

УДК 534.2.

АКУСТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДВУМЕРНЫХ ФОНОННЫХ КРИСТАЛЛОВ С ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ СИММЕТРИЕЙ

© С.П. Никитенкова, А.И. Потапов

Нижегородский государственный технический университет, Нижний Новгород, Россия

***Аннотация.** В настоящей работе методом структурно-феноменологического моделирования выведены дифференциально-разностные уравнения, описывающие колебания двумерной гексагональной решетки материальных частиц в гармоническом приближении.*

***Ключевые слова:** композитные материалы, фононные кристаллы, акустические волны.*

Термин «фотонные кристаллы» появился в начале 90-х годов [1] для сред, в которых имеется периодическая система диэлектрических неоднородностей, приводящая к возникновению зон непропускания для световых или электромагнитных волн. Для композитных материалов, в которых имеется периодическая система акустических неоднородностей, по аналогии с названием фотонные кристаллы появился термин «фононные кристаллы» [2]. В настоящее время проводятся интенсивные исследования характеристик распространения акустических волн различных типов, как объёмных, так и поверхностных в искусственных двумерных и трехмерных композитных материалах [3,4].

1. Динамическая модель

Метод структурно-феноменологического моделирования, предполагает выделение в массиве материала некоторого минимального объема – структурной ячейки, – способной отображать основные черты макроскопического поведения материала [7-9]. Моделирование материала начинается с геометрического описания его структуры: определяется ячейка периодичности, вводятся её характерные размеры и кинематические переменные, описывающие текущее состояние ячейки. Далее моделируются силовые взаимодействия между частицами при их отклонениях от равновесного положения и выводятся уравнения движения. В качестве примера рассмотрим колебания гексагональной решетки (рис. 1), в узлах которой расположены однородные частицы массой m . В исходном состоянии центры масс частиц расположены в узлах решетки, и расстояние между ними равно a .

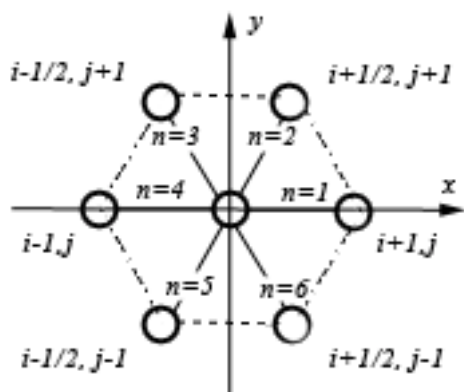


Рис.1. Структура элементарной ячейки решетки

Узлы решетки перенумерованы с помощью индексов $(i, j) = \vec{N}$. Каждая частица обладает двумя степенями свободы: смещениями центра масс $u_{ij}(t)$ и $w_{ij}(t)$ соответственно по осям x и y . Потенциальная энергия, приходящаяся на одну ячейку решетки, является функцией мгновенных положений её частиц. Она может быть представлена как сумма энергий попарных центральных взаимодействий между частицами решетки и зависящих только от расстояний между ними [6,7]. При структурном моделировании вместо полевого описания взаимодействия вводят эквивалентную силовую схему в виде системы стержней или пружин, осуществляющих передачу сил и моментов между элементами структуры [5,8]. Так как в рассматриваемой решетке все силы центральные, то для моделирования взаимодействия используется пружинная модель. Потенциальная энергия, приходящаяся на одну ячейку решетки, равна:

$$U_N = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^6 \frac{k}{2} D_n^2 \quad (1)$$

где D_n - изменение расстояний (длин пружин), между частицей, расположенной в центре конфигурационной сферы, и её соседями ($n = 1, \dots, 6$). В приближении малости смещений частиц выражения для D_n имеют вид

$$D_n = \cos\left((n-1)\frac{\pi}{3}\right)(u_{i+p, j+r} - u_{i, j}) + \sin\left((n-1)\frac{\pi}{3}\right)(w_{i+p, j+r} - w_{i, j}), \quad (2)$$

