

(Research Article)
**Analysis and Investigation of the Band Gap and Deaf Band in the
Two-Dimensional Boron Nitride Phononic Crystal**

Mina Noori*, Narges Mirzakhani Nafchi

Department of Electrical Engineering, Sahand University of Technology

Received: 2025/02/02, Accepted: 2025/10/15

Abstract:

In this paper, we investigate the band gap and deaf bands in a two-dimensional phononic crystal structure based on a boron nitride lattice. The results indicate that the band gap is highly dependent on the material properties, the contrast between the physical properties of the components and the substrate, and the structural geometry. We present a boron nitride structure with the following specifications: a lattice constant of 2.5 mm, radii of scatterers of $r_1 = 0.4$ mm and $r_2 = 0.2$ mm, along with the simulated band gap. For the structures under consideration, we examine the existence of deaf bands in the transmission spectrum along the ΓM direction. The mechanical wave output from the structure undergoes modifications compared to the input wave, influenced by the geometry and materials used. These modifications can yield useful information regarding material concentration and the acoustic properties of the compounds, aiding material identification. We investigate the energy band diagram and transmission spectrum for two material systems: a solid-fluid structure (water and steel) and a fluid-fluid structure (water and mercury). Simulations were performed using COMSOL Multiphysics software implements the finite element method. This study demonstrates that the transmission spectrum provides more precise information than the band structure regarding mechanical wave transmission through the structure, as deaf bands identified in the band structure correspond to zero transmission.

Keywords: Phononic crystal, Boron nitride, Fluid-fluid structure, Solid-fluid structure, Deaf band.

pp. 68-76 (In Persian)

* Corresponding author E-mail: Noori@sut.ac.ir

تحلیل و بررسی باند ممنوعه و باند کر در ساختار بلور فونونی دو-بعدی نیتريد بور

مینا نوری^{*}، نرگس میزراخانی نافچی

دانشکده مهندسی برق، دانشگاه صنعتی سهند

دریافت: ۱۴۰۳/۱۱/۱۴، پذیرش: ۱۴۰۴/۰۷/۲۳

چکیده

در این مقاله، باند ممنوعه و باند کر در ساختار بلور فونونی دو-بعدی شبکه نیتريد بور مورد بررسی و ارزیابی قرار گرفته است. نتایج حاصل بیانگر این است که پهنای باند ممنوعه به شدت به ماهیت مواد و تضاد بین ویژگی‌های فیزیکی اجزاء و زیرلایه و نیز هندسه ساختار وابسته است. ساختار نیتريد بور با مشخصات $a_1 = 2.5$ میلی‌متر، شعاع پراکنده‌کننده‌های $r_1 = 0.4a_1$ و $r_2 = 0.2a_1$ و ثابت شبکه $a = \sqrt{3}a_1$ شبیه‌سازی و باند ممنوعه پدیدآمده، نشان داده شده است. برای ساختارهای موردنظر، وجود باند کر در طیف انتقال در راستای ΓM مورد بررسی قرار گرفته است. موج مکانیکی خروجی از ساختار دچار تغییراتی نسبت به موج ورودی می‌شود که متأثر از هندسه و مواد به کار رفته است و می‌تواند اطلاعات مفیدی از غلظت مواد و خواص صوتی ترکیبات بکار رفته را ارائه دهد. این امر در شناسایی مواد مفید است. نمودار باند انرژی و نمودار طیف انتقال، با در نظر گرفتن دو ماده آب و فولاد (استیل) برای ساختار جامد-سیال و نیز آب و جیوه برای ساختار سیال-سیال بررسی شد. شبیه‌سازی‌ها با استفاده از نرم‌افزار کامسول و روش المان محدود انجام شد. در این مطالعه نشان داده شده است که طیف انتقال، اطلاعات دقیق‌تری نسبت به ساختار باند از وضعیت عبور موج مکانیکی از ساختار ارائه می‌دهد، زیرا باندهای کر شناسایی شده در ساختار باند، مربوط به انتقال صفر هستند.

کلیدواژه‌ها: بلور فونونی، شبکه نیتريد بور، ساختار سیال-سیال، ساختار جامد-سیال، باند کر.

۱. مقدمه

بلورهای فونونی، مواد مهندسی‌شده با آرایش متناوب اجزاء تشکیل دهنده، به دلیل داشتن توانایی در کنترل انتشار امواج صدا توجه زیادی را به خود جلب کرده‌اند [۱].

کوشوها و همکارانش برای اولین بار در سال ۱۹۹۳، مفهوم بلور فونونی را پیشنهاد کردند [۲].

بلورهای فونونی بر اساس ماهیت فیزیکی مواد تشکیل دهنده در ماتریس و پراکنده‌کننده‌ها به ساختارهای جامد-جامد، جامد-سیال و سیال-سیال تقسیم می‌شوند که می‌توانند شکاف‌های باند مطلق از خود نشان دهند [۳].

نحوه انتشار امواج به ماهیت مواد بستگی دارد. به عنوان مثال فقط حالت‌های طولی در کامپوزیت‌های سیال-سیال مجاز به انتشار هستند. پهنای باند ممنوعه به شدت به ماهیت مواد تشکیل دهنده (جامد یا سیال)،

تضاد بین ویژگی‌های فیزیکی (چگالی و مدول الاستیک) اجزاء و ماتریس، هندسه ساختار و ضریب پراشندگی وابسته است [۴].

تضاد بالا در چگالی، جرم و سرعت صوتی^۱ شرط اساسی برای تشکیل شکاف باند فونونی است. هرچه این اختلاف بیش‌تر باشد، شکاف باند پهن‌تر خواهد بود. برای بهبود عملکرد، باید مواد با امپدانس صوتی بسیار متفاوت ترکیب شوند. تاکنون، بلورهای فونونی با شبکه نیتريد بور^۲ تنها برای ترکیبات مواد و شبه‌سنگ‌های هندسی خاص توسط برخی محققین بررسی شده است [۵].

شبکه نیتريد بور شش ضلعی، نقش مهمی در کاوش الکترونیکی دو-بعدی، فوتونیک، مکانیک و مهندسی کوانتومی دارد [۶].

