

正方点阵上 Fibonacci 超元胞声子晶体的带结构*

郝国郡 傅秀军† 侯志林

(华南理工大学物理系, 广州 510640)

(2009 年 3 月 3 日收到, 2009 年 4 月 9 日收到修改稿)

用平面波展开方法研究了水柱体作为填充物, 按照二维 Fibonacci 排列成超元胞填充在 Hg 基体中构成的声子晶体的声频带结构. 结果发现, 随着超元胞中准晶格常数的变化, 各个能带均出现三分裂. 对声场分布的研究发现了居间态的存在. 这些现象体现了准周期结构的特征.

关键词: Fibonacci 排列, 声子晶体, 能带结构

PACC: 6140M, 4320, 4620

1. 引言

在过去的十几年中, 人们对于声子晶体的研究已经做了大量的工作^[1-6]. 由于声子晶体具有可调节的带隙, 其应用前景被十分看好. 随着研究的深入, 人们发现声子晶体具有更丰富的物理性质, 一些在传统晶体中不能观察到的物理现象(例如 Bloch 振荡等), 可以在声子晶体结构中表现出来^[7]. 而对声子晶体的研究也不再局限于传统的周期结构, 其中具有准周期结构的声子晶体(即声子准晶体)是一个新的研究方向, 引起了物理学工作者的极大兴趣^[8].

具有准周期结构物质的研究, 起始于 1984 年实验上准晶体的首次发现^[9]. 准晶体结构的特点是具有长程的准周期平移序和长程取向序. 由于没有周期平移不变性的限制, 准晶体可以具有 5 次及大于 6 次的旋转对称性. 准晶体的另一特点是结构上的自相似性, 而且这一特点在物理性质上也有直接的体现. 如单电子紧束缚模型中, 能谱具有套层的分支结构, 且居间态波函数呈现出多分形分布^[10-12]. 由于准周期结构存在这样的特点, 因此, 在对周期结构的光子晶体和声子晶体做了充分研究后, 人们开始关注准周期结构是否能带来新的性质. 例如, Chan 等^[13]对光子准晶体的研究表明, 局域散射决定光子带隙的产生, 周期结构不是存在带

隙的必然要求. 赖云等^[14]在 12 次对称的声子准晶体中发现很宽的带隙. 张向东^[15]研究了 8 次、10 次和 12 次声子准晶体的声聚焦性质, 指出由于高对称性的存在, 它们具有普遍的非近场聚焦性质. Sutter-Widmer 等^[16]研究了声子准晶体中的超声传播性质, 采用周期平均结构预言了声子准晶体的带隙. 由于周期光子晶体及声子晶体的很多现象都已在准周期结构中实现, 因此本文虽然是计算声子晶体的带结构, 但研究的主要目的是探讨准周期结构的特点是否能在声波性质上有更好的体现. 在准晶体电子性质的研究结果中, 我们注意到一维 Fibonacci 准晶的能谱性质非常完美地反映了准周期结构的特点^[10], 而且二维 Fibonacci 准晶的能谱也具有规则的分裂方式^[12]. 因此, 本文并没有选择研究较为普遍的准晶体模型, 而是采用以二维 Fibonacci 准周期结构作为超元胞的声子晶体进行计算.

2. 模型与计算方法

Fibonacci 序列可由迭代关系 $a \rightarrow ab, b \rightarrow a$ 来产生. 例如从第 1 代 a 元素开始, 前五代的序列分别为 $a, ab, aba, abaab$ 和 $abaababa$. 若将 a 和 b 看作两种不同的距离, 格点在二维空间互相垂直的两个方向上均按 Fibonacci 序排列, 则构成二维 Fibonacci 结构. 我们的声子晶体模型是在正方点阵上放置超元胞构成的, 超元胞中以 Hg 为基体, 以

* 广东省自然科学基金(批准号 8451064101000328)和国家教育部留学回国人员科研启动基金资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: phxfu@scut.edu.cn

水柱体为填充物, 填充物的中心位置在二维 Fibonacci 结构的格点上, 超元胞的大小由某一代的 Fibonacci 准周期晶格决定. 图 1 所示为第 5 代 Fibonacci 超元胞.

