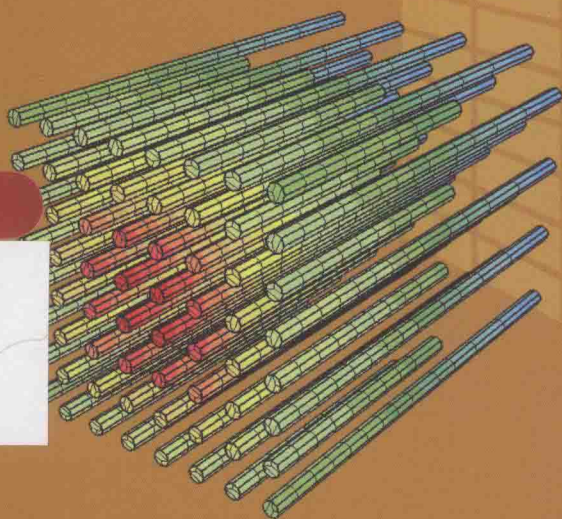


PHONONIC
CRYSTAL

CALCULATION METHOD AND
BAND GAP PROPERTIES

声子晶体的 计算方法与带隙特性

张研 韩林 蒋林华 张子明 著



科学出版社

声子晶体的计算方法 与带隙特性

张 研 韩 林 蒋林华 张子明 著

科 学 出 版 社

北 京

内 容 简 介

本书主要论述工程中的声子晶体能带计算方法和带隙特性。全书分为8章,内容包括绪论、周期介质中弹性波、声子晶体的能带结构计算方法、声子晶体梁的带隙特性、外部作用下声子晶体梁的带隙特性、声子晶体板的带隙特性、铰接二维格栅的带隙特性及截断式二维格栅的带隙特性。

本书可供工程力学、材料工程、土木工程等有关专业的研究人员和工程技术人员参考。

图书在版编目 CIP 数据

声子晶体的计算方法与带隙特性 / 张研等著. —北京:科学出版社, 2015
ISBN 978-7-03-043266-7

I. ①声… II. ①张… III. ①声光晶体-计算方法 ②声光晶体-特性
IV. ①O7

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2015)第 024761 号

责任编辑:童安齐 / 责任校对:王万红
责任印制:吕春珉 / 封面设计:耕者设计工作室

科学出版社出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

双青印刷厂印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2015年3月第 一 版 开本:B5(720×1000)

2015年3月第一次印刷 印张:17

字数:330 000

定价:80.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换〈双青〉)

销售部电话 010-62134988 编辑部电话 010-62137154

版权所有,侵权必究

举报电话:010-64030229; 010-64034315; 13501151303

前 言

弹性波在周期结构中的传播问题有很长的研究历史,可追溯至 Newton 对声速的研究。尤其是近 20 年来,随着声子晶体概念的提出,人们开始在一个新的层面认识弹性波在周期结构中的传播,并进行了大量理论和实验研究以及应用探索。声子晶体是一种具有周期性结构特征的功能材料,独特的弹性波带隙(振动带隙)特性使在带隙频率范围内的弹性波无法传播。另外,某些特定频率的弹性波在声子晶体和其他介质交界面上有负折射现象,利用该性质可以实现声聚焦。诸多特性使得声子晶体在减振降噪、声功能器件等方面具有广阔的应用前景。而从 1993 年声子晶体概念被提出至今,时间并不长。目前,在声子晶体的能带结构计算方法、带隙机理及特性、应用探索等诸多方面存在许多问题有待解决。该领域正充满着机遇和挑战。

作者主要针对有广泛应用的梁、板、格栅等结构进行声子晶体研究,改进能带结构计算方法,探索此类声子晶体的带隙机理、特性与应用途径,发掘可用于调节和设计带隙的手段。经过多年积淀,课题组取得了一些成果。现将这些成果整理成书,希望对该领域的研究人员有所帮助。

本书由张研、韩林、蒋林华和张子明撰写,由张研统稿,倪志强博士等计算了书中部分例题。王德信教授对书稿进行了详细审阅,他的宝贵而富于建设性的意见,使得本书结构更为合理,内容更为严谨,在此表示衷心的感谢。本书的研究工作得到了国家自然科学基金和教育部留学回国人员科研基金的资助,也一并表示感谢。