از جمله کاربردهای بلور فونونی می‌توان به استفاده از آن در طراحی و ساخت دستگاه‌های صوتی پیشرفته، مانند

³ Parameter

^{*} نویسنده پاسخگو: Noori@sut.ac.ir

¹ Acoustic

² BN; Boron Nitride

مربوطه به صورت عددی در بسامدهای نمونه محاسبه شده‌اند.

در نهایت ثابت شده است که طیف انتقال سازه، نتایج دقیق تری را برای انتشار یا ممانعت از عبور امواج مکانیکی در بلورهای فونونی در مقایسه با نمودار پراکندگی ارائه می‌دهد.

۲. مواد و روش‌ها

شبکه نیتريد بور به دلیل خواص منحصر به فرد خود، مورد توجه بسیاری از زمینه‌های علوم از جمله فونونیک و مهندسی مواد قرار گرفته است. این بلور فونونی دارای خواص مکانیکی و حرارتی منحصر به فردی است که می‌تواند در طراحی دستگاه‌ها و حسگرهای صدا مفید باشد. ساختار شبکه بلور نیتريد بور بسیار شبیه به ساختار بلور لانه زنبوری است. با این تفاوت که در ساختار لانه زنبوری هر دو پراکنده‌کننده موجود در سلول واحد از یک جنس و با شعاع یکسان هستند، در حالی که در شبکه نیتريد بور این دو پراکنده‌کننده مثل هم نبوده و در اندازه و جنس مواد متفاوت هستند. به عبارتی ساختار بلور فونونی لانه زنبوری حالت خاصی از شبکه نیتريد بور است که در آن اندازه و جنس پراکنده‌کننده‌ها دقیقاً عین هم هستند. بنابراین، مزیت ساختار نیتريد بور این است که درجه آزادی بیش‌تری نسبت به ساختار بلور فونونی لانه زنبوری در اختیار طراح قرار می‌دهد.

همانطور که اشاره شد، بلور فونونی دو-بعدی نیتريد بور ساختاری است که در آن میله‌های الاستیک با ارتفاع نامتناهی با شعاع‌های مختلف r_1 و r_2 ، بر روی رئوس یک شش‌ضلعی منظم قرار گرفته‌اند و توسط یک بستر الاستیک احاطه شده‌اند.

سلول واحد ساختار نیتريد بور، شامل دو نوع میله (با مواد متفاوت یا هندسه متفاوت) موازی، با ارتفاع بی-نهایت است. فرض می‌شود که استوانه‌ها موازی با محور z و عمود بر صفحه عرضی (XOY) هستند. در ساختار مورد نظر در این مقاله، شعاع میله‌ها $r_1 = 0.4a_1$ و $r_2 = 0.2a_1$ و از یک نوع ماده هستند.

صافی‌ها [۷]، موج‌برها [۳]، حسگرها [۸]، کاربردهای مخابراتی [۹]، برداشت انرژی [۱۰] و پردازش علامت^۲ روی تراشه اشاره کرد. همچنین، دستیابی به انکسار منفی [۱۱]، خودجمع‌کنندگی [۱۲]، اثر ابر منشوری [۱۳] و پوشش صوتی [۱۴] نیز از سایر کاربردهای بلورهای فونونی است.

تاکنون، بلورهای فونونی با شبکه نیتريد بور به صورت محدود مورد بررسی قرار گرفته و ویژگی‌های جالبی در مقایسه با سایر الگوهای بلوری کشف شده است [۵]، که شامل ارتباط و پردازش علامت [۳]، جداسازی صدا و هدایت موج صدا است [۱۵].

در مرجع [۱۶]، مهندسی شکاف نواری در شبکه نیتريد بور مورد بررسی قرار گرفته است. همچنین، وجود هم‌زمان شکاف‌های باند فوتونی و فونونی در یک آرایه تناوبی از سوراخ‌های حفرشده در یک غشا با شبکه نیتريد بور با دو اتم در سلول واحد در مرجع [۱۷]، نشان داده شده است.

به علاوه، با طراحی و ساخت یک ساختار بلوری فونونی با شبکه نیتريد بور، توانایی کنترل انتشار و پراکندگی امواج صدا با دقت بالا نشان داده شده است [۱۸].

خصوصیات ساختار باند، خواص انتقال و قابلیت‌های دستکاری موج در بلور فونونی با آرایه نیتريد بور از طریق شبیه‌سازی‌های عددی، تجزیه و تحلیل شده و اولین نمایش تجربی از موج‌برهای فونونی نانومقیاس بر اساس یک ماده کریستالی لایه‌ای دو-بعدی نیتريد بور در مرجع [۶] نشان داده شده است.

در این مقاله، ساختار بلور فونونی با شبکه نیتريد بور از طریق شبیه‌سازی‌های عددی روش المان محدود به ازای پیکربندی‌های جامد-سیال (متشکل از استیل و آب) و سیال-سیال (متشکل از جیوه و آب) مورد بررسی قرار گرفته است. نقشه‌های شکاف باند، ساختار باند و طیف‌های انتقال با درجه بالایی از سازگاری محاسبه شده‌اند.

همچنین، باندهای گر، توسط طیف‌های انتقال شناسایی و تحلیل شده و بسته به نوع ساختار، توزیع‌های میدان

² Signal

¹ Filter

$$a_1 = \frac{a\sqrt{3}}{2} (1, \sqrt{3}) \quad , \quad a_2 = \frac{a\sqrt{3}}{2} (-1, \sqrt{3}) \quad (1)$$

$$b_1 = \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} \left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}\right) \quad , \quad b_2 = \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} \left(-1, \frac{1}{\sqrt{3}}\right) \quad (2)$$

که بردار شبکه وارون بصورت رابطه‌ی (۳) با G نمایش داده می‌شود.

$$G = h_x b_1 + h_y b_2 = \frac{2\pi}{a\sqrt{3}} \left[(h_x - h_y) e_x + \frac{1}{\sqrt{3}} (h_x + h_y) e_y \right] \quad (3)$$

که h_x و h_y دو عدد صحیح هستند.

