

УДК 534.2

В. В. Румянцев, С. А. Федоров

**РАСПРОСТРАНЕНИЕ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЗБУЖДЕНИЙ
В НЕИДЕАЛЬНЫХ ЖК-СВЕРХРЕШЕТКАХ**

**PROPAGATION OF ACOUSTIC EXCITATIONS THROUGH NON-IDEAL
LC SUPERLATTICES**

Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина НАН Украины
83114 Донецк, Украина, ул. Р. Люксембург, 72
E-mail: rumyants@teor.fti.ac.donetsk.ua

В рамках приближения виртуального кристалла изучены особенности распространения акустических возбуждений через несовершенную 1D сверхрешетку. Зависимость ширины низшей запрещенной акустической зоны от концентрации примесных жидкокристаллических слоев в двух подрешетках численно оценена для продольных и поперечных возбуждений.

Ключевые слова: акустические возбуждения, несовершенная 1D сверхрешетка, ЖК-слой, запрещенная фотонная зона.

The peculiarities of propagation of acoustic excitations through a non-ideal 1D superlattice are studied within the virtual crystal approximation. The dependence of the lowest forbidden acoustic zone width of the described structure on concentration of impurity liquid crystal layers in two sublattices is numerically evaluated for longitudinal and transverse excitations.

Key words: acoustic excitations, non-ideal 1D superlattice, LC-layer, forbidden photon zone.

Изучение распространения упругих колебаний – один из распространенных методов исследования физических свойств материалов сегодня. Совершенствование техники эксперимента и развитие теоретических представлений расширяет диапазон частот указанных возбуждений. Часто акустические методы незаменимы в исследованиях структуры веществ. В настоящее время имеется значительное число работ [1 – 6], посвященных расчетам спектров электромагнитных и акустических возбуждений в сверхрешетках. Эти расчеты основываются на использовании метода Т-матрицы и решении системы уравнений для коэффициентов разложения соответствующих полей в ряд Фурье. При нахождении конкретных физических характеристик (например, коэффициентов прохождения электромагнитного излучения, зонного спектра) точный расчет в общем случае осуществить не представляется возможным, поэтому используются приближенные численные методы. Например, в работе [7] показано, что вблизи зоны Бриллюэна можно приближенно представить в аналитической форме зависимость соответствующих частот от блоховского волнового вектора. Развитый для идеальных

сверхрешеток подход [7] авторы применили при исследовании [5, 6] электромагнитных возмущений неидеальных 1D систем, содержащих инородные (дефектные) слои, распределенные случайным образом по всему объему сверхрешетки. Распространенным методом расчета нормальных мод в таких неупорядоченных средах является приближение виртуального кристалла (ПВК), которое заключается [8] в замене конфигурационно зависящих параметров гамильтониана задачи на конфигурационно усредненные их значения. Исследование оптических характеристик неидеальных сверхрешеток выполнено в работах [5, 6] с использованием именно этого приближения.

В настоящей работе указанный подход в рамках идеологии [3] перенесен на аналогичные расчеты при исследовании особенностей распространения акустических возмущений через несовершенный 1D фононный кристалл – систему отличающихся упругими характеристиками плоскопараллельных слоев, один из которых – жидкокристаллический (ЖК).

Упругие волны в 1D сверхрешетках

В общем случае неоднородной упругой среды, плотность $\rho(\vec{r})$ вещества и упругие модули $\hat{\Lambda}(\vec{r})$ которой являются функциями координат, поле $\vec{u}(\vec{r}, t)$ упругих смещений описывается системой уравнений [9, 10]:

$$\rho(\vec{r})\ddot{u}_i(\vec{r}, t) = \frac{\partial \Lambda_{iklm}(\vec{r})}{\partial x_k} \frac{\partial u_m(\vec{r}, t)}{\partial x_l} + \Lambda_{iklm}(\vec{r}) \frac{\partial^2 u_m(\vec{r}, t)}{\partial x_k \partial x_l}, \quad (1)$$

соответствующей плотности функции Лагранжа $\frac{1}{2}\rho(\vec{r})\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)^2 - \frac{1}{2}\Lambda_{iklm}(\vec{r})\frac{\partial u_k}{\partial x_i}\frac{\partial u_m}{\partial x_l}$ [10].

