

UNIVERSIDAD DE SONORA
DIVISIÓN DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

ESTUDIO TEÓRICO Y EXPERIMENTAL DE UN CRISTAL
FONÓNICO DE PERIODICIDAD UNIDIMENSIONAL



Que para obtener el título de:
LICENCIADO EN FÍSICA

Presenta:

LUIS EDUARDO GÁLVEZ GONZÁLEZ

Hermosillo, Sonora

Diciembre 2014

Universidad de Sonora

Repositorio Institucional UNISON



"El saber de mis hijos
hará mi grandeza"



Excepto si se señala otra cosa, la licencia del ítem se describe como openAccess

Agradecimientos

Quiero agradecer primeramente al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por el financiamiento de este trabajo a través del proyecto CONACYT CB-2008/104151, así como por el apoyo económico brindado durante la realización del mismo. También agradezco a la Universidad de Sonora y a la Dra. María Elena Zayas Saucedo por proporcionar un espacio donde fuera posible desarrollar los experimentos.

Extiendo mi más sincero agradecimiento a la Dra. María Betsabé Manzanares Martínez por permitirme trabajar a su lado, compartiendo su conocimiento conmigo, guiándome en el desarrollo de este trabajo de tesis y abriendo mis horizontes hacia nuevas áreas.

Agradezco a los demás miembros del comité de tesis, al Dr. Arnulfo Castellanos Moreno, al Dr. Rodrigo Arturo Rosas Burgos y al Dr. Adalberto Corella Madueño, por sus valiosas aportaciones que permitieron que este trabajo llegara a un buen término.

Para finalizar, quiero agradecer a mi familia, especialmente a mis padres y a mi hermano, por todo el apoyo que me han dado a largo de mi vida, sin el cual no hubiera sido posible llegar hasta aquí.

Índice general

Introducción	1
1. Teoría de la elasticidad	3
1.1. Tensor de deformaciones	3
1.2. Tensor de esfuerzos	8
1.3. Ley de Hooke	13
1.4. Ondas elásticas	15
1.5. Condiciones de frontera	21
2. Cristales fonónicos	25
2.1. Cristales y estructura cristalina	25
2.2. Red recíproca	26
2.3. Teorema de Bloch	28
2.4. Estructura de bandas	30
3. Simulación numérica con FDTD	37
3.1. Ecuaciones de movimiento	37
3.2. Diferencias finitas	38
3.3. Condiciones de Mur	42
3.4. Fuentes	45
3.5. Parámetros de la simulación	46

4. Método experimental	49
4.1. Caracterización de los materiales	49
4.2. Elaboración de la multicapa	54
4.3. Medición de la transmisión en la multicapa	54
5. Resultados	57
5.1. Espectro de frecuencias experimental	57
5.2. Estructura de bandas fonónicas	59
5.3. Simulación con FDTD	61
5.4. Comparación de los resultados	63
Conclusiones	65
A. Tensores isotrópicos	67
B. Código para FDTD elástico unidimensional	77
Bibliografía	83

Introducción

En la década de los ochenta surgió un gran interés por el estudio de estructuras periódicas construidas a partir de materiales con propiedades dieléctricas distintas, conocidas como cristales fotónicos, los cuales presentan un comportamiento análogo al de los cristales naturales, como es una estructura de bandas para la luz (o bandas fotónicas)[1, 2], mientras que los cristales naturales presentan bandas de energía para los electrones. Motivados por estas investigaciones, en los años noventa se propuso que estructuras periódicas compuestas de dos materiales con propiedades elásticas diferentes, conocidos como cristales fonónicos, debían presentar una estructura de bandas para las vibraciones y el sonido[1, 2]. Se estudiaron estructuras elásticas periódicas formadas por cilindros de un material contenidos una matriz de propiedades elásticas diferentes, formando una red cuadrada de periodicidad bidimensional. Para estos sistemas, se encontró que existen bandas prohibidas (o *gaps*) para las frecuencias, donde no pueden existir vibraciones transversales, sonido o fonones[1, 2].

La motivación de este trabajo es el estudio de las propiedades de una estructura periódica de dos materiales con parámetros mecánicos diferentes, constituida por placas de vidrio alternadas con capas de glicerina formando un cristal fonónico de periodicidad unidimensional. Este sistema fue estudiado en forma teórica y experimental. Se midió la transmisión de un pulso ultrasónico longitudinal a incidencia normal a las placas, y se analizó el espectro de frecuencias de la señal resultante. También, se dedujo la relación de dispersión para el vector de onda de Bloch \mathbf{k} y la frecuencia ω de las ondas longitudinales en dirección del eje de simetría del cristal. Finalmente, se simuló la propagación de ondas longitudinales con dirección normal a un sistema elástico periódico finito con los mismos parámetros del cristal fonónico, y se obtuvo el espectro de frecuencias de las

ondas transmitidas a través del medio.

La distribución del contenido es la siguiente: el Capítulo 1 está dedicado al desarrollo de la teoría de la mecánica de sólidos elásticos, concluyendo con la obtención de las ecuaciones de onda para perturbaciones longitudinales y transversales en un medio continuo, así como las condiciones de frontera correspondientes. Aunque se trabaja con un sistema formado por un sólido y un fluido, se plantea la posibilidad de aplicar el formalismo desarrollado para sólidos elásticos a la propagación de ondas longitudinales en fluidos ideales.

En el Capítulo 2 se deduce una expresión analítica con la cual se puede conocer la relación de dispersión para un cristal fonónico de periodicidad unidimensional. En este capítulo también se hace una revisión de los conceptos básicos de cristalografía necesarios para la obtención de dicha ecuación. El método empleado para la simulación de las ondas elásticas se explica en el Capítulo 3, desarrollándolo para el caso de propagación de ondas longitudinales en una dimensión.

El Capítulo 4 describe el método experimental empleado para la medición de la transmisión en el cristal fonónico, así como el procedimiento usado para la construcción del mismo y la caracterización de las propiedades de los materiales. Finalmente, en el Capítulo 5 se comparan los resultados obtenidos con cada enfoque.

Capítulo 1

Teoría de la elasticidad

En este capítulo se abordarán los conceptos básicos de la mecánica de sólidos elásticos, o teoría de la elasticidad, necesarios para el desarrollo del trabajo. El modelo del cual se parte es el del medio continuo, es decir, que cualquier elemento de volumen del material siempre contiene un número muy grande de átomos o moléculas[3].

1.1. Tensor de deformaciones

Consideremos un cuerpo sólido con una configuración inicial descrita por los vectores de posición \mathbf{x} de cada uno de sus puntos, respecto a un sistema de coordenadas fijo.

Al aplicar una fuerza externa sobre este cuerpo, sufre un cambio en su configuración y los puntos en el material se desplazan. A este cambio en la configuración se le llama deformación. Denotamos a la nueva posición de los puntos con \mathbf{x}' .

El cambio de las posiciones desde la configuración inicial hasta la nueva configuración se denota mediante el vector de desplazamiento, definido como

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{x}' - \mathbf{x}. \quad (1.1)$$

Este vector es una función de las posiciones en la configuración inicial. En la Figura 1.1 se ilustra la deformación de un cuerpo y el cambio de la posición de un punto dentro del mismo.

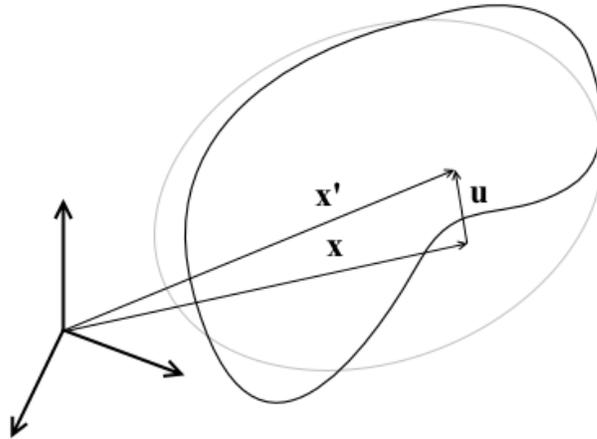


Figura 1.1: Cuerpo sometido a una deformación. Se muestra la configuración inicial con línea gris.

La deformación del material y el consecuente desplazamiento de sus puntos provoca un cambio en la separación entre ellos. Determinando cómo es este cambio podemos conocer cómo es la deformación. Consideremos dos puntos muy cercanos entre sí, de modo que están unidos por un vector $d\mathbf{x}$ antes de la deformación y por un vector $d\mathbf{x}'$ después de ella, como se muestra en la Figura 1.2, donde

$$d\mathbf{x}' = d\mathbf{x} + d\mathbf{u}. \quad (1.2)$$

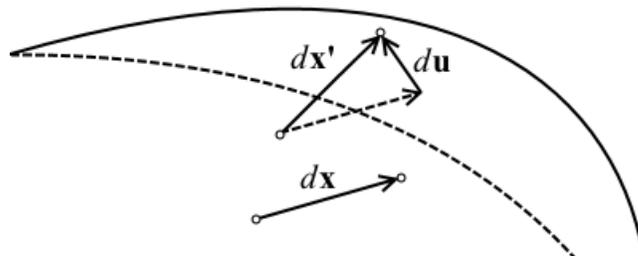


Figura 1.2: Cambio de la separación de dos puntos vecinos. Con línea punteada se denota a la configuración inicial.

1.1. TENSOR DE DEFORMACIONES

La separación entre los puntos en la configuración inicial viene dada por el elemento de longitud dl y en la nueva configuración por dl' , con

$$dl^2 = dx_1^2 + dx_2^2 + dx_3^2 \quad (1.3)$$

y

$$dl'^2 = dx_1'^2 + dx_2'^2 + dx_3'^2. \quad (1.4)$$

De (1.2) sabemos que

$$dx_i' = dx_i + du_i, \quad (1.5)$$

de modo que podemos expresar (1.4) como

$$dl'^2 = (dx_1 + du_1)^2 + (dx_2 + du_2)^2 + (dx_3 + du_3)^2, \quad (1.6)$$

o en la forma compacta, tomando la convención de suma sobre índices repetidos

$$dl'^2 = (dx_i + du_i)^2. \quad (1.7)$$

Para pequeñas deformaciones, podemos aproximar du_i de la forma

$$du_i \approx \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) dx_j, \quad (1.8)$$

así, la separación entre puntos vecinos en la nueva configuración viene dada por

$$dl'^2 \approx \left[dx_i + \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) dx_j \right]^2. \quad (1.9)$$

Desarrollando esta ecuación, obtenemos

$$dl'^2 - dl^2 \approx 2 \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) dx_i dx_j + \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right) dx_j dx_k. \quad (1.10)$$

Como los índices i y j son mudos, podemos expresar el primer término del lado

derecho como

$$\begin{aligned} 2 \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) dx_i dx_j &= \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) dx_i dx_j + \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) dx_j dx_i \\ &= \left[\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) + \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] dx_i dx_j. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Además, como estamos considerando deformaciones pequeñas, el segundo término del lado derecho de (1.10) puede ser despreciado, de tal modo llegamos a

$$dl'^2 - dl^2 \approx 2u_{ij} dx_i dx_j, \quad (1.12)$$

donde se ha definido

$$u_{ij} \equiv \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (1.13)$$

Este se conoce como tensor de deformaciones y contiene información sobre cómo cambian los elementos de longitud con las deformaciones[4]. Una propiedad importante de este tensor es que es simétrico, esto es

$$u_{ij} = u_{ji}. \quad (1.14)$$

Para conocer el significado de los elementos de este tensor, consideremos tres puntos dentro de un cuerpo deformable muy cercanos entre sí, como se muestra en la Figura 1.3.

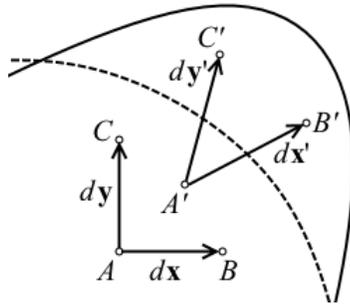


Figura 1.3: Puntos vecinos en la configuración inicial y en la nueva configuración.

1.1. TENSOR DE DEFORMACIONES

El tensor de deformación nos permite escribir $du_i = u_{ij}dx_j$, entonces

$$dx'_i = dx_i + u_{ij}dx_j, \quad dy'_i = dy_i + u_{ij}dy_j. \quad (1.15)$$

Si orientamos los ejes coordenados de forma que $dx_1 = dx$, $dx_2 = dx_3 = 0$, $dy_2 = dy$ y $dy_1 = dy_3 = 0$, entonces las longitudes de los vectores que unen a los puntos en la configuración deformada son, hasta primer orden en u_{ij} ,

$$dx' = \sqrt{dx'_i dx'_i} \approx \sqrt{1 + u_{11}}dx, \quad dy' = \sqrt{dy'_i dy'_i} \approx \sqrt{1 + u_{22}}dy. \quad (1.16)$$

De estas ecuaciones se deduce que las componentes de la diagonal del tensor de deformaciones contienen información sobre el cambio en las distancias en las direcciones de los ejes coordenados.

Como se muestra en la Figura 1.3, en la configuración inicial el vector $d\mathbf{x}$ es perpendicular al vector $d\mathbf{y}$ de modo que $dx_i dy_i = 0$. En la nueva configuración, el ángulo θ' entre $d\mathbf{x}'$ y $d\mathbf{y}'$ se obtiene del producto punto entre ellos, ya que

$$dx'_i dy'_i = dx' dy' \cos \theta'. \quad (1.17)$$

Haciendo uso de (1.15), hasta primer orden en u_{ij} ,

$$dx'_i dy'_i \approx dx_i dy_i + 2u_{ij} dx_i dy_j = 2u_{12} dx dy. \quad (1.18)$$

Es decir, la información sobre el cambio en el ángulo entre los vectores que unen a los puntos está contenida en u_{12} . Cuando el ángulo entre dos líneas dentro de un cuerpo, inicialmente ortogonales, cambia al deformarlo, se denomina deformación de corte. Esto ocurre cuando se aplican fuerzas en dirección tangente a la superficie del medio. Si no se presenta este cambio, la deformación es llamada compresión y si la magnitud de ella es la misma en todas las direcciones se conoce como compresión hidrostática.

En general, las componentes fuera de la diagonal del tensor de deformación corresponden a deformaciones de corte y las de la diagonal a compresiones en cada dirección del sistema coordenado.

1.2. Tensor de esfuerzos

Cuando un sólido elástico se somete a una deformación, dentro de él se generan fuerzas que tratan de regresarlo a su estado de equilibrio original. Estas fuerzas son llamadas esfuerzos internos. En la teoría clásica de la elasticidad se considera que las fuerza que causan los esfuerzos internos sólo actúan de un punto del material a los puntos vecinos. Esto implica que las fuerzas ejercidas por una parte del material a su alrededor sólo actúan en la superficie de ésta[4].

Para el estudio de la distribución de fuerzas internas hacemos un corte transversal a un cuerpo sujeto a una deformación, como se muestra en la Figura 1.4. Donde \hat{n} es el vector unitario normal al área ΔS sobre la sección del sólido y ΔF es la fuerza que actúa sobre dicha superficie.

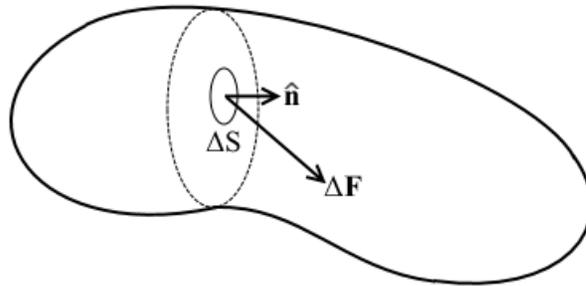


Figura 1.4: Corte transversal de un sólido deformado.

El vector de esfuerzos, o vector de tracción, se define como[2]

$$\mathbf{T}^{\hat{n}}(\mathbf{x}, \hat{n}) = \lim_{\Delta S \rightarrow 0} \frac{\Delta \mathbf{F}}{\Delta S}. \quad (1.19)$$

Éste es un campo vectorial que es función tanto de la posición del punto en el cuerpo, como de la orientación de la superficie sobre la cual actúa la fuerza. El superíndice denota la superficie correspondiente, en términos del vector normal a ella.

Consideremos una sección de volumen cúbica en un cuerpo sometido a una deformación, con las caras del cubo paralelas a los planos coordenados de un sistema cartesiano, como se muestra en la Figura 1.4. Para cada cara, el vector unitario normal \hat{e}_i a ella está en la dirección del eje coordenado x_i . Para estas superficies, el vector de tracción

1.2. TENSOR DE ESFUERZOS

puede expresarse como

$$\mathbf{T}^{\hat{e}_i}(\mathbf{x}, \hat{e}_i) = \sigma_{ij} \hat{e}_j. \quad (1.20)$$

El término σ_{ij} es conocido como el tensor de esfuerzos. Representado en forma matricial, este tensor es

$$[\sigma] = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix}. \quad (1.21)$$

Los términos de la diagonal corresponden a esfuerzos normales, en la dirección correspondiente. Los que están fuera de la diagonal, a los esfuerzos de corte. La Figura 1.5 ilustra el significado físico de las componentes del tensor de esfuerzos.

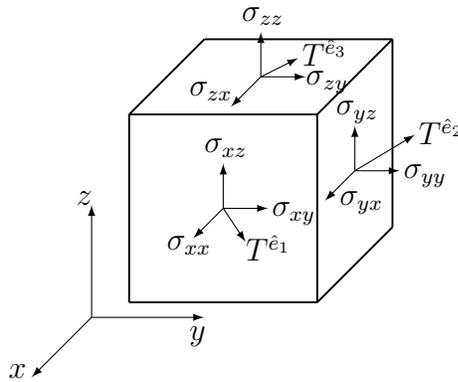


Figura 1.5: Tensor de esfuerzos para un elemento de volumen cúbico.

