

二维声子晶体同质位错结缺陷态特性*

赵 芳 苑立波†

(哈尔滨工程大学理学院物理系, 哈尔滨 150001)

(2005 年 5 月 20 日收到, 2005 年 7 月 4 日收到修改稿)

利用平面波展开法结合超原胞的方法研究了二维声子晶体同质位错结的缺陷态. 分别研究了横向位错和纵向位错两种情况. 研究表明, 横向位错效应与线缺陷相似, 它可以使处于禁带频率范围内的声波沿位错通道进行传播, 形成声波导. 纵向位错效应则类似于点缺陷, 位错线两边三个最接近的散射子形成腔, 因而能够产生局域模. 另外, 横向位错距离和纵向位错距离的大小将影响缺陷带的位置和数量, 因此, 可以通过调节横向位错距离或纵向位错距离来人为的控制同质位错结中的缺陷带.

关键词: 声子晶体, 同质位错结, 缺陷态

PACC: 0340K, 4630C, 7115B, 8160H

1. 引 言

十几年前, 对具有光子禁带的周期性电介质结构功能材料——光子晶体的研究极其活跃^[1-3]. 随后, 人们发现当弹性波在周期性弹性复合介质中传播时, 也会产生类似的弹性波禁带, 于是提出了声子晶体的概念^[5]. 声子晶体由于具有丰富的物理内涵及潜在的广阔应用前景, 而引起了各国研究机构的高度关注^[4-18].

当声子晶体中存在(或引入)点缺陷或线缺陷时, 禁带内的弹性波将被局域在点缺陷内或只能沿线缺陷传播. 人们对于利用缺陷人为地调控弹性波的流动产生了极大的兴趣, 在声子晶体缺陷态的研究方面作了大量的工作^[9-18], 但普遍将研究的焦点集中在点缺陷和线缺陷(通过移去一排或几排散射子形成)上. 在这些研究工作的基础上, 本文进一步将固体物理学中的一种晶体结构上的拓扑缺陷——位错, 引入到声子晶体的范畴中, 构造出了声子晶体同质位错结. 对于同质位错结, 除去在位错线附近, 晶体仍保持理想的晶格排列. 由于在位错线附近很小的区域内的散射子排列和理想的状况十分不同, 因而丧失了晶格的规则排列, 有可能产生缺陷态. 于是我们分别探究了横向位错结和纵向位错结的特

性. 研究表明: 横向位错效应与线缺陷相似, 它可以使处于禁带频率范围内的声波沿位错通道进行传播, 形成声波导; 纵向位错效应则类似于点缺陷, 位错线两边三个最接近的散射子形成腔, 因而能够产生局域模.

2. 同质位错结

以二维铝合金/空气体系正方格子声子晶体为研究对象, 文献^[19]认为固体刚度无限大, 即不可压缩, 则声波不传入固体中, 声波的传播只在空气中进行. 所以固/气体系可以被近似为液/气体系, 相应地, 声波方程可以被简化为

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

其中, $\lambda(\mathbf{r})$, $\rho(\mathbf{r})$ 和 p 分别为弹性常数、材料密度和压强.

由于同质位错结是一种非周期结构, 需要利用平面波展开法结合超原胞法进行研究. 需要注意的是超原胞要选取得足够大, 以保证相邻的超原胞间的耦合效应可以被忽略.

同质位错结按位错方向的不同, 可以被划分为横向位错结((10)方向)和纵向位错结((01)方向)两种.

* 教育部第三届高校优秀青年教师教学科研奖励计划等项目资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: lbyuan@vip.sina.com

2.1. 横向位错结

如图 1 所示,将位错线左(右)两边所有散射子沿着横向,即(10)方向,整体向左(右)移动一段距离 $|\Delta x|/2$,即所谓的横向位错 Δx 距离.其中 a 为正方形晶格常数, f 为填充系数,位错线沿着晶格的(01)方向.图 1 中虚线所包围的矩形是一个超原胞,它在位错线两边各取了相同数量的散射子(即相同数量的原胞).

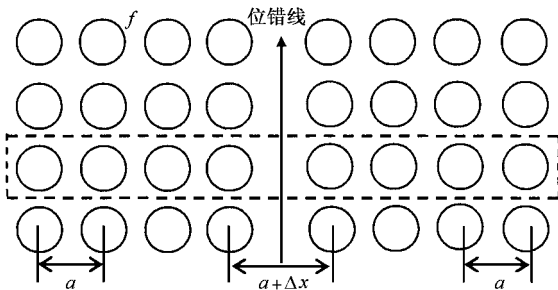


图 1 横向位错结构示意图

2.2. 纵向位错结

纵向位错 Δy 指的就是将左(右)边的散射子沿着位错线,即(01)方向,整体向上(下)移动 $|\Delta y|/2$ (如图 2 所示).图中的标注同横向位错结.

