

文章编号: 1001-2486(2003)01-0103-04

## 二维正方点阵液态声子晶体的带隙计算\*

齐共金, 杨盛良, 白书欣, 赵 恂

(国防科技大学航天与材料工程学院, 湖南 长沙 410073)

**摘要:**介绍了计算二维正方点阵液态声子晶体带隙的 PWM 法。在四氯化碳/水银复合体系中发现了完全带隙, 当四氯化碳填充分数为约 22% 时带隙宽度达到最大值。研究了三种不同截面形状的填充物, 其中, 圆形截面填充物体系比方形截面及其 45° 旋转的体系更有利于产生宽带隙。对圆形截面填充物体系, 当填充分数为  $f = 0.229$  时有最宽带隙  $\Delta\Omega = 0.5497$ 。将填充物和基体交换, 即水银/四氯化碳复合体系中, 所得到的带隙宽度显著减小。

关键词: 声子晶体; 正方点阵; 带隙计算; PWM

中图分类号: O481.1 文献标识码: A

## Band Gap Calculation for Two-dimensional Liquid Phononic Crystals with Square Lattices

QI Gong-jin, YANG Sheng-liang, BAI Shu-xin, ZHAO Xun

(College of Aerospace and Materials Engineering, National Univ. of Defense Technology, Changsha 410073, China)

**Abstract:** PWM is introduced to calculate the phononic band gaps for two-dimensional liquid phononic crystals with square lattices. Complete phononic band gaps are found in the carbon tetrachloride/mercury composite system, and all these band gaps reach the widest point for a filling fraction of ~ 22%. Among the three different shapes of the inclusions' section studied, the circular section is easier to attain large band gaps than the square section and obliquely-rotated square one. The widest band gap  $\Delta\Omega = 0.5497$  appears in the circular section system when the filling fraction  $f = 0.229$ . If the substances of the inclusions and matrix are interchanged (i. e., mercury/carbon tetrachloride system), the gaps obtained are much narrower.

**Key words:** phononic crystal; square lattice; band gap calculation; PWM

对周期性介质的研究一直是科学家们关注的热点。固体能带理论告诉我们, 电子在周期性势场的作用下会形成能带结构, 只有处于导带中的电子才能自由运动, 由此在半导体超晶格中通过调节物理参数可以设计和调控带隙。近 10 年来, 一种具有周期性结构的声学功能复合材料——声子晶体逐渐引起人们的重视, 与电子在晶格周期性势场中一样, 当声波在声子晶体中传播时也会形成能带结构, 分裂成导带和禁带, 只有位于导带中的声波才能在晶体中传播<sup>[1]</sup>。声子晶体研究的重要意义不仅在于促进物理学的新发展, 如深入研究声波异质结构中声子的 Anderson 局域化、缺陷态、表面态等问题<sup>[2~4]</sup>, 而且在于声子晶体器件的潜在应用, 如新型隔振降噪材料、滤波器、声波导和声波换能器等<sup>[5~7]</sup>。

目前, 国内外有关声子晶体的研究虽然取得了一定的进展, 如离子型声子晶体<sup>[8]</sup>和局域共振型声子晶体<sup>[9]</sup>, 但总体看来还处于基础理论研究和实验室研究阶段, 没有成熟器件的应用。已有的研究表明, 材料参数的高对比是产生带隙的重要条件<sup>[1~5]</sup>。与固态声子晶体相比, 声波在液态体系中传播时只有纵波, 可使问题大大简化。Kushwaha 和 Halevi 研究了水柱以二维正方或六方点阵排列于水银基体中的带隙变化规律<sup>[10]</sup>; Vasseur 等人研究了具有 BN 结构的水柱/水银体系, 并发现了完全带隙<sup>[11]</sup>。但是以上文献中的二维复合体系均为圆形截面填充物单元(即圆柱体), 没有考虑其它形状。我们不仅选择了新的体系(四氯化碳和水银的复合体系), 而且研究了三种具有不同截面形状的填充物对带隙的

\* 收稿日期: 2002-07-22

基金项目: 国家部委基金项目资助

作者简介: 齐共金(1978—), 男, 硕士生。

影响。

## 1 方法过程

平面波法(PWM)是声子晶体带隙计算中应用最早也是最常用的方法,其基本思想是将材料的密度和弹性常数在倒格矢空间中以平面波的形式展开为傅里叶级数,把声波波动方程转化为一个本征方程,然后求解本征值得到带结构。

