

# 任意散射体二维声子晶体的带结构计算方法

王留运<sup>1</sup>, 熊滨生<sup>1</sup>, 王 兴<sup>2</sup>

(1. 郑州大学机械工程学院, 河南 郑州 450002; 2. 防空兵指挥学院基础部, 河南 郑州 450052)

**摘 要:** 通过将二维任意形状散射体的声子晶体单元离散化, 采用数值积分的方法, 解决了其结构函数求解中的积分问题, 从而改进了现有的平面波算法, 使之能够计算二维任意单元结构正方晶格声子晶体的带结构. 通过对比采用传统的以及本文中改进的平面波算法分别计算得到的规则单元结构声子晶体的带结构, 验证了文中算法的正确性. 采用文中改进的平面波算法, 可方便地对二维声子晶体的单元结构进行拓扑优化, 从而改进其带隙特性.

**关键词:** 声子晶体; 弹性波带隙; 平面波展开

**中图分类号:** O 734; TH 113 **文献标识码:** A

## 0 引言

近年来, 模拟天然晶体原子排列的人造周期性复合结构中经典波(电磁波和弹性波)传播的研究受到广泛关注<sup>[1~7]</sup>. 介电常数(弹性常数)周期性分布的复合结构被称为光子(声子)晶体<sup>[1]</sup>. 当电磁波(弹性波)在受到介电常数(弹性常数)的周期性调制时, 可能会产生光子(声子)带隙, 即一定频率范围的电磁波(弹性波)的传播被抑制或禁止. 光子(声子)晶体的这种特性具有极大的理论价值和应用前景.

对于声子晶体, 甚至在较为简单的各向同性介质中, 也存在多种决定弹性波传播的参数(质量密度和两个拉梅常数), 所以声子晶体带隙特性的研究较光子晶体更为复杂和具有丰富的物理内涵; 另外声子晶体在无源隔音、精密机械平台减振、声滤波器等新型声学功能材料方面具有广泛的应用前景. 因此, 声子晶体带隙特性的研究正在成为一个新的热点<sup>[2~7]</sup>.

现有的声子晶体带隙计算方法主要有平面波展开法(PWE)<sup>[2~4]</sup>、多散射理论(MST)<sup>[5,6]</sup>以及时域有限差分(FDTD)<sup>[7]</sup>方法. 其中, FDTD算法适合计算任意有限尺寸复合结构的弹性波传输特性, 但无法计算声子晶体的带结构; 传统的 PWE 方法

应用最为广泛, 易于理解, 且计算相对简单, 但其仅适合对规则单元结构的声子晶体带结构进行计算, 对于任意单元结构的声子晶体, 由于结构函数难以推导, 因此无法进行带结构的计算; MST方法既可以计算声子晶体的带结构, 又可以计算有限尺寸复合结构的弹性波传输特性, 但其理论推导复杂, 而且目前只限于处理圆柱<sup>[6]</sup>及球形散射体<sup>[5]</sup>单元结构的声子晶体, 应用上存在很大局限. 本文采用数值积分的方法, 在保证一定精度的前提下, 通过将任意结构的声子晶体单元离散化, 将积分转变为求和, 解决了其结构函数求解中的积分问题, 从而改进了现有的 PWE 算法, 使之能够计算任意单元结构二维声子晶体的带结构. 通过对比采用传统的以及本文中改进的 PWE 算法分别计算得到的规则单元结构二维声子晶体的带结构, 验证了文中算法的正确性. 使用文中改进的 PWE 算法, 可方便地对二维声子晶体单元结构进行拓扑优化, 从而改进带隙性能.

## 1 弹性波波动方程及其平面波展开

对于一个各向同性的介质而言, 其二维弹性波波动方程为<sup>[8]</sup>

$$\frac{\partial^2 u^i}{\partial t^2} = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot (\mu \nabla u^i) \quad (1)$$

收稿日期: 2006-01-08; 修订日期: 2006-03-20

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(60478021)

作者简介: 王留运(1949-), 男, 河南郑州人, 郑州大学工程师, 主要从事机械电子工程、周期结构的振动、声学特性等方面的研究.

$$\frac{\partial^2 u^j}{\partial t^2} = \frac{1}{\rho} \left\{ \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \lambda \frac{\partial u^l}{\partial x_l} \right) + \frac{\partial}{\partial x_l} \left[ \mu \left( \frac{\partial u^j}{\partial x_l} + \frac{\partial u^l}{\partial x_j} \right) \right] \right\} \quad (2)$$

式中:  $j, l$  代表坐标  $x$  或  $y$ .  $u^j(x)$  为位移矢量  $u$  的  $j$  分量;  $\rho$  为介质密度;  $\lambda$  和  $\mu$  为介质的弹性常数——拉梅常数.

