

晶格中心插入体的对称性及取向 对二维声子晶体带隙的影响*

胡家光¹⁾²⁾ 徐文^{1)†} 肖宜明¹⁾ 张丫丫¹⁾

1) (云南大学物理科学技术学院, 昆明 650091)

2) (文山学院数理系, 文山 663000)

(2012年5月17日收到; 2012年6月20日收到修改稿)

以二维钢/气体声子晶体为模型, 采用平面波法研究了圆柱正方及六角晶格中心添加插入体的对称性及取向与带隙的关系, 给出了四方、六方、八方及圆柱插入体结构的带隙分布图及带隙随柱体取向的变化关系图. 发现在低填充率条件下, 插入体的截面形状与晶格类型相同时最有利于能带简并态的分离而获得带隙, 但填充率较高时, 采用高对称性的插入体可以获得最宽的带隙. 正方晶格中心插入体取向对带隙的影响要比在六角晶格中更为显著. 对四方柱正方晶格声子晶体的研究表明, 仅旋转原柱体要比在其中心插入柱体后旋转更容易获得低频宽带隙, 单独运用添加柱体或旋转非圆柱体来降低晶格对称性以获取低频带隙的方法要比同时使用两种方法效果更好. 此外, 从机理上对计算结果进行了解释.

关键词: 声子晶体, 能带结构, 带隙, 平面波法

PACS: 43.40.+s, 61.50.Ah, 61.72.Bb

1 引言

周期性功能材料一直是科学家们感兴趣的研究对象, 从半导体材料器件到光子晶体都已取得了巨大的成就. 近年来, 研究人员又提出了声子晶体的概念. 与光子晶体结构类似, 声子晶体是由不同的弹性材料周期性排列而成的复合功能材料. 理论和实验都已证明, 在适当的条件下, 弹性波在声子晶体中传播时会产生与光子晶体相似的禁带^[1-3], 声子晶体的禁带特性使其在减振降噪及声学功能器件领域有着广阔的应用前景^[4]. 但与光子晶体不同, 电磁波只有横波, 而弹性波在不同介质中传播时偏振状态将有所不同, 在流体中传播时只有纵波, 在固体中传播时既有横波又有纵波, 还有可能存在纵波与横波的耦合. 所以声子晶体带隙的获取及计算更为复杂, 特别是超低频带隙的获取更是成为富

有挑战性的难题.

声子晶体的禁带机理主要有局域共振机理^[5]、惯性放大机理^[6]和布拉格散射机理^[7], 基于不同机理的声子晶体结构和带隙特性完全不同. 局域共振机理虽然可以通过小尺寸结构获得较低的带隙, 但其带隙一般较窄, 而且制备极为复杂. 惯性放大机理可以在小尺寸条件下获得较宽的低频带隙, 但目前还仅限于弹簧振子结构, 如何制作出普通声学材料的声子晶体还存在困难. 对于布拉格散射机理, 为了获得低频带隙, 其晶格常数一般较大, 但其制作简单, 带隙的调控性较强, 而且对于揭示声子晶体中波传播的特殊声学特性具有重要意义, 所以基于布拉格散射机理的声子晶体带隙的产生与调控仍是目前声子晶体研究的重点. 研究发现, 布拉格散射型声子晶体布里渊区对称点的高简并态是获得声子晶体带隙的瓶颈之一, 降低声子晶体的对称性使简并态分立是一种有效的带隙获取

* 国家自然科学基金 (批准号: 10974206) 资助的课题.

