

文章编号:1000-582X(2007)06-0006-04

# 基于多重散射理论的二维声子晶体带结构计算

郑玲,李以农

(重庆大学机械传动国家重点实验室,重庆400030)

**摘要:**二维固体结构声子晶体如平板、板壳在结构材料的减振、降噪方面有广泛的应用,研究二维固体结构声子晶体的禁带特性,对减振、降噪结构材料及声学滤波器的设计有重要的理论指导意义。用声子晶体带结构计算的多重散射理论,计算了二维碳-环氧树脂声子晶体的能带结构。结果表明,将波速较大的碳柱体按正方形周期排列放入到波速较小的环氧树脂中,在布里渊区两个主要方向上出现了完全禁带。

**关键词:**声子晶体;带结构;多重散射

**中图分类号:**TH113;O321

**文献标志码:**A

十几年前,人们开始触及结构功能材料光学特性的研究。理论和实验证明,如果结构功能材料中的介电常数在光波长尺度上周期性变化,光子与周期结构相互作用,会使得该材料具有类似半导体中电子禁带的能带结构,称之为光子禁带(或称光子带隙)。具有光子禁带的周期性电介质结构功能材料称为光子晶体(photonic crystals)。光子能量落在光子禁带中的光波不能在光子晶体中传播。通过对光子晶体周期结构及其缺陷的设计,可以人为地调控光子的流动<sup>[1-3]</sup>。1991年,Yablonovitch通过实验验证了微波波段光子禁带的存在,光子晶体迅速成为光电子以及信息技术领域研究的热点。

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,提出了声子晶体概念。声子晶体具有丰富的物理内涵及潜在的广阔应用前景。虽然声子晶体的应用在很大程度上还处于展望阶段,但声子晶体特有的禁带特性、缺陷态特性已经使它在减振、降噪、声学器件等方面展示了广阔的应用前景<sup>[4-6]</sup>。

目前声子晶体的研究主要集中在3个方面:

(1)声子晶体禁带机理的研究;(2)缺陷态的研究;

(3)声子晶体的应用研究。

用于声子晶体带结构的理论计算方法有传递矩阵法<sup>[7]</sup>、平面波展开法<sup>[8]</sup>、时域有限差分法<sup>[9]</sup>、多重散射方法等<sup>[10]</sup>。传递矩阵法一般用于一维声子晶体的带结构计算,方法简单,由于传递矩阵比较小,计算量小。平面波展开法可用于二维及三维声子晶体的带结构计算,它通过将波动方程中的位移、弹性参数等物理量在倒格矢空间以平面波叠加的形式近似展开,将波动方程转化成一个个本征方程,求解本征值便可得到本征频率与波矢之间的色散关系,即能带结构,但存在收敛速度慢,计算精度不高,无法计算固-液声子晶体带结构等问题,应用受到限制。时域有限差分法可用于二维及三维声子晶体的禁带计算,它是一种直接在时域把波动方程离散为差分方程进行求解的方法,可精确模拟各种复杂的周期结构,对介质非均匀性、各向异性及色散特性等问题均有较好的计算精度,与采用多重散射法计算得到的声子晶体带结构有很好的 consistency。

二维固体结构声子晶体如平板、板壳在结构材料的减振、降噪方面有广泛的应用,研究二维固体结构声子晶体的禁带特性,对减振、降噪结构材料及声学滤波器的设计有重要的理论指导意义。采用多重散射理

收稿日期:2007-01-18。

基金项目:国家自然科学基金资助项目(50475064);重庆市自然科学基金资助项目(8426)。

作者简介:郑玲(1963-),女,重庆大学博士,主要研究方向有:汽车系动力学与控制,结构优化设计与虚拟现实,智能结构与控制系统(Tel)023-65106094;(E-mail)zling@cqu.edu.cn。

论,研究二维固体声子晶体的带结构。以碳/环氧树脂二维声子晶体为例,采用多重散射法计算了其能带结构。给出了一些相关的重要结论。

## 1 多重散射理论与计算方法

多重散射理论将波动方程中的位移展开为3种模式(一个纵波,两个横波)的线性叠加,把入射到某个散射体上的入射波看成是外来入射波和被其他散射体所散射的散射波之和,通过代数运算,最终得到一个本征方程,求解本征方程的本征值,即是声子晶体的本征频率。