由于材料参数具有二维空间上的周期性, 可按傅里叶级数展开为

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

其中:  $f$  分别代表  $\rho, \lambda$  和  $\mu$ ,  $\mathbf{r} = \{x, y\}$  为位置矢量,  $\mathbf{G} = \{G_x, G_y\}$  为倒格矢. 其傅里叶级数系数  $f_{\mathbf{G}}$  为

$$f_{\mathbf{G}} = S^{-1} \int d^2 \mathbf{r} f(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} \quad (4)$$

其中:  $S$  为原胞的横截面积.

由于方程式(1)、(2)中的所有系数均具有相同的周期性, 因此根据 Bloch 定理<sup>[9]</sup>, 其解的形式可写为

$$u(\mathbf{r}, t) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad (5)$$

其中  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  为波矢, 波矢的方向表示波传播方向, 大小表示波传播方向上单位长度上的滞后相位.  $\omega$  为波的角频率,  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  为与材料参数具有相同周期的周期函数, 同样可展开为傅里叶级数形式

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} u_{\mathbf{k}+\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} \quad (6)$$

将式(4)、(5)、(6)代入式(1)、(2)中, 可得

$$-\omega^2 u_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^i = \sum_{\mathbf{G}', \mathbf{G}''} \rho_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'}^{-1} \lambda_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'} (\mathbf{k} + \mathbf{G}') \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{G}'') u_{\mathbf{k}+\mathbf{G}'}^j + \mu_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'} (\mathbf{k} + \mathbf{G}')_j (\mathbf{k} + \mathbf{G}'')_i u_{\mathbf{k}+\mathbf{G}'}^j \quad (7)$$

和

$$\omega^2 u_{\mathbf{k}+\mathbf{G}}^i = \sum_{\mathbf{G}'} \left\{ \sum_{l, \mathbf{G}''} \rho_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'}^{-1} [\lambda_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'} (\mathbf{k} + \mathbf{G}')_l (\mathbf{k} + \mathbf{G}'')_i + \mu_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'} (\mathbf{k} + \mathbf{G}')_j (\mathbf{k} + \mathbf{G}'')_j] u_{\mathbf{k}+\mathbf{G}'}^l + \sum_{\mathbf{G}''} [\rho_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'}^{-1} \mu_{\mathbf{G}-\mathbf{G}'} \sum_n (\mathbf{k} + \mathbf{G}')_n (\mathbf{k} + \mathbf{G}'')_n] u_{\mathbf{k}+\mathbf{G}'}^n \right\} \quad (8)$$

式中:  $j, l, n$  代表坐标  $x$  或  $y$ . 式(7)和(8)为对无限多个倒格矢的求和,  $\mathbf{G}', \mathbf{G}''$  分别为在倒格式空间取的不同值. 本文中用  $N$  个倒格矢的和来代替. 这样方程变成含有  $N \times N$  个矩阵元的本征值方程, 通过给定第一布里渊区(BZ)内的波矢  $\mathbf{k}$ , 可以采用数值计算的方法来求解声子晶体的带结构.

## 2 任意单元结构的结构函数积分求解

传统的 PWE 算法所计算的二维声子晶体一般具有规则的单元横截面形状, 如圆柱<sup>[2,3]</sup> 和方

柱<sup>[4]</sup>. 对于这些规则形状, 可以根据式(4)较为简单地求出其结构函数, 进而求解相应声子晶体的带结构.

图 1 所示为二维正方晶格声子晶体的一个原胞, 由基体材料 B 和散射体 A 组成, 其中, 散射体形状任意. 显见, 对于如图 1 所示的任意单元结构的二维声子晶体, 无法直接求解其结构函数, 也无法进一步求解其带结构.

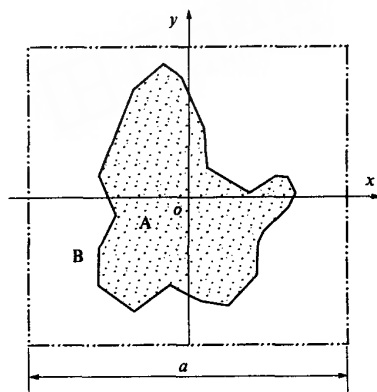


图 1 含有任意形状散射体的二维声子晶体单元结构  
Fig.1 Lattice structure of the two-dimensional phononic crystals with scatters in arbitrary shape

由式(4), 我们可以得到图 1 所示的含有任意形状散射体的二维声子晶体单元结构所对应的傅里叶级数系数  $f_{\mathbf{G}}$  为

$$f_{\mathbf{G}} = S^{-1} \int d^2 \mathbf{r} f(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} = S^{-1} (f_A - f_B) \int_A d^2 \mathbf{r} e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} + S_{-1} f_B \int_{A+B} d^2 \mathbf{r} e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} \quad (9)$$

其中:  $f_A$  和  $f_B$  表示介质 A 和 B 中的弹性常数或密度. 当  $\mathbf{G} = 0$  时, 式(9)可写为

$$f_{\mathbf{G}} = S^{-1} (f_A S_A + f_B S_B) \quad (10)$$

其中:  $S_A$  和  $S_B$  分别为介质 A 和 B 的面积.