† E-mail: ynszjt@126.com

方法. 基于这一思想, 研究人员用多种方法来降低二维声子晶体的对称性, 如旋转非圆柱散射体 [8,9], 采用复式结构等 [10,11]. 近年来, 受光子晶体研究的启发, 研究人员通过在二维声子晶体晶格中再添加另一柱体(插入体)的方式来降低晶格的对称性, 可以明显地增大带隙. 但针对这一方法的研究, 目前还仅限于插入体的位置对带隙的影响 [12,13], 由于在布拉格散射型固/气体系声子晶体中, 带隙主要源于散射体相邻原胞间反射波的同相叠加, 是散射体与晶格结构共同作用的结果, 所以改变插入体的形状和取向, 从机理上看同样可以实现对带隙的调控. 在此基础上, 本文以二维固/气体系声子晶体为模型, 采用平面波法研究了晶格中心插入体的对称性及取向与带隙的关系, 发现插入体的对称性对带隙有较大影响, 当插入体的形状与晶格类型相同

时, 相同填充率下有利于获得最宽的带隙, 而晶格中心是否添加另外的散射体, 取向对带隙的影响明显不同.

2 模型及计算方法

为使计算具有普遍意义, 我们在圆柱正方晶格及六角晶格两种不同的声子晶体结构中, 分别添加四方柱、六方柱、八方柱及圆柱四种不同的柱体, 其横截面对称性依次提高, 如图 1 及图 2 所示. 插入体的位置选择在两种晶格的中心(图 1 中两个虚线圆所在的位置), 因为这个位置容易产生带隙, 又在很大程度上避免简约布里渊区发生变化给计算带来不便 [14].

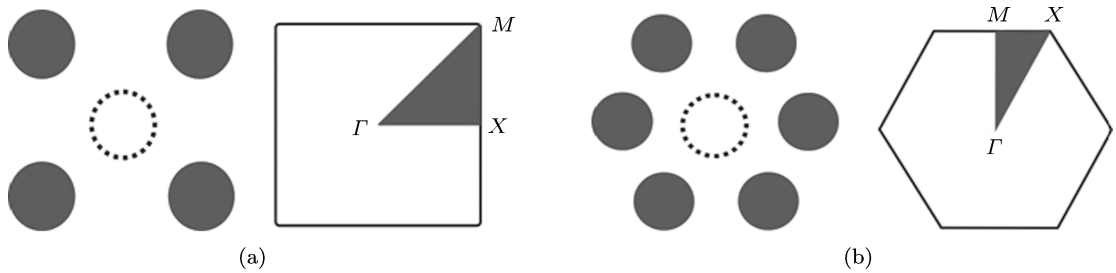


图 1 结构模型 (a) 正方晶格及布里渊区; (b) 六角晶格及布里渊区

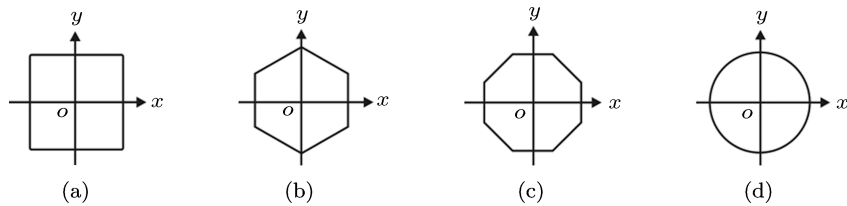


图 2 插入体横截面示意图 (a) 四方柱; (b) 六方柱; (c) 八方柱; (d) 圆柱

文中采用固/气体系声子晶体的等效平面波法进行计算 [11], 为得出能带结构, 需计算方程

$$\sum_{\mathbf{G}} \mathbf{M}^{-1} \mathbf{N} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{G}') = \omega^2 \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{G}), \quad (1)$$

其中 ω 是角频率, 矩阵 \mathbf{M} 及 \mathbf{N} 分别为

$$\mathbf{M}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} = P(\mathbf{G} - \mathbf{G}') (\Delta C_{11}^{-1}) (1 - \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}) + \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \overline{C_{11}^{-1}}, \quad (2)$$

$$\mathbf{N}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} = [P(\mathbf{G} - \mathbf{G}') (\Delta \rho^{-1}) (1 - \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}) + \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \overline{\rho^{-1}}] (\mathbf{k} + \mathbf{G}) (\mathbf{G} + \mathbf{G}'), \quad (3)$$

