

超元胞方法研究平移群对称性对声子带隙的影响^{*}

牟中飞 吴福根[†] 张欣 钟会林

(广东工业大学实验教学部, 物理与光电工程学院, 广州 510090)

(2006 年 11 月 6 日收到, 2007 年 3 月 27 日收到修改稿)

采用基于超元胞的平面波展开法, 计算了由水银(水)正四棱柱体按正方格子排列于水(水银)基体中所组成的两种声子晶体的能带结构. 通过改变两相邻的柱体底面边长之比来改变声子晶体的平移群对称性. 结果发现, 改变相邻柱体的底面边长之比, 具有很好的调节声学带隙的作用. 研究表明, 声子晶体的平移群对称性对于其带隙的形成具有重要影响, 同时还表明, 超元胞方法也是研究声子晶体平移群对称性影响声子带隙形成的一种有效方法.

关键词: 声子晶体, 带隙, 对称性

PACC: 4320, 6260, 7125C

1. 引 言

声子晶体是 20 世纪 90 年代初提出的一种新型声学功能材料, 它是在传统晶体和光子晶体研究基础上提出的新课题. 由于对声子晶体的研究既有重要的理论意义, 又有广阔的实际应用前景, 因此该领域已经成为国内外学术界的研究热点之一^[1-8]. 声子晶体的一个重要特征就是在其能带结构中存在着声子带隙, 即频率落在带隙范围内的弹性波(声波)不能穿过声子晶体. 由于声子晶体的许多应用都取决于带隙及其宽度, 因而人们投入了大量的时间和精力研究声子晶体的能带结构, 现在已经从理论和实验方面发现了二维及三维周期性结构中声子带隙的存在及其调节机理.

一般情况下, 影响声子带隙形成的因素主要有材料的弹性模量^[9,10]、散射体的几何形状^[10,11]、填充率^[9,12-15]、排列形式^[12-18]以及系统的对称性^[17-19]等, 而其中系统的对称性对于声子带隙的影响又至关重要. 由固体物理知识可知, 声子晶体的对称性由点阵结构的对称性和点阵上排列的各个基元的对称性及其拓扑关系所决定. 由于声子晶体的可设计性, 我们可在不改变点阵结构对称性的前提下, 通过改变基元的对称性或仅改变基元的方位来达到声子带

隙的调节作用.

在二维声子晶体中, 非圆柱形柱体(三角形、正方形、六边形、八边形等)方位的改变, 在既不改变点阵结构的对称性, 也不改变柱体本身的对称性的情况下, 却可改变声子晶体的对称性(点群). 例如: 在正方形排列的声子晶体中, 柱体方位的改变可使声子晶体的对称性由 C_{4v} 变化为 C_{2v} ^[20], 而在三角形排列的声子晶体中则可使其由 C_{6v} 变化为 C_{2v} ^[21]. 因此, 柱体方位的变化改变了声子晶体的点群对称性, 从而也调节了声子带隙. 近来, 我们的工作还发现^[20,21], 在非圆柱形柱体按正方形排列和三角形排列所组成的声子晶体中, 声子带隙的极大值和极小值均出现在柱体方位使得声子晶体具有最大对称性点的位置上.

我们知道, 声子晶体对称性的改变既可以通过改变点群对称性来实现, 同时也可以通过改变其平移群对称性来实现. 本文中, 我们将采用超元胞的平面波展开(PWE)法来研究由水银和水组成的二维声子晶体中平移群对称性改变对其声子带隙的影响. 该方法已成功地应用于含缺陷的声子晶体的能带结构的计算中^[22]. 本文工作表明了超元胞方法也是研究声子晶体平移群对称性对声子带隙影响的一种有效方法, 声子晶体平移群对称性的改变也是调节声子带隙的一种有效机制.

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 10674032)和广东省自然科学基金(批准号: 6021480, 6300237)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: wufugen@21cn.com

2. 模型和方法

本文中我们采用超元胞的 PWE 法, 计算由水银正四棱柱体按正方格子排列于水基体中(以下称 MW 声子晶体)和由水正四棱柱体按正方格子排列于水银基体中(以下称 WM 声子晶体)所组成的两种声子晶体的带隙结构. 声子晶体的横截面结构如图 1 所示.