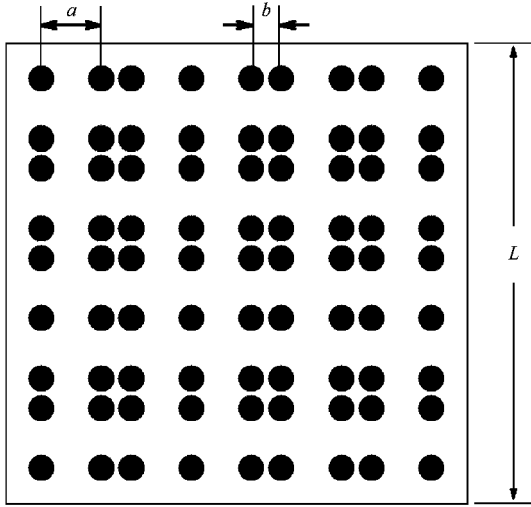


图 1 第 5 代二维 Fibonacci 超元胞示意图 L 为晶格常数. 圆柱形填充物的中心置于准周期格点上, 近邻格点有 a 和 b 两种距离, 在两个方向上均按 Fibonacci 排列

声频带结构采用平面波展开方法计算. 对于各向同性的流体组成的系统, 弹性波波动方程为

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

式中 ρ 为流体密度, p 为压强, λ 为 Lamé 常数. 按照 Bloch 定理, (1) 式中的压强 p 可以写成如下形式:

$$p(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \sum_{\mathbf{G}} P_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}. \quad (2)$$

这里 \mathbf{k} 为 Bloch 波矢, 计算时可以限制在正方格子的第一 Brillouin 区, $\mathbf{G} = 2\pi(N_x \mathbf{i} + N_y \mathbf{j})/L$ 为正方格子的倒格矢, L 为晶格常数, N_x 和 N_y 取正整数; 而 $1/\lambda(\mathbf{r})$, $1/\rho(\mathbf{r})$ 是周期函数, 可以展开成如下的 Fourier 级数:

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} f_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}}, \quad (3)$$

式中 $f(\mathbf{r})$ 可表示 $1/\lambda(\mathbf{r})$ 或 $1/\rho(\mathbf{r})$, $f_{\mathbf{G}}$ 是 Fourier 展开系数. (3) 式中的 Fourier 系数可由以下公式求得:

$$f_{\mathbf{G}} = \begin{cases} [m^2 f_A \pi R^2 + f_B (1 - m^2 \pi R^2)] \equiv \bar{f} & (\mathbf{G} = 0), \\ (f_A - f_B) \sum_{i=1}^m \exp[-i(2\pi N_x r_{ix} + 2\pi N_y r_{iy})] P(\mathbf{G}) & (\mathbf{G} \neq 0), \end{cases} \quad (4)$$

式中 (r_{ix}, r_{iy}) 为第 i 个填充物在超元胞中的坐标, m 是超元胞中填充物的个数. 对于圆形填充物有 $P(\mathbf{G}) = 2\pi R J_1(GR)/G$, R 为填充物半径, J_1 为一阶第一类 Bessel 函数, 其中 $G = \sqrt{G_x^2 + G_y^2}$. 把 (2)(3) 式代入 (1) 式可得

$$\omega^2 \sum_{\mathbf{G}} \lambda_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'}^{-1} P_{\mathbf{G}} = \sum_{\mathbf{G}} [\rho_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'}^{-1} (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{G}')] P_{\mathbf{G}}, \quad (5)$$

式中对倒格矢 \mathbf{G} 的求和为无穷求和, 在实际计算中往往要取截断. 对应第 2、第 3、第 4、第 5 代 Fibonacci 超元胞, 我们分别采用了 441, 529, 961 和 1681 个平面波, 其计算时间和收敛性都比较合理.

