



TECHNISCHE UNIVERSITÄT
CHEMNITZ

MODELLIERUNG ZWEIDIMENSIONALER
PHONONISCHER KRISTALLE

Professur Theoretische Physik -
Simulation neuer Materialien

TU Chemnitz
Bachelorarbeit
SS 2019

vorgelegt von:	David Röhlig
Betreuer:	M.Sc. Eduard Kuhn
Erstprüferin:	Prof. Dr. Angela Thränhardt
Zweitprüferin:	Prof. Dr. Sibylle Gemming
Abgabedatum:	13.09.2019

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	3
2	Physikalische Grundlagen	7
2.1	Phononische Bandlücken	8
2.1.1	Bragg-Bandlücken	8
2.1.2	Lokal resonante Bandlücken	9
2.2	Elastische Wellengleichung	9
2.3	Kristallgitter und reziproker Raum	10
2.4	Entwicklung nach ebenen Wellen (PWE)	11
2.5	Anzahl der Gittervektoren	14
3	Modellierung des Kristalls	15
3.1	Kristallstruktur und Abmessungen	15
3.2	Wahl der Einheitszelle	16
3.3	Berechnung der Fourierkoeffizienten	16
4	Ergebnisse	18
4.1	Bandstrukturen verschiedener Material-Kombinationen	18
4.2	Eigenvektoren innerhalb der Einheitszelle	24
4.3	Konvergenz der Frequenzbänder	26
4.4	Manipulation der Bandlücke	29
5	Zusammenfassung	31
5.1	Inhalt der Arbeit	31
5.2	Kombination von Gasen und Festkörpern	32
5.3	Einbau von Störstellen	32

1 Einleitung

Phononische Kristalle sind Metamaterialien mit räumlich periodisch variierenden Materialeigenschaften, welche die Ausbreitung akustischer Wellen auf verschiedene Weisen manipulieren können. Aus der Festkörperphysik ist bereits das Phänomen von erlaubten und verbotenen Energiebereichen für Elektronen bekannt, welches durch die periodische Anordnung der Atome einer Kristallstruktur entsteht.

Ein analoges Prinzip wurde im Jahre 1972 für Lichtwellen entdeckt [1]. Die sogenannten photonischen Kristalle zeichnen sich durch eine periodische Änderung der Brechzahl aus. Im Bereich der Akustik wurde schließlich 1979 erstmals ein ähnliches Prinzip in einem wissenschaftlichen Artikel als eine Analogie zu photonischen Kristallen beschrieben [2], während die ersten theoretischen Berechnungen 1993 in einer Veröffentlichung von Kushwaha erschienen [3]. 1995 folgte schließlich der erste experimentelle Nachweis einer Bandstruktur, wobei Martinez-Sala Messungen an einem Kunstwerk aus Stahlzylindern durchführte. In Abbildung 1.1 liegt die höchste Verminderung, verursacht durch destruktive Interferenz, bei 1.67 Hz in [100]-Richtung [4], was außerhalb des menschlichen Hörbereiches liegt. Die Schwankungen der Schallabschwächung weisen in diesem Beispiel eindeutig auf die Existenz einer akustischen Bandstruktur hin.

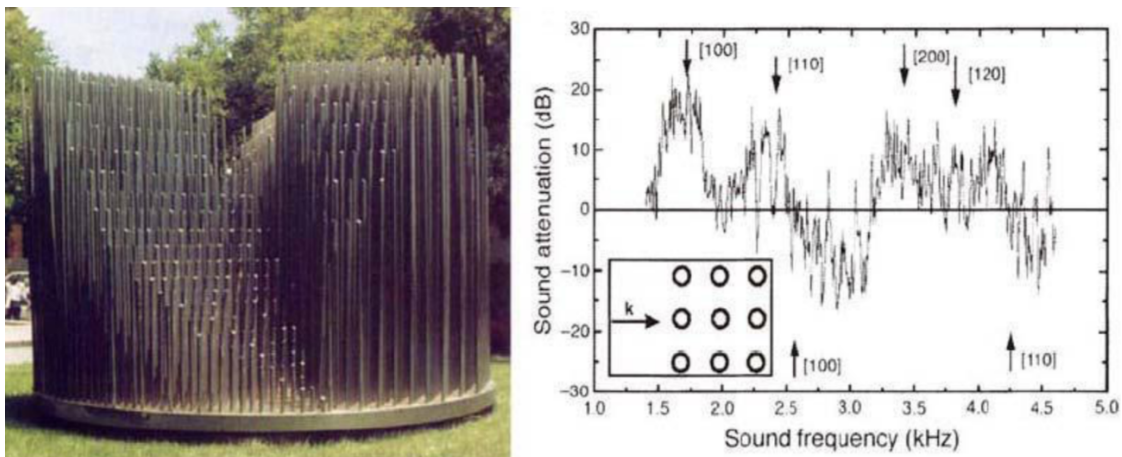


Abbildung 1.1: Eine phononische Struktur aus Stahlzylindern, rechts wurde die Schalldämpfung über der Frequenz dargestellt [4].

Die im Kristall verbotenen Frequenzbereiche werden als phononische Bandlücken bezeichnet und verhindern die Ausbreitung elastischer Wellen innerhalb der Struktur. Solche Lücken können richtungsabhängig, aber auch vollständig und damit von der Richtung losgelöst sein. Unabhängig von Polarisation und Ausbreitungsrichtung werden Wellen so vollständig reflektiert, während solche mit Frequenzen außerhalb der Lücke den Kristall durchqueren können [5]. Die Lage der Frequenzlücke wird dabei von den Materialeigenschaften und den geometrischen Abmessungen des Kristalls bestimmt, sodass Kristallgrößen im makroskopischen bis mikroskopischen Bereich Wellen unterschiedliche Wellenlängen beeinflussen.

Durch ihre besonderen Eigenschaften versprechen phononische Kristalle zahlreiche Anwendungen wie akustische Spiegel, Geräusch- und Schwingungsisolierung, Verminderung der Gruppengeschwindigkeit von Schallwellen [6] bis hin zur Beeinflussung thermischer Eigenschaften auf der Nanometerskala durch die Manipulation von Gitterschwingungen [7]. In Abbildung 1.2 sind Aufnahmen eines Rasterelektronenmikroskops fünf verschiedener phononischer 2D-Strukturen aus einem Silizium-Plättchen mit Luftlöchern dargestellt, welche eine Verringerung der Wärmeleitfähigkeit bewirken, ohne dabei die elektrische Leitfähigkeit wesentlich zu beeinträchtigen. Da dieser Effekt bereits bei Raumtemperatur auftritt, kann dies tiefgreifende Auswirkungen auf die thermoelektrische Kühlung haben und somit eine Vielzahl an neuen Anwendungsmöglichkeiten eröffnen [8].

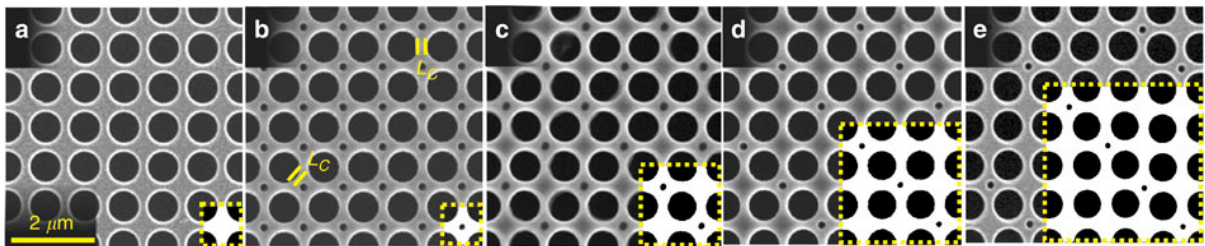


Abbildung 1.2: Alle fünf Proben haben eine Dicke von 366 nm und eine Gitterkonstante von 1100 nm. Die gelb-gepunkteten Linien umschließen die unterschiedlichen Einheitszellen der Strukturen [8].

Für den Schallschutz ist der Einsatz lokal resonanter phononischer Kristalle sinnvoll, welche später näher erläutert werden. Dies ist für die Schall-Abschirmung praktischer, da die räumliche Modulation der Struktur nicht im Bereich der Wellenlänge liegen muss und so die Kristallgröße verringert werden kann [9]. In Abbildung 1.3 ist solch eine phononische Struktur dargestellt, welche zur Unterdrückung niederfrequenter Schwingungen auf dem Dach eines Fahrzeugs montiert werden kann.

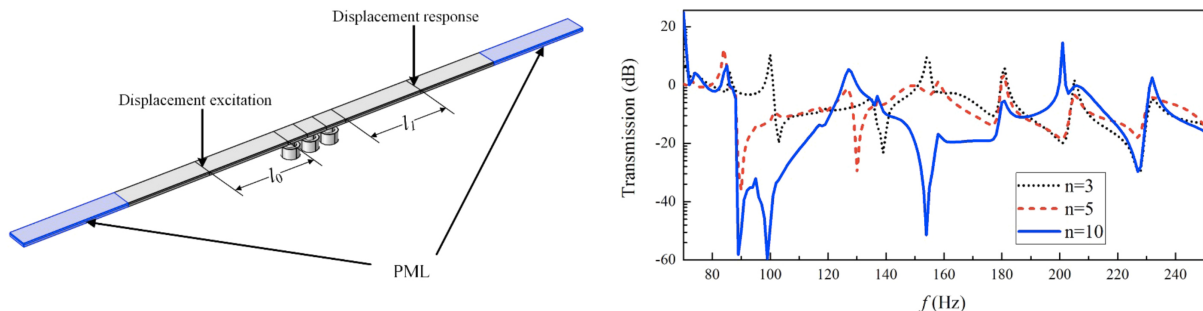


Abbildung 1.3: Lokal resonanter phononischer Kristall mit der Gitterkonstante $a = 10$ mm und der Anzahl $n = 3$ an Einheitszellen. Der Abstand zwischen Schwingungsquelle l_0 und Kristall entspricht dabei dem Abstand vom Kristall zum Empfänger $l_1 = 4$ cm. Im rechten Bild wurde das normierte Transmissionsspektrum für verschiedene n berechnet [10].

Dafür wurden Stahlzylinderköpfe auf Gummizylinder aufgesetzt und mit der Fahrzeugwand verbunden. Das Gesamtkonstrukt ist zusätzlich von einer Absorptionsschicht (PML)

umgeben, welche unerwünschte Reflexionseffekte und elastische Störungen verhindern soll. Für eine unterschiedliche Anzahl n an Einheitszellen erscheinen ab einer Frequenz von 89 Hz mehrere Minima im Spektrum, was auf Bandlücken hindeutet. Mit steigender Anzahl an Einheitszellen verringert sich die Transmission an diesen Stellen weiter und die Breite der Minima nimmt zu, was mit den experimentellen Ergebnissen übereinstimmt [10].

In Abbildung 1.4 wird eine zeitliche Pulsmanipulation mit Hilfe einem dispersiven phononischen Wellenleiters mit einer Länge von einem Millimeter erreicht. Der eindimensionale Kristall-Wellenleiter besteht aus einer GaAs/AlGaAs-Heterostruktur mit periodisch angeordneten Luftlöchern und dient der Manipulation von Ultraschallsignalen, was für neuartige Sensoren und Mikrochip-Technologien interessant sein könnte.

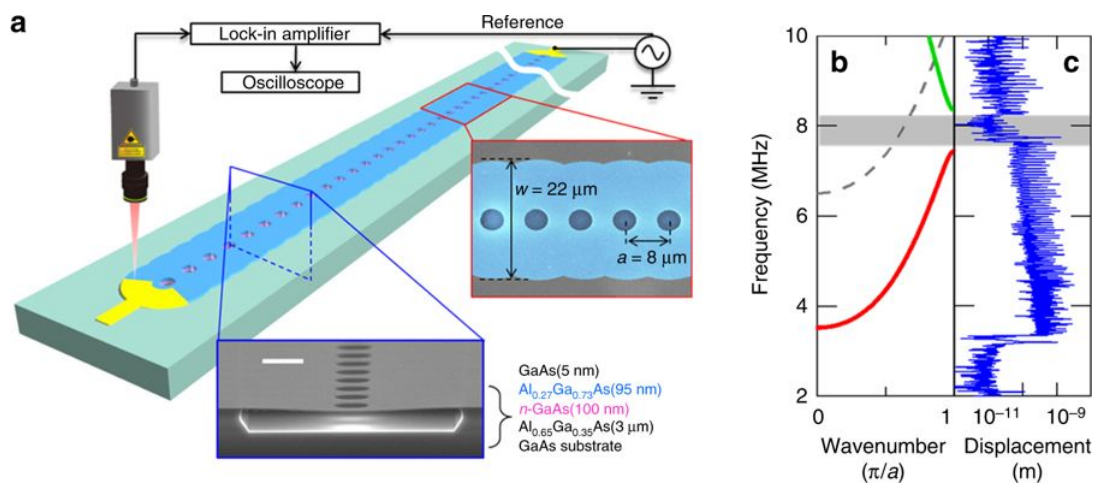


Abbildung 1.4: (a) Darstellung des Wellenleiters mit einer Länge von 5 µm und das Bild eines Rasterelektronenmikroskops vom Querschnitt der Struktur. (b) Die simulierte Dispersionsrelation. (c) Das experimentelle Transmissionsspektrum [11].

Die Schwingungserzeugung erfolgt über piezoelektrische Anregung am rechten Rand und die Detektierung mit einem Laser-Doppler-Interferometer am linken Rand. Durch Bragg-Reflexion an den Luftlöchern entsteht eine phononische Bandlücke für Ultraschallwellen in der Nähe von 8 MHz, wobei die experimentellen Resultate mit der theoretisch ermittelten Bandstruktur übereinstimmen [11].

Als Alternative zu spektroskopischen Messmethoden der Biochemie könnten phononische Mikrosensoren zur Analyse komplexer Moleküle wie Proteinen dienen, da jene bei verschiedenen Wechselwirkungen ihre räumliche Anordnung und damit ihre mechanischen Eigenschaften ändern. Während für optische Sensoren bereits fundiertes Wissen vorliegt, bedarf es hier allerdings noch eines besseren Verständnisses der Zusammenhänge zwischen biochemischen und Ultra- bzw. Hyperschallsignalen. Einer der Vorteile solcher Technologien ist, dass die volumetrischen Eigenschaften durch solche Sensoren in ihrer physiologischen Umgebung ohne Isolierung der betreffenden Biomoleküle untersucht werden können, was potentiell für die Erforschung der Wirkung pharmazeutischer Stoffe oder Toxine auf Organismen, Zellumbauprozesse oder Erbgutveränderungen interessant ist. Aus technologischer

Sicht sind dafür abstimmbare akustische Quellen, breitbandige phononische Detektoren, Mikro- und Nanofluidsysteme usw. notwendig [12]. Die Kontrolle von akustischen Oberflächenwellen [13] wäre in Zukunft eine Alternative in der Signalverarbeitung, wobei auch Interesse an einer möglichen Steuerung von Lamb- oder Rayleigh-Wellen besteht [14]. Eine weitere vielversprechende Möglichkeit ist die Manipulation der Bandstruktur, wodurch eine negative akustische Brechzahl erreicht werden kann, welche die Kontrolle über Schallausbreitung bietet und neue Möglichkeiten für eine Vielzahl an Anwendungen eröffnet. So konnten für elektromagnetische Wellen bereits Mikro-Superlinsen mit Hilfe photonischer Kristalle entwickelt werden, deren Auflösungsvermögen derzeitige optischer Werkstoffe weit übertrifft [15]. Für Schallwellen könnten solche Linsen aus akustischen Metamaterialien mit negativer Massendichte beschrieben werden [16].



