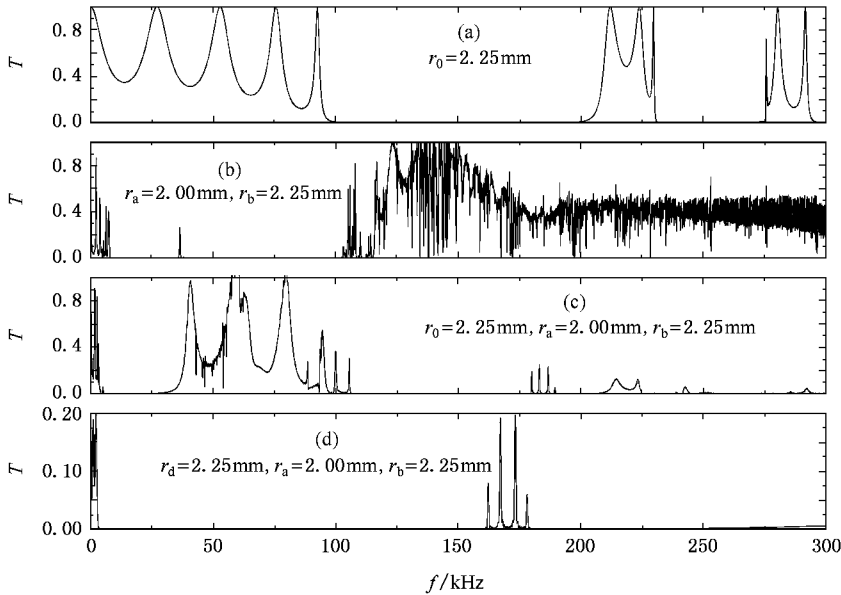


图 2 晶体的传播系数-频率图 (a) 铁/水完整结构 (b) 包层铁/水完整结构 (c) 包层铁柱线缺陷结构 (d) 铁柱线缺陷结构

为了进一步探讨组合带隙的变化规律, 本文继续计算了结构参数对带隙的影响.

首先, 保持图 1(c) 中原铁柱的大小不变, 中央包层铁柱中橡胶和铁芯的相对半径改变 (r_a 变大或变小), 但保证包层缺陷柱的大小与其他铁柱大小一样, 即 $r_b = r_0 = 2.25$ mm, 因此单胞填充率均为 $F = 0.64$. 图 3(1) 给出了 r_a 变化过程中带隙的变化情况. 比较图 3(1)(a)(b)(c) 发现: 随着 r_a 的变化, 高频区带隙基本不变, 这与高频带隙的产生机理是相符的, 因为三种情况中, 所有散射柱的大小 r_0 或 r_b 没变, 所以带隙也没有变化; 从曲线 a 到 c, 随着

r_a 的变小, 包层厚度 ($c_d = r_b - r_a$) 变厚, 低频带隙变宽, 具体表现为带隙的高频边沿基本不变, 低频边沿向低频方向移动, 整个低频带隙变宽(见图 3(2)), 这也与低频带隙产生的机理相符, 软包层厚度的改变会导致局域共振频率的改变.

其次, 保持图 1(c) 中原铁柱的大小不变 ($r_0 = 2.25$ mm), 作为缺陷的中央包层铁柱中铁芯半径 r_a 也不变 ($r_a = 2$ mm), 改变包裹层厚度 c_d , 因此, 缺陷胞填充率也随之改变. 图 4 给出了带结构变化图. 图 4(a) 表明: 低频区带隙随着包裹层厚度的增加略为变宽, 具体表现为带隙的高频边沿基本不动, 低频边

