

水波在周期性钻孔底部结构中的传播及其能带^{*}

钟兰花^{1)†} 吴福根²⁾

1) 湛江师范学院物理科学与技术学院 湛江 524048)

2) 广东工业大学实验教学部 广州 510090)

(2008 年 8 月 22 日收到 2008 年 10 月 17 日收到修改稿)

采用平面波展开法计算了浅水表面波在底部按周期性钻孔结构下的能带,找到了完全带隙的出现.通过考虑方形孔按正方晶格排列、圆形孔按正方晶格和六角晶格排列等三种钻孔模型,发现带隙的数量、宽度、频率、位置与孔的面积、形状、方位角及其排列晶格等都有关.且这些规律与光子/声子晶体的情况相类似.

关键词:周期性,水波,能带,带隙

PACC: 4710, 4735, 0340G

1. 引言

近年来,波在人工周期性复合介质中传播的研究成为一个新的热点,如光子晶体和声子晶体^[1-8].它们是新型的人造功能材料,建立在模拟天然晶体原子排列的基础之上.我们知道,在半导体中,由于原子点阵施加的周期性势场作用,电子会形成能带结构,带与带之间可能存在带隙.类似地,在介电常数(弹性常数)按周期分布的光子(声子)晶体中,由于多重 Bragg 散射作用,当波长与空间周期相当时,电磁波(弹性波)的传播也能形成能带,并可能产生带隙,在带隙频率范围内电磁波(弹性波)不能通过.目前,光子晶体的研究已经从理论分析逐步转向制备、测试和应用阶段^[1],而声子晶体仍以理论研究为主,当然也有一些初步的实验模型制备,如设计出了二维声子晶体声波透镜来实现声波聚焦^[5].由于光子(声子)晶体与传统的光电(声学)材料相比有着截然不同的设计思想、功能特点和明显的优势,具有广阔的实际应用前景,因而引起了物理学、光电子学、材料科学等领域的共同关注.

那么,我们是否可以把光子、声子晶体的概念进一步推广,如对于水波或其他液体波,当给它们加上一个周期性的背景时,是不是也可能产生液体波的能带和带隙?实际上,许多物理现象和规律都具有

可类比性,有少数学者已进行了这方面的研究,包括在液体容器底部按周期钻孔^[9-11]和放置柱体^[11-13]两种情况.如文献[9]通过在液体底部周期性钻孔进行实验研究,直接观察到了浅液体表面波的带隙现象,也有人对该实验模型采用平面波展开法(PWE)进行数值模拟^[10,11].而当在容器底部按周期性排列突出于液体表面的柱体时,能观察到浅液体表面波的负折射现象,形成超棱镜效应^[12];Hu 等采用多重散射法(MST)进行数值计算也得到了与实验相一致的结果^[13].对液体波的研究不仅可以丰富经典波的研究内容,可为海洋或其他水域工程提供指导.更重要的是,它的波动行为具有直观性的优点.利用这一特点及各种波的相似性,可以使其他抽象的波动行为变得形象、直观.

本文采用 PWE 方法计算了浅水底部按周期性钻孔系统的能带结构,发现具有完全带隙的出现,并分析了钻孔的方位角,孔的形状和大小及其排列晶格对水波能带带隙的影响,发现这些规律与光子晶体和声子晶体的情况相类似.

2. 波动方程及其平面波展开

假设水是无黏滞、不可压缩的理想液体,且忽略表面张力,则水的表面重力波在无旋的条件下,其小振幅波波动方程的线性近似表达式为^[11,14]

^{*} 国家自然科学基金(批准号:10674032)和湛江师范学院校级理科一般项目(批准号:10704)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: lanhuazhong@163.com

$$\nabla \cdot \left(\frac{\tan(kh)}{k} \nabla \eta \right) + \frac{\omega^2}{g} \eta = 0, \tag{1}$$

此处 $k, \omega, g, h(x, y), \eta(x, y, t)$ 分别表示波数、角频率、重力加速度 (9.8 N/kg)、原静止水深、水表面在竖直方向上的位移 (以原静止水平面为基准), $\nabla = (\partial_x, \partial_y)$; 且 k 满足色散关系 $\omega^2 = gk \tan(kh)$.