Abbildung 1.5: Das aus 187 farbigen Stelen bestehende Kunstwerk „Denk- und Wahrnehmungsmodell zum Phänomen der Farbe“ aus dem Jahr 1998 von Stefan Nestler.

Diese Arbeit beschäftigt sich mit der Modellierung der Skulptur „Denk- und Wahrnehmungsmodell zum Phänomen der Farbe“, welche sich vor dem zentralen Hörsaal- und Seminargebäude der Technischen Universität Chemnitz befindet (siehe Abbildung 1.5). Dieses Kunstwerk wurde vom Dresdner Künstler Stefan Nestler gestaltet und erfüllt durch die periodische Variation in Form von regelmäßig angeordneten, von Luft umgebenen Metallstangen die Anforderungen eines phononischen Kristalls [17].

Der Grundlagenteil dieser Arbeit soll zunächst in wichtige physikalische und numerische Konzepte einführen und in einer konkreten mathematischen Beschreibung des Kunstwerks münden. Dabei sollen verschiedene Strukturen mit unterschiedlichen Materialkombinationen anlehnend an die Abmessungen des Kunstwerks simuliert werden.

2 Physikalische Grundlagen

Phononische Kristalle zeichnen sich durch die periodische Änderung der Dichte und der elastischen Materialeigenschaften aus. Die Schallgeschwindigkeit hängt von beiden Komponenten ab, weshalb eine Periodizität der damit verknüpften akustischen Brechzahl entsteht. Im Unterschied dazu ändern sich bei photonischen Kristallen die dielektrischen Eigenschaften, damit die Lichtgeschwindigkeit und analog die optische Brechzahl. Eine Gemeinsamkeit beider Strukturen ist die Anzahl der Richtungen, in welcher die periodische Variation der Materialeigenschaften auftritt. Diese bestimmt die Dimension der Struktur, was in Abbildung 2.1 dargestellt wurde.

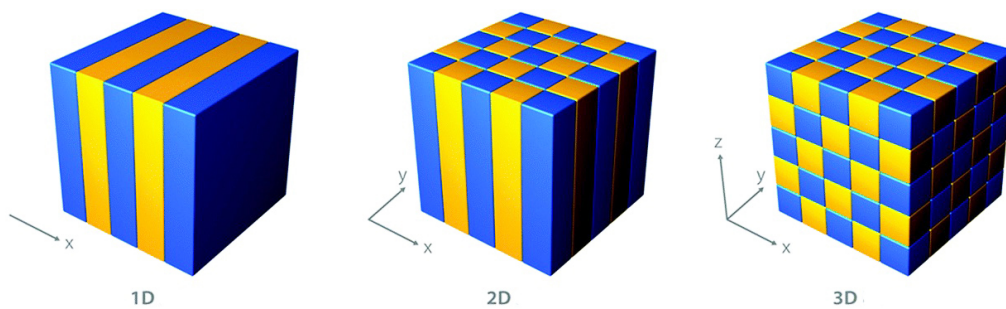


Abbildung 2.1: Auftretende Periodizität in einer, zwei oder drei Richtungen [18].

Demzufolge entspräche eine periodische Aneinanderreihung verschiedener planparalleler Metallplatten einer eindimensionalen Struktur. Ein konkretes Beispiel für einen dreidimensionalen Kristall wird in Abbildung 2.2 in Form eines sc-Gitters gezeigt.

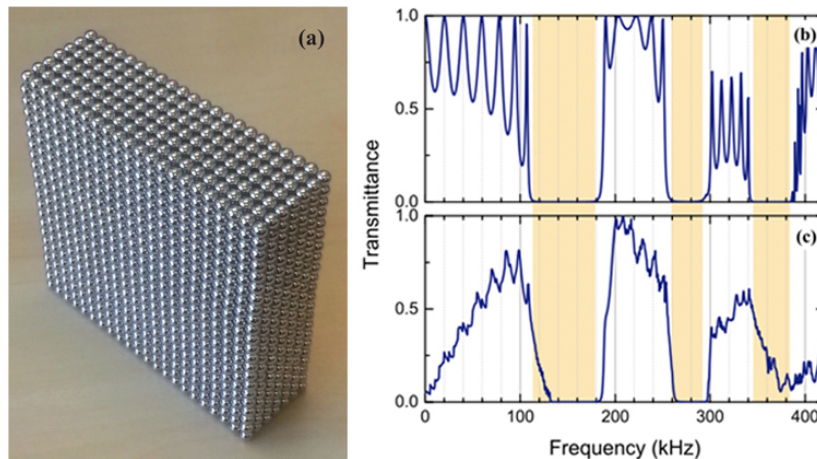


Abbildung 2.2: (a) Ein phononisches Kristallgitter mit den Abmessungen $11 \text{ cm} \times 11 \text{ cm} \times 3.5 \text{ cm}$ und einem Kugeldurchmesser von 5 mm . (b) Transmission für $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$ und (c) für mehrere $\mathbf{k}_{\parallel} = \pi(q, 0)$ mit variierendem q [19].

Hier wurden mehrere Magnetkugeln aus Neodym-Eisen-Bor miteinander verbunden und in eine Fluidmatrix eingebettet. Aus Messungen in einem Wasserbehälter mit akustischem

Emitter und einem Empfänger lässt sich die Existenz einer phononischen Bandstruktur folgern, da beispielsweise Frequenzen zwischen 120 und 180 kHz den Kristall nicht durchqueren können [19]. In den farbig markierten Bereichen ist somit die Ausbreitung ebener Longitudinalwellen nicht möglich. Bei dem in dieser Arbeit beschriebenen Kunstwerk ändern sich die Materialeigenschaften in zwei Richtungen, weshalb man demzufolge von einem zweidimensionalen phononischen Kristall spricht.

2.1 Phononische Bandlücken

Um große Bandlücken zu erzielen, ist die Kombination von Materialien mit hohem physikalischem Kontrast beispielsweise in der Schallgeschwindigkeit oder Dichte von Bedeutung. Zusätzlich wird die Frequenzlücke durch den Wert des Füllfaktors und damit den Anteil der einzelnen Materialien innerhalb der Einheitszelle bestimmt [20].

2.1.1 Bragg-Bandlücken

Treffen akustische Wellen auf einen phononischen Kristall, so werden diese im Falle von Wellenlängen im Bereich der Gitterkonstanten gestreut. Dieses Phänomen der Bragg-Streuung entsteht durch konstruktive Interferenz von an den Netzebenen reflektierten Wellen. Dafür müssen sich die einfallenden Wellen jedoch in gleicher Phase befinden. Für den Gitterabstand d und den Winkel θ gilt nun die Bedingung:

$$n\lambda = 2d \sin \theta \quad (2.1)$$

für konstruktive Interferenz. In Abbildung 2.3 ist dies nur der Fall, wenn die an der zweiten Gitterebene reflektierte Welle einen zusätzlichen Weg zurücklegt, welcher einem ganzzahligen Vielfachen n der Wellenlänge λ entspricht.

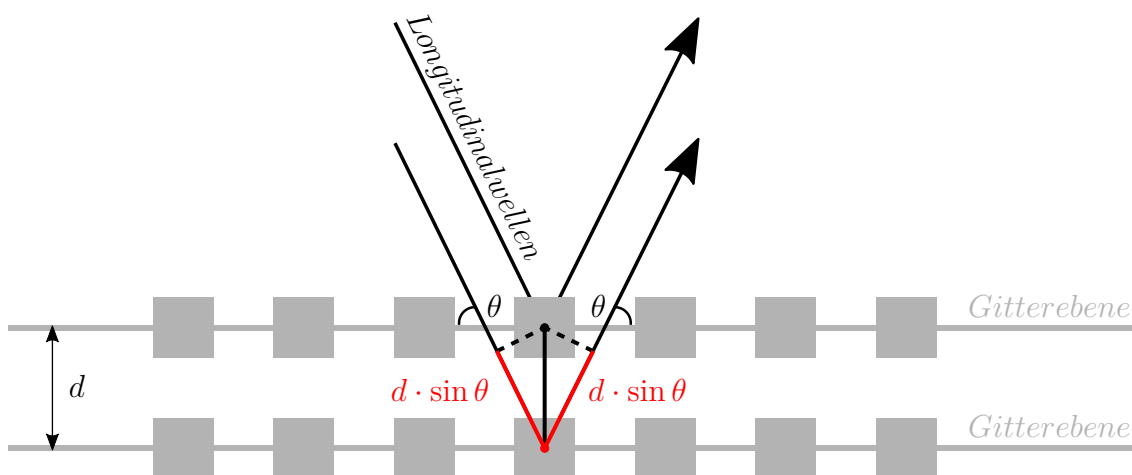


Abbildung 2.3: Darstellung der Bragg-Bedingung für ein phononisches Kristallgitter.

Zusätzlich kann in phononischen Kristallen auch Mie-Streuung vorkommen, d.h. Streuung an sphärischen Objekten mit einem Durchmesser im Bereich der Wellenlänge.

2.1.2 Lokal resonante Bandlücken

Im Jahre 2000 wurde eine neue phononische Struktur von Liu beschrieben [21]. Durch destruktive Interferenz von internen Oszillatoren im Kristall können bestimmte Frequenzen nahe der jeweiligen Resonanzfrequenzen gedämpft werden. Die Herstellung solcher Kristalle ist durch das periodische Einsetzen von Resonanzeinschlüssen in ein Hintergrundmaterial möglich, wodurch die Bandlücke dominiert wird. Im Gegensatz zum Bragg-Streuungs-Mechanismus können solche Strukturen weitaus höhere verbotene Wellenlängen beinhalten als die Gitterkonstante [22]. Lokal resonante Verbundwerkstoffe weisen in bestimmten Frequenzbereichen negative effektive elastische Konstanten auf, wodurch die Gitterkonstante beispielsweise zwei Größenordnungen unter dem Bragg-Limit liegen kann [9]. Aus diesem Grund sind lokal resonante Kristalle weniger stark an die Größe der periodischen Struktur gebunden und für praktische Anwendungen flexibler einsetzbar.

2.2 Elastische Wellengleichung

Die transversale und longitudinale Ausbreitung von Wellen in einem isotropen, homogenen und elastischen Medium kann durch folgende Differentialgleichung beschrieben werden:

$$\rho(\mathbf{r})\ddot{u}_i(\mathbf{r}, t) = \partial_i \lambda(\mathbf{r}) \partial_j u_j(\mathbf{r}, t) + \partial_j \mu(\mathbf{r}) [\partial_j u_i(\mathbf{r}, t) + \partial_i u_j(\mathbf{r}, t)], \quad i, j = x, y, z \quad (2.2)$$

Dabei stehen $\lambda(\mathbf{r})$ und $\mu(\mathbf{r})$ für die erste und zweite Lamé-Konstante, wobei die Letztere auch unter dem Namen Schubmodul bekannt ist. Beide Parameter beschreiben die elastischen Eigenschaften des jeweiligen Mediums. Des weiteren steht $\rho(\mathbf{r})$ für die Dichte und $u_i(\mathbf{r})$ für den Auslenkungsvektor der Welle. Es sei an dieser Stelle angemerkt, dass hier gemäß der einsteinschen Summenkonvention über gleiche Indizes summiert wird. Da die Gleichung linear ist, kann die Variable t der Zeit vom Auslenkungsvektor durch den Ausdruck $u_i(\mathbf{r}, t) = u_i(\mathbf{r}) \cdot e^{i\omega t}$ separiert und in Gleichung (2.2) eingesetzt werden:

$$-\omega^2 \rho(\mathbf{r}) u_i(\mathbf{r}) = \partial_i \lambda(\mathbf{r}) \partial_j u_j(\mathbf{r}) + \partial_j \mu(\mathbf{r}) [\partial_j u_i(\mathbf{r}) + \partial_i u_j(\mathbf{r})], \quad i, j = x, y, z \quad (2.3)$$

Im Falle eines Kristalls mit unendlich vielen Stäben parallel zur z -Achse und einem Wellenvektor in der xy -Ebene kann die Gleichung für die xy - und z -Moden getrennt werden [23]. Da sich der Wellenvektor in diesem Fall bezüglich der z -Komponente nicht ändert, verschwinden alle Ableitungen nach z und es ergeben sich folgende Zusammenhänge:

$$-\omega^2 \rho(\mathbf{r}) u_i(\mathbf{r}) = \partial_i \lambda(\mathbf{r}) \partial_j u_j(\mathbf{r}) + \partial_j \mu(\mathbf{r}) [\partial_j u_i(\mathbf{r}) + \partial_i u_j(\mathbf{r})], \quad i, j = x, y \quad (2.4)$$

für die xy -Mode und

$$-\omega^2 \rho(\mathbf{r}) u_z(\mathbf{r}) = \partial_j \mu(\mathbf{r}) \partial_j u_z(\mathbf{r}), \quad j = x, y \quad (2.5)$$

für die z -Mode.

2.3 Kristallgitter und reziproker Raum

Im Falle eines zweidimensionalen phononischen Kristallgitters setzt sich der Gittervektor \mathbf{R} aus den primitiven Einheitsvektoren \mathbf{a}_1 und \mathbf{a}_2 zusammen und es gilt:

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 \quad (2.6)$$

Die Einheitsvektoren werden durch ganze Zahlen n_1 und n_2 skaliert, weshalb ein beliebiger Gittervektor \mathbf{R} definitionsgemäß nicht zwischen den Gitterpunkten liegen kann. Der beschriebene Sachverhalt wurde in Abbildung 2.4 dargestellt:

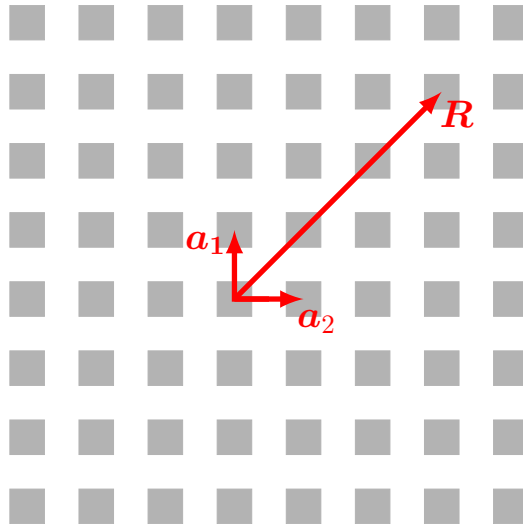


Abbildung 2.4: Die primitiven Einheitsvektoren \mathbf{a}_1 und \mathbf{a}_2 mit einem beliebigen Gittervektor \mathbf{R} auf einem phononischen Kristallgitter.

Für die weiteren Betrachtungen ist es zweckmäßig zum phononischen Kristallgitter ein reziprokes Gitter einzuführen. Dessen Basis $\{b_i\}$ muss orthogonal zu $\{a_j\}$ sein, sodass die realen und reziproken Einheitsvektoren wie folgt in Beziehung stehen:

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij} \quad (2.7)$$

Aus dieser Bedingung lassen sich die reziproken Gittervektoren für den zweidimensionalen Fall berechnen. In den folgenden Gleichungen wurde der Einheitsvektor \mathbf{e}_z in z -Richtung

eingesetzt, wodurch die z -Komponente von \mathbf{b}_i immer Null wird.