3. 计算结果及讨论

在选定基底和填充材料后, 影响频带结构的因素包括准晶格常数 a 和 b 、超元胞的大小以及填充率 F . 在这里填充率 F 定义为超元胞中填充物的体积

与整个超元胞的体积之比. 在计算过程中, 为了比较不同代 Fibonacci 超元胞声子晶体声频带之间的关系, 我们固定填充率 $F = 0.2$; 而为了得到周期系统与 Fibonacci 准周期系统声频带间的关系, 对于各代 Fibonacci 超元胞, 常数 b/a 取 1—0.5 之间不同的几个值. 图 2 所示为第 5 代 Fibonacci 超元胞的计算结果, 其中的横坐标取 $kL/(2\pi)$, 纵坐标取 $\omega L/(2\pi c_1)$, 其中 \mathbf{k} 为 Bloch 波矢, L 为超元胞的晶格常数, 而 c_1 则是基底材料 (Hg) 的纵波波速. 从图 2 可以看到, 由于准周期结构的引入, 系统的声频带结构发生了很大的变化. 当 $b/a = 1$ 时, 系统为周期结构. 在 b/a 逐渐变小的过程中, 即超元胞逐渐由周期变为 Fibonacci 结构的过程中, 最低及次低原本连续的带渐渐劈裂, 分别变成了不连续的两个子带, 其中次低带的高子带向上移动, 在 $b/a = 0.8$ 左右时淹没于更高的频带中. 次低带的低子带向下移动, 在 $b/a = 0.5$ 左右时与最低带的高子带重合, 而最低带的低子带则在 b/a 变小的过程中向下压缩. 这种效应带来的结

果是相对于周期系统,在相同的填充率下将会出现一些新的带隙,其中最低带隙出现的频率将会降低.从图2可以看到,当 $b/a = 0.7$ 左右时,在 $\omega L/(2\pi c_1) \approx 0.2$ 处开始出现一条低频带隙,并且这一最低带隙

随 b/a 值的减小还会进一步降低.这个位置比传统的 H_2O-Hg 系统的 Bragg 散射机理所产生的最低带隙的位置要低^[17],就我们所取参数的计算来比较,这个带隙比周期结构时低约 $1/3$.

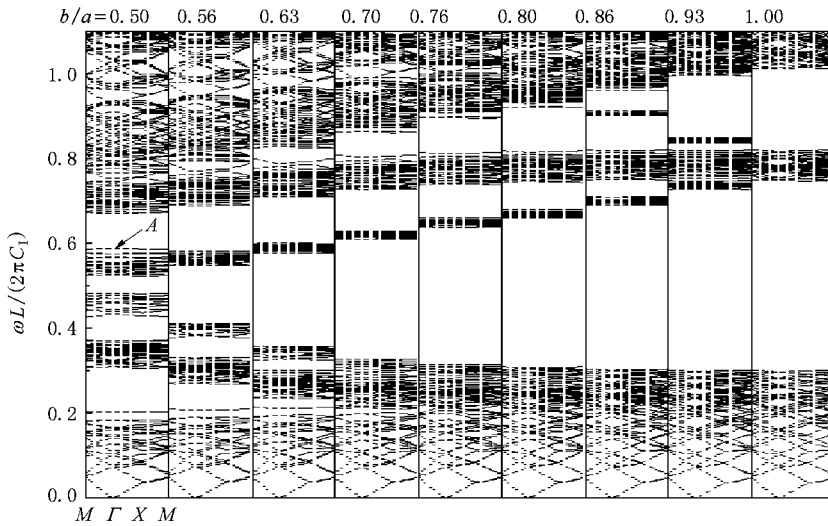


图2 以第5代二维 Fibonacci 准周期结构为超元胞,固定填充率 $F = 0.2$,声子晶体频带结构随 b/a 的变化情况 横坐标方向都是 $M\Gamma XM$

我们还计算了以第2、第3、第4代及更高代 Fibonacci 为超元胞的频带结构随 b/a 的变化关系,均发现了能带三分裂的结果.图3中给出的是第2、第3、第4代 Fibonacci 超元胞系统在 $b/a = 1$ 和 $b/a = 0.86$ 时中间频带的结构,从中可以看出系统变为

准周期后能带清楚的三分裂.图4给出了不同代 Fibonacci 超元胞在 $b/a = 0.5$ 时最低带隙出现的位置,相比周期结构的元胞(即第1代),其最低带隙位置都有所降低.