当  $\mathbf{G} \neq 0$  时, 式(9)第二项为零, 由此可得

$$f_{\mathbf{G}} = S^{-1} (f_A - f_B) P \quad (11)$$

其中为对应散射体 A 的结构函数, 可写为

$$P = \int_A d^2 \mathbf{r} e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} \quad (12)$$

对于任意形状散射体 A, 可按图 2 所示将其离散化, 并使用  $M$  个矩形 ( $R_1, \dots, R_m, \dots, R_M$ ) 填充, 这样有

$$P = \sum_{m=1}^M \int_{R_m} d^2 \mathbf{r} e^{-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}} = \sum_{m=1}^M \int_{x_m}^{x_m + \Delta x_m} dx \int_{y_m}^{y_m + \Delta y_m} dy e^{-i(G_x x + G_y y)} \quad (13)$$

即

$$P = \begin{cases} \sum_{m=1}^M i \frac{e^{-iG_y \Delta y_m} (e^{-iG_x \Delta x_m} - 1)}{G_y}, & (G_x = 0, G_y \neq 0) \\ \sum_{m=1}^M i \frac{e^{-iG_x \Delta x_m} (e^{-iG_y \Delta y_m} - 1)}{G_x}, & (G_x \neq 0, G_y = 0) \\ \sum_{m=1}^M - \frac{e^{-i(G_x \Delta x_m + G_y \Delta y_m)} (e^{-iG_x \Delta x_m} - 1) (e^{-iG_y \Delta y_m} - 1)}{G_x G_y}, & (G_x \neq 0, G_y \neq 0) \end{cases} \quad (14)$$

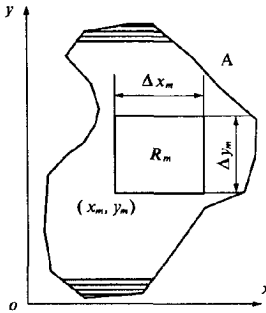


图2 任意形状散射体A的横截面图

Fig.2 Cross section of the scatter A in arbitrary shape

此外,当  $G = 0$  时,式(10)中  $S_A$  和  $S_B$  可通过图2中矩形面积和来计算得到。

由此,将式(14)、(10)代入式(9),我们就可采用数值方法,计算得到任意散射体形状二维声子晶体的单元结构函数,进而根据式(7)、(8)即可计算得到其带结构。

### 3 数值计算结果及比较

为了验证文中算法的正确性,我们分别采用传统的以及文中改进的PWE算法对图3所示二维正方晶格声子晶体的带隙特性进行计算,并对其结果进行比较。

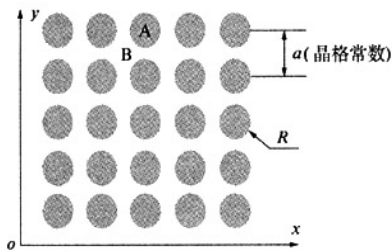


图3 二维正方晶格典型声子晶体横截面图

Fig.3 Cross section of the typical two-dimensional phononic crystals with square lattice

图3中  $z$  方向垂直于纸面向上,A为基体材料B中插入的圆柱,圆柱体半径  $R = 8 \text{ mm}$ ,平行于  $z$  轴,间距  $a = 20 \text{ mm}$  为晶格常数。其中,

介质A为Pb(铅),B为Epoxy(环氧树脂),材料参数为:  $\rho_{\text{Pb}} = 13\,600 \text{ kg/m}^3$ ,  $\lambda_{\text{Pb}} = 4.23 \times 10^{10} \text{ Pa}$ ,  $\mu_{\text{Pb}} = 1.49 \times 10^{10} \text{ Pa}$  及  $\rho_{\text{Epoxy}} = 1\,180 \text{ kg/m}^3$ ,  $\lambda_{\text{Epoxy}} = 4.43 \times 10^9 \text{ Pa}$ ,  $\mu_{\text{Epoxy}} = 1.59 \times 10^9 \text{ Pa}$ 。

