

# 平面波展开法计算二维磁振子晶体带结构\*

曹永军<sup>1) 2)†</sup> 云国宏<sup>1) 2)</sup> 那日苏<sup>2)</sup>

1) (内蒙古大学物理科学与技术学院, 呼和浩特 010020)

2) (内蒙古自治区功能材料物理与化学重点实验室和内蒙古师范大学物理与电子信息学院, 呼和浩特 010022)

(2010年9月11日收到; 2010年9月29日收到修改稿)

磁振子晶体是光子晶体或声子晶体在磁性材料领域内的替代品, 是近来的一个研究热点. 本文提出了磁振子晶体领域内的一种平面波展开法, 其较传统的平面波展开法能节约一半以上的计算时间. 采用此方法, 数值计算了由 Fe/EuO 二种铁磁材料构成的二维磁振子晶体带结构. 数值计算结果表明, 在一定的体积填充率下, 有自旋波带隙的出现; 影响磁振子晶体带隙结构形成的主要因素是有效场中的交换作用场, 其他作用场的影响相对很小.

**关键词:** 磁振子晶体, 带隙, 平面波展开法

**PACS:** 75.30.Ds, 75.70.Cn, 75.40.Gb

## 1. 引言

磁振子晶体, 是由一种铁磁材料周期排列在另一铁磁材料中形成的一种人工微结构复合材料. 理论和实验研究都表明<sup>[1-6]</sup>, 当自旋波在磁振子晶体中传播时, 频率落在带隙范围内的自旋波不可通过整个复合系统. 磁振子晶体作为微波领域内的滤波或导波器件制作材料, 具有广阔的应用前景<sup>[1]</sup>. 对带隙结构的研究, 是人工微结构复合材料领域内的一个重要研究内容, 因为波在复合材料中传播的许多物理性质均与带结构有关. 在带结构理论计算方面, 针对不同的系统结构, 有不同的计算方法. 其中平面波展开法, 因其简便而被广泛应用, 但其收敛慢、计算耗时的问题, 是该方法的一个重大弊端. 本文针对由二种铁磁材料构成的磁振子晶体系统, 提出了一种较省时的平面波展开法. 采用此方法, 数值计算了由 Fe 圆柱正方排列在 EuO 基底材料构成的二维磁振子晶体的带结构, 研究了带隙宽度随体积填充率的变化行为.

## 2. 模型与计算方法

二维磁振子晶体结构示意图如图 1(a) 所示, 圆

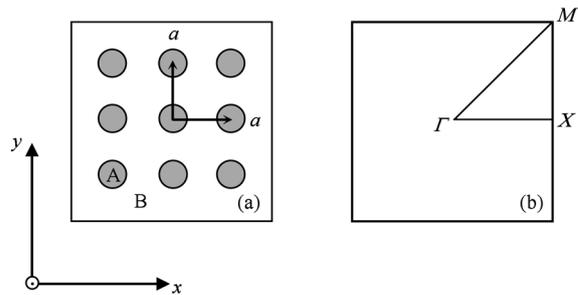


图 1 (a) 二维磁振子晶体结构; (b) 正方点阵第一布里渊区

柱材料 A 正方排列在另一铁磁基底材料 B 中, 晶格常数为  $a$ , 其第一布里渊区如图 1(b) 所示. 不考虑阻尼效应, 自旋波在铁磁材料中的传播行为可用 Landau-Lifshitz 方程描述为<sup>[2]</sup>

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{M}(\mathbf{r}, t) = -g \mathbf{M}(\mathbf{r}, t) \times \mathbf{H}_{\text{eff}}(\mathbf{r}, t), \quad (1)$$