\mathbf{G} 为倒格矢, \mathbf{k} 为波矢, C_{11} 和 ρ 分别为材料的纵弹性常数和密度, $P(\mathbf{G})$ 为结构系数, 其计算式为

$$P(\mathbf{G}) = S^{-1} \int d^2r e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}, \quad (4)$$

式中 S 为元胞面积, 积分仅在柱体的横截面上进行, 由此可得出四种柱体的结构系数, 这是带隙计算的关键. 求解 (1) 式中矩阵 $\mathbf{M}^{-1}\mathbf{N}$ 的特征值就可得出角频率 ω , 从而画出能带结构 \mathbf{k} -Hz. 文中以钢/空气体系为研究对象, 其物理参数为: $\rho = 7800/1.21 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$, $C_l = 6100/343 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. 晶格常

数 a 取为 10 cm, 为保证收敛性, 取 61 个 k 点 441 个平面波进行计算.

3 结果与讨论

3.1 带隙与插入体对称性的关系

图 3 为圆柱正方晶格中心添加不同柱体

后的带隙分布图, 它反映了频率在 10 kHz 以下的带隙随中心插入体的填充率 F_2 变化的情况, 纵坐标为频率 f , 单位为 kHz, 阴影部分为完全带隙. 未添加柱体时原圆柱体的填充率 F_1 设为 0.3, 保持不变, 在此基础上, 中心四方柱的最大填充率为 0.32, 六方柱为 0.43, 八方柱为 0.52, 圆柱为 0.50. 为便于比较, 横坐标 F_2 的范围均取 0—0.5.