Из (1) следует, что если ограничить исследование случаем монохроматических упругих возмущений: $\vec{u}(\vec{r}, t) = \vec{u}(\vec{r})\exp(-i\omega t)$, то уравнение для амплитуд $\vec{u}(\vec{r})$ принимает следующий вид:

$$\hat{L}(\vec{r})\vec{u}(\vec{r}) = \omega^2\vec{u}(\vec{r}), \quad (2)$$

здесь $\hat{L}(\vec{r})$ – тензорный оператор:

$$[\hat{L}(\vec{r})]_{im} = -\frac{1}{\rho(\vec{r})} \left[\frac{\partial \Lambda_{iklm}(\vec{r})}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_l} + \Lambda_{iklm}(\vec{r}) \frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x_l} \right]. \quad (3)$$

Для трансляционно инвариантной системы с периодом $\vec{d}$ оператор $\hat{L}$, тензор $\hat{\Lambda}$ и плотность $\rho(\vec{r})$ – удовлетворяют соотношениям:

$$\hat{L}(\vec{r}) = \hat{L}(\vec{r} + \vec{d}), \quad \hat{\Lambda}(\vec{r}) = \hat{\Lambda}(\vec{r} + \vec{d}) \quad \text{и} \quad \rho(\vec{r}) = \rho(\vec{r} + \vec{d}), \quad (4)$$

поэтому справедливо разложение величин $\rho(\vec{r})$ и $\hat{\Lambda}(\vec{r})$ в ряд Фурье по векторам соответствующей обратной решетки:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} \rho(\vec{g}) \exp(i\vec{g} \cdot \vec{r}), \quad \Lambda_{iklm}(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} \Lambda_{iklm}(\vec{g}) \exp(i\vec{g} \cdot \vec{r}). \quad (5)$$

Поскольку выполняются условия (4), то решение уравнения (2) имеет блоховский вид:

$$\vec{u}_{\vec{K}}(\vec{r}) = \vec{U}_{\vec{K}}(\vec{r}) \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}) = \sum_{\vec{g}} U_{\vec{K}}(\vec{g}) \exp[i(\vec{K} + \vec{g}) \cdot \vec{r}]. \quad (6)$$

После несложных вычислений, используя (2), (5) и (6), получим следующую систему уравнений для амплитуд $\vec{U}_{\vec{K}}(\vec{g})$:

$$\omega^2 U_{\vec{K}}^i(\vec{g}) = \sum_{\vec{g}'} [B_{iklm}(\vec{g} - \vec{g}') (K^k + g'^k) (K^l + g'^l) - i A_{ilm}(\vec{g} - \vec{g}') (K^l + g'^l)] U_{\vec{K}}^m(\vec{g}'), \quad (7)$$

$A_{ilm}(\vec{g})$ и $B_{iklm}(\vec{g})$ – фурье-коэффициенты разложения функций $A_{ilm}(\vec{r}) = \frac{1}{\rho(\vec{r})} \frac{\partial \Lambda_{iklm}(\vec{r})}{\partial x_k}$ и

$B_{iklm}(\vec{r}) = \frac{1}{\rho(\vec{r})} \Lambda_{iklm}(\vec{r})$ в ряд Фурье.

Рассмотрим распространение упругой монохроматической волны с блоховским вектором $\vec{K} = (0, 0, K)$ в 1D фононном кристалле (ось z в одномерной сверхрешетке направлена вдоль нормали к слоям). Зависящие от единственной координаты z тензор $\hat{\Lambda}(z)$ модуля упругости и плотность $\rho(z)$ вещества сверхрешетки связаны с соответствующими слоевыми величинами следующим образом:

$$\rho(z) = \sum_{n,\alpha} \rho_{n\alpha} \theta_{n\alpha}(z), \quad \hat{\Lambda}(z) = \sum_{n,\alpha} \hat{\Lambda}_{n\alpha} \theta_{n\alpha}(z), \quad (8)$$

где

$$\theta_{n\alpha}(z) = \theta \left[z - (n-1)d - \left(\sum_{j=1}^{\alpha} a_{nj} - a_{n\alpha} \right) \right] - \theta \left[z - (n-1)d - \sum_{j=1}^{\alpha} a_{nj} \right]. \quad (9)$$

В (8), (9) n – номер элементарной ячейки 1D сверхрешетки, $\alpha = 1 \dots \sigma$ – номер элемента ячейки (слоя с толщиной $a_{n\alpha}$). Для идеальной (с периодом d) 1D решетки $\rho(z) = \rho(z+d)$, $a_{n\alpha} \equiv a_{\alpha}$, $\rho_{n\alpha} \equiv \rho_{\alpha}$ (аналогичные равенства выполняются и относительно тензора $\hat{\Lambda}$). В данном случае система уравнений (7) принимает вид:

$$\omega^2 U_K^i(g) = \sum_{g'} [B_{izzm}(g - g') (K + g')^2 - i A_{izm}(g - g') (K + g')] U_K^m(g'), \quad (10)$$