где $p=1, r=0$ (при $n=1$); $p=1/2, r=1$ (при $n=2$); $p=-1/2, r=1$ (при $n=3$); $p=-1, r=0$ (при $n=4$); $p=-1/2, r=-1$ (при $n=5$); $p=-1/2, r=1$ (при $n=6$). Так как рассматриваемая решетка является простой, то кинетическая энергия ячейки равна кинетической энергии её центральной частицы

$$T_N = \frac{m}{2} (\dot{u}_{i, j}^2 + \dot{w}_{i, j}^2) \quad (3)$$

Уравнения, описывающие динамику двумерной гексагональной решетки имеют вид

$$\ddot{u}_{i, j} + \frac{3k}{m} u_{i, j} + \frac{k}{m} \left[\sum_p \sum_r (-1)^{-2pr} p^2 \left(\sqrt{3} w_{i+p, j+r} - u_{i+p, j+r} \right) \right] = 0$$

$$\ddot{w}_{i,j} + \frac{3k}{m} w_{i,j} + \frac{\sqrt{3}k}{m} \left[\sum_p \sum_{r \neq 0} (-1)^{-2pr} p^2 (u_{i+p,j+r} - \sqrt{3}w_{i+p,j+r}) \right] = 0 \quad (4)$$

Исследуем некоторые свойства распространения упругих волн в такой периодической системе, не накладывая никаких ограничений на длины волн упругих колебаний. Длина волны может быть много большей, так и сравнимой с расстоянием между частицами, когда обычное континуальное приближение не работает.

2. Дисперсионные соотношения

В рассматриваемой структуре все частицы физически равноправны, поэтому возбуждение любой из частиц должно перераспределиться по всей структуре. Иными словами, всякое движение отдельной частицы будет стимулировать соответствующие движения соседних частиц; в результате по решетке побежит волна – типичное коллективное движение. Для рассмотрения коллективных движений, возникающих в кристалле как в упорядоченном коллективе перейдем к нормальным колебаниям [6,7]. Рассмотрим решения уравнений (5) представляющие собой плоские монохроматические волны, для которых смещение можно представить в виде.

$$u_{\alpha}(\vec{N}, t) = A_{\alpha} \exp[i(\omega(\vec{q})t - \vec{q}\vec{N})] \quad (5)$$

где $\omega = \omega(\vec{q})$ – частота волны, рассматриваемая как непрерывная функция волнового вектора $\vec{q} = (q_1, q_2)$, задающего направление распространения волны в декартовой системе координат (x, y) и её длину $\lambda = 2\pi/q$ ($q = |\vec{q}|$). Вектор $\vec{A} = \{A_{\alpha}\}$, определяет величины амплитуд смещения в волне вдоль осей координат. Вектор $\vec{N} = (i, j)$, нумерует узлы решетки. Произвольные коллективные движения могут быть представлены в виде суперпозиции монохроматических волн. Подстановка решения в (5) приводит к дисперсионному соотношению.

$$\left(k \cos\left(\frac{q_1 a}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}q_2 a}{2}\right) + 2k \cos q_1 a - 3k + m\omega^2 \right) \left(3k \cos\left(\frac{q_1 a}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}q_2 a}{2}\right) - 3k + m\omega^2 \right) - \left(\sqrt{3}k \sin\left(\frac{q_1 a}{2}\right) \sin\left(\frac{\sqrt{3}q_2 a}{2}\right) \right)^2 = 0. \quad (6)$$

Здесь компоненты волнового вектора представлены в полярной системе координат $\vec{q} = (q \cos \varphi, q \sin \varphi)$, q – модуль волнового вектора, φ – угол между направлением волнового вектора и осью x .

Дисперсионное уравнение (8) представляет собой биквадратное уравнение относительно частоты и с геометрической точки зрения описывает в трехмерном пространстве (ω, q_1, q_2) семейство двух поверхностей, периодичных по q_1 и q_2 . Каждой из поверхностей соответствует своя нормальная мода колебаний. Любому направлению волнового вектора соответствуют две независимые волны (нормальные моды) с взаимно перпендикулярными смещениями. По направлению смещения относительно волнового вектора колебания разделяют на продольные (ЛА, когда смещение параллельно \vec{q}) и поперечные (ТА, когда смещение перпендикулярно \vec{q}). Строго говоря, смещения частиц при колебаниях параллельны или перпендикулярны вектору \vec{q} только при распространении волны в направлениях симметрии.

В общем же случае волны не являются ни чисто продольными, ни чисто поперечными [6]. Скорость распространения продольных колебаний, как правило, больше чем поперечных, поэтому моду с большей фазовой скоростью в акустике твердого тела называют продольной, а с меньшей – поперечной. Ниже приводится анализ свойств нормальных мод вытекающих из решений дисперсионного уравнения (8).