在图 1(a)中, 系统由完全相同的柱体所组成,

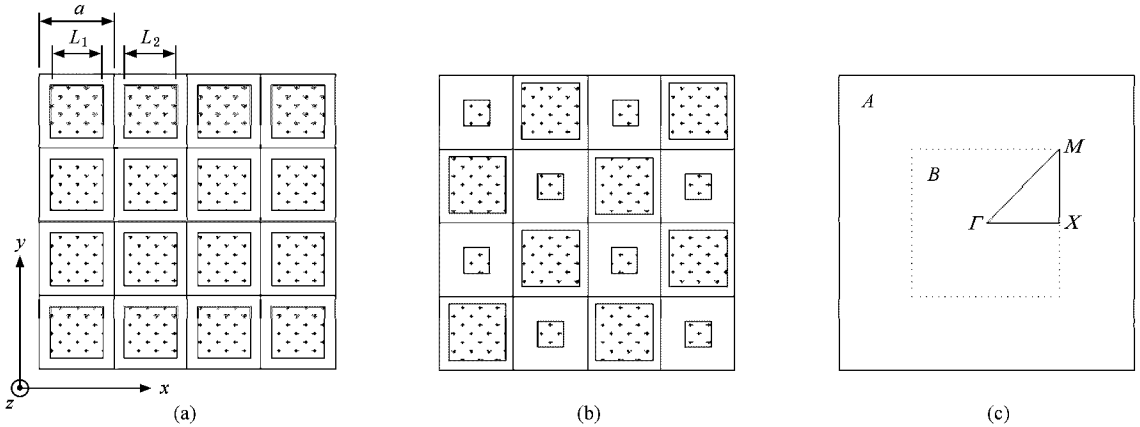


图 1 声子晶体的横截面结构 (a) $L_1/L_2 = 1$ (b) $L_1/L_2 \neq 1$ (c) 原始单胞(区域 A)和超元胞(区域 B)的第一布里渊区

在超元胞的情形下, 考虑二维液体-液体系统, 声波的波动方程可以化成如下本征方程^[21]:

$$\sum_{G'} [\omega^2 \lambda_{G-G'}^{-1} - \rho_{G-G'}^{-1} (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{G}')] P_G = 0, \quad (2)$$

式中 ω 为声波频率, $\lambda_{G'}^{-1}$, $\rho_{G'}^{-1}$ 和 P_G 分别为液体体模量 λ 、质量密度 ρ 和压强 P 的傅里叶分量. (2) 式中的波矢 \mathbf{k} 被限制于第一布里渊区.

在用(2)式进行声子晶体的能带结构计算时, 最关键的一步是结构函数 $p(\mathbf{G})$ 的计算, 它完全由散射体的几何形状决定. 在本文所示的超元胞情形下, 可计算得到的结构函数为

$$p(\mathbf{G}) = \frac{1}{S} \int_S e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} d^2 r$$

$$= \frac{2L_2^2}{S} \cos \frac{a}{2} (G_x + G_y) \frac{\sin \frac{L_2 G_x}{2} \sin \frac{L_2 G_y}{2}}{\frac{L_2^2 G_x G_y}{4}}$$

$$+ \frac{2L_1^2}{S} \cos \frac{a}{2} (G_x - G_y) \frac{\sin \frac{L_1 G_x}{2} \sin \frac{L_1 G_y}{2}}{\frac{L_1^2 G_x G_y}{4}} \quad (3)$$

此时系统在 x 和 y 方向的最小平移周期均为 a , 相应的倒格子基矢均为 $2\pi/a$. 然后我们逐步改变相邻的两个柱体的底边边长之比 L_1/L_2 , 如图 1(b) 所示. 此时系统在 x 和 y 方向的最小平移周期就变化为 $2a$, 相应的倒格子基矢则为 π/a , 倒格子矢量为

$$\mathbf{G} = n_x G_x \mathbf{i} + n_y G_y \mathbf{j} = n_x \frac{\pi}{a} \mathbf{i} + n_y \frac{\pi}{a} \mathbf{j}, \quad (1)$$

式中 n_x 和 n_y 均为整数. 取 2×2 的超元胞(图 1(c) 所示为 4 个超元胞)作为最小的重复单位, 图 1(c) 给出了单胞和超元胞的第一布里渊区.

式中 $2a$ 为超元胞的晶格常数, S 为超元胞的面积, 本文中 $S = 4a^2$, L_1 和 L_2 分别为两类柱体的底边边长.

在本文中, 我们使用了 529 个平面波来进行计算. 结果显示很好的收敛性, 能带结构的误差小于 0.5%.