当 $kh \ll 1$ 时, 可将此系统视为浅水波系统, 此时 $\tan(kh) \approx kh$, 则方程 (1) 可简化为一个显式的本征方程^[9-11]

$$\nabla \cdot (h \nabla \eta) + \frac{\omega^2}{g} \eta = 0, \tag{2}$$

该方程是描述浅水小振幅波的基本方程.

在水底是二维周期性结构的条件下, 水深 h 具有空间周期性, 即满足 $h(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = h(\mathbf{r})$, 式中 $\mathbf{r} = (x, y)$, 反映周期性的矢量 $\mathbf{R}$ 为 Bravais 格矢. 根据 Bloch 定理, 方程 (2) 的解可表示为^[15]

$$\eta(\mathbf{r}, t) = u_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{K} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}, \tag{3}$$

式中 $\mathbf{K}$ 是 Bloch 波矢, $u_{\mathbf{K}}(\mathbf{r})$ 与 $h(\mathbf{r})$ 有相同的周期性, 它们均可展开为傅里叶级数形式

$$h(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} H_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}, \tag{4}$$

$$u_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} I_{\mathbf{K}, \mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}, \tag{5}$$

其中 H 和 I 为傅里叶展开系数, $\mathbf{G}$ 为与 $\mathbf{R}$ 对应的倒格矢. 联立 (3) 式和 (5) 式, 则方程 (2) 的解可表示为

$$\eta(x, y, t) = e^{-i\omega t} \sum_{\mathbf{G}} I_{\mathbf{K}, \mathbf{G}} e^{i(\mathbf{K} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}}. \tag{6}$$

将 (4) 式和 (6) 式代入方程 (2), 可得^[9-11]

$$\sum_{\mathbf{G}} \left[(\mathbf{G} + \mathbf{K}) \cdot (\mathbf{G}' + \mathbf{K}) \right. \\ \left. \times H_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'} - \frac{\omega^2}{g} \right] I_{\mathbf{K}, \mathbf{G}} = 0, \tag{7}$$

(7) 式理论上表示对无限多个倒格矢求和, 实际中通常取有限个倒格矢代替. 若选取 N 个倒格矢, 则 (7) 式变成 $N \times N$ 阶矩阵的本征值方程.

3. 模 型

本文中所考虑的模型是在水底部钻孔, 横截面如图 1 所示, 包括方形孔按正方晶格排列 (图 1(a)), 圆形孔按正方晶格 (图 1(b)) 和六角晶格 (或称为三角晶格) (图 1(c)) 排列等三种模式, 其中 a 为晶格常数. 平底部和钻孔处的水深分别为 h_0 和 h_1 , 如图 2 的纵切面图所示.

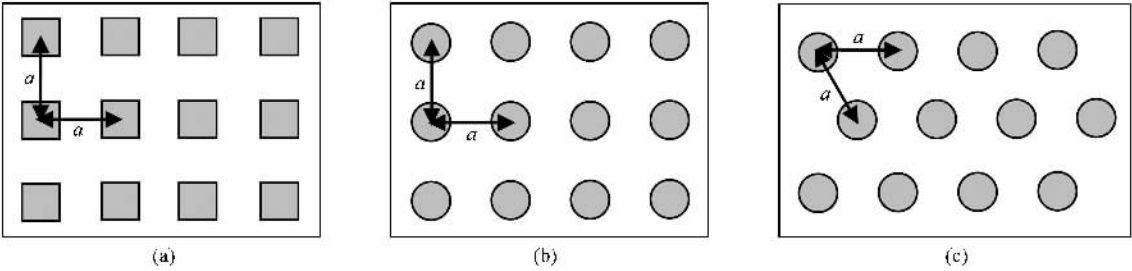


图 1 水底钻孔模型横截面图

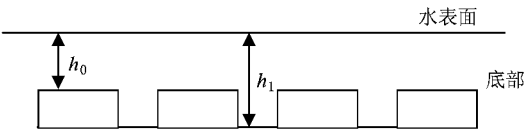


图 2 浅水系统纵切面示意图

在 (7) 式中水深的傅里叶系数计算式为

$$H_{\mathbf{G}} = \frac{1}{S} \int_{\text{原胞}} h(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r}, \tag{8}$$