由于作者水平有限,书中难免有不足之处,热忱希望各位专家和读者批评指正。

著 者

2014 年 9 月 16 日

目 录

前言

第 1 章 绪论	1
1.1 声子晶体的提出	1
1.2 相关基础理论的发展	4
1.2.1 弹性波与振动	4
1.2.2 晶体学与 Bloch 波	5
1.3 声子晶体研究概况	6
1.3.1 带隙计算方法	7
1.3.2 带隙机理与特性	9
1.3.3 应用前景	14
第 2 章 周期介质中的弹性波	16
2.1 介质中的弹性波	16
2.1.1 固体中的弹性波	16
2.1.2 流体中的声波	17
2.1.3 杆和板中的波动与振动	18
2.1.4 弹性波的频散	21
2.2 介质周期性的描述	23
2.2.1 晶格与位置空间	23
2.2.2 晶格类型	24
2.2.3 倒格子与倒易空间	25
2.3 声子晶体中的弹性波	27
2.3.1 固体中的 Bloch 弹性波	27
2.3.2 流体中的 Bloch 声波	30
2.3.3 杆和板中的 Bloch 波	31
2.3.4 能带结构	32
2.3.5 传输特性	34
2.4 本章小结	36
第 3 章 声子晶体的能带结构计算方法	37
3.1 传递矩阵法	38

3.1.1	一般传递矩阵法	38
3.1.2	改进传递矩阵法	41
3.1.3	结果验证	45
3.2	平面波展开法	47
3.2.1	一般平面波展开法	47
3.2.2	改进平面波展开法	50
3.2.3	平面波展开法的收敛性	51
3.3	有限元法	62
3.3.1	一般有限元法	62
3.3.2	平均处理法	63
3.3.3	平均处理法的推广与适用范围	66
3.3.4	结果验证	70
3.4	本章小结	80
第4章	声子晶体梁的带隙特性	82
4.1	声子晶体 Euler 梁的带隙特性	83
4.1.1	声子晶体 Euler 梁的带隙	83
4.1.2	声子晶体 Euler 梁能带结构调节规律	86
4.2	声子晶体 Timoshenko 梁的带隙特性	91
4.2.1	Timoshenko 梁的平面波展开法	91
4.2.2	不同梁模型下声子晶体梁的改进传递矩阵法	97
4.2.3	转动惯性与剪切变形对声子晶体梁能带结构的影响	103
4.3	本章小结	107
第5章	外部作用下声子晶体梁的带隙特性	108
5.1	基础模型	108
5.2	弹性基础上刚接声子晶体梁的带隙特性	110
5.2.1	Winkler 基础上的声子晶体梁	110
5.2.2	双参数基础上的声子晶体梁	122
5.3	弹性基础上铰接声子晶体梁的带隙特性	129
5.3.1	能带结构计算	130
5.3.2	能带结构与带隙特性	132
5.4	弹性基础上周期铰接均质梁的带隙特性	137
5.4.1	能带结构计算	138
5.4.2	能带结构与带隙特性	139
5.5	周期性弹性支座上声子晶体梁的带隙特性	142

5.6 轴向力作用下声子晶体梁的带隙特性	144
5.6.1 轴向力作用下声子晶体 Euler 梁的带隙特性	144
5.6.2 轴向力作用下声子晶体 Timoshenko 梁的带隙特性	147
5.7 本章小结	150
第 6 章 声子晶体板的带隙特性	152
6.1 声子晶体薄板的带隙特性	152
6.1.1 晶格尺寸对能带结构的影响	152
6.1.2 散射体填充率对能带结构的影响	153
6.1.3 板的厚度对能带结构的影响	154
6.1.4 晶格结构对能带结构的影响	155
6.2 声子晶体厚板的带隙特性	156
6.2.1 非均质厚板基本理论及声子晶体厚板的平面波展开法	156
6.2.2 声子晶体厚板的能带结构	160
6.3 弹性基础上声子晶体板的带隙特性	167
6.3.1 弹性基础上声子晶体板的平面波展开法	167
6.3.2 Winkler 基础对声子晶体板能带结构的影响	168
6.3.3 双参数基础对声子晶体板能带结构的影响	171
6.4 本章小结	173
第 7 章 铰接二维格栅的带隙特性	174
7.1 铰接二维格栅的样式与模型	175
7.2 能带结构计算	178
7.2.1 适用于铰接格栅的有限元法	178
7.2.2 结果验证	185
7.3 能带结构与带隙特性	187
7.3.1 正方格栅	187
7.3.2 六角格栅	193
7.3.3 三角格栅	197
7.3.4 Kagomé 格栅	202
7.3.5 内凹格栅	207
7.3.6 有限周期结构的幅频响应	212
7.4 本章小结	215
第 8 章 截断式二维格栅的带隙特性	217
8.1 截断二维格栅的样式与模型	218
8.2 能带结构与带隙特性	219
8.2.1 截断式正方格栅	219

8.2.2 六角截断式三角格栅	226
8.2.3 Kagomé 截断式三角格栅	233
8.2.4 有限周期结构的幅频响应	239
8.3 本章小结	242
附录 A 结构参数的推导	244
A.1 一维结构参数(二组元)	244
A.2 二维结构参数(圆柱形散射体)	245
附录 B 材料参数表	248
参考文献	249

