

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ
ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ
ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ
ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΤΗΜΩΝ

ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ
ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

ΕΚΕΦΕ «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ»

ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΝΑΝΟΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΚΑΙ ΝΑΝΟΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ

ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΠΥΡΗΝΙΚΗΣ ΚΑΙ
ΣΩΜΑΤΙΔΙΑΚΗΣ ΦΥΣΙΚΗΣ



Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών
Σπουδών

«Φυσική και Τεχνολογικές Εφαρμογές»

**Υπολογισμοί ζωνών συχνότητας
δισδιάστατων φωνονικών
κρυστάλλων με τη μέθοδο των
επίπεδων κυμάτων.**

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

του Σπύρου Κανταρέλη

Επιβλέπων καθηγητής: Β. Γιαννόπαπας

Αθήνα, Ιούνιος 2017

“Μόλις αποδεχτούμε τα όριά μας, προχωρούμε πέρα από αυτά.”

Albert Einstein

Περιεχόμενα

1. Φωνονικοί Κρύσταλλοι	1
1.1. Εισαγωγή	1
1.2. Ανάλυση ελαστικών τάσεων σε έναν φωνονικό κρύσταλλο	4
2. Θεωρία Επίπεδων Κυμάτων	7
2.1. Εξισώσεις διάδοσης ελαστικών κυμάτων σε δισδιάστατο φωνονικό κρύσταλλο	7
2.2. Θεωρία επίπεδων κυμάτων σε δισδιάστατο φωνονικό κρύσταλλο	10
2.3. Αριθμητικοί Υπολογισμοί για τους συντελεστές Fourier	11
2.4. Πυκνότητα καταστάσεων και αριθμητικός υπολογισμός της	12
3. Αποτελέσματα	15
3.1. Παρουσίαση αποτελεσμάτων	15
3.2. Συμπεράσματα	24

Ευχαριστίες

A. Παράρτημα	i
A.1. Προσδιορισμός των 27 μητρών της εξίσωσης 2.8	i
A.2. Μετασχηματισμοί συμμετρικών δισδιάστατου τετραγωνικού πλέγματος	iii
A.3. Μετρήσεις ζωνών συχνοτήτων που υπολογίστηκαν στα πλαίσια της παρούσας διπλωματικής	iv

Βιβλιογραφία

Περίληψη

Η παρούσα εργασία παρουσιάζει θεωρητικούς υπολογισμούς ζωνών συχνοτήτων δισδιάστατων φωνονικών κρυστάλλων με τη μέθοδο των επίπεδων κυμάτων. Η εργασία δίνει έμφαση στην μέθοδο των επίπεδων κυμάτων (PWE: Plain Wave Expansion) καθώς και στον υπολογισμό της πυκνότητας καταστάσεων (DOS: Density Of States) των συστημάτων. Εξετάζουμε δύο συστήματα: ράβδους μολύβδου εμβαπτισμένες σε εποξειδική ρητίνη καθώς και ατσάλινες ράβδους σε σιλικόνη (Si rubber). Και τα δύο συστήματα είναι δισδιάστατοι φωνονικοί κρύσταλλοι αποτελούμενοι από κυλίνδρους (ράβδοι) απείρου μήκους και τετραγωνικής διατομής οι οποίοι καταλαμβάνουν τις θέσεις ενός δισδιάστατου τετραγωνικού πλέγματος.

Abstract

This master thesis presents theoretical calculations of the frequency band structure of two dimensional phononic crystals with the plane wave method. This work focuses on plane wave method as well as the calculation of the Density Of States of the systems. We study two systems: rods of lead embedded in epoxy lattice and rods of steel embedded in Silicon Rubber lattice. Both systems were two dimensional phononic crystals consisting of infinite length rods with rectangular cross-section placed in a two dimensional rectangular lattice.

1. Φωνονικοί Κρύσταλλοι

1.1. Εισαγωγή

Κρυσταλλικά υλικά χαρακτηρίζονται τα ομογενή στερεά που διαθέτουν τα άτομά τους σε πλήρως ταξινομημένες γεωμετρικές θέσεις υψηλής συμμετρίας. Διάφορες προσεγγιστικές υπολογιστικές μέθοδοι εκμεταλλεύονται την υψηλή συμμετρία που διαθέτουν οι κρύσταλλοι ώστε να μειώσουν την πολυπλοκότητα των υπολογισμών που χρειάζονται για να προσεγγιστούν οι ιδιότητες του στερεού. Στην πραγματικότητα όμως, δεν υπάρχει τέλειος κρύσταλλος, αφού και σε έναν ιδανικό κρύσταλλο που δεν περιέχει ατέλειες, τα τέλεια ταξινομημένα άτομά του κινούνται διαρκώς και τυχαία γύρω από την θέση ισορροπίας τους. Για αυτόν τον λόγο επικρατούσε η άποψη ότι αυτή η θερμική τυχαία κίνηση δεν μπορούσε να ελεγχθεί.

Η συνολική κίνηση των ατόμων μέσα στο πλέγμα ενός στερεού κρυστάλλου δεν είναι εντελώς τυχαία, αλλά περιορίζεται από τα γειτονικά τους άτομα επειδή είναι συνδεδεμένα μεταξύ τους με χημικούς δεσμούς. Όταν ένα άτομο ξεφεύγει από την θέση ισορροπίας του, ασκεί δυνάμεις στα γειτονικά του άτομα τα οποία αναγκάζει και να κινηθούν αναλόγως. Το αποτέλεσμα που προκύπτει από αυτήν την αλυσιδωτή κίνηση είναι η δημιουργία ενός φωνονίου, ένα ειδικό κύμα το οποίο δημιουργείται από τις ταλαντώσεις του πλέγματος ενός στερεού. Επειδή η ενέργεια της ταλάντωσης του πλέγματος είναι κβαντισμένη, μπορούμε να θεωρήσουμε το φωνόνιο ως ένα κβαντομηχανικό σωματίδιο, όπως αντίστοιχα το φωτόνιο είναι για το ηλεκτρομαγνητικό κύμα[1].

Η εικόνα αυτή άλλαξε για πρώτη φορά το 1992 όταν ο Μιχάλης Σιγάλας και ο Ελευθέριος Οικονόμου, που βρίσκονταν και οι δύο στο Iowa State University των Η.Π.Α., πρότειναν ότι “χάσματα συχνότητας” μπορούσαν να εμφανιστούν στην διάδοση ακουστικών και ελαστικών κυμάτων σε κατάλληλα σχεδιασμένα σύνθετα (μη ομογενή) συστήματα[2]. Αυτά τα σύνθετα συστήματα ονομάστηκαν αργότερα φωνονικοί κρύσταλλοι. Η ύπαρξη τέτοιων δομών με φωνονικές ζώνες χάσματος επιτρέπουν τον έλεγχο των ελαστικών κυμάτων και έχουν εμφανείς εφαρμογές. Για παράδειγμα μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως μονωτές ακουστικών κυμάτων που θα εμποδίζουν τα ίδιας συχνότητας κύματα με την περιοχή συχνοτήτων της ζώνης χάσματος. Επίσης, με την εισαγωγή ατελειών στους φωνονικούς κρυστάλλους, θα επιτρέπεται στα κύματα που θα έχουν συχνότητα αυτής της ζώνης χάσματος να εγκλωβίζονται κοντά στο σημείο της ατέλειας ή να καθοδηγούνται στον φωνονικό κρύσταλλο από μια γραμμική σειρά ατελειών.

Ένα ελαστικό κύμα μπορεί να έχει τρεις ανεξάρτητες πολώσεις, δύο εγκάρσιες και μία διαμήκη σε ένα τρισδιάστατο στερεό μέσο. Χάσμα στον φωνονικό κρύσταλλο, μπορεί

να υπάρξει σε μία από τις τρεις ανεξάρτητες πολώσεις έως και τις τρεις ταυτόχρονα για μία περιοχή του κρυστάλλου. Για να κατανοήσουμε πώς δημιουργείται ένα χάσμα θεωρούμε μονοδιάστατο κρύσταλλο ο οποίος θα απαρτίζεται από εναλλασσόμενα στρώματα δύο διαφορετικών υλικών. Ένα ποσοστό της ενέργειας από τα ελαστικά κύματα διαπερνάει το κάθε στρώμα ενώ το υπόλοιπο ποσοστό της ενέργειας ανακλάται. Το ανακλώμενο κύμα συμβάλλει με το κύμα που θα προσκρούσει στο επόμενο στρώμα. Αν αυτή η συμβολή είναι ενισχυτική, τότε όλη η ενέργεια του αρχικού κύματος θα αντανακλαστεί πίσω και το κύμα δεν θα μπορέσει να διαπεράσει τα στρώματα. Αντιθέτως, αν η συμβολή είναι καταστρεπτική, τότε η ενέργεια του αρχικού κύματος θα διαδοθεί μέσα στον κρύσταλλο. Οπότε η ενισχυτική συμβολή ευθύνεται για τις ζώνες χάσματος, ενώ η καταστρεπτική συμβολή ευθύνεται για τις ζώνες που τα κύματα θα μπορούν να διαδοθούν. Η προϋπόθεση να υπάρξει ενισχυτική συμβολή, άρα και χάσμα, είναι η διαφορά δρόμου μεταξύ των κυμάτων που συμβάλλουν να είναι ίση με ακέραιο πολλαπλάσιο του μήκους κύματός τους.

$$\Delta x = n\lambda \quad (1.1)$$

Λαμβάνοντας υπ' όψιν ότι η διαφορά δρόμου εξαρτάται από μία παράμετρο του πλέγματος a καταλαβαίνουμε ότι σε περίπτωση ενισχυτικής συμβολής η παράμετρος a πρέπει να είναι ανάλογη του μήκους κύματος λ . Το μήκος κύματος είναι αντιστρόφως ανάλογο της συχνότητας ω , άρα για τις συχνότητες που παρουσιάζεται ζώνη χάσματος ισχύει $\omega \sim 1/\lambda \sim 1/a \sim c$, με c να είναι η τυπική ταχύτητα του ήχου στο μέσο. Οπότε, οι ζώνες χάσματος που εμφανίζονται σε μία συχνότητα ω είναι της τάξης του c/a [1, 3].

Οι εφαρμογές των φωνονικών κρυστάλλων είναι εκτενείς. Όλες οι εφαρμογές στηρίζονται στον έλεγχο του ήχου, υπερήχων και θερμότητας μέσω των φωνονικών χασμάτων. Παρακάτω αναφέρονται μερικές γνωστές εφαρμογές των φωνονικών κρυστάλλων.

Ακουστικοί δίοδοι: Αντίστοιχα με τις ήδη γνωστές διόδους που επιτρέπουν στο ηλεκτρικό ρεύμα να περνάει μόνο προς μία κατεύθυνση έτσι και οι ακουστικές δίοδοι δημιουργήθηκαν από μονοδιάστατους φωνονικούς κρυστάλλους που εμποδίζουν την διάδοση του ήχου προς μία κατεύθυνση. Οι ακουστικές δίοδοι μπορούν να βρουν εφαρμογές σε ανιχνευτές, για μείωση του θορύβου όπως για παράδειγμα σε μια βιοϊατρική απεικόνιση μέσω υπερήχων.

Θερμικοί δίοδοι: Σε πλήρη αναλογία με τις ακουστικές διόδους, οι θερμικές δίοδοι επιτρέπουν τη ροή της θερμότητας μόνο προς μία κατεύθυνση. Σε σχέση με τις ακουστικές διόδους, οι θερμικές δίοδοι θεωρούνται πιο δύσκολες ως προς την κατασκευή τους επειδή η θερμότητα μεταφέρεται από ένα ευρύ φάσμα υψηλών συχνοτήτων φωνονικών και είναι δύσκολος ο ταυτόχρονος έλεγχός τους. Οι εφαρμογές των θερμικών διόδων είναι κυρίως σε ηλεκτρονικά κυκλώματα, προσφέροντας πολύ υψηλές επιδόσεις σε αυτά, κυρίως σε ηλεκτρονικά κυκλώματα που χρειάζονται ακριβή έλεγχο της θερμοκρασίας καθώς και σε νανο - ηλεκτρονικά συστήματα.

Θερμοκρύσταλλοι: Οι θερμοκρύσταλλοι είναι περιοδικά συστήματα που περιέχουν κράματα νανοϋλικών και επιτρέπουν τον έλεγχο της μεταφοράς θερμότητας χρησιμοποιώντας την θερμική ροή ως ελαστικά κύματα του κρυστάλλου.

Ενίσχυση της αλληλεπίδρασης μεταξύ ήχου και φωτός: Ο ταυτόχρονος εντοπισμός, ελαστικών και οπτικών κυμάτων χρησιμοποιώντας ακουστικές και οπτικές κοιλότητες σε ένα σύνθετο σύστημα, χρησιμοποιείται για την ενίσχυση της αλληλεπίδρασης μεταξύ φωνονίων και φωτονίων. Αυτό δημιουργεί την προοπτική μιας νέας τάξης ακουστικό - οπτικών κρυστάλλων που μπορούν να συνδιάσουν τον ταυτόχρονο έλεγχο φωνονίων και φωτονίων.

Η ικανότητα χειρισμού ηλεκτρονίων και φωτονίων οδήγησε σε σπουδαίες τεχνολογικές επιτυχίες τις προηγούμενες δεκαετίες. Ίσως η ανάπτυξη ικανότητας του ακριβή χειρισμού των φωνονίων να οδηγήσει σε ανάλογα επιτεύγματα[4].

1.2. Ανάλυση ελαστικών τάσεων σε έναν φωνονικό κρύσταλλο

Η βασική ιδέα για την ανάλυση ελαστικών τάσεων σε έναν φωνονικό κρύσταλλο είναι απλή. Θα χρησιμοποιήσουμε τον νόμο του Hooke ($F = -kx$) και τον δεύτερο νόμο του Newton ($F = ma$). Ο νόμος του Hooke εφαρμόζεται μόνο για μικρές τάσεις, τόσο μικρές ώστε να μην υπάρχει καμία είδους παραμόρφωση (να μην αλλάζει το k).

Θεωρούμε έναν φωνονικό κρύσταλλο στον οποίο εφαρμόζεται μία ομοιόμορφη παραμόρφωση, τέτοια ώστε κάθε μοναδιαία κυψελίδα του παραμορφώνεται με ακριβώς ίδιο τρόπο. Οι καινούργιοι άξονες του x', y', z' ως προς τους άξονες πριν την παραμόρφωση x, y, z θα έχουν την μορφή:

$$\begin{aligned} x' &= (1 + \varepsilon_{xx})\hat{x} + \varepsilon_{xy}\hat{y} + \varepsilon_{xz}\hat{z} \\ y' &= \varepsilon_{yx}\hat{x} + (1 + \varepsilon_{yy})\hat{y} + \varepsilon_{yz}\hat{z} \\ z' &= \varepsilon_{zx}\hat{x} + \varepsilon_{zy}\hat{y} + (1 + \varepsilon_{zz})\hat{z} \end{aligned} \quad (1.2)$$

όπου ε_{ab} : ορίζουν την παραμόρφωση, είναι αδιάστατα μεγέθη και λαμβάνουν τιμές πολύ μικρότερες της μονάδας για μικρές τάσεις.

