

大弹性常数差二维声子晶体带隙计算中的集中质量法*

王 刚† 温激鸿 刘耀宗 郁殿龙 温熙森

(国防科学技术大学机电工程研究所, 光子/声子晶体研究中心, 长沙 410073)

(2004 年 4 月 19 日收到, 2004 年 5 月 12 日收到修改稿)

通过引入振动力学中的连续系统离散化的思想, 将一维集中质量法延伸至二维, 提出一种二维声子晶体带隙特性计算的集中质量法. 进而采用该算法对两种正方晶格的二维声子晶体的带结构进行了计算, 计算结果与传统的平面波展开法相符合. 通过对计算结果以及两种算法收敛性的分析, 发现集中质量法的收敛性对组成声子晶体的不同材料弹性参数差不敏感, 这使得该算法在计算大弹性常数差二维声子晶体的带隙特性时较平面波展开法收敛速度更快. 此外, 集中质量法对二维声子晶体单元形状没有特殊要求, 这使得它更加适用于声子晶体带隙特性的计算.

关键词: 声子晶体, 声子带隙, 集中质量法

PACC: 4320, 4335, 0260, 8160H

1. 引 言

近 10 多年来, 经典波在周期结构中传播的研究受到了广泛关注, 其中一个典型的例子就是光子晶体的研究^[1]. 大量理论计算和实验结果均发现了这种新的结构中的电磁波禁带, 即特定范围内的电磁波不能在光子晶体中传播, 这一现象具有极大的应用前景.

近来, 这些研究工作被推广到不同弹性介质组成的周期结构中弹性波传播的研究上^[2-7]. 弹性常数周期性分布的复合结构称为声子晶体. 当弹性波在其中传播时, 可能会产生完全或某方向上的弹性波带隙, 即一定频率范围的弹性波的传播被抑制或禁止. 声子晶体的这种特性具有极大的理论价值和应用前景.

与光子晶体相比, 声子晶体所具有的一大特点是其组成材料弹性系数可以有巨大的差别, 这使得声子晶体的研究具有更加丰富的内涵. 如组成结构中含有软橡胶材料(弹性常数较通常固体小 5 个数量级以上)的声子晶体^[8,9], 更容易在小尺寸条件下产生低频禁带, 这使得其在低频减振降噪方面的应用成为可能.

现有的声子晶体带隙计算方法主要有平面波展开(PWE)法^[5,6,10-12]、多散射理论(MST)^[13-16]、时域有限差分(FDTD)^[17,18]法以及变分(VM)^[9]法. PWE法应用最为广泛, 易于理解, 且计算相对简单, 但由于其依赖于对弹性参数的傅里叶级数展开, 因此该方法在计算含大弹性常数差界面的声子晶体的带隙特性时, 需要使用大量的傅里叶级数项, 而且很容易产生不合理的平直色散关系曲线. MST法可以解决这些问题, 但其理论推导十分复杂, 而且目前只限于处理球形单元结构的声子晶体, 应用上存在局限. FDTD法更适用于计算有限周期声子晶体结构的传输/反射特性, 对于大弹性常数差声子晶体结构, 也需要大幅度减小离散时间步长, 以满足计算稳定性的要求, 这使得计算时间大大增加.

集中质量(LM)法是基于振动力学中连续系统离散化处理的思想提出的一种声子晶体带隙特性计算方法, 并在二维声子晶体带隙特性计算中得到运用^[19]. 本文进一步将该算法延伸至二维. 与文献[20]采用质点间横、竖、斜拉线弹簧所构成的模型不同, 本文中 LM 法采用均匀无密度弹性面作为质点间的连接方式, 并通过理论推导和算例说明该连接方式的集中质量模型才可用于替代二维连续周期介质声子晶体进行带隙特性的计算. 为了证明其有效

* 国家重点基础研究发展规划项目(批准号 51307)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: wang-g@vip.sina.com

性,使用该方法分别计算了两种正方晶格的二维声子晶体结构的带隙特性.这两种结构分别为树脂中周期排列的、截面为圆形的铅柱阵列,以及软橡胶中的相同阵列.计算结果将表明,LM法在计算后者时,无论在收敛性和计算速度上都远优于传统的PWE法,而且其收敛性与弹性常数差无关.这一独有特性,使得LM法尤其适合小尺寸低频禁带声子晶体的带隙特性计算.此外,LM法还可以方便地计算任意单元形状的声子晶体.这些独有特性都使得该方法具有重要的理论价值和广阔的应用前景.