其中 S 为原胞的面积, 积分区间为整个原胞. 我们定义一个结构函数

$$P_{\mathbf{G}} = \frac{1}{S} \int_{\text{孔}} e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r}, \tag{9}$$

积分范围是孔所占区间, 其函数值完全由孔的形状和大小决定. 如果钻孔的面积占整个原胞面积的比率 (面积填充率) 为 f , 则 (8) 式可化为

$$H_{\mathbf{G}} = \begin{cases} h_1 f + h_0 (1 - f), & (\mathbf{G} = 0), \\ (h_1 - h_0) P_{\mathbf{G}}, & (\mathbf{G} \neq 0). \end{cases} \tag{10}$$

对于方形孔, 设边长为 $2l$, 则结构函数 (9) 式可表示为^[2,3]

$$P_{\mathbf{G}} = f \frac{\sin(G_x l)}{G_x l} \cdot \frac{\sin(G_y l)}{G_y l}. \tag{11}$$

而对于半径为 r 的圆形孔, 其结构函数可计算得为^[11]

$$P_G = \frac{2fJ_1(Gr)}{Gr}, \tag{12}$$

式中 J_1 为第一类一阶 Bessel 函数.

在方孔模型中,我们还可以考虑孔按不同方位角排列的情况,比如将每个孔都在图 1(a)所示的基础上绕各自的格点按顺时针旋转 θ 角度.此时等同于将整个坐标进行旋转变换,即相当于上面计算式中的倒格矢 $\boldsymbol{G}$ 变为^[23]

$$\begin{aligned} G'_x &= G_x \cos \theta + G_y \sin \theta, \\ G'_y &= -G_x \sin \theta + G_y \cos \theta. \end{aligned} \tag{13}$$

4. 计算结果

本文中固定取晶格常数 $a = 22.0\text{ mm}$,平底部水深 $h_0 = 0.2\text{ mm}$,钻孔处水深 $h_1 = 2.2\text{ mm}$,即孔的深度为 2.0 mm ,这些参数的选取参考了文献 [9—11].取 625 个倒格子矢量进行计算,此时结果已显示了很好的收敛性.对每一个给定的波矢 $\boldsymbol{K}$,求解方程

(7)可得到一系列本征圆频率 ω .令波矢 $\boldsymbol{K}$ 扫描整个不可约 Brillouin 区,则可得到其能带结构.

4.1. 钻孔的方位角对能带的影响

首先讨论了方孔模型中孔按不同方位角排列的情况,发现正如声子晶体中一样^[23],孔的方位角对能带结构有很大影响.如图 3 所示为当面积填充率 $f = 0.5$ 时,旋转角 $\theta = 0^\circ$ (图 3(a)) 和 $\theta = 45^\circ$ (图 3(b)) 的能带结构图.图 3 中插图为晶格对应的第一 Brillouin 区,打点部分为不可约 Brillouin 区.横坐标为波矢沿着不可约 Brillouin 区的几条高对称边扫描,由此可获得能带的带隙情况.显然,这两种情况下都出现了完全带隙,如图中阴影部分所示,但带隙出现的位置和宽度均有所不同.当 $\theta = 0^\circ$ 时,带隙出现在第一、二能带之间,处于 $1.83\text{—}2.26\text{ Hz}$ 范围内,带隙宽度为 0.43 Hz ;而当 $\theta = 45^\circ$ 时,带隙出现在第二、三能带之间,处于 $2.44\text{—}2.80\text{ Hz}$ 范围,带隙宽度为 0.36 Hz .