Έτσι, αν για παράδειγμα η θέση ενός ατόμου βρισκόταν στην θέση $r = x\hat{x} + y\hat{y} + z\hat{z}$ τότε η θέση του ατόμου μετά την παραμόρφωση θα είναι $r' = xx' + yy' + zz'$. Άρα η μετατόπιση R του ατόμου από την ομοιόμορφη παραμόρφωση θα είναι:

$$R \equiv r' - r = x(x' - \hat{x}) + y(y' - \hat{y}) + z(z' - \hat{z}) \quad (1.3)$$

και από την (1.2) η (1.3) γίνεται:

$$R(r) \equiv (x\varepsilon_{xx} + y\varepsilon_{yx} + z\varepsilon_{zx})\hat{x} + (x\varepsilon_{xy} + y\varepsilon_{yy} + z\varepsilon_{zy})\hat{y} + (x\varepsilon_{xz} + y\varepsilon_{yz} + z\varepsilon_{zz})\hat{z} \quad (1.4)$$

Απλοποιούμε την (1.4) εισάγοντας τους όρους u, v και w , έτσι ώστε[1]:

$$\boxed{R(r) = u(r)\hat{x} + v(r)\hat{y} + w(r)\hat{z}} \quad (1.5)$$

Οι παραμορφώσεις που ενδιαφερόμαστε για να περιγράψουμε τα ελαστικά κύματα στο κεφάλαιο 2 για αυτήν την διπλωματική δεν είναι ομοιόμορφες, όπως δεν είναι και οι

περισσότερες παραμορφώσεις στην πραγματικότητα. Άρα για μη ομοιόμορφες παραμορφώσεις, πρέπει να συσχετίσουμε τα u , v , w με τις τοπικές παραμορφώσεις. Από το ανάπτυγμα της σειράς Taylor για την $R(0) = 0$ παίρνουμε:

$$x\varepsilon_{xx} = x\frac{\partial u}{\partial x}, \quad y\varepsilon_{yx} = y\frac{\partial u}{\partial y}, \quad z\varepsilon_{zx} = z\frac{\partial u}{\partial z}, \quad \dots \text{ κτλ.} \quad (1.6)$$

Για τοπικές παραμορφώσεις συνηθίζεται να συμβολίζουμε τους συντελεστές ε_{ab} ως e_{ab} . Οπότε τους ορίζουμε:

$$e_{xx} \equiv \varepsilon_{xx} = \frac{\partial u}{\partial x}, \quad e_{yy} \equiv \varepsilon_{yy} = \frac{\partial u}{\partial y}, \quad e_{zz} \equiv \varepsilon_{zz} = \frac{\partial u}{\partial z} \quad (1.7)$$

Τα e_{xy} , e_{yz} , e_{zx} μας δείχνουν την αλλαγή της γωνίας μεταξύ των αξόνων. Χρησιμοποιώντας την εξίσωση (1.2) παίρνουμε τις:

$$\begin{aligned} e_{xy} &\equiv x'y' = \varepsilon_{yx} + \varepsilon_{xy} = \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \\ e_{yz} &\equiv y'z' = \varepsilon_{zy} + \varepsilon_{yz} = \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \\ e_{zx} &\equiv z'x' = \varepsilon_{zx} + \varepsilon_{xz} = \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \end{aligned} \quad (1.8)$$

Ο ορισμός της τάσης είναι η δύναμη που ασκείται επάνω σε ένα μοναδιαίο επίπεδο επιφάνειας. Από τον ορισμό καταλαβαίνουμε ότι μπορούν να υπάρχουν εννέα τάσεις σε τρεις διαστάσεις: $X_x, X_y, X_z, Y_x, Y_y, Y_z, Z_x, Z_y, Z_z$. Το κεφαλαίο γράμμα συμβολίζει την διεύθυνση της τάσης και το υπογεγραμμένο γράμμα το κάθετο διάνυσμα ενός επιπέδου στο οποίο εφαρμόζεται η δύναμη της τάσης.

Από τον νόμο του Hooke εν τέλει παίρνουμε[1]:

$$\begin{aligned} e_{xx} &= S_{11}X_x + S_{12}Y_y + S_{13}Z_z + S_{14}Y_z + S_{15}Z_x + S_{16}X_y \\ e_{yy} &= S_{21}X_x + S_{22}Y_y + S_{23}Z_z + S_{24}Y_z + S_{25}Z_x + S_{26}X_y \\ e_{zz} &= S_{31}X_x + S_{32}Y_y + S_{33}Z_z + S_{34}Y_z + S_{35}Z_x + S_{36}X_y \\ e_{yz} &= S_{41}X_x + S_{42}Y_y + S_{43}Z_z + S_{44}Y_z + S_{45}Z_x + S_{46}X_y \\ e_{zx} &= S_{51}X_x + S_{52}Y_y + S_{53}Z_z + S_{54}Y_z + S_{55}Z_x + S_{56}X_y \\ e_{xy} &= S_{61}X_x + S_{62}Y_y + S_{63}Z_z + S_{64}Y_z + S_{65}Z_x + S_{66}X_y \end{aligned} \quad (1.9)$$

$$\begin{aligned} X_x &= C_{11}e_{xx} + C_{12}e_{yy} + C_{13}e_{zz} + C_{14}e_{yz} + C_{15}e_{zx} + C_{16}e_{xy} \\ Y_y &= C_{21}e_{xx} + C_{22}e_{yy} + C_{23}e_{zz} + C_{24}e_{yz} + C_{25}e_{zx} + C_{26}e_{xy} \\ Z_z &= C_{31}e_{xx} + C_{32}e_{yy} + C_{33}e_{zz} + C_{34}e_{yz} + C_{35}e_{zx} + C_{36}e_{xy} \\ Y_z &= C_{41}e_{xx} + C_{42}e_{yy} + C_{43}e_{zz} + C_{44}e_{yz} + C_{45}e_{zx} + C_{46}e_{xy} \\ Z_x &= C_{51}e_{xx} + C_{52}e_{yy} + C_{53}e_{zz} + C_{54}e_{yz} + C_{55}e_{zx} + C_{56}e_{xy} \\ X_y &= C_{61}e_{xx} + C_{62}e_{yy} + C_{63}e_{zz} + C_{64}e_{yz} + C_{65}e_{zx} + C_{66}e_{xy} \end{aligned} \quad (1.10)$$

όπου S_{11}, S_{12}, \dots : συντελεστές ελαστικής επιδεκτικότητας με διαστάσεις [εμβαδόν]/[δύναμη] ή [όγκο]/[ενέργεια]

και όπου C_{11}, C_{12}, \dots : συντελεστές ελαστικής ακαμψίας με διαστάσεις [δύναμη]/[εμβαδόν] ή [ενέργεια]/[όγκο].

2. Θεωρία Επίπεδων Κυμάτων

2.1. Εξισώσεις διάδοσης ελαστικών κυμάτων σε δισδιάστατο φωνονικό κρύσταλλο

Γενικά, η εξίσωση της κίνησης ελαστικών κυμάτων μέσα σε έναν τρισδιάστατο φωνονικό κρύσταλλο μπορεί να δοθεί από την εξίσωση:

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial X_x}{\partial x} + \frac{\partial X_y}{\partial y} + \frac{\partial X_z}{\partial z} + \frac{\partial Y_x}{\partial x} + \frac{\partial Y_y}{\partial y} + \frac{\partial Y_z}{\partial z} + \frac{\partial Z_x}{\partial x} + \frac{\partial Z_y}{\partial y} + \frac{\partial Z_z}{\partial z} \quad (2.1)$$

Για έναν δισδιάστατο φωνονικό κρύσταλλο η παραπάνω εξίσωση θα πάρει την μορφή [5, 6, 7, 8, 9, 10]:

$$\rho(\vec{r}) \ddot{u}(\vec{r}, t)_j = \frac{\partial}{\partial x_i} (C_{ijkl} \frac{\partial u_k(\vec{r}, t)}{\partial x_l}) \quad (2.2)$$

με $\vec{r} = (x_1, x_2, z) = (\vec{x}, z)$: διάνυσμα θέσης

$\rho(\vec{r})$: η πυκνότητα μάζας

C_{ijkl} : συντελεστής ελαστικής ακαμψίας

Για την παρούσα διπλωματική εργασία ο δισδιάστατος φωνονικός κρύσταλλος θα αποτελείται από δύο δισδιάστατες περιοδικές διατάξεις υλικού A ενσωματωμένου σε υλικό B. Στο κεφάλαιο 3 θα χρησιμοποιήσουμε δύο ζευγάρια τέτοιων υλικών, τα οποία και θα προσδιοριστούν παρακάτω. Και τα δύο υλικά A και B είναι ομογενή και ισότροπα. Εξαιτίας της περιοδικότητας ενός φωνονικού κρυστάλλου, οι σταθερές $\rho(\vec{x})$ και C_{ijkl} μπορούν να αναπτυχθούν σε σειρά Fourier συναρτήσεων των διανυσμάτων πλέγματος του αντίστροφου χώρου $\vec{G} = (G_x, G_y)$ με τον εξής τρόπο:

$$\rho(\vec{x}) = \sum_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\vec{x}} [\rho_{\vec{G}}] \quad (2.3)$$

και

$$C_{ijkl}(\vec{x}) = \sum_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\vec{x}} [C_{\vec{G}}^{ijkl}] \quad (2.4)$$

όπου τα $\rho_{\vec{G}}$ και $C_{\vec{G}}^{ijkl}$ είναι οι αντίστοιχοι συντελεστές Fourier, όπου ορίζονται ως:

$$\rho_{\vec{G}} = A_{uc}^{-1} \int \rho(\vec{x}) e^{i\vec{G}\vec{x}} d^2\vec{x} \quad (2.5)$$

και

$$C_{\vec{G}}^{ijkl} = A_{uc}^{-1} \int C_{ijkl}(\vec{x}) e^{i\vec{G}\vec{x}} d^2\vec{x} \quad (2.6)$$

όπου A_{uc} : επιφάνεια της μοναδιαίας κυψελίδας του δισδιάστατου φωνονικού κρυστάλλου.

Χρησιμοποιώντας το θεώρημα του Bloch και αναπτύσσοντας το διάνυσμα μετατόπισης $u_j(\vec{r}, t)$ σε σειρά Fourier έχουμε:

$$u_j(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{G}} e^{i(\vec{k}+\vec{G})\vec{x}-i\omega t} (e^{ik_z z} A_{\vec{G}}^j) \quad (2.7)$$

με $\vec{k} = (k_x, k_y)$: είναι το κυματόνισμα του θεωρήματος Bloch

ω : γωνιακή συχνότητα

k_z : κυματόνισμα στην κατεύθυνση z

$A_{\vec{G}}^j$: το εύρος του διανύσματος μετατόπισης

Αντικαθιστώντας την (2.3), (2.4) και (2.7) στην εξίσωση (2.2) παίρνουμε[5]:

$$\begin{bmatrix} \begin{pmatrix} M_{G,G'}^{(1)} \\ +k_z S_{G,G'}^{(1)} \\ +k_z^2 N_{G,G'}^{(1)} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} L_{G,G'}^{(1)} \\ +k_z O_{G,G'}^{(1)} \\ +k_z^2 T_{G,G'}^{(1)} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} U_{G,G'}^{(1)} \\ +k_z K_{G,G'}^{(1)} \\ +k_z^2 V_{G,G'}^{(1)} \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} L_{G,G'}^{(2)} \\ +k_z O_{G,G'}^{(2)} \\ +k_z^2 T_{G,G'}^{(2)} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} M_{G,G'}^{(2)} \\ +k_z S_{G,G'}^{(2)} \\ +k_z^2 N_{G,G'}^{(2)} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} U_{G,G'}^{(2)} \\ +k_z K_{G,G'}^{(2)} \\ +k_z^2 V_{G,G'}^{(2)} \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} W_{G,G'}^{(1)} \\ +k_z J_{G,G'}^{(1)} \\ +k_z^2 X_{G,G'}^{(1)} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} W_{G,G'}^{(2)} \\ +k_z J_{G,G'}^{(2)} \\ +k_z^2 X_{G,G'}^{(2)} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} M_{G,G'}^{(3)} \\ +k_z S_{G,G'}^{(3)} \\ +k_z^2 N_{G,G'}^{(3)} \end{pmatrix} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{G'}^1 \\ A_{G'}^2 \\ A_{G'}^3 \end{bmatrix} = 0 \quad (2.8)$$

με τις μήτρες $k \times l$ $M_{G,G'}^{(1)}, M_{G,G'}^{(2)}, M_{G,G'}^{(3)}, S_{G,G'}^{(1)}, S_{G,G'}^{(2)}, S_{G,G'}^{(3)}, N_{G,G'}^{(1)}, N_{G,G'}^{(2)}, N_{G,G'}^{(3)}, L_{G,G'}^{(1)}, L_{G,G'}^{(2)}, O_{G,G'}^{(1)}, O_{G,G'}^{(2)}, T_{G,G'}^{(1)}, T_{G,G'}^{(2)}, U_{G,G'}^{(1)}, U_{G,G'}^{(2)}, K_{G,G'}^{(1)}, K_{G,G'}^{(2)}, V_{G,G'}^{(1)}, V_{G,G'}^{(2)}, W_{G,G'}^{(1)}$

$W_{G,G'}^{(2)}$, $J_{G,G'}^{(1)}$, $J_{G,G'}^{(2)}$, $X_{G,G'}^{(1)}$, $X_{G,G'}^{(2)}$ να προσδιορίζονται στο παράρτημα της διπλωματικής Α.1.

Μπορούμε να απλοποιήσουμε την εμφάνιση της εξίσωσης (2.8), ξαναγράφοντάς την ως ένα πρόβλημα ιδιοτιμών συναρτήσει του k_z καταλήγοντας στην εξίσωση[5]:

$$\boxed{(Ak_z^2 + Bk_z + C) \cdot U = 0} \quad (2.9)$$

με

$$A = \begin{bmatrix} N_{G,G'}^{(1)} & T_{G,G'}^{(1)} & V_{G,G'}^{(1)} \\ T_{G,G'}^{(2)} & N_{G,G'}^{(2)} & V_{G,G'}^{(2)} \\ X_{G,G'}^{(1)} & X_{G,G'}^{(2)} & N_{G,G'}^{(3)} \end{bmatrix} \quad (2.10)$$

$$B = \begin{bmatrix} S_{G,G'}^{(1)} & O_{G,G'}^{(1)} & K_{G,G'}^{(1)} \\ O_{G,G'}^{(2)} & S_{G,G'}^{(2)} & K_{G,G'}^{(2)} \\ J_{G,G'}^{(1)} & J_{G,G'}^{(2)} & S_{G,G'}^{(3)} \end{bmatrix} \quad (2.11)$$

$$C = \begin{bmatrix} M_{G,G'}^{(1)} & L_{G,G'}^{(1)} & U_{G,G'}^{(1)} \\ L_{G,G'}^{(2)} & M_{G,G'}^{(2)} & U_{G,G'}^{(2)} \\ W_{G,G'}^{(1)} & W_{G,G'}^{(2)} & M_{G,G'}^{(3)} \end{bmatrix} \quad (2.12)$$

και

$$U = \begin{bmatrix} A_{G'}^1 \\ A_{G'}^2 \\ A_{G'}^3 \end{bmatrix} \quad (2.13)$$

2.2. Θεωρία επίπεδων κυμάτων σε δισδιάστατο φωνονικό κρύσταλλο

Παρατηρώντας ότι όταν το k_z τείνει προς το μηδέν η εξίσωση (2.7) παίρνει την μορφή διάνυσματος μετατόπισης ενός επίπεδου κύματος, μπορούμε να μελετήσουμε πώς εκφυλίζεται η εξίσωση (2.9) αν στον δισδιάστατο φωνονικό κρύσταλλο διαδώσουμε επίπεδο κύμα. Όταν λοιπόν $k_z = 0$ η εξίσωση (2.9) εκφυλίζεται σε:

$$C \cdot U = 0 \quad (2.14)$$

Στην παρούσα διπλωματική μελετήθηκε φωνονικός κρύσταλλος με τετραγωνική συμμετρία. Αυτό σημαίνει ότι τα στοιχεία $U_{G,G'}^{(1)}$, $U_{G,G'}^{(2)}$, $W_{G,G'}^{(1)}$, $W_{G,G'}^{(2)}$ της μήτρας C θα είναι μηδέν[5]. Άρα η εξίσωση (2.14) θα περιέχει πλέον δύο διαφορετικούς τρόπους πόλωσης και θα πάρει την μορφή:

Για κύματα με το διάνυσμα πόλωσης εντός του δισδιάστατου πλέγματος των ράβδων:

$$\begin{bmatrix} M_{G,G'}^{(1)} & L_{G,G'}^{(1)} \\ L_{G,G'}^{(2)} & M_{G,G'}^{(2)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{G'}^1 \\ A_{G'}^2 \end{bmatrix} = 0 \quad (2.15)$$

ενώ για κύματα με το διάνυσμα πόλωσης κάθετο στο επίπεδο του πλέγματος των ράβδων:

$$\begin{bmatrix} M_{G,G'}^{(3)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{G'}^3 \end{bmatrix} = 0 \quad (2.16)$$

Η επίλυση των εξισώσεων (2.15) και (2.16) με μεθόδους αριθμητικής διαγωνιοποίησης μας δίνει τη δομή ζωνών συχνοτήτων για τον φωνονικό κρύσταλλο. Στην παρούσα διπλωματική εργασία χρησιμοποιήσαμε την υπορουτίνα DGGEV από τη βιβλιοθήκη LAPACK, γραμμένη σε γλώσσα Fortran.