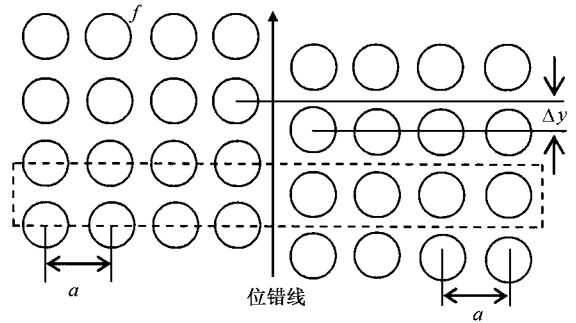


图 2 纵向位错结构示意图

取 4 个散射子组成超原胞,采用的平面波数为 $N = 65 \times 19 = 1235$,填充系数取 $f = 0.7$,此时原型声子晶体的带隙位于 $\omega = \Omega(2\pi C_0/a) = (0.3561 - 0.7697)(2\pi C_0/a)$ 的范围之内,其中 $C_0 = \sqrt{\bar{\rho}^{-1}/\bar{\lambda}^{-1}}$, $\bar{\rho}$, $\bar{\lambda}$ 分别代表铝合金和空气两种物质的平均密度和平均弹性常数.

计算结果如图 3,两条平行线给出了绝对带隙的范围,点画线表示缺陷带(位于带隙中的部分成为传导模).图 3(a)给出了横向位错 $\Delta x = a/2$ 的情形,此时绝对带隙位于 $(0.3503 - 0.7699)(2\pi C_0/a)$,带宽略微增加到 $\Delta\omega = 0.419(2\pi C_0/a)$.在绝对带隙中有三条缺陷带,并且其中有一条缺陷带接近带隙中间部位,远离带隙边缘,从而具有很好的稳定性.而纵向位错 $\Delta y = 0.35a$ 的情形由图 3(b)给出,相应绝对带隙位于 $(0.3349 - 0.7698)(2\pi C_0/a)$,带宽为 $\Delta\omega = 0.434(2\pi C_0/a)$,此时在带隙中出现了三条缺陷带,其中完全落入带隙的为一条二重简并局域模式.

同质位错结产生缺陷态的机理可以理解如下:

3. 数值计算结果及分析

铝合金和空气的相关物理参数分别为: $\rho_{Al} = 2700\text{kg/m}^3$, $\rho_{air} = 1.21\text{kg/m}^3$; $Cl_{Al} = 6260\text{m/s}$, $Cl_{air} = 343\text{m/s}$.在实际计算中,一共取 $M = 8$ 个(两边各选

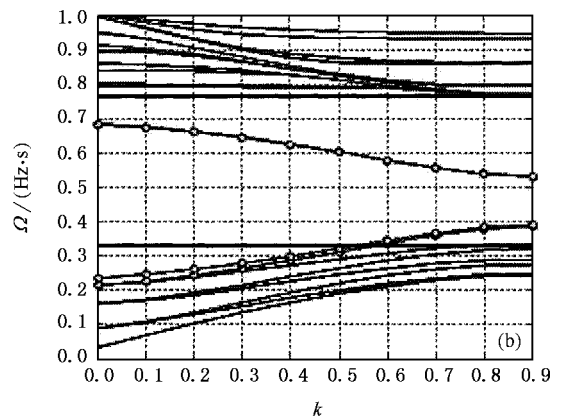
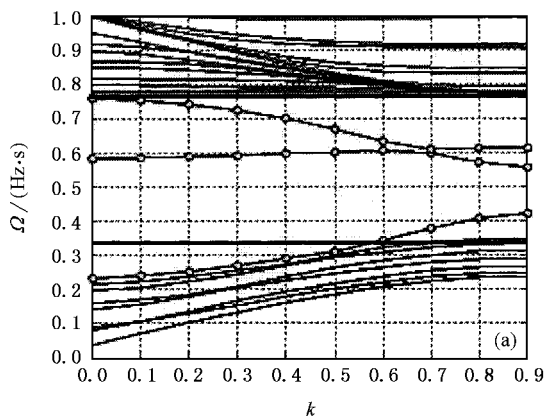