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{A_{EZ}} \mathbf{a}_2 \times \mathbf{e}_z \quad (2.8)$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{A_{EZ}} \mathbf{e}_z \times \mathbf{a}_1 \quad (2.9)$$

Falls eine beliebige Funktion $f(\mathbf{r})$ die Periodizität des Gitters besitzt gilt:

$$f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \quad (2.10)$$

Solche Funktionen können in Form einer Fourier-Reihe mit dem Fourier-Koeffizienten $f_{\mathbf{G}}$ ausgedrückt werden, was im nächsten Kapitel für die Lösung der elastischen Wellengleichung ausgenutzt wird. Wendet man Gleichung (2.10) an, so folgt:

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} f_{\mathbf{G}} = \sum_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R})} f_{\mathbf{G}} = \sum_{\mathbf{G}} (e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \cdot e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}}) f_{\mathbf{G}} \quad (2.11)$$

Demzufolge muss $e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}} = 1$ zwangsläufig erfüllt sein, weshalb zusätzlich $\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = 2\pi n$ für ganzzahlige n gilt. \mathbf{G} sind somit die zu den Gittervektoren \mathbf{R} reziproken Fourier-Wellenvektoren und erfüllen jene Bedingung unter der Voraussetzung, dass die Beziehung (2.7) gilt.

$$\mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 \quad (2.12)$$

Die Summation in Gleichung (2.11) entspricht damit einer ganzzahligen Änderung von h und k .

2.4 Entwicklung nach ebenen Wellen (PWE)

Mit Hilfe der PWE-Methode kann die Bandstruktur eines phononischen Kristalls berechnet werden. Da die Materialparameter $\rho(\mathbf{r})$, $\lambda(\mathbf{r})$ und $\mu(\mathbf{r})$ gitterperiodisch sind, können diese nun wie beschrieben in Fourier-Reihen entwickelt werden [23]:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \rho_{\mathbf{G}} \quad (2.13)$$

$$\lambda(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \lambda_{\mathbf{G}} \quad (2.14)$$

$$\mu(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \mu_{\mathbf{G}} \quad (2.15)$$

Mit der Fläche der Einheitszelle A_{EZ} ergeben sich die Fourier-Koeffizienten $\rho_{\mathbf{G}}$, $\lambda_{\mathbf{G}}$ und $\mu_{\mathbf{G}}$ durch Integration über die Einheitszelle:

$$\rho_{\mathbf{G}} = \frac{1}{A_{EZ}} \int \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} d^2\mathbf{r} \quad (2.16)$$

$$\lambda_{\mathbf{G}} = \frac{1}{A_{EZ}} \int \lambda(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} d^2\mathbf{r} \quad (2.17)$$

$$\mu_{\mathbf{G}} = \frac{1}{A_{EZ}} \int \mu(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} d^2\mathbf{r} \quad (2.18)$$

Die Koeffizienten können zum einen mit einer diskreten Fourier-Transformation numerisch berechnet werden, andererseits lassen sich die Integrale in einfachen Fällen auch analytisch lösen, was die Genauigkeit der PWE-Methode erhöht und im Falle einer in dieser Arbeit betrachteten quadratischen Einheitszelle möglich ist. Darauf soll jedoch erst in Abschnitt 3.2 näher eingegangen werden.

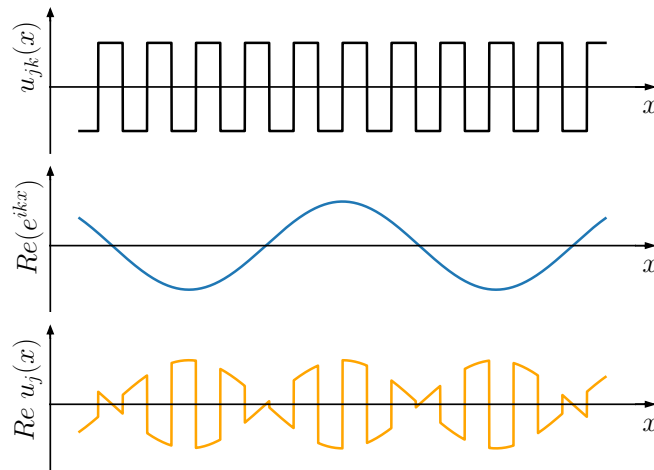


Abbildung 2.5: Die Konstruktion einer Bloch-Welle $u_j(x)$ für ein eindimensionales Kristallgitter mit einer beliebigen gitterperiodischen Funktion $u_{jk}(x)$.

Das Bloch-Theorem gilt für das festkörperphysikalische Problem eines Elektrons in einem periodischen Potential. Analog zeichnen sich phononische Kristalle durch die Modulation der Materialeigenschaften aus, während sich in diesen Strukturen elastische Wellen ausbreiten. Die Lösungen der elastischen Wellengleichung $u_j(\mathbf{r})$ lassen sich nun analog zur Kristall-Wellenfunktion des Elektrons für periodisch variierende Materialeigenschaften als ebene Wellen, multipliziert mit einer gitterperiodischen Funktion $u_{jk}(\mathbf{r})$ ausdrücken. Diese sogenannten Bloch-Wellen wurden für den eindimensionalen Fall in Abbildung 2.5 dargestellt. Demzufolge gilt:

$$u_j(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{jk}(\mathbf{r}), \quad j = x, y \quad (2.19)$$

wobei \mathbf{k} den Bloch-Wellenvektor in der ersten Brillouin-Zone beschreibt, während die Funktion $u_{j\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ wegen ihrer Periodizität $u_{j\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{j\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ in einer Fourier-Reihe beschrieben werden kann:

$$u_j(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}} u_{j\mathbf{k},\mathbf{G}}, \quad j = x, y \quad (2.20)$$

Nun werden die Gleichungen (2.13) bis (2.15) der Materialparameter und (2.20) in die beiden elastischen Wellengleichungen (2.4) und (2.5) für die xy - und z -Moden substituiert.

$$\begin{aligned} \omega^2 \sum_{\mathbf{G}_1} \rho_{\mathbf{G}_2-\mathbf{G}_1} u_{\alpha\mathbf{k},\mathbf{G}_1} &= \sum_{\mathbf{G}_1} [\mu_{\mathbf{G}_2-\mathbf{G}_1} (\mathbf{k} + \mathbf{G}_1)_\beta (\mathbf{k} + \mathbf{G}_2)_\beta \cdot \delta_{\alpha\beta} \\ &+ \lambda_{\mathbf{G}_2-\mathbf{G}_1} (\mathbf{k} + \mathbf{G}_1)_\beta (\mathbf{k} + \mathbf{G}_2)_\alpha \\ &+ \mu_{\mathbf{G}_2-\mathbf{G}_1} (\mathbf{k} + \mathbf{G}_1)_\alpha (\mathbf{k} + \mathbf{G}_2)_\beta] u_{\beta\mathbf{k},\mathbf{G}_1}, \quad \alpha, \beta = x, y \end{aligned} \quad (2.21)$$

für die xy -Mode und

$$\omega^2 \sum_{\mathbf{G}_1} \rho_{\mathbf{G}_2-\mathbf{G}_1} u_{z\mathbf{k},\mathbf{G}_1} = \sum_{\mathbf{G}_1} \mu_{\mathbf{G}_2-\mathbf{G}_1} (\mathbf{k} + \mathbf{G}_1)_\alpha (\mathbf{k} + \mathbf{G}_2)_\alpha u_{z\mathbf{k},\mathbf{G}_1}, \quad \alpha = x, y \quad (2.22)$$

für die z -Mode. Des weiteren lassen sich die beschriebenen Gleichungen (2.21) und (2.22) in folgender Eigenwertgleichung ausdrücken, wobei $\mathbf{u}_\mathbf{k}$ den Auslenkungsvektor des reziproken Gittervektors \mathbf{G}_1 mit den drei Komponenten x, y, z beschreibt, während \mathbf{N} und \mathbf{M} Matrizen sind:

$$\omega^2 \mathbf{N} \mathbf{u}_\mathbf{k} = \mathbf{M} \mathbf{u}_\mathbf{k} \quad (2.23)$$

Nun müssen zwei entkoppelte Eigenwertgleichungen beider Moden für jeden Vektor \mathbf{k} gelöst werden. Die Matrizen \mathbf{N}^{xy} und \mathbf{M}^{xy} sind für die Eigenwertgleichung der xy -Moden folgendermaßen bestimmt:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{\alpha\mathbf{G}_1, \beta\mathbf{G}_1}^{xy} &= \sum_{\mathbf{G}_1} [\mu_{\mathbf{G}_2-\mathbf{G}_1} (\mathbf{k} + \mathbf{G}_1)_\beta (\mathbf{k} + \mathbf{G}_2)_\beta \cdot \delta_{\alpha\beta} \\ &+ \lambda_{\mathbf{G}_2-\mathbf{G}_1} (\mathbf{k} + \mathbf{G}_1)_\beta (\mathbf{k} + \mathbf{G}_2)_\alpha \\ &+ \mu_{\mathbf{G}_2-\mathbf{G}_1} (\mathbf{k} + \mathbf{G}_1)_\alpha (\mathbf{k} + \mathbf{G}_2)_\beta], \quad \alpha, \beta = x, y \end{aligned} \quad (2.24)$$

$$\mathbf{N}_{\alpha\mathbf{G}_1, \beta\mathbf{G}_1}^{xy} = \omega^2 \sum_{\mathbf{G}_1} \rho_{\mathbf{G}_2-\mathbf{G}_1} \cdot \delta_{\alpha\beta}, \quad \alpha, \beta = x, y \quad (2.25)$$

Die Matrizen N^z und M^z bezüglich der z -Moden lauten:

$$M_{\mathbf{G}_1, \mathbf{G}_1}^z = \sum_{\mathbf{G}_1} \mu_{\mathbf{G}_2 - \mathbf{G}_1} (\mathbf{k} + \mathbf{G}_1)_\alpha (\mathbf{k} + \mathbf{G}_2)_\alpha, \quad \alpha = x, y \quad (2.26)$$

$$N_{\mathbf{G}_1, \mathbf{G}_1}^z = \omega^2 \sum_{\mathbf{G}_1} \rho_{\mathbf{G}_2 - \mathbf{G}_1}, \quad \alpha = x, y \quad (2.27)$$

Die Entwicklung nach ebenen Wellen ist zwar flexibel für unterschiedliche periodische Strukturen einsetzbar, erfordert jedoch ausreichend viele reziproke Gittervektoren \mathbf{G} für eine möglichst exakte Bandstruktur. Aus diesem Grund muss das Konvergenzverhalten für die jeweiligen Kristallabmessungen getestet werden. Zusätzlich ist das Verfahren bei ungeordneten Strukturen weniger effektiv [21], was beispielsweise den Einbau von Störstellen erschwert oder im Fall des in dieser Arbeit betrachteten Kristalls verhindert.

2.5 Anzahl der Gittervektoren

Zur Festlegung der numerisch verwendeten Anzahl an Gittervektoren wird ein Kreis im reziproken Raum eingesetzt, welcher die gewünschten Gitterpunkte eingrenzt und alle äußeren Punkte ausschließt. In Abbildung 2.6 ist dieser Bereich farbig gekennzeichnet.

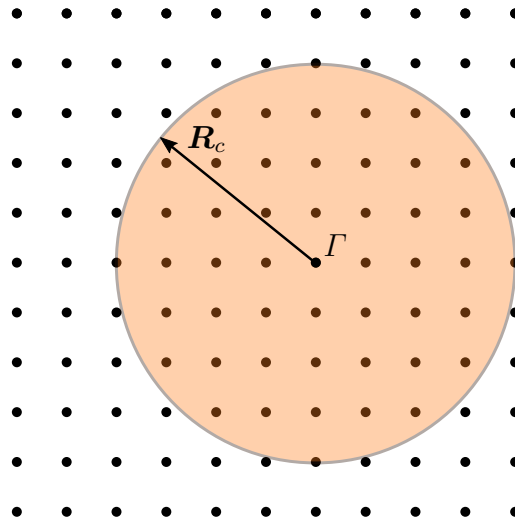


Abbildung 2.6: Der Kreis mit dem Radius R_c auf dem reziproken Kristallgitter mit dem Mittelpunkt Γ .

Zur mathematischen Beschreibung genügt nun die Angabe des Kreisradius, dem sogenannten cutoff-Radius R_c mit der Einheit m^{-1} . Die Anzahl an Gitterpunkten ist dabei proportional zu R_c^2 , da für die Kreisfläche $A_c = \pi R_c^2$ gilt und ist laut Gleichung (2.20) gleichbedeutend mit der Anzahl ebener Wellen.

3 Modellierung des Kristalls

3.1 Kristallstruktur und Abmessungen

Das zu beschreibende Kunstwerk besteht aus 14 mal 14 hohlen Stahl-Stäben, wobei auf einer der Hauptdiagonalen zusätzlich Fehlstellen vorliegen (siehe Abbildung 3.1 rechts). Diese lassen sich jedoch nicht mit der Entwicklung nach ebenen Wellen modellieren, da die Einheitszelle unendlich oft periodisch fortgesetzt wird. Selbst mit der Wahl einer Einheitszelle, welche eine oder mehrere Störstellen beinhaltet, würde eine grundlegend andere Struktur entstehen. Außerdem ergäbe ein solcher Ansatz auch aus numerischen Gründen wenig Sinn, was später noch genauer erläutert werden soll. Aus diesem Grund wird der Kristall gemäß dem idealisierten Grundriss aus Abbildung 3.1 modelliert, auch wenn der Einfluss der Störstellen auf die Bandstruktur wesentlich ist [20].

Die unterschiedliche Höhe der vollverzinkten Stäbe wird vernachlässigt, sodass nur Ebenen unterhalb des niedrigsten Stabes betrachtet werden. Aus diesem Grund sollen die Wellenvektoren nur in der xy -Ebene liegen und somit ihre z -Komponente nicht ändern, was bereits für die Separation von Gleichung (2.3) angenommen wurde.

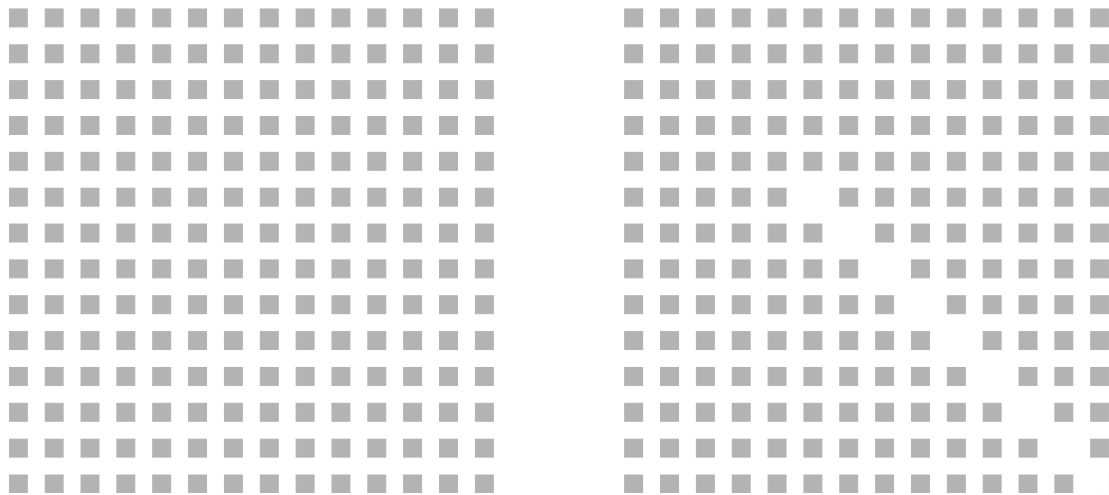


Abbildung 3.1: Grundriss des Kristalls ohne (links) und mit Störstellen (rechts)

In den einzelnen Stäben befindet sich Luft, genau wie in der sogenannten Matrix, welche die Stangen umgibt. Da die bereits beschriebenen Lamé-Konstanten jedoch nicht für Gase definiert sind, kann die elastische Wellengleichung nicht verwendet werden. Es sollen deshalb Kombinationen verschiedener Materialien mit dem Ziel einer möglichst großen Bandlücke getestet werden.