第 1 章 绪 论

近年来,周期性介质(尤其是具有二维、三维周期性的介质)中电磁波和弹性波的传播问题被人们所关注^[1]。这类介质具有若干与一般介质显著不同的性质,其中最重要的特点就是存在经典波带隙。针对电磁波和弹性波,这类介质分别被称为光子晶体^[2-4]和声子晶体^[5-7]。本书关注的是有关声子晶体的计算方法和特性。

声子晶体具有介质相互区隔排列的周期性结构。由于弹性波与周期结构的相互作用,只有一部分频率范围内的弹性波可以在其中顺利传播,而其他频率范围的弹性波无法透过其继续传播,即存在所谓的弹性波带隙。同时,通过在声子晶体中引入缺陷,可以控制弹性波的传播范围和方向。另外,某些特定频率的弹性波在声子晶体和其他介质交界面上有负折射现象,利用该性质可以实现声聚焦。诸多特性使得声子晶体在减振降噪、声功能器件等方面具有广阔的应用前景^[8]。

从 1993 年声子晶体概念被提出至今,时间并不长。其研究理论和方法部分借鉴了晶体学和固体能带论的相关内容。目前,在声子晶体的能带结构计算方法、带隙机理及特性、应用探索等诸多方面存在许多问题有待解决。该领域正充满着机遇和挑战。而无论是研究带隙机理,抑或是面向应用的带隙优化设计等,能带结构的计算与分析无疑是基础。本文主要针对若干典型声子晶体,包括梁杆类声子晶体、格栅式声子晶体以及声子晶体板等,研究能带结构的计算方法及带隙特性。

1.1 声子晶体的提出

固体能带理论^[9,10]是研究晶体中的电子状态和说明晶体性质最重要的基础理论。晶体中的电子波由于受到晶格的周期性位势散射,部分波段会因为破坏性干涉形成带隙,导致电子波的频散关系呈带状分布,这就是电子能带结构。在完整的晶体中,带隙范围内没有允许的能级。利用固体能带理论,不仅第一次揭示了晶体导电与否的本质,并及时为半导体技术的应用提供了理论基础。半导体就是通过人为设计电子带隙来操纵电子的流动性,使其易于实现导电性能差别很大的状态。半导体技术带来了一次科技革命,对人类文明的进步产生了巨大而深远的影响。在固体能带理论的启发下,人们也逐渐开始探索周期性介质中经典波的传播问题。

1987 年 Yablonovitch^[2] 和 John^[3] 分别独立提出了光子晶体的概念^[11]。光子晶体是由不同折射率的介质周期性排列而成。介电常数在空间上的周期性,会引起空间折射率的周期性变化,当满足一定条件时,类似电子能带结构,电磁波的频

散关系也会呈带状分布,即出现了光子能带结构。没有频率和波矢对应的范围就是电磁波带隙或光子带隙。该范围内的电磁波传播被抑制。虽然光子晶体概念提出的时间不长,但是事实上 Rayleigh 在 1887 年就发现规则排列的多层半导体材料具有一维光子带隙,即对于一定波长范围的光具有极大的反射率^[12]。在 1987 年以前,研究都集中在这种一维结构上。直到 Yablonovitch 和 John 开创了对二维、三维规则光学结构的研究。1991 年,Yablonovitch 制出了首个微波范围内具有完全带隙的三维光子晶体^[13]。1996 年,Krauss 制出了首个针对可见光范围的一维光子晶体^[14]。随着这些光子晶体实物不断被制造出来,该领域的研究蓬勃发展起来。Thomson Reuters 公司每年通过分析科学家发表研究成果的总被引频次,来预测当年或以后的 Nobel 奖得主。在对 2011 年物理学领域的预测中,提出及发明光子晶体的 Yablonovitch 和 John 位列其中。

事实上,自然界中也有众多光子晶体实例,比如蝴蝶和一些甲虫随不同观察角度而变化颜色的翅膀等^[15]。光子晶体体积可以非常小,在纳米技术、光计算机、芯片等领域有很好的应用前景。最早由 Russell 在 1998 年制出的光子晶体光纤,有比传统光纤更好的传输特性,可以应用到通信、生物等诸多前沿和交叉领域^[16]。利用光子晶体可以将光的群速度降低到原来的 1% 以下^[17]。这种材料可被用于各种光学系统及元件中,以得到高功率低阈值的光子晶体激光等。2011 年,Qualcomm 公司开发出利用光子晶体性质进行彩色显示的 Mirasol 显示技术,制造出了功耗极低的彩色电子墨水显示屏。利用现有的半导体工业技术,如电子束光刻、干刻蚀、蚀刻溅射生长技术等,可以制造出各种光子晶体,如由半导体薄片堆层构成二维光子晶体,以及通过层层堆积方法制造木堆结构或者使纳米微球通过自组装形成三维光子晶体等^[18]。