假设声子晶体是由各向同性的圆柱或正棱柱  $A$  以正方点阵排列于各向同性的基体  $B$  中组成的二维双组分复合材料体系,使填充物  $A$  的轴线平行于笛卡尔坐标系  $(0x_1x_2x_3)$  中的  $x_3$  轴,则在与  $A$  垂直的  $(x_10x_2)$  平面上就形成了二维正方晶格的周期性排列。若声子晶体是由水银和四氯化碳组成的复合体系,因为声波在液体中传播时只有纵波( $C_{44}=0$ ),所以在没有外力作用的条件下,上述复合体系的声波波动方程可表示为<sup>[5,6]</sup>

$$\left[ \frac{1}{C_{11}(\mathbf{r})} \right] \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} = \nabla \cdot \left[ \left[ \frac{1}{\rho(\mathbf{r})} \right] \nabla \Phi(\mathbf{r}, t) \right] \quad (1)$$

其中,  $\rho, C_{11}$  为组分材料的密度和纵弹性常数,  $\Phi(\mathbf{r}, t)$  是一个与位置矢量  $\mathbf{r}(x_1, x_2)$  和时间  $t$  相关的标量势,它与位移矢量  $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$  满足关系  $\rho \mathbf{u} = \nabla \Phi$ 。

根据布洛赫定理,方程(1)的解可写为

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = e^{i(\mathbf{K} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \sum_{\mathbf{G}} \Phi_{\mathbf{K}}(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} \quad (2)$$

此处,  $\mathbf{K} = (k_{x1}, k_{x2})$  (即  $k_{x3}=0$ ) 是  $(x_10x_2)$  平面内的二维布洛赫波矢,  $\mathbf{G}$  为二维晶格的倒格矢,  $\omega$  为波的角度频率。利用密度和弹性常数在  $(x_10x_2)$  面上随位置矢量  $\mathbf{r}(x_1, x_2)$  变化的二维周期性,把  $1/\rho(\mathbf{r})$  和  $1/C_{11}(\mathbf{r})$  在倒格矢空间中展开为傅里叶级数

$$\zeta(\mathbf{r}) = \zeta(x_1, x_2) = \sum_{\mathbf{G}} \zeta(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} \quad (3)$$

此处,  $\zeta$  代表  $1/\rho(\mathbf{r})$  和  $1/C_{11}(\mathbf{r})$ 。式中傅里叶系数为

$$\zeta(\mathbf{G}) = \frac{1}{A_c} \iint d^2\mathbf{r} \zeta(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} \quad (4)$$

上式积分在元胞面积  $A_c = a^2$  ( $a$  为点阵常数) 上进行,结果为

$$\zeta(\mathbf{G}=0) = \bar{\zeta} = \zeta_A f + \zeta_B (1-f) \quad (5)$$

$$\zeta(\mathbf{G} \neq 0) = (\zeta_A - \zeta_B) F(\mathbf{G}) = (\Delta \zeta) F(\mathbf{G}) \quad (6)$$

其中  $F(\mathbf{G})$  代表填充物  $A$  的结构因子,它定义为

$$F(\mathbf{G}) = \frac{1}{A_c} \iint_A d^2\mathbf{r} e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} \quad (7)$$

此处积分仅在填充物  $A$  上进行,基体  $B$  不计入内。经过数学变换,方程(1)变为

$$\sum_{\mathbf{G}' \neq \mathbf{G}} F(\mathbf{G}-\mathbf{G}') [\Delta(\rho^{-1})(\mathbf{K}+\mathbf{G}) \cdot (\mathbf{K}+\mathbf{G}') - \Delta(C_{11}^{-1}) \omega^2] \Phi_{\mathbf{K}}(\mathbf{G}') + \left[ \overline{\rho^{-1}} |\mathbf{K}+\mathbf{G}|^2 - \overline{C_{11}^{-1}} \omega^2 \right] \Phi_{\mathbf{K}}(\mathbf{G}) = 0 \quad (8)$$