3.2 Wahl der Einheitszelle

Eine mögliche Wahl der Einheitszelle ist in Abbildung 3.2 dargestellt. Die konkrete Lage der hier gewählten Wigner-Seitz-Zelle innerhalb des Kristalls ist dabei unbedeutend, da für die Entwicklung nach ebenen Wellen ein unendlich ausgedehnter Kristall angenommen wird. Die Länge L der Einheitszelle liegt bei 24 Zentimetern, die Stabbreite a bei 12 Zentimetern und die Dicke des Stab-Metalls d bei ungefähr 5 Millimetern (siehe Abbildung 3.2). Für die weiteren Betrachtungen wird die Zelle in die drei Teilbereiche der Matrix (1), der Zwischenschicht (2) und der des Streuers (3) aufgeteilt.

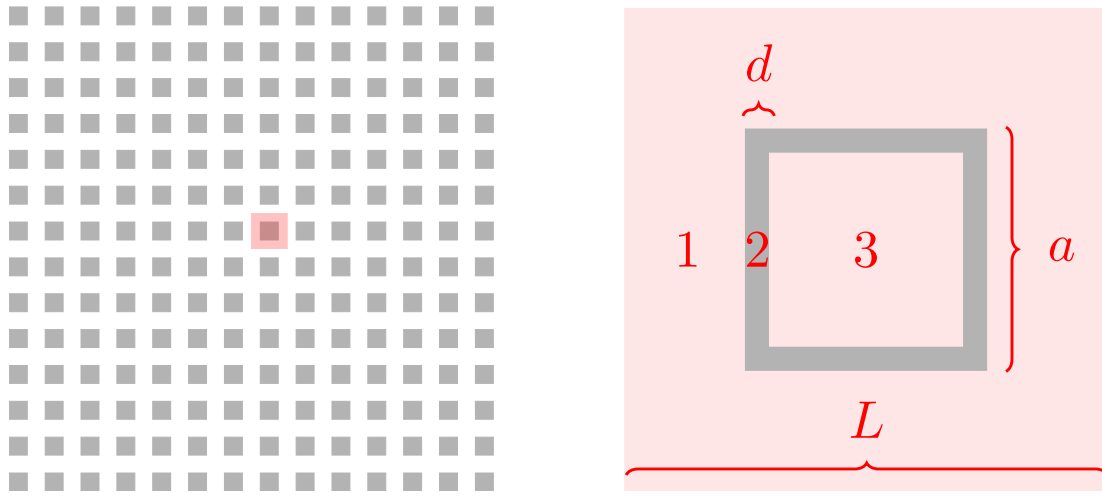


Abbildung 3.2: Mögliche Wahl der Einheitszelle im Kristallgitter und deren Abmessungen.

3.3 Berechnung der Fourierkoeffizienten

Wie schon erwähnt, können die Fourier-Koeffizienten aus den Gleichungen (2.16) bis (2.18) für die hier gewählte quadratische Einheitszelle analytisch gelöst werden. Die einzelnen Lösungen für den Fall $\mathbf{G} = 0$ hängen nicht von der Geometrie der Zelle ab und mitteln über den jeweiligen Materialparameter der Dichte oder Lamé-Konstanten.

$$\rho_{\mathbf{G}} = \begin{cases} \frac{A_1}{A} \rho_1 + \frac{A_2}{A} \rho_2 + \frac{A_3}{A} \rho_3 & \mathbf{G} = 0 \\ (\rho_2 - \rho_1) F_2(\mathbf{G}) + (\rho_3 - \rho_2) F_3(\mathbf{G}) & \mathbf{G} \neq 0 \end{cases} \quad (3.1)$$

$$\lambda_{\mathbf{G}} = \begin{cases} \frac{A_1}{A} \lambda_1 + \frac{A_2}{A} \lambda_2 + \frac{A_3}{A} \lambda_3 & \mathbf{G} = 0 \\ (\lambda_2 - \lambda_1) F_2(\mathbf{G}) + (\lambda_3 - \lambda_2) F_3(\mathbf{G}) & \mathbf{G} \neq 0 \end{cases} \quad (3.2)$$

$$\mu_{\mathbf{G}} = \begin{cases} \frac{A_1}{A} \mu_1 + \frac{A_2}{A} \mu_2 + \frac{A_3}{A} \mu_3 & \mathbf{G} = 0 \\ (\mu_2 - \mu_1) F_2(\mathbf{G}) + (\mu_3 - \mu_2) F_3(\mathbf{G}) & \mathbf{G} \neq 0 \end{cases} \quad (3.3)$$

Für beliebige reziproke Gittervektoren sind hingegen die geometrischen Eigenschaften der Einheitszelle von Bedeutung. Die Strukturfunktionen $F_2(\mathbf{G})$ und $F_3(\mathbf{G})$ lassen sich in einen von G_x und G_y abhängigen Teil aufteilen.

$$F_2(\mathbf{G}) = \tilde{F}_2(G_x) \cdot \tilde{F}_2(G_y) \quad (3.4)$$

$$F_3(\mathbf{G}) = \tilde{F}_3(G_x) \cdot \tilde{F}_3(G_y) \quad (3.5)$$

Durch Integration über die beiden Teilbereiche ergeben sich folgende Lösungen, wobei die x -abhängigen durch die quadratische Symmetrie der Einheitszelle analog zu den y -abhängigen Ergebnissen sind.

$$\tilde{F}_2(G_{x|y}) = \begin{cases} \frac{1}{L}(a + 2d) & G_{x|y} = 0 \\ \frac{2}{G_{x|y}L} \sin(G_{x|y} \frac{a}{2} + G_{x|y} d) & G_{x|y} \neq 0 \end{cases} \quad (3.6)$$

$$\tilde{F}_3(G_{x|y}) = \begin{cases} \frac{a}{L} & G_{x|y} = 0 \\ \frac{2}{G_{x|y}L} \sin(G_{x|y} \frac{a}{2}) & G_{x|y} \neq 0 \end{cases} \quad (3.7)$$

4 Ergebnisse

4.1 Bandstrukturen verschiedener Material-Kombinationen

Für die Bandstruktur wurde ein beliebiger Weg entlang der Symmetriepunkte Γ , X und M mit den folgenden Koordinaten im zweidimensionalen reziproken Raum gewählt:

$$\Gamma = \frac{2\pi}{L} (0, 0, 0) \quad (4.1)$$

$$X = \frac{\pi}{L} (1, 0, 0)$$

$$M = \frac{\pi}{L} (1, 1, 0)$$

Die markierte Fläche in Abbildung 4.1 stellt die nicht-reduzierbare Brillouin-Zone dar. Da die Einheitszelle im Bezug auf 90°-Drehungen rotationssymmetrisch ist, sind die Eigenwerte in allen vier Quadranten äquivalent. Zusätzlich ist die Einheitszelle invariant gegenüber Spiegelungen an den Diagonalen, weshalb sich die erste Brillouin-Zone reduzieren lässt. Zwischen den drei Symmetriepunkten wurden endlich viele äquidistante k -Punkte als Näherung für einen kontinuierlichen Weg im reziproken Raum gesetzt.

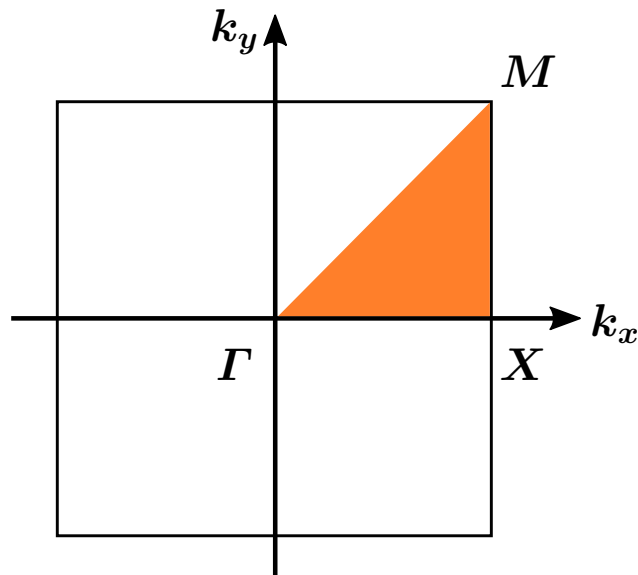


Abbildung 4.1: Die erste Brillouin-Zone im k -Raum.

Entlang dieses Pfades sollen nun Bandstrukturen berechnet werden. Die Matrizen aus den Gleichungen (2.24) bis (2.27) wurden hierfür aufgestellt und in die Eigenwertgleichungen (2.23) für die xy - und z -Moden eingesetzt. Die Anzahl numerischer Lösungen der Eigenwertprobleme an jedem k -Punkt entspricht dabei der Anzahl an Bändern der Bandstruktur. Aus diesen Überlegungen resultieren separate xy - und z -Bänder entlang des gewählten Pfades im reziproken Raum. Für die weiteren Betrachtungen werden phononische Kristalle aus Materialien mit folgenden Parametern simuliert [24]:

Material	Dichte ρ in kg/m ³	Kompressionsmodul K in GPa	Poissonzahl ν
Aluminium	2699	76	0.35
Gold	19320	180	0.42
Blei	11342	46	0.44
Kupfer	8920	137.8	0.35
HDPE	950	0.2	0.46
Magnesium	1738	35.6	0.35
Quarzglas	2201	40	0.17
Silizium	2329	102	0.22
Stahl	7860	160	0.28
Titan	4500	135	0.33

Da für die verschiedenen Materialien mehr Daten für das Kompressionsmodul und die Poissonzahl vorliegen und sich die einzelnen elastischen Konstanten leicht ineinander umrechnen lassen, wurden die für die elastische Wellengleichung benötigten Parameter hier nicht angegeben. Stattdessen lassen sich die erste und zweite Lamé-Konstante λ und μ jeweils aus dem Kompressionsmodul und der Poissonzahl berechnen:

$$\lambda = \frac{3K\nu}{1 + \nu} \quad (4.2)$$

$$\mu = \frac{3K(1 - 2\nu)}{2(1 + \nu)} \quad (4.3)$$

Abbildung 4.2 zeigt nun verschiedene Bandstrukturen für einen cutoff-Radius von 600 m^{-1} mit den in Kapitel 3.2 beschriebenen Abmessungen. In diesem Zusammenhang ist zu erwähnen, dass anlehnend an die betrachtete Skulptur das Material der Matrix dem des Streuers entsprechen soll.

Vergleicht man die Bandstrukturen (a) und (b), so fällt vor allem deren Ähnlichkeit auf. Gerade in den Frequenzen unterhalb von 15 kHz ist dies besonders deutlich, auch wenn sich der Frequenzbereich der ersten sechs xy - und z -Bänder um ungefähr 6 kHz unterscheidet. Im Gegensatz zu allen anderen Kombinationen heben sich jene mit Polyethylen hoher Dichte (HDPE) deutlich von den restlichen Bandstrukturen ab, die sich von (a) und (b) letztlich nicht großartig unterscheiden. Die Bänder sind nicht nur wesentlich verteil-

ter, sondern liegen auch in einem deutlich niedrigeren Frequenzbereich, was (c) und (d) exemplarisch aufzeigen. Dies liegt am starken Kontrast der Dichten und Kompressionsmodule, da HDPE für diese Größen im Vergleich zu den restlichen gewählten Materialien die niedrigsten Werte aufweist. Am Beispiel von HDPE und Gold wird dies besonders deutlich, da der Unterschied in Dichte und Kompressionsmodul mit $\Delta\rho = 18\,370\text{ kg/m}^3$ und $\Delta K = 179.8\text{ GPa}$ für die bisher eingesetzten Materialien am größten ausfällt. So ergeben sich Bandstrukturen mit einer Dispersion, d.h. einer Richtungsabhängigkeit der Frequenz, die im Vergleich zu (a) und (b) einen weniger linearen Charakter aufweist. Dennoch ähneln sich auch die Bandstrukturen von Materialien, die mit HDPE kombiniert wurden. Grundsätzlich stellt sich somit die Frage, warum trotz unterschiedlicher Dichten und elastischer Konstanten die Bandstrukturen nur geringe Differenzen aufweisen.

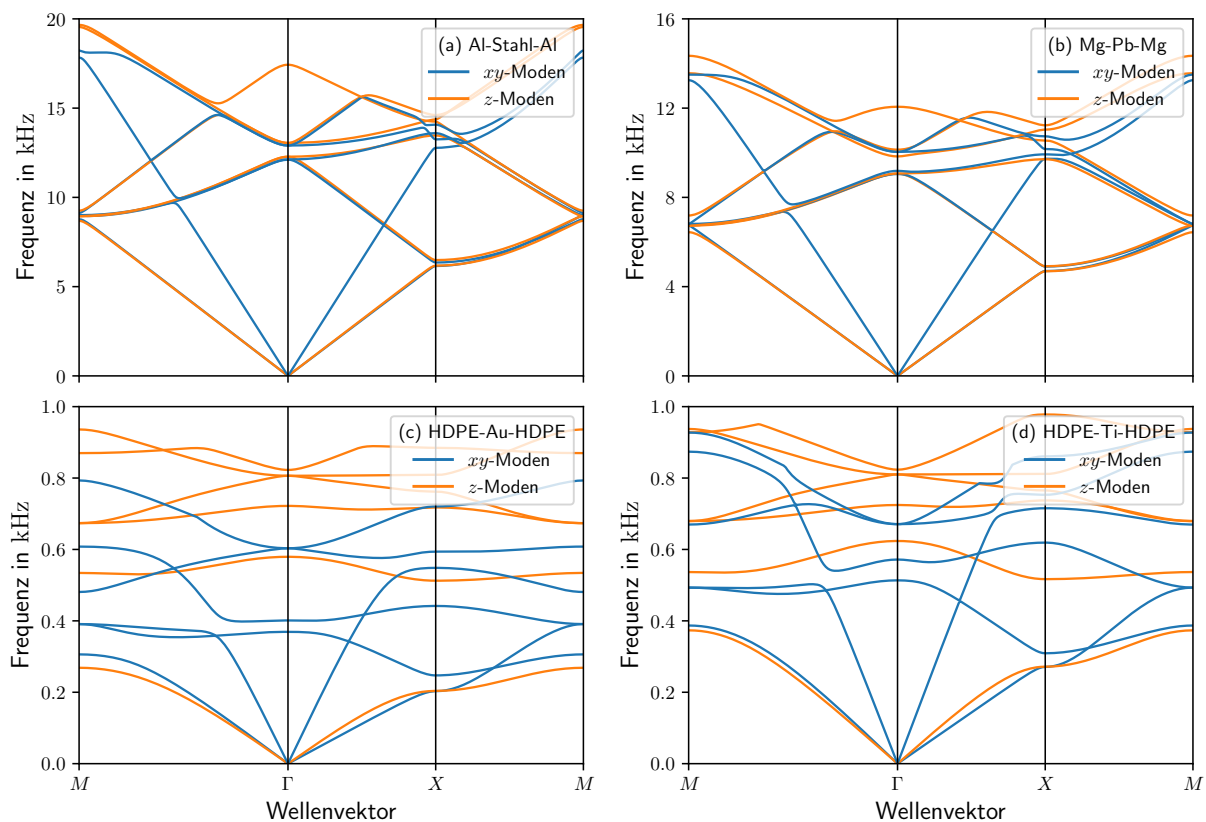


Abbildung 4.2: Bandstrukturen für verschiedene Material-Kombinationen mit den Abmessungen des betrachteten Kunstwerks.