通过类比光子晶体,很快,人们发现弹性波在周期性介质中传播时也会产生弹性波带隙。带隙范围内的弹性波传播被抑制。1992 年,Sigalas 和 Economou 首次在理论上证明了三维周期点阵结构中存在弹性波带隙^[5]。1993 年 Kushwaha 等人在研究二维周期复合材料时首次提出了声子晶体的概念^[6]。而最早关于声子晶体的研究是在 1979 年由 Narayanamurti 等人完成的,他们研究了高频声子在 GaAs/AlGaAs 超晶格中的传播,该超晶格可被视为一维声子晶体^[19]。1995 年,Martinezsala 等人通过在西班牙马德里的一座雕塑进行声学实验,首次证实了声波带隙的存在^[20]。1998 年,de Espinosa 首次发现了具有完全弹性波带隙的声子晶体,该材料由铝合金板中正方排列水银柱组成。2000 年,刘正猷通过研究橡胶、铅和环氧树脂构成的三维声子晶体,发现了 Bragg 散射机理外的另一种产生弹性波带隙的机理,即局域共振机理^[21]。短短数年,声子晶体研究领域已经出现不少关键性进展。

从复合材料的观点来看,声子晶体中相互不连通的材料称为散射体,连通为一

体的材料称为基体或基质。一维(典型)声子晶体为层状周期结构,散射体和基体不能严格区分。按照构成声子晶体材料的数目分类,可以将声子晶体分为二组元声子晶体、三组元声子晶体等。按照构成声子晶体组元材料的属性分类,可以将声子晶体分为固/固、固/液(液/固)、固/气(气/固)声子晶体等,其中固/液声子晶体表示固体散射体周期分布在液体基体材料中,其他情况依此类推。讨论到具体的声子晶体时,用例如铝/空气的形式,表示铝为散射体而空气为基体。

声子晶体按材料变化方向的维数可分为一维、二维和三维声子晶体,其典型结构如图 1.1 所示,图中箭头方向为材料周期性变化的方向。

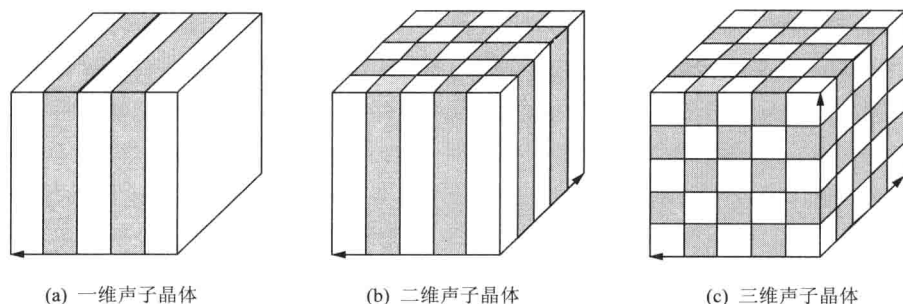


图 1.1 声子晶体结构示意图

理想的声子晶体在非周期方向具有无限尺寸,而这种假设只有在波长远小于非周期方向尺寸才合理。由于固体中弹性波传播速度较快,实际工程中广泛应用的梁、板等结构均不满足这一条件。为了区别于一维、二维理想声子晶体,将此类非周期方向为有限尺寸的结构称为典型声子晶体结构^[8],如图 1.2 所示。

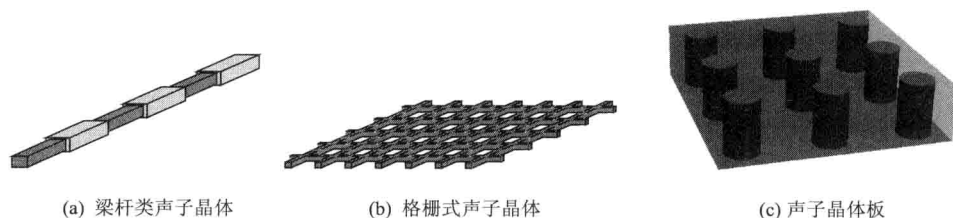


图 1.2 典型声子晶体示意图

Kushwaha 曾对电子晶体、光子晶体和声子晶体进行过比较^[6]。简单来说,电子晶体中的电子波是 de Broglie 波,其波动性满足 Schrödinger 方程。由于原子周期性排列,电子带隙产生,这解释了电绝缘体的存在。光子晶体中传播的是电磁波,其波动性满足 Maxwell 方程。电磁介质材料周期性排列,光子带隙产生,于是出现了光“绝缘体”。类似地,声子晶体中传播的是弹性波,其波动性满足 Navier 方程。弹性材料周期性排列,弹性波带隙产生,于是有了弹性波“绝缘体”。因此,