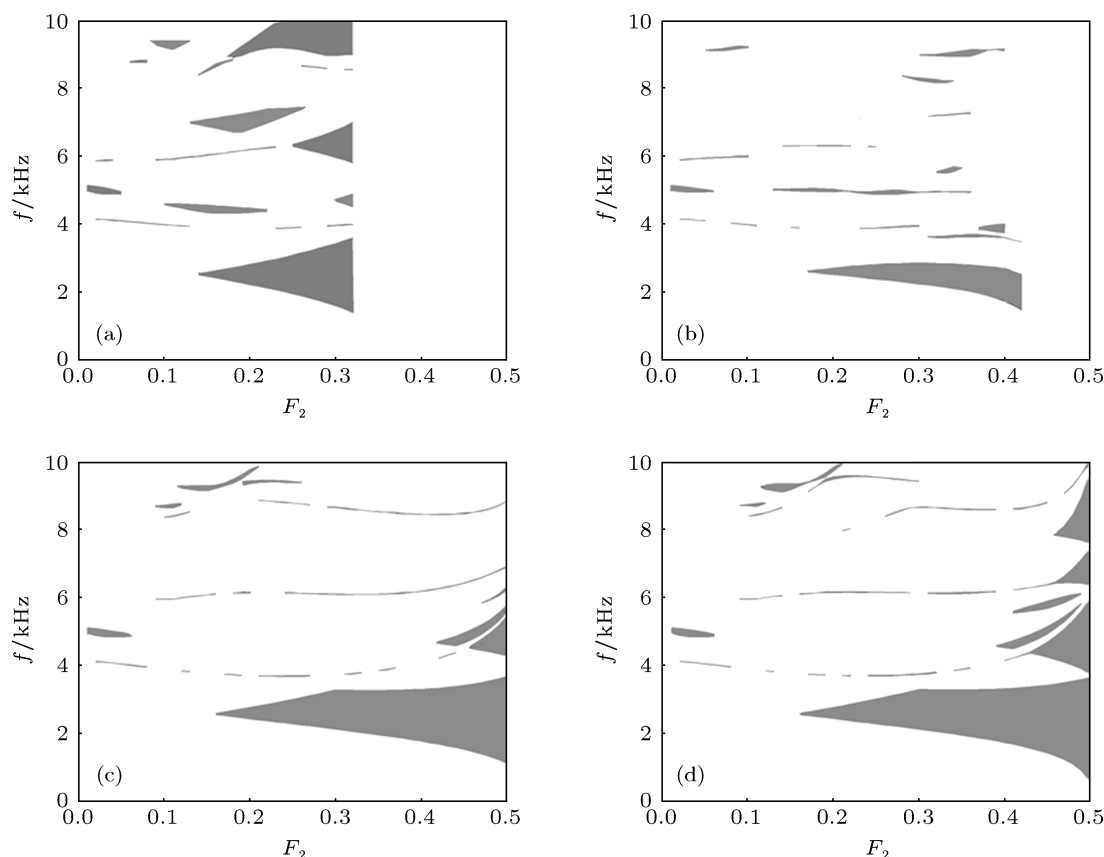


图 3 带隙随晶格中心插入体填充率 F_2 变化的分布图 (a) 插入四方柱; (b) 插入六方柱; (c) 插入八方柱; (d) 插入圆柱

由图 3 可以看出, 不管晶格中心再插入何种柱体, 随着插入体填充率 F_2 的变化, 均容易出现完全带隙, 分布范围最宽的都是第一带隙, 都随着 F_2 的增加而变大, 但其中心频率均较为接近, 说明插入体填充率对第一带隙宽度的影响最为显著, 而对位置的影响较小. 六方柱中除了第一带隙外, 其余带隙都呈较细的带状分布, 八方柱在 F_2 大于 0.43 后增加两个稍宽的带隙分布, 圆柱在 F_2 大于 0.39 后带隙迅速增多变大, 在 F_2 最大时带隙最宽, 但在其余填充率范围内带隙也呈较细的带状分布. 通过对比以上三种结构可以发现, 横截面对称性越高的插

入体有利于获得宽带隙分布, 六角晶格中也有相同的规律. 在研究中, 我们还计算了椭圆柱插入体的对称性对带隙的影响, 也发现椭圆长短半轴长度之比越接近 1 时, 越容易获得带隙. 这一现象的根本原因是由于高对称性的插入体容易实现对波的均匀散射, 其散射面随着填充率的增大而增加, 使得相邻原胞间反射波的同相叠加效应增强, 从而增大带隙.

进一步分析可以发现, 图 3(a) 中的第一带隙范围在相同填充率下要显著宽于其余三种插入体结构的第一带隙分布, F_2 为 0.32 时, 六方柱、八

方柱及圆柱插入体的第一带隙宽度分别为 0.68, 1.21, 1.23 kHz, 而四方柱插入体的第一带隙宽度高达 2.2 kHz, 并且在 F_2 小于 0.32 时, 四方柱中有四个较大的带隙分布区, 其余插入体结构均只有一个大的带隙分布. 图 4(a) 和 (b) 给出了四方及圆柱插入体此时的能带结构. 可以看出, 四方柱结构之所以容易在低填充率下产生带隙, 是由于能带曲线的简并态得到更有效的分离, 能带曲线变得较为平滑, 特别是在 Γ 点及 M 点处的简并态分离最为明显. 说明四方柱插入体更有利于在低填充率下获得较宽的带隙分布, 这对于减小结构尺寸及降低成本具有重要意义. 同时, 我们计算了圆柱六角晶格中心

插入四种柱体时的能带结构, 发现插入六方柱体时最容易产生带隙, 如图 4(c) 和 (d) 所示. 在相同填充率下, 插入六方柱体比插入圆柱体时在低频区多出一条带隙, 在高频区多出三条带隙, 能带简并态分离更明显. 由此可以得出结论, 当插入体的截面形状和晶格类型相同时, 相同填充率条件下, 最有利于能带简并态的分离而获得带隙. 这主要是因为当插入体的截面形状和晶格类型相同时, 晶格中插入体各个散射面所面对的区域完全相同, 波在插入体各面上的散射具有良好的对称性, 与周期性晶格的相互作用更为充分, 进一步增强了同相叠加效应, 从而更容易产生带隙.