2. 模型描述与基本方程

图1为二维正方晶格声子晶体结构横截面图, z 方向垂直于纸面向上,黑色的部分为基体材料 B 中插入的柱状介质 A ,该介质平行于 z 轴周期排列,间距 a 为晶格常数.

假设弹性波的传播方向平行于 $x-y$ 平面,则其二维分段各向同性介质中应力与应变的基本方程可写为相互独立的 $x-y$ 方向和 z 方向振动模式的方程,即

$$\begin{Bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \tau_{xy} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & 0 \\ \lambda & \lambda + 2\mu & 0 \\ 0 & 0 & \mu \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \epsilon_x \\ \epsilon_y \\ \gamma_{xy} \end{Bmatrix}, \quad (1)$$

$$\begin{Bmatrix} \tau_{xz} \\ \tau_{yz} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \mu & 0 \\ 0 & \mu \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \gamma_{xz} \\ \gamma_{yz} \end{Bmatrix}. \quad (2)$$

令 $\sigma_{xy} = \{\sigma_x, \sigma_y, \tau_{xy}\}^T$; $\epsilon_{xy} = \{\epsilon_x, \epsilon_y, \gamma_{xy}\}^T$; $\sigma_z =$

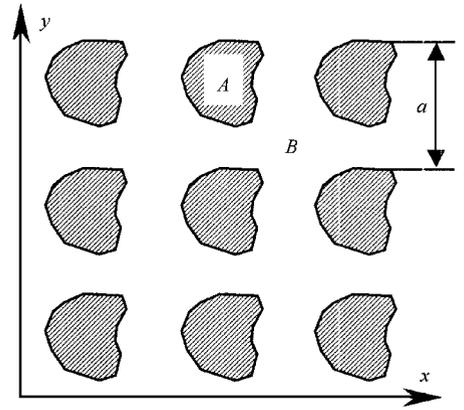


图1 二维正方晶格声子晶体结构横截面图

$\{\tau_{xz}, \tau_{yz}\}^T$; $\epsilon_z = \{\gamma_{xz}, \gamma_{yz}\}^T$, 则上式可写为

$$\sigma_{xy} = D_{xy} \epsilon_{xy}; \quad \sigma_z = D_z \epsilon_z, \quad (3)$$

其中 $(\sigma_x, \sigma_y, \tau_{xy}, \tau_{xz}, \tau_{yz})$ 为压应力和剪切应力, $(\epsilon_x, \epsilon_y, \gamma_{xy}, \gamma_{xz}, \gamma_{yz})$ 为拉压和剪切应变, λ 和 μ 为拉梅常数.

3. LM 法

LM法的基本思想是将连续介质的密度集中到离散节点上成为质点,而相邻质点由仅有弹性而没有密度的连续介质连接.如图2(a)为二维声子晶体的一个晶胞的离散质点图,其中 $N \times N$ 个质点按照正方点阵等间距分布,相邻质点由无质量的弹性介质相互连接,其弹性参数即对应介质的弹性常数, p

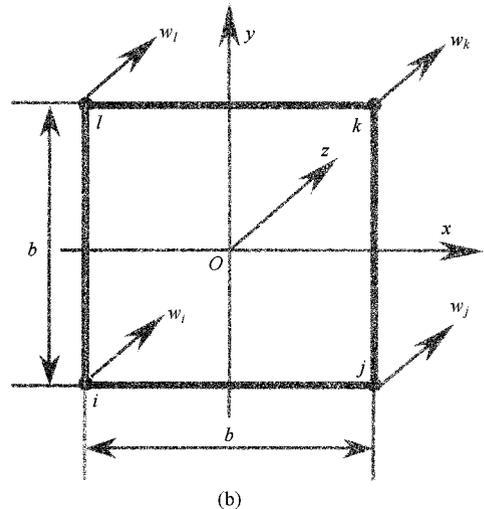
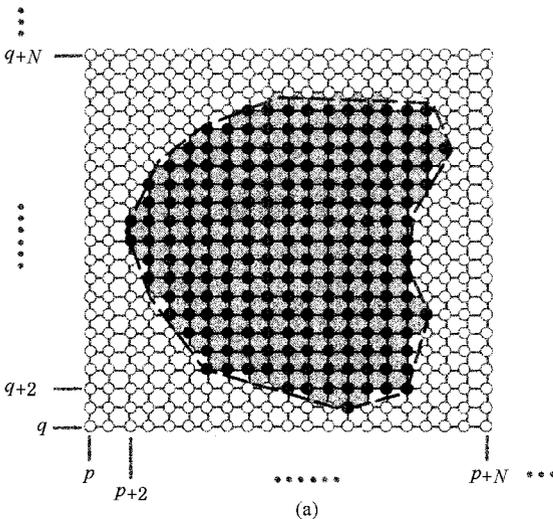