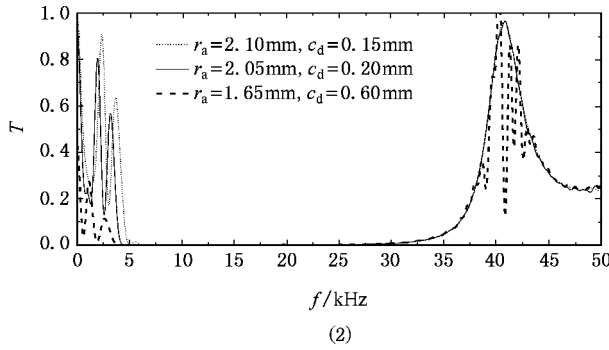
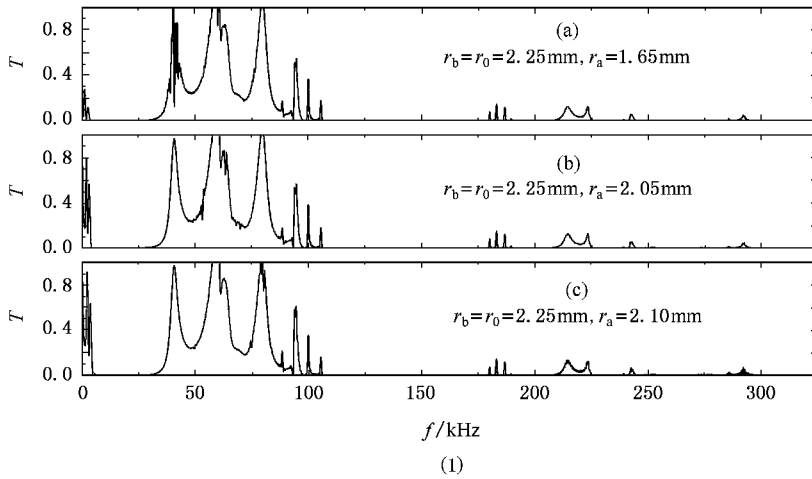


图3 包层铁柱线缺陷结构传播系数-频率图. 填充率不变(包层/铁芯相对改变)(1) (a)为 $r_0 = 2.25 \text{ mm}$, $r_a = 1.65 \text{ mm}$, $c_d = 0.6 \text{ mm}$ (b)为 $r_0 = 2.25 \text{ mm}$, $r_a = 2.05 \text{ mm}$, $c_d = 0.20 \text{ mm}$ (c) $r_0 = 2.25 \text{ mm}$, $r_a = 2.10 \text{ mm}$, $c_d = 0.15 \text{ mm}$. (2) 低频区的对比图

沿向低频方向略有移动,变化规律与图3(2)相同;图4(b)表明:高频区的带隙宽度基本不变,但缺陷

态的位置随着缺陷柱的填充率的变大而向更高频方

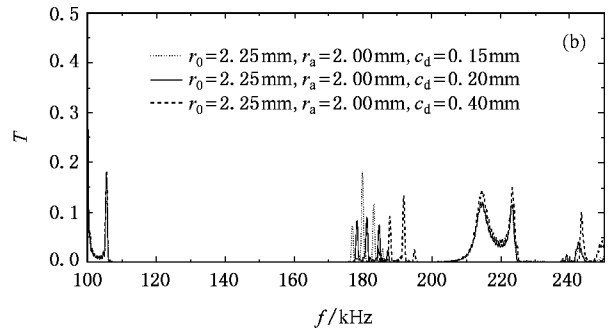
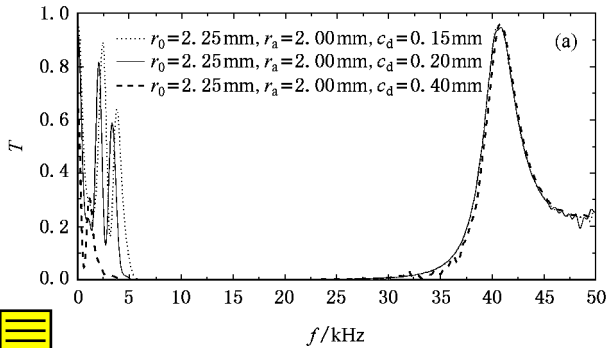