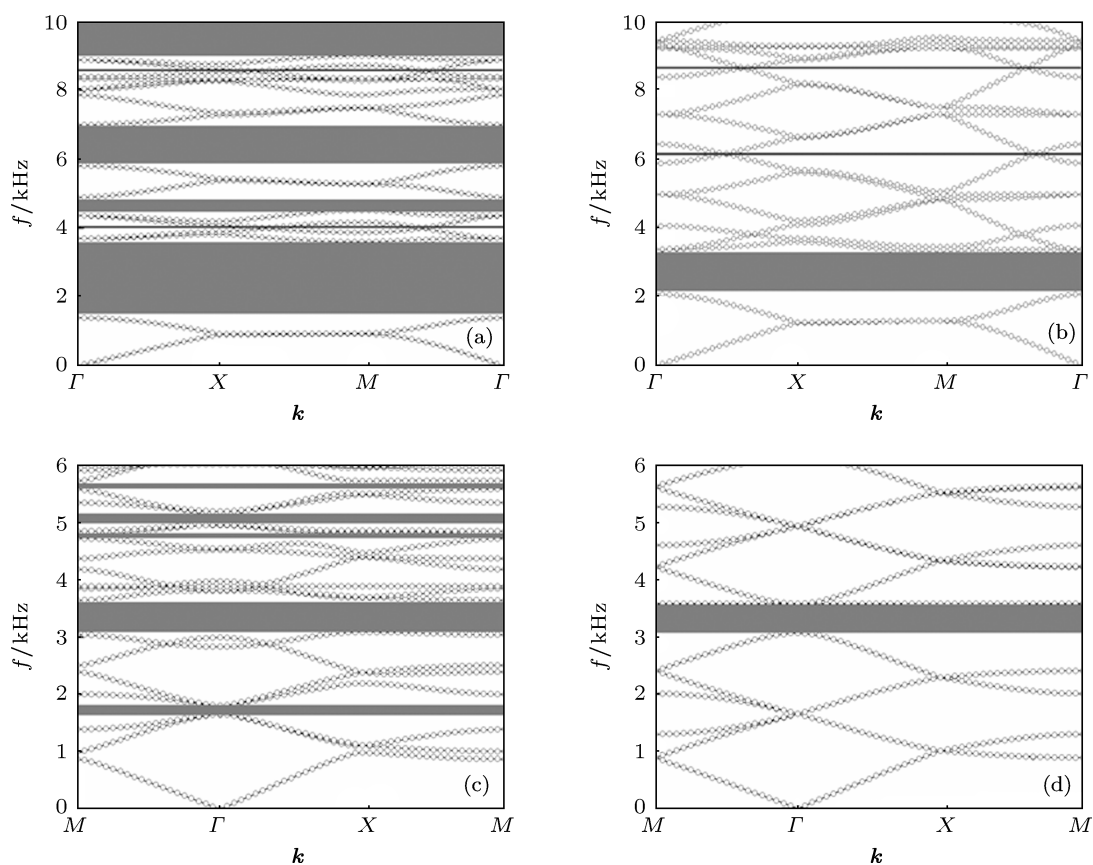


图 4 能带结构 (a) 正方晶格中心插四方柱 ($F_1 = 0.3, F_2 = 0.32$); (b) 正方晶格中心插圆柱 ($F_1 = 0.3, F_2 = 0.32$); (c) 六角晶格中心插六方柱 ($F_1 = 0.4, F_2 = 0.2$); (d) 六角晶格中心插圆柱 ($F_1 = 0.4, F_2 = 0.2$)

3.2 取向与带隙的关系

图 5 给出了圆柱正方晶格中的四方柱插入体及圆柱六角晶格中的六方柱形插入体绕其中心轴旋转时带隙分布的变化情况. 在正方晶格中, 四方插入体的取向对带隙有较大影响, 随着插入体旋转角度的增大, 不同位置的带隙宽度变化明显不同,