方程(8)可变为标准特征值方程

$$\sum_{\mathbf{G}'} \mathbf{Q}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \Phi_{\mathbf{K}}(\mathbf{G}') = \omega^2 \Phi_{\mathbf{K}}(\mathbf{G}) \quad (9)$$

其中,矩阵  $\mathbf{Q} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{N}$ , 而矩阵  $\mathbf{M}$  和  $\mathbf{N}$  分别定义为

$$\mathbf{M}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} = F(\mathbf{G}-\mathbf{G}') (\Delta C_{11}^{-1}) (1 - \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} + \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \overline{C_{11}^{-1}}) \quad (10)$$

$$\mathbf{N}_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} = [F(\mathbf{G}-\mathbf{G}') (\Delta \rho^{-1}) (1 - \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} + \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \overline{\rho^{-1}})] (\mathbf{K}+\mathbf{G}) \cdot (\mathbf{K}+\mathbf{G}') \quad (11)$$

式中  $\delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}$  为 Kronecker 符号。

令波矢  $\mathbf{K}$  扫描第一布里渊区中不可约三角形  $\Gamma\text{XM}$  的边界,求解矩阵  $\mathbf{Q}$  的特征值后得到声子晶体的能带结构。四氯化碳(水银)的相关物理参数<sup>[12]</sup>为:  $\rho = 1.594(13.6) \times 10^3 \text{ kg/m}^3$ ,  $C_l = 0.938(1.451)$

$\times 10^3 \text{ m/s}$ ,  $C_{11} = \rho C_l^2 = 1.402(28.633) \times 10^6 \text{ kg/m} \cdot \text{s}^2$ .

已知正方点阵的点阵常数为  $a$ , 则倒格矢  $\mathbf{G} = h_1 \mathbf{b}_1 + h_2 \mathbf{b}_2 = 2\pi(h_1 \mathbf{e}_1 + h_2 \mathbf{e}_2)/a$ , 其中,  $h_1$  和  $h_2$  是整数, 在数值计算时, 这些整数满足  $-N \leq h_1, h_2 \leq N$ . 在此取  $N = 10$ , 即 441 个平面波. 现在考虑三种不同截面形状的填充物:

(1) 半径为  $R$  的圆: 结构因子为  $F(\mathbf{G}) = 2f \frac{J_1(\mathbf{G}R)}{\mathbf{G}R}$ , 其中  $J_1$  为一阶第一类贝塞耳函数, 填充分数  $f = \pi R^2/a^2$  且  $0 \leq f \leq \pi/4$ .

(2) 边长为  $2l$  的正方形: 结构因子,  $F(\mathbf{G}) = f \frac{\sin(G_x l)}{G_x l} \cdot \frac{\sin(G_y l)}{G_y l}$ ,  $f = 4l^2/a^2$  且  $0 \leq f \leq 1$ .

(3)  $45^\circ$  旋转的正方形 (即边长为  $2l$  的正方形沿  $x_1 \times x_2$  轴旋转  $45^\circ$ ): 结构因子为  $F(\mathbf{G}) = f \left[ \frac{\sin[(l/\sqrt{2})(G_x + G_y)]}{[(l/\sqrt{2})(G_x + G_y)]} \right] \left[ \frac{\sin[(l/\sqrt{2})(-G_x + G_y)]}{[(l/\sqrt{2})(-G_x + G_y)]} \right]$ , 填充分数  $f = 4l^2/a^2$  且  $0 \leq f \leq 1/2$ .

## 2 结果分析

图 1(a) 是四氯化碳正棱柱 (截面为  $45^\circ$  旋转的正方形) 以正方点阵排列于水银基体的二维声子晶体的能带结构, 点阵常数  $a = 4\text{cm}$ , 填充分数  $f = 0.09$ . 图中纵坐标为标准化频率  $\Omega = \omega a / 2\pi C_0$ , 其中  $C_0 = \left( \overline{\rho}^{-1} / \overline{C_{11}} \right)^{1/2}$ , 横坐标取布洛赫波矢  $\mathbf{k} = \mathbf{K}a/2\pi$ , 图中有两个贯穿整个第一布里渊区的完全带隙 (如阴影部分所示). 把填充物四氯化碳和基体水银交换后得到水银/四氯化碳 (Hg/ $\text{CCl}_4$ ) 体系, 其能带结构如图 1(b) 所示, 点阵常数  $a = 4\text{cm}$ ,  $f = 0.25$ , 虽然填充分数比图 1(a) 所示的体系大, 但带隙宽度却小得多. 图 (a) 和 (b) 之间为正方点阵的第一布里渊区及不可约三角形  $\Gamma X M$ . 上述计算过程中, 用 441 个平面波和 71 个  $\mathbf{k}$  点得到了收敛的结果. 为了进一步验证计算的精度, 计算了 841 个平面波的情况, 发现直到第 50 个波段特征频率的误差仍小于 2%.