图 3 同质位错结 $f = 0.7$ 时的能带图 (a) 横向位错 $\Delta x = a/2$ (b) 纵向位错 $\Delta y = 0.35a$, $\Omega = \omega a/2\pi C_0$ 为归一化频率, $k = Ka/2\pi$ 为布洛赫波矢

引入横向位错时,位错线两边的空间增大了,它在位错线处提供了一个足够大的势阱,使得接近带隙上下边带的能带落入势阱中,形成缺陷态.因此,横向位错结可以使处于禁带频率范围内的声波沿位错通道进行传播,形成声波导.可以看出,线缺陷就是横向位错 $\Delta x = a$ 时的特殊情况;而当引入纵向位错时,在位错线两边三个最接近的散射子所围成的空间类似于腔,因而能够产生局域模.可见纵向位错效应类似于点缺陷,相当于形成了微腔.相应的,所形成的腔的几何构造、空间的分离程度以及边缘的构造将会影响所产生的局域模.

下面我们将考察横向位错距离与纵向位错距离对缺陷带的影响.采用步长 $\Delta x = 0.1a$,让 Δx 从 $0.1a$ 变化至 a ,结果显示缺陷带的数量与横向位错距离有着直接的关系.横向位错距离 Δx 越大,则出现的缺陷带就越多,最多可达5条.当 $\Delta x = 0.1a$ 时,第1条缺陷带完全进入绝对带隙中,变为传导模,而且第2条、第3条缺陷带也分别开始从带隙的上边带和下边带进入带隙中;当 $\Delta x = 0.3a$ 时,第2条缺陷带也完全进入绝对带隙中;当 $\Delta x = 0.9a$ 时,第4条和第5条缺陷带开始从带隙上边带落入带隙中.其中在 $0.6a \leq \Delta x \leq a$ 的范围内,第1、2条缺陷带都完全进入带隙中,并且远离带隙边缘,所形成的两条传导模具有很好的稳定性.采用步长 $\Delta y = 0.1a$,让 Δy 从 $0.1a$ 变化至 $0.9a$,我们发现随着纵向位错距离 Δy 的增加,一部分模式从带隙上边带落入带隙中,而另一部分模式从带隙的下边带进入带隙中,而后又分别从上边带和下边带重新返回能带中.当 $\Delta y = 0.1a$ 时,有两个模式从带隙的上边带落入带隙中,变为传导模开始向下边带移动,并以 $\Delta y = 0.5a$ 为转折点,开始重新向上边带移动.当 $\Delta y = 0.9a$ 以后,开始从带隙的上边带返回能带中.可以看出,这两个模式在 $0.2a \leq \Delta y \leq 0.8a$ 时,变为一条二重简并传导模.而第3、4条缺陷带分别是当 $\Delta y = 0.2a$ 和 $\Delta y = 0.1a$ 时,开始从带隙的下边带进入带隙中,并逐渐向带隙中移动,当 $\Delta y = 0.5a$ 以后,又开始转向下边带方向移动,当 $\Delta y = 0.8a$ 和 $\Delta y = 0.9a$ 时,分别重新完全移出带隙返回下边带.可以发现,曲线实际上是以 $\Delta y = 0.5a$ 为对称轴的.这一点不难理解,因为对称于 $\Delta y = 0.5a$ 的纵向位错距离所形成腔的几何构造和空间的分离程度是完全一致的,相应的局域模式自然是相同的.

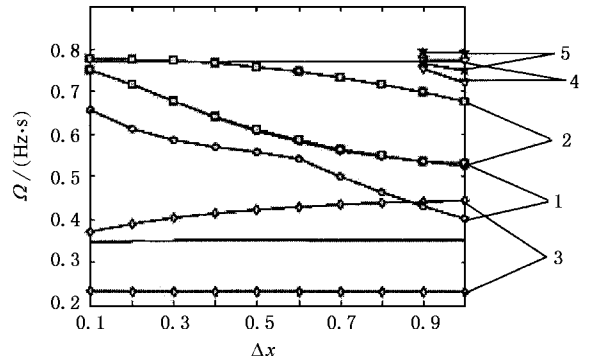


图4 缺陷带上下边带频率随横向位错距离的变化曲线 两条实线给出了绝对带隙的范围

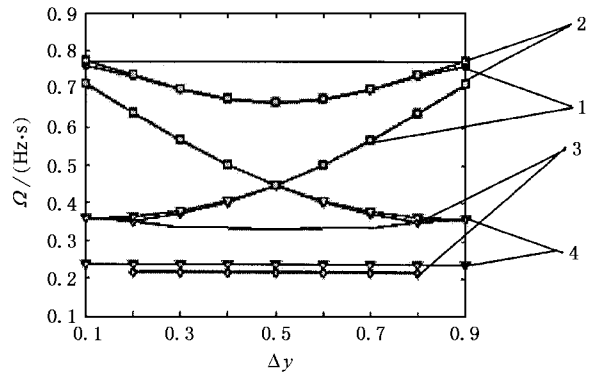


图5 缺陷带上下边带频率随纵向位错距离的变化曲线 两条实线给出了绝对带隙的范围

可见,横向位错距离和纵向位错距离的大小将影响缺陷带的位置和数量,因此,我们可以通过调节横向位错距离或纵向位错距离来人为的控制同质位错结中的局域模.