第一带隙宽度减小, 第二带隙先增大后减小, 而更高频段区的带隙变化更为多样, 说明插入体的取向能对各频段的带隙进行有效的调控, 以利于获取有针对性的带隙. 但在六角晶格中, 六方插入体的旋转对最低的三条带隙宽度几乎无影响, 最高的两条带隙随旋转角度的增加缓慢变窄, 说明插入体的取向在六角晶格中影响并不显著, 这主要和插入

体的填充率较小有关,因为在研究中我们发现减小六方插入体的填充率更有利于带隙的获取,这和文献 [10] 的结论是相似的.

已有的研究表明,由四方柱(文中称为原方柱)在空气中排列而成正方晶格声子晶体时,带隙随散射体绕其中心轴的旋转角度增加而变宽,第一带隙的变化最为显著,其依据是旋转可以降低晶格的对称性 [8]. 在这里,我们进一步探讨该结构晶格中心再插入四方柱体后旋转效应对第一带隙的影响,中心插入柱体的引入可以使晶格的对称性进一步降低. 从图 6(a) 可以看出,晶格中心插入四方柱后,仅原方柱旋转与插入体和原方柱体同时旋转相比,第一带隙的变化是相同的,两者的上边带基本上是重合的,而同时旋转的下边带要高于仅原方柱旋转时的情况,下边带都随旋转角度的增大而上升,上边带下降,以致带隙变窄,这一现象与晶格中心未添

加柱体时的变化情况完全相反. 此外,仅原方柱旋转时带隙的下边带与无插入时带隙的上边带有较宽范围的重合,所以插入柱体后第一带隙的位置要高于无插入时的情况. 图 6(b) 是原方柱在旋转 0° , 15° 及 30° 后,单独旋转插入体时第一带隙的变化,可以看出,不管原柱体的取向如何,随着插入体的旋转,带隙都是变窄,而且原柱体的旋转角度越大,相同条件下带隙越窄. 这一现象说明通过原柱体旋转的同时引入插入体来进一步降低晶格的对称性,并不能获得更宽的低频带隙,反而不利于低频带隙的获取. 从机理上分析可以知道,插入柱体后旋转,将会使自由空间减小,波在传播时受到更多的散射,破坏性干扰因素增多,波在插入体各面上的散射对称性降低,使得带隙变窄. 所以通过旋转来降低晶格的对称性以获得带隙的方法在复式晶格中并不一定可行,这和已有的结论是不同的.

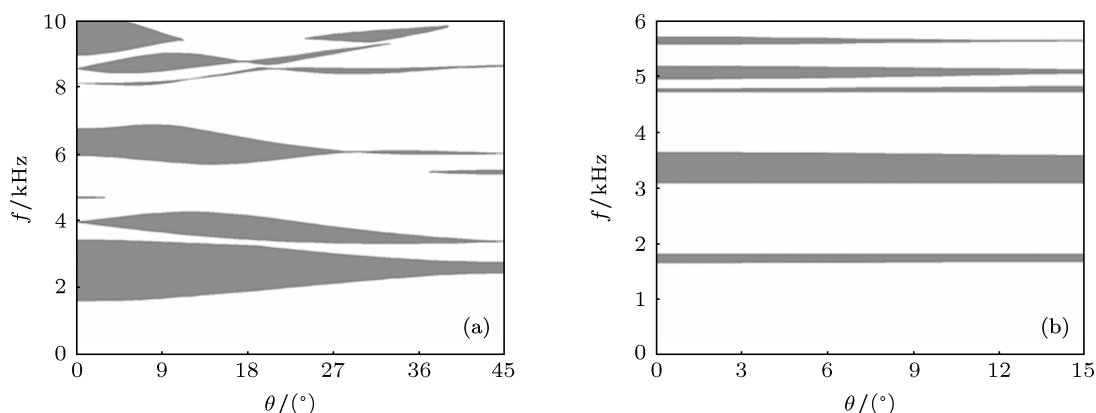


图 5 带隙分布随晶格中心插入体取向的变化 (a) 正方晶格中心插四方柱 ($F_1 = 0.3, F_2 = 0.3$); (b) 六角晶格中心插六方柱 ($F_1 = 0.4, F_2 = 0.2$)