图4 包层铁柱线缺陷结构传播系数-频率图,铁芯不变,包层、填充率改变 (a)低频区 (b)高频区

为了和上面的工作做比较,保持图1(c)结构中的原铁柱大小不变,缺陷柱的包裹层厚度也不变($c_d = 0.25 \text{ mm}$)。改变铁芯半径 r_a , 缺陷胞填充率也相应改变。计算结果见图5: 低频区带隙随着铁芯半径的增大变宽,具体也表现为:带隙的高频边沿也基本不动,低频边沿向低频方向移动(见图5(a)),这主要

是因为铁芯的半径增大,质量增大,导致共振频率降低,高频区带隙的宽度也基本不变,但缺陷态的位置随着缺陷圆柱的填充率的增加而向更高频方向移动(见图5(b))。

因此,对于铁/水和包层铁/水的组合结构,其带隙也具有原带隙的组合特征,组合带隙受包层和铁

芯的相对厚度调节,而其中铁芯的调节似又优于包层厚度的调节作用.

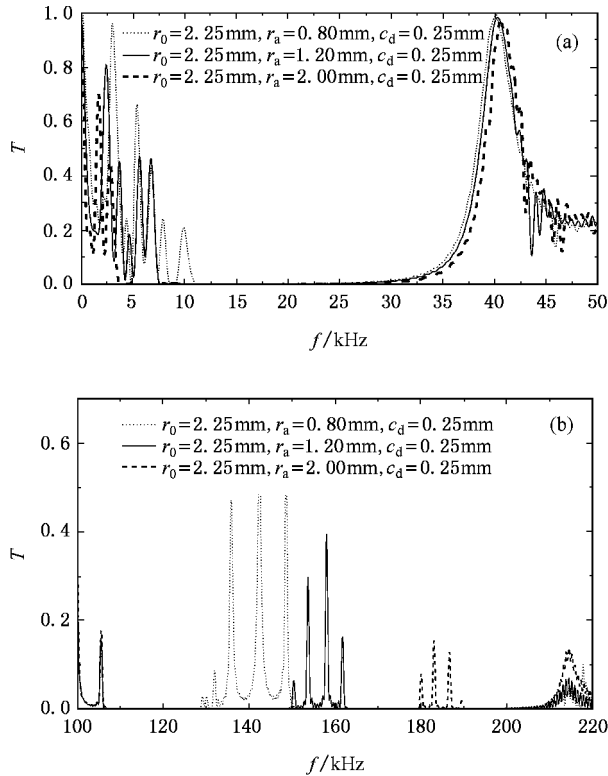


图5 包层铁柱线缺陷结构传播系数-频率图,包层不变,铁芯、填充率改变 (a)低频区 (b)高频区

计算时,在波的传播方向上的传播系数与模型大小密切相关.如果排列的柱数比较少时,波的散射也少,传播系数会更大一些,更有利于波的传播.图6给出了类似图1(c)结构的 5×3 , 5×7 方阵的透射图.文中计算的都是波在晶体结构的 y 方向上传播时的情况,如果波在 x 方向上传播时,每行都有包

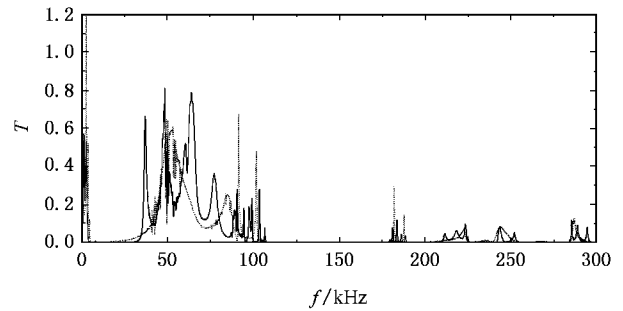


图6 传播系数-频率图(实线是在传播方向上有7排圆柱时的传播系数-频率图虚线是在传播方向上有3排圆柱时的传播系数-频率图)

层铁柱,会产生更宽的带隙,但前者比后者更有利于对组合带隙变化规律的研究.