三类问题的研究具有相似之处,尤其是光子晶体和声子晶体的研究均有可相互借鉴之处。当然,声子晶体也有自身独有的特点。除了尺度以及所针对的物理问题不同外,一般地,弹性波是纵波和横波耦合的全矢量波,即使在各向同性介质中也具有三个独立的材料参数(密度、弹性模量和剪切模量),相比只有无耦合横波的电磁波要复杂得多。

1.2 相关基础理论的发展

1.2.1 弹性波与振动

声子晶体是具有弹性波带隙的周期性介质。研究声子晶体就是解答周期性非均匀介质中的弹性波传播问题。弹性波在介质中的产生与传播问题是力学中既古老又新颖的重要内容。

弹性动力学在 19 世纪蓬勃发展,许多经典理论在这一时期建立起来^[22-24]。1821 年,Navier 从分子模型出发,把每一个分子作为一个力心,导出了弹性固体的平衡和运动方程。这组方程只含有一个弹性常数。有两个弹性常数的各向同性弹性波动方程是 Cauchy 在 1823 年得出的。1828 年 Poisson 指出波动方程的位移解由两部分组成,一部分是一个标量势函数的梯度,另一部分代表了一个旋转场,在弹性体内存在两种传播速度不同的波。1852 年,Lamé 进一步明确提出了标量势和矢量势的概念,指出位移场可以表示为标量势函数的梯度与矢量势函数的旋度之和,而且这两个势函数分别满足非耦合的波动方程,分别具有无旋波和等容波的传播速度。这个时期的研究还包括,1830 年 Cauchy 对晶体介质中平面波传播的研究;1831 年 Poisson 对初值问题的处理;1849 年 Stokes 对体积力引起的波动问题的研究;1877 年 Christoffel 对间断面传播问题的讨论以及 1882 年 Kirchhoff 对非齐次波动方程所支配势积分表达式的导出。除了发现一维光子带隙,1887 年 Rayleigh 还发现了在半空间界面上传播的面波,这种波以略小于等容波的波速沿界面传播。1899 年 Knott 首先研究了弹性波在两个弹性半空间分界面上的反射和折射问题。在介质属性不连续的界面处,反射波和折射波都可能出现波型转换,或者说,在界面处两种位移势通过边界条件以复杂的方式耦合。这是弹性波的重要特征,但是求解困难。在两个弹性半空间界面处,也可能存在一种与 Rayleigh 波相似的面波,即 Stonely 波。当一个弹性半空间表面有覆盖层时,层内除了 Rayleigh 波外,还可能存在着另一种质点运动方向平行于界面的面波,Love 波。1904 年,Lamb 研究了由位于半无限介质表面或内部的点源和线源所产生弹性波的传播问题,这在地震学中有重要价值。

相比波动理论,由于在应用上的重要性,人们对一些典型结构(梁、板、壳等)振

动的研究更早^[22-24]。弹性波在有界介质中传播时,由于行波来回反射,最终会形成驻波,使整个物体呈现出在平衡位置附近的振动。早期研究一般使用材料力学方法,引入一些近似假定来建立运动方程。虽然有一定局限性,但即使现在看来也是合理可行的。因为若从弹性波动理论出发,即使研究看似简单的杆件中弹性波的传播也相当困难。问题的困难主要在于横向尺寸的引入会导致复杂的几何频散。Euler 和 Bernoulli 分别在 1744 年和 1751 年推导了梁的弯曲振动方程,也得出了各种边界条件下的解答。1821 年 Germain 建立了薄板振动的偏微分方程。1824 年 Navier 导出了杆的纵向振动方程。1829 年 Poisson 证明了细杆的振动理论包含于精确的线弹性体运动方程中。1876 年 Pochhammer 精确分析了无限长圆杆的一般振动,这是研究圆杆波导的基础。Rayleigh 和 Timoshenko 分别在 1894 年和 1921 年对 Euler-Bernoulli 梁的弯曲振动理论进行了修正,前者考虑了转动效应,后者考虑了剪切变形作用。

到 19 世纪末,比较完善的弹性动力学经典理论已经建立。这些经典理论虽然历史久远,但是在现在的研究和应用中仍然一再被提及和运用,而在声子晶体研究中同样需要这些理论。

1.2.2 晶体学与 Bloch 波

声子晶体中不同材料在空间的周期性分布就像晶体中各种微观粒子的周期排列一样,只是尺度有所不同。因此,在几何上,固体物理学中描述晶体的方法^[25,26]可作为描述声子晶体的方法。