2.3. Αριθμητικοί Υπολογισμοί για τους συντελεστές Fourier

Γενικά, οι συντελεστές Fourier ρ_G και C_G^{ijkl} της εξίσωσης (2.5) και (2.6) μπορούν να εκφραστούν ως [5, 6, 7, 8, 9, 10]:

$$a_G = \begin{cases} a_A f + a_B(1 - f) & \text{για } G=0 \\ (a_A - a_B)F_G & \text{για } G \neq 0 \end{cases} \quad (2.17)$$

με $a_G = (\rho, C^{ijkl})$

a_A : συνάρτηση α του υλικού A

a_B : συνάρτηση α του υλικού B

f : ποσοστό κατάληψης (κλάσμα πλήρωσης)

Το ποσοστό κατάληψης f είναι το πηλίκο της επιφάνειας της διατομής της ράβδου προς το συνολικό εμβαδόν της κυψελίδας. Για την συγκεκριμένη διπλωματική όπου ο φωνονικός κρύσταλλος είναι δισδιάστατος, η μοναδιαία κυψελίδα B είναι τετραγωνική και το υλικό A είναι μια ράβδος τετραγωνικής διατομής, θα ισχύει:

$$f = \frac{\text{εμβαδόν A}}{\text{εμβαδόν B}} = \frac{L^2}{a^2} \quad (2.18)$$

με a : μήκος της τετράγωνης μοναδιαίας κυψελίδας

L : μήκος της τετραγωνικής διατομής της ράβδου

F_G : συνάρτηση δομής : ορίζεται ως $F_G = A_c^{-1} \int_{A_c} e^{-iGx} d^2x$

Για τετραγωνικής διατομής ράβδους η F_G θα πάρει την μορφή:

$$F_G = 4f \left(\frac{\sin(G_x L/2)}{G_x L} \right) \left(\frac{\sin(G_y L/2)}{G_y L} \right) \quad (2.19)$$

2.4. Πυκνότητα καταστάσεων και αριθμητικός υπολογισμός της

Η πυκνότητα καταστάσεων (Density Of States - DOS) ως συνάρτηση της συχνότητας ω μπορεί να υπολογιστεί από το άθροισμα όλων των συχνοτήτων του κυματανύσματος k χρησιμοποιώντας την εξίσωση[11]:

$$DOS(\omega) = \frac{1}{N_k} \sum_k \delta(\omega - \omega_k) \quad (2.20)$$

όπου N_k : Ο συνολικός αριθμός των κυματανυσμάτων Bloch εντός της πρώτης ζώνης Brillouin που λαμβάνουμε υπόψη στον υπολογισμό της πυκνότητας καταστάσεων.

Η συνάρτηση δέλτα, $\delta(x)$, μας δίνει την $DOS(\omega)$ σαν ένα ιστόγραμμα. Αυτό μειώνει αρκετά την ακρίβεια των υπολογισμών μας. Για να αντιμετωπίσουμε αυτό το πρόβλημα, αντικαθιστούμε την συνάρτηση $\delta(x)$ με την παρακάτω Gaussian κατανομή:

$$\delta(x) = \frac{e^{-x^2/2\sigma^2}}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \quad (2.21)$$

με

$$x = \omega - \omega_k^\lambda \quad (2.22)$$

και ω_k^λ : είναι η τιμή της λ -οστής ζώνης συχνοτήτων για το κυματάνυσμα k .

Επίσης, για να μειώσουμε τον χρόνο υπολογισμού της $DOS(\omega)$ λαμβάνουμε υπ' όψιν ότι τα σημεία κοντά στις άκρες της Gaussian κατανομής είναι πολύ λιγότερης σημασίας από αυτά στην μέση της, με την λογική ότι έχουν πολύ μικρότερο πληθυσμό. Μειώνουμε τον χρόνο υπολογισμού της $DOS(\omega)$ με το να αγνοούμε τους υπολογισμούς έξω από το εύρος 6σ .

Για την δημιουργία της DOS χρειαζόμαστε μια λίστα από κυματανύσματα τα οποία να καλύπτουν όλο το φάσμα των σημείων k της πρώτης ζώνης Brillouin. Για αυτό τον λόγο στον κώδικα που χρησιμοποιήθηκε για τον υπολογισμό της DOS προστέθηκε μία υπορουτίνα που έφτιαξε κυματανύσματα τέτοια ώστε να γεμίζουν την πρώτη ζώνη Brillouin.

Η υπορουτίνα αυτή διαιρεί τα διανύσματα του αντίστροφου πλέγματος σε n τμήματα και δημιουργεί αχέραια πολλαπλάσια του κάθε τμήματος σε όλες τις κατευθύνσεις όπως φαίνεται στο σχήμα 2.1. Έτσι δημιουργεί μία κυβική διάταξη διανυσμάτων διατεταγμένα σε μια γραμμική λίστα. Αυτή η λίστα των κυματανυσμάτων χρησιμοποιείται για την δημιουργία της Χαμιλτονιανής μήτρας για τον υπολογισμό της DOS.

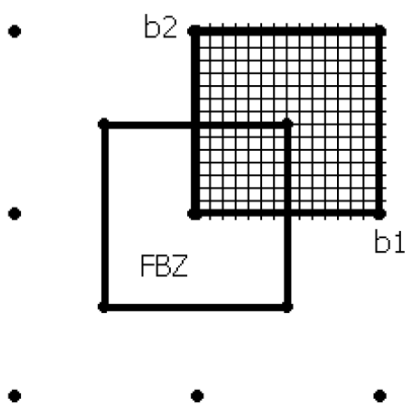
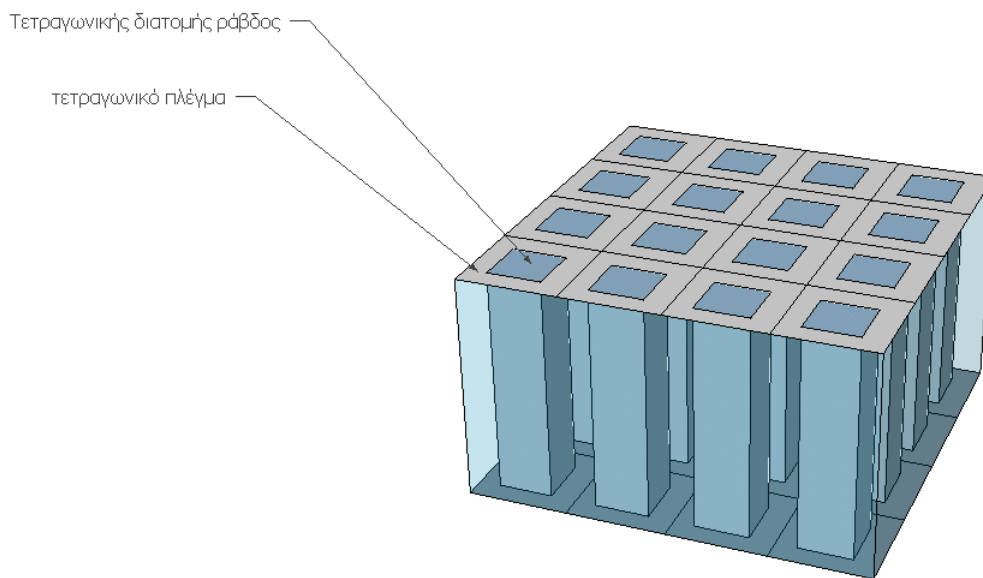


Figure 2.1.: Πλέγμα k που δημιουργείται μέσα στην αντεστραμμένη μοναδιαία κυψελίδα με την ίδια επιφάνεια και άρα τον ίδιο αριθμό κυματανυσμάτων της πρώτης ζώνης Brillouin.[11]

3. Αποτελέσματα

3.1. Παρουσίαση αποτελεσμάτων

Στην παρούσα διπλωματική υπολογίζουμε ζώνες συχνοτήτων δισδιάστατων φωνονικών κρυστάλλων με τη μέθοδο των επίπεδων κυμάτων όπως ακριβώς παραπέμπει ο τίτλος. Υπολογίστηκαν οι ζώνες συχνοτήτων για δύο δισδιάστατους φωνονικούς κρυστάλλους, τετραγωνικής διατομής ράβδοι μολύβδου ενσωματωμένες σε τετραγωνικό πλέγμα από εποξειδική ρητίνη (Pb - epoxy: φωνονικός κρύσταλλος P_1) και τετραγωνικής διατομής ράβδοι ατσάλιου ενσωματωμένοι σε τετραγωνικό πλέγμα σιλικόνης (Steel - Silicon Rubber: φωνονικός κρύσταλλος P_2) (εικόνα 3.1). Στον παρακάτω πίνακα αναφέρονται οι ελαστικές ιδιότητες των τεσσάρων υλικών.



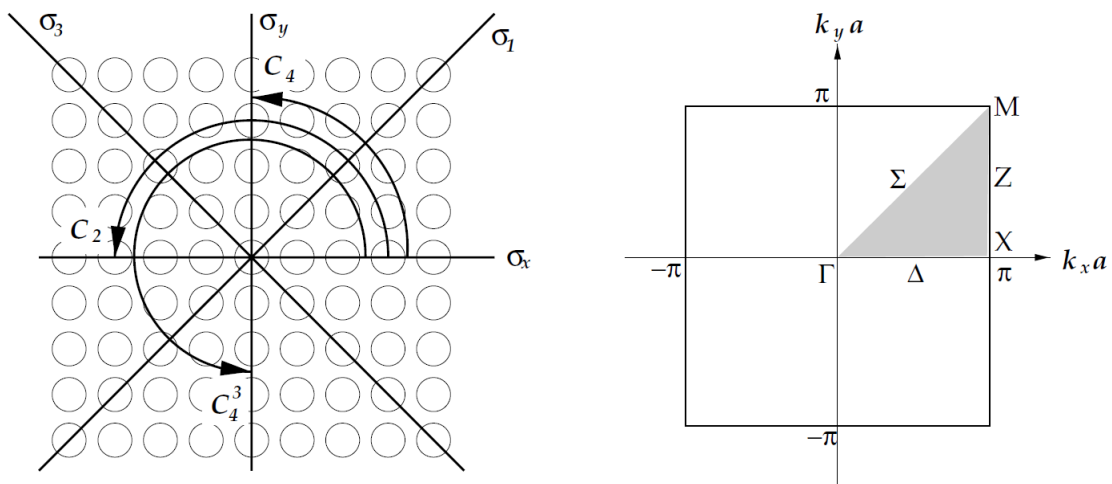
Εικόνα 3.1.: Δισδιάστατος φωνονικός κρύσταλλος: Τετραγωνικής διατομής ράβδοι ενσωματωμένες σε τετραγωνικό πλέγμα.

Εξαιτίας της υψηλής συμμετρίας του δισδιάστατου τετραγωνικού πλέγματος, άρα και του δισδιάστατου αντίστροφου τετραγωνικού πλέγματος, υπολογίστηκαν οι συχνότητες για το μη αναγωγίσιμο τμήμα της πρώτης ζώνης Brillouin, όπως φαίνεται στο σχήμα 3.2 [12]. Το μη αναγωγίσιμο τμήμα για την τετραγωνική κυψελίδα είναι ένα τρίγωνο με κορυφές Γ , X και M . Το δισδιάστατο αντίστροφο τετραγωνικό πλέγμα παρουσιάζει τις

Material	Density ($\frac{kg}{m^3}$)	Elastic Constant $C_{11}(\frac{N}{m^2})$	Elastic Constant $C_{44}(\frac{N}{m^2})$
Pb	11600	$7.21 \cdot 10^{10}$	$1.49 \cdot 10^{10}$
Epoxy	1180	$0.761 \cdot 10^{10}$	$0.159 \cdot 10^{10}$
Steel	7780	$2.6398 \cdot 10^{11}$	$8.1017 \cdot 10^{10}$
Sillicon Rubber	1300	$1.3 \cdot 10^9$	$3.9325 \cdot 10^4$

Πίνακας I.: Οι ελαστικές ιδιότητες των υλικών που χρησιμοποιήθηκαν.

κατοπτρικές $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_1, \sigma_3$ και περιστροφικές C_4, C_2, C_4^3 συμμετρίες όπως παρουσιάζεται στο σχήμα 3.2. Οι υπολογισμοί των συχνοτήτων για το μη αναγωγίσιμο τμήμα ΓΧΜ θα είναι αρκετοί για να καλύψουμε όλο το φάσμα της πρώτης ζώνης Brillouin χρησιμοποιώντας τις παραπάνω συμμετρίες.



Εικόνα 3.2.: Αριστερά: Τα είδη συμμετρίας για το δισδιάστατο τετραγωνικό πλέγμα. Δεξιά: Το μη αναγωγίσιμο τμήμα που έλαβαν μέρος οι υπολογισμοί σε σύγκριση με ολόκληρη την πρώτη ζώνη Brillouin για το δισδιάστατο αντίστροφο πλέγμα.

Οι μετασχηματισμοί συμμετριών για το δισδιάστατο τετραγωνικό πλέγμα παρουσιάζονται στο παράρτημα Α.2.