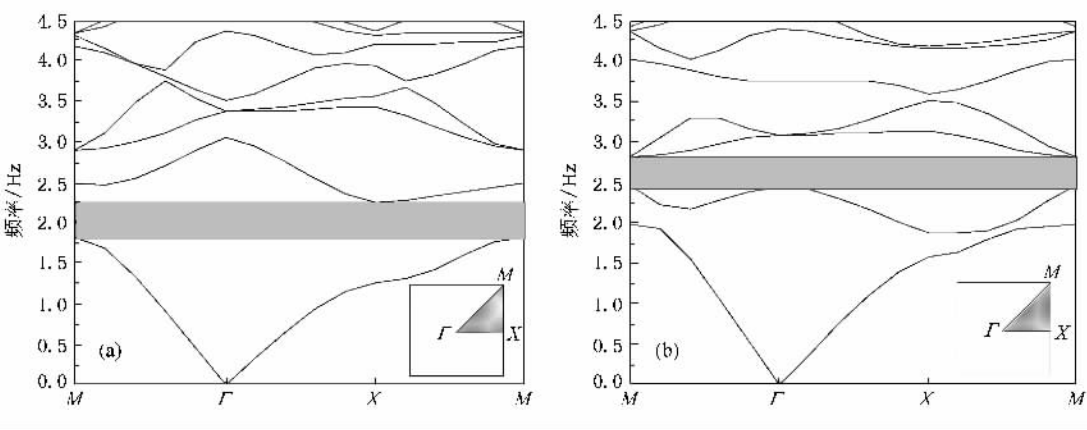


图 3 当 $f = 0.5$ 时,方形孔按正方晶格排列的能带结构图 (a) $\theta = 0^\circ$ (b) $\theta = 45^\circ$

下面进一步分析上述两条能带带隙随着旋转角的改变分别如何变化.从几何结构不难看出方孔的旋转周期为 90° ,而由于对称性我们只要分析半个旋转周期内的情况即可.如图 4 所示为当取 $f = 0.35, 0.40, 0.50, 0.60, 0.65$ 等 5 个不同值时的带隙宽度随旋转角 θ 的变化关系.图 4(a)为第一、二能带间的带隙,显然,带隙宽度均随着 θ 的增大而单调减小,当 θ 增大到接近 30° 时该条完全带隙已不存在.

图 4(b)表示第二、三能带间的带隙,可以看出,当 θ 增大到约 10° 之后带隙才逐渐开始出现,带隙宽度随 θ 的增大而先增大后减小.当 $f = 0.35, 0.40$ 这些较小的值时,曲线随 θ 的减小不是十分明显,而当 f 较大时,如 $f = 0.60(0.65)$, θ 增大到 $33^\circ(30^\circ)$ 之后(尚未达到紧密排列)带隙迅速消失.对比图 4(a)和(b)不难看出,对于任一给定 f 值,最宽的带隙出现在旋转角 $\theta = 0^\circ$ 时,且为第一、二能带间的带隙.

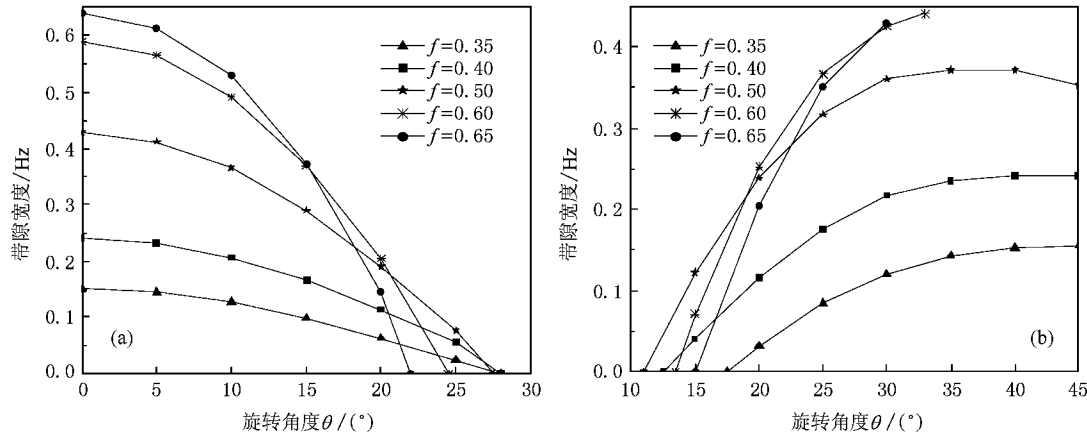


图 4 方形孔按正方晶格排列时带隙宽度随 θ 的变化关系 (a)第一、二能带间的带隙 (b)第二、三能带间的带隙

4.2. 钻孔的形状和排列晶格对能带的影响

通过计算发现,当孔的形状相同(如均为圆形)时,排列晶格的改变对能带结构也有影响.如图 5 所示为圆形孔面积填充率 $f = 0.5$ 时,按正方晶格(图 5(a))和六角晶格(图 5(b))排列的能带结