где $g = \frac{2\pi}{d} p$ ($p = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$). Легко показать, что для случая 1D сверхрешетки, с характеристиками слоев, удовлетворяющими условию (8), тензор $A_{izm}(\vec{g})$ обращается в нуль. Фурье-образ тензора $\hat{B}$, который получен с использованием выражения (9), имеет вид:

$$\hat{B}(p) = -\frac{i}{2\pi p} \sum_{\alpha} \frac{\hat{\Lambda}_{n\alpha}}{\rho_{n\alpha}} \left\{ \exp \left(i \frac{2\pi}{d} p \sum_{j=1}^{\alpha} a_j \right) - \exp \left[i \frac{2\pi}{d} p \left(\sum_{j=1}^{\alpha} a_j - a_{\alpha} \right) \right] \right\}. \quad (11)$$

Бесконечная система уравнений (10) определяет законы дисперсии $\omega = \omega(K)$ соответствующих акустических возбуждений. В общем случае (для произвольных K) система (10) решается с помощью приближенных численных методов (аналогично нахождению поляритонных возбуждений в диэлектрических сверхрешетках [1]). Тем не менее (как будет показано ниже), для значений K , близких к границе зоны Бриллюэна ($|K - \frac{2\pi}{d}| \approx K$), зависимость $\omega = \omega(K)$ можно записать в аналитической форме. Действительно, из (10) видно, что в этом случае наибольшими являются величины $U_K^i(g)$ для значений g при $p = 0, -1$, что соответствует выполнению условия

$\omega^2 \approx K^2 B_{\parallel, \perp}(0)$ (символы $\parallel, \perp$ означают компоненты тензора $\hat{B}$ соответственно $zzzz$ и $xzzx=yzzy$). Оставляя в системе (10) только слагаемые соответствующие резонансу указанных плоских волн ($p = 0, -1$), получаем следующий закон дисперсии акустических возбудений:

$$\omega_{\pm}^2 = K^2 [B_{\parallel, \perp}(0) \pm |B_{\parallel, \perp}(1)|] \quad (12)$$

Результаты и обсуждение

Рассмотрим акустические возбудения в несовершенном 1D фононном кристалле, составленном из слоев изотропного вещества и слоев одноосного ЖК. В отличие от идеальной сверхрешетки, исследуемая система содержит хаотически внедренные слоипримеси иного состава. Тензор $\hat{B}$ для изотропной среды $\hat{B}^{(1)}$ имеет следующую структуру [11]:

$$\hat{B}^{(1)} = \begin{pmatrix} b_{11}^{(1)} & b_{12}^{(1)} & b_{12}^{(1)} & 0 & 0 & 0 \\ b_{12}^{(1)} & b_{11}^{(1)} & b_{12}^{(1)} & 0 & 0 & 0 \\ b_{12}^{(1)} & b_{12}^{(1)} & b_{11}^{(1)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b_{44}^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & b_{44}^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b_{44}^{(1)} \end{pmatrix}, \quad (13)$$

а для ЖК-среды, симметрия которой описывается группой $C_{\infty v}$, тензор $\hat{B}$ имеет вид $\hat{B}^{(2)}$:

$$\hat{B}^{(2)} = \begin{pmatrix} b_{11}^{(1)} & b_{12}^{(1)} & b_{13}^{(1)} & 0 & 0 & 0 \\ b_{12}^{(1)} & b_{11}^{(1)} & b_{13}^{(1)} & 0 & 0 & 0 \\ b_{13}^{(1)} & b_{13}^{(1)} & b_{33}^{(1)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b_{44}^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & b_{44}^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b_{66}^{(1)} \end{pmatrix}, \quad (14)$$

причем $b_{44}^{(1)} = \frac{1}{2}(b_{11}^{(1)} - b_{12}^{(1)})$ и $b_{66}^{(1)} = \frac{1}{2}(b_{11}^{(1)} - b_{12}^{(1)})$. В матрицах () индексам 1, 2, 3 ставятся в соответствие следующие декартовы индексы: 1 $\rightarrow$ xx, 2 $\rightarrow$ yy, 3 $\rightarrow$ zz, 4 $\rightarrow$ yz, 6 $\rightarrow$ xy.