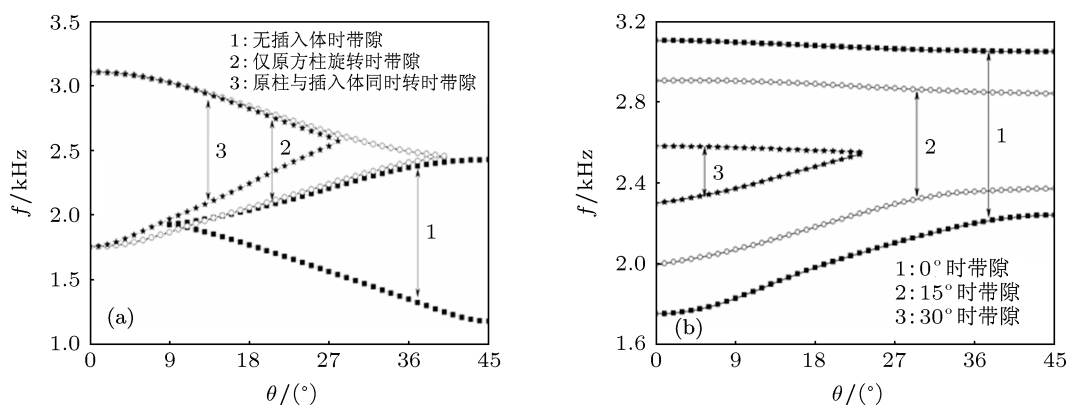


图 6 第一带隙随原柱体及插入体取向的变化 (a) 正方晶格中心未插入柱体时原方柱体填充率 $F = 0.5$, 插入四方柱体后 $F_1 = F_2 = 0.25$; (b) 原方柱体旋转 $0^\circ, 15^\circ$ 及 30° 后, 插入体的取向对第一带隙的影响, 填充率 $F_1 = F_2 = 0.25$

4 结论

本文主要以正方晶格及六角晶格钢/气体系声子晶体为模型,用平面波展开法研究了晶格中心插入体的对称性及取向对带隙的影响.发现在四方晶格中心插入四方柱体时及六角晶格中心插入六方柱体时带隙特性最好,说明当插入体的截面形状和晶格类型相同时,相同填充率条件下,最有利于能带简并态的分离而获得带隙,而横截面对称性越高的插入体有利于在高填充率下获得宽带隙分布.通过改变插入体的取向可以有效地对正方晶格中的带隙进行调控,六角晶格中的带隙对插入体取向的改变不明显.在四方柱正方晶格声子晶体中,我们发现单独旋转插入体及同步旋转插入体和原柱体

时第一带隙的变化规律与无插入体时旋转原方柱的第一带隙变化情况完全相反,位置也要比未插入时偏高,而且晶格中心插入柱体后,原方柱旋转角度越大,带隙越小,说明在旋转原柱体的同时引入插入体虽然能进一步降低晶格的对称性,但并不能获得更宽的低频带隙.这是因为布拉格散射型固/气体系声子晶体的带隙主要是由散射体的散射和结构周期性共同作用的结果,在降低结构周期性对称性的同时,必须还要考虑散射体的作用,特别是插入体的对称性和取向对带隙的影响,从而获得更有针对性的带隙.在实际应用中,应针对晶格的具体形状来选择插入体的类型.为了获得频率尽可能低的带隙,在正方晶格中,不添加另外的柱体,而仅旋转原柱体更为理想.