其中,  $g$  是旋磁比 ( $g > 0$ ),  $\mathbf{H}_{\text{eff}}$  为作用于磁化强度矢量  $\mathbf{M}$  上的有效场. 考虑短波扰动的情况下, 与交换作用项相比较而言, 静磁项可以被忽略<sup>[3]</sup>, 所以有效场可表示为

$$\mathbf{H}_{\text{eff}}(\mathbf{r}, t) = H_0 \mathbf{z} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left( \alpha_0 \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{M}(\mathbf{r}, t) \right), \quad (2)$$

$\alpha_0 = \frac{2A}{\mu_0 M_s}$ ,  $M_s$  为材料的自发磁化强度大小,  $A$  为铁磁材料的交换作用系数,  $\mu_0$  为真空磁导率. 外磁场

\* 国家自然科学基金 (批准号: 10947008, 50901039, 11072104) 和内蒙古大学高层次人才引进基金 (批准号: Z20090146) 资助的课题.

† E-mail: phyjcao@imnu.edu.cn

$H_0$  沿  $z$  方向将铁磁系统饱和磁化. 磁化强度  $\mathbf{M}(\mathbf{r}, t)$  可写为

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}, t) = M_s \mathbf{z} + \mathbf{m}(\mathbf{r}, t), \quad (3)$$

$\mathbf{m}(\mathbf{r}, t)$  为磁化强度矢量  $\mathbf{M}$  在  $x$ - $y$  平面内的动态分量, 且  $|\mathbf{m}(\mathbf{r}, t)| \ll M_s$ .

引入变量  $m_{\pm} = m_x \pm im_y$ , 并将方程(2)和(3)代入方程(1)中, 得

$$\mp \frac{i}{g} \frac{\partial m_{\pm}}{\partial t} = \left[ H_0 - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left( \alpha_1 \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) \right] m_{\pm}, \quad (4)$$

其中  $\alpha_1 = \frac{2A}{\mu_0 M_s}$ . 可设系统中的传播模式为时谐的平面自旋波, 即  $m_{\pm}(\mathbf{r}, t) = m_{\pm\omega}(\mathbf{r}) e^{\pm i\omega t}$ , 则方程(4)式可变为

$$\Omega m_{\pm\omega} = \left[ \mu_0 H_0 - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left( \alpha \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) \right] m_{\pm\omega}, \quad (5)$$

其中  $\alpha = \frac{2A}{M_s}$ ,  $\Omega = \frac{\mu_0 \omega}{g}$ . 在周期结构的系统中,  $m_{\pm\omega}(\mathbf{r})$ ,  $\alpha(\mathbf{r})$  均为空间位置矢量  $\mathbf{r}$  的周期函数, 故在倒格矢  $\mathbf{G}$  空间将其作傅里叶级数展开, 并应用布洛赫定理得

$$m_{\pm\omega}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} m_{\pm\omega}(\mathbf{G}) e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}, \quad (6)$$

$$\alpha(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}'} \alpha(\mathbf{G}') e^{i\mathbf{G}'\cdot\mathbf{r}}. \quad (7)$$

将方程(6), (7)代入方程(5)式, 得本征方程

$$\begin{aligned} \Omega m_{\pm\omega}(\mathbf{G}) = \sum_{\mathbf{G}'} \left[ \mu_0 H_0 \delta(\mathbf{G} - \mathbf{G}') + (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \right. \\ \left. \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{G}') \alpha(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \right] \\ \times m_{\pm\omega}(\mathbf{G}'). \end{aligned} \quad (8)$$

对傅里叶系数  $\alpha(\mathbf{G} - \mathbf{G}')$  计算可得

$$\alpha(\mathbf{G} - \mathbf{G}') = \begin{cases} \alpha_A f + \alpha_B (1 - f), & \mathbf{G} = \mathbf{G}', \\ (\alpha_A - \alpha_B) P(\mathbf{G} - \mathbf{G}'), & \mathbf{G} \neq \mathbf{G}'. \end{cases} \quad (9)$$

$f$  为散射体材料 A 在基底材料 B 中的体积填充率, 结构函数  $P(\mathbf{G} - \mathbf{G}')$  取决于散射体的具体形状<sup>[4,5]</sup>, 其中圆柱体散射体的结构函数  $P(\mathbf{G}) = 2f \frac{J_1(Gr)}{Gr}$ ,  $J_1$  为一阶第一类贝塞尔函数. 对给定的一个布里渊波矢  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  值, 通过数值求解本征方程(8)式, 便可容易求得磁振子晶体的带结构  $\omega_n(\mathbf{k})$ .