图2 (a)二维声子晶体的一个晶胞的离散质点示意图,(b)相邻的4个离散节点所组成的正方形单元

和 q 分别为周期数,对于无限周期结构, p, q 可取任意整数. 图 2(b) 为相邻的 4 个离散节点所组成的正方形单元, 边长 $b = a/N$.

首先以 z 方向的振动传播为例, 设节点沿 z 方向的微小位移为 w_r ($r = i, j, k, l$, 分别对应节点 i, j, k, l), 当假定单元中的连续介质为仅有弹性、没有密度的介质时, 单元介质中 z 方向的形变可写为如下线性形式:

$$w = N_i w_i + N_j w_j + N_k w_k + N_l w_l, \quad (4)$$

其中

$$N_r = \frac{1}{4b^2} \left(\frac{b}{4} + \frac{x_r}{b} x \right) \left(\frac{b}{4} + \frac{y_r}{b} y \right),$$

由此, 单元中的应变可写为

$$\boldsymbol{\varepsilon}_z = \mathbf{B} \boldsymbol{\Delta}_z, \quad (5)$$

其中

$$\mathbf{B} = \frac{1}{4b^2} \left[\frac{x_r}{4} + \frac{x_r y_r}{b^2} y, \frac{y_r}{4} + \frac{x_r y_r}{b^2} x \right]^T,$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \left[\frac{\partial w}{\partial x}, \frac{\partial w}{\partial y} \right]^T$$

为应变, $\boldsymbol{\Delta}_z = [w_i, w_j, w_k, w_l]^T$.

由 (3) 式, 相应的应力可写为

$$\boldsymbol{\sigma}_z = \mathbf{D}_z \boldsymbol{\varepsilon}_z = \mathbf{D}_z \mathbf{B} \boldsymbol{\Delta}_z. \quad (6)$$

由分析力学虚功原理^[21], 可以写出

$$\mathbf{F}_z = \mathbf{K}_z \boldsymbol{\Delta}_z, \quad (7)$$

其中 $\mathbf{F}_z = \{F_i, F_j, F_k, F_l\}$ 为节点 i, j, k, l 上 z 方向位移所对应的 z 方向节点力, $\mathbf{K}_z = [k_{rs}]$ 为刚度矩阵, $r, s = i, j, k, l$ 分别对应节点 i, j, k, l , 可写为该正方形单元内的积分为

$$\mathbf{K}_z = \iint_{\text{unit}} \mathbf{B}^T \mathbf{D}_z \mathbf{B} t dx dy = [k_{rs}], \quad (8)$$

其中 t 为给定的 z 方向的厚度, 可取任意值. 此外

$$k_{rs} = \mu \left[\frac{x_r x_s}{b^2} \left(1 + \frac{4}{3} \frac{y_r y_s}{b^2} \right) + \frac{y_r y_s}{b^2} \left(1 + \frac{4}{3} \frac{x_r x_s}{b^2} \right) \right]. \quad (9)$$

由质量所产生的惯性力为体积力, 可被平均分配到 4 个节点上, 也即将质量平均分配到 4 个节点上, 进而可得到某个节点 r 的动力平衡方程为

$$m_r \frac{\partial^2 w_r}{\partial t^2} = \{F_z\} = \sum_{s=0}^N \{k_z\}^s w_s, \quad (10)$$

其中 m_r 为分配到节点 r 上的质量和, w_r 为节点 r 的 z 方向位移.