晶体学的产生,是由于早期鉴别矿石的需要。一些天然矿物晶体,如岩盐、石英等,具有规则的几何外形,这是一般所熟知的。利用这个特点来鉴别矿物资源,已经发展成为重要的方法。正是这个缘故,在 18 世纪中叶,对晶体几何的研究有了很大发展。当时,已经从理论上推断,晶体的宏观规则性,是晶体中微观粒子规则排列的结果^[10]。到 20 世纪,随着 X 射线衍射方法的发展,直接验证了这一结论^[27]。由于存在周期性和对称性,研究晶体时一般将其抽象表示为空间点阵形式的晶格。由点群对称性和空间群操作,可以定义立方晶系、四方晶系、正交晶系、单斜晶系、三斜晶系、三方晶系和六方晶系等 7 个晶系。

随着物理学的发展,人们发现,晶体中的电子波函数与其他一些波动问题都可以用一类双曲型偏微分方程描述。这类方程的形式为

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + \omega^2 F(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (1.1)$$

式中: $\psi(\mathbf{r})$ 是位置 $\mathbf{r}$ 处的场量, $F(\mathbf{r})$ 是一个周期函数。

Floquet 在 1883 年首先研究了 $F(\mathbf{r})$ 是余弦函数时的一维问题,即 Mathieu 方程^[28]。1928 年, Bloch 将研究推广至三维问题,对波在三维周期性介质中传播问题的研究作出了开创性贡献^[29]。晶体中存在带隙的性质就是由 Bloch 理论决

定的。Bloch 证明了电子波在三维周期性介质中传播时没有散射;解的形式是 Bloch 波,可写为一个周期函数与一个平面波的乘积。在此基础上,Bloch 得出了惊人的结论,即在导体中,电子不被周期性离子散射,而只在周期性存在缺陷的地方被散射。虽然,Bloch 所研究的是电子波函数,但他所提出的理论并不依赖于具体的波动方程。事实上,不论是满足 Schrödinger 方程、Maxwell 方程或是 Navier 方程,只要是线性算子特征值问题,均可应用。无论是传播电子波的晶体,还是传播电磁波的电介质,抑或是传播弹性波的弹性体,在满足 Bloch 理论的基础上,均可能产生相应的波带隙。另外,某种满足其他波动方程的波,在周期性条件下,若也有 Bloch 波的形式,也会产生对应的波带隙。例如,目前也有针对磁子晶体^[30-32]的研究。磁子晶体是类比光子晶体、声子晶体的概念而来,其由周期性亚铁磁材料构成,具有自旋波带隙。

1.3 声子晶体研究概况

虽然从声子晶体概念提出至今仅有 20 年,但是,事实上,研究经典波在周期结构中的传播问题已有上百年的历史,而分析结构波导中波传播的数学模型和方法出现的更早。早期,人们非常关注周期性弹簧质量系统,即链的动力问题。Newton 最早研究了该问题,并推导了计算声速的公式^[33]。虽然,后来 Laplace 指出声波传播应按绝热过程来考虑,但是 Newton 得出的声速与大气压平方根成正比,与密度平方根成反比的基本结论是正确的。到 18、19 世纪,包括 Taylor、Euler、Lagrange、Cauchy 和 Kelvin 在内的几乎所有著名数学家和物理学家都研究过波在链中传播的各种问题^[34]。后来,Brillouin 在 Floquet 理论上建立了滤波器的数学模型,并对波在周期材料中的传播特性进行了系统深入的研究^[34]。接着,他的做法被推广到分析工程上类似的周期性结构中。由于在应用上的重要性,首先被分析的是波在层状复合材料中的传播问题。在 20 世纪 50~70 年代,弹性波在各种分层介质中传播的频散特性已被研究得比较深入^[35-38]。研究的结论主要有:在无限周期分层介质中传播的波只存在于某些特定而离散的频率范围内,称为通带;而与通带交替出现的所谓带隙中的波迅速衰减以致无法传播。随后,简单格栅、周期支撑梁等工程结构中弹性波的传播问题也开始被研究^[39-43],同样也发现只有某些频率范围的波才能在其中传播。之后,被研究的周期结构逐渐扩展到周期支撑或加劲的各种梁、板以及桁架等^[44-49]。这个阶段,模型至多是二维结构而且只有一种材料构成,周期性也仅表现在支撑或加劲肋等。后来,也出现了针对纤维、圆柱孔或球状孔周期排列的复合材料中弹性谐波传播问题的研究^[50-52]。但在声子晶体概念提出之前,周期结构大都是来源于实际工程,研究的出发点当然是保证这些结构在实际应用中的可靠性。而在声子晶体概念提出后,研究对象不再局限于

实际的物体,各种更注重不同材料排列的周期结构不断被提出,研究的重点已经变成由构造出声子晶体的性质来探索可能的用途。因此,可以说真正的声子晶体研究历史只有短短 20 年。