上述计算方法, 即为磁振子晶体领域中的平面波展开法. 与传统平面波展开法<sup>[2,4-6]</sup>不同的是, 本征方程(8)中有关本征矢  $m_{+\omega}(\mathbf{G})$  和  $m_{-\omega}(\mathbf{G})$  的方

程是互相独立的, 且具有共同的本征值. 这样在实际操作中, 我们只需求解关于  $m_{+\omega}(\mathbf{G})$  或  $m_{-\omega}(\mathbf{G})$  的一个本征方程即可. 在传统的平面波展开法中, 二个本征方程是相互耦合的, 必须同时求解<sup>[2,4-6]</sup>. 因本征矩阵缩小了一半, 所以本方法能节省一半以上的计算时间. 这个优势, 对高维系统或有缺陷结构的系统, 特别是对二种磁参数相差比较大的系统, 该方法更具有实际的操作意义.

### 3. 结果与讨论

采用上述提出的平面波展开法, 计算了不同体积填充率下铁(Fe)圆柱正方排列在氧化铈(EuO)基底材料中构成的二维磁振子晶体带结构. 计算中, 交换作用常数  $A$  和自发磁化强度大小  $M_s$  的选取如下<sup>[6]</sup>: 对 Fe 材料,  $A = 2.1 \times 10^{-11} \text{ J} \cdot \text{m}^{-1}$ ,  $M_s = 1.752 \times 10^6 \text{ A} \cdot \text{m}^{-1}$ ; 对 EuO 材料,  $A = 1.0 \times 10^{-10} \text{ J} \cdot \text{m}^{-1}$ ,  $M_s = 1.910 \times 10^6 \text{ A} \cdot \text{m}^{-1}$ . 晶格常数  $a = 100 \text{ \AA}$ , 外磁场  $\mu_0 H_0 = 0.1 \text{ T}$ . 收敛性检验表明, 在倒格矢  $\mathbf{G} = \left( n_x \frac{2\pi}{a}, n_y \frac{2\pi}{a} \right)$  表示中, 当  $N = 25$ ,  $-N \leq n_x, n_y \leq N$ , 即取  $(2N + 1)^2 = 2601$  个平面波展开数, 能够使数值计算结果收敛到一个很好的精度范围之内, 故以下计算均选取了 2601 个平面波.

图 2 为体积填充率  $f = 0.5$  情况下的磁振子晶体带结构. 在图 2 所示的频率范围内, 共有五个完全带隙出现. 完全带隙的出现, 是因为二种周期结构排列的铁磁材料具有相差比较大的磁参数. 带隙范围内的自旋波, 不可沿周期结构的平面内传播, 所以磁振子晶体本身就是一个良好的带阻滤波器. 类似与光子晶体和声子晶体, 在磁振子晶体中设计不同的缺陷结构, 利用自旋波在缺陷结构中的局域性质, 磁振子晶体材料有望被应用于微波领域内的滤波器、导波器等的制作材料, 这将是我们以后的一个研究工作内容.