Zur Beantwortung dieser Fragestellung soll Abbildung 4.3 dienen. Diese zeigt eine für diese Betrachtungen typische Kombination im Vergleich zu einem Kristall aus nur einem Material, sodass für diesen Fall keine periodische Änderung der akustischen Brechzahl mehr vorliegt. Wenngleich sich die beiden Bandstrukturen in den ersten sechs xy - und z -Bändern im Frequenzbereich um 10 kHz unterscheiden, ähneln sich deren Bandverläufe dennoch enorm. Zwischen den einzelnen Symmetriepunkten ist die Dispersion häufig linear, an den drei Punkten treten zudem starke Änderungen der Monotonie auf und es

liegt eine besonders starke Überlappung einzelner Bänder vor. Diese Ähnlichkeit zeigt, dass der Einfluss des Materials der Zwischenschicht für $d = 0.5$ cm nicht sonderlich groß ist. Mit der Verringerung dieser Dicke entfernt sich die Bandstruktur somit immer weiter vom typischen Verhalten phononischer Kristalle. Somit ist das Fehlen einer Bandlücke in den bisherigen Betrachtungen wenig überraschend. Mit einer Dicke von $d = 0.5$ cm können Bandlücken für die gewählte Einheitszelle nur durch besonders hohe Differenzen der Dichten oder elastischen Konstanten erreicht werden. Aus diesem Grund unterscheiden sich die Bandstrukturen mit HDPE stark von Kombinationen anderer Materialien, auch wenn selbst diese keine Frequenzlücken enthalten.

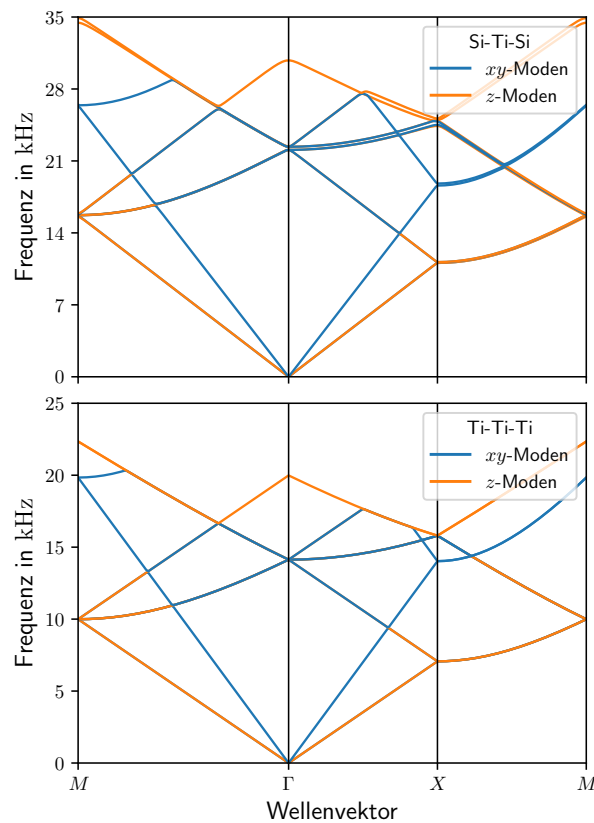


Abbildung 4.3: Bandstrukturen für die Material-Kombination Silizium-Titan-Silizium und für reines Titan mit den Abmessungen des betrachteten Kunstwerks.

Erste Ergebnisse sind hiermit erzielt, wenngleich insgesamt keine Bandlücken für 5 mm im Bereich der jeweils ersten sechs xy - und z -Bänder gefunden wurden. Weitergehende Resultate würden sich eventuell durch das Testen anderer Kombinationen ergeben, wobei bisher 25 Bandstrukturen aus den bereits aufgelisteten Materialien berechnet werden konnten. Da die Existenz von Bandlücken die für Anwendungen interessanteste Eigenschaft phononischer Kristalle darstellt, wäre das Aufspüren von Frequenzlücken für die betrachtete Skulptur wünschenswert. Aus diesem Grund sollen nun Bandstruktur-Berechnungen für eine Dicke von $d = 2$ cm des Quadratrings mit den eben genannten Materialien durchgeführt werden.

Die Ergebnisse sind in Abbildung 4.4 in Form von vier ausgewählten Bandstrukturen dargestellt. Die Kombination (a) von Aluminium und Stahl weist im Vergleich zur Bandstruktur mit $d = 0.5$ cm Bänder auf, die weniger überlappen und somit verteilter sind. Bandlücken treten hier auch für den Fall der höheren Dicke nicht auf. Nur mit dem bereits verwendeten Material HDPE konnten solche Frequenzlücken gefunden werden. Exemplarisch sind in diesem Zusammenhang (b), (c) und (d) aufgeführt, wobei mit Gold durch die hohe Differenz der Dichte und vor allem des Kompressionsmoduls die bisher größte Bandlücke erzielt werden konnte. Doch nicht jede Kombination mit HDPE führte zu ähnlichen Ergebnissen. Es sei darauf hingewiesen, dass letztlich Frequenzlücken für Gold, Blei, Kupfer und Stahl in Kombination mit HDPE aufgetreten sind.

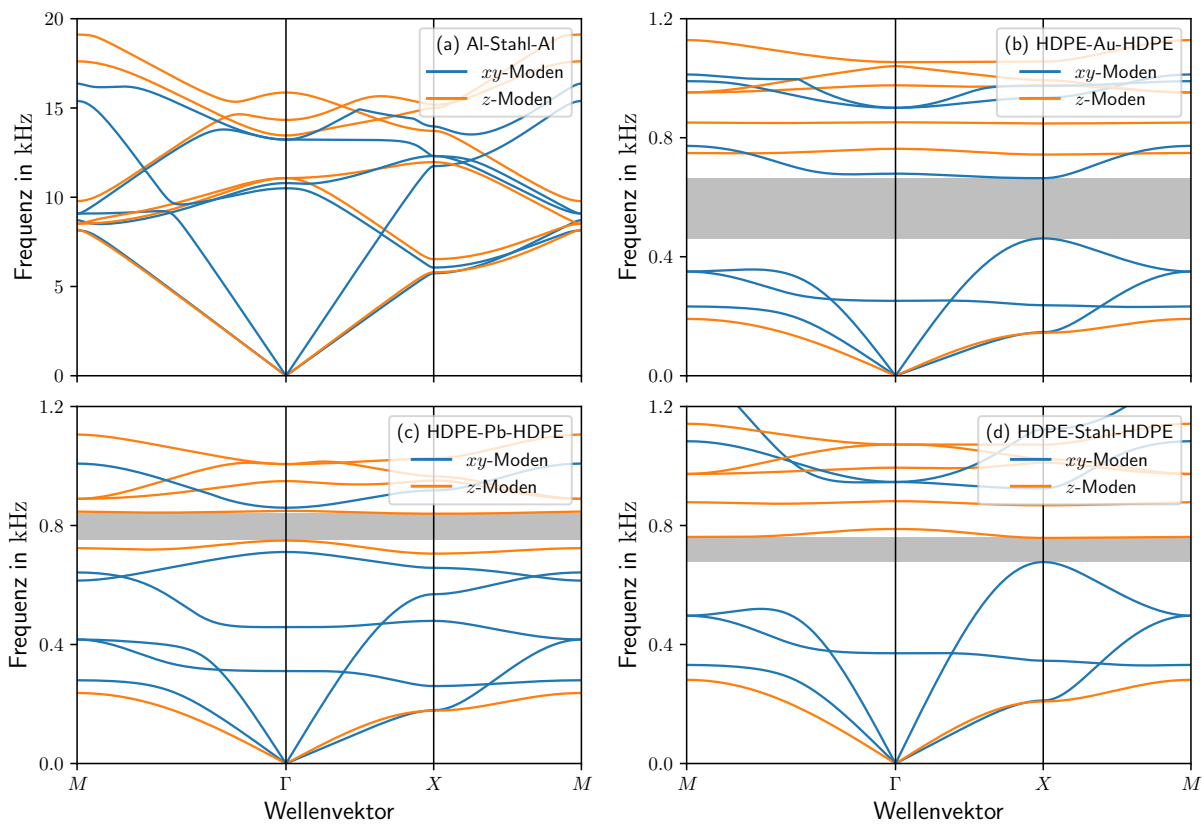


Abbildung 4.4: Bandstrukturen für verschiedene Material-Kombinationen mit den Abmessungen des betrachteten Kunstwerks, jedoch mit einer veränderten Dicke von $d = 2$ cm. Zur Veranschaulichung ist für jede Bandstruktur die erste Bandlücke farblich gekennzeichnet.

Auch wenn hiermit das oben genannte Ziel erreicht ist, sind die Dichte-Differenzen der bisher getesteten Kombinationen im Vergleich zu denen des betrachteten Kunstwerks, also Stahl und Luft, vergleichsweise gering. Dies liegt weniger an der zu niedrigen Dichte der Eisenstäbe als an der geringen Dichte von Luft. Für weitere Untersuchungen ist es demnach zweckmäßig ein ähnliches Material für die Zwischenschicht zu finden, welches jedoch aus bereits genannten Gründen nicht gasförmig oder flüssig sein darf. Ein neuarti-

ges Material mit solchen Eigenschaften ist hochporöses Aerogel mit der geringsten Dichte unter den Festkörpern, da es zum größten Teil aus Luft besteht. Für die Simulation soll Silicat-Aerogel mit den Parametern $\rho = 100 \text{ kg/m}^3$, $K = 2.8 \text{ MPa}$ und $\nu = 0.2$ in die bereits verwendeten Materialien hoher Dichte eingesetzt werden [25]. Die Resultate dieses Vorhabens sind nun in Abbildung 4.5 dargestellt.

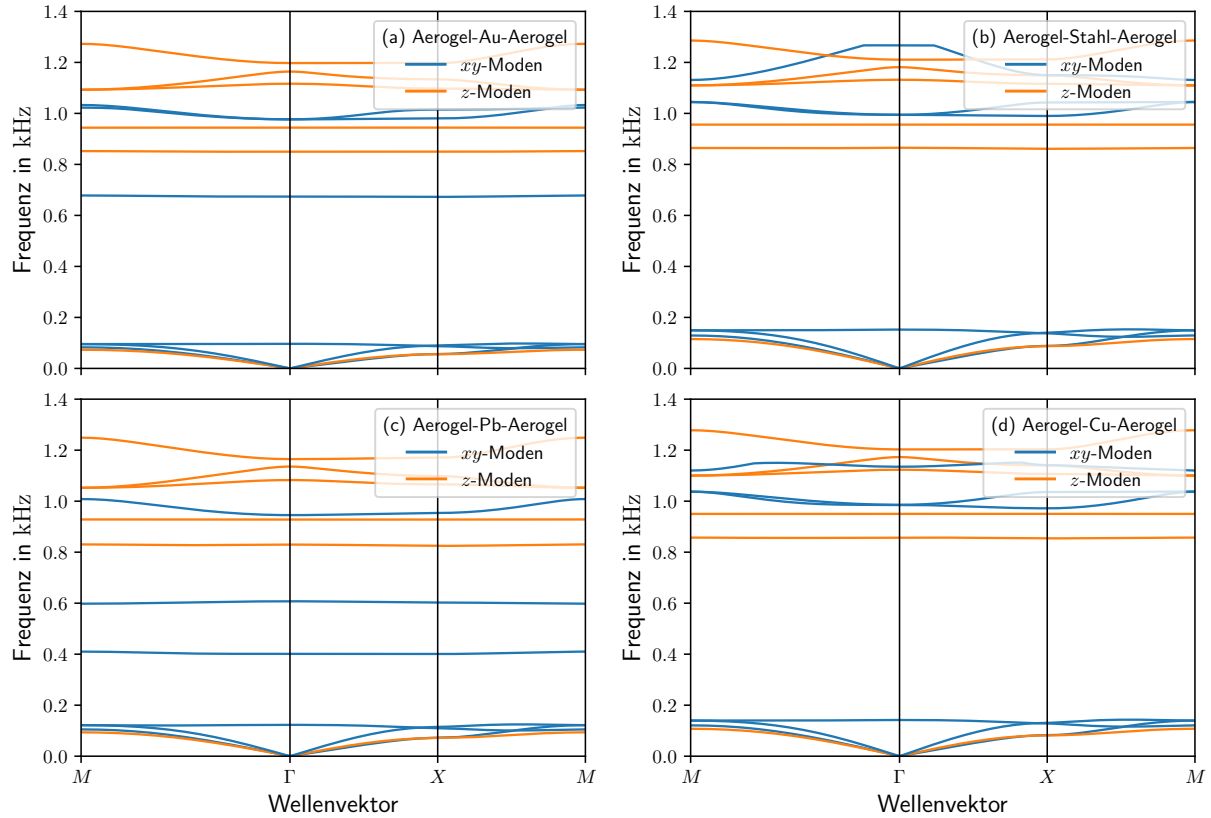


Abbildung 4.5: Bandstrukturen für Material-Kombinationen mit Aerogel und einer Dicke von $d = 2 \text{ cm}$.

Im Vergleich zu allen bisher berechneten Bandstrukturen kommt es für Aerogel in allen getesteten Kombinationen, also mit Gold, Stahl, Blei, Kupfer und Titan, zu weiten Bandlücken. Auffallend ist, dass sich die vier abgebildeten Bandstrukturen besonders durch flache Bänder und damit geringe Überlappungen kennzeichnen. Innerhalb der ersten sechs xy - und z -Bänder treten für Gold (a) bereits sechs Lücken auf.

Erwähnenswert ist an dieser Stelle, dass alle in dieser Arbeit gefundenen Bandlücken in dem für das menschliche Ohr wahrnehmbaren Frequenzbereich von 20 bis 20 000 Hz liegen. Die Bandstrukturen (b) und (d) ähneln sich gerade in den Bändern unterhalb von 1 kHz besonders stark und enthalten die bisher größte Frequenzlücke mit etwa 6.5 kHz. Die größte Anzahl an Bandlücken weist die Kombination (c) von Aerogel und Blei mit sieben verschiedenen Lücken auf.

4.2 Eigenvektoren innerhalb der Einheitszelle

In Abbildung 4.6 wurden die Eigenvektoren $u_{jk}(\mathbf{r})$ aus den Gleichungen (2.19) bis (2.23) bezüglich der xy -Moden wie folgt in den Realraum zurück transformiert:

$$u_{jk}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} u_{jk,\mathbf{G}}, \quad j = x, y \quad (4.4)$$

Die resultierenden Eigenvektoren des Realraums sind nun innerhalb der Einheitszelle für einen cutoff-Radius von 500 m^{-1} an verschiedenen Punkten im k -Raum dargestellt.