در این پژوهش، برای ساختار سیال-سیال از ترکیب آب و جیوه استفاده شده است. آب به عنوان یک ماده منحصر به فرد و دارای فاکتور میرایی بالایی است. عنصر جیوه هم به دلیل داشتن اختلاف زیاد در ضرایب صوتی و الاستیکی نسبت به آب، در این ساختار مورد استفاده قرار گرفته است. این دو ماده برای ایجاد شکاف باند پهن مناسب هستند. مشخصات فیزیکی دو ماده در جدول ۱ آمده است.

جدول ۱ مشخصات فیزیکی آب و جیوه.

جیوه	آب	ماده
۱۳۵۳۴	۱۰۰۰	چگالی (کیلوگرم بر مترمکعب)
۱۴۵۰	۱۴۸۰	سرعت صدا (متر بر ثانیه)

در ساختار جامد-سیال شبکه بلور فونونی نیتريد بور از دو ماده آب و استیل استفاده شده است. استیل آلیاژی از آهن و کربن است و در مقایسه با سایر اشکال آهن، استحکام و مقاومت بالایی در برابر شکست دارد. جدول ۲، خواص الاستیکی و صوتی استیل و آب را بیان می‌کند.

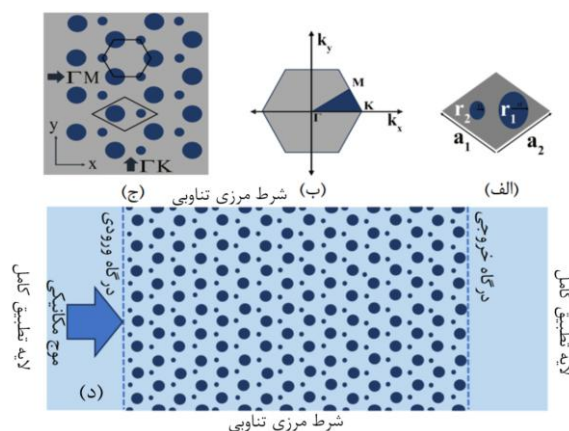
جدول ۲ خواص الاستیکی و صوتی آب و استیل.

آب	استیل	ماده
۱۰۰۰	۷۸۵۰	چگالی (کیلوگرم بر مترمکعب)
-	۲۱۵	مدول یانگ (پاسکال)
۱۴۸۰	۵۹۴۰	سرعت صدا (متر بر ثانیه)
-	۰٫۳	نسبت پواسون

شکل ۱ (الف) و (ب) به ترتیب ساختار سلول واحد و بردارهای پایه اولیه a_1 و a_2 را به‌ازای شعاع‌های r_1 و r_2 و ناحیه بریلوین را نشان می‌دهد. شکل ۱ (ج) و (د) نیز به ترتیب راستای بردار موج برای محاسبه ساختار باند در لبه‌های اولین ناحیه بریلوین برابر $\Gamma K M \Gamma$ و چینش ساختار برای محاسبه طیف انتقال را نشان می‌دهد.

در این مطالعه، منبع تحریک ورودی به صورت عمود بر ساختار اعمال می‌شود. برای تحلیل و محاسبه طیف عبوری ساختار از لایه تطبیق کامل^۱ و شرایط مرزی تناوبی^۲ طبق شکل ۱ (د) استفاده شده است. در شکل ۱ (ج)، راستاهای ΓK و ΓM به‌ترتیب جهت‌های برخورد موج صوتی در فضای واقعی را نشان می‌دهند.

فاصله بین نزدیک‌ترین استوانه‌ها برابر با a_1 است و هر سلول واحد شامل دو استوانه از هر نوع است. ثابت شبکه ساختار نیتريد بور با a نشان داده می‌شود که مقداری برابر با $a = \sqrt{3}a_1$ دارد به‌طوری‌که a_1 ثابت شبکه ساختار شش ضلعی هست.



شکل ۱ (الف) طرح‌واره‌ای از شبکه نیتريد بور و سلول واحد آن، (ب) ناحیه بریلوین و ناحیه بریلوین تقلیل‌ناپذیر، (ج) جهت‌های موج ورودی و (د) طرح‌واره‌ای از ساختار نیتريد بور برای محاسبه طیف انتقال در جهت ΓM .

بردارهای a_1 و a_2 بردارهای اولیه‌ی شبکه در فضای واقعی و بردارهای b_1 و b_2 به‌عنوان بردارهای اولیه شبکه در فضای وارون هستند که به ترتیب با روابط (۱) و (۲) بیان می‌شوند.

³ Schematic

¹ PML; Perfectly Matched Layer

² PBC; Periodic Boundary Condition

۳. نتایج

۳-۱. بلور فونونی نیتريد بور سیال-سیال

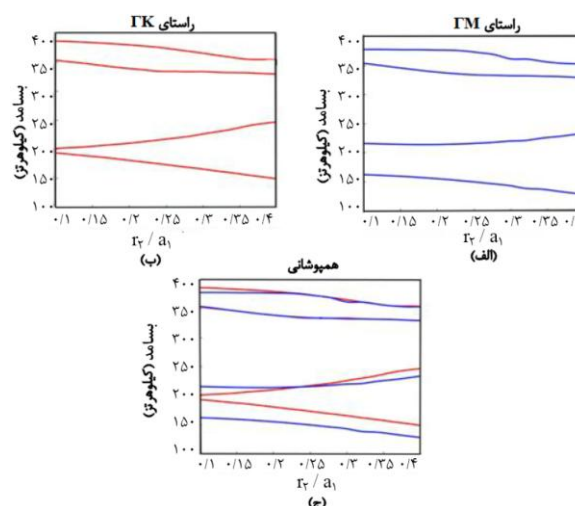
همانطور که ذکر شد، برای ساختار سیال-سیال ترکیب دو ماده آب و جیوه در نظر گرفته شده است.

در این بخش ابتدا ساختاری متشکل از پراکنده کننده های جیوه در ماتریس آب مورد بررسی قرار می گیرد و در ادامه، با تعویض و جابجایی مواد پراکنده کننده ها و ماتریس (آب در ماتریس جیوه) نتایج بدست آمده، بیان می شوند.