按照同样的思想, 可以得到单个晶胞内所有离散节点上的动力平衡方程, 并组成方程组. 由 Bloch 定理^[22], 该方程组解的形式为

$$w_r = C_r e^{[q_x x_r + q_y y_r - \omega t]}, \quad (11)$$

其中 q_x, q_y 为波矢, ω 为角频率, C_r 为节点 m_r 的 z 方向振动幅值.

将 (11) 式代入 (10) 式, 可得

$$(-\{k_z\}^r / m_r - \omega^2) C_r = \sum_{s \neq r} \{k_z\}^s C_s e^{[q_x(x_s - x_r) + q_y(y_s - y_r) - \omega t]} / m_r. \quad (12)$$

存在周期边界条件:

$$C_{(x_s, y_s)} = C_{(x_s + na, y_s + na)}, \quad (13)$$

将 (13) 式代入 (12) 式, 可以得到单个晶胞内 $N \times N$ 个节点上的联立方程组为

$$[S_z(\mathbf{q}) - \omega^2 \mathbf{I}] \mathbf{C} = 0. \quad (14)$$

同理可以得到 x - y 模态振动模式所对应的联立方程组为

$$[S_{xy}(\mathbf{q}) - \omega^2 \mathbf{I}] \mathbf{A} = 0, \quad (15)$$

其中 $\mathbf{q} = \{q_x, q_y\}$. (14) 和 (15) 式即典型的一般复数矩阵特征值问题, 对于给定的波矢 \mathbf{q} , 可通过特征值求解, 得到相对应的一系列特征频率 ω , 从而得到该二维声子晶体的色散关系图 (即带结构). 同时, 由于周期性, (14) 和 (15) 式仅需要对图 4 右下角所示第一布里渊区内的波矢 \mathbf{q} 求解^[22].

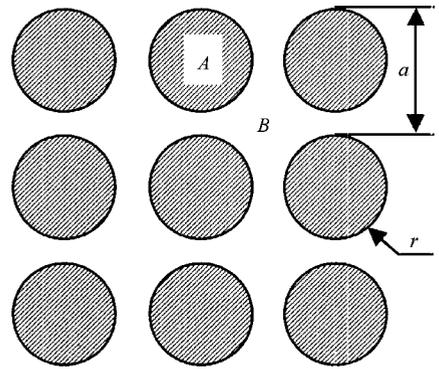


图 3 二维声子晶体算例结构图

4. 算例 I 计算结果

为了验证算法的有效性, 采用本文算法以及传统的平面波展开法对图 3 所示二维声子晶体结构的带隙特性进行了计算, 其中晶格常数 $a = 20\text{mm}$, 圆柱半径 $r = 8\text{mm}$, 介质 A 为铅, 介质 B 为树脂. 计算中所使用的参数分别为: $\rho_A = 11600 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$, $\rho_B = 1180 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$, $\lambda_A = 4.23 \times 10^{10} \text{ Pa}$, $\lambda_B = 4.43 \times 10^9 \text{ Pa}$, $\mu_A = 1.49 \times 10^{10} \text{ Pa}$, $\mu_B = 1.59 \times 10^9 \text{ Pa}$. 图 4 为计算

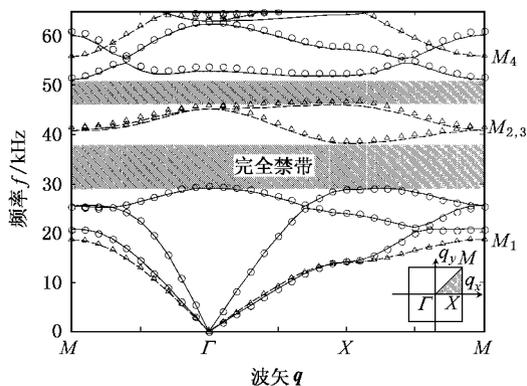


图 4 沿第一布里渊区边界绘制的算例 I 声子晶体的色散关系图 结构如图 3 所示,其中 $a = 20\text{mm}$, $r = 8\text{mm}$, 介质 A 为铅, 介质 B 为树脂. ——和 - - - 分别为采用 LM 法计算得到的 x - y 模式和 z 模式色散曲线, \circ 和 \triangle 分别为使用 PWE 法计算得到的 x - y 模式和 z 模式色散曲线, 阴影区域即完全禁带

所得该结构的色散关系曲线, 其中 LM 法引入了 400 个集中质量, PWE 法引入了 441 个平面波. 可以看出, 两种方法的计算结果符合很好. 图 4 中阴影所示完全禁带产生于 29.5—38.5 和 46.5—51.5 kHz.