Τα σημεία $\Gamma, X, M, \Delta, Z, \Sigma$ του σχήματος 3.2 είναι σημεία υψηλής συμμετρίας της πρώτης ζώνης Brillouin:

1. $\Gamma = (0, 0)$, το οποίο παρουσιάζει τις συμμετρίες $E, C_4, C_2, C_4^3, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_1, \sigma_3$
2. $X = (\frac{\pi}{a}, 0)$, το οποίο παρουσιάζει τις συμμετρίες $E, C_2, \sigma_x, \sigma_y$
3. $M = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$, το οποίο παρουσιάζει τις συμμετρίες $E, C_4, C_2, C_4^3, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_1, \sigma_3$
4. $\Delta = (k_x, 0)$, για $0 < k < \frac{\pi}{a}$, το οποίο παρουσιάζει τις συμμετρίες E, σ_x
5. $Z = (\frac{\pi}{a}, k_y)$, για $0 < k < \frac{\pi}{a}$, το οποίο παρουσιάζει τις συμμετρίες E, σ_1

3.1 Παρουσίαση αποτελεσμάτων

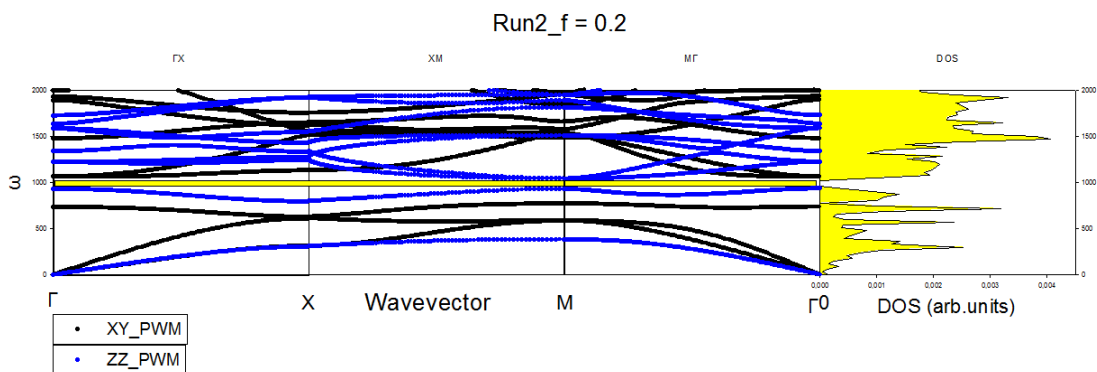
6. $\Sigma = (k_x, k_y)$, για $0 < k < \frac{\pi}{a}$, το οποίο παρουσιάζει τις συμμετρίες E, σ_y

Οι υπολογισμοί στο μη αναγωγίσιμο τμήμα των ζωνών Brillouin έγιναν στις ομάδες σημείων Δ, Z και Σ σαρώνοντας τα κυματανύσματα στις αντίστοιχες κατευθύνσεις $\Gamma X, XM$ και $M\Gamma$. Η διαδικασία επαναλήφθηκε και για τους 20 υπολογισμούς που έλαβαν χώρα.

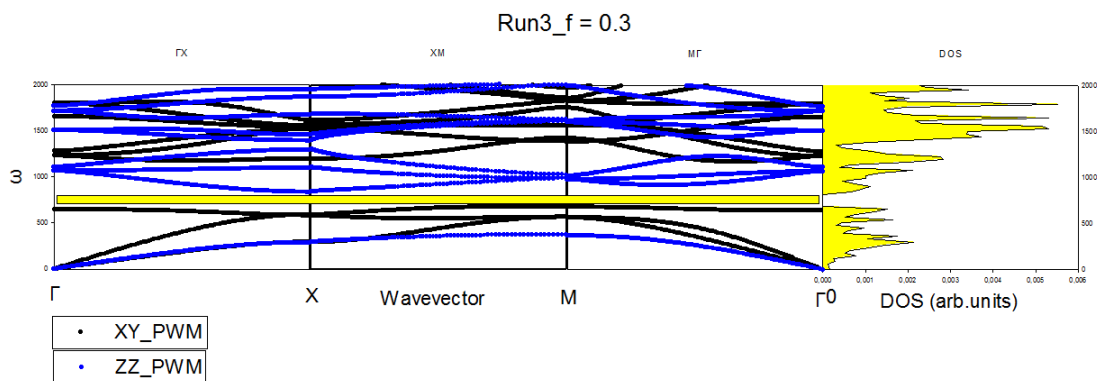
Πραγματοποιήθηκαν 10 υπολογισμοί για κάθε φωνονικό κρύσταλλο, αλλάζοντας μόνο το κλάσμα πλήρωσης f από 0.1 με βήμα 0.1 έως την τιμή 1.

Βρέθηκαν φωνονικά χάσματα σε οκτώ περιπτώσεις, τέσσερις για τον φωνονικό κρύσταλλο P_1 (Pb - epoxy) και άλλες τέσσερις για τον φωνονικό κρύσταλλο P_2 (Steel - Silicon Rubber).

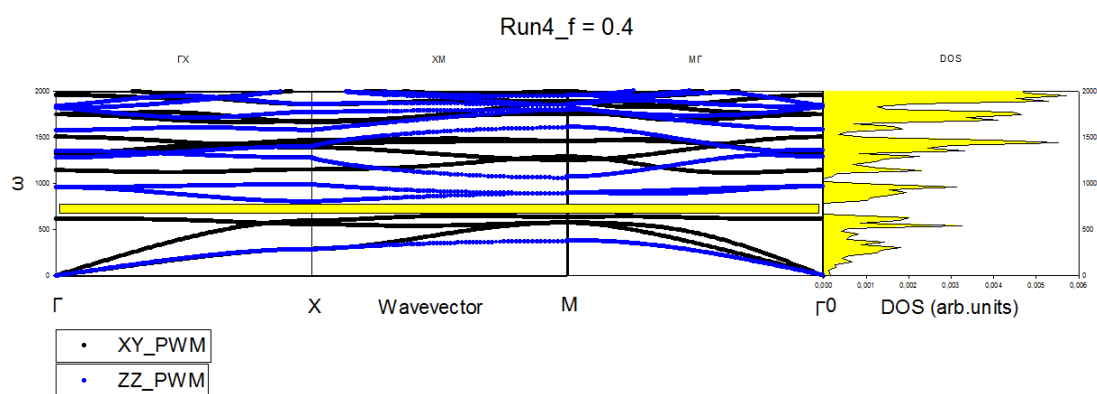
Για τον P_1 φωνονικό κρύσταλλο, φωνονικά χάσματα βρέθηκαν για τις τιμές του $f = 0.2, 0.3, 0.4$ και 0.5 .



Εικόνα 3.3.: Δομή των ζωνών συχνοτήτων και αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων (DOS) για ένα τετραγωνικό πλέγμα από ράβδους μολύβδου τετραγωνικής διατομής, εμβαπτισμένες σε εποξειδική ρητίνη, με ποσοστό κάλυψης επιφάνειας $f = 0.2$

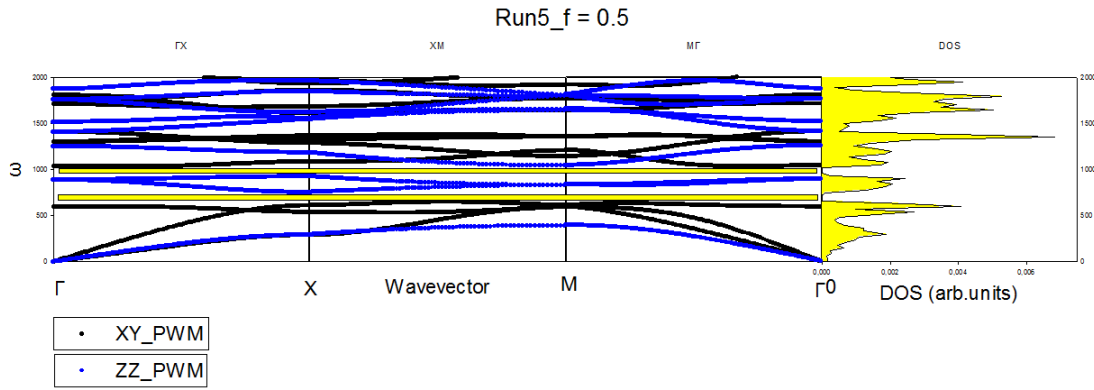


Εικόνα 3.4.: Δομή των ζωνών συχνοτήτων και αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων (DOS) για ένα τετραγωνικό πλέγμα από ράβδους μολύβδου τετραγωνικής διατομής, εμβαπτισμένες σε εποξειδική ρητίνη, με ποσοστό κάλυψης επιφάνειας $f = 0.3$



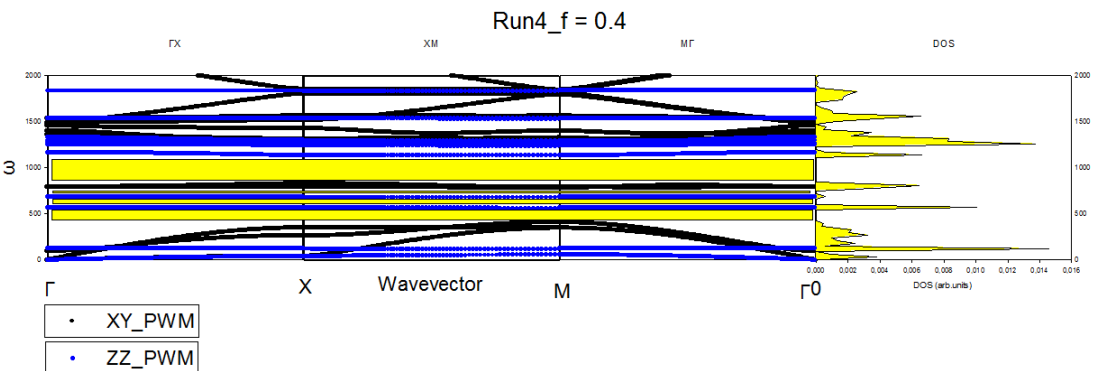
Εικόνα 3.5.: Δομή των ζωνών συχνοτήτων και αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων (DOS) για ένα τετραγωνικό πλέγμα από ράβδους μολύβδου τετραγωνικής διατομής, εμβαπτισμένες σε εποξειδική ρητίνη, με ποσοστό κάλυψης επιφάνειας $f = 0.4$

3.1 Παρουσίαση αποτελεσμάτων

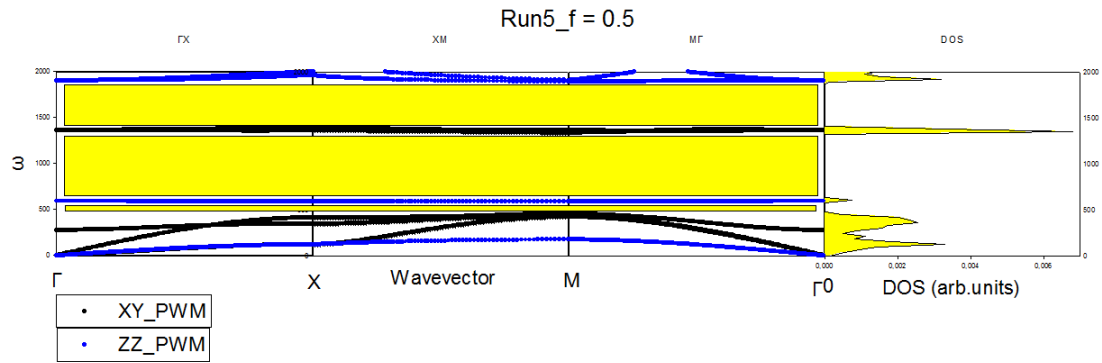


Εικόνα 3.6.: Δομή των ζωνών συχνοτήτων και αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων (DOS) για ένα τετραγωνικό πλέγμα από ράβδους μολύβδου τετραγωνικής διατομής, εμβαπτισμένες σε εποξειδική ρητίνη, με ποσοστό κάλυψης επιφάνειας $f = 0.5$

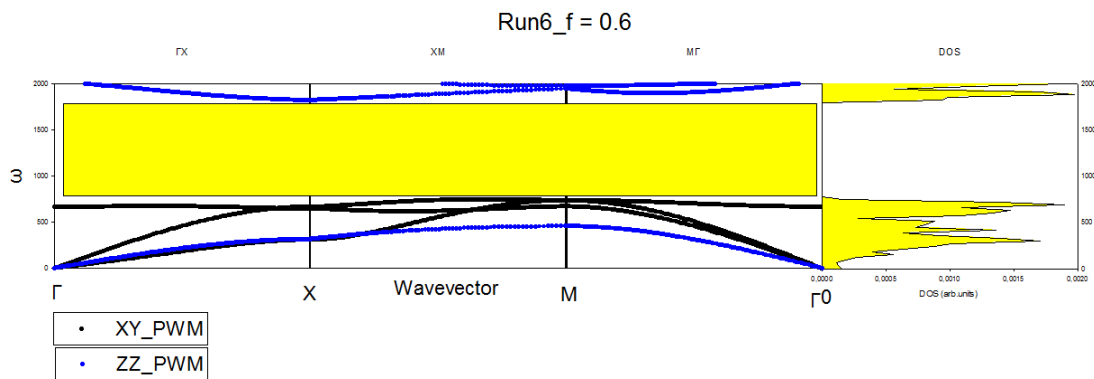
Και για το σύστημα τετραγωνικής διατομής ράβδων ατσάλιου εμβαπτισμένα σε σιλικόνη, φωνονικά χάσματα βρέθηκαν στις τιμές του $f = 0.4, 0.5, 0.6, 0.7$.



Εικόνα 3.7.: Δομή των ζωνών συχνοτήτων και αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων (DOS) για ένα τετραγωνικό πλέγμα από ράβδους ατσάλιου τετραγωνικής διατομής, εμβαπτισμένες σε σιλικόνη, με ποσοστό κάλυψης επιφάνειας $f = 0.4$

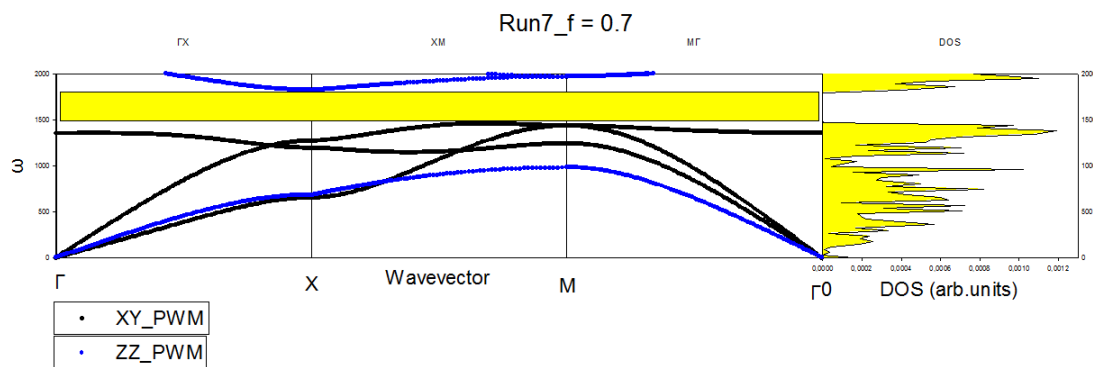


Εικόνα 3.8.: Δομή των ζωνών συχνοτήτων και αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων (DOS) για ένα τετραγωνικό πλέγμα από ράβδους ατσαλιού τετραγωνικής διατομής, εμβαπτισμένες σε σιλικόνη, με ποσοστό κάλυψης επιφάνειας $f = 0.5$



Εικόνα 3.9.: Δομή των ζωνών συχνοτήτων και αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων (DOS) για ένα τετραγωνικό πλέγμα από ράβδους ατσαλιού τετραγωνικής διατομής, εμβαπτισμένες σε σιλικόνη, με ποσοστό κάλυψης επιφάνειας $f = 0.6$

3.1 Παρουσίαση αποτελεσμάτων



Εικόνα 3.10.: Δομή των ζωνών συχνοτήτων και αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων (DOS) για ένα τετραγωνικό πλέγμα από ράβδους ατσαλιού τετραγωνικής διατομής, εμβαπτισμένες σε σιλικόνη, με ποσοστό κάλυψης επιφάνειας $f = 0.7$

Τα μαύρα σημεία είναι οι υπολογισμοί των κυμάτων όταν η πόλωση βρίσκεται στο επίπεδο των ράβδων (XY_PWM), ενώ τα μπλε σημεία οι υπολογισμοί των κυμάτων όπου η πόλωση είναι κάθετη στο επίπεδο των ράβδων. (ZZ_PWM).