Para una superficie arbitraria con vector normal \hat{n} dado por

$$\hat{n} = n_1 \hat{e}_1 + n_2 \hat{e}_2 + n_3 \hat{e}_3, \quad (1.22)$$

en este caso, el vector de tracción puede expresarse como

$$\mathbf{T}^{\hat{n}} = n_i \mathbf{T}^{\hat{e}_i}. \quad (1.23)$$

Aplicando la ecuación (1.20) en (1.23), tenemos

$$\begin{aligned}\mathbf{T}^{\hat{n}} = & (\sigma_{11}n_1 + \sigma_{21}n_2 + \sigma_{31}n_3)\hat{e}_1 + \\ & (\sigma_{12}n_1 + \sigma_{22}n_2 + \sigma_{32}n_3)\hat{e}_2 + \\ & (\sigma_{13}n_1 + \sigma_{23}n_2 + \sigma_{33}n_3)\hat{e}_3,\end{aligned}$$

o bien, en forma compacta,

$$T_i^{\hat{n}} = \sigma_{ji}n_j. \quad (1.24)$$

Es importante notar que el tensor de esfuerzos es simétrico, esto es

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji}. \quad (1.25)$$

Para demostrar esta propiedad estudiaremos un cuerpo elástico en equilibrio mecánico. La condición de equilibrio mecánico establece que tanto las fuerzas como las torcas aplicadas sobre un cuerpo deben anularse. En el caso de un sólido elástico, cada elemento de volumen del mismo debe estar en equilibrio. Esto implica que la suma de esfuerzos internos y fuerzas externas debe ser cero.

Consideremos una región de volumen V , dentro del sólido. La fuerza resultante debida a la deformación se obtiene como la suma de los esfuerzos sobre la superficie

$$f_i = \int_S T_i^{\hat{n}} dS, \quad (1.26)$$

donde S es la superficie que encierra al volumen V . Sustituyendo (1.24) en la integral, resulta

$$\int_S T_i^{\hat{n}} da = \int_S \sigma_{ji}n_j dS. \quad (1.27)$$

De aquí, aplicando el teorema de la divergencia para tensores[5]

$$\int_S B_{ij\dots k}n_k dS = \int_V \frac{\partial}{\partial x_k}(B_{ij\dots k})dV, \quad (1.28)$$

1.2. TENSOR DE ESFUERZOS

entonces,

$$\int_S \sigma_{ji} n_j dS = \int_V \frac{\partial \sigma_{ji}}{\partial x_j} dV. \quad (1.29)$$

Así, la fuerza sobre este volumen del cuerpo es

$$f_i = \int_V \frac{\partial \sigma_{ji}}{\partial x_j} dV. \quad (1.30)$$

De aquí se deduce que la fuerza por unidad de volumen que actúa sobre este elemento viene dada por

$$F_i = \frac{\partial \sigma_{ji}}{\partial x_j}. \quad (1.31)$$

Si f_i^{ext} son las fuerzas externas aplicadas sobre el cuerpo, entonces, la condición de equilibrio queda expresada de la forma

$$F_i + f_i^{ext} = 0. \quad (1.32)$$

Usando la ecuación (1.31), esta condición queda

$$\frac{\partial \sigma_{ji}}{\partial x_j} + f_i^{ext} = 0. \quad (1.33)$$

Además, se debe cumplir, que las torcas sobre cada elemento de volumen del cuerpo se anulen. La torca total, sobre una sección de volumen V del cuerpo, se calcula como la suma de la torca debida a los esfuerzos internos más la producida por las fuerzas externas. Entonces, la condición de equilibrio rotacional queda expresada como

$$\int_S \epsilon_{ijk} x_j T_k^{\hat{n}} dS + \int_V \epsilon_{ijk} x_j f_k^{ext} dV = 0, \quad (1.34)$$

donde S es la superficie que encierra al volumen V , $T_k^{\hat{n}}$ es el vector de tracción sobre ella y ϵ_{ijk} es el símbolo de Levi-Civita. Usando la relación de este vector con el tensor de esfuerzos (1.24), la integral queda

$$\int_S \epsilon_{ijk} x_j \sigma_{lk} n_l dS + \int_V \epsilon_{ijk} x_j f_k^{ext} dV = 0. \quad (1.35)$$

Aplicando el teorema de la divergencia en la primera integral, podemos escribirla como una integral de volumen sobre V , esto es

$$\int_V \left[\frac{\partial}{\partial x_l} (\epsilon_{ijk} x_j \sigma_{lk}) + \epsilon_{ijk} x_j f_k^{ext} \right] dV = 0, \quad (1.36)$$

desarrollando esta integral llegamos a

$$\int_V \epsilon_{ijk} \left[\frac{\partial x_j}{\partial x_l} \sigma_{lk} + x_j \frac{\partial \sigma_{lk}}{\partial x_l} + x_j f_k^{ext} \right] dV = 0. \quad (1.37)$$

Usando la propiedad

$$\frac{\partial x_j}{\partial x_l} = \delta_{jl}, \quad (1.38)$$

la integral queda

$$\int_V \epsilon_{ijk} \left[\sigma_{jk} + x_j \left(\frac{\partial \sigma_{lk}}{\partial x_l} + f_k^{ext} \right) \right] dV = 0. \quad (1.39)$$

La condición de equilibrio para las fuerzas (1.33) implica que el segundo término del integrando debe anularse. Finalmente, la integral resultante es

$$\int_V \epsilon_{ijk} \sigma_{jk} dV = 0. \quad (1.40)$$

Como el volumen V es arbitrario, entonces el integrando debe ser cero, esto es

$$\epsilon_{ijk} \sigma_{jk} = 0. \quad (1.41)$$

Para que se cumpla esta ecuación, como el símbolo de Levi-Civita es antisimétrico en los índices j y k , σ_{jk} debe ser simétrico. Por lo tanto

$$\sigma_{jk} = \sigma_{kj}.$$

Con esto queda demostrada la propiedad de simetría del tensor de esfuerzos.

1.3. Ley de Hooke

Para deformaciones pequeñas, los esfuerzos aplicados y las deformaciones resultantes están relacionadas en forma lineal. Esto implica que cada componente del tensor de esfuerzos es directamente proporcional a las componentes del tensor de deformación. Esta relación se expresa como

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}u_{kl}, \quad (1.42)$$

donde C_{ijkl} es llamado tensor de elasticidad y contiene los módulos elásticos del material. Este es un tensor de rango cuatro que, en general, tiene ochenta y una componentes independientes. Gracias a las propiedades de simetría de los tensores de esfuerzo y de deformación, dichas componentes se reducen a sólo treinta y seis independientes[5].

En el caso de materiales homogéneos, que son aquéllos donde las propiedades mecánicas no varían de un punto a otro, todos los módulos elásticos son constantes. Pero, en general, los valores de los módulos elásticos pueden depender de la orientación del medio, a esta propiedad se le denomina anisotropía y se presenta en materiales como cristales o maderas. Sin embargo, como la mayoría de los metales son policristalinos, es decir que están formados por granos monocristalinos orientados aleatoriamente, sus parámetros mecánicos no dependen de la orientación. A este tipo de materiales se les denomina isotrópicos. Esta última propiedad implica que el tensor de elasticidad del medio debe ser invariante bajo cualquier rotación. Esto se expresa matemáticamente mediante la siguiente ecuación para el tensor de elasticidad[5]

$$C_{ijkl} = R_{im}R_{jn}R_{kp}R_{lq}C_{mnpq}, \quad (1.43)$$

donde R_{ij} es una matriz de rotación. Es posible demostrar que la forma más general para un tensor isotrópico de rango cuatro es [5, 6](ver Apéndice A)

$$C_{ijkl} = \alpha\delta_{ij}\delta_{kl} + \beta\delta_{ik}\delta_{jl} + \gamma\delta_{il}\delta_{jk}, \quad (1.44)$$

donde los coeficientes α , β y γ son constantes.

Sustituyendo (1.44) en (1.42) obtenemos

$$\begin{aligned}\sigma_{ij} &= (\alpha\delta_{ij}\delta_{kl} + \beta\delta_{ik}\delta_{jl} + \gamma\delta_{il}\delta_{jk})u_{kl} \\ &= \alpha u_{ll}\delta_{ij} + \beta u_{ij} + \gamma u_{ji}.\end{aligned}\tag{1.45}$$

Aplicando la propiedad de simetría del tensor de deformaciones, definiendo $\lambda \equiv \alpha$ y $2\mu \equiv \beta + \gamma$, queda

$$\sigma_{ij} = \lambda u_{ll}\delta_{ij} + 2\mu u_{ij}.\tag{1.46}$$

Estas constantes, λ y μ , son llamadas coeficientes de Lamé[4, 5, 6]. Es conveniente expresar esta ecuación como la suma de una compresión hidrostática y una deformación de corte puro. Para esto, descomponemos el tensor de deformaciones usando la identidad

$$u_{ij} = \frac{1}{3}u_{ll}\delta_{ij} + \left(u_{ij} - \frac{1}{3}u_{ll}\delta_{ij}\right),\tag{1.47}$$

aquí, el primer término corresponde a una compresión hidrostática y el segundo a una deformación de corte. Esto se deduce observando que el primero término no contiene elementos fuera de la diagonal y en el segundo, la suma de dichas componentes es cero.

Usando la identidad (1.47) es posible reescribir (1.46) como

$$\sigma_{ij} = K u_{ll}\delta_{ij} + 2\mu \left(u_{ij} - \frac{1}{3}u_{ll}\delta_{ij}\right),\tag{1.48}$$

donde

$$K = \lambda + \frac{2}{3}\mu\tag{1.49}$$

es el módulo de compresión del material, que mide la resistencia del medio a compresiones hidrostáticas. La constante μ es llamada módulo de corte o de rigidez y mide la resistencia a las deformaciones de corte.

La ecuación (1.46) y su forma alternativa (1.48) son conocidas como la ley de Hooke generalizada para sólidos elásticos isotrópicos[5]. Como se observa, para este tipo de materiales sólo son necesarios dos módulos elásticos independientes para describir el comportamiento mecánico del medio.

1.4. Ondas elásticas

En general, las ecuaciones de movimiento para un material elástico se obtienen aplicando la segunda ley de Newton a un medio continuo. De esta ley, sabemos que el cambio del momento en el tiempo es igual a la fuerza total aplicada sobre un cuerpo. En el caso de un medio continuo, el momento por unidad de volumen es el producto de la densidad por la velocidad en cada punto[3, 4, 7]

$$\mathbf{p} = \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}, \quad (1.50)$$

donde \mathbf{u} es el vector de desplazamiento y ρ la densidad del medio.

Con esto, la segunda ley de Newton para un medio elástico toma la forma

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \frac{\partial u_i}{\partial t} \right) = F_i + \rho f_i, \quad (1.51)$$

donde F_i son las fuerzas por unidad de volumen debidas a los esfuerzos internos y ρf_i son las fuerzas externas por unidad de volumen. La derivada temporal puede aproximarse como

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \frac{\partial u_i}{\partial t} \right) \approx \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}, \quad (1.52)$$

si tomamos en cuenta que las deformaciones son tan pequeñas que el valor local de la densidad permanece constante en el tiempo.

Aplicando la ecuación (1.31), resulta

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho f_i. \quad (1.53)$$

Ésta es la expresión general para las ecuaciones de movimiento en un medio elástico.

Haciendo uso de la ecuación (1.48) para la ley de Hooke en medios isotrópicos, tenemos

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = K \frac{\partial u_{ll}}{\partial x_j} \delta_{ij} + 2\mu \left(\frac{\partial u_{ij}}{\partial x_j} - \frac{1}{3} \frac{\partial u_{ll}}{\partial x_j} \delta_{ij} \right). \quad (1.54)$$

Por otro lado, el tensor de deformación se define como

$$u_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right).$$

Entonces, sustituyendo u_{ij} en (1.54) obtenemos

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \left(K + \frac{1}{3}\mu \right) \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_j \partial x_i} + \mu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2}. \quad (1.55)$$

Así, la ecuación de movimiento para un medio elástico homogéneo e isotrópico es

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \left(K + \frac{1}{3}\mu \right) \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right) + \mu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} + \rho f_i. \quad (1.56)$$

Esta ecuación es comúnmente expresada en notación vectorial de la forma[3]

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \left(K + \frac{1}{3}\mu \right) \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) + \rho \mathbf{f}. \quad (1.57)$$

Haciendo uso de la la identidad vectorial

$$\nabla^2 \mathbf{u} = -\nabla \times (\nabla \times \mathbf{u}) + \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}), \quad (1.58)$$

la ecuación (1.57) queda

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = \rho c_l^2 \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \rho c_t^2 \nabla \times (\nabla \times \mathbf{u}) + \rho \mathbf{f}, \quad (1.59)$$

donde c_l es la velocidad del sonido longitudinal del medio y c_t es la velocidad del sonido transversal. Éstas vienen dadas por

$$c_l^2 = \frac{K + \frac{4}{3}\mu}{\rho} \quad (1.60a)$$

y

$$c_t^2 = \frac{\mu}{\rho}. \quad (1.60b)$$

1.4. ONDAS ELÁSTICAS

Es importante notar que siempre se cumple $c_l > c_t$, es decir, las perturbaciones longitudinales en cualquier medio siempre se propagan a mayor velocidad que las transversales en el mismo.

Volviendo a la ecuación de movimiento, el vector de desplazamiento \mathbf{u} puede ser descompuesto en dos partes independientes

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_l + \mathbf{u}_t, \quad (1.61)$$

donde \mathbf{u}_l representa compresiones hidrostáticas y \mathbf{u}_t deformaciones cortantes puras. Estas componentes satisfacen las ecuaciones

$$\nabla \times \mathbf{u}_l = 0, \quad (1.62a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_t = 0. \quad (1.62b)$$

Sustituyendo (1.61) en (1.59) obtenemos, en ausencia de fuerzas de volumen, la ecuación

$$\frac{\partial^2 \mathbf{u}_l}{\partial t^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{u}_t}{\partial t^2} = c_l^2 \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}_l) - c_t^2 \nabla \times (\nabla \times \mathbf{u}_t), \quad (1.63)$$

luego, usamos la identidad (1.58) en esta ecuación y aplicamos las propiedades (1.62) para llegar a la ecuación de movimiento

$$\left[\frac{\partial^2 \mathbf{u}_l}{\partial t^2} - c_l^2 \nabla^2 \mathbf{u}_l \right] + \left[\frac{\partial^2 \mathbf{u}_t}{\partial t^2} - c_t^2 \nabla^2 \mathbf{u}_t \right] = 0. \quad (1.64)$$

Es posible separar ésta en dos ecuaciones independientes. Para esto, tomamos la divergencia en ambos lados de (1.64) y obtenemos

$$\nabla \cdot \left[\frac{\partial^2 \mathbf{u}_l}{\partial t^2} - c_l^2 \nabla^2 \mathbf{u}_l \right] = 0. \quad (1.65)$$

Además, como $\nabla \times \mathbf{u}_l = 0$, entonces se cumple que

$$\nabla \times \left[\frac{\partial^2 \mathbf{u}_l}{\partial t^2} - c_l^2 \nabla^2 \mathbf{u}_l \right] = 0. \quad (1.66)$$

Si tanto la divergencia como el rotacional de un vector son cero, entonces, el vector mismo debe ser cero. Esto nos permite obtener la ecuación para \mathbf{u}_l

$$\frac{\partial^2 \mathbf{u}_l}{\partial t^2} - c_l^2 \nabla^2 \mathbf{u}_l = 0, \quad (1.67)$$

que es una ecuación de onda clásica para la componente longitudinal del vector de desplazamiento.

Procediendo de forma análoga es posible obtener una ecuación independiente para la componente transversal. Para esto se toma el rotacional de (1.64)

$$\nabla \times \left[\frac{\partial^2 \mathbf{u}_t}{\partial t^2} - c_t^2 \nabla^2 \mathbf{u}_t \right] = 0, \quad (1.68)$$

en este caso, de las propiedades (1.62) se observa que también se cumple

$$\nabla \cdot \left[\frac{\partial^2 \mathbf{u}_t}{\partial t^2} - c_t^2 \nabla^2 \mathbf{u}_t \right] = 0. \quad (1.69)$$

Entonces, el rotacional y la divergencia de la expresión entre paréntesis se anulan. Esto implica que

$$\frac{\partial^2 \mathbf{u}_t}{\partial t^2} - c_t^2 \nabla^2 \mathbf{u}_t = 0. \quad (1.70)$$

Esta ecuación corresponde a la ecuación de las ondas transversales en el medio elástico.

Para una onda monocromática viajando en un medio elástico, la solución al vector de desplazamiento es la suma de una onda longitudinal y una onda transversal[4]

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}_l(\mathbf{x})e^{-i\omega t} + \mathbf{u}_t(\mathbf{x})e^{-i\omega t}, \quad (1.71)$$

donde $\omega = 2\pi f$ con f la frecuencia de la onda en hertz. Cada componente satisface las ecuaciones de Helmholtz

$$\nabla^2 \mathbf{u}_l + k_l^2 \mathbf{u}_l = 0 \quad \text{y} \quad \nabla^2 \mathbf{u}_t + k_t^2 \mathbf{u}_t = 0. \quad (1.72)$$

Los términos $k_l = \omega/c_l$ y $k_t = \omega/c_t$ son los números de onda de la componente longitu-

1.4. ONDAS ELÁSTICAS

dinal y de la transversal, respectivamente.

Para ondas planas monocromáticas, la expresión (1.71) para el vector de desplazamiento queda

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}_l e^{i(\mathbf{k}_l \cdot \mathbf{x} - \omega t)} + \mathbf{u}_t e^{i(\mathbf{k}_t \cdot \mathbf{x} - \omega t)}, \quad (1.73)$$

donde \mathbf{k}_l t \mathbf{k}_t son los vectores de onda longitudinal y transversal, de magnitud k_l y k_t , respectivamente; \mathbf{u}_l y \mathbf{u}_t son vectores constantes que satisfacen las ecuaciones

$$\mathbf{u}_l \times \mathbf{k}_l = 0 \quad \text{y} \quad \mathbf{u}_t \cdot \mathbf{k}_t = 0. \quad (1.74)$$

Lo cual indica que la dirección de oscilación de la onda es paralela a la dirección de propagación para la componente longitudinal, y perpendicular a ella para la transversal.