图 5 分析比较了两种算法在计算算例 I 时的收敛性. 可见, 两种算法的收敛性相当. 但由于 LM 法采用有限的点阵来描述一个元胞, 因此对元胞拓扑结构的精确描述存在一定困难, 而且圆柱边界仅能以锯齿形描述, 这使得 LM 法的收敛结果在正确值附近有一定波动.

5. 算例 II 计算结果

软橡胶最近在文献 [8, 9] 中分别被用来作为三维和二维声子晶体中散射体(铅球、金圆柱)的包覆层. 软橡胶极低的弹性常数使得声子晶体内产生了很强的共振效应, 从而能够在小尺寸条件下获得较低频率的禁带. 这一特性对声子晶体减振降噪方面的实际应用有极大的推动作用.

为了进一步验证 LM 法的有效性, 我们计算了与算例 I 中相同结构的声子晶体, 但将介质 B 换成文献 [8, 9] 中的软橡胶, 其弹性参数分别为 $\rho_B = 1300 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$, $\lambda_B = 6 \times 10^5 \text{ Pa}$, $\mu_B = 4 \times 10^4 \text{ Pa}$. 图 6 即为计算所得该结构色散关系曲线, 其中 LM 法引入了 625 个集中质量, PWE 法引入了 1225 个平面波. 可以看出, 两种方法的计算结果在低频时较符合, 但在高频时差别很大. 这是由于该算例中软橡胶和铅

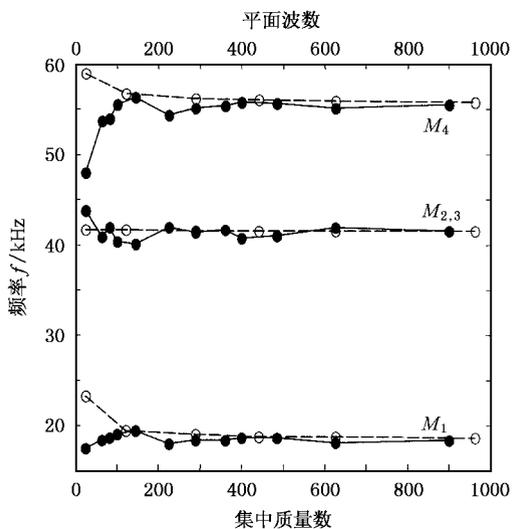


图 5 LM 法和 PWE 法在计算算例 I 时的收敛性比较 M_1 , $M_{2,3}$ 和 M_4 点分别对应图 4 中第一布里渊区 M 点上 z 模式的前四阶特征频率. ——为 LM 法的计算结果, - - - 为 PWE 法的计算结果. 上方的横坐标为 PWE 法计算中所使用的平面波数, 下方的横坐标为 LM 法计算中所使用的集中质量数. 在引入同样多的集中质量数和平面波数时, 两种算法的计算矩阵规模相同

的弹性常数差别极大(相差 5 个数量级), PWE 法在使用有限项傅里叶级数描述其交界面上弹性常数差时造成严重的 Gibbs 现象, 误差很大, 而 LM 法则较好地避免了这一问题.

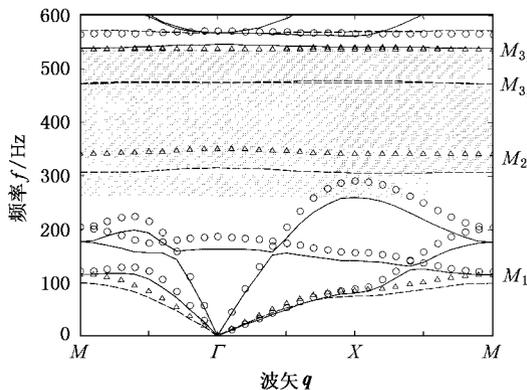


图 6 算例 II 声子晶体的色散关系图 结构如图 3 所示, 其中 $a = 20\text{mm}$, $r = 8\text{mm}$, 介质 A 为铅, 介质 B 为软橡胶 图注同图 4