Простейшим приближением, позволяющим выявлять особенности и трансформацию спектров элементарных возбудений, обусловленные изменением концентрации дефектов в неидеальных кристаллах является ПВК. Применение этого приближения позволяет «восстановить» трансляционную симметрию системы и получить искомый спектр акустических возбудений. Для этого конфигурационно зависимый тензор $\hat{B}$ неидеальной сверхрешетки представим, используя случайные величины $\eta_{n\alpha}^v$, в виде:

$$\hat{B}_{n\alpha} \equiv \frac{\hat{\Lambda}_{n\alpha}}{\rho_{n\alpha}} = \sum_{v(\alpha)} \hat{B}_{\alpha}^{v(\alpha)} \eta_{n\alpha}^{v(\alpha)}, \quad (15)$$

причем $\eta_{n\alpha}^v = 1$, если в узле $(n\alpha)$ 1D кристалла находится слой $v(\alpha)$ -го сорта, $\eta_{n\alpha}^v = 0$ – в ином случае, $\hat{B}_{\alpha}^{v(\alpha)} \equiv \frac{\hat{\Lambda}_{\alpha}^{v(\alpha)}}{\rho_{\alpha}^{v(\alpha)}}$. После применения в соответствии с ПВК (аналогично квазичастичному подходу [6, 12]) процедуры конфигурационного усреднения (обозначенной угловыми скобками) из (15) следует, что:

$$\langle \hat{B}_{n\alpha} \rangle = \sum_{v(\alpha)} \hat{B}_{\alpha}^{v(\alpha)} C_{\alpha}^{v(\alpha)}, \quad (16)$$

здесь $C_{\alpha}^{v(\alpha)}$ – концентрация примесного слоя $v(\alpha)$ -го сорта в α -й подрешетке, $\sum_{v(\alpha)} C_{\alpha}^{v(\alpha)} = 1$. Замена $\hat{B}_{n\alpha} \rightarrow \langle \hat{B}_{n\alpha} \rangle$ в (11) позволяет использовать это выражение для нахождения спектра акустических возбуждений исследуемой несовершенной сверхрешетки, как функции концентрации инородных слоев.

Корни уравнения (12) $\omega_{\pm}$ определяют границы спектральной полосы: при частотах $\omega_{-}(K) < \omega < \omega_{+}(K)$ (запрещенная зона) корни комплексные, акустические волны – затухающие (брэгговское отражение), частоты $\omega < \omega_{-}$, $\omega > \omega_{+}$ соответствуют распространяющимся волнам. Важной для физических приложений является ширина запрещенной зоны $\Delta\omega = |\omega_{+} - \omega_{-}|$. В данном случае величина нижней запрещенной зоны, согласно (12), равна:

$$\Delta\omega = \omega \left| \sqrt{1 + B_{\parallel,\perp}(1)/B_{\parallel,\perp}(0)} - \sqrt{1 - B_{\parallel,\perp}(1)/B_{\parallel,\perp}(0)} \right|. \quad (17)$$

Величины $B_{\parallel,\perp}$ определяются количеством подрешеток, характеристиками материала такими, как упругие модули, плотность ρ вещества, и зависят от концентрации инородных (по отношению к идеальной сверхрешетке) слоев. Поэтому, концентрационное поведение запрещенной зоны $\Delta\omega$ может быть весьма разнообразным в зависимости от соответствующих параметров задачи.

Исследуем подробнее характер зависимости $\Delta\omega$ для случая разупорядоченного по составу двухподрешеточного 1D фононного кристалла: и первая и вторая подрешетки – слои стекла (с модулями Юнга соответственно $E_1^{(1)} = 70 \text{ ГПа}$, $E_2^{(1)} = 50 \text{ ГПа}$ и коэффициентами Пуассона: $\sigma_1^{(1)} = 0,2$, $\sigma_2^{(1)} = 0,3$). В качестве примесных используем ЖК слои с модулями Юнга $E_1^{(2)} = 0,001 \text{ ГПа}$, $E_2^{(2)} = 0,0005 \text{ ГПа}$ и коэффициентами Пуассона $\sigma_1^{(2)} = 0,48$, $\sigma_2^{(2)} = 0,49$. При этом толщина слоев первой подрешетки a_1 , второй – a_2 (в численных расчетах использовалась относительная толщина $a_1/d = 0,4$), концентрацию слоев-примесей в первой и второй подрешетках обозначим соответственно $C_1^{(2)}$ и $C_2^{(2)}$. Подробный расчет на основе соотношения (11) приводит к следующим выражениям:

$$B_{\beta}(0) = (b_{1,\beta}^{(1)} f_{1,\beta} a_1 + b_{2,\beta}^{(1)} f_{2,\beta} a_2) / d, \quad B_{\beta}(1) = \frac{1}{\pi} |b_{2,\beta}^{(1)} f_{2,\beta} - b_{1,\beta}^{(1)} f_{1,\beta}| \sin \pi a_1 / d, \quad (18)$$