Sabiendo que las deformaciones en un medio elástico pueden separarse en componentes longitudinales y componentes transversales, las cuales se propagan con velocidades c_l y c_t , respectivamente, resulta importante expresar la ley de Hooke para medios isotrópicos y homogéneos en términos de estas velocidades. Usando las ecuaciones (1.60), los módulos de compresión y de corte quedan

$$K = \rho(c_l^2 - \frac{4}{3}c_t^2) \quad \text{y} \quad \mu = \rho c_t^2 \quad (1.75)$$

Sustituyendo éstas en la ecuación (1.48) se llega a la expresión

$$\sigma_{ij} = 2\rho c_t^2 u_{ij} + \rho(c_l^2 - 2c_t^2) u_{ll} \delta_{ij}. \quad (1.76)$$

Para un cuerpo sometido únicamente a compresiones hidrostáticas, el tensor de esfuerzos se reduce a[4]

$$\sigma_{ij} = -p \delta_{ij}, \quad (1.77)$$

donde p es la presión. Comparando esta relación con la ecuación (1.76), obtenemos que

$$p = -\rho c_l^2 \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (1.78)$$

donde se ha hecho uso de las propiedades de la δ_{ij} y de la definición del tensor de

deformación (1.13).

En un medio donde se propaga una onda plana longitudinal, sólo existen compresiones hidrostáticas, por lo que se cumple (1.78). Además, en este caso, el vector de desplazamiento es de la forma

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}_l e^{i(\mathbf{k}_l \cdot \mathbf{x} - \omega t)}. \quad (1.79)$$

Calculando su divergencia, se obtiene

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = i\mathbf{k}_l \cdot \mathbf{u}_l e^{i(\mathbf{k}_l \cdot \mathbf{x} - \omega t)}. \quad (1.80)$$

Como el vector de onda y el vector de deformación longitudinal son paralelos, entonces $\mathbf{k}_l \cdot \mathbf{u}_l = k_l u$, donde u es la magnitud del vector de desplazamiento. Entonces,

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = ik_l u e^{i(\mathbf{k}_l \cdot \mathbf{x} - \omega t)}. \quad (1.81)$$

Usando esta relación en (1.78), queda

$$p = \rho c_l^2 k_l u e^{i(\mathbf{k}_l \cdot \mathbf{x} - \omega t)}. \quad (1.82)$$

La impedancia acústica específica (a la que en adelante nos referiremos simplemente como impedancia acústica) se define como la razón de la presión a la velocidad de las partículas asociada en el medio[8] y se denota con la letra z ,

$$z = \frac{p}{v}. \quad (1.83)$$

En un medio continuo, la velocidad en cada punto viene dada por

$$\mathbf{v} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}. \quad (1.84)$$

Para una onda plana longitudinal

$$\mathbf{v} = -i\omega \mathbf{u} \quad \Rightarrow \quad v = \omega u e^{i(\mathbf{k}_l \cdot \mathbf{x} - \omega t)}. \quad (1.85)$$

1.5. CONDICIONES DE FRONTERA

Sustituyendo (1.82) y (1.85) en (1.83), la impedancia acústica longitudinal para un medio elástico se expresa como

$$z_l = \rho c_l. \quad (1.86)$$

De forma análoga, se define la impedancia acústica transversal como

$$z_t = \rho c_t. \quad (1.87)$$

En un fluido ideal, al ejercer un esfuerzo de corte sobre él, se deforma continuamente sin resistirse. Esto implica que su módulo de corte μ es igual a cero. Entonces, el tensor de esfuerzos para un fluido ideal[6] viene dado por (1.77) y no pueden existir ondas transversales en dicho medio. Esto nos permite aplicar el formalismo desarrollado para el caso de sólidos elásticos, considerando únicamente deformaciones pequeñas, para el estudio de ondas longitudinales propagándose en fluidos ideales en reposo.

1.5. Condiciones de frontera

Las ecuaciones (1.67) y (1.70) describen el comportamiento de ondas mecánicas que se propagan en un medio elástico isotrópico homogéneo. Cuando estas ondas viajan entre dos medios con propiedades elásticas diferentes, el vector de desplazamiento \mathbf{u} debe satisfacer ciertas condiciones en la frontera que separa a los medios para tener soluciones físicamente aceptables.

Consideremos dos materiales elásticos isotrópicos y homogéneos con parámetros elásticos diferentes, separados por una superficie S como se ilustra en la Figura 1.6.

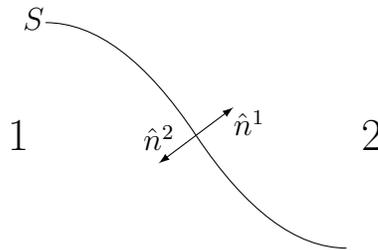


Figura 1.6: Frontera que separa a dos medios elásticos diferentes.

Si no hay discontinuidades en la superficie que une a los medios, la deformación del medio 1 debe ser igual a la deformación en el medio 2 en cada punto de la misma. Esta condición se describe en términos del vector de desplazamiento como

$$\mathbf{u}^1|_s = \mathbf{u}^2|_s, \quad (1.88)$$

donde el superíndice indica el medio al que corresponde cada vector.

Otra condición se obtiene de la tercera ley de Newton. De esta ley se deduce que la fuerza ejercida por elemento de volumen sobre sus alrededores debe ser igual a la fuerza que ejercen éstos sobre dicho volumen, pero en direcciones opuesta. En este caso, implica que el vector de tracción total sobre la frontera se anula, es decir

$$T_i^{\hat{n}_1} + T_i^{\hat{n}_2} = 0. \quad (1.89)$$

Expresando el vector de tracción en términos del tensor de esfuerzos

$$T_i^{\hat{n}} = \sigma_{ij} n_j, \quad (1.90)$$

y notando que $\hat{n}_1 = -\hat{n}_2$, podemos reescribir la ecuación (1.89) de la forma

$$(\sigma_{ij}^1 - \sigma_{ij}^2) n_j = 0. \quad (1.91)$$

Cuando la superficie que separa a los medios es plana, éstas condiciones se vuelven más simples. En coordenadas cartesianas, tomando como frontera al plano $z = 0$, cuyo vector unitario normal es \hat{e}_z , la condición de continuidad del vector de desplazamiento se expresa en las ecuaciones

$$\begin{aligned} u_x^1|_{z=0} &= u_x^2|_{z=0}, \\ u_y^1|_{z=0} &= u_y^2|_{z=0}, \\ u_z^1|_{z=0} &= u_z^2|_{z=0}. \end{aligned} \quad (1.92)$$

Las primeras dos ecuaciones corresponden a deformaciones tangenciales a la frontera y

1.5. CONDICIONES DE FRONTERA

la tercera, a la deformación normal a la misma.

Para la condición del tensor de esfuerzos, quedan

$$\begin{aligned}\sigma_{zx}^1|_{z=0} &= \sigma_{zx}^2|_{z=0}, \\ \sigma_{zy}^1|_{z=0} &= \sigma_{zy}^2|_{z=0}, \\ \sigma_{zz}^1|_{z=0} &= \sigma_{zz}^2|_{z=0}.\end{aligned}\tag{1.93}$$

De forma análoga a las ecuaciones anteriores, las dos primeras de éstas se refieren a los esfuerzos tangenciales a S , mientras que la tercera es para los esfuerzos normales.

En general, cuando una onda elástica incide sobre la superficie que separa a dos medios distintos, ocurre un cambio en la naturaleza tanto de la onda que es reflejada como de la que se transmite. Esto es, si la onda incidente es puramente longitudinal (o transversal), la onda reflejada y la transmitida resultantes serán una mezcla de ondas longitudinales y transversales (ondas mixtas). Los únicos casos donde no se presenta este tipo de conversión son cuando la onda incide en forma normal a la superficie, o cuando incide una onda transversal cuyas oscilaciones son paralelas a dicha superficie (conocida como polarización de corte horizontal)[4].

Capítulo 2

Cristales fonónicos

Los cristales fonónicos son estructuras periódicas compuestas por dos materiales con propiedades elásticas diferentes[1]. Reciben este nombre por presentar una estructura análoga a la de los cristales naturales, y así como éstos presentan una estructura de bandas permitidas y bandas prohibidas para la energía de los electrones, los cristales fonónicos tienen bandas de frecuencias para las ondas elásticas.

En este capítulo se estudia el caso de un cristal fonónico de periodicidad unidimensional donde se propagan ondas elásticas longitudinales. Se obtiene una expresión analítica que relaciona la frecuencia de estas ondas con el vector de onda de Bloch. Antes de obtener dicha relación se revisan algunos conceptos básicos de cristalografía, los cuales pueden aplicarse al caso de estructuras periódicas de materiales elásticos.

2.1. Cristales y estructura cristalina

Se denominan cristales a los sólidos cuyos constituyentes, sean átomos, moléculas o iones, forman un arreglo periódico ordenado. Este arreglo recibe el nombre de estructura cristalina. Una forma de describir dicha estructura es a través de las redes cristalinas, las cuales son los arreglos infinitos de puntos discretos descritos por

$$\mathbf{T}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3, \quad \forall n_i \in \mathbb{Z}, \quad (2.1)$$

donde \mathbf{a}_i son los vectores de traslación primitivos y forman los ejes cristalinos.

Para un cristal unidimensional, sólo existe un tipo de red cristalina, y ésta es de la forma mostrada en la Figura 2.1.



Figura 2.1: Red cristalina unidimensional.

Los vectores de traslación primitivos \mathbf{a}_i definen un paralelepípedo, conocido como celda primitiva[9]. Esta celda contiene el menor número de átomos y al ser trasladada según \mathbf{T}_n rellena todo el espacio sin superposiciones ni vacíos[4]. Su volumen es $\Omega_c = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$. Los cristales se forman por la repetición periódica de estas celdas primitivas.

Un caso particular de celda primitiva es la celda de Wigner-Seitz. Esta red se forma trazando líneas desde un punto de la red cristalina a cada uno de los puntos vecinos; en el punto medio de cada línea se colocan planos normales a ellas. La región de menor volumen encerrada por estos planos es la celda de Wigner-Seitz[9]. Ésta contiene la zona del espacio más cercana a un punto de la red.

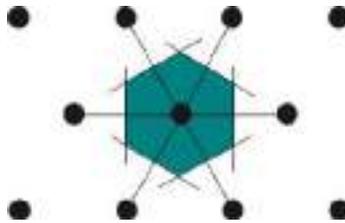


Figura 2.2: Red de Wigner-Seitz de una red cristalina bidimensional.

2.2. Red recíproca

Cualquier propiedad local $f(\mathbf{r})$ de un cristal es invariante bajo la traslación \mathbf{T}_n y es una función periódica con periodos $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ en las direcciones de los ejes cristalinos, es decir

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = f(\mathbf{r}). \quad (2.2)$$

2.2. RED RECÍPROCA

Esta periodicidad nos permite estudiar dicha propiedad mediante el análisis de Fourier. Definimos los vectores primitivos de la red recíproca en tres dimensiones como

$$\mathbf{b}_i = \epsilon_{ijk} \frac{\pi}{\Omega_c} \mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k, \quad (2.3)$$

éstos tienen la propiedad

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij}. \quad (2.4)$$

Para redes cristalinas de periodicidad unidimensional, el vector primitivo de la red recíproca se define como

$$\mathbf{b} = \frac{2\pi}{|\mathbf{a}|^2} \mathbf{a}, \quad (2.5)$$

el cual cumple con la propiedad (2.4).

El conjunto de puntos en el espacio recíproco dados por la expresión

$$\mathbf{K}_n = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 + m_3 \mathbf{b}_3, \quad \forall m_i \in \mathbb{Z}, \quad (2.6)$$

es una red de Bravais, conocida como red recíproca.

Entonces, la representación en serie de Fourier de $f(\mathbf{r})$ es

$$f(\mathbf{r}) = \frac{1}{\Omega_c} \sum_{\mathbf{K}} f_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}}, \quad (2.7)$$

donde

$$f_{\mathbf{K}} = \int_{\Omega_c} e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} f(\mathbf{r}) dV. \quad (2.8)$$

Esta representación cumple con la propiedad de periodicidad de $f(\mathbf{r})$, ya que

$$\begin{aligned} f(\mathbf{r} + \mathbf{T}) &= \frac{1}{\Omega_c} \sum_{\mathbf{K}} f_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{T})}, \\ &= \frac{1}{\Omega_c} \sum_{\mathbf{K}} f_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{T}}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Como

$$\begin{aligned}\mathbf{K} \cdot \mathbf{T} &= (m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 + m_3 \mathbf{b}_3) \cdot (n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3) \\ &= 2\pi(m_1 n_1 + m_2 n_2 + m_3 n_3) = 2\pi M,\end{aligned}\tag{2.10}$$

con M un entero. Entonces

$$e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{T}} = e^{2\pi i M} = 1.\tag{2.11}$$

Sustituyendo (2.11) en (2.9), queda

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = \frac{1}{\Omega_c} \sum_{\mathbf{K}} f_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} = f(\mathbf{r}).\tag{2.12}$$

Lo que confirma que dicha representación cumple con la propiedad de periodicidad.

2.3. Teorema de Bloch

El problema en consideración es análogo al de un sistema cuántico de una partícula en un potencial periódico, cuyo estado es descrito mediante una función de onda. El teorema de Bloch establece que dicha función puede escribirse como

$$\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}),\tag{2.13}$$

donde $\psi_{\mathbf{k}}$ es la función periódica de Bloch, que tiene la misma periodicidad que el potencial[9]. Los eigenvalores de la energía $\epsilon_n(\mathbf{k}) = \epsilon_n(\mathbf{k} + \mathbf{K})$ son periódicos, con periodicidad \mathbf{K} .

Como los eigenvalores para una n dada son periódicos en \mathbf{k} , todos los valores distintos de $\epsilon_n(\mathbf{k})$ se dan en la primera zona de Brillouin. Esta zona se construye como la celda de Wigner-Seitz, pero en la red recíproca. La estructura de bandas es la colección de los eigenvalores de la energía de la primera zona de Brillouin. Para un cristal de periodicidad unidimensional con constante de red a , la primera zona de Brillouin es $[-\pi/a, \pi/a]$.

2.3. TEOREMA DE BLOCH

La descripción de onda de Bloch puede aplicarse a cualquier fenómeno ondulatorio en un medio periódico. En el caso de ondas elásticas, el papel de la función de onda lo toma el vector de desplazamiento $u(\mathbf{r}, t)$.

Para redes cristalinas de periodicidad unidimensional, con vector de traslación $\mathbf{T} = nd\hat{e}_z$, donde n es un entero y d es la constante de red, la expresión para el teorema de Bloch toma la forma

$$\Psi(z) = \psi(z)e^{ikz}, \quad (2.14)$$

donde

$$\psi(z+d) = \psi(z). \quad (2.15)$$

Entonces, sustituyendo (2.15) en (2.14) queda

$$\begin{aligned} \Psi(z+d) &= \psi(z+d)e^{ik(z+d)} \\ &= \psi(z)e^{ikz}e^{ikd} \\ \Psi(z+d) &= \Psi(z)e^{ikd}. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Como tanto la función de onda como su derivada deben ser continuas en todo el dominio, entonces, para las derivadas de la función de onda, como $\psi(z)$ es periódica con periodo d , se cumple que

$$\left. \frac{d\psi}{dz} \right|_{z+d} = \left. \frac{d\psi}{dz} \right|_z. \quad (2.17)$$

Derivando (2.14) respecto a z , tenemos

$$\begin{aligned} \frac{d\Psi}{dz} &= e^{ikz} \frac{d\psi}{dz} + ik\psi(z)e^{ikz}, \\ \frac{d\Psi}{dz} &= e^{ikz} \frac{d\psi}{dz} + ik\Psi(z). \end{aligned} \quad (2.18)$$

Evaluable en $z+d$, resulta

$$\left. \frac{d\Psi}{dz} \right|_{z+d} = e^{ik(z+d)} \left. \frac{d\psi}{dz} \right|_{z+d} + ik\Psi(z+d). \quad (2.19)$$

Aplicando (2.16) y (2.17) en (2.19), queda

$$\left. \frac{d\Psi}{dz} \right|_{z+d} = e^{ikd} \left[e^{ikz} \left. \frac{d\psi}{dz} \right|_z + ik\Psi(z) \right]. \quad (2.20)$$

Finalmente, de aquí se llega a la ecuación

$$\left. \frac{d\Psi}{dz} \right|_{z+d} = e^{ikd} \left. \frac{d\Psi}{dz} \right|_z. \quad (2.21)$$

Esta última ecuación es una consecuencia del teorema de Bloch.

2.4. Estructura de bandas

Estudiaremos un cristal fonónico con periodicidad unidimensional que se forma alternando placas de dos materiales con propiedades elásticas diferentes. Se denotará con 1 al material con placas de grosor a y con 2 al otro material, de grosor b . El periodo de este sistema es d , con $d = a + b$. En la Figura 2.3 se ilustra un sistema con estas características.

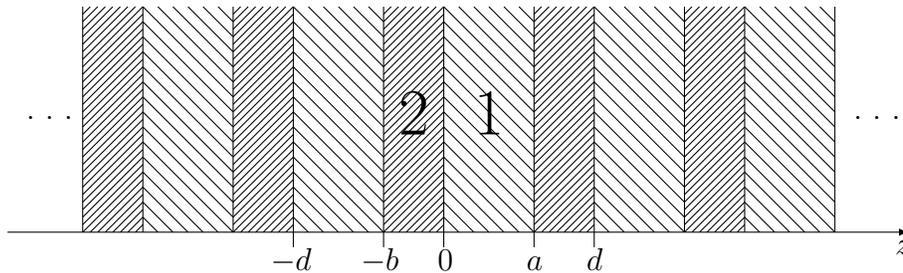


Figura 2.3: Cristal fonónico de periodicidad unidimensional.

Este modelo es similar al de Kronig-Penney, en el cual se modela la estructura de cristales naturales unidimensionales como un arreglo periódico de potenciales de pozo cuadrado[9].