۳-۱-۱. بلور فونونی نیتريد بور متشکل از جیوه در بستر آب

در ابتدا، برای ساختار توصیف شده، شعاع $r_1 = 0.4a_1$ در نظر گرفته شده و شعاع r_2 از $0.1a_1$ تا $0.4a_1$ با گام های $0.05a_1$ جاروب و نقشه شکاف باند محاسبه شده است. شکل ۲، نواحی شکاف باند برای دو راستای ΓM و ΓK برای میله های پر شده از جیوه در بستر آب را نشان می دهد.

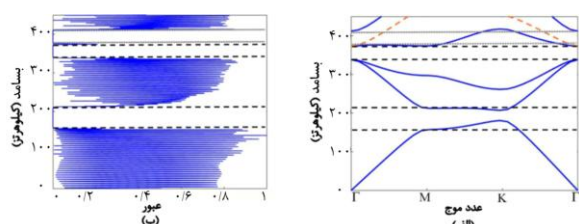
برای ساختار متشکل از میله های جیوه ای در بستر آب، شکاف باند کامل در بازه بسامدی $190-198.8$ کیلوهرتز به ازای تمامی شعاع های اختصاص داده شده به میله دوم (r_2) به وجود آمده است.



شکل ۲ نقشه شکاف باند برای میله های جیوه ای در بستر آب به ازای تغییرات شعاع r_2 در (الف) راستای ΓM ، (ب) راستای ΓK و (ج) همپوشانی شکاف ها در دو جهت.

مطابق با شکل ۲، در حالتی که میله های جیوه ای در بستر آب در شبکه نیتريد بور قرار گرفته اند، اندازه شکاف باند اول با افزایش شعاع r_2 بزرگ تر شده است که بیانگر تضاد بیش تر و مدوله سازی^۱ قوی از توزیع مکانی ضرایب الاستیکی در ساختار مورد نظر است. نمودار ساختار باند و طیف انتقال برای ساختار مورد مطالعه به ازای $r_1 = 0.4a_1$ و $r_2 = 0.2a_1$ ، مطابق شکل ۳، بدست آمده است.

در شکل ۳، نواحی مشخص شده با خط چین و نقطه چین بیانگر بازه شکاف باند و باند کر هستند که میزان عبور برابر صفر شده است. مطابق با شکل ۳، برای ساختار متشکل از میله های جیوه ای در بستر آب، شکاف باند اول و دوم به ترتیب در بازه بسامدی $212.6-157.5$ کیلوهرتز و $376-339$ کیلوهرتز ظاهر شده است.



شکل ۳ (الف) نمودار ساختار باند شبکه بلور فونونی نیتريد بور برای پراکنده کننده های جیوه در بستر آب به ازای $r_1 = 0.4a_1$ و $r_2 = 0.2a_1$ و (ب) طیف انتقال متناظر در راستای ΓM .

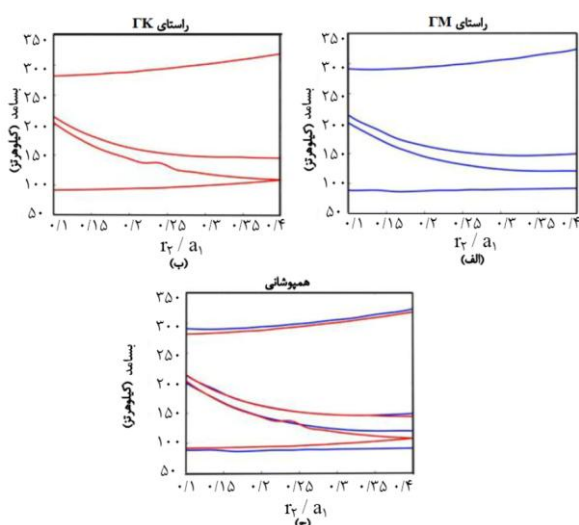
در بازه بسامدی $377-411$ کیلوهرتز، باند کر (باند پنجم) در راستای ΓM مشاهده شده است. در این بازه بسامدی در نمودار ساختار باند، باند مجاز بدست آمده است، اما در طیف انتقال میزان عبور در بازه بسامدی متناظر صفر است. علت عدم عبور موج مکانیکی در باند فوق، عدم امکان تحریک باند اشاره شده، به دلیل تقارن ساختار است.

شکل ۴، الگو^۲ میدان را در بسامدهای نمونه عبوری (323.14 کیلوهرتز) و باند کر (376.08 کیلوهرتز) نشان می دهد. مطابق با شکل ۴، الگوی میدان برای باند کر در راستای انتشار دارای عدم تقارن است که موجب عدم تحریک میدان شده و بعد از طی مسافت کوتاه میزان توان انتقالی در داخل ساختار به صفر می رسد.

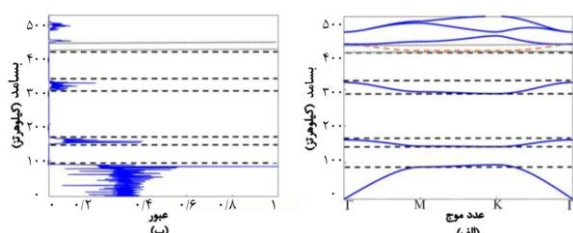
² Profile

¹ Modulation

اشاره شده متوقف شده است. در این باند امواج ارتعاشی نمی‌توانند برانگیخته شوند. ذکر این نکته ضروری است که میزان اتلاف با افزایش بسامد، افزایش می‌یابد و این خود دلیلی بر کاهش دامنه طیف در بسامدهای بالا است. شکل ۷، الگوی میدان را در بسامدهای نمونه مشخص شده با حروف C و D که به ترتیب معادل باندهای عبوری (۶۰/۴۳ کیلوهرتز) و باند کر (۴۱۰/۰۴ کیلوهرتز) هستند، نشان می‌دهد.