3. Анализ дисперсионных свойств акустических фононов

По аналогии с физикой твердого тела, каждому нормальному колебанию решетки можно поставить в соответствие понятие фонона. Продольной моде соответствует продольный фонон, а поперечной моде – поперечный фонон [7]. Периодичность решетки приводит периодической зависимости частоты от волнового числа и возникновению понятия зон Бриллюэна [6,7]. На рис. 2–3 в качестве примера представлены карты равных частот и дисперсионные кривые вдоль направлений симметрии кристаллической структуры. Построения проводились для приведенных параметров решетки: $a = 1$, $m = 1$, $k = 1$. Изображенные на рис. 2 карты равных частот представляют собой плоские сечения трехмерных поверхностей $\omega_k(q_1, q_2) = const$, отдельно для продольных (рис. 2а) и отдельно для поперечных (рис. 2б) фононов. Пунктиром на рисунках выделена первая Бриллюэна, которая представляет собой равносторонний шестиугольник, повернутый на угол $\pi/6$ относительно ячейки прямой решетки (рис. 1). С ростом частоты линии уровня отклоняются от круговой и принимают форму шестиугольника, что свидетельствует об анизотропии акустических свойств кристаллической структуры. Существование замкнутых кривых с центрами, лежащими на границах зоны Бриллюэна, говорит о немонотонности дисперсионной зависимости.

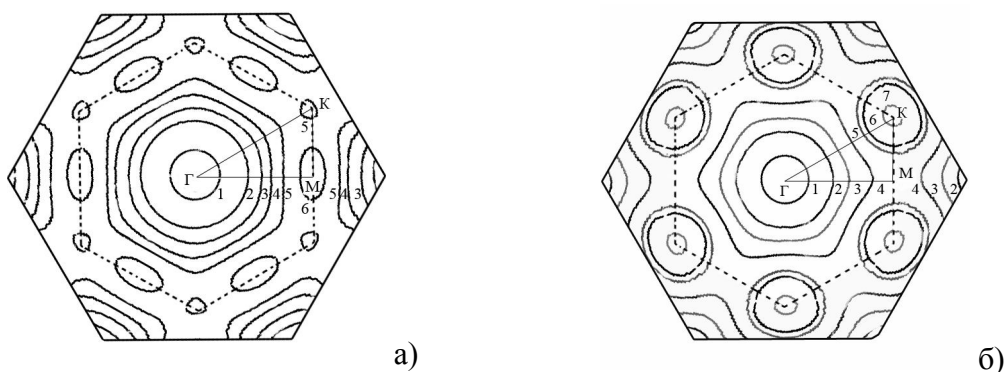


Рис.2. Карта равных частот для продольных (а) и поперечных (б) фононов.
1 – $\omega = 0,5$, 2 – $\omega = 0,7$ 3 – $\omega = 1$ 4 – $\omega = 1,3$, 5 – $\omega = 1,7$, 6 – $\omega = 2,0$, 7 – $\omega = 2,2$

На рис. 3 приведены дисперсионные кривые, рассчитанные вдоль направлений симметрии (Г–К и Г–М) и по границе зоны Бриллюэна (К–М) (см. рис.2). Угол φ указывает направление распространения плоской волны по отношению к оси x в прямой решетке (рис. 1).

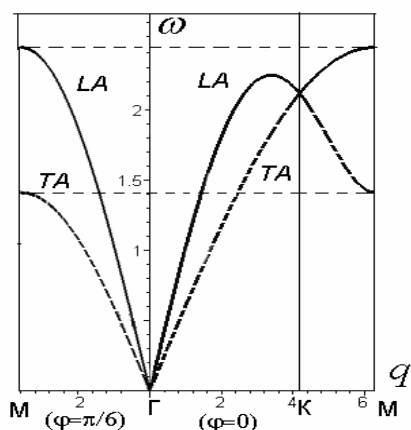


Рис. 3. Дисперсионные кривые продольных и поперечных фононов в решетке

Из рисунка видно, что в направлении Г–К частота продольных фононов имеет максимум в точке $q = 2(\pi - \arctg(3\sqrt{7}))/a$, а затем спадает вплоть до границы зоны Бриллюэна. Это приводит к тому, что на дисперсионной кривой имеется участок ($3.22 < q < 4.18$), где групповая скорость отрицательна $v_{gr} = d\omega/dq < 0$. Это так называемая область обратной волны. В периодических структурах обратные волны ассоциируются с явлением отрицательного преломления при условии выпуклости поверхности равных частот [4]. Обычно область отрицательной групповой скорости наблюдается для дисперсионных ветвей «оптических» фононов в решетках со сложной структурой, когда в ячейке периодичности находится более одной частицы. Здесь же подобная ситуация имеет место для акустических фононов в простой решетке, что ранее не отмечалось.