2.4. ESTRUCTURA DE BANDAS

Como se estudian ondas longitudinales, la amplitud de la onda es paralela al vector de onda. Entonces, para ondas planas longitudinales propagándose en la dirección z dentro del cristal fonónico, las soluciones para el vector de deformación son de la forma

$$u(z) = \begin{cases} u_1(z) = A_+e^{ik_1z} + A_-e^{-ik_1z} & 0 \leq z \leq a \\ u_2(z) = B_+e^{ik_2z} + B_-e^{-ik_2z} & a < z \leq d \end{cases} \quad (2.22)$$

Cabe notar que la función $u(z)$ sólo describe el comportamiento de las ondas en una celda unitaria, denominada celda principal. Pero, dado el carácter periódico del sistema, es suficiente analizar esta celda y después aplicar las condiciones de continuidad y periodicidad necesarias. Estas condiciones vienen dadas por las ecuaciones (1.93) y (1.92). Como la amplitud de las ondas sólo tiene componente en la dirección z , dichas condiciones se reducen a:

$$u_{1,z}|_{z=a} = u_{2,z}|_{z=a} \quad \Rightarrow \quad u_1(a) = u_2(a), \quad (2.23)$$

$$\sigma_{1,z}|_{z=a} = \sigma_{2,z}|_{z=a} \quad \Rightarrow \quad \rho_1 c_{1l}^2 \left. \frac{\partial u_1}{\partial z} \right|_{z=a} = \rho_2 c_{2l}^2 \left. \frac{\partial u_2}{\partial z} \right|_{z=a}. \quad (2.24)$$

En la ecuación (2.24) se ha hecho uso de la ley de Hooke en la forma (1.76) y de la definición del tensor de deformación (1.13), donde ρ_i es la densidad del medio correspondiente y c_{il} es su velocidad del sonido longitudinal.

Aplicando estas condiciones en la función de onda (2.22), obtenemos las ecuaciones

$$A_+e^{ik_1a} + A_-e^{-ik_1a} = B_+e^{ik_2a} + B_-e^{-ik_2a} \quad (2.25)$$

y

$$k_1\rho_1c_{1l}^2(A_+e^{ik_1a} - A_-e^{-ik_1a}) = k_2\rho_2c_{2l}^2(B_+e^{ik_2a} - B_-e^{-ik_2a}). \quad (2.26)$$

Escribiendo la ecuación (2.26) en términos de la frecuencia ω y de las impedancias acústicas longitudinales de cada medio, queda de la forma

$$z_1\omega(A_+e^{ik_1a} - A_-e^{-ik_1a}) = z_2\omega(B_+e^{ik_2a} - B_-e^{-ik_2a}), \quad (2.27)$$

donde $z_1 = \rho_1 c_1$, $z_2 = \rho_2 c_2$ y $\omega = k_1 c_1 = k_2 c_2$.

Del teorema de Bloch, tenemos

$$\Psi(z + d) = \Psi(z)e^{ikd}. \quad (2.28)$$

En este caso, en $z = 0$, la expresión queda

$$u_2(d) = u_1(0)e^{ikd}, \quad (2.29)$$

o

$$A_+ + A_- = e^{-ikd} (B_+ e^{ik_2 d} + B_- e^{-ik_2 d}). \quad (2.30)$$

Para la derivada de la función de onda, de la ecuación (2.21) se tiene que

$$\left. \frac{\partial u}{\partial z} \right|_{z=d} = e^{ikd} \left. \frac{\partial u}{\partial z} \right|_{z=0}. \quad (2.31)$$

De la continuidad de tensor de esfuerzos en $z = d$ y de la ecuación (2.31) obtenemos

$$\rho_1 c_{1l}^2 \left[e^{ikd} \left. \frac{\partial u}{\partial z} \right|_{z=0} \right] = \rho_2 c_{2l}^2 \left. \frac{\partial u}{\partial z} \right|_{z=0}, \quad (2.32)$$

de aquí

$$k_1 \rho_1 c_{1l}^2 (A_+ - A_-) = k_2 \rho_2 c_{2l}^2 e^{-ikd} (B_+ e^{ik_2 d} - B_- e^{-ik_2 d}), \quad (2.33)$$

o, en términos de la impedancia acústica

$$z_1 (A_+ - A_-) = z_2 e^{-ikd} (B_+ e^{ik_2 d} - B_- e^{-ik_2 d}). \quad (2.34)$$

2.4. ESTRUCTURA DE BANDAS

Las ecuaciones (2.25), (2.27), (2.30) y (2.34) se pueden resumir en la forma matricial

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & -e^{id(k_2-k)} & -e^{-id(k_2+k)} \\ z_1 & -z_1 & -z_2 e^{id(k_2-k)} & z_2 e^{-id(k_2+k)} \\ e^{ik_1 a} & e^{-ik_1 a} & -e^{ik_2 a} & -e^{-ik_2 a} \\ z_1 e^{ik_1 a} & -z_1 e^{-ik_1 a} & -z_2 e^{ik_2 a} & z_2 e^{-ik_2 a} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_+ \\ A_- \\ B_+ \\ B_- \end{bmatrix} = 0. \quad (2.35)$$

Para tener una solución distinta a la trivial, se debe cumplir que el determinante de la matriz sea cero, es decir

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -e^{id(k_2-k)} & -e^{-id(k_2+k)} \\ z_1 & -z_1 & -z_2 e^{id(k_2-k)} & z_2 e^{-id(k_2+k)} \\ e^{ik_1 a} & e^{-ik_1 a} & -e^{ik_2 a} & -e^{-ik_2 a} \\ z_1 e^{ik_1 a} & -z_1 e^{-ik_1 a} & -z_2 e^{ik_2 a} & z_2 e^{-ik_2 a} \end{vmatrix} = 0. \quad (2.36)$$

Éste determinante puede simplificarse definiendo

$$C_1 = e^{ik_1 a}, \quad C_2 = e^{ik_2 a}, \quad D_2 = e^{ik_2 d} \quad y \quad D = e^{-ikd}. \quad (2.37)$$

Con esto la ecuación (2.36) queda

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -D_2 D & -D_2^* D \\ z_1 & -z_1 & -z_2 D_2 D & z_2 D_2^* D \\ C_1 & C_1^* & -C_2 & -C_2^* \\ z_1 C_1 & -z_1 C_1^* & -z_2 C_2 & z_2 C_2^* \end{vmatrix} = 0. \quad (2.38)$$

Para resolver éste, recurrimos a las propiedades de los determinantes. Si sumamos un múltiplo escalar de un renglón o columna de la matriz a otro, su determinante no cambia. Entonces, multiplicando el primer renglón y el tercero por $-z_1$ y sumándoselo

al segundo y al cuarto, respectivamente, obtenemos

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -D_2D & -D_2^*D \\ 0 & -2z_1 & (z_1 - z_2)D_2D & (z_1 + z_2)D_2^*D \\ C_1 & C_1^* & -C_2 & -C_2^* \\ 0 & -2z_1C_1^* & (z_1 - z_2)C_2 & (z_1 + z_2)C_2^* \end{vmatrix} = 0. \quad (2.39)$$

Además, para cualquier matriz cuadrada \mathbb{A} se cumple $\det(\mathbb{A}) = \det(\mathbb{A}^T)$. Así, la ecuación (2.39) es equivalente a

$$\begin{vmatrix} 1 & 0 & C_1 & 0 \\ 1 & -2z_1 & C_1^* & -2z_1C_1^* \\ -D_2D & (z_1 - z_2)D_2D & -C_2 & (z_1 - z_2)C_2 \\ -D_2^*D & (z_1 + z_2)D_2^*D & -C_2^* & (z_1 + z_2)C_2^* \end{vmatrix} = 0. \quad (2.40)$$

Desarrollando este determinante se llega a

$$\begin{aligned} & 4z_1z_2 + (z_1 - z_2)^2C_1^*C_2^*D_2D - (z_1 + z_2)^2C_1^*C_2D_2^*D \\ & + 4z_1z_2D^2 - (z_1 + z_2)^2C_1C_2^*D_2D + (z_1 - z_2)^2C_1C_2D_2^*D = 0. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Multiplicando la ecuación (2.41) por D^* , queda

$$\begin{aligned} & 4z_1z_2(D + D^*) + (z_1 - z_2)^2C_1^*C_2^*D_2 - (z_1 + z_2)^2C_1^*C_2D_2^* \\ & - (z_1 + z_2)^2C_1C_2^*D_2 + (z_1 - z_2)^2C_1C_2D_2^* = 0. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Agrupando términos semejantes y desarrollando

$$\begin{aligned} & 4z_1z_2(D + D^*) + [(z_1 - z_2)^2C_1^* - (z_1 + z_2)^2C_1]C_2^*D_2 \\ & + [(z_1 - z_2)^2C_1 - (z_1 + z_2)^2C_1^*]C_2D_2^* = 0, \end{aligned}$$

2.4. ESTRUCTURA DE BANDAS

$$4z_1z_2(D + D^*) + [(z_1^2 - z_1z_2 + z_2^2)C_1^* - (z_1^2 + z_1z_2 + z_2^2)C_1]C_2^*D_2 \\ + [(z_1^2 - z_1z_2 + z_2^2)C_1 - (z_1^2 + z_1z_2 + z_2^2)C_1^*]C_2D_2^* = 0,$$

$$4z_1z_2(D + D^*) + (z_1^2 + z_2^2)(C_1^* - C_1)(C_2^*D_2 - C_2D_2^*) \\ - 2z_1z_2(C_1^* + C_1)(C_2^*D_2 + C_2D_2^*) = 0. \quad (2.43)$$

Sustituyendo (2.37) en (2.43)

$$4z_1z_2[2\cos(kd)] + (z_1^2 + z_2^2)[-2i\text{sen}(k_1a)][2i\text{sen}k_2(d-a)] \\ - 2z_1z_2[2\cos(k_1a)][2\cosk_2(d-a)] = 0,$$

$$8z_1z_2\cos(kd) + 4(z_1^2 + z_2^2)\text{sen}(k_1a)\text{sen}k_2(d-a) \\ - 8z_1z_2\cos(k_1a)\cosk_2(d-a) = 0. \quad (2.44)$$

Como $b = d - a$, entonces podemos escribir la ecuación (2.44) como

$$8z_1z_2\cos(kd) + 4(z_1^2 + z_2^2)\text{sen}(k_1a)\text{sen}(k_2b) - 8z_1z_2\cos(k_1a)\cos(k_2b) = 0. \quad (2.45)$$

Finalmente, dividiendo ésta entre $8z_1z_2$ se llega a la ecuación

$$\cos(k_1a)\cos(k_2b) - \frac{(z_1^2 + z_2^2)}{2z_1z_2}\text{sen}(k_1a)\text{sen}(k_2b) = \cos(kd). \quad (2.46)$$

Es conveniente expresar esta relación en términos de la frecuencia f de la onda. Recordando que en un medio homogéneo

$$k_i = \frac{\omega}{c_i}, \quad (2.47)$$

donde el índice indica el medio al que corresponde. Entonces, sustituyendo esta relación en la ecuación (2.46) y expresando la frecuencia angular en términos de la frecuencia

temporal f , como $\omega = 2\pi f$, se llega a la ecuación

$$\cos\left(\frac{2\pi af}{c_1}\right) \cos\left(\frac{2\pi bf}{c_2}\right) - \frac{1}{2} \left(\frac{z_1}{z_2} + \frac{z_2}{z_1}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{2\pi af}{c_1}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{2\pi bf}{c_2}\right) = \cos(kd). \quad (2.48)$$

Esta ecuación es análoga a la que se obtiene con el modelo de Kronig-Penney. La solución a esta ecuación permite conocer la relación de dispersión entre f y k para un cristal fonónico de periodicidad unidimensional con constante de red d . Como el rango de la función coseno es $[-1, 1]$, para tener soluciones a (2.48) es necesario que el lado izquierdo tome valores entre -1 y 1 . El conjunto de frecuencias para las cuales se cumple esta condición forma las bandas de propagación, mientras que aquellas donde no se cumple constituyen las bandas prohibidas. La estructura de bandas depende de los valores de los parámetros de longitud (a , b y d), de las velocidades del sonido en los materiales (c_1 y c_2) y de sus impedancias acústicas (z_1 y z_2).

Capítulo 3

Simulación numérica con FDTD

El método de las diferencias finitas en el dominio del tiempo, conocido por sus siglas en inglés como FDTD (*finite-difference time-domain*), es comúnmente usado para simular la propagación de ondas electromagnéticas. Esto se logra discretizando las ecuaciones de Maxwell[10] dependientes del tiempo (la ley de Ampère y la de Faraday), aproximando las derivadas mediante diferencias finitas. En este trabajo se aplicó este método para la simulación de ondas mecánicas longitudinales en medios elásticos, con propagación en una dimensión.

3.1. Ecuaciones de movimiento

Las ecuaciones que se discretizaron en este trabajo, para simular las ondas elásticas, fueron la segunda ley de Newton para un medio elástico en ausencia de fuerzas de volumen, correspondiente a la ecuación (1.53) con $f_i = 0$

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j}, \quad (3.1)$$

y la ley de Hooke para medios isotrópicos (1.76)

$$\sigma_{ij} = 2\rho c_t^2 u_{ij} + \rho(c_l^2 - 2c_t^2) u_{ll} \delta_{ij}. \quad (3.2)$$

En el sistema estudiado, sólo se consideraron ondas longitudinales que se propagan en forma perpendicular a las placas. Tomando al eje z paralelo al eje de simetría del cristal fonónico, el vector de onda y el vector de desplazamiento quedan paralelos a z . Así, el sistema de ecuaciones se reduce a

$$\rho(z) \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} \quad (3.3)$$

y

$$\sigma_{zz} = \rho(z) c_l^2(z) \frac{\partial u_z}{\partial z}, \quad (3.4)$$

donde se hizo uso de la definición

$$u_{zz} = \frac{\partial u_z}{\partial z}. \quad (3.5)$$

Por simplicidad, de aquí en adelante se denotarán $u_z \rightarrow u$ y $\sigma_{zz} \rightarrow \sigma$. Con esto, el sistema de ecuaciones que se debe resolver queda expresado como

$$\rho(z) \frac{\partial^2 u(z)}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma(z)}{\partial z}, \quad (3.6a)$$

$$\sigma(z) = \rho(z) c_l^2(z) \frac{\partial u(z)}{\partial z}. \quad (3.6b)$$

3.2. Diferencias finitas

Para discretizar las ecuaciones con las que se trabaja, se aproximan las derivadas como diferencias finitas centrales, es decir, la derivada de una función $f(x)$ respecto a x se toma como

$$\frac{df}{dx} \approx \frac{1}{\Delta x} \left[f \left(x + \frac{1}{2} \Delta x \right) - f \left(x - \frac{1}{2} \Delta x \right) \right]. \quad (3.7)$$

Entre más pequeño sea Δx , la aproximación será más cercana a la derivada exacta.

3.2. DIFERENCIAS FINITAS

Repitiendo el proceso, la aproximación para la segunda derivada de $f(x)$ resulta

$$\frac{d^2 f}{dx^2} = \frac{d}{dx} \left(\frac{df}{dx} \right),$$
$$\frac{d^2 f}{dx^2} \approx \frac{1}{(\Delta x)^2} \left[f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x) \right]. \quad (3.8)$$

Además, es necesario discretizar las variables, tanto la espacial z como el tiempo t . Para hacer esto, se toma

$$x = k\Delta x, \quad (3.9)$$

donde k es un entero. Esto implica que sólo tomaremos valores de la función $f(x)$ en puntos discretos del espacio, separados una distancia Δx entre sí. Con esto, las derivadas pueden expresarse de la forma

$$\frac{df}{dx} \approx \frac{1}{\Delta x} \left[f\left(\left(k + \frac{1}{2}\right)\Delta x\right) - f\left(\left(k - \frac{1}{2}\right)\Delta x\right) \right] \quad (3.10)$$

y

$$\frac{d^2 f}{dx^2} \approx \frac{1}{(\Delta x)^2} \left[f((k+1)\Delta x) - 2f(k\Delta x) + f((k-1)\Delta x) \right]. \quad (3.11)$$

O bien, denotando $f(k\Delta x)$ como $f(k)$,

$$\frac{df(k)}{dx} \approx \frac{1}{\Delta x} \left[f\left(k + \frac{1}{2}\right) - f\left(k - \frac{1}{2}\right) \right], \quad (3.12)$$

$$\frac{d^2 f_k}{dx^2} \approx \frac{1}{(\Delta x)^2} \left[f(k+1) - 2f(k) + f(k-1) \right]. \quad (3.13)$$

El tiempo se discretizó de forma similar, expresando el instante t como un número n de pasos finitos Δt , es decir $t = n\Delta t$.

En este caso, la coordenada espacial z se discretizó como $z = k\Delta z$. Como se ha venido haciendo, para simplificar las expresiones, se denota $u(z, t)$ como $u^n(k)$ y a $\sigma(z, t)$ como $\sigma^n(k)$. Así, las derivadas parciales de estas funciones, que aparecen en el sistema

de ecuaciones (3.6), se aproximan mediante las diferencias finitas

$$\frac{\partial u}{\partial z} \approx \frac{1}{\Delta z} \left[u^n(k + \frac{1}{2}) - u^n(k - \frac{1}{2}) \right], \quad (3.14a)$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial z} \approx \frac{1}{\Delta z} \left[\sigma^n(k + \frac{1}{2}) - \sigma^n(k - \frac{1}{2}) \right] \quad (3.14b)$$

y

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \approx \frac{1}{(\Delta t)^2} \left[u^{n+1}(k) - 2u^n(k) + u^{n-1}(k) \right]. \quad (3.14c)$$

Usando las ecuaciones (3.14) en las ecuaciones (3.6), éstas se transforman de un sistema de ecuaciones diferenciales parciales a un sistema de ecuaciones de diferencias finitas. Éste es el par de ecuaciones que se resuelven numéricamente

$$\rho(k) \frac{u^{n+1}(k) - 2u^n(k) + u^{n-1}(k)}{(\Delta t)^2} = \frac{\sigma^n(k + \frac{1}{2}) - \sigma^n(k - \frac{1}{2})}{\Delta z}, \quad (3.15a)$$

$$\sigma^n(k) = \rho(k) [c_l(k)]^2 \frac{u^n(k + \frac{1}{2}) - u^n(k - \frac{1}{2})}{\Delta z}. \quad (3.15b)$$

Los parámetros de la densidad ρ y de la velocidad del sonido longitudinal c_l del medio, en general, dependen de la ubicación espacial, es decir

$$\rho = \rho(z) \quad y \quad c_l = c_l(z).$$

Los argumentos de las funciones $k + \frac{1}{2}$ y $k - \frac{1}{2}$, que aparecen en las ecuaciones anteriores, indican que los nodos donde se evalúa el vector de desplazamiento $u^n(k)$ están localizados en medio de los nodos del tensor de esfuerzos $\sigma^n(k)$. En la Figura 3.1 se ilustra esta característica.