- [1] Sigalas M M, Economou E N 1992 *J. Sound Vib.* **158** 377
- [2] Kushwaha M S, Halevi P, Dobrzynski L, Djafari-Rouhani B 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 2022
- [3] Martinez-Sala R, Sancho J, Sanchez J V, Gomez V, Llinares J, Meseguer F 1995 *Nature* **378** 241
- [4] Zhang R Y, Jiang G S, Wang Z Q, Lü Y D 2006 *Technical Acoustics* **25** 35 (in Chinese) [张荣英, 姜根山, 王璋奇, 吕亚东 2006 声学技术 **25** 35]
- [5] Liu Z Y, Zhang X X, Mao Y W, Zhu Y Y, Yang Z Y, Chan C T, Sheng P 2000 *Science* **289** 1734
- [6] Yilmaz C, Hulbert G M, Kikuchi N 2007 *Phys. Rev. B* **76** 054309
- [7] Sievenpiper D, Zhang L J, Broas R F J, Alexópolous N G, Yablonovitch E 1999 *IEEE Trans. on Microwave Theory and Tech.* **47** 2059
- [8] Li X L, Wu F G, Hu H F, Zhong S, Liu Y Y 2003 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **36** L15
- [9] Wu F G, Liu Z Y, Liu Y Y 2002 *Phys. Rev. E* **66** 046628
- [10] Caballero D, Sánchez-Dehesa J, Rubio C, Martínez-Sala R, Sánchez-Pérez J V, Meseguer F, Llinares J 1999 *Phys. Rev. E* **60** R6316
- [11] Zhao F, Yuan L B 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 4511 (in Chinese) [赵芳, 苑立波 2005 物理学报 **54** 4511]
- [12] Yao Y W, Hou Z L, Liu Y Y 2007 *Phys. Lett. A* **362** 494
- [13] Xu Z L, Wu F G, Mu Z F, Zhang X, Yao Y W 2007 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **40** 5584
- [14] Dong H F, Wu F G, Mu Z F, Zhong H L 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 754 (in Chinese) [董华锋, 吴福根, 牟中飞, 钟会林 2010 物理学报 **59** 754]

The two-dimensional phononic crystal band gaps tuned by the symmetry and orientation of the additional rods in the center of unit cell*

Hu Jia-Guang¹⁾²⁾ Xu Wen^{1)†} Xiao Yi-Ming¹⁾ Zhang Ya-Ya¹⁾

1) (School of Physical Science and Technology, Yunnan University, Kunming 650091, China)

2) (Department of Math and Physics, Wenshan University, Wenshan 663000, China)

(Received 17 May 2012; revised manuscript received 20 June 2012)

Abstract

The effects of symmetry and orientation of the additional steel rods on the band gaps of two-dimensional phononic crystals with steel-air system are numerically investigated by using the plane wave expansion method. The original steel rods of the phononic crystals are of columns in square and hexagonal lattices, and the additional steel rods are of regular square, hexagon, octagon prisms and columns, which are placed, respectively, in the center of each unit cell of the two kinds of lattices. The gap maps are introduced to illustrate the influences of the filling fraction and orientation of the additional rods on band gaps. It is found that in the case of the additional rods with low filling fraction, the band gaps can be obtained most easily because the degeneracy of bands is lifted when the cross section of additional rod has the same shape as that of lattice, but the widest band gaps appear under the condition of the additional rods with highest symmetry and largest filling fraction. The influence of orientation on band gap in square lattice is more obvious than that in hexagonal lattice. If the column lattice points are changed by square prisms in simple square lattice, the lower and wider band gaps can be produced by rotating the square prisms, which is contrary to the scenario that emerges in square lattice with additional rods at the center of unit cell. Using one of the methods of adding additional rods or rotating the original prisms is more beneficial to the generation of band gaps than combining effect of these two means in simple lattices. Furthermore, the mechanisms of above results are analyzed.

Keywords: phononic crystal, band structure, band gap, plane wave expansion method

PACS: 43.40.+s, 61.50.Ah, 61.72.Bb

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10974206).

† E-mail: ynszjt@126.com