构图.在图 5(a)中有两条完全带隙,分别位于第一、二能带间和第二、三能带间.而图 5(b)中只有一条处于第一、二能带间的带隙,其宽度比图 5(a)中的两条带隙都大得多.由此可见,孔的排列方式不同,带隙的数量、频率、宽度均有很大差异.

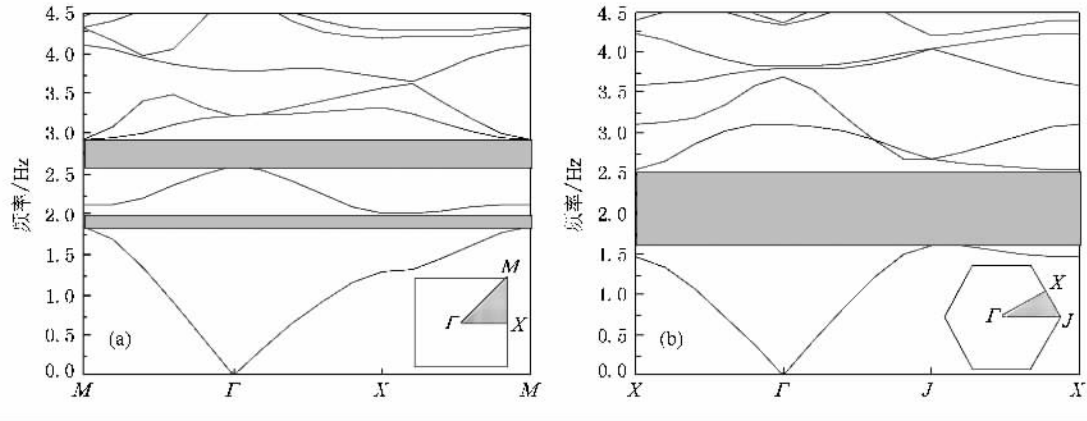


图 5 当 $f = 0.5$ 时,圆形孔按正方晶格((a))和六角晶格((b))排列下的能带结构图

接下来我们看三种钻孔模型对应于各面积填充率 f 的带隙分布情况,如图 6 所示,图中阴影部分表示带隙出现的范围.图 6(a)为按正方晶格排列的方形孔在旋转角度 $\theta = 0^\circ$ 时的能带,此时只有一条位于第一、二能带间的带隙,出现在 $0.25 \leq f \leq 0.85$ 范围内.图 6(b)对应于圆形孔按正方晶格排列的情况,不难看出,在大部分 f 值范围内有两条带隙出现,分别处于第一、二能带和第二、三能带之间;且在对

应相等 f 值的条件下后者比前者要宽.对比图 6(a)和(b)可知,按正方晶格排列时,方形孔比圆形孔更有利于大带隙的产生.图 6(c)表示圆形孔按六角晶格排列的模型,有一条处于第一、二能带间的带隙,带隙出现的 f 值范围及带隙宽度比前面两种情况都要大.由此可见,钻孔的形状及其排列晶格对各带隙的宽度、频率、出现和消失所对应的 f 值均有较大影响.但在各种模型中,这些带隙的宽度都是随着面积填充率 f 的增大而先增大后减小,且带隙出现的频率逐渐升高.