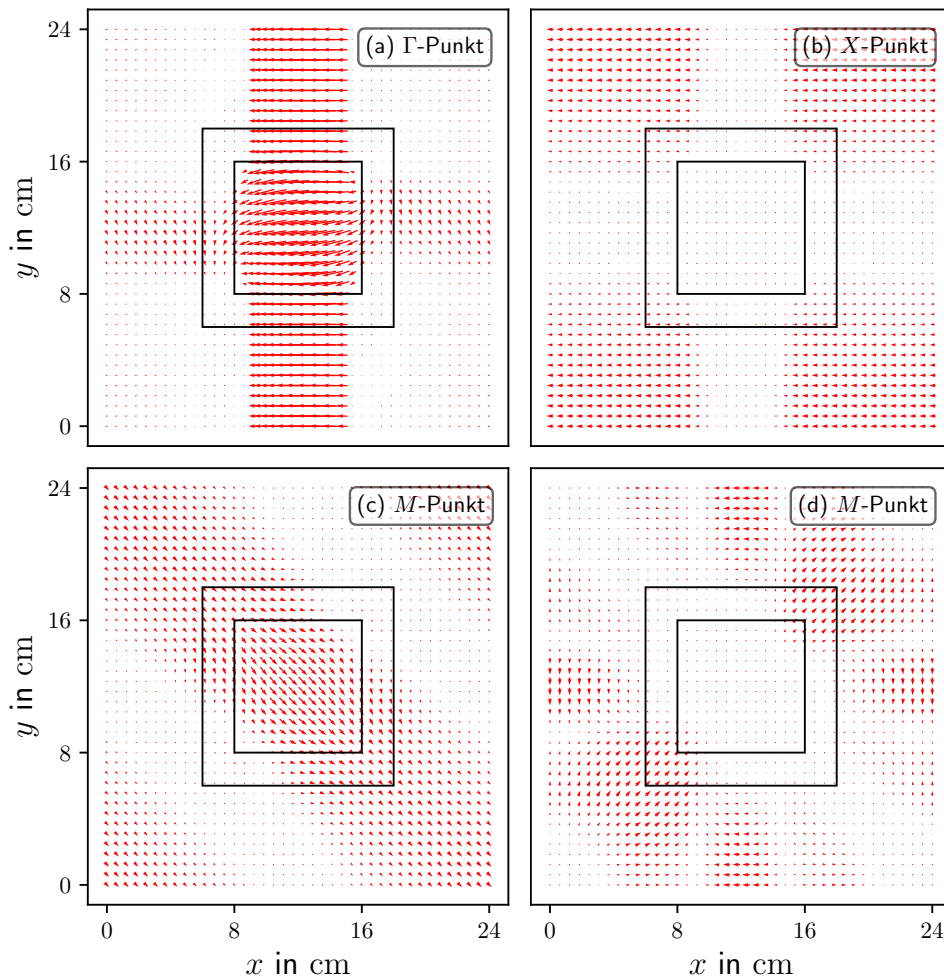


Abbildung 4.6: Eigenvektoren innerhalb der Einheitszelle für die Kombination HDPE-Gold-HDPE am Γ -Punkt des dritten xy -Bandes (a), am X -Punkt des zweiten xy -Bandes (b), am M -Punkt des zweiten xy -Bandes (c) und am M -Punkt des dritten xy -Bandes (d).

Die gezeigten longitudinalen Vektoren ergeben unterschiedliche Muster an verschiedenen Symmetriepunkten im reziproken Raum, sind bezüglich des eingezeichneten Betrags je-

doch nicht maßstabsgetreu. Nur die relative Auslenkung der Eigenvektoren zueinander ist in diesem Fall entscheidend. In Abbildung 4.7 sind diesmal die Eigenvektoren bezüglich der z -Moden gezeigt. Diese entsprechen den transversalen Auslenkungen elastischer Wellen, welche sich je nach Orientierung zum Kristall unterschiedlich verhalten. Mit Hilfe einer Farbskala und den dazugehörigen dimensionslosen Kennzahlen wurde der Betrag der Vektoren auf eine Höhengskala projiziert und farbig gekennzeichnet.

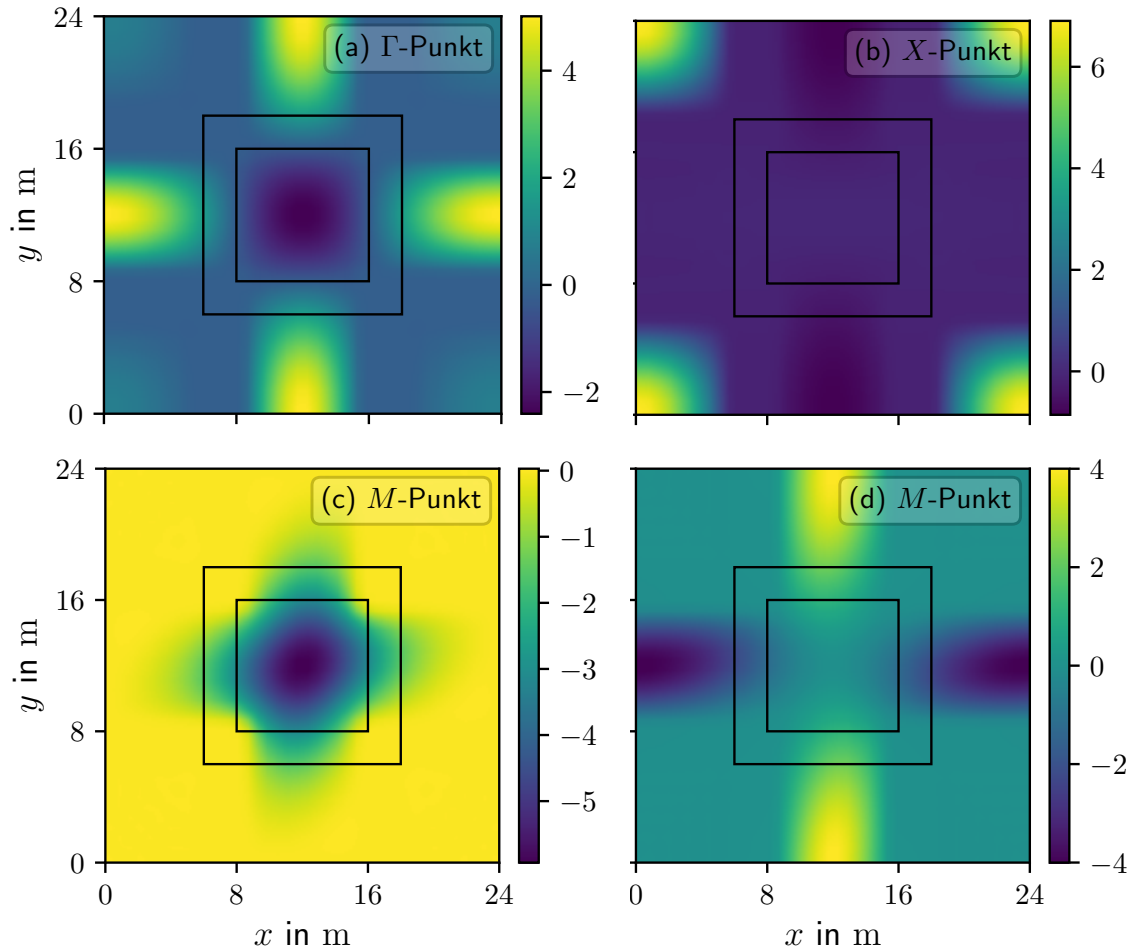


Abbildung 4.7: Betrag der Eigenvektoren innerhalb der Einheitszelle für die Kombination HDPE-Gold-HDPE am Γ -Punkt des dritten z -Bandes (a), am X-Punkt des zweiten z -Bandes (b), am M-Punkt des zweiten z -Bandes (c) und am M-Punkt des dritten z -Bandes (d).

Für zeitabhängige Lösungen $u_j(\mathbf{r}, t)$ ist es notwendig, die Auslenkungen der xy - und z -Moden aus Gleichung (4.4) mit dem Anteil $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-i\omega t}$ zu multiplizieren. Diese Annahme wurde bereits für die Herleitung der stationären elastischen Wellengleichung (2.3) verwendet. In dieser Arbeit werden allerdings nur stationäre Lösungen untersucht.

4.3 Konvergenz der Frequenzbänder

Für eine konkrete Bandstruktur sollte zunächst die für ein möglichst genaues Resultat notwendige Anzahl an ebenen Wellen empirisch bestimmt werden. Als Testkombination wurde Polyethylen hoher Dichte (HDPE) für Matrix und Streuer sowie eine Zwischenschicht aus Kupfer gewählt. Analog zum Aufbau des in dieser Arbeit beschriebenen Kunstwerks werden also auch hier nur zwei verschiedene Materialien kombiniert. In Abbildung 4.8 ist die ermittelte Bandstruktur für eine unterschiedliche Anzahl an verwendeten Gittervektoren und damit für verschiedene cutoff-Radien dargestellt.

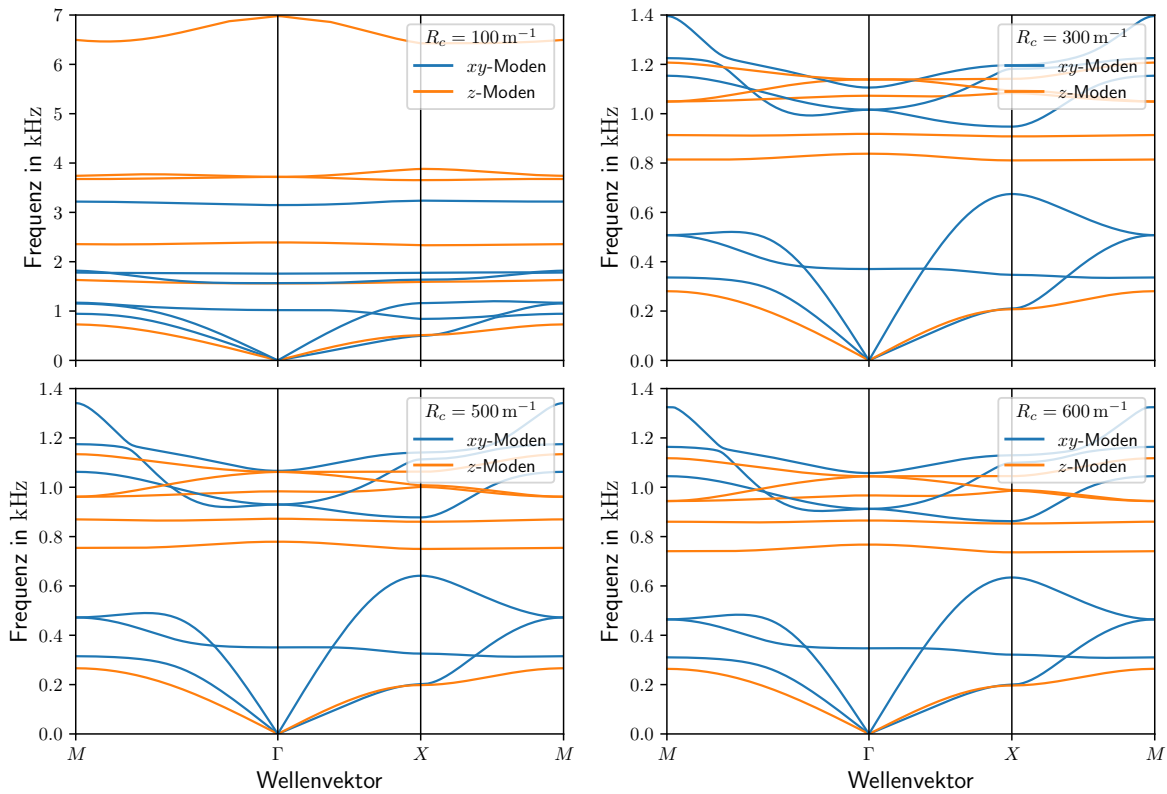


Abbildung 4.8: Bandstrukturen für die Material-Kombination HDPE-Kupfer-HDPE.

Für wenige Gittervektoren erhält man aufgrund der geringen Auflösung flache Bänder, was auch die Anzahl von Überlappungen reduziert. Ab einem Radius von 300 m^{-1} sind die untersten Bänder schon stark konvergiert, was im Vergleich zu $R_c = 600 \text{ m}^{-1}$ auffällt. Zusätzlich liegen die hier dargestellten ersten sechs xy - und z -Bänder im Gegensatz zur Bandstruktur für $R_c = 100 \text{ m}^{-1}$ nun im Bereich von 0 bis 1.4 kHz. Die Bänder oberhalb des zweiten z -Bandes unterliegen mit steigender Anzahl an Gittervektoren stärkeren Schwankungen. Vergleicht man schließlich die letzten beiden Bandstrukturen, so sind die Abweichungen selbst in den oberen Frequenzbereichen nur noch minimal und das Ergebnis ist hinreichend exakt. Besonders eingängig wird die Bedeutung dieses Sachverhalts durch die Darstellung der xy -Eigenvektoren des Realraums innerhalb der Einheitszelle.

Die Anzahl der mit der Fouriertransformation berechneten realen Gittervektoren wurde so gewählt, dass sie der Anzahl an ebenen Wellen entspricht.

So ist in Abbildung 4.9 diese Situation für die bereits verwendeten cutoff-Radien aus Abbildung 4.8 dargestellt.

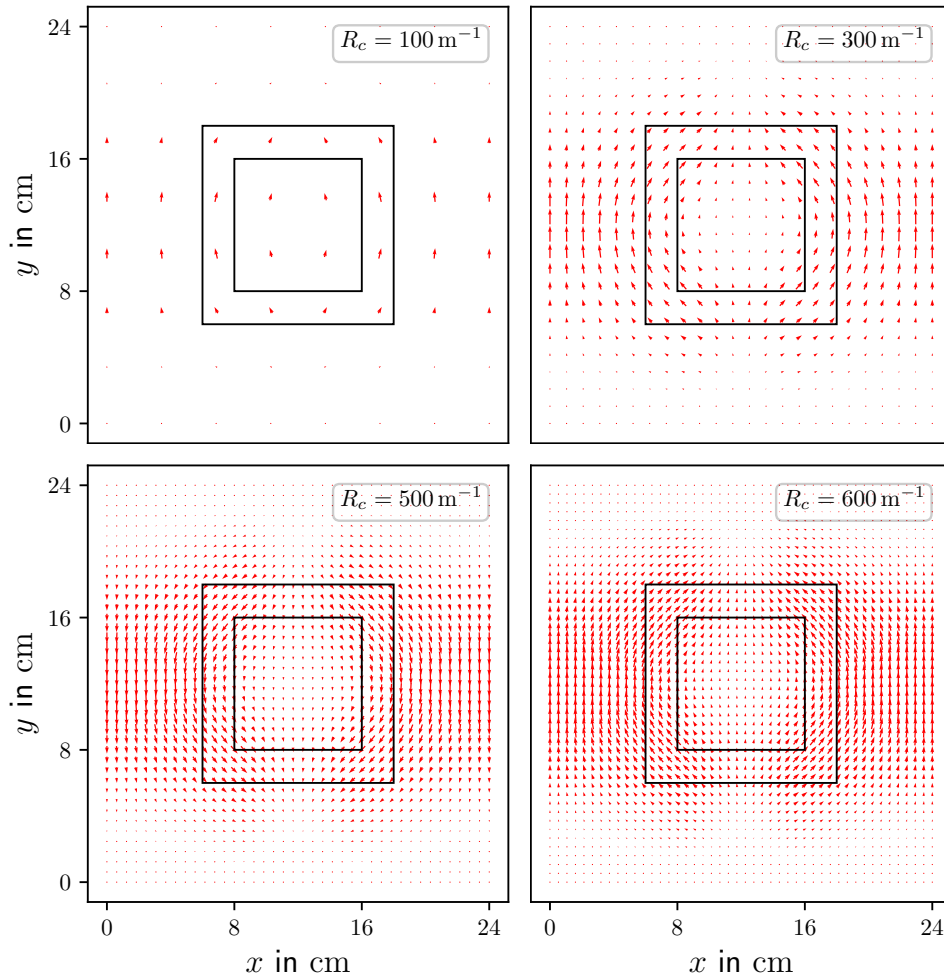


Abbildung 4.9: Eigenvektoren innerhalb der Einheitszelle der Kombination HDPE-Kupfer-HDPE am X-Punkt des zweiten xy -Bandes für unterschiedlichen cutoff-Radien.