图4所示即分别采用传统的以及文中改进的PWE算法计算得到的图3所示声子晶体的带结构,图中实线和虚线分别为采用文中改进的PWE算法的计算得到的  $x-y$  模式和  $z$  模式色散曲线,圆圈和三角形分别为使用传统PWE算法计算得到的  $x-y$  模式和  $z$  模式色散曲线。其中,两者均引入了441个平面波,同时,改进的PWE算法将声子晶体原胞离散为  $100 \times 100$  个点,并引入47个矩形来描述其散射体。可以看出,两种方法的计算结果吻合很好。图4中阴影所示完全禁带产生于  $30 \sim 38.7 \text{ kHz}$  和  $46.9 \sim 51.7 \text{ kHz}$ 。

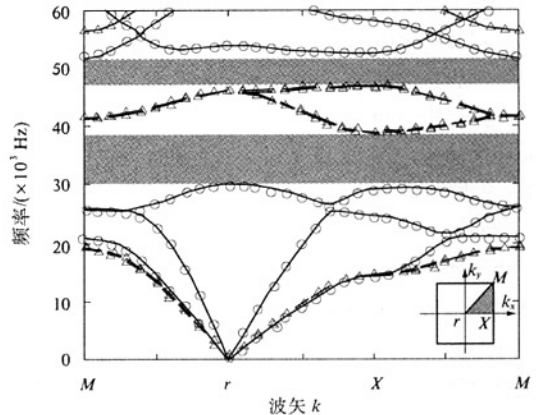


图4 图3所示二维声子晶体的带结构

Fig.4 Band structures of the phononic crystals in Fig.3.

### 4 结论

通过引入数值积分的思想,改进了平面波展开算法,使之能够计算任意单元结构二维声子晶体的带结构。通过算法对比,充分验证了文中改进的平面波展开算法的正确性。该算法为二维声子晶体单元结构的拓扑优化提供了必要的手段。

### 参考文献:

- [1] JOHNSON S G, JOANNOPOULOS J D. Photonic Crystals - The Road from Theory to Practice [M]. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 2002.
- [2] 吴福根,刘有延. 二维周期性复合介质中声波带隙结构及其缺陷态[J]. 物理学报, 2002, 51(7): 1434 ~ 1438.
- [3] KUSHWAHA M S, HALEVI P, DOBRZYNSKI L, et al. Acoustic band structure of periodic elastic composites[J].

- Phys Rev Lett, 1993, 71(13): 2022 ~ 2025.
- [4] LI X, WU F, HU H, et al. Large acoustic band gaps created by rotating square rods in two-dimensional periodic composites[J]. J Phys D: Appl Phys, 2002, 36(1): L15 ~ L17.
- [5] LIU Z, ZHANG X, MAO Y, et al. Locally resonant sonic materials[J]. Science, 2000, 289(1): 1734 ~ 1736.
- [6] MEI J, LIU Z, SHI J, et al. Theory for elastic wave scattering by a two-dimensional periodical array of cylinders: An ideal approach for band-structure calculations[J]. Phys Rev B, 2003, 67(24): 245 ~ 253.
- [7] 王 刚, 温激鸿, 韩小云, 等. 二维声子晶体带隙计算中的时域有限差分方法[J]. 物理学报, 2003, 52(8): 1943 ~ 1947.
- [8] 程祖依. 弹性动力学基础[M]. 北京: 中国地质大学出版社, 1993.
- [9] 顾秉林, 王喜坤. 固体物理学[M]. 北京: 清华大学出版社, 1989.

## Calculation of Band Structure in Two - dimensional Phononic Crystals with Arbitrary Scatters

WANG Liu - yun<sup>1</sup>, XIONG Bin - sheng<sup>1</sup>, WANG Xing<sup>2</sup>

(1. School of Mechanical Engineering, Zhengzhou University, Zhengzhou 450002, China; 2. Base Department of Air Defence Command College, Zhengzhou 450052, China)

**Abstract:** With the discretization of one lattice with scatter in arbitrary shape inside two - dimensional phononic crystals, the integral problem in the calculation of structural functions is successfully solved with a numerical integral method. Thus, an improved plane - wave expansion method is proposed for the calculation of band structure in two - dimensional phononic crystals with lattice of scatters in arbitrary shape. Using traditional and improved plane - wave expansion method respectively, we calculate the band structures of same two - dimensional phononic crystals with regular unit structure. The two calculation results are in good agreement, which validates the correctness of our method. The special ability of the improved method will be especially helpful in the topological optimization of unit structure in phononic crystals.

**Key words:** phononic crystal; elastic wave band gap; plane-wave expansion