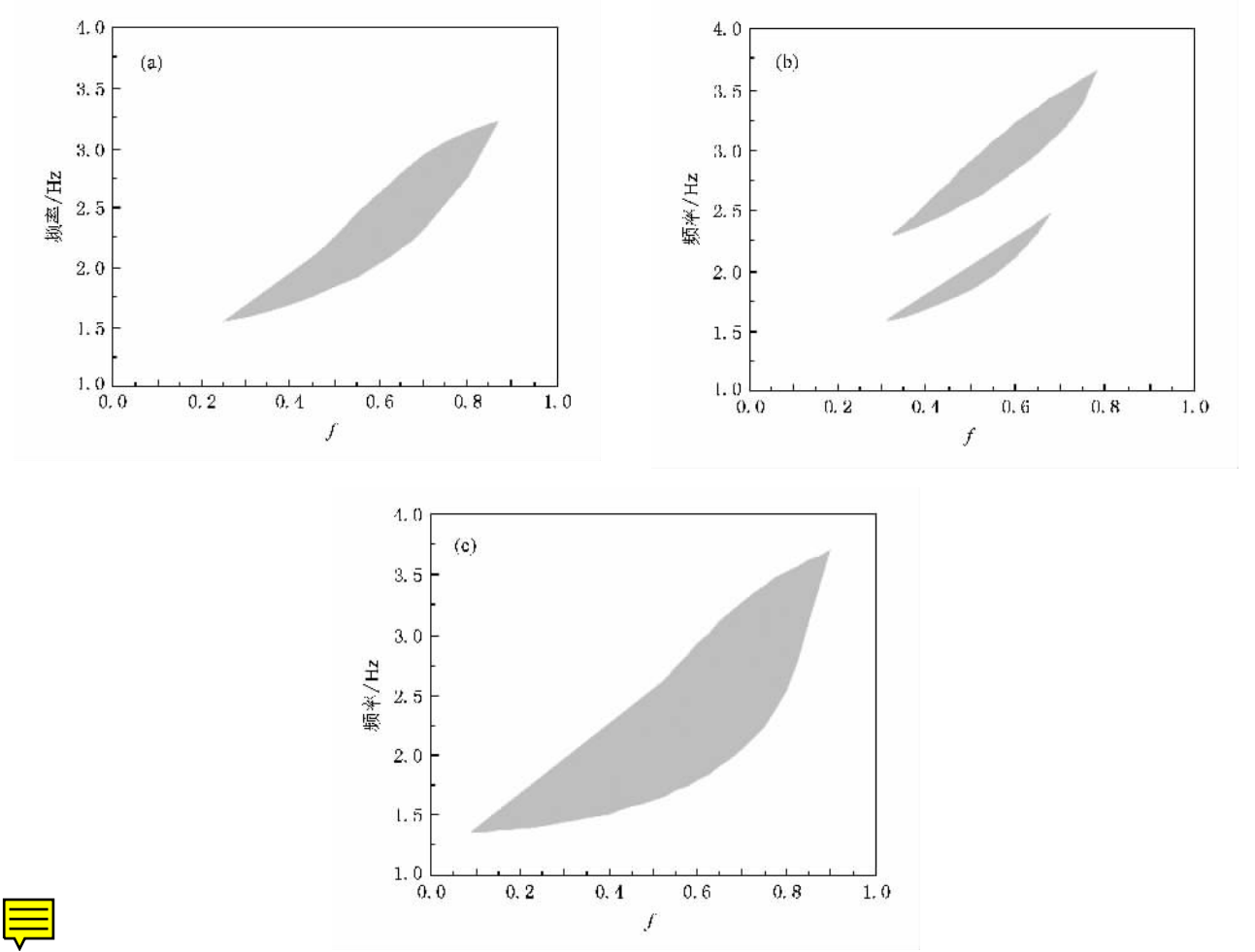


图 6 带隙随 f 的变化关系图 (a) 方形孔按正方晶格排列 ($\theta = 0^\circ$) (b) 圆形孔按正方晶格排列 (c) 圆形孔按六角晶格排列

5. 结 论

本文先给出了浅水表面重力波的波动方程,当在水底部按周期性钻孔时,水深为一空间周期函数,则可采用平面波展开法进行数值计算.我们考虑了方形孔按正方晶格排列、圆形孔按正方晶格和六角晶格排列等三种模型,计算出了水表面波的能带结构图.并分析了孔的排列方位角度、孔的大小和形状以及排列晶格对能带带隙的影响.计算结果表明,在方形孔按正方晶格排列的模型中,随着钻孔旋转角度的增大,第一、二能带间的带隙宽度单调减小,而