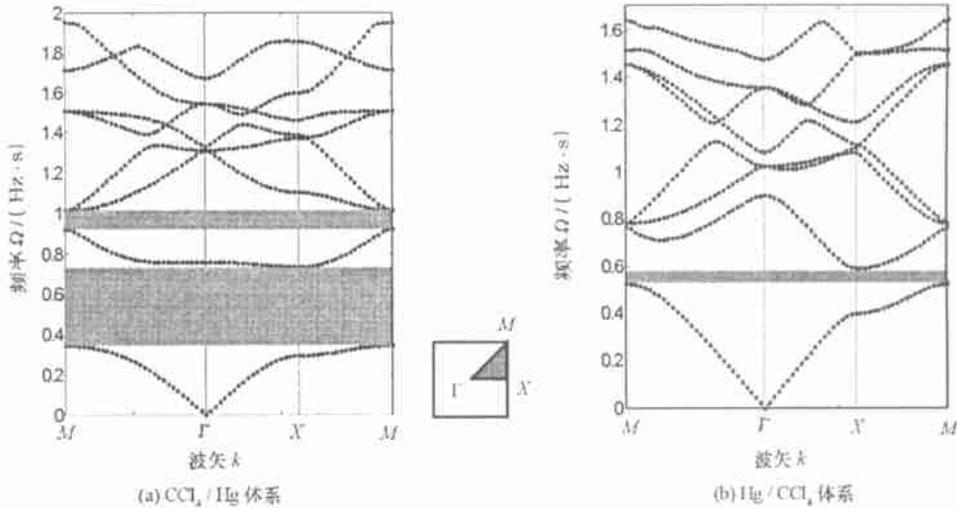


图 1 声子晶体的能带结构

Fig. 1 Energy band structure of phononic crystals

若同一声子晶体中有几个带隙, 最低能区的带隙就是最宽的带隙. 图 2 为三种不同填充物截面形状的  $\text{CCl}_4/\text{Hg}$  体系中, 低能区带隙的宽度  $\Delta\Omega$  随填充分数  $f$  的变化曲线, 标记有圆形、正方形和菱形的曲线分别代表圆形截面 (CS)、正方形截面 (SS) 和  $45^\circ$  旋转正方形截面 (ORSS) 填充物体系, 随着填充分数的增大, 带隙先变宽再变窄, 最后逐渐消失, 当  $f \approx 22\%$  时, 带隙宽度达到最大值. 对圆形截面填充物体系, 最宽带隙  $\Delta\Omega = 0.5497$  出现在  $f = 0.229$  处, 当  $f = 0.7698$  时, 带隙消失; 对正方形截面填充物体系, 当  $f = 0.2116$  时, 带隙最宽为  $\Delta\Omega = 0.5341$ , 带隙消失在  $f = 0.5341$ ; 对  $45^\circ$  旋转的正方形截面填充

物体系,  $f = 0.2116$  时, 有最宽带隙  $\Delta\Omega = 0.5290$ ,  $f = 0.5$  时, 带隙消失。总体看来, 当  $f$  小于 0.21 时, 上述三种情况没有明显区别; 当  $f$  大于 0.21 时, 圆形截面的体系带隙宽度大于正方形及其旋转截面, 直到  $f = 0.64$  时, 正方形截面体系逐渐优于圆形截面。