以下将本文工作与文献[6]中的工作相比较. 首先注意到文献[6]中有效场表达式为  $\mathbf{H}_{\text{eff}}(\mathbf{r}, t) = H_0 \mathbf{z} + \mathbf{h}(\mathbf{r}, t) + \frac{2}{\mu_0 M_s} \left( \nabla \cdot \frac{A}{M_s} \nabla \right) \mathbf{M}(\mathbf{r}, t)$ , 而本文并没有考虑偶极场  $\mathbf{h}(\mathbf{r}, t)$  一项的作用, 如(2)式所示. 在相同的结构和计算参数选取下, 利用文献[6]中算法计算所得带结构, 如图 3 所示. 比较图 2 和图 3 可知, 二种不同算法所得的带结构形状几乎完全相同, 当然纵坐标轴的示数因约化频率  $\Omega$  的具体

表示不同而不同. 这说明影响磁振子晶体带结构形成的主要因素是有效场中的交换作用场, 而其他作用场的影响相对很小.

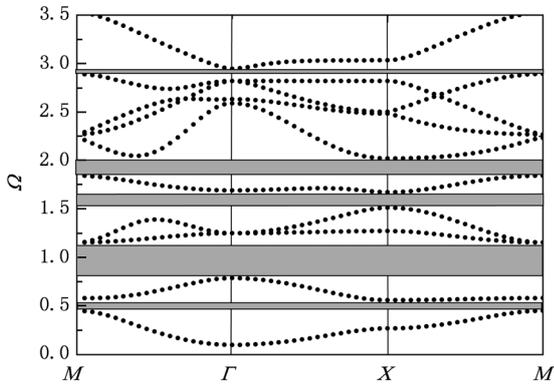


图2 Fe 圆柱正方排列在 EuO 基底组成二维磁振子晶体的带结构,  $f = 0.5$

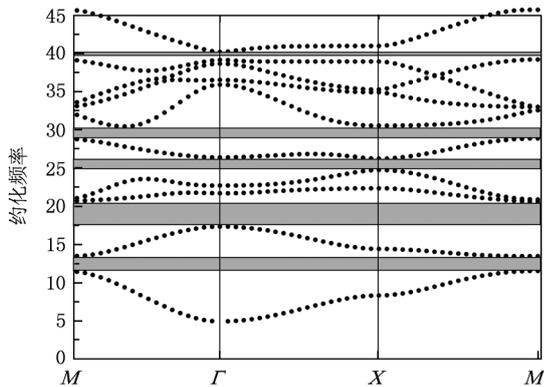


图3 Fe 圆柱正方排列在 EuO 基底组成二维磁振子晶体的带结构,  $f = 0.5$ , 文献[6]中的算法

磁振子晶体材料的应用研究, 主要是利用复合结构具有带隙这一特性. 影响带隙的形成及其宽度的因素又是多方面的<sup>[5,6]</sup>, 其中散射体在基底材料中的体积填充率就是其中一个重要的因素. 以下研究了前三个带隙的宽度随体积填充率的变化情况, 其变化行为如图4所示. 所谓前三个带隙, 是按低频到高频的顺序依次命名的. 之所以研究低频带隙, 有二点考虑. 首先因为平面波展开法对低频数值的计算结果收敛性更好, 其精确度更高; 其次因为研究的系统属纳米尺度范围, 晶格常数  $a = 100\text{\AA}$ , 低频长波范围对应于较大的纳米尺寸系统,

所以考虑到磁振子晶体的实际制造困难, 常常仅研究低频范围的带隙特性. 从图4可知, 无论哪个禁带, 只是在一定的体积填充率范围内才有完全带隙的出现. 相比较而言, 第二个带隙最宽, 在  $f = 0.7$  时出现了最大的禁带宽度  $\Delta\Omega = 0.7813$ , 如图4中的实心点线所示; 其次为第三个带隙, 在  $f = 0.65$  处最大的禁带宽度  $\Delta\Omega = 0.4251$ , 如图4中的空心点线所示; 第一个带隙的宽度最小, 在  $f = 0.6$  最大的禁带宽度  $\Delta\Omega = 0.1389$ , 如图4中的三角点线所示. 在铁圆柱的半径  $r = \frac{a}{2}$  时, 体积填充率为最大  $f = \frac{\pi}{4}$  时, 三个带隙均消失, 即二种铁磁材料互相连通, 不同频率的自旋波均可穿透整个复合结构.