3. 结果及分析

3.1. MW 声子晶体中的能带结构

首先, 我们研究由水银柱体在水中以正方形排列时的声子晶体, 即 MW 声子晶体. 对于图 1(a) 所示的模型, 由于相邻柱体的大小相同, 我们既可用单胞的 PWE 方法, 也可以用 2×2 的超元胞的 PWE 方法来计算, 所得的结果是一致的, 所不同的是由于单胞时的第一布里渊区比超元胞时的大 4 倍, 因此, 对应单胞时的 1 条能带将折叠成 4 条超元胞时的能带(我们称每 4 条能带为一组能带). 图 2(a) 给出了填充率 $F = 0.5$ 时超元胞的能带结构, 与单胞的计算结果相同^[16], 此时无带隙出现.

然后令两个正四棱柱的底边长减小而另外两个正四棱柱的底边长增加(以保持超元胞的填充率 $F = 0.5$ 不变),得到如图 1(b)所示的声子晶体. 超元胞的 PWE 法计算结果显示,随着柱体底边边长比 L_1/L_2 的减小,在第一布里渊区内一些具有高对称性的点处的能级简并呈现出逐渐分立的趋势. 当 $L_1/L_2 = 0.447$ 时,能带之间开始出现完全带隙,并且

随着底边边长比的进一步减小,带隙逐渐增大. 图 2(b)给出了 $L_1/L_2 = 0$ 时,即较小正四棱柱的底边边长为零,超元胞中只有两根较大的正四棱柱时的能带结构图. 此时在最低频率的 12 条能带之间有 3 条带隙出现,其中能带 2—3 之间的带隙为最大带隙,其带隙的频率宽度为 $\Delta\omega = 2.376c/a$,相对频率宽度为 $\Delta\omega/\omega_g = 0.494$,其中 ω_g 为带隙的中间频率.

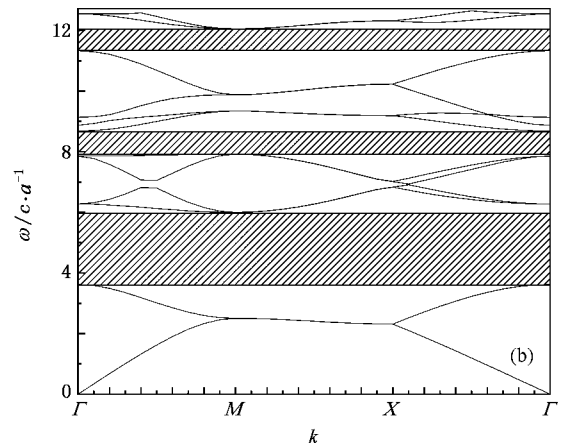
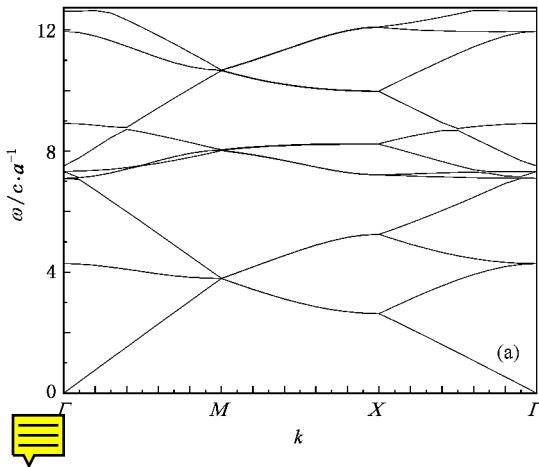


图 2 MW 声子晶体的能带结构. 填充率 $F = 0.5$,图中的每一个阴影部分表示一条带隙.(a) 所有柱体具有相同的底边长 (b) 其中的两个柱体的底边长为零

图 3 给出了能带 2—3 之间带隙的相对宽度以及该带隙的上下边缘的频率随底边边长比的变化情况. 从图 3 可以看出,随着底边边长比的减小,该带

隙的相对宽度单调地增大,带隙的上下边缘的频率分别逐渐地增大和减小,而其中心频率则基本上保持不变.