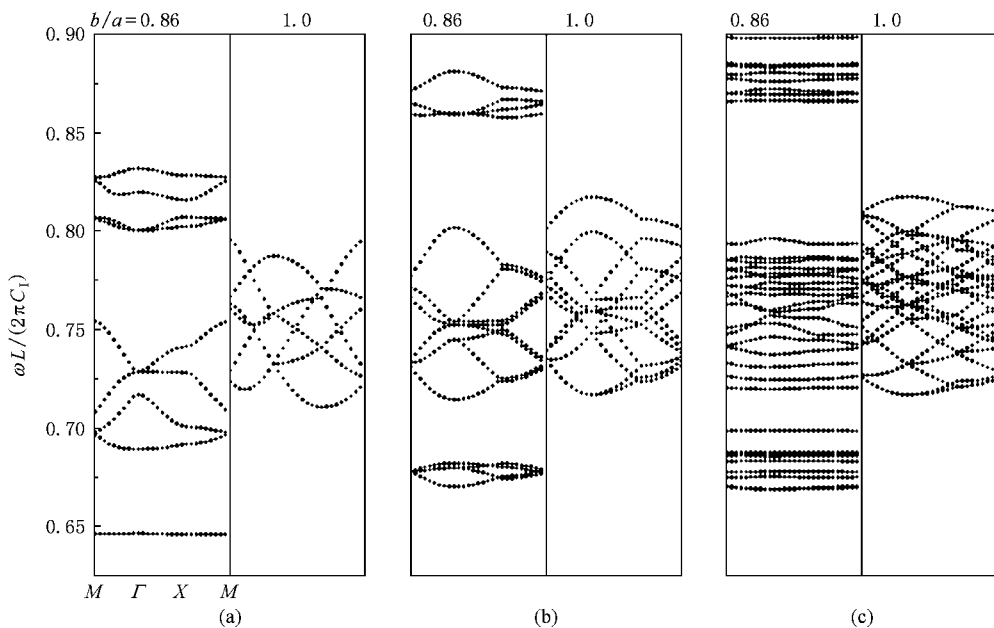


图3 Fibonacci 准周期超元胞系统的中间频带结构 $b/a = 0.86$ 时均显示出三分裂的性质.填充率 $F = 0.2$.(a)第2代 (b)第3代 (c)第4代

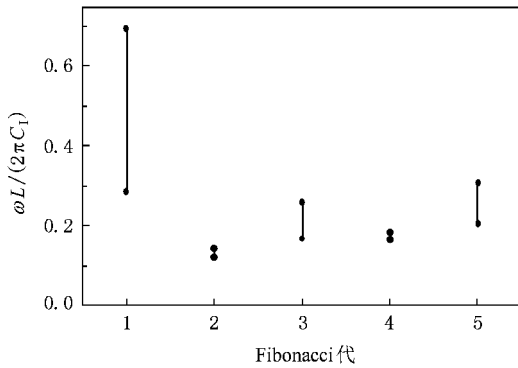


图 4 各代 Fibonacci 准周期超元胞系统最低带隙位置 实心圆点表示带隙的最低点及最高点. 作为比较, 图中也给出了周期元胞(即第 1 代)的带隙位置. 填充率 $F = 0.2$, 格点之间的两种距离之比 $b/a = 0.5$

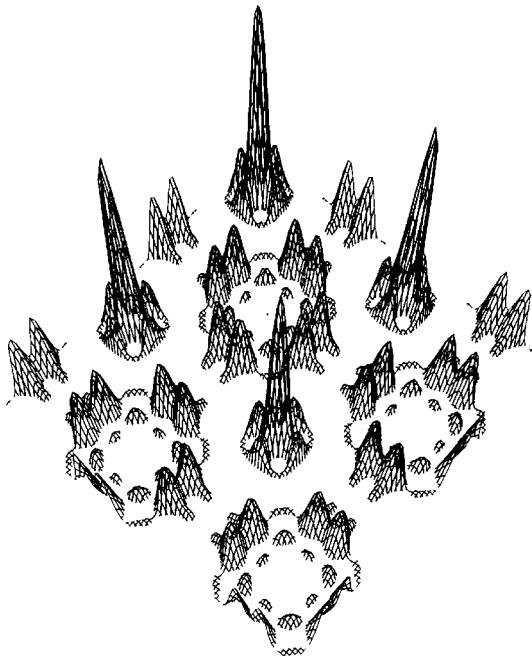


图 5 第 5 代 Fibonacci 超元胞中典型振动模式的场分布 对应图 2 中 A 点的模式

另外, 我们还计算了一些特殊模态的压强场分布, 发现了具有不同局域性的振动模式. 图 5 是对应图 2 左侧 A 点的一个振动模式($kL(2\pi) = 0$, $\omega L(2\pi c_1) = 0.5969$)的压强场分布. 从图 5 可以看出, 声场的分布起伏很大, 在某些位置出现极大值, 在紧邻位置很快衰减到近乎零, 然后在其他位置又出现极大值, 这样反复交替. 这样的场分布既不是典型的扩展态, 也不是局域态, 类似于紧束缚电子模型中的居间态. 这很好地反映出了准周期结构的特点.