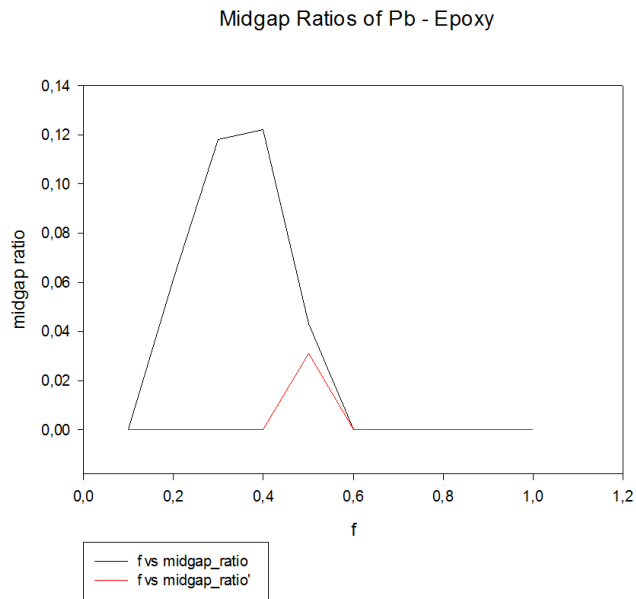
Όλοι οι υπολογισμοί αναφέρονται στο παράρτημα Α.3.

Από τα φωνονικά χάσματα υπολογίστηκε το εύρος του χάσματος (MGR: midgap ratio):

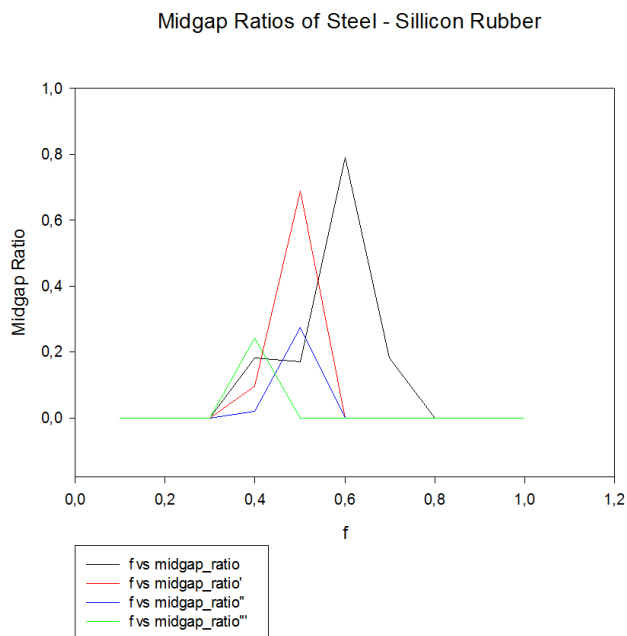
$$MGR = \frac{\Delta\omega}{\omega_{gap}} \quad (3.1)$$

με: $\Delta\omega = \omega_2 - \omega_1$ και $\omega_{gap} = \frac{\omega_2 + \omega_1}{2}$

Το MGR για τον φωνονικό κρύσταλλο P_1 υπολογίστηκε:



Εικόνα 3.11.: Η συχνότητα μέσου χάσματος (MGR: midgap ratio) του Pb - Epoxy και για τον φωνονικό κρύσταλλο P_2 :



Εικόνα 3.12.: Η συχνότητα μέσου χάσματος (MGR: midgap ratio) του Steel - Silicon Rubber

Το μαύρο διάγραμμα είναι τα MGR των πρώτων χασμάτων, το κόκκινο διάγραμμα είναι τα MGR των δεύτερων χασμάτων, και αντίστοιχα το μπλε και πράσινο διάγραμμα είναι

3.1 Παρουσίαση αποτελεσμάτων

τα MGR των τρίτων και τέταρτων χασμάτων που υπολογίστηκαν (όπου η σειρά των χασμάτων αναφέρεται στην ταξινόμησή τους σύμφωνα με τη συχνότητα που αντιστοιχεί στο μέσο κάθε χάσματος).

Αναλυτικά τα MGR των χασμάτων παρουσιάζονται στους δύο παρακάτω πίνακες.

f	MGR	MGR'
0.1	0	0
0.2	0.061	0
0.3	0.118	0
0.4	0.122	0
0.5	0.043	0.031
0.6	0	0
0.7	0	0
0.8	0	0
0.9	0	0
1	0	0

Πίνακας II.: Αναλυτικά τα MGR και MGR' για κάθε μέτρηση του Pb - Epoxy

f	MGR	MGR'	MGR''	MGR'''
0.1	0	0	0	0
0.2	0	0	0	0
0.3	0	0	0	0
0.4	0.182	0.095	0.02	0.242
0.5	0.171	0.688	0.275	0
0.6	0.791	0	0	0
0.7	0.182	0	0	0
0.8	0	0	0	0
0.9	0	0	0	0
1	0	0	0	0

Πίνακας III.: Αναλυτικά τα MGR, MGR', MGR'' και MGR''' για κάθε μέτρηση του Steel - Silicon Rubber

3.2. Συμπεράσματα

Στην παρούσα διπλωματική μελετήθηκαν φωνονικά χάσματα σε τετραγωνικής διατομής ράβδους μολύβδου ενσωματωμένες σε τετραγωνικό πλέγμα από εποξειδική ρητίνη (φωνονικός κρύσταλλος P_1) και τετραγωνικής διατομής ράβδους ατσαλιού ενσωματωμένες σε τετραγωνικό πλέγμα σιλικόνης (φωνονικός κρύσταλλος P_2). Για τον υπολογισμό των φωνονικών ζωνών χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος των επίπεδων κυμάτων, ενώ παράλληλα υπολογίστηκε και η αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων για τον προσδιορισμό των φωνονικών χασμάτων.

Παρατηρήθηκε ότι τα φωνονικά χάσματα βρίσκονται σε τιμές του κλάσματος πλήρωσης $f \simeq 0.5$, κάτι που είναι και αναμενόμενο διότι τα φωνονικά χάσματα δημιουργούνται λόγω των διαφορών στις ταχύτητες διάδοσης των κυμάτων στα δύο διαφορετικά υλικά από τα οποία κατασκευάζεται ο φωνονικός κρύσταλλος. Όσο πιο κοντά στις ακραίες του τιμές βρίσκεται το κλάσμα πλήρωσης, τόσο πιο ομοιογενής θα είναι ο κρύσταλλος. Οπότε και ήταν λογικό να μην υπάρχουν φωνονικά χάσματα στις περιπτώσεις κοντά στο $f \rightarrow 0$ και στο $f \rightarrow 1$. Επίσης, παρατηρήθηκε ότι τα χάσματα είναι ευρύτερα στην περίπτωση που το διάνυσμα της πόλωσης των κυμάτων βρίσκεται στο επίπεδο των ράβδων σε σχέση με τα κύματα που έχουν το διάνυσμα πόλωσης κάθετο στο επίπεδο των κυμάτων. Για τον φωνονικό κρύσταλλο P_1 τα φωνονικά χάσματα παρουσιάστηκαν στις τιμές του κλάσματος πλήρωσης $f = 0.2, 0.3, 0.4$ και 0.5 ενώ για τον κρύσταλλο P_2 για τις τιμές $f = 0.4, 0.5, 0.6, 0.7$. Το μεγαλύτερο φωνονικό χάσμα που υπολογίστηκε για το σύστημα μολύβδου - εποξειδικής ρητίνης και αντιστοιχεί για την τιμή του κλάσματος πλήρωσης $f \simeq 0.4$. Ομοίως για το σύστημα ατσαλιού - σιλικόνης το μεγαλύτερο χάσμα εμφανίζεται στην τιμή $f \simeq 0.6$ του κλάσματος πλήρωσης.

Ο φωνονικός κρύσταλλος P_2 παρουσιάζει μεγαλύτερο εύρος χασμάτων σε σχέση με τον κρύσταλλο μολύβδου - εποξειδικής ρητίνης. Επίσης αυτό ήταν αναμενόμενο διότι μεγαλύτερα φωνονικά χάσματα εμφανίζονται όταν υπάρχει μεγάλη αντίθεση στην πυκνότητα και την ελαστική σταθερά C_{44} των υλικών του φωνονικού κρυστάλλου[6]:

$$\Delta\rho_B > \Delta\rho_A \text{ και } \Delta C_{44}^B > \Delta C_{44}^A$$

$$\text{με } \Delta\rho = \rho_b - \rho_a \text{ και } \Delta C_{44} = C_{44}^b - C_{44}^a$$

Παρατηρώντας τις φωνονικές ζώνες του φωνονικού κρυστάλλου P_2 , βλέπουμε ότι οι ζώνες γύρω από τα φωνονικά χάσματα για τιμές του κλάσματος πλήρωσης $f = 0.4$ και 0.5 είναι πιο επίπεδες από τις αντίστοιχες φωνονικές ζώνες για $f = 0.6$ και 0.7 . Αυτό σημαίνει ότι ο φωνονικός κρύσταλλος P_2 είναι πιο ευαίσθητος στις αλλαγές τις ανισοτροπίας του συστήματος για μεγαλύτερες τιμές του κλάσματος πλήρωσης[8]. Παρατηρώντας τις φωνονικές ζώνες του P_1 δεν παρουσιάστηκε διαφοροποίηση στην ομαλότητα των φωνονικών ζωνών.

Τέλος, εξετάσαμε το midgap ratio των φωνονικών κρυστάλλων. Από τις εικόνες 3.11 και 3.12 παρατηρούμε ότι τα MGR του φωνονικού κρυστάλλου P_2 παρουσιάζουν πολύ μεγαλύτερες τιμές από τα MGR του P_1 .

Τα αποτελέσματα αυτής της διπλωματικής μπορούν να χρησιμοποιηθούν για θεωρητικούς ή πειραματικούς υπολογισμούς φωνονικών κρυστάλλων P_1 και P_2 .

Ευχαριστίες

Επιθυμώ να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα της παρούσης διπλωματικής εργασίας καθηγητή Β. Γιαννόπαπα για την στήριξη και υπομονή που μου έδειξε στα πλαίσια της παρούσας διπλωματικής αλλά και για την ευκαιρία που μου έδωσε να ξεπεράσω τα όρια μου προχωρώντας με πέρα από αυτά.

A. Παράρτημα

A.1. Προσδιορισμός των 27 μητρών της εξίσωσης 2.8

Για τις παρακάτω εξισώσεις αντικαθιστάται ο συμβολισμός του $C_{\bar{G}}^{ijkl}$ σε C_G^{IJ} .

$$M_{G,G'}^{(1)} = \begin{bmatrix} \omega^2 \rho_{G-G'} \\ -(G_x + k_x)(G'_x + k_x)C_{G-G'}^{11} - (G_x + k_x)(G'_y + k_y)C_{G-G'}^{16} \\ -(G_y + k_y)(G'_x + k_x)C_{G-G'}^{16} - (G_y + k_y)(G'_y + k_y)C_{G-G'}^{66} \end{bmatrix} \quad (\text{A.1})$$

$$M_{G,G'}^{(2)} = \begin{bmatrix} \omega^2 \rho_{G-G'} \\ -(G_x + k_x)(G'_x + k_x)C_{G-G'}^{66} - (G_x + k_x)(G'_y + k_y)C_{G-G'}^{26} \\ -(G_y + k_y)(G'_x + k_x)C_{G-G'}^{26} - (G_y + k_y)(G'_y + k_y)C_{G-G'}^{22} \end{bmatrix} \quad (\text{A.2})$$

$$M_{G,G'}^{(3)} = \begin{bmatrix} \omega^2 \rho_{G-G'} \\ -(G_x + k_x)(G'_x + k_x)C_{G-G'}^{55} - (G_x + k_x)(G'_y + k_y)C_{G-G'}^{45} \\ -(G_y + k_y)(G'_x + k_x)C_{G-G'}^{45} - (G_y + k_y)(G'_y + k_y)C_{G-G'}^{44} \end{bmatrix} \quad (\text{A.3})$$

$$S_{G,G'}^{(1)} = \begin{bmatrix} -(G_x + k_x)C_{G-G'}^{15} - (G_y + k_y)C_{G-G'}^{56} \\ -(G'_x + k_x)C_{G-G'}^{15} - (G'_y + k_y)C_{G-G'}^{56} \end{bmatrix} \quad (\text{A.4})$$

$$S_{G,G'}^{(2)} = \begin{bmatrix} -(G_x + k_x)C_{G-G'}^{46} - (G_y + k_y)C_{G-G'}^{24} \\ -(G'_x + k_x)C_{G-G'}^{46} - (G'_y + k_y)C_{G-G'}^{24} \end{bmatrix} \quad (\text{A.5})$$

$$S_{G,G'}^{(3)} = \begin{bmatrix} -(G_x + k_x)C_{G-G'}^{35} - (G_y + k_y)C_{G-G'}^{34} \\ -(G'_x + k_x)C_{G-G'}^{35} - (G'_y + k_y)C_{G-G'}^{34} \end{bmatrix} \quad (\text{A.6})$$

$$N_{G,G'}^{(1)} = -C_{G-G'}^{55}, N_{G,G'}^{(2)} = -C_{G-G'}^{44}, N_{G,G'}^{(3)} = -C_{G-G'}^{33} \quad (\text{A.7})$$

$$L_{G,G'}^{(1)} = \begin{bmatrix} -(G_x + k_x)(G'_x + k_x)C_{G-G'}^{16} - (G_x + k_x)(G'_y + k_y)C_{G-G'}^{12} \\ -(G_y + k_y)(G'_x + k_x)C_{G-G'}^{66} - (G_y + k_y)(G'_y + k_y)C_{G-G'}^{26} \end{bmatrix} \quad (\text{A.8})$$

$$L_{G,G'}^{(2)} = \begin{bmatrix} -(G_x + k_x)(G'_x + k_x)C_{G-G'}^{16} - (G_x + k_x)(G'_y + k_y)C_{G-G'}^{66} \\ -(G_y + k_y)(G'_x + k_x)C_{G-G'}^{21} - (G_y + k_y)(G'_y + k_y)C_{G-G'}^{26} \end{bmatrix} \quad (\text{A.9})$$

$$O_{G,G'}^{(1)} = \begin{bmatrix} -(G_x + k_x)C_{G-G'}^{14} - (G_y + k_y)C_{G-G'}^{46} \\ -(G'_x + k_x)C_{G-G'}^{56} - (G'_y + k_y)C_{G-G'}^{25} \end{bmatrix} \quad (\text{A.10})$$

$$O_{G,G'}^{(2)} = \begin{bmatrix} -(G_x + k_x)C_{G-G'}^{56} - (G_y + k_y)C_{G-G'}^{25} \\ -(G'_x + k_x)C_{G-G'}^{14} - (G'_y + k_y)C_{G-G'}^{46} \end{bmatrix} \quad (\text{A.11})$$

$$T_{G,G'}^{(1)} = -C_{G-G'}^{45}, T_{G,G'}^{(2)} = -C_{G-G'}^{45} \quad (\text{A.12})$$

$$U_{G,G'}^{(1)} = \begin{bmatrix} -(G_x + k_x)(G'_x + k_x)C_{G-G'}^{15} - (G_x + k_x)(G'_y + k_y)C_{G-G'}^{14} \\ -(G_y + k_y)(G'_x + k_x)C_{G-G'}^{56} - (G_y + k_y)(G'_y + k_y)C_{G-G'}^{46} \end{bmatrix} \quad (\text{A.13})$$

$$U_{G,G'}^{(2)} = \begin{bmatrix} -(G_x + k_x)(G'_x + k_x)C_{G-G'}^{56} - (G_x + k_x)(G'_y + k_y)C_{G-G'}^{46} \\ -(G_y + k_y)(G'_x + k_x)C_{G-G'}^{25} - (G_y + k_y)(G'_y + k_y)C_{G-G'}^{24} \end{bmatrix} \quad (\text{A.14})$$

$$K_{G,G'}^{(1)} = \begin{bmatrix} -(G_x + k_x)C_{G-G'}^{13} - (G_y + k_y)C_{G-G'}^{36} \\ -(G'_x + k_x)C_{G-G'}^{55} - (G'_y + k_y)C_{G-G'}^{45} \end{bmatrix} \quad (\text{A.15})$$

$$K_{G,G'}^{(2)} = \begin{bmatrix} -(G_x + k_x)C_{G-G'}^{36} - (G_y + k_y)C_{G-G'}^{23} \\ -(G'_x + k_x)C_{G-G'}^{45} - (G'_y + k_y)C_{G-G'}^{44} \end{bmatrix} \quad (\text{A.16})$$

$$V_{G,G'}^{(1)} = -C_{G-G'}^{35}, V_{G,G'}^{(2)} = -C_{G-G'}^{34} \quad (\text{A.17})$$

$$W_{G,G'}^{(1)} = \begin{bmatrix} -(G_x + k_x)(G'_x + k_x)C_{G-G'}^{15} - (G_x + k_x)(G'_y + k_y)C_{G-G'}^{56} \\ -(G_y + k_y)(G'_x + k_x)C_{G-G'}^{14} - (G_y + k_y)(G'_y + k_y)C_{G-G'}^{46} \end{bmatrix} \quad (\text{A.18})$$

$$W_{G,G'}^{(2)} = \begin{bmatrix} -(G_x + k_x)(G'_x + k_x)C_{G-G'}^{56} - (G_x + k_x)(G'_y + k_y)C_{G-G'}^{25} \\ -(G_y + k_y)(G'_x + k_x)C_{G-G'}^{46} - (G_y + k_y)(G'_y + k_y)C_{G-G'}^{24} \end{bmatrix} \quad (\text{A.19})$$

$$J_{G,G'}^{(1)} = \begin{bmatrix} -(G_x + k_x)C_{G-G'}^{55} - (G_y + k_y)C_{G-G'}^{45} \\ -(G'_x + k_x)C_{G-G'}^{13} - (G'_y + k_y)C_{G-G'}^{36} \end{bmatrix} \quad (\text{A.20})$$