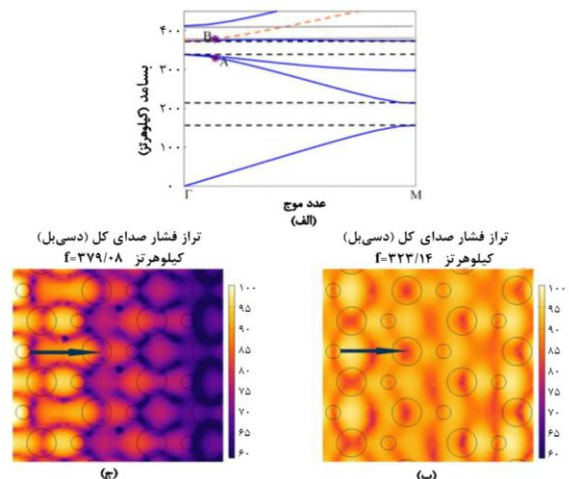


شکل ۵ نقشه شکاف باند برای میله‌های آبی در بستر جیوه به‌ازای تغییرات شعاع r_2 در (الف) راستای GM، (ب) راستای GK و (ج) همپوشانی شکاف‌ها در دو جهت.



شکل ۶ (الف) نمودار ساختار باند شبکه بلور فونونی نیتريد بور برای پراکنده‌کننده‌های آب در بستر جیوه به‌ازای $r_1 = 0.4a_1$ و $r_2 = 0.2a_1$ (ب) طیف انتقال متناظر در راستای GM.

مطابق با شکل ۷، در باند کر عدم تقارن در بالا و پایین پیکان، در ساختار مشاهده می‌شود که موجب عدم تحریک موج مکانیکی شده و میزان عبور صفر را نتیجه می‌دهد.



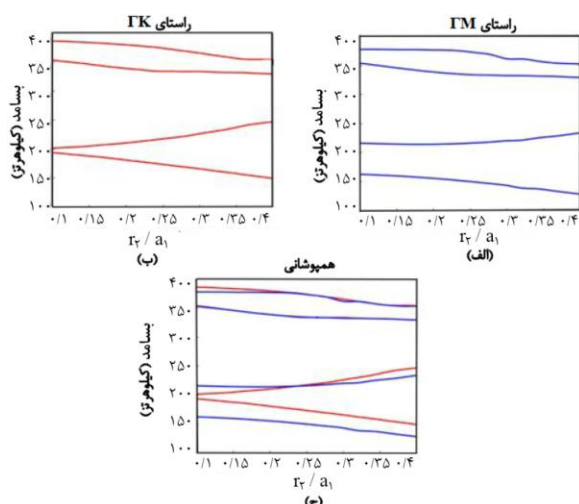
شکل ۴ (الف) ساختار باند در راستای GM، به همراه الگوی میدان در بسامدهای نمونه نشان داده شده با حروف A و B. (ج) B.

۳-۲. بلور فونونی نیتريد بور متشکل از آب در بستر جیوه در گام بعدی، با جابجایی ماده بستر و میله‌ها یعنی برای ساختار متشکل از میله‌های آبی در بستر جیوه، نقشه شکاف باند به‌ازای شعاع $r_1 = 0.4a_1$ و تغییرات r_2 از $0.1a_1$ تا $0.4a_1$ با گام‌های $0.05a_1$ محاسبه شده است. شکل ۵، نواحی شکاف باند برای دو راستای GK و GM را برای میله‌های پر شده از آب در بستر جیوه را نشان می‌دهد. مطابق با شکل ۵، اندازه شکاف باند اول با افزایش شعاع r_2 در هر دو راستا کاهش می‌یابد که کاملاً برعکس ساختار قبلی (شکل ۲) است.

نتایج حاصل بیانگر این نکته است که با افزایش سهم ماده آب/جیوه در ساختار سیال-سیال (متشکل از آب و جیوه)، اندازه شکاف باند اول کاهش/افزایش می‌یابد. نمودار ساختار باند و طیف انتقال برای ساختار شبکه نیتريد بور متشکل از میله‌های آبی در بستر جیوه به‌ازای $r_1 = 0.4a_1$ و $r_2 = 0.2a_1$ مطابق شکل ۶، حاصل شد. که در آن، نواحی مشخص شده با خط چین و نقطه چین بیانگر بازه شکاف باند و باند کر هستند که میزان عبور برابر صفر شده است.

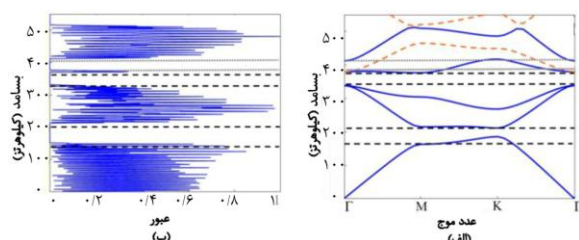
مطابق با شکل ۶، برای شبکه نیتريد بور متشکل از میله‌های آبی در بستر جیوه، شکاف باند اول و دوم به ترتیب در بازه بسامدی ۸۹-۱۴۵ کیلوهرتز و ۲۹۲-۱۶۹ کیلوهرتز ظاهر شده است.

هم‌چنین باند چهارم، در بازه بسامدی ۴۰۵-۴۲۵ کیلوهرتز معادل باند کر بوده و انتقال در بازه بسامدی



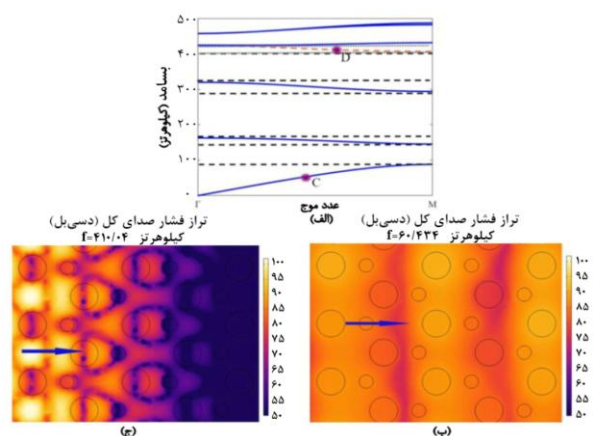
شکل ۸ نقشه شکاف باند برای میله‌های استیل در بستر آب به‌ازای تغییرات شعاع r_2 در (الف) راستای FM، (ب) راستای GK و (ج) همپوشانی شکاف‌ها در دو جهت.