经过 20 年的发展,声子晶体在理论研究、实验测试和样品制备等方面都取得了巨大的进步。总的来说,国内外对声子晶体的研究工作主要包括弹性波带隙的形成机理、弹性波带隙计算方法、表面和缺陷引起的波的局域化、负折射现象研究及其应用。与当前热门的光子晶体相比,声子晶体在带隙机理研究、能带计算方法研究和相关的实验研究的许多方面尚处于探索阶段。但由于其潜在的广阔应用前景,引起了世界各国学者的广泛关注,国际上墨西哥的 Kushwaha、美国的 Sigalas、法国的 Vasseur、西班牙的 Torres、比利时的 Khelif 等课题组,国内的国防科学技术大学温熙森、华南理工大学刘有延、武汉大学刘正猷、北京交通大学汪越胜、香港科技大学沈平、台湾大学吴政忠及南京大学凝聚态物理、声学 and 材料等多个课题组都在声子晶体领域作了大量的研究工作。当然,在声子晶体的计算方法、带隙机理与特性、应用探索等方面还有许多问题有待解决。

1.3.1 带隙计算方法

带隙特性是声子晶体的标志性性质,其通常有两种表述方法,即能带结构和传输特性。计算能带结构是研究声子晶体的基础。能带结构表述的是无限周期声子晶体中弹性波的频散关系。通过能带结构分析可以明确所研究对象是否存在完全带隙或方向带隙。当确定了某种声子晶体的带隙范围后,可以设计制造出相应的设备。但是,显然实际的设备不可能有无限周期。此时,可以用传输特性描述弹性波的传播。事实上,许多研究结果表明,并不需要很多周期就可以使得由有限周期声子晶体传输特性表述的带隙范围与由无限周期声子晶体能带结构表述的带隙范围相符合,而增大周期数可以使带隙范围内的波衰减程度更强^[53,54]。另外,能带结构也是分析判断某种声子晶体是否可以出现负折射性质的主要工具^[55]。因此,能带结构的计算最为基本。

目前,能带结构计算方法主要有传递矩阵法、平面波展开法、多重散射理论、时域有限差分法和有限元法等,各具特色,其中几个方法也适用于计算传输特性,下面做简要说明。

传递矩阵法^[53,54,56]是计算一维声子晶体能带结构的首选方法。该方法推导比较简单,通过建立状态参数间的传递关系并结合因结构周期性而满足的 Bloch 定理,就可以得到包含弹性波传播频散关系的特征值问题。传递矩阵法可得到精确解,计算量也很小,通过求解有限周期声子晶体的传递矩阵还可以得到传输特性的解析解^[56]。该方法适用于各种一维声子晶体,包括理想一维声子晶体^[54,56]、一维声子晶体梁杆类结构^[57-70]以及可以简化为一维模型的结构,如由周期材料构成的

管道^[60,61,63,66,67]、薄壁结构^[62]等。然而,常见的传递矩阵法并不重视状态参数的选取,导致传递关系多建立在缺乏实际意义的状态参数之间。这不仅不利于带隙机理的解释,也使推导和计算过程变得较为繁琐。再者,当考虑高频或者材料中有阻尼等损耗的情况时,传递矩阵法的结果表现出数值不稳定性^[71]。另外,传递矩阵法目前难以直接计算二维、三维声子晶体的能带结构。

平面波展开法是计算声子晶体能带结构的基本方法^[72]。该方法将周期性与声子晶体本身相同的各个材料参数按 Fourier 级数在波矢空间展开,再将满足解答的 Bloch 位移波也作类似展开,最终使这些变量在波动方程中结合,可以导出波矢空间中包含弹性波传播频散关系的特征值问题。该方法的实施依赖波矢空间中倒格矢的选取。具体计算时,只可能选取有限个倒格矢,这使得所得结果是近似的。平面波展开法在求解只包含固体或流体的声子晶体^[73-80]以及只考虑声波的情况^[81-86]时都很成功。通过结合超胞方法,该方法也被用来处理包含缺陷的声子晶体^[87-90]。平面波展开法最常被提到的缺点是收敛性问题^[91-95]。当组元材料的参数差异较大时,尤其是同时含有固体和流体的情况下,结果收敛很慢,即使取较多倒格矢也不易得出较准确的结果。另外,平面波展开法最终要求解高阶稠密复特征值问题,考虑到计算精度,波矢空间中的倒格矢和简约 Brillouin 区中的波矢都不能取得太少,这使整个计算过程相当费时。