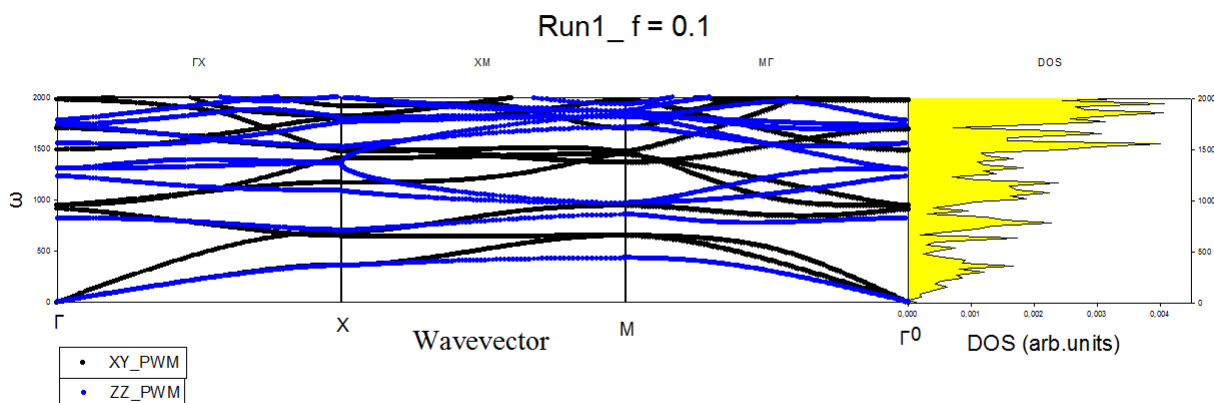
$$J_{G,G'}^{(2)} = \begin{bmatrix} -(G_x + k_x)C_{G-G'}^{45} - (G_y + k_y)C_{G-G'}^{44} \\ -(G'_x + k_x)C_{G-G'}^{36} - (G'_y + k_y)C_{G-G'}^{23} \end{bmatrix} \quad (\text{A.21})$$

$$X_{G,G'}^{(1)} = -C_{G-G'}^{35}, X_{G,G'}^{(2)} = -C_{G-G'}^{34} \quad (\text{A.22})$$

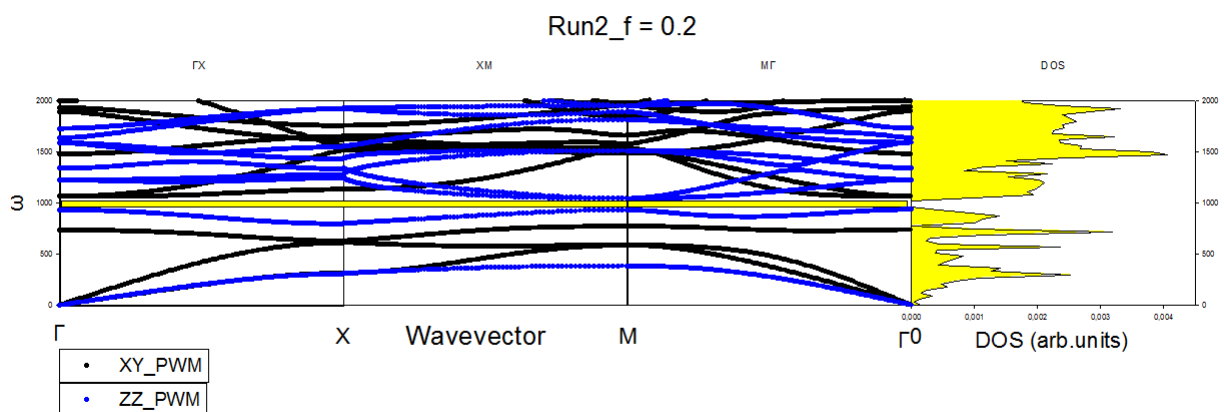
A.2. Μετασχηματισμοί συμμετριών δισδιάστατου τετραγωνικού πλέγματος

E	$(x, y) \rightarrow (x, y)$	E	C_4	C_2	C_4^3	σ_x	σ_y	σ_1	σ_3
C_4	$(x, y) \rightarrow (-y, x)$	C_4	C_2	C_4^3	E	σ_1	σ_3	σ_y	σ_x
C_2	$(x, y) \rightarrow (-x, -y)$	C_2	C_4^3	E	C_4	σ_y	σ_x	σ_3	σ_1
C_4^3	$(x, y) \rightarrow (y, -x)$	C_4^3	E	C_4	C_2	σ_3	σ_1	σ_x	σ_y
σ_x	$(x, y) \rightarrow (x, -y)$	σ_x	σ_3	σ_y	σ_1	E	C_2	C_4^3	C_4
σ_y	$(x, y) \rightarrow (-x, y)$	σ_y	σ_1	σ_x	σ_3	C_2	E	C_4	C_4^3
σ_1	$(x, y) \rightarrow (y, x)$	σ_1	σ_x	σ_3	σ_y	C_4	C_4^3	E	C_2
σ_3	$(x, y) \rightarrow (-y, -x)$	σ_3	σ_y	σ_1	σ_x	C_4^3	C_4	C_2	E

A.3. Μετρήσεις ζωνών συχνοτήτων που υπολογίστηκαν στα πλαίσια της παρούσας διπλωματικής

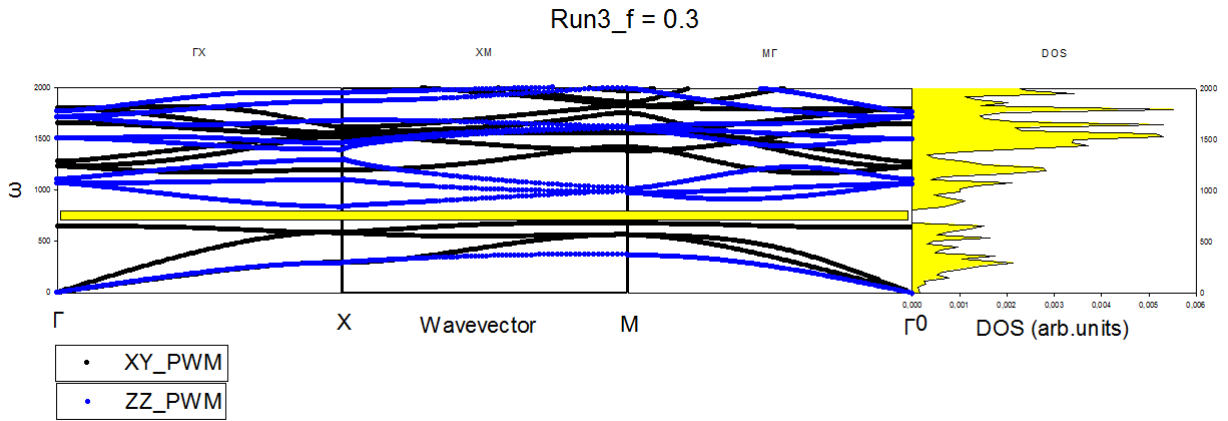


Εικόνα A.1.: Δομή των ζωνών συχνοτήτων και αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων (DOS) για ένα τετραγωνικό πλέγμα από ράβδους μολύβδου τετραγωνικής διατομής, εμβαπτισμένες σε εποξειδική ρητίνη, με ποσοστό κάλυψης επιφάνειας $f = 0.1$

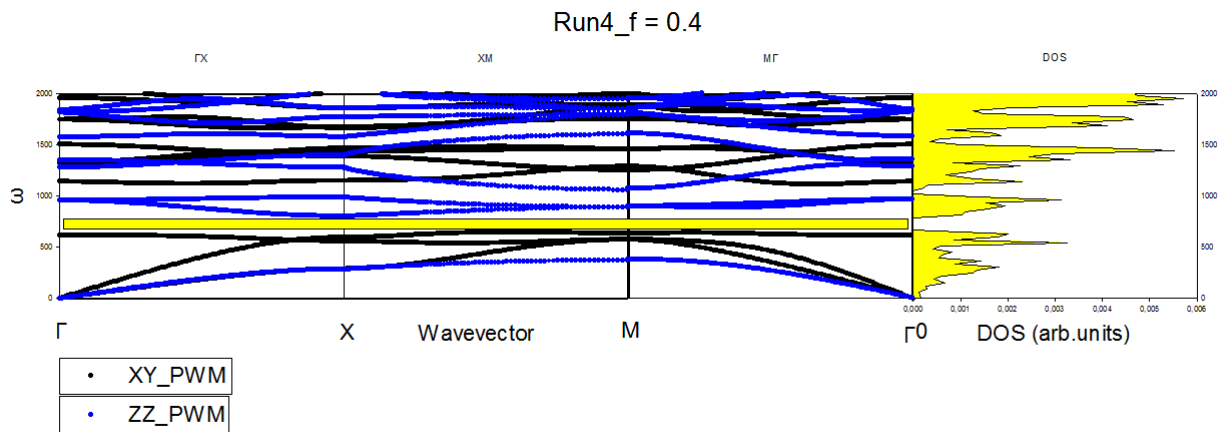


Εικόνα A.2.: Δομή των ζωνών συχνοτήτων και αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων (DOS) για ένα τετραγωνικό πλέγμα από ράβδους μολύβδου τετραγωνικής διατομής, εμβαπτισμένες σε εποξειδική ρητίνη, με ποσοστό κάλυψης επιφάνειας $f = 0.2$

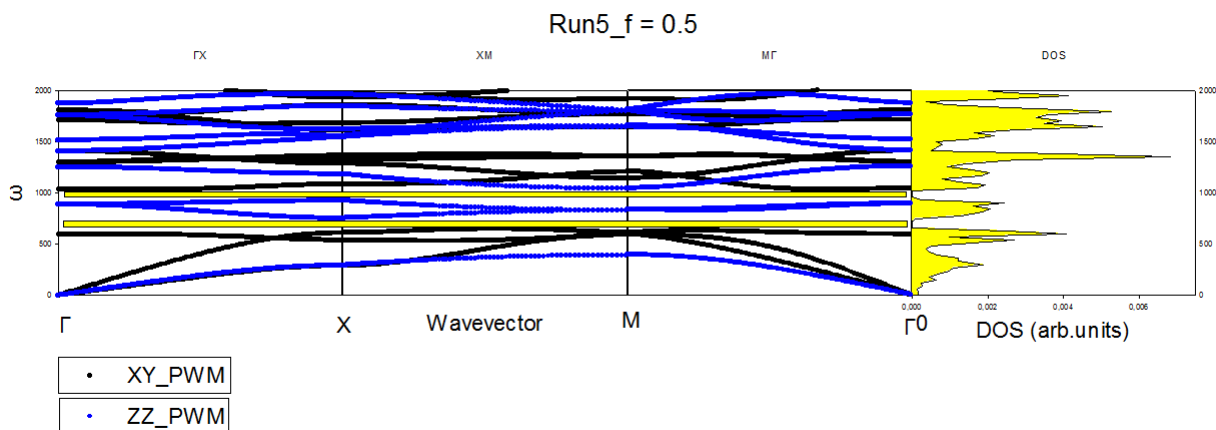
A.3 Μετρήσεις ζωνών συχνοτήτων που υπολογίστηκαν στα πλαίσια της παρούσας διπλωματικής



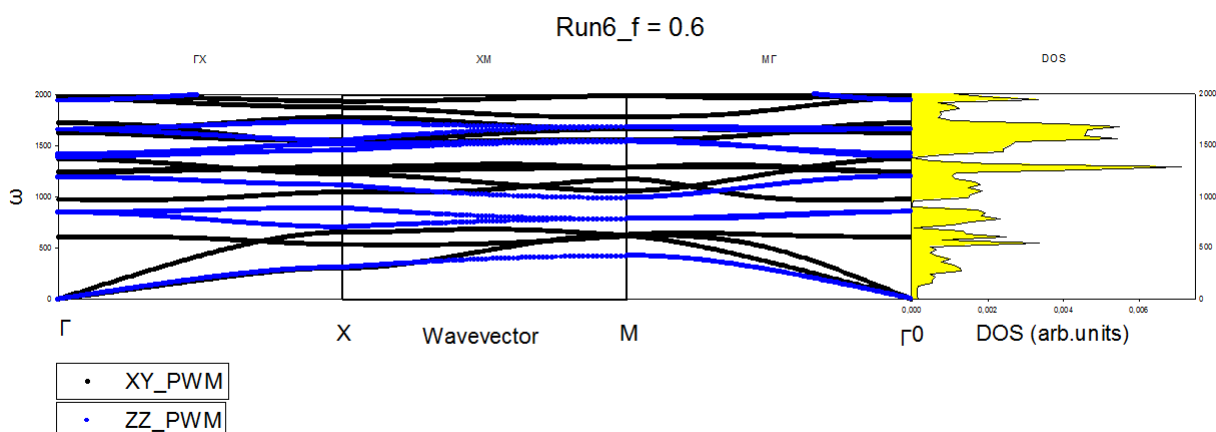
Εικόνα A.3.: Δομή των ζωνών συχνοτήτων και αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων (DOS) για ένα τετραγωνικό πλέγμα από ράβδους μολύβδου τετραγωνικής διατομής, εμβαπτισμένες σε εποξειδική ρητίνη, με ποσοστό κάλυψης επιφάνειας $f = 0.3$



Εικόνα A.4.: Δομή των ζωνών συχνοτήτων και αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων (DOS) για ένα τετραγωνικό πλέγμα από ράβδους μολύβδου τετραγωνικής διατομής, εμβαπτισμένες σε εποξειδική ρητίνη, με ποσοστό κάλυψης επιφάνειας $f = 0.4$