نمودار ساختار باند و طیف انتقال برای ساختار شبکه نیتريد بور متشکل از میله‌های استیل در بستر آب به‌ازای $r_1 = 0.4a_1$ و $r_2 = 0.2a_1$ مطابق شکل ۹، بدست آمده است که در آن، نواحی مشخص‌شده با خط چین و نقطه چین بیانگر بازه شکاف باند و باند کر هستند.



شکل ۹ نمودار ساختار باند شبکه بلور فونونی نیتريد بور برای پراکنده‌کننده‌های استیل در بستر آب به‌ازای $r_1 = 0.4a_1$ و $r_2 = 0.2a_1$ و (ب) طیف انتقال متناظر در راستای FM.

برای ساختار نمونه متشکل از میله‌های استیل در بستر آب، شکاف باند اول و دوم به ترتیب در بازه بسامدی ۱۶۲-۲۱۵ کیلوهرتز و ۳۳۷-۳۸۰ کیلوهرتز ظاهر شده است. در باند پنجم در بازه بسامدهای ۳۸۱-۴۱۱ کیلوهرتز باند کر در راستای FM مشاهده می‌شود که این بازه بسامدی در نمودار ساختار باند، شامل باند مجاز است، اما در طیف انتقال میزان عبور برابر صفر است.



شکل ۱۰ (الف) ساختار باند در راستای FM، به همراه الگوی میدان در بسامدهای نمونه نشان داده شده با حروف C و D. (ج) و (د) الگوی میدان در بسامدهای نمونه نشان داده شده با حروف C و D.

۳-۲. بلور فونونی نیتريد بور جامد-سیال

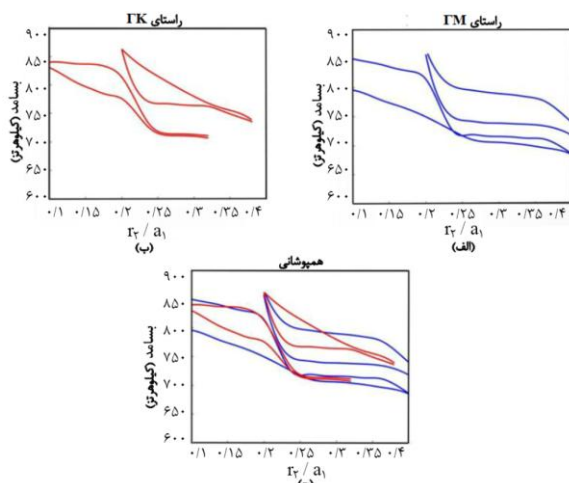
در این بخش، ابتدا ساختار شبکه نیتريد بور متشکل از میله‌های استیل در بستر آب و سپس حالت بالعکس (حفره‌های پر شده از آب در بستر استیل) در نظر گرفته شده است. در این بخش نیز مشابه با بخش قبل، برای ساختارهای موردنظر شعاع $r_1 = 0.4a_1$ در نظر گرفته شده است و شعاع r_2 از $0.1a_1$ تا $0.4a_1$ با گام‌های $0.05a_1$ جاروب و نقشه شکاف باند محاسبه شده است.

هم‌چنین، در مرز جامد - سیال، از شرط مرزی عدم-لغزش^۱ استفاده شده است، که در آن سرعت سیال در مرز برابر با سرعت سطح جامد است. به عبارت دیگر، سیال به سطح جامد می‌چسبد و هیچ حرکت نسبی بین سیال و جامد در مرز وجود ندارد.

۳-۲-۱. بلور فونونی نیتريد بور متشکل از استیل در بستر آب

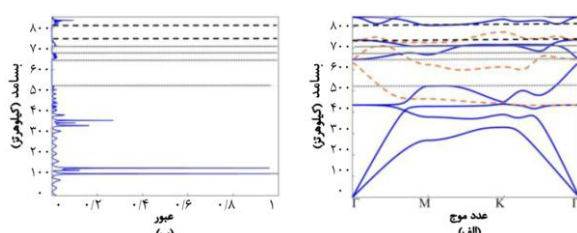
شکل ۸، نواحی شکاف باند برای دو راستای GK و FM برای میله‌های پر شده از استیل در بستر آب را به‌ازای شعاع $r_1 = 0.4a_1$ و تغییرات r_2 از $0.1a_1$ تا $0.4a_1$ با گام‌های $0.05a_1$ نشان می‌دهد. مطابق شکل ۸، در بازه بسامدی ۱۹۳/۶-۲۰۰/۵ کیلوهرتز شکاف باند کامل برای ساختار متشکل از میله‌های استیل در بستر آب به‌ازای تمامی شعاع‌های اختصاص داده شده به میله‌های دوم (r_2) قابل دستیابی است. هم‌چنین، پهنای شکاف باند اول در ساختار مذکور با افزایش شعاع میله‌های استیل افزایش یافته است.

¹ None-slip



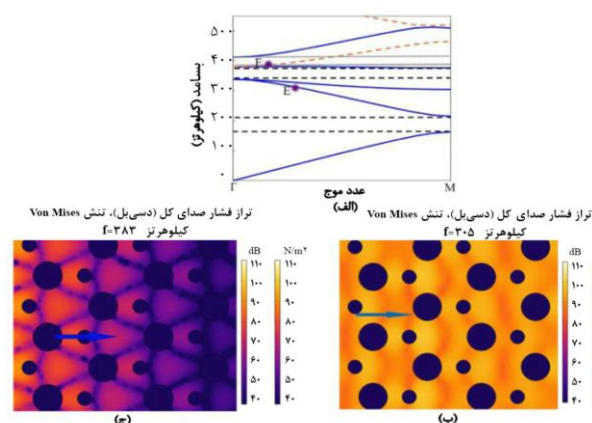
شکل ۱۱ نقشه شکاف باند برای میله‌های آب در بستر استیل به‌ازای تغییرات شعاع r_2 در (الف) راستای ΓM ، (ب) راستای ΓK و (ج) همپوشانی شکاف‌ها در دو جهت.

نمودار ساختار باند و طیف انتقال برای ساختار شبکه نیتريد بور نمونه متشکل از میله‌های آب در بستر استیل به‌ازای $r_1 = 0.4a_1$ و $r_2 = 0.2a_1$ مطابق شکل ۱۲، بدست آمده است. در این شکل نواحی مشخص شده با خط چین و نقطه چین بیان گر بازه شکاف باند و باند کر هستند.