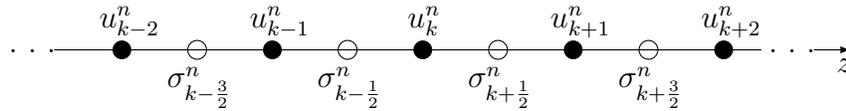


Figura 3.1: Nodos intercalados de u y σ .

3.2. DIFERENCIAS FINITAS

El algoritmo empleado consiste en obtener el campo $u^{n+1}(k)$ en términos de los campos pasados $u^n(k)$, $u^{n-1}(k)$ y de la derivada espacial del tensor de esfuerzos $\sigma^n(k)$. Este último campo se obtiene a su vez de la derivada espacial del campo pasado $u^n(k)$, previamente calculado. Las relaciones necesarias para obtener esta información se derivan de las ecuaciones (3.15), de donde se obtienen

$$u^{n+1}(k) = \frac{2(\Delta t)^2}{\rho(k)\Delta z} [\sigma^n(k + \frac{1}{2}) - \sigma^n(k - \frac{1}{2})] + 2u^n(k) - u^{n-1}(k) \quad (3.16a)$$

y

$$\sigma^n(k) = \frac{\rho(k)[c_l(k)]^2}{\Delta z} [u^n(k + \frac{1}{2}) - u^n(k - \frac{1}{2})]. \quad (3.16b)$$

Para un medio inhomogéneo formado por varios materiales elásticos, una onda longitudinal requiere un tiempo mínimo $\Delta t = \Delta z/c_0$ para recorrer una distancia Δz , donde c_0 es la velocidad del sonido longitudinal máxima. Entonces, para los pasos temporales, la condición de estabilidad para la simulación con este método es

$$\Delta t \leq \frac{\Delta z}{c_0}. \quad (3.17)$$

Esta es conocida como la condición de Courant[10], en este caso para simulaciones unidimensionales de ondas elásticas. Por simplicidad, se usó

$$\Delta t = \frac{\Delta z}{2c_0}. \quad (3.18)$$

Usando la relación (3.18) para los pasos temporales y espaciales en las ecuaciones (3.16), el sistema de ecuaciones que fue usado para las simulaciones quedó finalmente

$$u^{n+1}(k) = D(k) \left[\sigma^n(k + \frac{1}{2}) - \sigma^n(k - \frac{1}{2}) \right] + 2u^n(k) - u^{n-1}(k), \quad (3.19a)$$

$$\sigma^n(k) = R(k) \left[u^n(k + \frac{1}{2}) - u^n(k - \frac{1}{2}) \right], \quad (3.19b)$$

donde

$$R(k) = \frac{\rho(k)[c_l(k)]^2}{\Delta z} \quad y \quad D(k) = \frac{\Delta t}{c_0\rho(k)}. \quad (3.20)$$

Aplicando sucesivamente estas ecuaciones un número N de pasos temporales, se obtienen los campos u y σ después de recorrido un tiempo $N\Delta t$.

3.3. Condiciones de Mur

Debido a las limitaciones computacionales, sólo es posible trabajar en una región del espacio finita, a la que se denomina celda de simulación. En este trabajo se consideró una celda unidimensional de longitud L , con un extremo en $z = 0$ y el otro en $z = L$. Ésta a su vez, se dividió en K subintervalos iguales de longitud Δz , de modo que

$$\Delta z = \frac{L}{K}. \quad (3.21)$$

Entonces, el punto $z = 0$ corresponde al nodo $k = 0$ y el punto $z = L$ a $k = K$.

Como se trabaja con una celda de simulación finita, es necesario incluir condiciones de absorción en las fronteras artificiales de la misma para evitar que las perturbaciones sean reflejadas en dichos puntos. Estas reflexiones se producen porque es como si la onda, al llegar a estos puntos, se encontrara con un material con parámetros diferentes al del medio donde se está propagando. Para evitar esto, se considera que en los extremos las ondas sólo se propagan hacia afuera de la celda.

En el punto $z = 0$, sólo debe haber ondas viajando a la izquierda. Esto implica que el vector de desplazamiento en dicho punto es de la forma:

$$u^-(z, t) = u_0 e^{i(-kz - \omega t)} \quad (3.22)$$

Calculado las derivadas parciales de u^- respecto a z y a t , se obtiene

$$\frac{\partial u^-}{\partial z} = -iku_0 e^{i(-kz - \omega t)} = -iku^-. \quad (3.23a)$$

y

$$\frac{\partial u^-}{\partial t} = -i\omega u_0 e^{i(-kz - \omega t)} = -i\omega u^-. \quad (3.23b)$$

Como $k = \omega/c$, entonces, de estas ecuaciones, se obtiene la siguiente relación para las

3.3. CONDICIONES DE MUR

derivadas parciales del vector de desplazamiento en el punto $z = 0$

$$\left(\frac{\partial u^-}{\partial z} - \frac{1}{c} \frac{\partial u^-}{\partial t} \right) \Big|_{z=0} = 0. \quad (3.24)$$

La ecuación (3.24) es una de las condiciones de absorción de Mur de primer orden[11]. Para obtener la condición en el otro extremo se procede de forma análoga. En $z = L$, se considera una onda viajando hacia la derecha, de la forma

$$u^+(z, t) = u_0 e^{i(kz - \omega t)} \quad (3.25)$$

derivando u^+ respecto a z y t se llega a

$$\frac{\partial u^+}{\partial z} = iku_0 e^{i(kz - \omega t)} = iku^+. \quad (3.26a)$$

y

$$\frac{\partial u^+}{\partial t} = -i\omega u_0 e^{i(kz - \omega t)} = -i\omega u^+. \quad (3.26b)$$

Entonces, la condición de absorción de Mur en $z = L$ es

$$\left(\frac{\partial u^+}{\partial z} + \frac{1}{c} \frac{\partial u^+}{\partial t} \right) \Big|_{z=L} = 0. \quad (3.27)$$

Si $u(z, t)$ satisface las ecuaciones (3.24) y (3.27) en los puntos correspondientes, entonces se garantiza que no habrá reflexión en las fronteras de la celda. Pero, como se aproximan las derivadas con diferencias finitas, el porcentaje de las reflexiones eliminadas dependerá del tamaño del Δz . Para discretizar las condiciones de Mur, es necesario expresar la derivada espacial como el promedio de las derivadas espaciales entre los puntos temporales $n\Delta t$ y $(n+1)\Delta t$, esto es

$$\frac{\partial u}{\partial z} \approx \frac{1}{2} \left[\frac{u^n(k+1) - u^n(k)}{\Delta z} + \frac{u^{n+1}(k+1) - u^{n+1}(k)}{\Delta z} \right]. \quad (3.28)$$

Hay que notar que no se usó una diferencia finita central, sino una diferencia adelantada, esto se debe a que la función discretizada $u^n(k)$ sólo está definida en los puntos $k\Delta z$,

para k un entero entre 0 y M . La derivada temporal se puede escribir como el promedio de las derivadas temporales entre los puntos $z = k\Delta z$ y $z = (k + 1)\Delta z$, de la forma

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{1}{2} \left[\frac{u^{n+1}(k) - u^n(k)}{\Delta t} + \frac{u^{n+1}(k+1) - u^n(k+1)}{\Delta t} \right]. \quad (3.29)$$

Sustituyendo (3.28) y (3.29) en la primera condición (3.24), con $k = 0$, queda

$$\frac{u^n(1) - u^n(0) + u^{n+1}(1) - u^{n+1}(0)}{2\Delta z} - \frac{u^{n+1}(0) - u^n(0) + u^{n+1}(1) - u^n(1)}{2c\Delta t} = 0. \quad (3.30)$$

Despejando $u^{n+1}(0)$ de esta ecuación, se obtiene una expresión para la condición de absorción de Mur que puede ser trabajada numéricamente, ésta es

$$u^{n+1}(0) = u^n(1) + \frac{c\Delta t - \Delta z}{c\Delta t + \Delta z} [u^{n+1}(1) - u^n(0)]. \quad (3.31)$$

De manera similar, para obtener la forma discreta de la condición de Mur en el otro extremo, se sustituyeron las expresiones (3.28) y (3.29) en la ecuación (3.27), en este caso con $k + 1 = K$. La expresión resultante para $u^{n+1}(K)$ es

$$u^{n+1}(K) = u^n(K - 1) + \frac{c\Delta t - \Delta z}{c\Delta t + \Delta z} [u^{n+1}(K - 1) - u^n(K)]. \quad (3.32)$$

Recordando la condición de Courant (3.17), si la velocidad del sonido en el material de los extremos de la celda es la más alta, es posible expresar $c\Delta t$ como $\alpha\Delta z$, con $\alpha < 1$. Entonces, podemos escribir

$$\frac{c\Delta t - \Delta z}{c\Delta t + \Delta z} = \frac{\alpha - 1}{\alpha + 1} \quad (3.33)$$

Para las simulaciones hechas en este trabajo, se tomó $\alpha = \frac{1}{2}$, de modo que las condiciones de absorción en las fronteras empleadas fueron

$$u^{n+1}(0) = u^n(1) - \frac{1}{3} [u^{n+1}(1) - u^n(0)] \quad (3.34a)$$

y

$$u^{n+1}(K) = u^n(K - 1) - \frac{1}{3} [u^{n+1}(K - 1) - u^n(K)]. \quad (3.34b)$$

Estas condiciones permiten eliminar la mayoría de las reflexiones en las fronteras de la celda de simulación.

3.4. Fuentes

Además de las ecuaciones de movimiento para ondas elásticas longitudinales y de las condiciones de absorción de Mur en las fronteras, es necesario colocar una o más fuentes de perturbaciones mecánicas en el medio. Existen dos formas de hacer esto, una es asignar un valor a $u(z, t)$ en un punto de la malla, sobrescribiendo el valor previamente calculado. A este tipo de fuente se le llama fuente dura[10]. Este nombre se debe a que si una onda pasa por dicho punto, verá el valor impuesto por la fuente y será reflejada. El otro tipo de fuente es conocida como fuente suave. En este caso no se especifica un valor sobre el punto, sino que se le suma al valor ya calculado[10].

Para las simulaciones de este trabajo, se usó una fuente suave colocada en el nodo con $k = 1$, donde se insertó un pulso que varía en el tiempo de la forma

$$P(t) = Ae^{-\frac{(t-4\alpha)^2}{2\alpha^2}} \sin(2\pi ft), \quad (3.35)$$

donde α determina el ancho del pulso, A la amplitud y f la frecuencia. En la Figura 3.2 se muestra la gráfica de un pulso de este tipo.

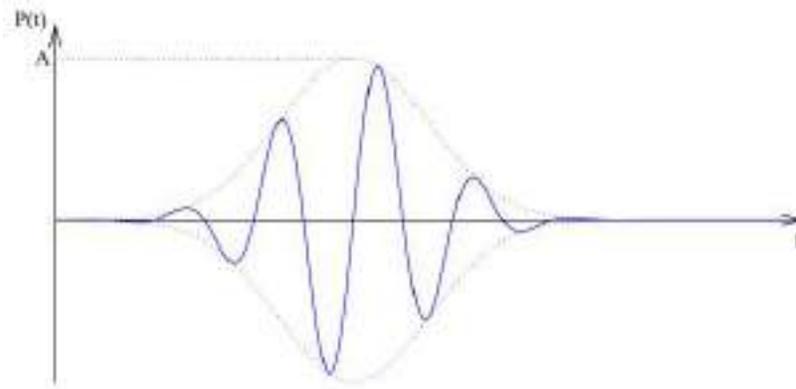


Figura 3.2: Pulso con envolvente gaussiana.

3.5. Parámetros de la simulación

El sistema estudiado consiste en una repetición periódica infinita de bicapas formadas por placas de dos materiales elásticos distintos. Para la simulación, fue necesario reducir el número de celdas unitarias a un número finito M . La celda de simulación fue construida con las M bicapas, colocadas entre un medio de incidencia y un medio de transmisión, ambos de longitud L_0 y del mismo material. Cada bicapa está formada por una capa de un material A , de ancho L_a , y un material B , de ancho L_b con $L_a < L_b$; así, el ancho total de la celda de simulación es

$$W = L_0 + M(L_a + L_b) + L_0. \quad (3.36)$$

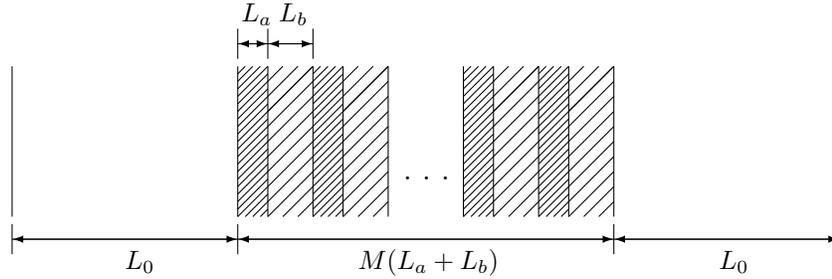


Figura 3.3: Estructura de la celda de simulación.

Para poder usar las condiciones de Mur en la forma (3.34), se escogió al material de incidencia y de transmisión como el de mayor velocidad longitudinal c_0 .

La longitud de las divisiones tomó como $L_a/10$, es decir, la longitud de cada paso espacial es

$$\Delta z = \frac{L_a}{10}. \quad (3.37)$$

La ecuación (3.37) permite calcular el número de nodos de cada capa de la celda, obteniéndose

$$K_a = 10, \quad (3.38a)$$

$$K_b = \left\lceil 10 \frac{L_b}{L_a} \right\rceil \quad (3.38b)$$

3.5. PARÁMETROS DE LA SIMULACIÓN

y

$$K_0 = \left[10 \frac{L_0}{L_a} \right], \quad (3.38c)$$

donde los corchetes indican que se toma el entero más cercano y los subíndices denotan al medio correspondiente. Entonces, el número total de divisiones de la celda de simulación (o número total de nodos de la malla) es

$$K = 2K_0 + M(10 + K_b). \quad (3.39)$$

Otro parámetro necesario es el número total de pasos temporales. Si se toma al tiempo total T como el que tarda la onda en recorrer toda la celda de simulación, éste resulta

$$T = 2 \frac{L_0}{c_0} + M \left(\frac{L_a}{c_a} + \frac{L_b}{c_b} \right). \quad (3.40)$$

Además, el tiempo total debe ser igual a N pasos temporales, es decir $T = N\Delta t$. Despejando el número de pasos temporales se llega a

$$N = \frac{T}{\Delta t}. \quad (3.41)$$

De la relación entre pasos temporales y pasos espaciales (3.18), se tiene

$$\Delta t = \frac{L_a}{20c_0}. \quad (3.42)$$

Sustituyendo (3.42) y (3.40) en la expresión (3.41), se tiene que el número de pasos temporales totales es

$$N = 2 \left[20 \frac{L_0}{L_a} \right] + M \left(\left[20 \frac{c_0}{c_a} \right] + \left[20 \frac{L_b c_0}{L_a c_b} \right] \right). \quad (3.43)$$

Eligiendo los parámetros elásticos (c_l y ρ) del material de los medios de incidencia y transmisión igual a los del medio A , la expresión para N se reduce a

$$N = 2N_0 + M(20 + N_b), \quad (3.44)$$

donde

$$N_0 = \left\lceil 20 \frac{L_0}{L_a} \right\rceil \quad (3.45a)$$

y

$$N_b = \left\lceil 20 \frac{L_b}{L_a} \frac{c_0}{c_b} \right\rceil. \quad (3.45b)$$

Finalmente, para analizar los datos calculados mediante la simulación con el FDTD, se guardaron los valores de $u^n(k_R)$, para $n_R \leq n \leq N$, en un archivo de datos. El punto con k_R es el donde el pulso de la fuente sale de la multicapa, es decir en

$$k_R = N_0 + M(10 + N_b) + 1 = K - K_0 + 1. \quad (3.46)$$

El valor n_R es el número de pasos temporales que tarda el pulso en llegar a dicho punto, esto es

$$n_R = N - N_0. \quad (3.47)$$

Los datos obtenidos fueron analizados para obtener el espectro de frecuencias de la onda transmitida a través de la multicapa.

Capítulo 4

Método experimental

El sistema estudiado experimentalmente en este trabajo consistió en una multicapa formada por placas de vidrio, alternadas con capas de glicerina. Antes de construirla, se caracterizaron la densidad y la velocidad de sonido longitudinal de cada material. Una vez obtenidas éstas, se procedió a su construcción usando ocho capas de vidrio, separadas por huecos con glicerina. Sobre este sistema se hizo incidir una onda mecánica longitudinal, en forma perpendicular a las placas mediante un transductor ultrasónico. Del otro lado de la multicapa, se colocó otro transductor del mismo tipo para medir la onda transmitida a través de la multicapa. Los datos obtenidos de aquí fueron analizados en una computadora para conocer el espectro de frecuencias de la transmisión y, así, obtener las bandas de frecuencia de la multicapa dentro del rango de frecuencias del experimento.

4.1. Caracterización de los materiales

Para las placas de vidrio se usaron portaobjetos de 1mm de grosor. Para determinar la densidad del vidrio, se midieron la masa y el volumen de diez portaobjetos diferentes. Éstos se pesaron usando una balanza analítica Ohaus PA313. Para conocer el volumen, se midieron las dimensiones de los portaobjetos, el grosor d , el ancho a y el largo b de cada uno, usando un calibrador digital Mitutoyo CD-6" CSX. Con estos datos, el

volumen medio de las placas se obtuvo mediante la fórmula $\bar{V} = \bar{d}\bar{a}\bar{b}$. Una vez conocida la masa promedio y el volumen promedio de los portaobjetos, se calculó la densidad como $\rho_v = \frac{\bar{m}}{\bar{d}\bar{a}\bar{b}}$ y se obtuvo $\rho_v = 2.49 \pm 0.03 \frac{g}{cm^3}$.