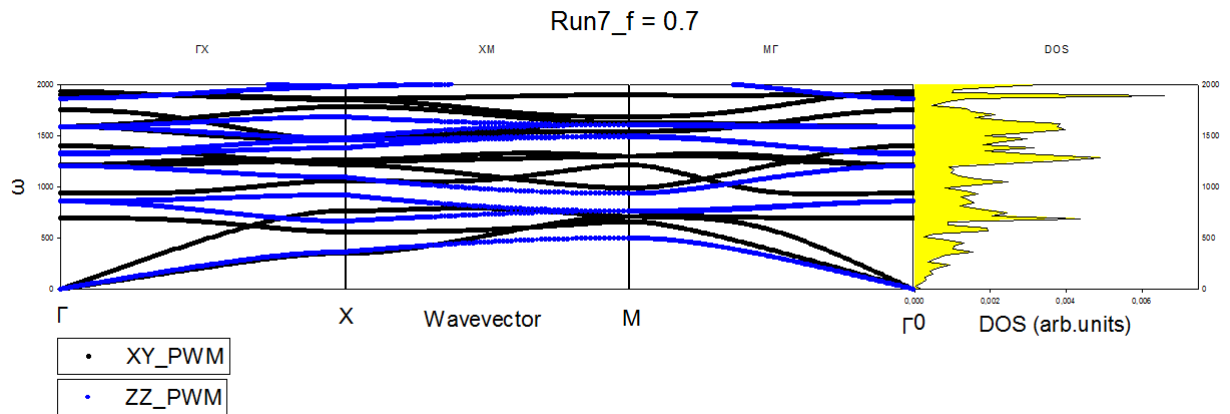


Εικόνα Α.5.: Δομή των ζωνών συχνοτήτων και αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων (DOS) για ένα τετραγωνικό πλέγμα από ράβδους μολύβδου τετραγωνικής διατομής, εμβαπτισμένες σε εποξειδική ρητίνη, με ποσοστό κάλυψης επιφάνειας $f = 0.5$

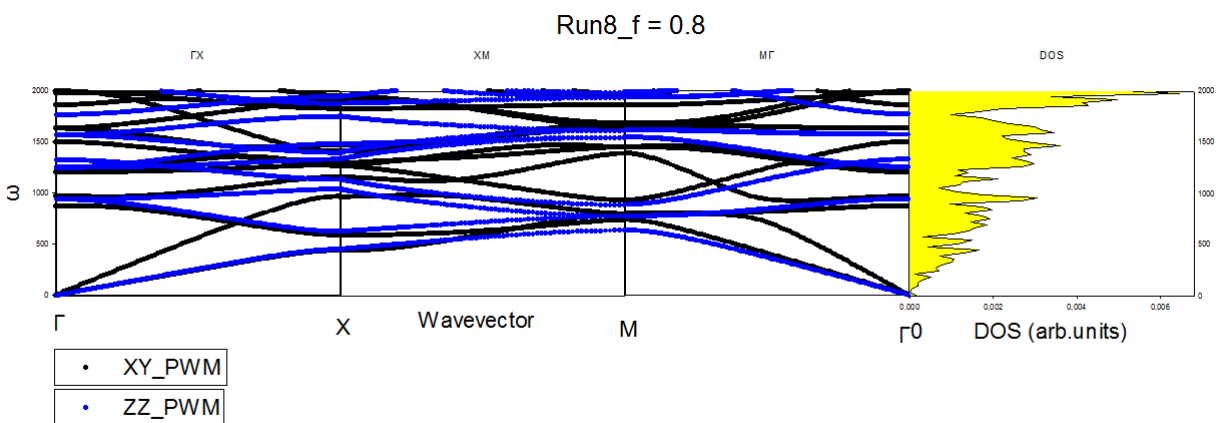


Εικόνα Α.6.: Δομή των ζωνών συχνοτήτων και αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων (DOS) για ένα τετραγωνικό πλέγμα από ράβδους μολύβδου τετραγωνικής διατομής, εμβαπτισμένες σε εποξειδική ρητίνη, με ποσοστό κάλυψης επιφάνειας $f = 0.6$

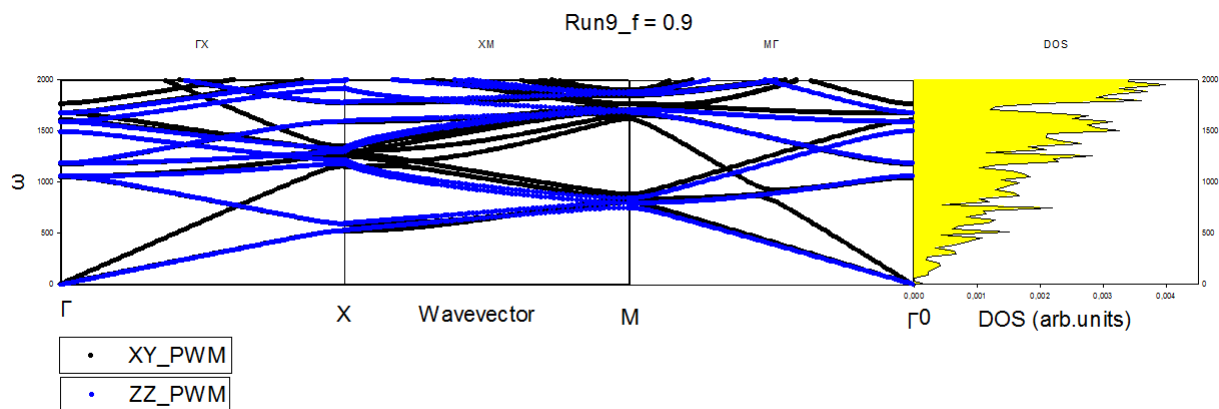
A.3 Μετρήσεις ζωνών συχνοτήτων που υπολογίστηκαν στα πλαίσια της παρούσας διπλωματικής



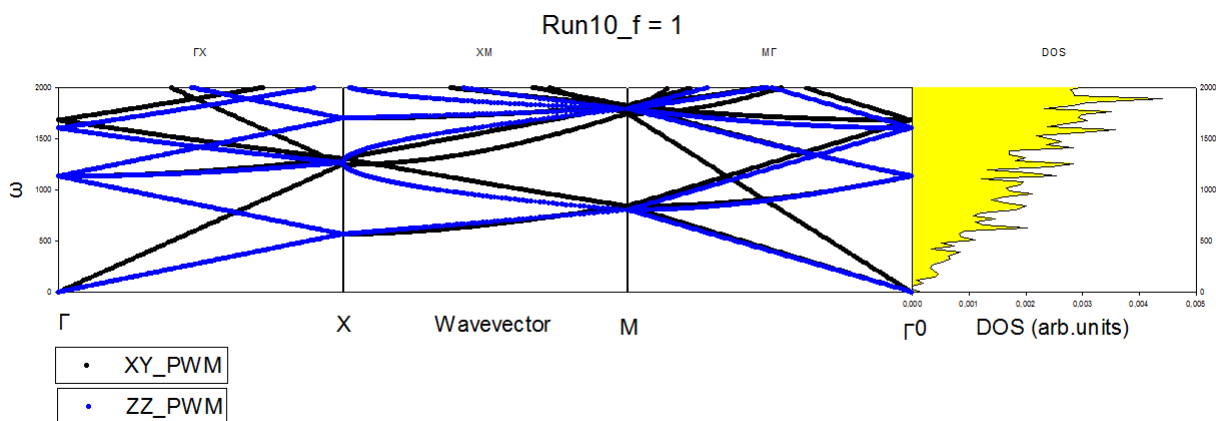
Εικόνα A.7.: Δομή των ζωνών συχνοτήτων και αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων (DOS) για ένα τετραγωνικό πλέγμα από ράβδους μολύβδου τετραγωνικής διατομής, εμβαπτισμένες σε εποξειδική ρητίνη, με ποσοστό κάλυψης επιφάνειας $f = 0.7$



Εικόνα A.8.: Δομή των ζωνών συχνοτήτων και αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων (DOS) για ένα τετραγωνικό πλέγμα από ράβδους μολύβδου τετραγωνικής διατομής, εμβαπτισμένες σε εποξειδική ρητίνη, με ποσοστό κάλυψης επιφάνειας $f = 0.8$

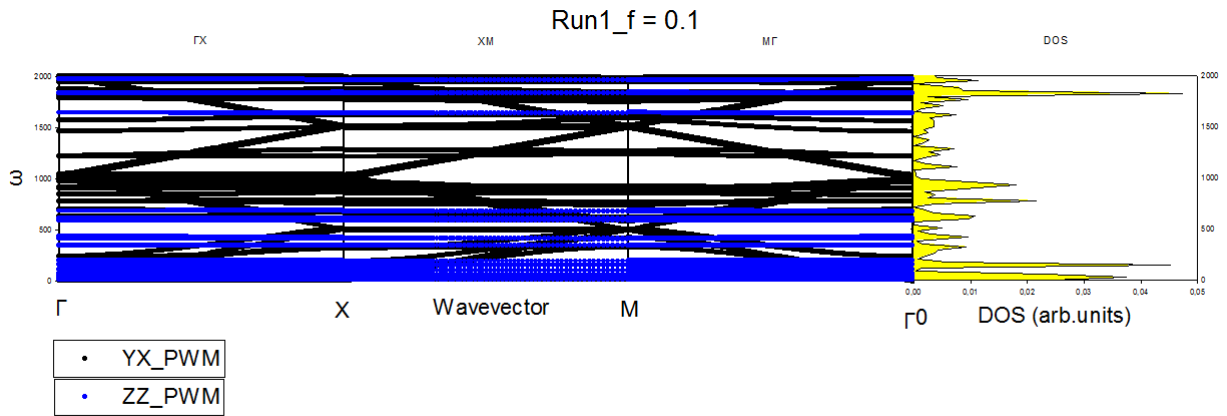


Εικόνα Α.9.: Δομή των ζωνών συχνοτήτων και αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων (DOS) για ένα τετραγωνικό πλέγμα από ράβδους μολύβδου τετραγωνικής διατομής, εμβαπτισμένες σε εποξειδική ρητίνη, με ποσοστό κάλυψης επιφάνειας $f = 0.9$

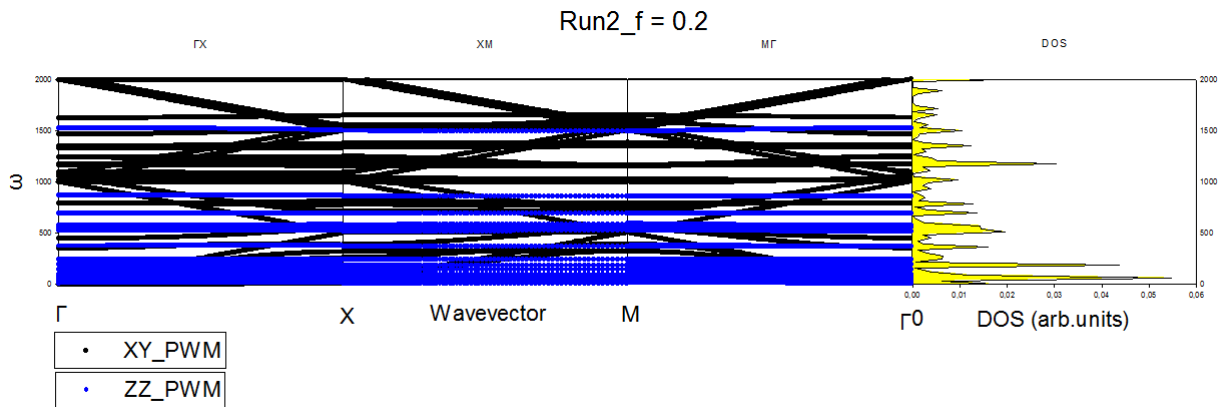


Εικόνα Α.10.: Δομή των ζωνών συχνοτήτων και αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων (DOS) για ένα τετραγωνικό πλέγμα από ράβδους μολύβδου τετραγωνικής διατομής, εμβαπτισμένες σε εποξειδική ρητίνη, με ποσοστό κάλυψης επιφάνειας $f = 1$

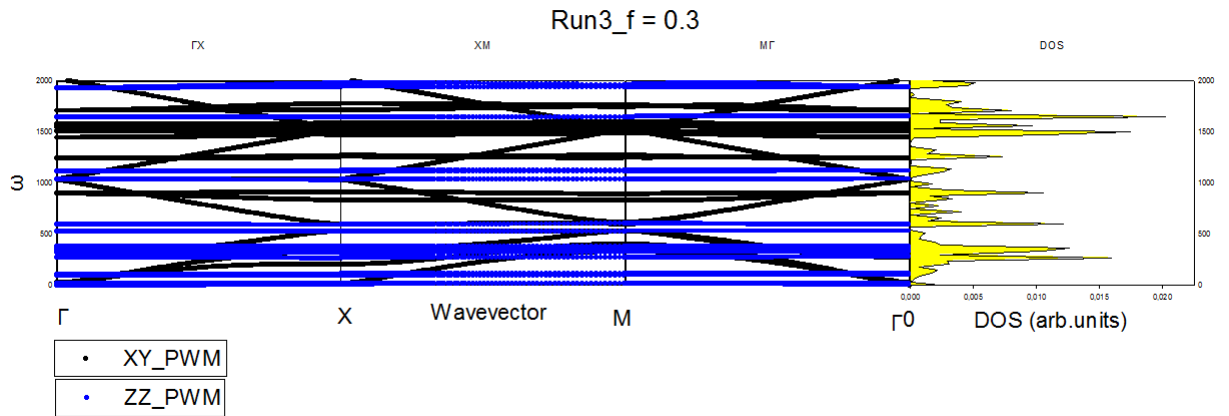
A.3 Μετρήσεις ζωνών συχνοτήτων που υπολογίστηκαν στα πλαίσια της παρούσας διπλωματικής



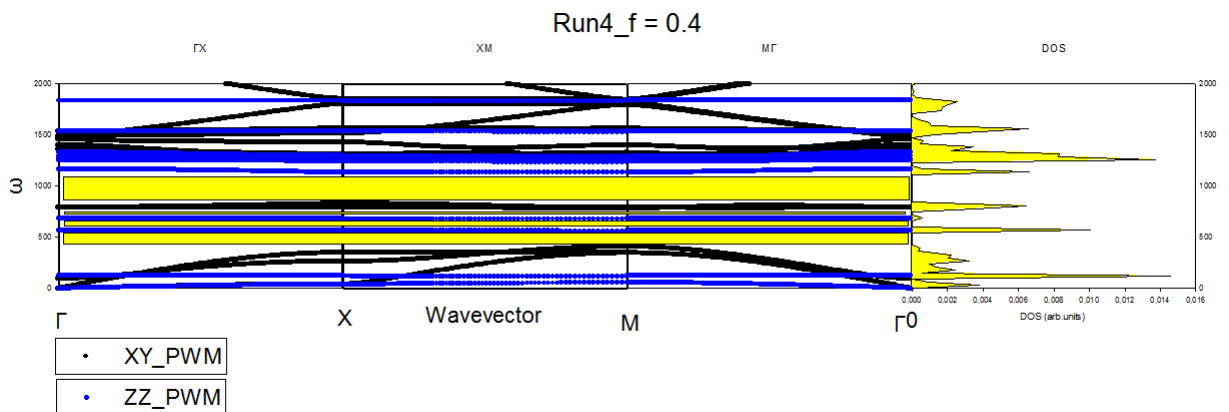
Εικόνα A.11.: Δομή των ζωνών συχνοτήτων και αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων (DOS) για ένα τετραγωνικό πλέγμα από ράβδους ατσάλιου τετραγωνικής διατομής, εμβαπτισμένες σε σιλικόνη, με ποσοστό κάλυψης επιφάνειας $f = 0.1$