где $f_{1,\beta} = 1 - C_1^{(2)}(1 - b_{1,\beta}^{(2)} / b_{1,\beta}^{(1)})$, $f_{2,\beta} = 1 - C_2^{(2)}(1 - b_{2,\beta}^{(2)} / b_{2,\beta}^{(1)})$, $b_{\alpha,\beta}^{(1,2)} = \Lambda_{\alpha,\beta}^{(1,2)} / \rho_{\alpha}^{(1,2)}$, $\alpha = 1, 2$, индекс β обозначает «||» – в случае продольных акустических возмущений, либо « $\perp$ » – в случае поперечных возмущений. Зависимость запрещенной зоны $\Delta\omega$ исследуемого двухподрешеточного 1D фононного кристалла от концентраций $C_1^{(2)}$, $C_2^{(2)}$ инородных слоев представлена на рис. 1 (поперечная мода) и рис. 2 (продольная мода). Анализ поведения поверхностей $\Delta\omega(C_1^{(2)}, C_2^{(2)})$ показывает, что при конкретных параметрах задачи и величинах концентрации примесных ЖК-слоев значения $\Delta\omega$ – существенно различны. Для определенных $C_1^{(2)}$, $C_2^{(2)}$ значения $\Delta\omega$ – велики, т. е. многослойная система является акустически слабопроницаемой, а для $C_1^{(2)}$, $C_2^{(2)}$, удовлетворяющих равенству

$$b_{2,\beta}^{(1)} f_{2,\beta}(C_1^{(2)}, C_2^{(2)}) = b_{1,\beta}^{(1)} f_{1,\beta}(C_1^{(2)}, C_2^{(2)}), \quad (19)$$

ширина щели $\Delta\omega$ (в рамках используемой модели) обращается в нуль.

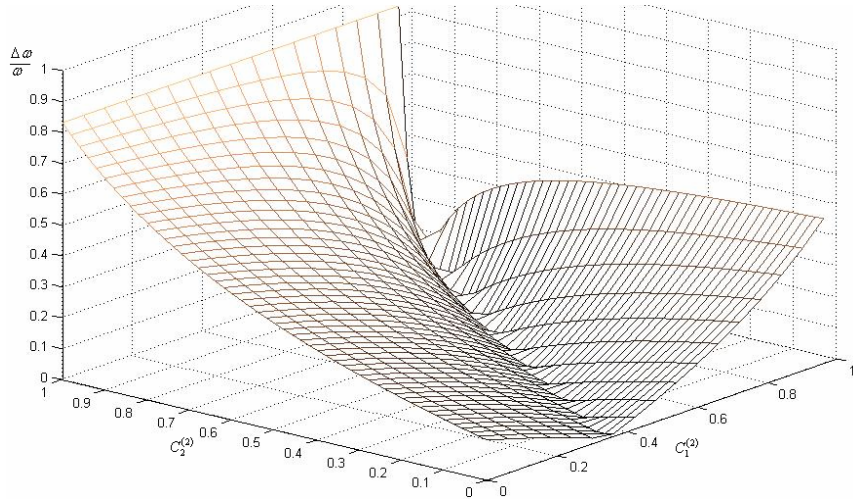


Рис. 1. Зависимость запрещенной зоны $\Delta\omega$ двухподрешеточного 1D фононного кристалла от концентраций $C_1^{(2)}$, $C_2^{(2)}$ инородных слоев (поперечная мода)