多重散射理论^[91,93,96-99]在一定程度上克服了平面波展开法的收敛性问题。该方法由计算电子能带结构的 Korringa-Kohn-Rostoker 方法推广而来,它将弹性波在声子晶体中的传播过程看做是一系列经散射体散射后弹性波的共同表现。具体地,弹性波场被展开为纵波和横波的线性叠加,将固有入射波和其他散射波作为当前散射体的入射波,由散射体内的驻波条件,可以得出散射体外散射波和入射波的关系,即 Mie 散射关系,进一步结合 Bloch 定理,可以得到包含频散关系的特征值问题^[8]。该方法适用于各种材料参数差异大的声子晶体,具有很好的收敛性^[8,100],也可以计算周期或无序有限结构的传输特性^[93,96,101],而且由于该方法将纵波和横波分开考虑,更有利于揭示带隙机理。但是该方法推导相当复杂,并且需要有合适的散射波基函数才能进行波场展开^[8,102,103],这对于形状简单的散射体,如圆柱体、球体等尚且较复杂,对于其他形状的散射体,目前更是无能为力。

时域有限差分法最早用来模拟电磁波的传播过程^[104],对弹性波传播的模拟也很成功^[94]。作为一个时域方法,除了对空间的离散,还要对时间过程进行分割,以得到每个离散时刻的波动方程解答。显然,该方法可以用来方便地计算传输特性,当然,也可以用来计算声子晶体的传输特性^[84,87,88,105-112]。后来,时域有限差分法也被用于计算声子晶体的能带结构^[92,103,113]。但是,能带结构是频域关系,因此,用该方法模拟一个波传播过程后,还要再由 Fourier 变换得出频率谱。显然,在只需获得能带结构的情况下,时域方法是不直接的。该方法的优点是可以追踪

过程,而且不受材料差异影响,能计算各种复杂声子晶体。但是虽然经过人们不断改进算法^[103,113],其计算量仍然太大^[102],最好是进行并行计算^[102,108,114],而且规则的差分网格在模拟复杂形状时也无优势。另外,该方法还存在稳定性和数值频散等问题。

有限元法是广泛应用的数值方法^[115,116]。该方法通过将求解域细分为比差分法更自由的网格,用所有单元中的低阶光滑函数来近似整个求解域中的解答。该方法在描述复杂形状结构时具有其他方法无可比拟的优越性,在通用性上有保证。若将时域分割,可以得到类似时域有限差分法的时域有限元法^[117]。显然,由于网格的自由性,时域有限元法比时域有限差分法对求解域的描述更准确。因此,该方法适于计算有限周期声子晶体的传输特性^[59,66,80,118-120]。而若将声子晶体中的 Bloch 位移波作为有限元法中的位移解,最终可以得到包含弹性波传播频散关系的广义特征值问题。这个过程不同于常规有限元法,常见的有限元软件如 Ansys、Abaqus、Marc 等均无法直接实现,Comsol^[120-125]、Atila^[126-128]等可以用 Floquet 周期性边界条件处理 Bloch 波,能通过相对较少的定制计算能带结构。由于有限元软件的普及性,一般用有限元法计算弹性波能带结构均通过这些软件进行^[129]。关键是通过整体矩阵的变换得到所需的新特征值问题。一般要对较多选定波矢逐一进行计算,但整个计算过程效率并不高,而且囿于利用现有软件,计算效率也很难提高。有限元法通用性好,适用于各种类型声子晶体^[120,124,130-135]以及有缺陷情况下^[121-123,125,129,136,137]的能带结构计算,而对于研究通过优化拓扑结构改变带隙范围等问题^[138,139],该方法也是上佳之选。

此外,一些其他用来计算声子晶体能带结构的方法也不时被提出,如集中质量法^[119,140]、微分求积法^[95]、小波法^[141,142]、变分法^[102,143]以及渐进匹配展开方法^[144]等均各有特点,只是尚未得到广泛应用。

1.3.2 带隙机理与特性

目前,常被提及的比较成熟的声子晶体带隙形成机理有两种,即 Bragg 散射机理和局域共振机理。一开始被研究的声子晶体所具有的带隙都是由 Bragg 散射机理产生的^[5,6,20,72-74,81,145,146]。若基体为流体,一般地,该声子晶体最低声波带隙的中心频率可由基体声速 c 和晶格常数 a 确定,即 $c/2a$ 。这种波长与晶格常数成两倍的关系与 Bragg 所发现的晶体中 X 射线衍射行为类似,因此将这类带隙的形成机理称为 Bragg 散射机理^[8]。该机理强调周期结构对波的影响。但是由该机理所产生带隙的最低频率范围与晶格常数有关,最低带隙频率对应的弹性波波长与晶格常数为同一数量级。若要产生频率越低的带隙就要构造尺寸越大的结构。这不利于声子晶体设备在低频范围的应用。局域共振机理的发现改变了这种局面^[21]。与 Bragg 散射机理明显不同,局域共振机理强调单个原胞的运动模式。通过适当