Εικόνα A.12.: Δομή των ζωνών συχνοτήτων και αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων (DOS) για ένα τετραγωνικό πλέγμα από ράβδους ατσάλιου τετραγωνικής διατομής, εμβαπτισμένες σε σιλικόνη, με ποσοστό κάλυψης επιφάνειας $f = 0.2$

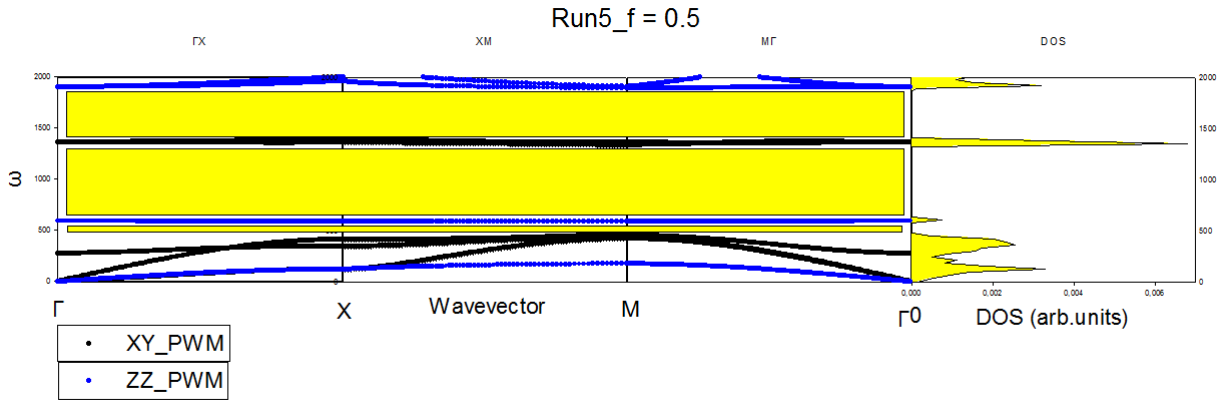


Εικόνα A.13.: Δομή των ζωνών συχνοτήτων και αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων (DOS) για ένα τετραγωνικό πλέγμα από ράβδους ασαλιού τετραγωνικής διατομής, εμβαπτισμένες σε σιλικόνη, με ποσοστό κάλυψης επιφάνειας $f = 0.3$

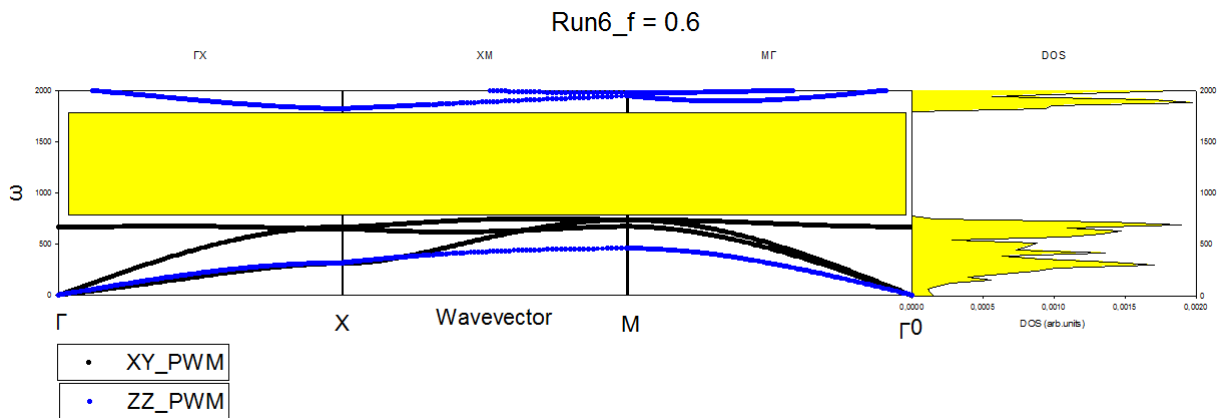


Εικόνα A.14.: Δομή των ζωνών συχνοτήτων και αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων (DOS) για ένα τετραγωνικό πλέγμα από ράβδους ασαλιού τετραγωνικής διατομής, εμβαπτισμένες σε σιλικόνη, με ποσοστό κάλυψης επιφάνειας $f = 0.4$

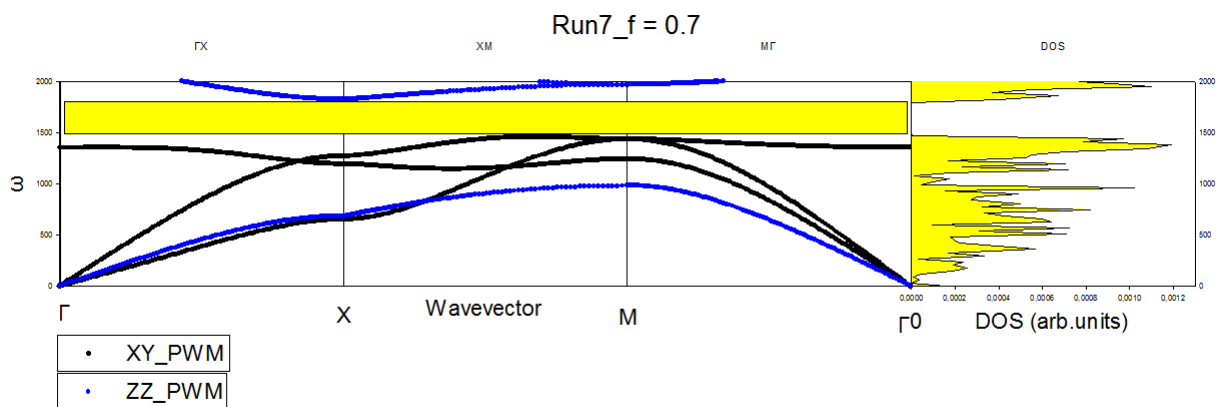
A.3 Μετρήσεις ζωνών συχνοτήτων που υπολογίστηκαν στα πλαίσια της παρούσας διπλωματικής



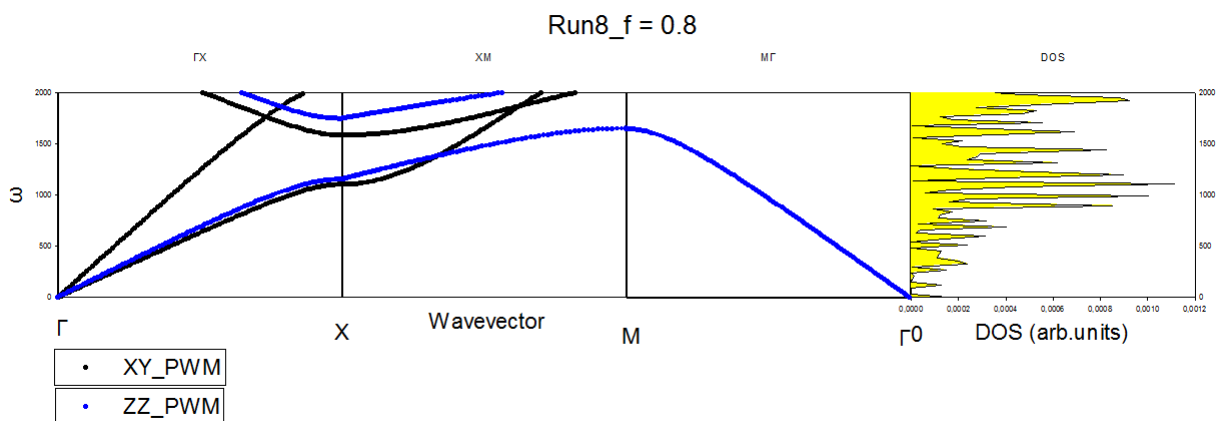
Εικόνα A.15.: Δομή των ζωνών συχνοτήτων και αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων (DOS) για ένα τετραγωνικό πλέγμα από ράβδους ατσαλιού τετραγωνικής διατομής, εμβαπτισμένες σε σιλικόνη, με ποσοστό κάλυψης επιφάνειας $f = 0.5$



Εικόνα A.16.: Δομή των ζωνών συχνοτήτων και αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων (DOS) για ένα τετραγωνικό πλέγμα από ράβδους ατσαλιού τετραγωνικής διατομής, εμβαπτισμένες σε σιλικόνη, με ποσοστό κάλυψης επιφάνειας $f = 0.6$

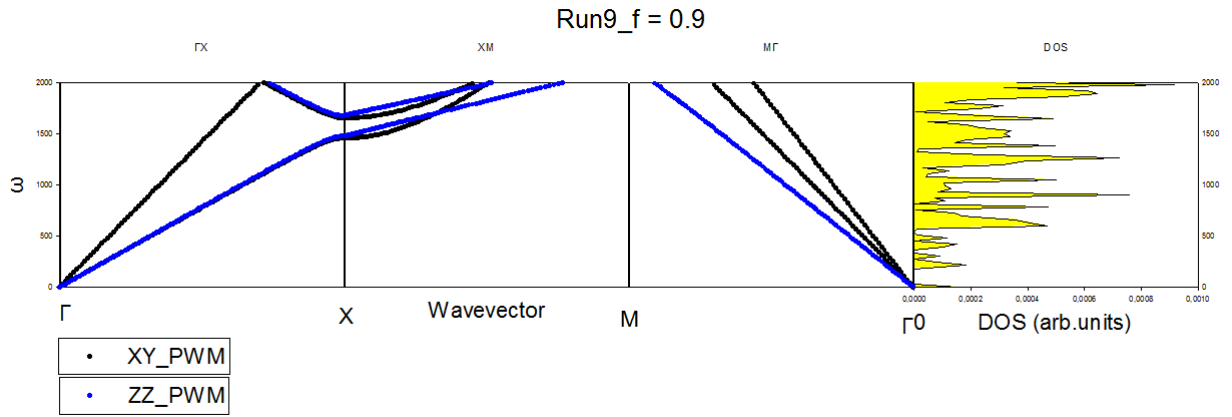


Εικόνα A.17.: Δομή των ζωνών συχνοτήτων και αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων (DOS) για ένα τετραγωνικό πλέγμα από ράβδους ατσάλιου τετραγωνικής διατομής, εμβαπτισμένες σε σιλικόνη, με ποσοστό κάλυψης επιφάνειας $f = 0.7$

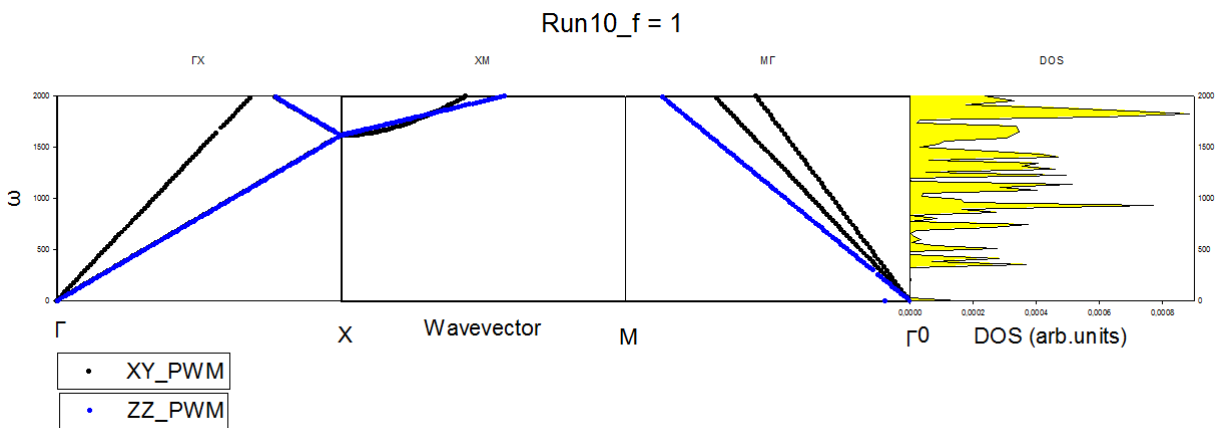


Εικόνα A.18.: Δομή των ζωνών συχνοτήτων και αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων (DOS) για ένα τετραγωνικό πλέγμα από ράβδους ατσάλιου τετραγωνικής διατομής, εμβαπτισμένες σε σιλικόνη, με ποσοστό κάλυψης επιφάνειας $f = 0.8$

A.3 Μετρήσεις ζωνών συχνοτήτων που υπολογίστηκαν στα πλαίσια της παρούσας διπλωματικής



Εικόνα A.19.: Δομή των ζωνών συχνοτήτων και αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων (DOS) για ένα τετραγωνικό πλέγμα από ράβδους ατσάλιου τετραγωνικής διατομής, εμβαπτισμένες σε σιλικόνη, με ποσοστό κάλυψης επιφάνειας $f = 0.9$



Εικόνα A.20.: Δομή των ζωνών συχνοτήτων και αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεων (DOS) για ένα τετραγωνικό πλέγμα από ράβδους ατσάλιου τετραγωνικής διατομής, εμβαπτισμένες σε σιλικόνη, με ποσοστό κάλυψης επιφάνειας $f = 1$

Βιβλιογραφία

- [1] Charles Kittel. *Introduction to Solid State Physics - 7th edition*. John Wiley & Sons, 1996.
- [2] M. M. Sigalas and E. N. Economou. Elastic and acoustic wave band structure. *J. of Sound and Vibrations* 158, 377-382, 1992.
- [3] Abdelkrim Khelif and Ali Adibi. *Phononic Crystals, Fundamentals and Applications*. Springer, 2016.
- [4] Martin Maldovan. Sound and heat revolutions in phononics. *Nature* 12608, doi:10.1038, 2013.
- [5] Tsung-Tsong Wu, Zi-Gui Huang, and S. Lin. Surface and bulk acoustic waves in two-dimensional phononic crystal consisting of materials with general anisotropy. *Phys.Review B*, 69, 094301, 2004.
- [6] M. S. Kushwaha, P. Halevi, and G. Martinez. Theory of acoustic band structure of periodic elastic composites. *Phys. Rev.B, Volume 49, number 4*, 1994.
- [7] Yukihiro Tanaka and Shin ichiro Tamura. Surface acoustic waves in two-dimensional periodic elastic structures. *Phys. Rev.B, Volume 58, number 12*, 1998.
- [8] Zhilin Hou, Xiujun Fu, and Youyan Liu. Acoustic wave in a two-dimensional composite medium with anisotropic inclusions. *Phys. Letters A*, 317, 127 - 134, 2003.
- [9] Mohammadhosein Ghasemi Baboly, Yasser Soliman, Mehmet F. Su, Charles M.Reinke, Zayd C. Leseman, and Ihab El-Kady. Enhanced plane wave expansion analysis for the band structure of bulk modes in two - dimensional high - contrast solid - solid phononic crystals. *Photonics and Nanostructures - Fundamentals and Applications* 12, 487 - 492, 2014.
- [10] Yan Pennec, Jérôme O. Vasseur, Bahram Djafari Rouhani, Leonard Dobrzynski, and Pierre A. Deymier. Two - dimensional phononic crystals: Examples and applications. *Surface Science Reports*, 65, 229 - 291, 2010.
- [11] Chao Wang. Numerical calculation of density of states and band structure. Master's thesis, University of California, Santa Cruz, 2009.
- [12] Efthimios Kaxiras. *Atomic and Electronic Structure of Solids*. Cambridge University Press, 2003.