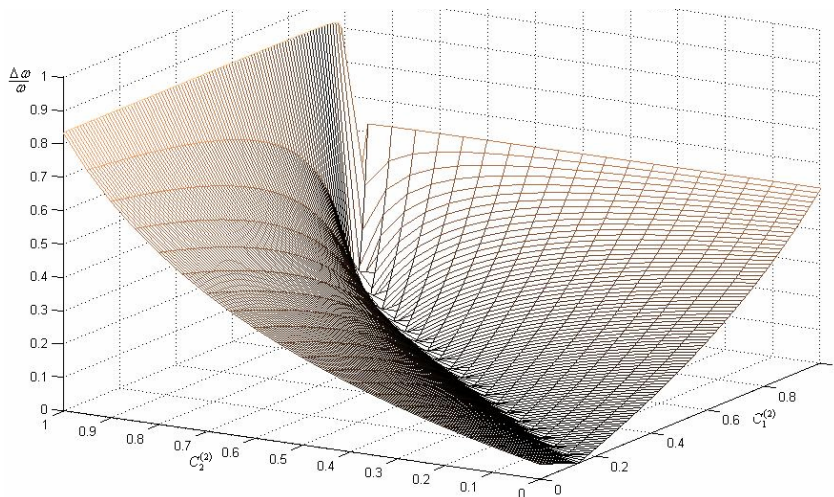


Рис. 2. Зависимость запрещенной зоны $\Delta\omega$ двухподрешеточного 1D фононного кристалла от концентраций $C_1^{(2)}$, $C_2^{(2)}$ инородных слоев (продольная мода)

Из соотношения (19) следует, что поскольку $(C_1^{(2)}, C_2^{(2)}) \in (0, 1)$, то акустические возбуждения определенной частоты проходят беспрепятственно ($\Delta\omega = 0$) лишь через многослойники с соответствующими характеристиками материала. Очевидно, что для одной и той же сверхрешетки не обязательно найдутся $C_1^{(2)}$ и $C_2^{(2)}$ такие, что поперечная и/или продольная моды удовлетворяют условию $\Delta\omega = 0$ для одной и той же частоты звуковой волны.

Заключение

Исследования в области акустики [13, 14] и совершенствование акустической техники направлены, как правило, на снижение уровня нежелательных звуков (борьбу с шумом), а также на поиск способов выделения полезных звуковых сигналов (например, для медицинской диагностики) или решения проблемы акустического обнаружения (эхолот), на то, как измерить некоторые другие физические свойства с помощью звука. В связи с этим создание новых акустических метаматериалов, позволяющих контролировать распространение звуковых волн в среде, весьма актуально. Выполненное в работе исследование зависимости ширины нижней запрещенной акустической зоны неидеальных 1D сверхрешеток от концентрации примесных слоев может оказаться полезным при конструировании акустических композитных материалов.

Список использованной литературы

1. Joannopoulos J. D., Johnson S. G., Winn J. N., Meade R. D. Photonic Crystals. Molding the Flow of Light. Second Edition. Princeton: Princeton University Press, 2008. 305 p.
2. Шабанов В. Ф., Ветров С. Я., Шабанов А. В. Оптика реальных фотонных кристаллов. Новосибирск: СО РАН, 2005. 240 с.
3. Косевич А. М. // Письма в ЖЭТФ. 2001. Т. 74. Вып. 11. С. 633 – 637.
4. Shu Zhang, Chunguang Xia, Nicholas Fang. // Phys. Rev. Let. 2011. Vol. 106. P. 024301.

5. *Rumyantsev V. V., Fedorov S. A., Shtaerman E. Ya.* // *Superlattices and Microstructures*. 2010. Vol. 47. № 1. P. 29 – 33.
6. *Rumyantsev V. V., Fedorov S. A., Gumennyk K. V.* // *Photonic Crystals: Optical Properties, Fabrication and Applications* / ed. L. William. Dahl, NY: Nova Science Publishers, Inc., 2011. P. 183 – 200.
7. *Ярич А., Юх П.* Оптические волны в кристаллах. М. : Мир, 1987. 616 с.
8. *Dargan T. G., Capaz R. B., Koiler Belita.* // *Brazilian J. of Phys.* 1997. Vol. 27/A. P. 299 – 304.
9. *Бреховских Л. М.* Волны в слоистых средах. М. : Наука, 1973. 343 с.
10. *Косевич А. М.* Физическая механика реальных кристаллов. Киев : Наукова думка, 1981. 328 с.
11. *Сиротин Ю. И., Шаскольская М. П.* Основы кристаллофизики. М. : Наука, 1975, 680 с.
12. *Займан Дж.* Модели беспорядка. М. : Мир, 1982. 592 с.
13. *Pendry J. B., Li Jensen.* // *New Journal of Physics*. 2008. Vol. 10, 11. P. 115032(1) – 115032(9).
14. *Zhang Shu, Xia Chunguang, Fang Nicholas.* // *Phys. Rev. Lett.* 2011. Vol. 106. P. 024301(1) – 024301(4).

Поступила в редакцию 14.03.2012 г.