4. 结 论

本文用平面波展开法结合超原胞的方法分别研究了二维声子晶体同质位错结中的横向位错结和纵向位错结,其中横向位错结可以使处于禁带频率范围内的声波沿位错通道进行传播,形成声波导,纵向位错结,位错线两边三个最接近的散射子形成腔,因而也能够产生局域模.另外,横向位错距离和纵向位错距离的大小将影响缺陷带的位置和数量,因此,我们可以通过调节横向位错距离或纵向位错距离来人为的控制同质位错结中的缺陷带.

- [1] Joannopoulos J D , Meade R D , Winn J N 1995 *Photonic Crystals* (Princeton : Princeton University Press) 4044
- [2] Yablonovitch E 1987 *J. Phys. Rev. Lett.* **58** 2059
- [3] John S 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2486
- [4] Sigalas M M , Economou E N 1992 *J. Sound and Vibration* **158** 337
- [5] Kushwaha M S , Halevi P , Dobrzynski L *et al* 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 2022
- [6] 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]
- [7] Wang G , Wen J H , Han X Y *et al* 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1943 (in Chinese) [王 刚、温激鸿、韩小云等 2003 物理学报 **52** 1943]
- [8] Wen J H , Wang G , Liu Y Z *et al* 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 3384 (in Chinese) [温激鸿、王 刚、刘耀宗等 2004 物理学报 **53** 3384]
- [9] 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]
- [10] Kafesaki M , Sigalas M M , Garcia N 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85**
- [11] Khelif A , Choujaa A , Laihem R *et al* 2003 *IEEE Ultrasonics Symposium* 377
- [12] Khelif A , Choujaa A , Djafari-Rouhani B *et al* 2003 *Phys. Rev. B* **68** 214301
- [13] Khelif A , Deymier P A , Djafari-Rouhani B *et al* 2003 *J. Appl. Phys.* **94** 1308
- [14] Khelif A , Wilm M , Laude V , Ballandras S 2004 *Phys. Rev. E* **69** 067601
- [15] Khelif A , Choujaa A , Benchabane S 2004 *Appl. Phys. Lett.* **84** 4400
- [16] Zhang X , Liu Z Y , Liu Y Y *et al* 2004 *Sol. Stat. Commun.* **130** 67
- [17] Li X C , Liu Z Y 2005 *Sol. Stat. Commun.* **133** 397
- [18] Pennec Y , Djafari-Rouhani B , Vasseur J O *et al* 2004 *Phys. Rev. E* **69** 046608
- [19] Vasseur J O , Deymier P A , Khelif A *et al* 2002 *Phys. Rev. E* **65** 056608

Defect states of homogeneity dislocation structures in two-dimensional phononic crystal ^{*}

Zhao Fang Yuan Li-Bo[†]

(Department of Physics , Harbin Engineering University , Harbin 150001 , China)

(Received 20 May 2005 ; revised manuscript received 4 July 2005)

Abstract

The defect states in two-dimensional phononic crystal homogeneity dislocation structures has been studied by means of the plane-wave expansion method in combination with a supercell technique. Transverse dislocation structures and longitudinal dislocation structures are investigated respectively. The results show that , acting as a line defect , transverse dislocation structures can mold the flow of sound in the bandgap along the dislocation channel and form the so called waveguides ; while longitudinal dislocation structures , which act just as point defects , can form a cavitylike void surrounded by the three nearest cylinders around the dislocation line to create a localized state. In addition , the number and the position of defect bands strongly depend on the transverse and longitudinal dislocation displacement , so we can artificially control the defect bands by adjusting the transverse and longitudinal dislocations of lattices in a homogeneity dislocation structures.

Keywords : phononic crystal , homogeneity dislocation structures , defect states

PACC : 0340K , 4630C , 7115B , 8160H

^{*} Project supported by the Teaching and Research Award Program for Outstanding Young Professors in Higher Education Institute MOE ,China ,to Harbin Engineering University.

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