当无限多的平行于Z轴的圆柱体镶嵌在基体中构成二维周期复合介质时,其弹性波波动方程可写为

$$(\lambda + 2\mu)\nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \mu\nabla \times \nabla \times \mathbf{u} + D\omega^2 \mathbf{u} = 0. \quad (1)$$

式中 $D$ 是介质的质量密度, $\mu$ 和 $\lambda$ 分别是介质的拉姆常数。对于倾斜入射的弹性波,设波动矢量 $\mathbf{k}$ 在 $x-y$ 平面上的投影为 $\mathbf{k}_{xy}$ ,在 $z$ 轴上的投影为 $k_z \mathbf{e}_z$ ,则 $\mathbf{k} = \mathbf{k}_{xy} + k_z \mathbf{e}_z$ 。同样对位移矢量 $\mathbf{r}$ ,可写成 $\mathbf{r} = \boldsymbol{\rho} + z \mathbf{e}_z$ ,其中 $\boldsymbol{\rho}$ 是位移矢量在 $x-y$ 平面上的投影, $z \mathbf{e}_z$ 是在 $z$ 轴上的投影。

在柱坐标系中,方程(1)的通解为

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \sum_{n\sigma} [a_{n\sigma} \mathbf{J}_{n\sigma}(\mathbf{r}) + b_{n\sigma} \mathbf{H}_{n\sigma}(\mathbf{r})], \quad (2)$$

其中:

$$\mathbf{J}_{n1}(\mathbf{r}) = \nabla [J_n(\alpha \rho) e^{i n \varphi} e^{i k_z z}],$$

$$\mathbf{J}_{n2}(\mathbf{r}) = \nabla \times [\mathbf{e}_z J_n(\beta \rho) e^{i n \varphi} e^{i k_z z}],$$

$$\mathbf{J}_{n3}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\beta} \nabla \times \nabla \times [\mathbf{e}_z J_n(\beta \rho) e^{i n \varphi} e^{i k_z z}],$$

$$\mathbf{H}_{n1}(\mathbf{r}) = \nabla [H_n(\alpha \rho) e^{i n \varphi} e^{i k_z z}],$$

$$\mathbf{H}_{n2}(\mathbf{r}) = \nabla \times [\mathbf{e}_z H_n(\beta \rho) e^{i n \varphi} e^{i k_z z}],$$

$$\mathbf{H}_{n3}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\beta} \nabla \times \nabla \times [\mathbf{e}_z H_n(\beta \rho) e^{i n \varphi} e^{i k_z z}].$$

$\mathbf{J}_n$ 和 $\mathbf{H}_n$ 分别是柱贝塞尔(Bessel)函数和一类柱汉克尔(Hankle)函数。 $\alpha = \sqrt{\frac{\omega^2 D}{\lambda + 2\mu} - k_z^2}$ , $\beta = \sqrt{\frac{\omega^2 D}{\mu} - k_z^2}$ ;在式(2)中, $\sigma = 1, 2, 3$ 分别代表弹性波的3种模式; $\sigma = 1$ 代表纵波模式; $\sigma = 2, 3$ 代表两个横波模式;当系数 $b_{n\sigma} = 0$ 时, $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ 表示入射波;当 $a_{n\sigma} = 0$ 时, $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ 中仅包含出射波;由于二维复合介质是由基体和镶嵌其中的散射体组成的,因此入射到第 $i$ 个散射体上的弹性波为

$$\mathbf{u}_i^{in}(\mathbf{r}_i) = \sum_{n\sigma} a_{n\sigma}^i \mathbf{J}_{n\sigma}^i(\mathbf{r}_i), \quad (3)$$

被第 $i$ 个散射体所散射的弹性波为

$$\mathbf{u}_i^{sc}(\mathbf{r}_i) = \sum_{n\sigma} b_{n\sigma}^i \mathbf{H}_{n\sigma}^i(\mathbf{r}_i), \quad (4)$$

$\mathbf{r}_i$ 表示对第 $i$ 个散射体中心的位移。根据多重散射理论,入射到散射体 $i$ 上的弹性波由两部分组成,一是外来入射波

$$\mathbf{u}_i^{in(0)}(\mathbf{r}_i) = \sum_{n\sigma} a_{n\sigma}^{i(0)} \mathbf{J}_{n\sigma}^i(\mathbf{r}_i). \quad (5)$$