图 7 分析比较了两种算法计算算例 II 时的收敛性. 图 8 比较了两种算法的计算时间与计算矩阵规模的关系. 比较图 5 与图 7 可以看出, LM 法的收敛性在计算算例 I 和 II 时几乎没有区别, 而 PWE 法在计算算例 II 时的收敛性与算例 I 时相比差了很多. 在计算算例 II 这种大弹性常数差的声子晶体的

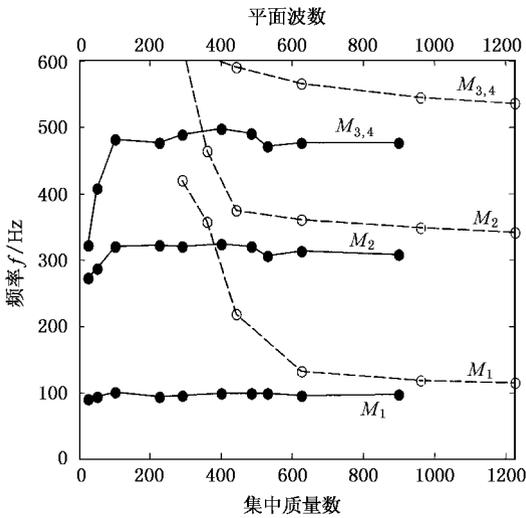


图7 LM法和PWE法在计算算例II时的收敛性比较 M_1 、 M_2 和 $M_{3,4}$ 点分别对应图6中第一布里渊区 M 点上 z 模式的前四阶特征频率. 图注同图5

带隙特性时,LM法的收敛性远强于PWE法,高频时尤为明显.当LM法使用625个集中质量时(相应计算时间为25.64s),能够保证很好的收敛性.相比之下,即使使用了1225个平面波(相应计算时间为375.83s),PWE法的计算精度仍远不能满足基本要求.这一明显的差别主要是由于算例II中组成声子晶体的铅和软橡胶的弹性常数差别极大(相差5个数量级),PWE法在使用有限项傅里叶级数描述其交界面时误差很大,难以快速收敛.相反地,由于LM法是一种直接空间方法,它可以直接、准确地描述不同介质交界面上弹性常数的突变,从而避免了PWE法中傅里叶级数有限项展开时造成的Gibbs现象所引起的误差,收敛性不受影响.

同时,由图8可见,在选用同样的计算矩阵规模时,LM法的计算时间仍大大少于PWE法,这是由于在LM法中,所需进行特征值计算的矩阵为稀疏矩阵的缘故.

6. 结 论

基于振动力学中连续系统离散化的思想,本文将一维LM法^[19]进一步延伸至二维,用以计算二维声子晶体的带隙特性.该方法的计算结果与传统

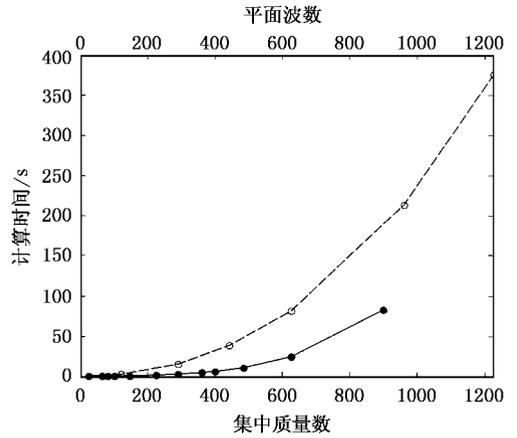


图8 两种算法的计算时间与计算矩阵规模的关系 ——为LM法在计算算例I和算例II的带结构中 M 点上 z 模式时所需要的计算时间与所引入的集中质量数的关系,---为PWE法在计算两个算例时相应的计算时间和引入的平面波数的关系.在引入同样多的集中质量数和平面波数时,两种算法的计算矩阵规模相同

PWE法计算结果相符合,而且文中算法具有以下特点:

1. 由于LM法是一种空域方法,它成功避免了PWE法中傅里叶级数展开所带来Gibbs现象,不同介质交界面上的大弹性常数跃变得以正确表达,这使得LM法的收敛性与界面弹性常数差无关,因此该方法尤为适合计算具有极软材料组分的声子晶体的带隙特性.由于此类声子晶体可能在小尺寸情况下获得低频禁带,该方法对于声子晶体在小尺寸低频减振降噪方面的应用有较大意义.