第二、三能带间的带隙宽度先增大后减小.同为按正方晶格排列时,钻圆形孔能产生两条带隙,钻方形孔(旋转角度为 0)能产生一条较宽的带隙.当孔为圆形时,按六角晶格排列能产生一条比其他两种模型下宽度大得多的带隙.同时,也分析了各种模型中带隙与钻孔面积大小的关系,发现带隙宽度都是随钻孔面积填充率的增大而先增大后减小.这些说明了,周期背景下的水表面波,其能带结构及带隙的变化规律与光子/声子晶体中的电磁波/弹性波具有相类似的性质.因此,我们可以借鉴光子/声子晶体的研究方法和手段,来研究水波或其他液体波在周期背景下的传播形式.

[1] Wen X S 2006 *Theory and Technology of Photonic/ Phononic Crystals* (in Chinese) [温熙森 2006 光子/声子晶体理论与技术 (北京: 科学出版社)]

[2] Goffaux C, Vigneron J P 2001 *Phys. Rev. E* **64** 075118

[3] Wu F G, Liu Z Y, Liu Y Y 2002 *Phys. Rev. E* **66** 046628

[4] Liu Z Y, Zhang X X, Mao Y W *et al* 2000 *Science* **289** 1734

- [5] Cervera F ,Sanchis L ,Sanchez-Perez J V *et al* 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 023902
- [6] Hou Z L ,Fu X J ,Liu Y Y 2004 *Phys. Rev. B* **70** 014304
- [7] Hou Z L ,Fu X J ,Liu Y Y 2006 *Phys. Rev. B* **73** 024304
- [8] Qi G J ,Yang S L ,Bai S X *et al* 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 668 (in Chinese)[齐共金、杨盛良、白书欣等 2003 物理学报 **52** 668]
- [9] Torres M ,Adreados J P ,Montero de Espinosa F R *et al* 2000 *Phys. Rev. E* **63** 011204
- [10] Hu X H ,Shen Y F ,Liu X H *et al* 2003 *Phys. Rev. E* **68** 066308
- [11] Zhen Y 2003 *Phys. Rev. E* **67** 036623
- [12] Hu X H ,Shen Y F ,Liu X H *et al* 2004 *Phys. Rev. E* **69** 030201
- [13] Hu X H ,Chan C T 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 154501
- [14] Zhang Z S ,Cui G X 2006 *Hydromechanics* (Beijing : Tsinghua University Press)(in Chinese)[张兆顺、崔桂香 2006 流体力学 (北京 : 清华大学出版社)]
- [15] Huang K ,Han R Q 1988 *Solid State Physics* (in Chinese)[黄昆、韩汝琦 1988 固体物理学 (北京 : 高等教育出版社)]

Propagation of water wave over a periodically perforated bottom and the band structure^{*}

Zhong Lan-Hua^{1)†} Wu Fu-Gen²⁾

¹⁾ *Physical Science and Technology College ,Zhanjiang Normal University ,Zhanjiang 524048 ,China*

²⁾ *Experiment Center ,Guangdong University of Technology ,Guangzhou 510090 ,China*

(Received 22 August 2008 ; revised manuscript received 17 October 2008)

Abstract

The band structures of shallow water surface wave propagating over a periodically perforated bottom are calculated by the plane wave expansion method and complete band gaps appear. Through considering three drilling patterns (square holes arrayed in square lattice ,circular holes arrayed in square and hexagonal lattices) ,we find that the number ,width ,frequency and location of band gaps are related to the area ,shape ,orientation of drilled holes and the lattice. These rules are similar to those in photonic/ phononic crystals.

Keywords : periodicity , water wave , band structure , band gap

PACC : 4710 , 4735 , 0340G

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10674032) and the Science General Foundation of Zhanjiang Normal University (Grant No. L0704).

[†] Corresponding author. E-mail : lanhuazhong@163.com