二是由其他散射体散射的弹性波

$$\mathbf{u}_i^{in}(\mathbf{r}_i) - \mathbf{u}_i^{in(0)}(\mathbf{r}_i) = \sum_{j \neq i} \sum_{n'\sigma'} b_{n'\sigma'}^j \mathbf{H}_{n'\sigma'}^j(\mathbf{r}_j), \quad (6)$$

$\mathbf{r}_i$ 和 $\mathbf{r}_j$ 分别代表空间中同一点相对于第 $i$ 个和第 $j$ 个散射体的位移,如果用 $\mathbf{R}_i$ 和 $\mathbf{R}_j$ 分别表示第 $i$ 个和第 $j$ 个散射体的位置,则有: $r_j = r_i - (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)$ 。可以证明

$$\mathbf{H}_{n'\sigma'}^j(\mathbf{r}_i - (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)) = \sum_{n\sigma} G_{n'\sigma'n\sigma}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i) \mathbf{J}_{n\sigma}^i(\mathbf{r}_i), \quad (7)$$

其中, $G$ 称为矢量结构常数

$$G_{n\sigma n'\sigma'}(\mathbf{R}) = \begin{cases} X_{nn'}^\alpha(\mathbf{R}); & \sigma = \sigma' = 1, \\ X_{nn'}^\beta(\mathbf{R}); & \sigma = \sigma' = 2, \sigma = \sigma' = 3. \end{cases} \quad (8)$$

式(8)中的 $X_{nn'}^k(\mathbf{R})$ 称为标量波的结构常数

$$X_{nn'}^k(\mathbf{R}) = H_{n'-n}(kR) e^{-i(n'-n)\varphi_R}.$$

$k = \alpha$ 或 $\beta$ , $\varphi_R$ 是矢量 $\mathbf{R}$ 的相位。如果定义: $G_{n'\sigma'n\sigma}^{ij} = G_{n'\sigma'n\sigma}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)$ ,那么 $\mathbf{H}_{n'\sigma'}^j(\mathbf{r}_j)$ 可表示为

$$\mathbf{H}_{n'\sigma'}^j(\mathbf{r}_j) = \sum_{n\sigma} G_{n'\sigma'n\sigma}^{ij} \mathbf{J}_{n\sigma}^i(\mathbf{r}_i). \quad (9)$$

对于一个指定的散射体而言,被散射后的位移场由入射场和散射矩阵完全决定。式(2)中入射系数 $\{a_{n\sigma}^i\}$ 和散射系数 $\{b_{n'\sigma'}^j\}$ 之间的关系可表述为

$$b_{n'\sigma'}^j = \sum_{n\sigma} t_{n'\sigma'n\sigma}^j a_{n\sigma}^i, \quad (10)$$

其中,散射矩阵 $\mathbf{T} = \{t_{n'\sigma'n\sigma}^j\}$ 可由单个散射体的麦氏(Mie)弹性矩阵得到。将式(3)、(5)、(10)代入式(7)可得到多重散射理论的最终方程

$$\sum_{j \neq i} [\delta_{ij} \delta_{n'n} \delta_{\sigma\sigma'} - \sum_{n''\sigma''} t_{n'\sigma'n''\sigma''}^j G_{n''\sigma''n\sigma}^{ij}] a_{n\sigma}^{i(0)}. \quad (11)$$

解上述方程,可得到弹性系统对外界扰动的反应。在入射波为零的条件下,解式(11)可以得出弹性系统的固有模式:

$$\det \left| \delta_{ij} \delta_{n'n} \delta_{\sigma\sigma'} - \sum_{n''\sigma''} t_{n'\sigma'n''\sigma''}^j G_{n''\sigma''n\sigma}^{ij} \right| = 0. \quad (12)$$

对于二维声子晶体的周期系统,式(16)可转化为

$$\det \left| \delta_{ss'} \delta_{nn'} \delta_{\sigma\sigma'} - \sum_{n''\sigma''} t_{n'\sigma'n''\sigma''}^{s's'} G_{n''\sigma''n\sigma}^{ss'} \right| = 0, \quad (13)$$