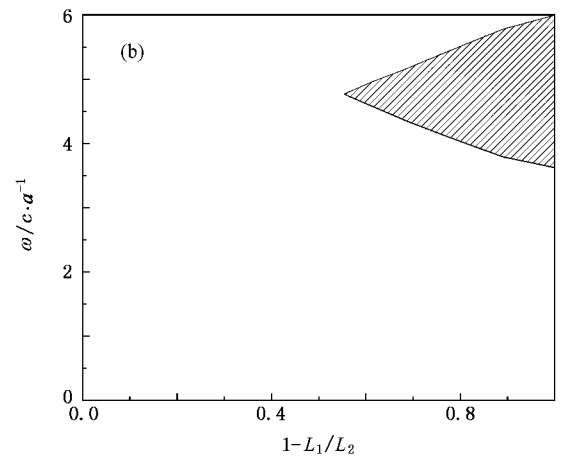
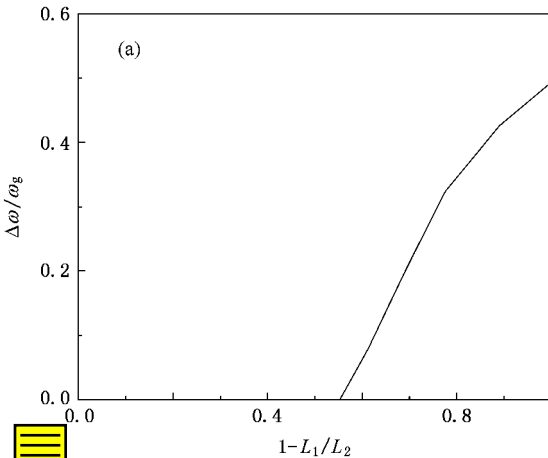


图 3 MW 声子晶体中,能带 2—3 之间带隙随底边边长比的变化情况 (a) 带隙的相对宽度变化 (b) 带隙上下边缘的频率变化

3.2. WM 声子晶体的能带结构

同样,用超元胞的 PWE 法研究了 WM 声子晶体的能带结构. 如图 4(a)给出了 $L_1/L_2 = 1$ 和 $F = 0.5$ 时的能带结构图. 此时在最低频率的 12 条能带之间,仅在能带 4—5 之间(即第一组能带和第二组能

带之间)存在带隙,其频率宽度为 $\Delta\omega = 4.828c/a$,相对频率宽度为 $\Delta\omega/\omega_g = 0.776$. 当底边边长比从 1 逐渐减小到零的过程中,每组能带逐渐从中间分立成两部分,并显示出明显的简并分立形成带隙的趋势. 而组与组之间所形成的带隙则呈现明显的逐渐减小趋势. 图 4(b)给出了 $L_1/L_2 = 0$ 时的能带结构图. 此

时,能带 4—5 之间的带隙已消失,而在能带 2—3, 6—7, 10—11 之间(即分别为第一、第二、第三组能带的中间)出现了三条带隙,其中在能带 2—3 之间的带隙为最大的带隙,其带隙的频率宽度为 $\Delta\omega = 2.425c/a$, 相对频率宽度为 $\Delta\omega/\omega_g = 0.494$.

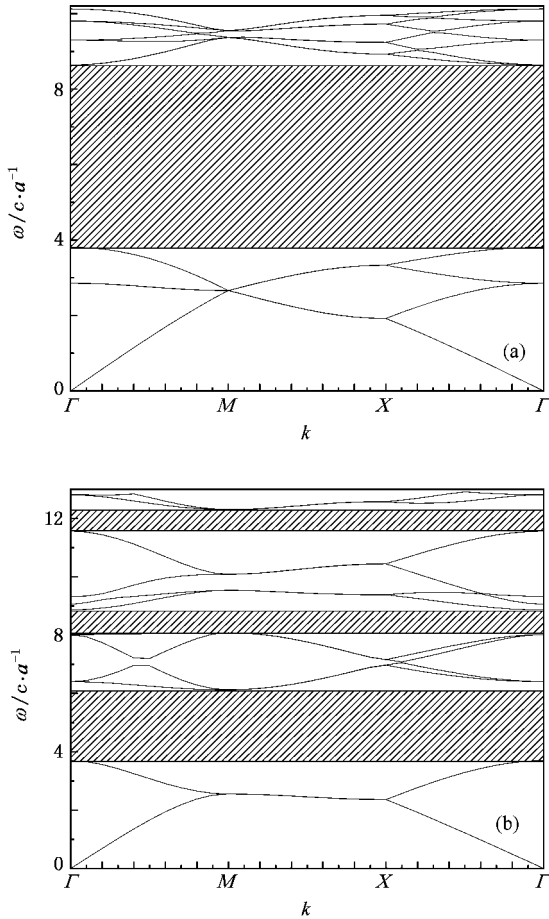


图 4 WM 声子晶体的能带结构 填充率 $F = 0.5$, 图中每一个阴影部分表示一条带隙。(a) 所有柱体具有相同的底边长 (b) 其中的两个柱体的底边长为零