Mit steigendem cutoff-Radius erhöht sich die Anzahl der reziproken Gitterpunkte innerhalb der Einheitszelle. Um ein möglichst präzises Ergebnis zu erreichen, muss die Wellenlänge der ebenen Wellen ausreichend klein sein, um auf dem Quadrating aus Kupfer zu liegen, was bei $R_c = 100 \text{ m}^{-1}$ noch nicht der Fall ist. Je geringer die Abmessungen innerhalb der Einheitszelle sind, desto größer sollte demzufolge die Anzahl an ebenen Wellen sein.

Eine besonders anschauliche Darstellung der Bandstruktur-Konvergenz befindet sich in Abbildung 4.10. Hier wurde die Kenngröße der Bandlückenbreite über dem cutoff-Radius aufgetragen, wobei ausschließlich die unterste Frequenzlücke betrachtet wurde. Aus den

berechneten Werten wurde eine Kurvenanpassung ermittelt. Hieraus lässt sich schlussfolgern, dass sich die Abweichung der Bandlücke vom Grenzwert für beide Dicken in etwa umgekehrt proportional zum Quadrat des cutoff-Radius verhält, was auch der Anzahl ebener Wellen entspricht.

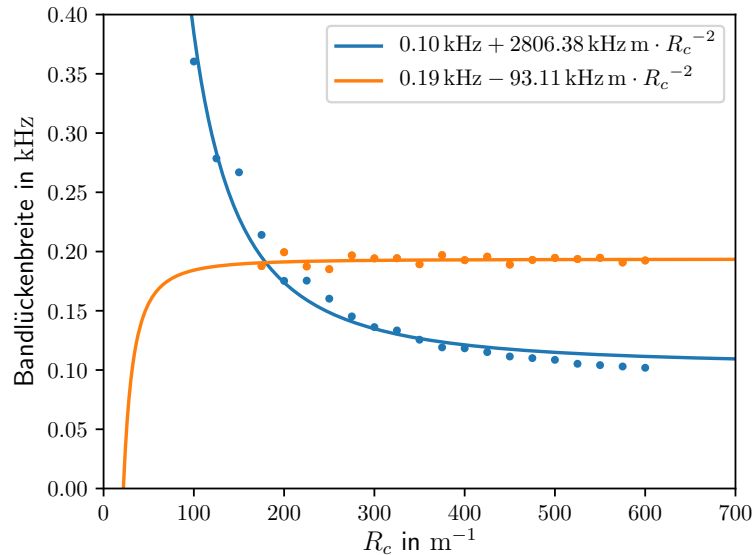


Abbildung 4.10: Die Änderung der Bandlückenbreite bei steigendem cutoff-Radius für HDPE-Kupfer-HDPE. Es wurden Werte für eine Dicke von $d = 2$ cm (blau) und $d = 3$ cm (orange) dargestellt.

Bei geringen Abmessungen innerhalb der gewählten Einheitszelle konvergiert die Bandstruktur wesentlich langsamer, was sich bereits bei einem Dicke-Unterschied von $\Delta d = 1$ cm bemerkbar macht. Zusätzlich kommt es bei geringen Abmessungen zu stärkerer Überlappung einzelner Bänder, was in Abbildung 4.11 verdeutlicht wird:

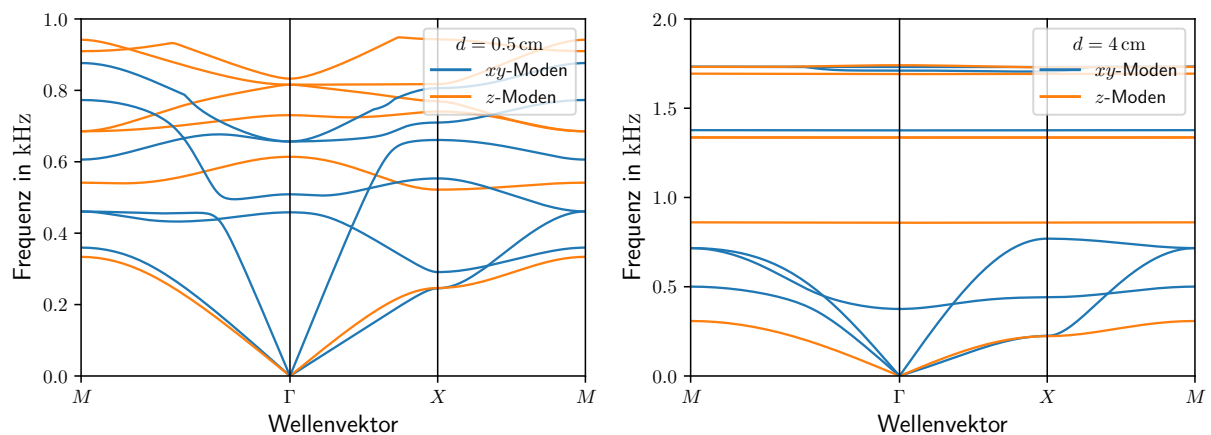


Abbildung 4.11: Vergleich zweier Bandstrukturen von HDPE-Kupfer-HDPE mit verschiedenen Dicken und einem cutoff-Radius von 600 m^{-1} .

Abgesehen von der Dicke des Quadratrings in der Einheitszelle wurden alle Parameter für beide Bandstrukturen gleich gewählt. Dennoch unterscheiden sich beide Darstellungen enorm, was den signifikanten Einfluss der Materialabmessungen bestätigt. Während die Bänder für $d = 0.5\text{ cm}$ stark gekrümmt sind, flachen vor allem die oberen Bänder mit steigender Dicke vermehrt ab.

4.4 Manipulation der Bandlücke

Das Dichteverhältnis der einzelnen Materialien hat einen signifikanten Einfluss auf die Größe der Bandlücke, wobei ein hoher Kontrast der Parameter zu einer Erhöhung der Bandlückenbreite führen kann. Dieser Sachverhalt wurde vor allem bei der Berechnung der Bandstrukturen deutlich. Im folgenden soll dies am Beispiel HDPE-Kupfer-HDPE mit $d = 2\text{ cm}$ und einem cutoff-Radius von 500 m^{-1} anschaulich verdeutlicht werden, wobei die Dichte des Kupfer variiert wird. Die Abbildung 4.12 zeigt nun die Breite der ersten Bandlücke über dem Dichteverhältnis.

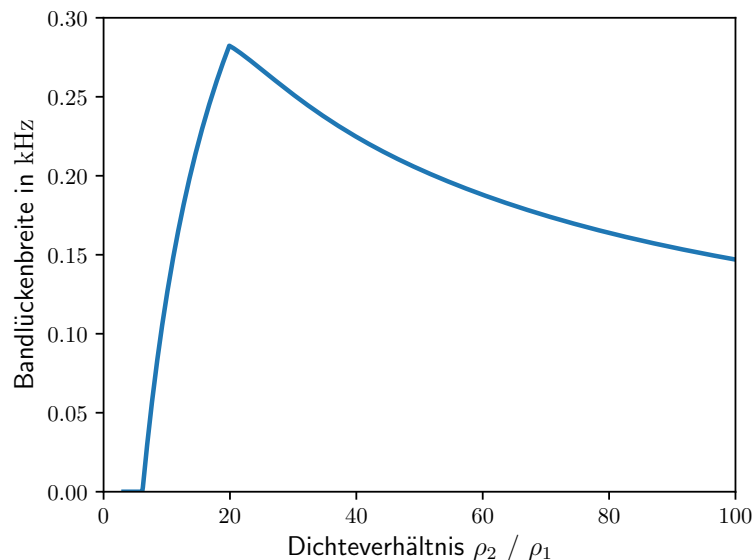


Abbildung 4.12: Die Änderung der Bandlückenbreite über dem Dichteverhältnis von Streuer und Matrix.

Unterhalb des Dichteverhältnisses von sechs tritt zunächst keine Bandlücke auf, da sich das dritte xy -Band am X -Punkt noch mit dem zweiten z -Band überlappt. Eine Bandstruktur in diesem Bereich ist in Abbildung 4.13 (a) dargestellt. Bis zu einem Dichteverhältnis von 19.89 mit einer Bandlückenbreite von 0.28 kHz wird die erste Bandlücke stark verbreitert, da die xy -Bänder in ihrem Frequenzbereich sinken, während die z -Bänder annähernd konstant bleiben. Jener Bereich ist exemplarisch in der Bandstruktur (b) gezeigt. Die maximale Bandlücke zwischen dem Dichteverhältnis von 0 bis 100 ist schließlich in der Bandstruktur (c) gezeigt.

Danach verringert sich die Bandlückenbreite jedoch kontinuierlich, da die Frequenz der xy -Bänder weiter abnimmt, was sich bereits in (d) andeutet.

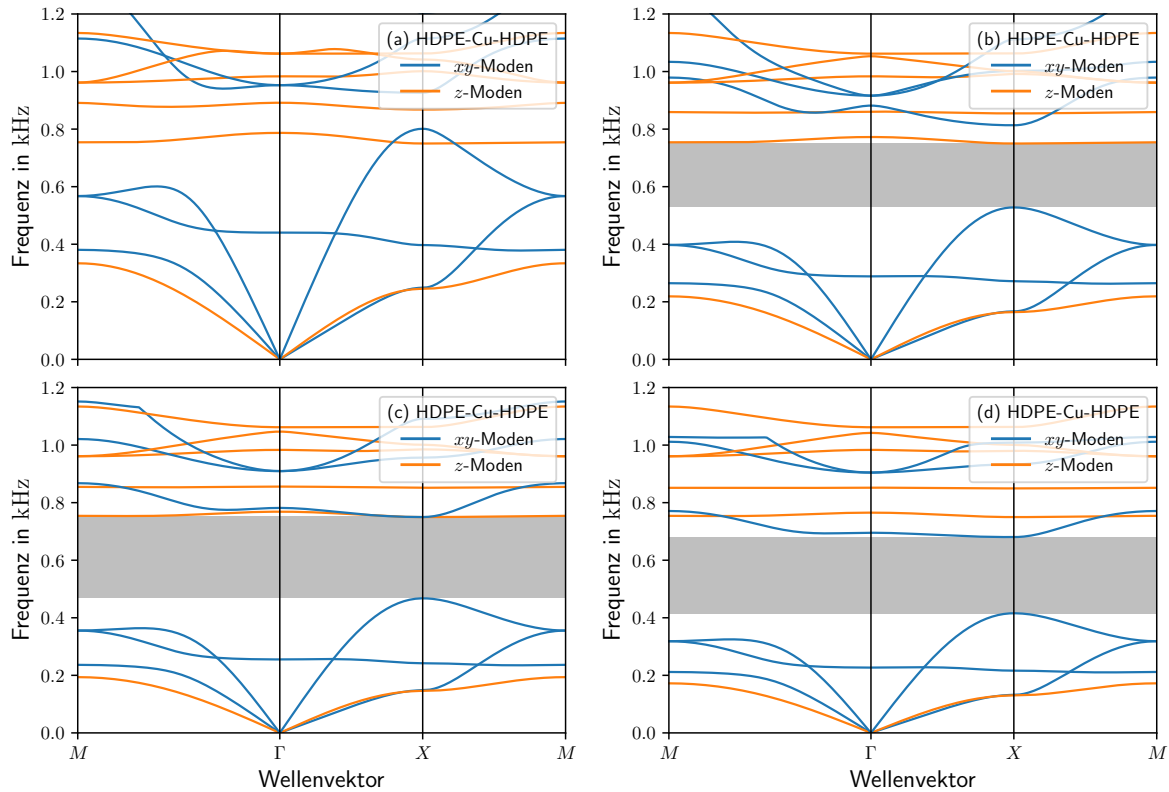


Abbildung 4.13: Bandstrukturen für die Material-Kombination HDPE-Kupfer-HDPE mit farbiger Kennzeichnung der jeweils ersten Bandlücke. Für ein Dichteverhältnis von 5.04 (a), 15.06 (b), 19.89 (c) und 25.81 (d).

Insgesamt wird deutlich, dass für die gezielte Manipulation der Bandstruktur das optimale Verhältnis der Dichten von enormer Bedeutung ist. Zusätzlich hat auch das Verhältnis der elastischen Konstanten einen Einfluss.

5 Zusammenfassung

5.1 Inhalt der Arbeit

Das Ziel der vorliegenden Arbeit lag in einer näheren Auseinandersetzung mit dem akustischen Analogon photonischer Kristalle am Beispiel eines Kunstwerks. Zu Beginn wurden zwei Mechanismen zur Entstehung phononischer Bandlücken betrachtet und auf die Wellenausbreitung in homogenen elastischen Medien eingegangen. Für die Modellierung war das Aufgreifen bereits bekannter Konzepte aus der Festkörperphysik wie dem reziproken Gitter hilfreich.

Für die Skulptur des Künstlers Stefan Nestler konnte den Erwartungen gemäß eine phononische Bandstruktur nachgewiesen werden. Dass in dieser Arbeit keine Fluide oder Gase, sondern ausschließlich Festkörper verwendet wurden, ist wie bereits erwähnt auf den Gültigkeitsbereich der elastische Wellengleichung zurückzuführen. Ein zentrales Anliegen war zudem Bandlücken für unterschiedliche Material-Kombinationen zu ermitteln, was mit den originalen Abmessungen des Kristalls nicht gelungen ist. Mit der Verringerung der geometrischen Abmessungen nimmt der Einfluss der Periodizität bis zu einer Dicke von Null fließend ab. Mit einer Erhöhung der Quadrating-Dicke innerhalb der Einheitszelle traten schließlich Bandlücken in mehreren Bandstrukturen auf. Besonders erwähnenswert ist in diesem Zusammenhang das Material Aerogel, welches hauptsächlich aus Luft besteht und die für das originale Kunstwerk realistischsten Bandstrukturen liefert.

Im weiteren Verlauf der Bachelorarbeit wurden die Eigenvektoren in den Realraum rücktransformiert und in der Einheitszelle visualisiert. Dabei kam es zu unterschiedlichen Auslenkungsmustern an verschiedenen Symmetriepunkten für die xy - und z -Moden. Die Untersuchungen des Konvergenzverhaltens haben gezeigt, dass die Bandstruktur schon bei leichter Verringerung der Abmessungen innerhalb der Einheitszelle wesentlich langsamer konvergiert und es zu stärkerer Überlappung einzelner Bänder kommt. Außerdem wurde deutlich, dass vor allem das Dichteverhältnis der Materialien für die Größe der Bandlücke eine entscheidende Rolle spielt. Dies konnte zum einen bei der Berechnung der Bandstrukturen festgestellt werden, da nur für Kombinationen mit den Materialien HD-PE und Aerogel Frequenzlücken aufgetreten sind. Zum anderen konnte dieser Sachverhalt durch das Auftragen der Bandlückenbreite über dem Dichteverhältnis verdeutlicht werden. Somit ist für eine gezielte Manipulation der Bandstruktur das optimale Verhältnis der Dichten wichtig. Es steht allerdings noch aus, den Einfluss der elastischen Konstanten und deren Zusammenspiel mit dem Dichteverhältnis zu untersuchen. Letztlich ist die Modulation somit im Wesentlichen abgeschlossen, wobei darauf hingewiesen sei, dass auf den Einbau der vorhandenen Störstellen und die Simulation mit den originalen Materialien der Skulptur verzichtet werden musste. Diese Problematik wird im weiteren noch kurz in Verbindung mit der Erläuterung möglicher Lösungsansätze diskutiert.