شکل ۱۲ (الف) نمودار ساختار باند شبکه بلور فونونی نیتريد بور برای پراکنده کننده‌های آب در بستر استیل به‌ازای $r_1 = 0.4a_1$ و $r_2 = 0.2a_1$ و (ب) طیف انتقال متناظر در راستای ΓM .

برای ساختار متشکل از میله‌های آب در بستر استیل، شکاف باند اول طبق شکل ۱۲ (الف) در بازه بسامدی ۷۴۰ - ۸۱۶ کیلوهرتز ظاهر شده است. برای ساختار متشکل از میله‌های آب در بستر استیل، شکاف باند اول طبق شکل ۱۲ (الف) در بازه بسامدی ۷۴۰ - ۸۱۶ کیلوهرتز ظاهر شده است. در حالتی که شکل ۱۲ (ب) بیانگر عبور صفر در بازه بسامدی ۵۱۹ - ۶۲۳ کیلوهرتز وجود باند است و بنابراین به نظر می‌رسد که برخی از



شکل ۱۰ ساختار باند در راستای ΓM ، به همراه الگوی میدان در بسامدهای نمونه نشان داده شده با حروف (ب) E و (ج) F.

مطابق شکل ۱۰، الگوی میدان در بسامدهای متناظر با نقاط نشان داده شده با حروف E (۳۰۵ کیلوهرتز) و F (۳۸۳ کیلوهرتز) به ترتیب بیانگر موج عبوری و باند کر است.

۳-۲-۲. بلور فونونی نیتريد بور متشکل از آب در بستر استیل

در نهایت، ساختار متشکل از میله‌های آبی در بستر استیل از منظر نقشه شکاف باند و ساختار باند به همراه طیف انتقال مورد بررسی قرار گرفته است.

شکل ۱۱، نواحی شکاف باند برای دو راستای ΓK و ΓM برای میله‌های پر شده از آب در بستر استیل را به‌ازای شعاع $r_1 = 0.4a_1$ و تغییرات r_2 از $0.1a_1$ تا $0.4a_1$ با گام‌های $0.05a_1$ نشان می‌دهد. طبق شکل ۱۱، شکاف باند اول با افزایش شعاع r_2 کوچک تر شده است و شکاف باند دوم در هر دو راستای ΓK و ΓM از شعاع $0.2a_1$ شروع شده است.

به‌ازای ساختار نیتريد بور متشکل از میله‌های استیل در بستر آب، شکاف باند اول با افزایش شعاع میله‌ها، گسترده تر شده، در حالیکه به‌ازای ساختار متشکل از میله‌های آبی در بستر استیل، با افزایش شعاع میله‌ها، شکاف باند به سمت بسامدهای پایین جابجا شده و محدودتر می‌شود. دلیل این امر این است که افزایش سهم ماده با سرعت صدا بالا/پایین منجر به جابه‌جایی باندها به سمت بسامدهای بالا/پایین می‌شود.

۵. نتیجه‌گیری

در این مقاله، نقشه‌های شکاف باند به همراه نمونه ساختار باند و طیف عبور برای شبکه نیتريد بور متشکل از مواد جیوه و آب و نیز استیل و آب مورد بررسی قرار گرفت. از مقایسه نتایج به دست‌آمده مشاهده‌شد که ساختار باند و طیف انتقال به دست‌آمده در شبکه نیتريد بور متشکل از میله‌های جیوه‌ای در بستر آب با ساختار متشکل از میله‌های استیل در آب شباهت زیادی دارند و این دو ساختار در بازه بسامدی نزدیک به هم گاف نشان داده‌اند. بنابراین در کاربردهای مشابه به‌جای ماده سمی جیوه می‌توان از استیل استفاده کرد. از جمله نتایج مهم این مطالعه این است که ساختار باند به تنهایی معیاری دقیقی برای تعیین ناحیه شکاف باند نیست و با بررسی طیف انتقال در حالت‌های مختلف می‌توان متوجه وجود باندهای کر در ساختار باند شد که این باندها در طیف انتقال عبوری از خود نشان نمی‌دهند. باندهای دیده شده در ساختار باند که در طیف انتقال عبور صفر دارند، باند کر نام دارند که الگوی میدان در بازه بسامدی متناظر با باند کر در راستای انتشار، عدم تقارن از خود نشان می‌دهد.

تقدیر و تشکر

از داوران محترم که با بررسی محتوای علمی مقاله و ارائه نظرات سازنده‌شان موجب بهبود ساختار و توسعه مقاله را فراهم نموده‌اند قدردانی می‌گردد.

تضاد منافع

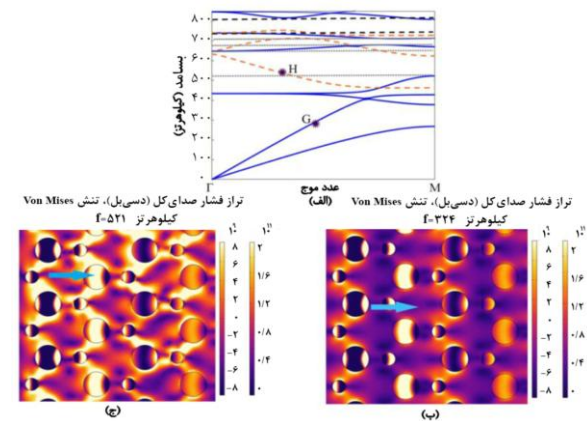
نویسندگان اعلام می‌دارند که هیچ تضاد منافی در مورد محتویات این مقاله وجود ندارد. نویسندگان هیچ منافع مالی یا روابطی که بتواند بر انتشار این مقاله تاثیرگذار باشد، ندارند.

مراجع

- [1] L. Pengfei, Z. Zhang, W. Wang, W. Ji, T. Yu, P. Gao, "Vibration manipulation properties of phononic crystals and acoustic meta-materials for fluid-conveying pipeline systems: A review," Journal of Vibration Engineering & Technologies, vol. 13, no. 1, pp.114, 2025.