图 5 (a) 给出了当底边边长比从 1 逐渐减小到零过程中, WM 声子晶体能带结构中能带 2—3 之间带隙以及能带 4—5 之间带隙的变化情况。当 $L_1/L_2 = 1$ 时, 在能带 2—3 之间没有带隙, 而在能带 4—5 之间有一较宽带隙。随着底边边长比的减小, 能带 4—5 之间的带隙逐渐减小, 至 $L_1/L_2 = 0$, 此带隙消失。而同时在能带 2—3 之间先是具有明显的简并分立趋势而未形成带隙, 自 $L_1/L_2 = 0.85$ 开始, 带隙出现并逐渐展宽, 至 $L_1/L_2 = 0$ 时带隙达到最大值。图 5 (b) 则给出了底边边长比变化过程中两条带隙的上下边缘的变化过程。

用同样的方法, 我们改变散射体的填充率(分别

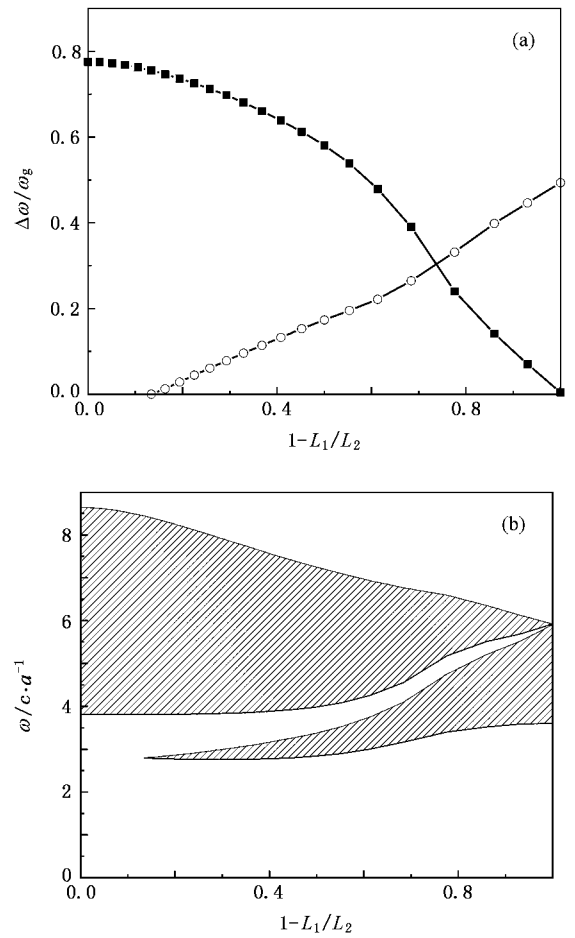


图 5 WM 声子晶体中, 能带 2—3 之间及能带 4—5 之间带隙随底边边长比的变化情况 (a) 带隙的相对宽度变化(—○—为能带 2—3 之间的相对带隙, —■—为能带 4—5 之间的相对带隙); (b) 带隙上下边缘的频率变化(下方的阴影部分表示能带 2—3 之间的带隙, 上方的阴影部分表示能带 4—5 之间的带隙)

取填充率 F 为 0.1, 0.2, 0.3, 0.4), 计算了改变声子晶体平移群对称性前后的能带结构。结果均表现出一个共同的性质, 那就是在两种系统中改变声子晶体平移群对称性的过程中, 每组能带的中部都会逐渐发生能级分立, 向形成带隙并展宽的方向发展(但仅当填充率较大时, 可以形成带隙并展宽, 当填充率较小时, 仅有能级分立形成带隙的趋势, 但最终也未能形成带隙), 而相邻两组能带之间未出现带隙或带隙呈现逐渐减小趋势。

4. 结 论

本文采用超元胞的 PWE 法研究了平移群对称性改变对二维声子晶体带隙的影响。结果发现, 无论是把高密度散射体(水银)放入低密度基体(水)中的

MW 系统, 还是把低密度散射体(水)放入高密度基体(水银)中的 WM 系统, 在改变其平移群对称性的过程中, 每组能带的中部都会逐渐发生简并分立, 并向形成带隙和展宽的方向发展, 而相邻两组能带之间未出现带隙或带隙呈现逐渐减小趋势.