2. 由于LM法使用有限点阵来表示声子晶体的一个晶胞,因此对晶胞拓扑结构的精确描述存在一定困难,而且不同介质交接面存在难以避免的锯齿形边界,这些因素使得其收敛结果在正确值附近有一定波动.

3. 与PWE法以及MST法相比,LM法对单元结构、形状均无特殊要求,可方便地计算任意单元形状的声子晶体的带隙特性.

4. 由于LM法的本质思想是采用集中质量的离散系统来近似连续系统,这一思想使得该方法可以更加直观地描述声子晶体内部作用机理,这对声子晶体带隙产生机理的揭示将起到重要作用.

- [1] Johnson S G and Joannopoulos J D 2002 *Photonic Crystals—The Road from Theory to Practice* (Dordrecht : Kluwer Academic)
- [2] Sigalas M M and Economou E N 1992 *J. Sound Vib.* **158** 377
- [3] Sigalas M M and Economou E N 1993 *Solid State Commun.* **86** 141
- [4] Economou E N and Sigalas M M 1993 *Phys. Rev. B* **48** 13434
- [5] Kushwaha M S *et al* 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 2022
- [6] Kushwaha M S *et al* 1994 *Phys. Rev. B* **49** 2313
- [7] Martinez-Sala R *et al* 1995 *Nature* **378** 241
- [8] Liu Z Y *et al* 2000 *Science* **289** 1734
- [9] Goffaux C and Sánchez-Dehesa J 2003 *Phys. Rev. B* **67** 144301
- [10] 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]
- [11] Wu F G *et al* 2002 *J. Phys. D : Appl. Phys.* **35** 162
- [12] Vasseur J O *et al* 1998 *J. Phys. : Condens. Mat.* **10** 6051
- [13] Kafesaki M *et al* 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 6050
- [14] Kafesaki M and Economou E N 1999 *Phys. Rev. B* **60** 11993
- [15] Liu Z Y *et al* 2000 *Phys. Rev. B* **62** 2446
- [16] Chen Y Y and Ye Z 2001 *Phys. Rev. E* **64** 36616
- [17] Sigalas M and García N 2000 *J. Appl. Phys.* **87** 3122
- [18] Wang G *et al* 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1943 (in Chinese) [王刚等 2003 物理学报 **52** 1943]
- [19] Wen J H *et al* 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 3384 (in Chinese) [温激鸿等 2004 物理学报 **53** 3384]
- [20] Jensen J S 2003 *J. Sound Vib.* **266** 1053
- [21] Hand L N and Finch J D 1998 *Analytical Mechanics* (Cambridge : Cambridge University Press)
- [22] Ashcroft N W 1987 *Solid State Physics* (International Thomson Publishing)

Lumped-mass approach for the calculation of band structure of two-dimensional phononic crystals with high contrast of elastic constant^{*}

Wang Gang[†] Wen Ji-Hong Liu Yao-Zong Yu Dian-Long Wen Xi-Sen

(Institute of Mechatronic Engineering , and PBG Research Center , National University of Defense Technology , Changsha 410073 , China)

(Received 19 April 2004 ; revised manuscript received 12 May 2004)

Abstract

With each unit cell replaced by a system of finite freedoms of motion , two-dimensional phononic crystals can be simplified to an infinite discrete periodic system. Therefore , the elastic wave band structures of the two-dimensional phononic crystals can be calculated with a straightforward lumped-mass approach , whose computational cost is much lower than the well-known plane wave expansion(PWE) method. The numerical results of the two methods are in reasonable agreements. As the well-known Gibbs oscillations in the PWE can be eliminated with the lumped-mass method , this new approach is insensitive to the sharp variation of elastic constants on the interfaces inside the phononic crystals. Furthermore , the lumped-mass method can also be used to calculate the band structures of two-dimensional phononic crystals with arbitrary unit shapes easily.

Keywords : phononic crystal , phononic band-gap , lumped-mass method

PACC : 4320 , 4335 , 0260 , 8160H

^{*} Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No.51307).

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