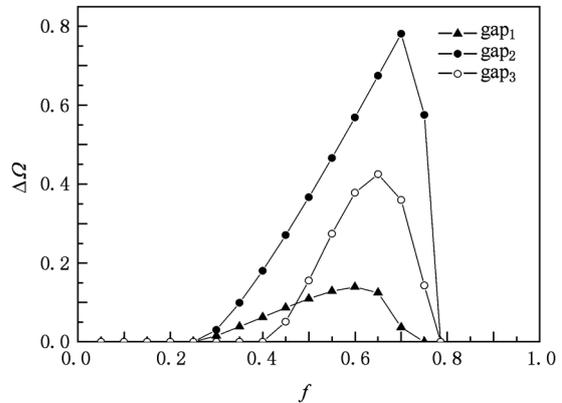


图4 前三个带隙 (gap) 宽度随体积填充率  $f$  的变化行为

#### 4. 结 论

本文提出了一种较省时的平面波展开法. 利用此方法, 数值计算了由铁 (Fe) 圆柱正方排列在氧化铕 (EuO) 基底材料构成二维磁振子晶体的带结构. 通过与传统的平面波展开法计算结果比较, 发现影响磁振子晶体带结构形成的主要因素是有效场中的交换作用场, 其他作用场的影响相对较小. 研究了带隙宽度随体积填充率的变化行为, 发现只有在一定的体积填充率范围内才有完全带隙的产生. 低频前三个带隙中, 第二个带隙在  $f = 0.7$  时出现了最大的禁带宽度,  $\Delta\Omega = 0.7813$ . 本文的定量计算研究, 能为磁振子晶体应用于一些器件的制作材料提供一定的理论依据.

- [1] Wang Z K, Zhang V L, Lim H S, Ng S C, Kuok M H, Jain S, Adeyeye A O 2009 *Appl. Phys. Lett.* **94** 083112
- [2] Puzkarski H, Krawczyk M 2003 *Solid State Phenom.* **94** 125
- [3] Kruglyak V V, Kuchko A N 2001 *Phys. Met. Metallogr.* **92** 211
- [4] Krawczyk M, Puzkarski H 2008 *Phys. Rev. B* **77** 054437
- [5] Cao Y J, Yun G H, Liang X X, Bai N 2010 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **43** 305005
- [6] Vasseur J O, Dobrzynski L, Djafari-Rouhani B 1996 *Phys. Rev. B* **54** 1043

## Band-structure calculations of two-dimensional magnonic crystals with plane-wave expansion method \*

Cao Yong-Jun<sup>1)2)†</sup> Yun Guo-Hong<sup>1) 2)</sup> Narsu<sup>2)</sup>

1) ( College of Physical Science and Technology, Inner Mongolia University, Huhhot 010020, China)

2) ( Inner Mongolia Key Laboratory of Physics and Chemistry of Functional Materials and College of Physics and Electronic Information, Inner Mongolia Normal University, Huhhot 010022, China)

(Received 11 September 2010; revised manuscript received 29 September 2010)

### Abstract

Recently, magnonic crystals which are the magnetic counterparts of photonic crystals or phononic crystals are growing into a hot area of research. In this paper, a plane-wave expansion method in the field of magnonic crystals is proposed. By using this method, band structures of two-dimensional magnonic crystals composed of ferromagnetic materials Fe and EuO are calculated. The numerical results show that the spin-wave gaps will be generated under a definite filling fraction ratio, and the effect of exchange field on the band structure is larger than that of other field in the effective field.

**Keywords:** magnonic crystals, band gap, plane-wave expansion method

**PACS:** 75.30.Ds, 75.70.Cn, 75.40.Gb

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10947008, 50901039, 11072104), and the Program of Higher-level Talents of Inner Mongolia University (Grant No. Z20090146).

† E-mail: phyjcao@imnu.edu.cn