Чем ближе фазовые скорости продольных и поперечных фононов, тем в большей мере они связаны. При равенстве фазовых скоростей между фононами возникает резонанс и улучшаются условия рассеяния (или переизлучения) фононов одного типа на фононах другого типа. Волновой резонанс достигается там, где графики дисперсионных кривых (рис.3) имеют общую точку ($q_{res} = 4\pi/3a, \omega_{res} = \sqrt{9k/2m}$). Это же можно увидеть и из полярной диаграммы фазовых скоростей фононов (рис.4б). Анизотропия спектра фононов определяется анизотропией фазовых скоростей $v_{ph} = \omega/|\vec{q}|$, зависящих от угловой переменной φ и волнового вектора \vec{q} . На рис. 4 приведены угловые зависимости фазовых скоростей фононов при различных значениях длины волны.

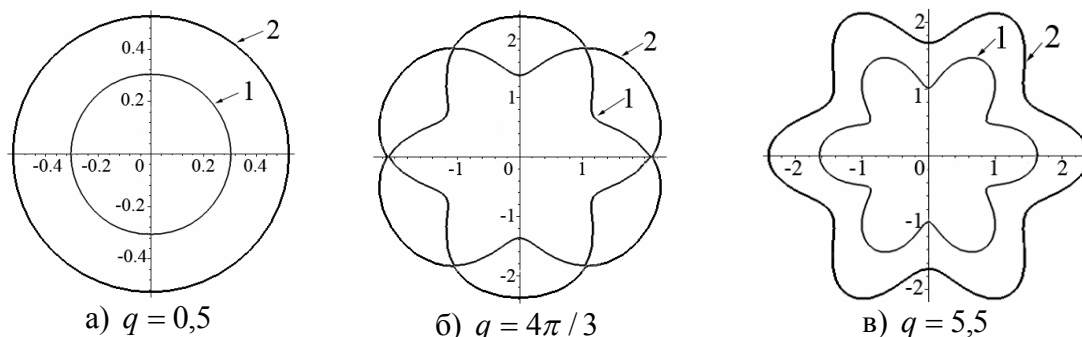


Рис.4. Угловые зависимости скоростей нормальных мод при различных длинах волн

Из приведенных графиков видно, что поведение фазовых скоростей и, соответственно, спектров фононов существенно отличаются от подобных характеристик для изотропных

сред. Так в области длинных волн фазовые скорости не зависят от угла и, следовательно, решетка ведет себя как изотропная среда. Этот факт хорошо известен в механике твердого деформируемого тела. Однако с уменьшением длины волны начинает проявляться зависимость фазовых скоростей от угла (рис.4б), т.е. начинают проявляться свойства анизотропии по отношению в коротковолновым фононам. При длинах волн сравнимых с расстоянием между частицами в решетке формируются так называемые «звуковые каналы» в которых скорость распространения фононов много больше скоростей распространения фононов в других направлениях (рис.4в). Эти результаты подтверждаются экспериментально по исследованиям теплопроводности кристаллических структур [3].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (проект № 07-02-00172).

Литература

1. Yablonovitch E., Gmitter T.J., Leung K.M. Photonic band structure: The face-centered cubic case employing nonspherical atoms // Phys. Rev. Lett., 1991, V. 67, P. 2295.
2. Kushwaha M.S., Halevi P., Martinez G., Dobrzynski L., Djafari-Rouhani B. Theory of band structure of periodic elastic composites // Phys.Rev. B, 1994 V. 49, P. 2313.
3. Богомолов В.Н., Парфеньева Л.С., Смирнов И.А., Мисиорек Х., Ежовский А. Прохождение фононов через фотонные кристаллы – среды с пространственной модуляцией акустических свойств // ФТТ, 2002, Т. 44. Вып.1.С. 175-179.
4. Qiu C., Zhang X., Liu Z., Far-field imaging of acoustic waves by a two-dimensional sonic crystal // Phys. Rev. B, 71, 2005, P. 054302-1.
5. Павлов И. С., Потапов А.И. Структурные модели в механике нанокристаллических сред // ДАН. 2008. Т.421, №3.С. 348-352.
6. Марадудин А. Монрол Э., ВейссДж. Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении. М.: Мир, 1965.
7. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела – М.: Наука, 1978. 792с.
8. Гольдштейн Р.В., Ченцов А.В. Дискретно-континуальная модель нанотрубки // Механика твердого тела, 2005, № 4, С. 57-74.

Поступила: 15.02.10.