其中 $s$ 和 $s'$ 代表一个晶胞中位移矢量分别是 $\mathbf{r}_s$ 和 $\mathbf{r}_{s'}$ 的

两个散射体,

$$G_{n'\sigma'n\sigma}^{ss'}(\mathbf{k}) = \sum_R G_{n'\sigma'n\sigma}^{ss'}(\mathbf{r}_s - \mathbf{r}_{s'} + \mathbf{R}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}). \quad (14)$$

对式(14)求和遍及声子晶体中的所有晶胞。

## 2 二维碳-环氧树脂声子晶体带结构计算

采用多重散射理论计算由碳(C)和环氧树脂(Epoxy)组成的二维声子晶体带结构。碳和环氧树脂的特性参数见表1所示。

表1 碳和环氧树脂的特性参数

材料	密度/kg·m <sup>-3</sup>	纵波波速/m·s	横波波速/m·s
碳	1 750	13 310	7 100
环氧树脂	1 200	2 830	1 160

图1是碳/环氧树脂二维正方点阵声子晶体横截面图。对于由固体组成的复合介质,弹性波波动方程可以分解成两个方程来求解,即平行于Z轴的横波模和XY平面内的混合模。取 $n_{\max}=3$ ,即展开式(2)中的 $-3 \leq n \leq 3$ ,此时,方程(13)分别变成 $7 \times 7$ 和 $14 \times 14$ 矩阵元的本征值方程。在第一布里渊区,对于给定的一个波矢 $\mathbf{k}$ 值,可以获得无限多个本征解。每一个本征解用一个整数 $n$ 来表示,相应的本征频率为 $\omega_{kn}$ 。当 $\mathbf{k}$ 沿着图1所示的正方形排列的第一布里渊区中的直线 $\Gamma X$ 和 $\Gamma M$ 变化时,可以得到一系列的 $\mathbf{k}$ 和 $\omega_{kn}$ 的曲线。

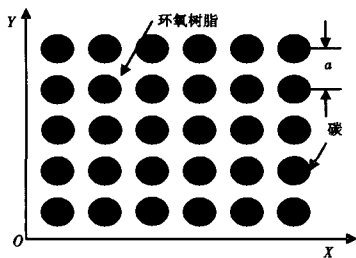


图1 碳/环氧树脂二维正方点阵声子晶体横截面图

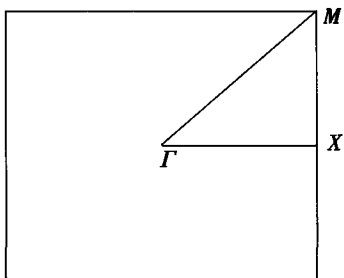


图2 二维正方形晶格排列的第一布里渊区

图3是填充率 $F=0.4$ 时,碳圆柱体按正方形晶

格排列放入环氧树脂中的弹性波能带结构图。图中横坐标是标量化的布洛赫波矢 $\mathbf{k} = K \frac{a}{2\pi}$ ,而纵坐标为标

量化的频率 $\Omega = \frac{\omega a}{c}$ ,其中 $c$ 为弹性波在环氧树脂介质中传播时的横波波速, $a$ 是晶格常数, $\omega$ 是角频率。对于位移的Z分量(用虚线表示),在最低的10个能带中,仅出现2个带隙,即在最低的第一个带和第2个带之间有1个带隙,带宽与带隙的中间频率之比 $\Delta\omega/\omega_g = 0.3246$ ,第2个带和第3个带之间也有1个带隙,且 $\Delta\omega/\omega_g = 0.3866$ 。对于位移的X和Y分量(用实线表示),在最低的10个能带中,也仅出现了2个带隙,即在第3个带和第4个带之间存在一个较大的带隙, $\Delta\omega/\omega_g = 0.7283$ ,在第5个带和第六个带之间出现一个较小的带隙, $\Delta\omega/\omega_g = 0.09451$ 。综合上述情况,可得到一个在布里渊区的主要方向上( $\Gamma X$ 和 $\Gamma M$ )都存在的所谓完全禁带(用斜线表示),频率范围 $\omega a/c = 6.05 \sim 8.95$ ,带宽 $\Delta\omega/\omega_g = 0.3866$ 。反之,将环氧树脂柱体放入碳基体中,无论是Z分量或XY分量,都没有禁带的出现。