Tanto las mediciones de las propiedades de la glicerina como la de la transmisión en la multicapa se hicieron de forma paralela, para tener mayor uniformidad en la temperatura de las muestras. Esta temperatura se midió usando un multímetro Fluke 179 con un termopar tipo K y fue de $26.0^\circ C$.

La densidad de la glicerina se midió pesando una probeta de 25ml llena de glicerina hasta la marca de 25.0 ml y restando al resultado la masa de la probeta vacía. El valor encontrado para la masa de la glicerina se dividió entre el volumen contenido en la probeta. Se encontró que la densidad de la glicerina a $26.0^\circ C$ es $\rho_g = 1.24 \pm 0.06 \frac{g}{cm^3}$.

La otra propiedad medida en cada material fue la velocidad del sonido longitudinal. Para la medición de la velocidad del sonido en los materiales se usaron transductores ultrasónicos piezoeléctricos, los cuales se muestran en la Figura 4.1.



Figura 4.1: Transductores piezoeléctricos longitudinales empleados en las mediciones ultrasónicas, de izquierda a derecha: CHF104 (10MHz), TAB104 (10MHz) y V303 (1MHz).

Se colocaron diez portaobjetos diferentes entre los transductores y se midió el tiempo de vuelo de un pulso longitudinal, es decir, el tiempo que tarda en atravesar el material. Para la emisión se empleó un transductor NDT Systems CHF104 conectado a un generador de funciones Tektronix AFG 3021B, con el cual se emitió un pulso de 10 MHz con una amplitud pico a pico de 10 V.

Del otro lado de las muestras se usó un transductor NDT Systems TAB104 para recibir el pulso transmitido dentro del vidrio. Para la captura de los datos se usó un

4.1. CARACTERIZACIÓN DE LOS MATERIALES

osciloscopio Tektronix TDS 2012, conectado a una computadora mediante un adaptador de GBIP a USB. El canal 2 de dicho osciloscopio se conectó a la salida del generador de funciones y el canal 1, el transductor receptor. En la figura 4.2 se ilustra el esquema de este arreglo.

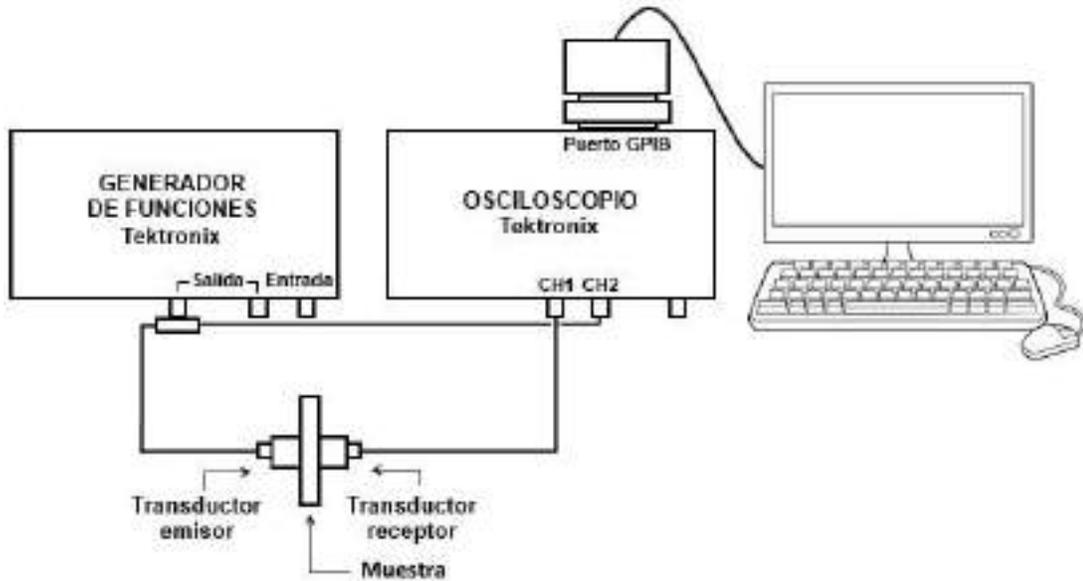


Figura 4.2: Arreglo empleado para las mediciones de velocidad del sonido.

Primeramente se midió el tiempo de vuelo de un pulso en una placa de vidrio. Sobre ésta se apiló otro portaobjetos y se midió el tiempo total que tardó el pulso en atravesar las dos placas.

El tiempo de vuelo dentro de una placa se calculó como la diferencia entre tiempo total y el tiempo de referencia medido inicialmente para un solo vidrio, esto es

$$t_V = t_T - t_0,$$

donde t_T es el tiempo total, t_0 el tiempo de referencia y t_V el tiempo de vuelo dentro de un vidrio, como se muestra en la Figura 4.3. Fue necesario realizar este procedimiento para tomar en cuenta el retraso intrínseco producido dentro de los transductores, así como para facilitar las mediciones.

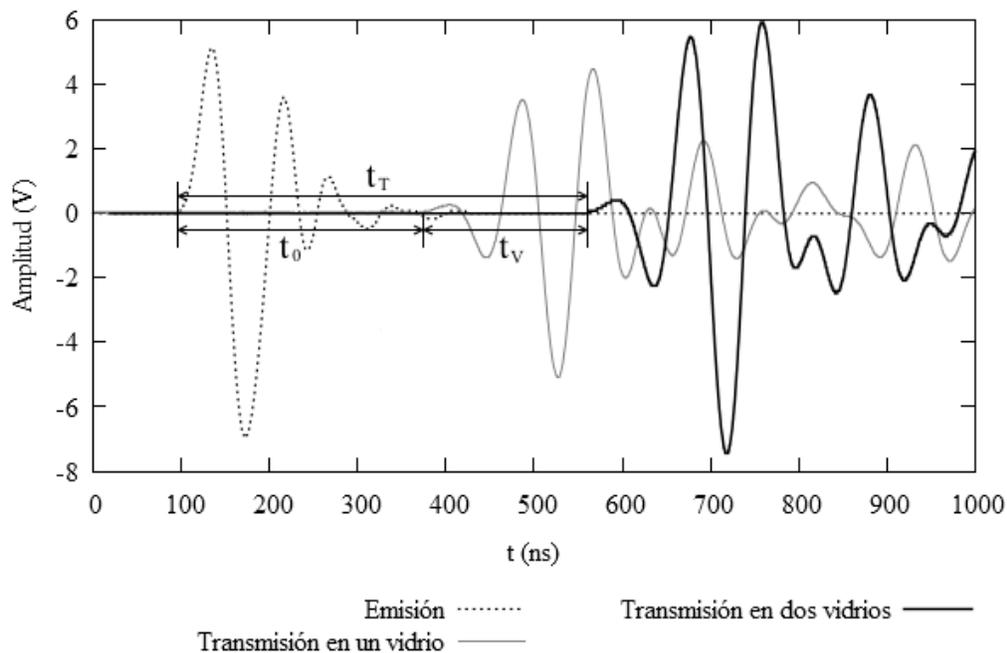


Figura 4.3: Medición del tiempo de vuelo en los vidrios.

Para determinar la velocidad se dividió el grosor promedio de los vidrios, medido anteriormente, $d = 0.108 \pm 0.001 \text{ cm}$, entre el tiempo de vuelo promediado de las diez mediciones. Con este método se encontró que $c_v = (5.62 \pm 0.07) \times 10^5 \frac{\text{cm}}{\text{s}}$ es la velocidad del sonido longitudinal en el vidrio.

La medición de la velocidad del sonido en la glicerina se hizo de forma similar a la del vidrio, pero, como la glicerina es un fluido, fue necesario contenerla dentro del recipiente mostrado en la Figura 4.4.

Éste se construyó usando dos vidrios comerciales planos de 5mm, de 10cm por 8cm. Antes de construirlo, se midió el tiempo de vuelo en las dos placas juntas usando el procedimiento antes descrito, empleando dos transductores longitudinales Olympus V303 con un pulso de 1.0 MHz como el mostrado en la Figura 4.5. Después, entre estas placas se colocaron tiras de este mismo material para cubrir la orilla en tres de sus lados, dejando uno descubierto.

4.1. CARACTERIZACIÓN DE LOS MATERIALES



Figura 4.4: Probeta usada para medir la velocidad del sonido en la glicerina.

Una vez construido el recipiente, se vertió glicerina dentro de él y se midió el tiempo de vuelo dentro de las tres capas usando los mismos transductores. El tiempo que tardó el pulso en atravesar la glicerina se calculó como la diferencia entre el tiempo total y el tiempo de vuelo en los vidrios.

Conociendo el tiempo de vuelo dentro de la glicerina, la velocidad del sonido se calculó como el ancho de la capa de glicerina entre dicho intervalo de tiempo. El ancho se tomó como la longitud de la separación entre las placas de vidrio, la cual fue $D = 0.583 \pm 0.005 \text{ cm}$. La velocidad del sonido medida en la glicerina, a 26.0°C , fue $c_g = (1.93 \pm 0.02) \times 10^5 \frac{\text{cm}}{\text{s}}$.

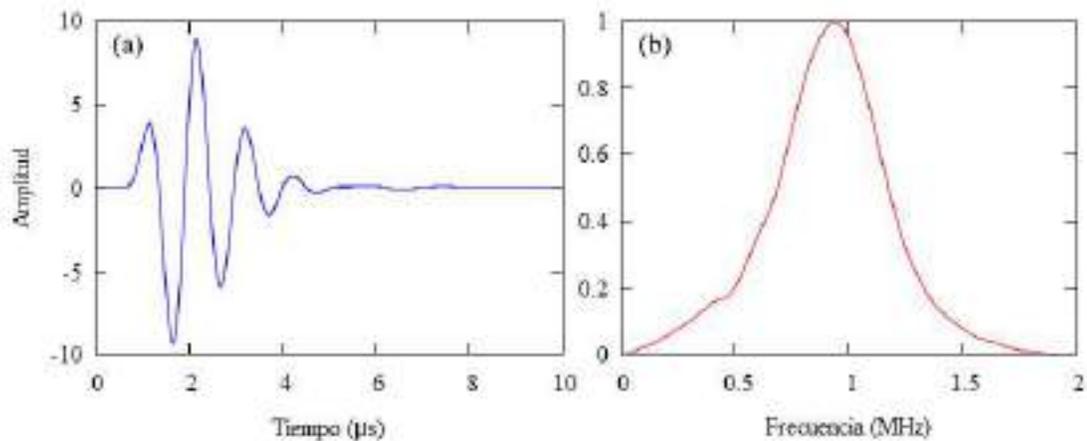


Figura 4.5: Pulso de 1MHz emitido por el transductor V303: (a) en el dominio del tiempo; (b) en el espacio de frecuencia.

4.2. Elaboración de la multicapa

Se usaron ocho portaobjetos de vidrio para formar las capas. Para separar cada placa, se cortaron 28 separadores de vidrio de 2.5cm de largo por ~ 1.0 cm de ancho y 0.1cm de grosor, usando los mismos portaobjetos. Entre las placas se pegaron dos separadores apilados en cada extremo, quedando una separación $D = 0.221 \pm 0.002$ cm entre cada placa. En forma perpendicular a las capas se pegó un portabojetos con resina epóxica para cubrir los huecos. Finalmente, se taparon los lados con resina epóxica para evitar fugas.

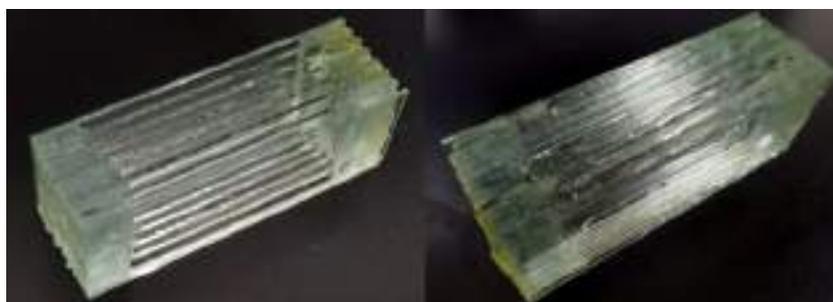


Figura 4.6: Izquierda: Multicapa vacía. Derecha: Multicapa con glicerina.

Una vez construida la multicapa, se vertió cuidadosamente la glicerina entre los huecos hasta llenarlos. En la figura 4.6 se muestra la multicapa usada en el experimento.

4.3. Medición de la transmisión en la multicapa

Para medir la transmisión de ondas longitudinales dentro de la multicapa, se empleó el mismo método usado para medir la velocidad del sonido. Para este caso, en lugar del generador de funciones, se empleó un pulsador de onda cuadrada Olympus modelo 5077PR.

Al pulsador se conectó un transductor ultrasónico longitudinal Olympus modelo V303 de 1MHz para generar el pulso. Este transductor se colocó de un lado de la multicapa, en forma perpendicular a las placas de vidrio. Del otro lado se usó un transductor del mismo tipo para captar la transmisión. Este transductor se conectó al

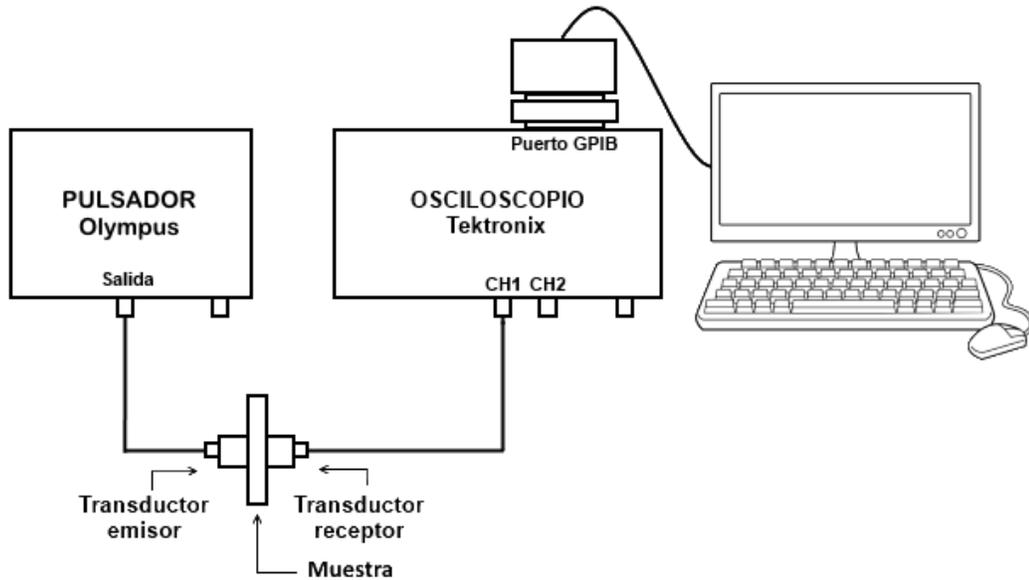


Figura 4.7: Arreglo empleado para la medición de la transmisión.

oscilador y éste envió los datos a la computadora para su análisis posterior. Este arreglo se ilustra en la Figura 4.7.

La razón para usar un dispositivo diferente para generar el pulso fue debido a la necesidad de tener una perturbación incidente de mayor intensidad, pues el generador de funciones sólo puede producir señales con amplitud de voltaje pico a pico de 10V, mientras que con el pulsador es posible tener hasta 400V. Esto es necesario para poder detectar más fácilmente la onda transmitida, ya que la intensidad de la señal recibida por el transductor receptor es mucho menor a la de la emisión, tanto por la atenuación debida a las propiedades de los materiales, como por las numerosas reflexiones internas que se producen entre las capas.

En el pulsador se ajustó el voltaje de salida a 300V, con una frecuencia de repetición de pulsos de 200Hz y la frecuencia del transductor a 1.0MHz. La señal recibida por el osciloscopio fue enviada a la computadora, donde se capturó usando LabView. Los datos obtenidos se analizaron con OriginPro 8 mediante la transformada discreta de Fourier, usando el algoritmo de la transformada rápida de Fourier(FFT). Esta transformada convierte la señal del dominio del tiempo al dominio de la frecuencia,

permitiendo conocer las frecuencias que componen a dicha señal. Con esto se pudo determinar la estructura de bandas de transmisión y bandas prohibidas de la multicapa, para frecuencias desde 0 hasta 1.8MHz.

Capítulo 5

Resultados

Se estudió el sistema tanto de forma teórica como experimental y se compararon los resultados obtenidos. Se calculó la estructura de bandas usando la relación de dispersión para un cristal fonónico de periodicidad unidimensional. Con el programa de FDTD se simuló la transmisión de un pulso con envolvente gaussiana, y se analizó la transmisión de dicho pulso a través de una multicapa de diez celdas mediante la transformada rápida de Fourier. A su vez, se calculó el espectro de frecuencias de los datos obtenidos en el experimento, para la transmisión de un pulso ultrasónico en la multicapa de vidrio y glicerina.

5.1. Espectro de frecuencias experimental

Se analizó la señal recibida por el transductor receptor, resultante de la transmisión de un pulso ultrasónico longitudinal de 1MHz dentro de la multicapa construida experimentalmente, como se describió en el capítulo 4. Esta señal fue convertida del dominio del tiempo al de la frecuencia, haciendo uso de la transformada rápida de Fourier con el software OriginPro 8. Con esto se determinó el espectro de frecuencias de la onda transmitida a través del medio periódico. En éste se observa cómo existen zonas de frecuencias donde la transmisión disminuye prácticamente a cero. Este espectro se muestra en la Figura 5.1, junto con la transformada de Fourier del pulso incidente.