4. 结 论

在过去的研究中发现, 影响声子晶体频带结构的因素很多, 既有物理参数的影响, 也有结构参数的影响. 我们采用平面波展开方法, 研究了以二维 Fibonacci 准周期结构为超元胞的声子晶体的声性质. 结果表明, 当超元胞由周期结构逐渐向 Fibonacci 准周期结构过渡时, 其声频带结构出现一分为三的典型性质, 这个结果主要是由于超元胞的准周期结构引起的. 由于准周期结构改变了原来的对称性, 在由 Bragg 散射机制形成的声子带隙中必然会有相应的体现. 采用准周期超元胞所产生的声频带的分裂可以获得比一般周期性结构更低的声频带隙. 在模态压强场分布的分析中, 还发现了反映准周期结构特点的居间态场分布模式.

[1] Kushwaha M S, Halevi P, Dobrzynski L, Djafari-Rouhani B 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 2022
 [2] Sigalas M M, Economou E N 1993 *Solid State Commun.* **86** 141
 [3] Wang G, Wen J H, Han X Y, Zhao H G 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1943 (in Chinese) [王刚、温激鸿、韩小云、赵宏刚 2003 物理学报 **52** 1943]
 [4] Mou Z F, Wu F G, Zhang X, Zhong H L 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 4694 (in Chinese) [牟中飞、吴福根、张欣、钟会林 2007 物理学报 **56** 4694]
 [5] Hou Z L, Wu F G, Fu X J, Liu Y Y 2005 *Phys. Rev. E* **71** 037604

[6] Hou Z L, Fu X J, Liu Y Y 2006 *Phys. Rev. B* **73** 024304
 [7] Sanchis-Alepuz H, Kosevich Y A, Sanchez-Dehesa J 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 134301
 [8] Steurer W, Sutter-Widmer D 2007 *J. Phys. D* **40** R229
 [9] Shechtman D, Blech I, Gratias D, Cahn J W 1984 *Phys. Rev. Lett.* **53** 1951
 [10] Kohmoto M, Sutherland B, Tang C 1987 *Phys. Rev. B* **35** 1020
 [11] Fu X J, Liu Y Y, Zhou P Q, Sritrakool W 1997 *Phys. Rev. B* **55** 2882
 [12] Fu X J, Cheng B L, Zheng D F, Liu Y Y 1991 *Acta Phys. Sin.* **40**

- 1666 (in Chinese) [傅秀军、程波林、郑大 、刘有延 1991 物理学报 **40** 1666]
- [13] Chan Y S , Chan C T , Liu Z Y 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 956
- [14] Lai Y , Zhang X D , Zhang Z Q 2002 *J. Appl. Phys.* **91** 6191
- [15] Zhang X D 2007 *Phys. Rev. B* **75** 024209
- [16] Sutter-Widmer D , Deloudi S , Steurer W 2007 *Phys. Rev. B* **75** 094304
- [17] Kushwaha M S , Halevi P 1996 *Appl. Phys. Lett.* **69** 31

Band structure of phononic crystal constructed by Fibonacci super-cell on square lattice ^{*}

Hao Guo-Jun Fu Xiu-Jun[†] Hou Zhi-Lin

(Department of Physics , South China University of Technology , Guangzhou 510640 , China)

(Received 3 March 2009 ; revised manuscript received 9 April 2009)

Abstract

Using the plane-wave expansion method , we study the band structure of a phononic crystal with water rods embedded in mercury to form a super-cell according to the two-dimensional Fibonacci array. It is found that each band splits into three sub-bands with the change of quasilattice constants and there exist intermediate states , which reflect the peculiar properties of quasiperiodic systems.

Keywords : Fibonacci sequence , phononic crystal , band structure

PACC : 6140M , 4320 , 4620

^{*} Project supported by the Natural Science Foundation of Guangdong Province , China (Grant No. 8451064101000328) and the Specialized Research Starting Foundation for the Returned Overseas Chinese Scholars , Ministry of Education of China.

[†] Corresponding author. E-mail phxjfu@scut.edu.cn