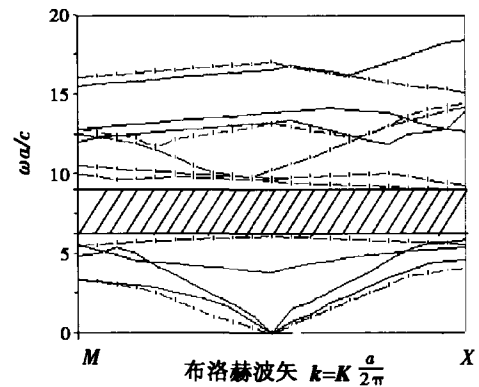


图3 碳圆柱体按正方形晶格排列放入

## 3 结论

采用多重散射理论计算由碳(C)和环氧树脂(Epoxy)组成的二维声子晶体的带结构。其计算结果与吴福根采用平面波展开法的计算结果基本吻合。研究表明:二组元的波速和质量密度之比对产生完全带隙有重要的作用。只有将波速较大的介质放入波速较小的介质中才有利于完全带隙的出现。采用多重散射理论计算带结构,速度快,精度高,具有很好的收敛性,能比较准确地预测二维固态声子晶体的带隙特性。其方法对减振、降噪结构材料及声学滤波器的设计有一定的理论指导意义。

## 参考文献:

- [1] FIGOTIN A, KUCHMENT P. Band-gap structure of spectra of periodic dielectric and acoustic media[J]. I Scalar Model SIAM J Appl Math, 1996, 56: 68-88.
- [2] FIGOTIN A, KUCHMENT P. Band-gap structure of spectra of periodic dielectric and acoustic media. II Two-dimensional photonic crystals[J]. SIAM J Appl Math, 1996, 56: 1561-1620.
- [3] DE LIMA M M, HEY R, SANTOS P V. Active photonic crystals based on surface acoustic waves[J]. Applied Physics Letters, 2003, 83(15): 2997-2999.
- [4] DEYMIER P. Executive summary: phononic crystals for acoustic applications in telecommunications [R]. Georgia Institute of technology, University of Arizona, USA, 2005.
- [5] GOFFAUX C, MASERI F. Measurements and calculations of the sound attenuation by a phononic band gap structure suitable for an insulating partition application[J]. Applied physics Letters, 2003, 81(20): 281-283.
- [6] DIEZ A, KAKARANTZAS G. Acoustic stop-band in periodically microtapered optical fibers[J]. Applied physics Letters, 2000, 76(23): 3481-3483.
- [7] SIGALAS M M, SOUKOULIS C M. Elastic-wave propagation through disordered and /or absorptive layered systems[J]. Physical Review B, 1995, 51(5): 2781-2789.
- [8] KHELIF A, WILM M, LAUDE V, et al. Guided elastic waves along a rod defect of a two-dimensional phononic crystal[J]. Physical Review E, 2004, 69: 067601.
- [9] SIGALAS M M, GARCIA N. Theoretical study of three dimensional elastic band gaps with the finite-difference time domain method[J]. Journal of applied physics, 2000, 87(6): 3122-3125.
- [10] MEI J, LIU Z Y, QIU C Y. Multiple-scattering theory for out-of-plane propagation of elastic waves in two-dimensional phononic crystals[J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2005, 17: 373-375.
- [11] 吴福根. 声子晶体中的带隙及缺陷态的研究 [D]. 广州: 华南理工大学, 2001.

## Elastic Band Gaps in Two-dimensional Phononic Crystals Based on Multiple-scattering Theory

ZHENG Ling, LI Yi-nong

(State Key Laboratory of Mechanical Transmission, Chongqing University, Chongqing 400030, China)

**Abstract:** Two dimensional solid phononic crystals such as plates, shells can be widely applied to the control of vibration and noise as a kind of structural materials. It is very significant to study the band gaps in two dimensional phononic crystals to apply them in the vibration and noise control for structures and as a filter for acoustical signal. The multiple-scattering theory is integrated with wave equations to study the elastic wave band gaps in two-dimensional phononic crystals. The carbon/proxy system is used as numerical example. The results show that a full band gap is presented when carbon cylinder with high propagation velocity is arranged periodically in proxy with low propagation velocity.

**Key words:** phononic crystal; band gap; multiple-scattering