4. 结 论

本文运用 FDTD 计算了弹性波/声波在铁/水体系中的传播特性,重点研究了含有软包层铁圆柱和没有软包裹层铁圆柱的二维组合结构.研究结果表明,对于铁/水和包层铁/水的组合结构,不仅在高频范围出现带隙,在低频范围内也有带隙.高频带隙主要是由于柱体的 Bragg 散射引起的,而低频带隙与局域共振有关.高频带隙的位置和宽度与插入体的排列方式、填充率等因素密切相关,而低频带隙则与软包层和铁芯的相对结构有关,调整组合结构中包层柱体的数目和包层与铁芯的相对结构参数可以有效地调节组合带隙的宽度.由于组合模式的多样性,人们可以借助结构的组合得到宽带隙材料,而且这种宽带隙是可调的.

[1] Jia Y, Ma B X, Yao Q K, Tang M S 2002 *Chin. Phys.* **11** 58
 [2] Mekis A, Chen J C, Kurland I, Fan S H, Villeneuve P R, Joannopoulos J D 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3787
 [3] Li X C, Liu Z Y 2005 *Phys. Lett. A* **338** 413
 [4] Li X C, Liu Z Y 2005 *Solid State Commun* **133** 397
 [5] Li X C, Liu Z Y, Liang H Y, Xiao Q W 2006 *Chin. Phys. Lett.* **23** 1830
 [6] Ni Q, Cheng J C 2005 *Chin. Phys. Lett.* **22** 2305
 [7] Kafesaki M, Sigalas M M, Garcia N 2001 *Physica B* **296** 190
 [8] Pennec Y, Djafari-Rouhani B, Vasseur J O, Khelif A, Deymier P A 2004 *Phys. Rev. E* **69** 046608

[9] Wang G, Wen X S, Wen J H, Shao L H, Liu Y Z 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 154302
 [10] Zhang X, Liu Y Y, Wu F G, Liu Z Y 2003 *Phys. Lett. A* **317** 144
 [11] Liu Z Y, Zhang X X, Mao Y W, Zhu Y Y, Yang Z Y, Chan C T, Sheng P 2000 *Science* **289** 1734
 [12] Liu Z Y, Chan C T, Sheng P 2006 *Phys. Rev. B* **62** 2446
 [13] Liu Z Y, Chan C T, Sheng P 2002 *Phys. Rev. B* **65** 165116
 [14] Li X C, Yi X Y, Xiao Q W, Liang H Y 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2300 (in Chinese) [李晚春、易秀英、肖清武、梁宏宇 2006 物理学报 **55** 2300]
 [15] Wu F G, Liu Z Y, Liu Y Y 2002 *Phys. Rev. E* **66** 046628

- [16] Wu F G , Liu Y Y 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1434 (in Chinese) 吴福根、刘有延 2006 物理学报 **51** 1434]
- [17] Sigalas M M , Garcia N 1998 *J. Appl. Phys.* **84** 3026
- [18] Wang G , Zhao H G , Wen J H , Han X Y 2004 *Journal of National of Defense Technology* **26** 72 (in Chinese) 王刚、赵宏刚、温激鸿、韩小云 2004 国防科技大学学报 **26** 72]

The study of two-dimensional composite materials with wide band gap^{*}

Li Xiao-Chun[†] Liang Hong-Yu Yi Xiu-Ying Xiao Qing-Wu Zhao Bao-Xing

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

(Received 30 August 2006 ; revised manuscript received 13 September 2006)

Abstract

Using FDTD method , the characteristics of elastic/acoustic wave propagating in two dimensional phononic crystals (PCs) consisting of Fe square arrayed cylinders in water was investigated. The absolute band gap was found in high frequency range for Fe/water structure , and the resonance gap was found in low frequency range for coated Fe/water structure , where the Fe cylinders were softly coated by rubber. These two gaps correspond to different mechanisms. Constructed with these two kinds of PCs , a combined wide gap from high to low frequency can be achieved , so the elastic wave propagating can be prohibited in a wide frequency range. Furthermore , the combined wide band gap can be adjusted effectively through changing the structure parameters , such as the size of Fe core , thickness of coating layer , filling ratio etc .

Keywords : phononic crystal , localized resonance , composite structure , wide band gap

PACC : 4320 , 6320

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

[†] E-mail : lxc4805@yahoo.com.cn