حالت‌های ارتعاشی در منحنی‌های پراکندگی، به انتقال کمکی نمی‌کند.

جهت تایید کر بود باندهای مشخص شده با خط چین در شکل ۱۲، الگوی میدان به صورت نمونه در بسامد ۵۲۱ کیلوهرتز و نیز در باند عبور، طبق شکل ۱۳ محاسبه شده است.



شکل ۱۳ (الف) ساختار باند در راستای ΓM ، به همراه الگوی میدان در بسامدهای نمونه نشان داده شده با حروف (ب) G و (ج) H.

مطابق با شکل ۱۳، الگوی میدان در بسامدهای متناظر با نقاط نشان داده شده با حروف G (۳۲۴ کیلوهرتز) و H (۵۲۱ کیلوهرتز) به ترتیب بیانگر موج عبوری و باند کر است.

۴. بحث

در این پژوهش، ساختار بلور فونونی نیتريد بور در دو حالت ترکیب سیال-سیال و جامد-سیال با استفاده از مواد به ترتیب آب-جیوه و نیز استیل-آب با جایگزینی مواد بسستر و پراکنده‌کننده‌ها به ازای شعاع‌های مختلف پراکنده‌کننده‌ها مورد مطالعه قرار گرفت و نقشه‌های شکاف باند برای ساختارهای اشاره شده، بدست آمد. برای یک حالت خاص و به ازای شعاع‌های $r_1 = 0.4a_1$ و $r_2 = 0.2a_1$ تطابق ساختار باند با طیف انتقال در راستای ΓM مورد بررسی قرار گرفته و باندهای کر و تخت شناسایی و علت اختلاف به کمک الگوهای میدان در نقاط نمونه بر روی ساختار باند، توجیه و تفسیر شد.

- [11] J. Page, "Focusing of ultrasonic waves by negative refraction in phononic crystals," AIP Advances, vol. 6, no. 12, pp. 121606, 2016.
- [12] Z. Jia, Y. Luo, A. Takezawa, X. Zhang, "Topology optimization for realizing tailored self-collimation in phononic crystals," International Journal for Numerical Methods in Engineering, vol. 123, no. 18, pp. 4170-4182, 2022.
- [13] O. Kaya, A. Cicek, M. Yilmaz, B. Ulug, "Superprism effect in a deformed triangular sonic crystal," Journal of Physics D: Applied Physics, vol. 44, no. 32, pp. 325401, 2011.
- [14] M. Ghoreishi, A. Bahrami, "Reciprocal invisibility cloaking with self-collimation effect of phononic crystals," Physica Scripta, vol. 98, no. 1, pp. 015704, 2022.
- [15] Z. Yuan, R. Chen, P. Li, A. Nikitin, R. Hillenbrand, X. Zhang, "Extremely confined acoustic phonon polaritons in monolayer-hBN/metal heterostructures for strong light-matter interactions," ACS Photonics, vol. 7, no. 9, pp. 2610-2617, 2020.
- [16] B. Rouhani, Y. Pennec, E. Boudouti, J. Vasseur, Y. Hassouani, C. Li, A. Akjouj, D. Bria, "Band gap engineering in simultaneous phononic and photonic crystal slabs," Applied Physics A, vol. 103, pp. 735-739, 2011.
- [17] Y. Pennec, B. Rouhani, E. Boudouti, C. Li, Y. Hassouani, J. Vasseur, N. Papanikolaou, S. Benchabane, V. Laude, A. Martinez, "Simultaneous existence of phononic and photonic band gaps in periodic crystal slabs," Optics express, vol. 18, no. 13, pp. 14301-14310, 2010.
- [18] J. Li, L. Wang, Y. Wang, Z. Tao, W. Zhong, Z. Su, S. Xue, G. Miao, W. Wang, H. Peng, J. Guo, X. Zhu, "Observation of the nonanalytic behavior of optical phonons in monolayer hexagonal boron nitride," Nature Communications, vol. 15, no. 1, pp. 1938, 2024.
- [2] S. Kushwaha, P. Halevi, L. Dobrzynski, B. Rouhani, "Acoustic band structure of periodic elastic composites," Physical Review Letters, vol. 71, no. 13, pp. 1993, 2022.
- [3] W. Yanan, J. Lee, X. Zheng, Y. Xie, P. Feng, "Hexagonal boron nitride phononic crystal waveguides," ACS Photonics, vol. 6, no. 12, pp. 3225-3232, 2019.
- [4] J. Zhiyuan, Y. Bao, Y. Luo, D. Wang, X. Zhang, Z. Kang, "Maximizing acoustic band gap in phononic crystals via topology optimization," International Journal of Mechanical Sciences, vol. 270, pp. 109107, 2024.
- [5] Y. Pennec, J. Vasseur, B. Rouhani, L. Dobrzyński, P. Deymier, "Two-dimensional phononic crystals: Examples and applications," Surface Science Reports, vol. 65, no. 8, pp. 229-291, 2010.
- [6] Y. Wang, J. Lee, Y. Xie, X. Zheng, P. Feng, "High-frequency hexagonal boron nitride (h-BN) phononic waveguides," IEEE 32nd International Conference on Micro Electro Mechanical Systems (MEMS), pp. 319-322, 2019.
- [7] Y. Pennec, B. Rouhani, J. Vasseur, A. Khelif, P. Deymier, "Tunable filtering and demultiplexing in phononic crystals with hollow cylinders," Physical Review E, vol. 69, no. 4, pp. 046608, 2004.
- [8] T. Ma, X. Tang, D. Li, Y. Wang, "Topological interface states in solid/liquid phononic crystal waveguides and sensing applications," Physics Letters A, vol. 530, pp. 130109, 2025.
- [9] A. Bin, J. Rakshit, D. Kumar, B. Yakkala, V. Nagaraju, M. Hossain, "Designing of acoustic half adder and half subtractor using fluid-fluid phononic crystal based ring resonator," Applied Physics A, vol. 131, no. 1, pp. 1-12, 2025.
- [10] A. Bahrami, F. Motaei, "A review of phononic-crystal-based energy harvesters," Progress in Energy, vol. 7, no. 1, pp. 012002, 2024.