本文的工作表明, 超元胞方法是研究声子晶体

平移群对称性对声子带隙形成影响的一种有效方法, 声子晶体平移群对称性的改变是调节声子带隙的一种有效机制. 与通过改变点群对称性的方法来调节声学带隙一样, 我们也可以通过改变声子晶体的平移群对称性的方法来发现一些有较宽声子带隙或多重带隙的声子晶体.

- [1] Wen X S 2006 *Theory and Technology of Photonic/Phonic Crystals* (Beijing: Science Press) (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] Kushwaha M S, Halevi P, Dobrzynski L, Djafari-Rouhani B 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 2022
- [3] Liu Z Y, Zhang X X, Mao Y W 2000 *Science* **289** 1734
- [4] Hua J, Zhang S, Cheng J C 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 1261 (in Chinese) [华 佳、张 舒、程建春 2005 物理学报 **54** 1261]
- [5] Wang W G, Liu Z Y, Zhao D G, Ke M Z 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4744 (in Chinese) [王文刚、刘正猷、赵德刚、柯满竹 2006 物理学报 **55** 4744]
- [6] Li X C, Yi X Y, Xiao Q W, Lian H Y 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2300 (in Chinese) [李晓春、易秀英、肖清武、梁宏宇 2006 物理学报 **55** 2300]
- [7] Wang G, Liu Y Z, Wen J H, Yu D L 2006 *Chin. Phys.* **15** 407
- [8] Wang G, Shao L H, Liu Y Z, Wen J H 2006 *Chin. Phys.* **15** 1843
- [9] Economou E N, Sigalas M M 1994 *J. Acoust. Soc. Am.* **95** 1734
- [10] Vasseur J O, Djafari-Rouhani B, Dobrzynski L, Kushwaha M S, Halevi P 1994 *J. Phys. Condens. Matter* **6** 8759
- [11] Zhang X, Liu Z Y, Liu Y Y, Wu F G 2003 *Phys. Lett. A* **313** 455
- [12] Kafesaki M, Sigalas M M, Economou E N 1995 *Solid State Commun.* **96** 285
- [13] Wu F G, Hou Z L, Liu Z Y, Liu Y Y 2002 *Solid State Commun.* **123** 239
- [14] Kushwaha M S, Djafari-Rouhani B 1996 *J. Appl. Phys.* **80** 3191
- [15] Kushwaha M S, Halevi P 1996 *Appl. Phys. Lett.* **69** 31
- [16] Wu F G, Liu Z Y, Liu Y Y 2002 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **35** 162
- [17] Coffaux C, Vigneron J P 2001 *Physica B* **296** 195
- [18] Lai Y, Zhang X D, Zhang Z Q 2002 *J. Appl. Phys.* **91** 6191
- [19] Caballero D, Sánchez-Dehesa J, Rubio C, Martínez-Sala R, Sánchez-Pérez J V, Meseguer F, Linares J 1999 *Phys. Rev. E* **60** R6316
- [20] Zhong L H, Wu F G, Zhang X, Zhong H L, Zhong S 2005 *Phys. Lett. A* **339** 164
- [21] Ren M, Wu F G, Zhong L H, Zhong H L, Zhong S, Liu Y Y 2006 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **39** 2272
- [22] Wu F G, Liu Z Y, Liu Y Y 2004 *Phys. Rev. E* **69** 066609

Effect of translation group symmetry on phononic band gaps studied by supercell calculation^{*}

Mu Zhong-Fei Wu Fu-Gen[†] Zhang Xin Zhong Hui-Lin

(*Experiment Center , College of Physics and Optoelectronic Engineering , Guangdong University of Technology , Guangzhou 510090 , China*)

(Received 6 November 2006 ; revised manuscript received 27 March 2007)

Abstract

The band structure of two kinds of phononic crystals (the square lattice of mercury (water) rods in a water (mercury) host) has been calculated using the plane-wave expansion method based on super cell. The translation group symmetry of phononic crystal is changed by changing the size of adjacent rods. We found that by changing the lengths of sides of adjacent rods one can effectively adjust the phononic band gaps. The present work shows that the translation group symmetry of phononic crystal has an important influence on the formation of its band gaps , and the method based on super cell is an effective method of studying the influence of translation group symmetry of phononic crystal on the formation of phononic band gaps.

Keywords : phononic crystal , band gap , symmetry

PACC : 4320 , 6260 , 7125C

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10674032) and the Natural Science Foundation of Guangdong Province , China (Grant Nos. 6021480 , 6300237).

[†] Corresponding author. E-mail : wufugen@21cn.com