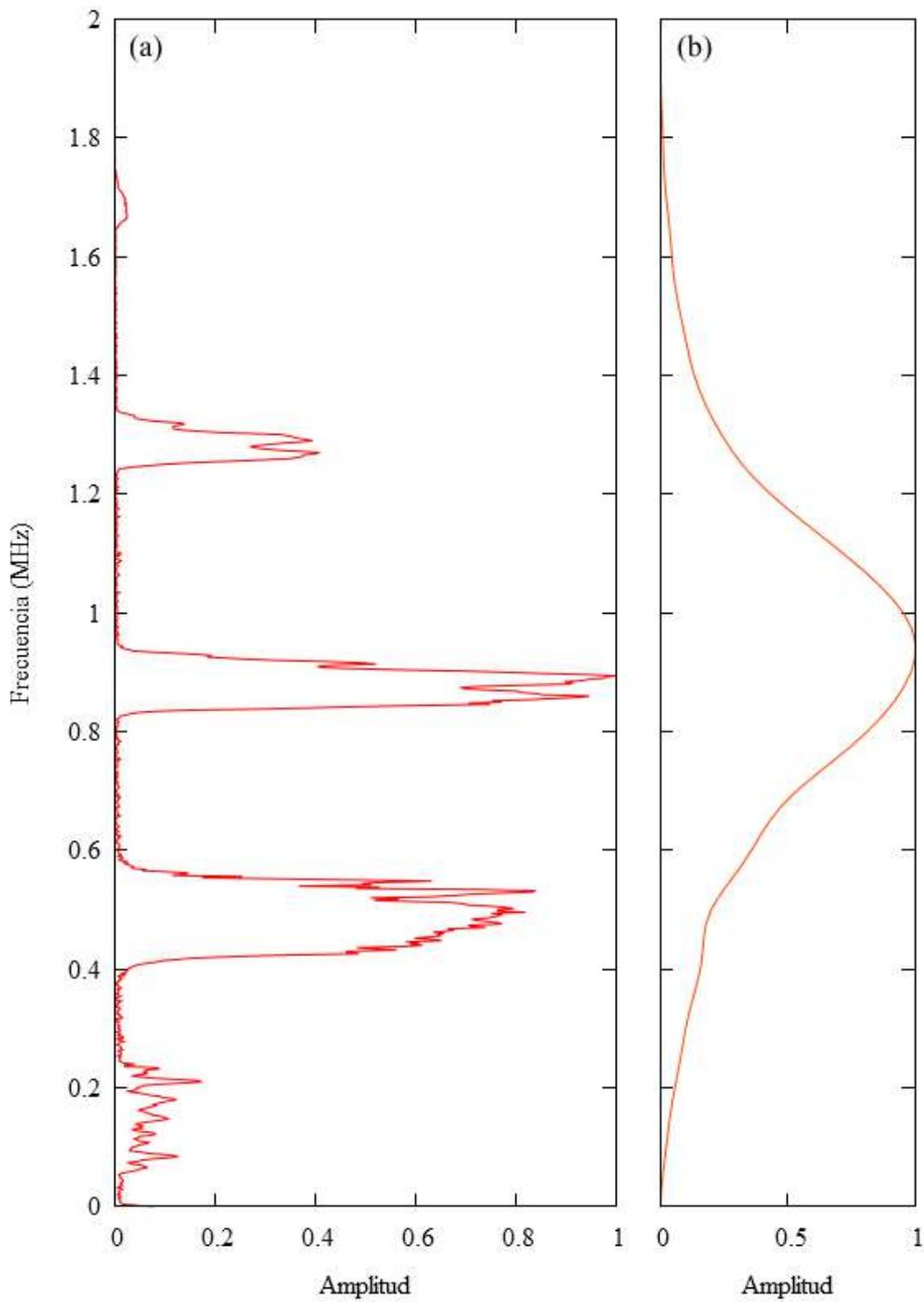


Figura 5.1: Espectro de frecuencias experimental de: (a) la transmisión; (b) el pulso emitido por el transductor.

5.2. Estructura de bandas fonónicas

A partir de la ecuación (2.48) se calculó la relación de dispersión de la frecuencia f y la magnitud del vector de onda k . Para encontrar dicha relación, se buscaron las raíces de la ecuación (2.48) numéricamente, para el número de onda k en la primera zona de Brillouin, para valores entre 0 y $\frac{\pi}{d}$. Se dividió este intervalo en 1000 subintervalos y para cada valor de k se buscaron las raíces en el intervalo de frecuencias entre 0 y 2MHz. Se usaron los valores de los parámetros reportados en el capítulo 4, tomando al medio 1 como el vidrio y al medio 2 como la glicerina, modelándola como un fluido ideal. Estos parámetros son

$$\begin{aligned}a &= 0.108cm, \\b &= 0.221cm, \\ \rho_1 &= 2.49\frac{g}{cm^3}, \\ \rho_2 &= 1.24\frac{g}{cm^3}, \\ c_1 &= 5.62 \times 10^5\frac{cm}{s}, \\ c_2 &= 1.93 \times 10^5\frac{cm}{s}.\end{aligned}$$

La impedancia acústica longitudinal para cada medio se calculó usando estos valores, obteniendo

$$\begin{aligned}z_1 &= \rho_1 c_1 = 13.99 \times 10^5\frac{g}{cm^2 \cdot s}, \\ z_2 &= \rho_2 c_2 = 2.39 \times 10^5\frac{g}{cm^2 \cdot s}.\end{aligned}$$

En la Figura 5.2 se muestra la relación de dispersión obtenida usando estos parámetros.

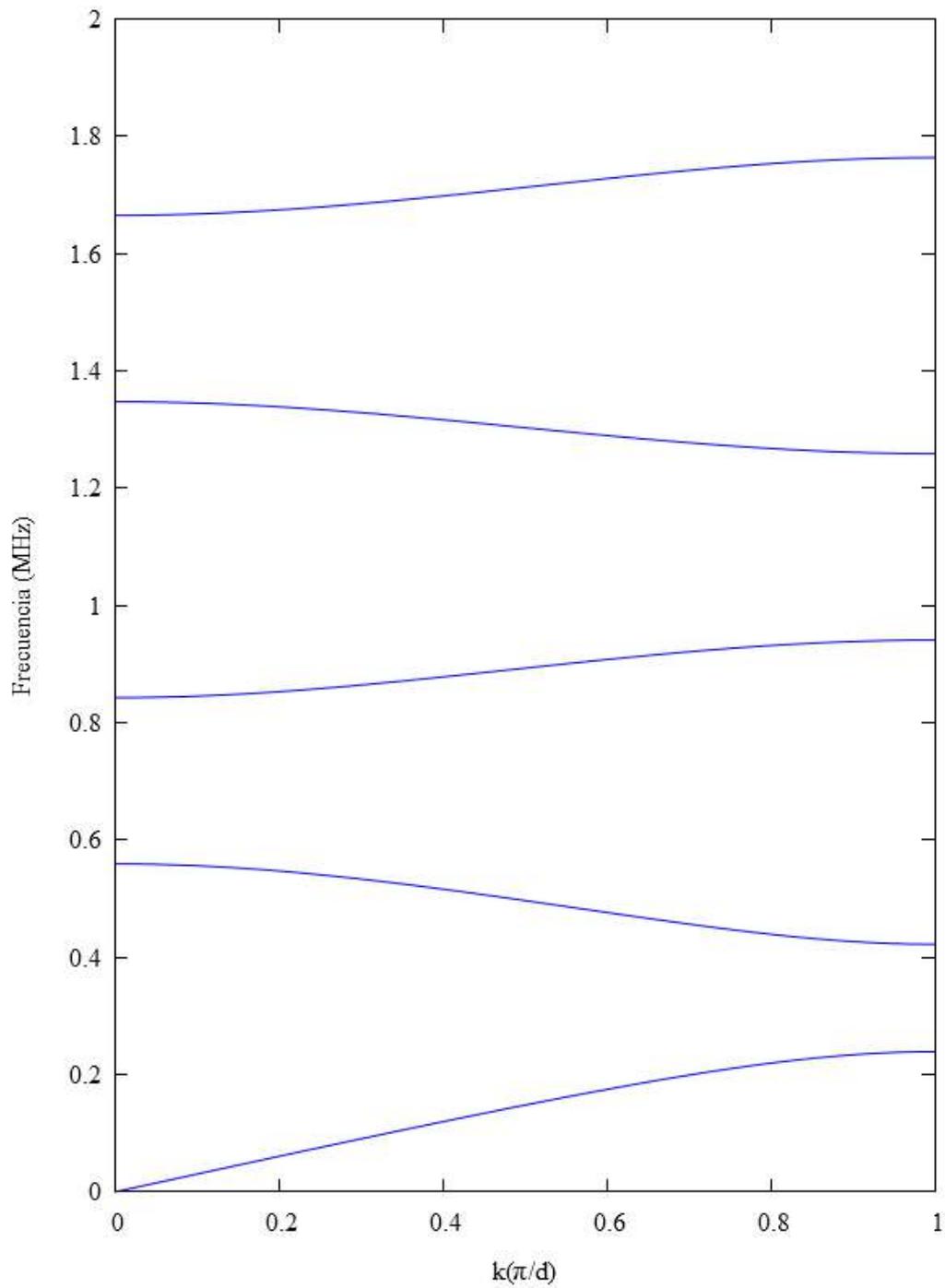


Figura 5.2: Relación de dispersión del número de onda k y la frecuencia f para el cristal fonónico de periodicidad unidimensional estudiado.

5.3. Simulación con FDTD

Se simuló la propagación de un pulso en una multicapa periódica unidimensional de $M = 7$ bicapas, empleando el algoritmo del FDTD elástico descrito en el Capítulo 3. Se usaron los mismos parámetros correspondientes al vidrio y a la glicerina usados en la sección 2 de este capítulo. Se tomaron como medios de incidencia y de transmisión al vidrio, ambos de $L_0 = 50.0cm$ de ancho.

El pulso usado fue de la forma (3.35) con $f = 0.93MHz$, $\alpha = 0.5 \times 10^{-6}s$ y $A = 1.0$, con los que se obtuvo el pulso mostrado en la Figura 5.3. Los parámetros fueron escogidos del tal forma que el pulso simulado fuera semejante al pulso usado en el experimento (Figura 4.5).

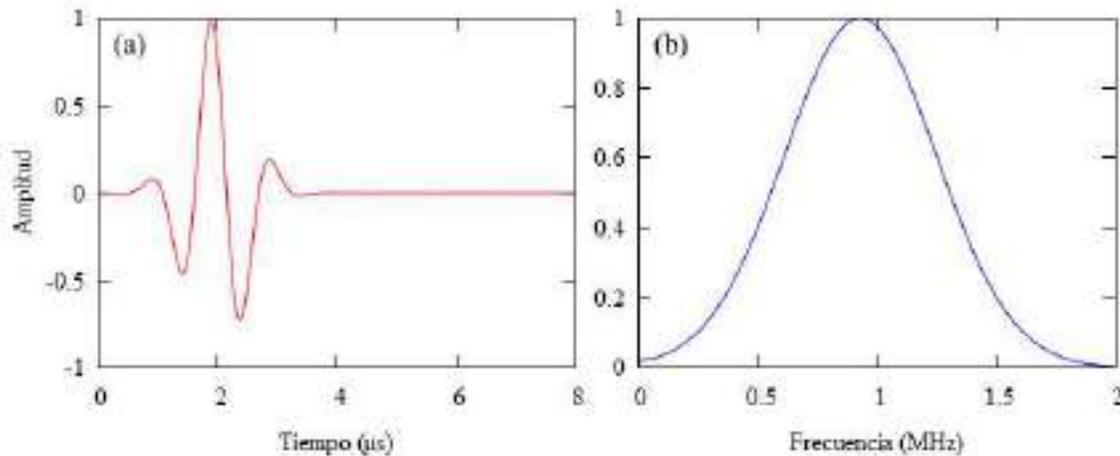


Figura 5.3: Pulso usado en la simulación con FDTD: (a) en el dominio del tiempo; (b) en el espacio de frecuencia.

Se analizaron los datos obtenidos para la transmisión de dicho pulso a través de la multicapa, aplicando la transformada rápida de Fourier. Este resultado se muestra en la Figura 5.4, junto a la transformada del pulso incidente.

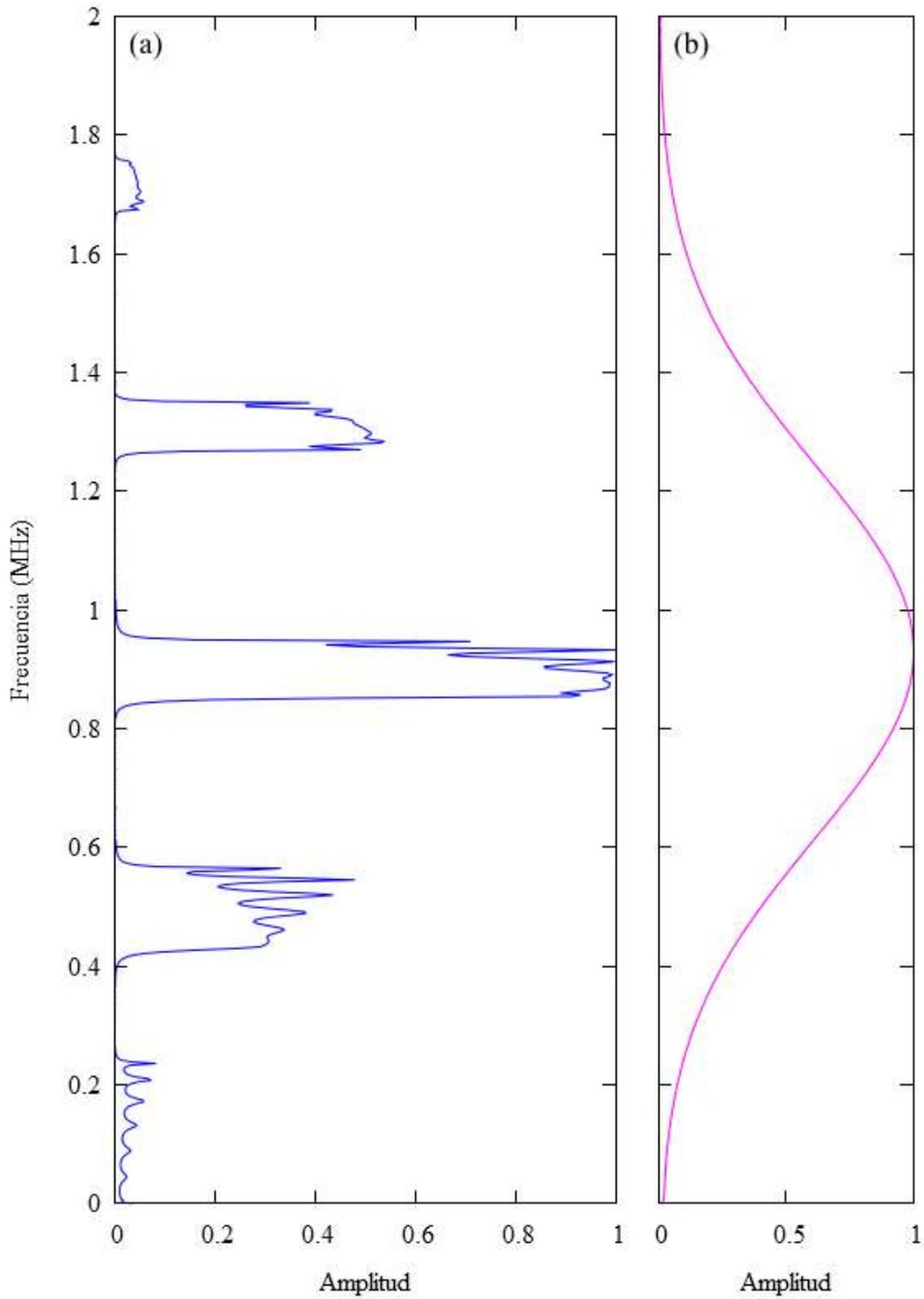


Figura 5.4: Espectro de frecuencias de: (a) la transmisión simulada de un pulso con envolvente gaussiana en una multicapa de vidrio y glicerina; (b) el pulso incidente.

5.4. Comparación de los resultados

Se observa una notable correspondencia entre los resultados arrojados por cada método, como se ve en la Figura 5.5. De la relación de dispersión, se encontró que hay bandas prohibidas para la propagación de ondas longitudinales, en el rango de 0 a $1.8MHz$, entre las frecuencias de 0.24 a $0.42MHz$, de 0.56 a $0.84MHz$, de 0.94 a $1.26MHz$ y de 1.35 a $1.66MHz$. En las zonas de frecuencias donde se predice teóricamente la existencia de estas bandas prohibidas, la transmisión disminuye significativamente, tanto en la simulación con FDTD, como en el experimento. Sin embargo, el espectro de frecuencias de la transmisión medida experimentalmente muestra que existen ligeras diferencias entre el ancho de las zonas donde la transmisión fue mínima y las bandas prohibidas que se obtienen con la relación de dispersión; esto puede deberse a la incertidumbre existente en las medidas de las capas y de los parámetros de los materiales, de modo que los valores usados en la teoría no coinciden perfectamente con los valores reales.

Comparando la Figura 5.1 y la Figura 5.4 se observa que la envolvente del pulso transmitido con la simulación es de la misma forma que el espectro del pulso incidente, mientras que para el experimento la envolvente de la transmisión tiene mayor amplitud para frecuencias bajas que para las altas y la forma de dicha envolvente no es como la del pulso emitido por el transductor. Esto se debe a la atenuación producida por la viscosidad de la glicerina, que es mayor para frecuencias más altas. Como en la simulación no se consideraron estos efectos, no se observa dicho cambio.

Los resultados fueron comparados con la transmisión de trenes de ondas planas para el sistema estudiado, calculada con el método de matriz global[12], el cual no es desarrollado en esta tesis y sólo se incluye con fines comparativos. La transmisión obtenida mediante este método es consistente con los demás resultados, siendo nula para las frecuencias que están dentro de las bandas prohibidas. Si se comparan los espectros de frecuencias de la transmisión del experimento y de la simulación con la transmisión para trenes de ondas, se observa como los puntos donde ésta es máxima corresponden a máximos locales en los espectros de frecuencias.