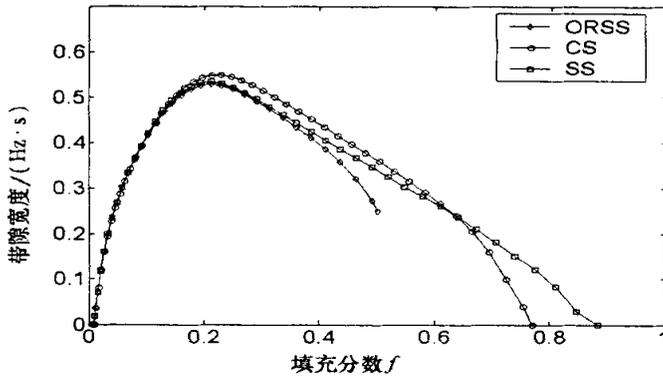


图2  $\text{CCl}_4/\text{Hg}$  体系的带隙宽度  $\Delta\Omega$  随填充分数  $f$  的变化曲线

Fig. 2 Gap width of the band gap vs filling fraction in  $\text{CCl}_4/\text{Hg}$  system

### 3 结论

用平面波法计算了由四氯化碳和水银组成的二维正方点阵液态声子晶体的能带结构, 发现了完全带隙。研究了  $\text{CCl}_4/\text{Hg}$  体系中三种不同形状的填充物对能带结构的影响, 最宽带隙出现于圆形截面填充物体系, 而正方形截面填充物体系的填充分数可调范围最宽; 把填充物四氯化碳和基体相水银交换后得到  $\text{Hg}/\text{CCl}_4$  体系, 带隙宽度明显变小, 所以对于液态声子晶体, 低密度的填充物和高密度基体的复合体系容易产生宽带隙。填充分数对声子晶体带隙宽度影响很大, 随着填充分数的增加, 带隙宽度先增大后减小, 直至带隙消失。将 841 与 441 个平面波的计算结果相比较, 发现 441 个平面波的收敛性能和精度良好。

### 参考文献:

- [1] Kushwaha M S, Halevi P, Martinez G, et al. Theory of Acoustic Band-structure of Periodic Elastic Composites [J]. Phys. Rev. B., 1994, 49(4): 2313- 2322.
- [2] Parmley S, Zobnist T, Clough T, et al. Phononic Band structure in a Mass Chain [J]. Appl. Phys. Lett., 1995, 67(6): 777- 779.
- [3] Sigalas M M, Soukoulis C M. Elastic-wave Propagation Through Disordered and/or Absorptive Layered Systems [J]. Phys. Rev. B., 1995, 51(5): 2780- 2789.
- [4] Torres M, De E F, Garcia P D, et al. Sonic Band Gaps in Finite Elastic Media: Surface States and Localization Phenomena in Linear and Point Defects [J]. Phys. Rev. Lett., 1999, 82(15): 3054- 3057.
- [5] Kushwaha M S, Halevi P, Dobryninski L, et al. Acoustic Band-structure of Periodic Elastic Composites [J]. Phys. Rev. Lett., 1993, 71(13): 2022- 2025.
- [6] Kushwaha M S, Halevi P. Ultra Wideband Filter for Noise Control [J]. Jpn. J. Appl. Phys., 1997, 236(8A): L1043- L1044.
- [7] Suzuki T, Yu P K L. Suppression and Enhancement of Elastodynamic Radiation from a Point Source Load in Elastic Wave Band Structures [J]. J. Appl. Phys., 1996, 80: 5665- 5673.
- [8] Lu Y Q, Zhu Y Y, Chen Y F, et al. Optical Properties of and Ionic type Phononic Crystal [J]. Science, 1999, 284: 1822- 1824.
- [9] Liu Z Y, Zhang X X, Mao Y W, et al. Locally Resonant Sonic Materials [J]. Science, 2000, 289: 1734- 1737.
- [10] Kushwaha M S, Halevi P. Giant Acoustic Stop Bands in Two-dimensional Periodic Arrays of Liquid Cylinders [J]. Appl. Phys. Lett., 1996, 69(1): 31- 33.
- [11] Vasseur J O, DjafariRouhani B, Dobryninski L, et al. Acoustic Band Gaps in Fibre Composite Materials of Boron Nitride Structure [J]. J. Phys. Condens. Mat., 1997, 9(35): 7327- 7341.
- [12] 杜功焕, 等. 声学基础 [M]. 上海: 科技出版社, 1981.