5.2 Kombination von Gasen und Festkörpern

Durch die grundsätzlich unterschiedlichen Eigenschaften lässt sich ein aus Gasen und Festkörpern bestehender phononischer Kristall nicht mit nur einer Gleichung beschreiben. Aus diesem Grund konnte das in dieser Arbeit betrachtete Kunstwerk wie schon erwähnt nur für Festkörper-Kombinationen simuliert werden. Die mathematische Beschreibung der Regionen des Gases und Festkörpers muss also durch verschiedene Gleichungen erfolgen. Dabei wird die Kopplung elastischer und akustischer Wellen berücksichtigt, wobei die Wahl geeigneter Randbedingungen essenziell ist [26]. Eine solche Kombination von Gasen und Festkörpern könnte beispielsweise mit Hilfe der Methode finiter Elemente gelöst werden [27], da eine Modellierung mit der Entwicklung nach ebenen Wellen normalerweise keine akkuraten Ergebnisse liefert [20].

5.3 Einbau von Störstellen

Die Berücksichtigung von Fehlstellen im Kristall, war wie bereits erwähnt mit der Entwicklung nach ebenen Wellen nicht möglich. Ein alternatives numerisches Verfahren wäre für diesen Fall der Einsatz der bereits erwähnten Finite-Elemente-Methode (FEM). Dabei wird der Kristall in endlich viele Teilgebiete bestimmter Formen wie Rechtecke oder Dreiecke, die sogenannten „finiten Elemente“, eingeteilt. Die einzelnen Teilbereiche der Kristallgeometrie werden somit vernetzt, während das physikalische Verhalten jedes Gebietes separat betrachtet wird. Durch eine Ansatzfunktion und Stetigkeitsbedingungen könnte der Kristall auf diese Weise mit den vorliegenden Störstellen modelliert werden [28].

Literaturverzeichnis

- [1] BYKOV, V. P.: Spontaneous Emission in a Periodic Structure. In: *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics*. (1972), S. 269–273. – ISSN ISSN 0038–5646
- [2] NARAYANAMURTI, V. ; STÖRMER, H.L. ; CHIN, M.A. ; GOSSARD, A.C. ; WIEGMANN, W.: Selective transmission of high-frequency phonons by a superlattice: the "dielectric"phonon filter. In: *Physical Review Letters* (1979)
- [3] KUSHWAHA, M.S. ; HALEVI, P. ; DOBRZYNSKI, L. ; DJAFARI-ROUHANI, B.: Acoustic band structure of periodic elastic composites. In: *Physical Review Letters* (1993)
- [4] MARTINEZ-SALA, R. ; SANCHO, J. ; SANCHEZ, J.V. ; GOMEZ, V. ; LLINARES, J. ; MESEGUER, F.: Sound attenuation by sculpture. In: *Nature* 378 (1995). <http://dx.doi.org/10.1038/378241a0>. – DOI 10.1038/378241a0
- [5] PSAROBAS, Ioannis ; STEFANOY, Nikolaos ; MODINOS, A: Phononic crystals with planar defects. In: *Physical Review B* 62 (2000), September, S. 5536. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.62.5536>. – DOI 10.1103/PhysRevB.62.5536
- [6] PAGE, J. H. ; SHENG, Ping ; SCHRIEMER, H. P. ; JONES, I. ; JING, Xiaodun ; WEITZ, D. A.: Group Velocity in Strongly Scattering Media. In: *Science* 271 (1996), Nr. 5249, 634-637. <http://www.jstor.org/stable/2889684>. – ISSN 00368075, 10959203
- [7] CLELAND, A. N. ; SCHMIDT, D. R. ; YUNG, C. S.: Thermal conductance of nanostructured phononic crystals. In: *Phys. Rev. B* 64 (2001), Oct, 172301. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.64.172301>. – DOI 10.1103/PhysRevB.64.172301
- [8] *Phononic Crystals: Engineering the Flow of Heat*. <https://energy.sandia.gov/phononic-crystals-engineering-the-flow-of-heat/>. – Eingesehen am 06.08.2019
- [9] LIU, Zhengyou ; ZHANG, Xixiang ; MAO, Yiwei ; ZHU, Y. Y. ; YANG, Zhiyu ; CHAN, C. T. ; SHENG, Ping: Locally resonant sonic materials. In: *Science* 289 (2000), September, 1734-1736. <http://dx.doi.org/10.1126/science.289.5485.1734>. – DOI 10.1126/science.289.5485.1734
- [10] WAN, Qingmian ; SHAO, Rong: A hybrid phononic crystal for roof application. In: *The Journal of the Acoustical Society of America* 142 (2017), 11, Nr. 5, S. 2988–2988. <http://dx.doi.org/10.1121/1.5010790>. – DOI 10.1121/1.5010790
- [11] KUROSU, M. ; HATANAKA, D. ; ONOMITSU, K. ; YAMAGUCHI, H.: On-chip temporal focusing of elastic waves in a phononic crystal waveguide. In: *Nature Communications* 9 (2018), Nr. 1, S. 1331. <http://dx.doi.org/10.1038/s41467-018-03726-7>. – DOI 10.1038/s41467-018-03726-7

- [12] LUCKLUM, R ; ZUBTISOV, Mikhail ; OSEEV, Aleksandr ; SCHMIDT, Marc-Peter ; HIRSCH, Soeren ; HAGEMANN, F: Phononic Crystals and Applications. (2013), Januar. <http://dx.doi.org/10.5162/sensor2013/A3.1>. – DOI 10.5162/sensor2013/A3.1
- [13] TANAKA, Y. ; TAMURA, S.: Surface acoustic waves in two-dimensional periodic elastic structures. In: *Phys. Rev. B* 55 (1998), 7958. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.58.7958>. – DOI 10.1103/PhysRevB.58.7958
- [14] LU, Ming-Hui ; FENG, Liang ; CHEN, Yan-Feng: Phononic crystals and acoustic metamaterials. In: *Materials Today* 12 (2009), Nr. 12, 34 - 42. [http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1016/S1369-7021\(09\)70315-3](http://dx.doi.org/https://doi.org/10.1016/S1369-7021(09)70315-3). – DOI [https://doi.org/10.1016/S1369-7021\(09\)70315-3](https://doi.org/10.1016/S1369-7021(09)70315-3). – ISSN 1369-7021
- [15] KE, Manzhu ; LIU, Zhengyou ; QIU, Chunyin ; WANG, Wengang ; SHI, Jing ; WEN, Weijia ; SHENG, Pinwg: Negative-refraction imaging with two-dimensional phononic crystals. In: *Phys. Rev. B* 72 (2005), Aug, 064306. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.72.064306>. – DOI 10.1103/PhysRevB.72.064306
- [16] AMBATI, Muralidhar ; FANG, Nicholas ; SUN, Cheng ; ZHANG, Xiang: Surface resonant states and superlensing in acoustic metamaterials. In: *Phys. Rev. B* 75 (2007), May, 195447. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.75.195447>. – DOI 10.1103/PhysRevB.75.195447
- [17] *Ausstellung "Kunst am Bau" macht neugierig.* <https://www.tu-chemnitz.de/tu/pressestelle/1998/06.18-11.21.html>. – Eingesehen am 22.05.2019
- [18] NUCARA, Luca ; GRECO, Francesco ; MATTOLI, Virgilio: Electrically responsive photonic crystals: a review. In: *J. Mater. Chem. C* 3 (2015), 8449-8467. <http://dx.doi.org/10.1039/C5TC00773A>. – DOI 10.1039/C5TC00773A
- [19] D, Leduc ; B, Morvan ; A, Tinel ; R, Sainidou ; P, Rembert: Magnetic-Sphere-Based Phononic Crystals. In: *Crystals - Open Access Journal* (2016). <http://dx.doi.org/10.3390/cryst6070078>. – DOI 10.3390/cryst6070078
- [20] KHELIF, A ; ADIBI, A: *Phononic crystals: Fundamentals and applications.* 2015. – 23-50 S. <http://dx.doi.org/10.1007/978-1-4614-9393-8>. <http://dx.doi.org/10.1007/978-1-4614-9393-8>
- [21] LIU, Zhengyou ; CHAN, C. T. ; SHENG, Ping ; GOERTZEN, A. L. ; PAGE, J. H.: Elastic wave scattering by periodic structures of spherical objects: Theory and experiment. In: *Phys. Rev. B* 62 (2000), 2446-2457. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.62.2446>. – DOI 10.1103/PhysRevB.62.2446
- [22] HEDAYATRASA, Saeid: *Design Optimisation and Validation of Phononic Crystal Plates for Manipulation of Elastodynamic Guided Waves.* Springer International Publishing AG 2018, 2018. – 2-4 S. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-319-72959-6>. <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-319-72959-6>

- [23] ZHOU, Xiao-Zhou ; WANG, Yue-Sheng ; ZHANG, Chuanzeng: Effects of material parameters on elastic band gaps of two-dimensional solid phononic crystals. In: *Journal of Applied Physics* 106 (2009), Nr. 1, 014903. <http://dx.doi.org/10.1063/1.3159644>. – DOI 10.1063/1.3159644
- [24] GROSS, Rudolf ; MARX, Achim: *Festkörperphysik*. De Gruyter Oldenbourg, 2014. – 158–161 S. <https://www.degruyter.com/view/product/278639>
- [25] GROUP, Lawrence Berkeley Laboratory’s Microstructured M.: *Physical Properties of Silica Aerogels*. <https://pamelanorris.wordpress.com/resources/physical-properties-of-silica-aerogels/>. – Eingesehen am 06.09.2019
- [26] MÖNKÖLÄ, Sanna: *Numerical Simulation of Fluid-Structure Interaction Between Acoustic and Elastic Waves*. <http://users.jyu.fi/~samonkol/print-vaitoskirja.pdf>. Version: 2011. – Eingesehen am 08.08.2019
- [27] MATUSZYKA, P. J. ; DEMKOWICZ, L. F. ; TORRES-VERDIN, C.: Solution of Coupled Acoustic-Elastic Wave Propagation Problems with Anelastic Attenuation Using Automatic hp-Adaptivity. In: *ICES REPORT* 3 (2011)
- [28] FISCHER, Prof. Dr.-Ing. W.: *Finite-Elemente-Methode*. <https://www.fh-dortmund.de/de/fb/5/personen/lehr/fischer/medien/FEMVL1.pdf>. – Eingesehen am 06.07.2019

Abbildungsverzeichnis

1.1	Eine phononische Struktur aus Stahlzylindern, rechts wurde die Schall- dämpfung über der Frequenz dargestellt [4].	3
1.2	Alle fünf Proben haben eine Dicke von 366 nm und eine Gitterkonstante von 1100 nm. Die gelb-gepunkteten Linien umschließen die unterschiedlichen Einheitszellen der Strukturen [8].	4
1.3	Lokal resonanter phononischer Kristall mit der Gitterkonstante $a = 10$ nm und der Anzahl $n = 3$ an Einheitszellen. Der Abstand zwischen Schwin- gungsquelle l_0 und Kristall entspricht dabei dem Abstand vom Kristall zum Empfänger $l_1 = 4$ cm. Im rechten Bild wurde das normierte Transmissionss- pektrum für verschiedene n berechnet [10].	4
1.4	(a) Darstellung des Wellenleiters mit einer Länge von $5 \mu\text{m}$ und das Bild eines Rasterelektronenmikroskops vom Querschnitt der Struktur. (b) Die simulierte Dispersionsrelation. (c) Das experimentelle Transmissionsspek- trum [11].	5
1.5	Das aus 187 farbigen Stelen bestehende Kunstwerk „Denk- und Wahrneh- mungsmodell zum Phänomen der Farbe“ aus dem Jahr 1998 von Stefan Nestler.	6
2.1	Auftretende Periodizität in einer, zwei oder drei Richtungen [18].	7
2.2	(a) Ein phononisches Kristallgitter mit den Abmessungen $11 \text{ cm} \times 11 \text{ cm} \times$ 3.5 cm und einem Kugeldurchmesser von 5 mm . (b) Transmission für $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$ und (c) für mehrere $\mathbf{k}_{\parallel} = \pi(q, 0)$ mit variierendem q [19].	7
2.3	Darstellung der Bragg-Bedingung für ein phononisches Kristallgitter.	8
2.4	Die primitiven Einheitsvektoren \mathbf{a}_1 und \mathbf{a}_2 mit einem beliebigen Gittervek- tor \mathbf{R} auf einem phononischen Kristallgitter.	10
2.5	Die Konstruktion einer Bloch-Welle $u_j(x)$ für ein eindimensionales Kris- tallgitter mit einer beliebigen gitterperiodischen Funktion $u_{jk}(x)$	12
2.6	Der Kreis mit dem Radius R_c auf dem reziproken Kristallgitter mit dem Mittelpunkt Γ	14
3.1	Grundriss des Kristalls ohne (links) und mit Störstellen (rechts)	15
3.2	Mögliche Wahl der Einheitszelle im Kristallgitter und deren Abmessungen.	16
4.1	Die erste Brillouin-Zone im k -Raum.	18
4.2	Bandstrukturen für verschiedene Material-Kombinationen mit den Abmes- sungen des betrachteten Kunstwerks.	20
4.3	Bandstrukturen für die Material-Kombination Silizium-Titan-Silizium und für reines Titan mit den Abmessungen des betrachteten Kunstwerks.	21

4.4	Bandstrukturen für verschiedene Material-Kombinationen mit den Abmessungen des betrachteten Kunstwerks, jedoch mit einer veränderten Dicke von $d = 2$ cm. Zur Veranschaulichung ist für jede Bandstruktur die erste Bandlücke farbig gekennzeichnet.	22
4.5	Bandstrukturen für Material-Kombinationen mit Aerogel und einer Dicke von $d = 2$ cm.	23
4.6	Eigenvektoren innerhalb der Einheitszelle für die Kombination HDPE-Gold-HDPE am Γ -Punkt des dritten xy -Bandes (a), am X -Punkt des zweiten xy -Bandes (b), am M -Punkt des zweiten xy -Bandes (c) und am M -Punkt des dritten xy -Bandes (d).	24
4.7	Betrag der Eigenvektoren innerhalb der Einheitszelle für die Kombination HDPE-Gold-HDPE am Γ -Punkt des dritten z -Bandes (a), am X -Punkt des zweiten z -Bandes (b), am M -Punkt des zweiten z -Bandes (c) und am M -Punkt des dritten z -Bandes (d).	25
4.8	Bandstrukturen für die Material-Kombination HDPE-Kupfer-HDPE.	26
4.9	Eigenvektoren innerhalb der Einheitszelle der Kombination HDPE-Kupfer-HDPE am X -Punkt des zweiten xy -Bandes für unterschiedlichen cutoff-Radien.	27
4.10	Die Änderung der Bandlückenbreite bei steigendem cutoff-Radius für HDPE-Kupfer-HDPE. Es wurden Werte für eine Dicke von $d = 2$ cm (blau) und $d = 3$ cm (orange) dargestellt.	28
4.11	Vergleich zweier Bandstrukturen von HDPE-Kupfer-HDPE mit verschiedenen Dicken und einem cutoff-Radius von 600 m^{-1}	28
4.12	Die Änderung der Bandlückenbreite über dem Dichteverhältnis von Streuer und Matrix.	29
4.13	Bandstrukturen für die Material-Kombination HDPE-Kupfer-HDPE mit farbiger Kennzeichnung der jeweils ersten Bandlücke. Für ein Dichteverhältnis von 5.04 (a), 15.06 (b), 19.89 (c) und 25.81 (d).	30

Selbstständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig angefertigt, nicht anderweitig zu Prüfungszwecken vorgelegt und keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel verwendet habe.

Sämtliche wissenschaftlich verwendete Textauschnitte, Zitate oder Inhalte anderer Verfasser wurden ausdrücklich als solche gekennzeichnet.

.....
Ort, Datum

.....
Unterschrift des Verfassers