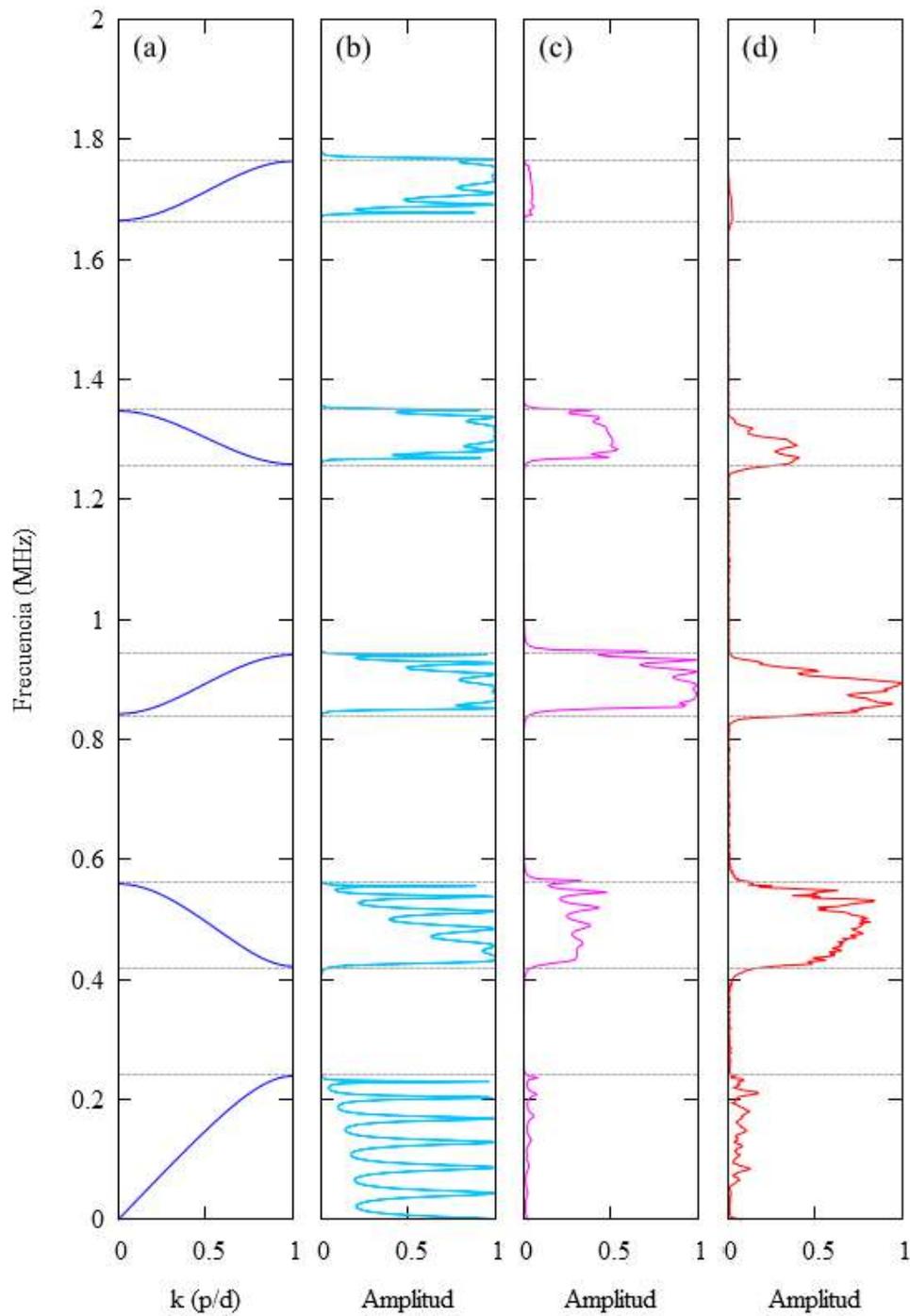


Figura 5.5: (a) Relación de dispersión;(b) transmisión con el método de matriz global; (c) espectro de frecuencias de la simulación;(d) espectro de frecuencias experimental.

Conclusiones

Se estudió un cristal fonónico de periodicidad unidimensional, formado por un arreglo periódico de capas de vidrio de grosor a alternadas con capas de glicerina de grosor b , por cuatro métodos diferentes. Por un lado se obtuvo teóricamente una expresión analítica para calcular la relación de dispersión del número de onda k y las frecuencias de las ondas longitudinales f en el cristal fonónico. También se desarrolló una variante del método de diferencias finitas en el dominio del tiempo para simular la propagación de ondas elásticas longitudinales en una dimensión. Por otro lado, se construyó una multicapa con vidrio y glicerina, sobre la cual se hizo incidir un pulso longitudinal y se analizó la onda transmitida dentro de la estructura.

Al comparar los resultados obtenidos con cada método, se observó que existe correspondencia entre las bandas de transmisión y bandas prohibidas que predice la relación de dispersión, encontrada teóricamente, con las bandas de frecuencia medidas en el experimento y las simuladas. Estos resultados se muestran lado a lado en la Figura 5.5. En las zonas donde no hay solución para la relación de dispersión se observa que la transmisión de ondas longitudinales es prácticamente cero, mientras que en donde existen soluciones sí hay propagación para estas ondas.

También se observó que la viscosidad no tuvo efecto en la estructura de bandas del cristal fonónico; sin embargo, sí provocó atenuación en la amplitud de la transmisión, siendo más notable para altas frecuencias.

La correspondencia entre los resultados obtenidos sugiere que el carácter periódico de un cristal fonónico efectivamente genera una estructura de bandas de transmisión y bandas prohibidas para las ondas elásticas, de forma análoga a las bandas que presentan los cristales naturales para la energía y los cristales fotónicos para la luz. Esto

hace posible la elaboración de estructuras periódicas elásticas con una estructura de bandas tal que permita aislar un sistema mecánico de perturbaciones de las frecuencias contenidas en las bandas prohibidas, entre otras aplicaciones.

Apéndice A

Tensores isotrópicos

Un tensor isotrópico es aquel cuyas componentes tienen los mismos valores en cualquier sistema coordenada cartesiano[6]. Aquí se describe y se desarrolla un método para obtener la forma general de tensores cartesianos isotrópicos, particularizando para tensores de rango 4.

En general, se define a un tensor contravariante $A^{i_1 i_2 \dots i_n}$ de rango n como un arreglo n -dimensional cuyas componentes se transforman de un sistema coordenado a otro de la forma

$$A^{i_1 i_2 \dots i_n} = \frac{\partial x'_{i_1}}{\partial x_{j_1}} \frac{\partial x'_{i_2}}{\partial x_{j_2}} \dots \frac{\partial x'_{i_n}}{\partial x_{j_n}} A^{j_1 j_2 \dots j_n}, \quad (\text{A.1})$$

donde las coordenadas no primadas son las de la base original y las primadas las de la nueva base.

Un tensor covariante $A_{i_1 i_2 \dots i_n}$ es aquel que se transforma como

$$A'_{i_1 i_2 \dots i_n} = \frac{\partial x_{j_1}}{\partial x'_{i_1}} \frac{\partial x_{j_2}}{\partial x'_{i_2}} \dots \frac{\partial x_{j_n}}{\partial x'_{i_n}} A_{j_1 j_2 \dots j_n}. \quad (\text{A.2})$$

Se denomina tensores cartesianos a los que están representados en sistemas coordenados cartesianos. En estos sistemas, se cumple la relación[13]

$$\frac{\partial x'_i}{\partial x_j} = \frac{\partial x_j}{\partial x'_i}. \quad (\text{A.3})$$

En este caso, no hay distinción entre tensores covariantes y tensores contravariantes. Como sólo trabajaremos con tensores cartesianos, en adelante al referirnos a un tensor estará implícito que es cartesiano y se denotará con subíndices.

Para conocer cómo se transforma un tensor bajo rotaciones de los ejes coordenados, se partirá de ver cómo es dicha transformación para un vector x_i , o tensor de rango 1. Consideremos una rotación de los ejes 1 y 2 alrededor del eje 3, en un ángulo θ_3 en el sentido contrario a las manecillas del reloj. Las componentes del vector x_i en el sistema rotado son

$$x'_1 = x_1 \cos\theta_3 + x_2 \sin\theta_3, \quad (\text{A.4a})$$

$$x'_2 = -x_1 \sin\theta_3 + x_2 \cos\theta_3, \quad (\text{A.4b})$$

$$x'_3 = x_3. \quad (\text{A.4c})$$

Esta transformación puede ser expresada en forma compacta como

$$x'_i = Q_{ij} x_j, \quad (\text{A.5})$$

donde Q_{ij} son los elementos de la matriz de rotación

$$Q = \begin{pmatrix} \cos\theta_3 & \sin\theta_3 & 0 \\ -\sin\theta_3 & \cos\theta_3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.6})$$

Para rotaciones en ángulos muy pequeños (o infinitesimales),

$$\cos\theta \approx 1,$$

$$\sin\theta \approx \theta.$$

Así, denotando $\theta_3 \rightarrow d\theta_3$, la matriz de transformación para rotaciones infinitesimales alrededor del eje x_3 queda

$$Q = \begin{pmatrix} 1 & d\theta_3 & 0 \\ -d\theta_3 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.7})$$

Para rotaciones sobre los ejes x_1 y x_2 , las matrices de rotación correspondientes son,

$$\mathbb{P} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & d\theta_1 \\ 0 & -d\theta_1 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.8})$$

y

$$\mathbb{T} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -d\theta_2 \\ 0 & 1 & 0 \\ d\theta_2 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.9})$$

Una rotación en el espacio puede expresarse como tres rotaciones sucesivas alrededor de cada eje coordenado. En este caso, la ecuación de transformación de un vector x_i viene dada por

$$x'_i = R_{ij}x_j, \quad (\text{A.10})$$

donde

$$R_{ij} \equiv Q_{il}T_{lk}P_{kj} \quad (\text{A.11})$$

son las componentes de la matriz $\mathbb{R} \equiv \mathbb{Q}\mathbb{T}\mathbb{P}$.

Multiplicando las matrices \mathbb{Q}, \mathbb{T} y \mathbb{P} se obtiene, hasta primer orden en $d\theta_k$,

$$\mathbb{R} = \begin{pmatrix} 1 & d\theta_3 & -d\theta_2 \\ -d\theta_3 & 1 & d\theta_1 \\ d\theta_2 & -d\theta_1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.12})$$

De aquí, las componentes de una matriz de transformación \mathbb{R} , para rotaciones infinitesimales, pueden expresarse como

$$R_{ij} = \delta_{ij} + \epsilon_{ijk}d\theta_k, \quad (\text{A.13})$$

donde δ_{ij} es la delta de Kronecker y ϵ_{ijk} es el símbolo de Levi-Civita.

Antes de deducir la expresión general para un tensor isotrópico de rango 4, se desarrollará la forma general de uno de rango 2, la cual será de utilidad posteriormente.

Como las componentes de un tensor isotrópico son las mismas en todos los sistemas coordenados cartesianos, entonces, para un tensor isotrópico A_{ij} de rango 2, se debe cumplir

$$A_{ij} = R_{il}R_{jm}A_{lm}, \quad (\text{A.14})$$

con R_{ij} dado por (A.13). Desarrollando el producto $R_{il}R_{jm}$ hasta primer orden en $d\theta$,

$$\begin{aligned} R_{il}R_{jm} &= (\delta_{il} + \epsilon_{ils}d\theta_s)(\delta_{jm} + \epsilon_{jmt}d\theta_t) \\ &= \delta_{il}\delta_{jm} + (\delta_{il}\epsilon_{jms} + \delta_{jm}\epsilon_{ils})d\theta_s. \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Sustituyendo (A.15) en (A.14) queda

$$A_{ij} = A_{ij} + (\epsilon_{jms}A_{im} + \epsilon_{ils}A_{lj})d\theta_s. \quad (\text{A.16})$$

De aquí,

$$(\epsilon_{jms}A_{im} + \epsilon_{ils}A_{lj})d\theta_s = 0, \quad (\text{A.17})$$

como el ángulo $d\theta_s$ es no nulo, necesariamente el término en paréntesis debe anularse, entonces

$$\epsilon_{jms}A_{im} + \epsilon_{ils}A_{lj} = 0. \quad (\text{A.18})$$

Haciendo el cambio $l \rightarrow m$ en el segundo término del lado izquierdo y aprovechando la propiedad del símbolo de Levi-Civita $\epsilon_{ijk} = \epsilon_{kij}$, obtenemos la ecuación

$$\epsilon_{sjm}A_{im} + \epsilon_{sim}A_{mj} = 0. \quad (\text{A.19})$$

Haciendo uso de la identidad

$$\epsilon_{ijk}\epsilon_{ilm} = \delta_{jl}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{kl}, \quad (\text{A.20})$$

entonces

$$\begin{aligned}\epsilon_{sin}\epsilon_{sim} &= \delta_{ii}\delta_{nm} - \delta_{im}\delta_{ni} \\ \epsilon_{sin}\epsilon_{sjm} &= \delta_{ij}\delta_{nm} - \delta_{im}\delta_{nj}.\end{aligned}\tag{A.21}$$

Como $\delta_{ii} = 3$, $\delta_{ij} = \delta_{ji}$ y $\delta_{il}\delta_{lj} = \delta_{ij}$,

$$\epsilon_{sin}\epsilon_{sim} = 2\delta_{nm}.\tag{A.22}$$

Multiplicando (A.19) por ϵ_{sin} y sustituyendo (A.21) y (A.22) en la expresión obtenida

$$\begin{aligned}2\delta_{nm}A_{mj} + (\delta_{ij}\delta_{nm} - \delta_{im}\delta_{nj})A_{im} &= 0, \\ 2A_{nj} + A_{jn} - A_{ii}\delta_{nj} &= 0\end{aligned}$$

de aquí

$$A_{nj} = \frac{A_{ii}}{3}\delta_{nj}.$$

El término A_{ii} es la suma de los elementos de la diagonal de A_{ij} , la cual es una constante,

$$\Rightarrow A_{ij} = \lambda\delta_{ij},\tag{A.23}$$

donde λ es una constante arbitraria. Ésta es la forma general de un tensor isotrópico de rango 2.

Para llegar a la expresión general de un tensor isotrópico de rango 4, se procede de forma similar. Sea C_{ijkl} un tensor isotrópico de rango 4, entonces, éste satisface la ecuación

$$C_{ijkl} = R_{im}R_{jn}R_{kp}R_{lq}C_{mnpq}.\tag{A.24}$$

Partiendo de (A.15) y desarrollando hasta primer orden en $d\theta_s$

$$\begin{aligned}R_{im}R_{jn}R_{kp} &= [\delta_{im}\delta_{jn} + (\delta_{im}\epsilon_{jns} + \delta_{jn}\epsilon_{ims})d\theta_s](\delta_{kp} + \epsilon_{kpt}d\theta_t) \\ &= \delta_{im}\delta_{jn}\delta_{kp} + (\delta_{im}\delta_{jn}\epsilon_{kps} + \delta_{jn}\delta_{kp}\epsilon_{ims} + \delta_{im}\delta_{kp}\epsilon_{jns})d\theta_s,\end{aligned}\tag{A.25}$$

y

$$R_{im}R_{jn}R_{kp}R_{lq} = \delta_{im}\delta_{jn}\delta_{kp}\delta_{lp} + (\delta_{im}\delta_{jn}\delta_{kp}\epsilon_{lqs} + \delta_{jn}\delta_{kp}\delta_{lq}\epsilon_{ims} + \delta_{im}\delta_{kp}\delta_{lq}\epsilon_{jns} + \delta_{im}\delta_{jn}\delta_{lq}\epsilon_{kps})d\theta_s. \quad (\text{A.26})$$

Sustituyendo (A.26) en (A.24) llegamos a la ecuación

$$(\epsilon_{sim}C_{mjkl} + \epsilon_{sjn}C_{inlk} + \epsilon_{skp}C_{ijpl} + \epsilon_{slq}C_{ijkq})d\theta_s = 0. \quad (\text{A.27})$$

Como $d\theta_s$ es distinto de cero, el término entre paréntesis debe anularse. Expresando los índices repetidos como m , se llega a la ecuación

$$\epsilon_{sim}C_{mjkl} + \epsilon_{sjm}C_{imkl} + \epsilon_{skm}C_{ijml} + \epsilon_{slm}C_{ijkm} = 0. \quad (\text{A.28})$$

Multiplicando esta ecuación por ϵ_{sin} y haciendo uso de la identidad (A.20)

$$2\delta_{mn}C_{mjkl} + (\delta_{ij}\delta_{mn} - \delta_{im}\delta_{jn})C_{imkl} + (\delta_{ik}\delta_{mn} - \delta_{im}\delta_{kn})C_{ijml} + (\delta_{il}\delta_{mn} - \delta_{im}\delta_{ln})C_{ijkm} = 0,$$

$$2C_{njkl} + C_{jnkl} - C_{mmkl}\delta_{jn} + C_{kjnl} - C_{mjml}\delta_{kn} + C_{ljkn} - C_{mjkm}\delta_{ln} = 0.$$

Haciendo el cambio $n \rightarrow i$ y acomodando los términos, queda

$$2C_{ijkl} + C_{jikl} + C_{kji}l + C_{ljki} = C_{mmkl}\delta_{ij} + C_{mjml}\delta_{ik} + C_{mjkm}\delta_{il}. \quad (\text{A.29})$$

De forma análoga, multiplicando la ecuación (A.28) por ϵ_{sjn} , ϵ_{skn} y ϵ_{sln} se obtienen, respectivamente, la ecuaciones

$$2C_{ijkl} + C_{jikl} + C_{ikjl} + C_{ilkj} = C_{mmkl}\delta_{ij} + C_{imkm}\delta_{jl} + C_{imml}\delta_{jk}, \quad (\text{A.30})$$

$$2C_{ijkl} + C_{kjil} + C_{ikjl} + C_{ijlk} = C_{ijmm}\delta_{kl} + C_{mjml}\delta_{ik} + C_{imml}\delta_{jk}, \quad (\text{A.31})$$

$$2C_{ijkl} + C_{ljki} + C_{ilkj} + C_{ijlk} = C_{ijmm}\delta_{kl} + C_{imkm}\delta_{jl} + C_{mjkm}\delta_{il}. \quad (\text{A.32})$$

Como C_{ijkl} es un tensor isotrópico de rango 4, la contracción[7] C_{ijmm} a su vez debe ser un tensor isotrópico, de rango 2. Aprovechando (A.23), podemos expresar los términos de este tipo de la forma

$$C_{ijmm} = \lambda \delta_{ij}, \quad (\text{A.33})$$

$$C_{mjkm} = \mu \delta_{jk}, \quad (\text{A.34})$$

$$C_{mmkl} = \nu \delta_{kl}, \quad (\text{A.35})$$

$$C_{imml} = \sigma \delta_{il}, \quad (\text{A.36})$$

$$C_{imkm} = \tau \delta_{ik}, \quad (\text{A.37})$$

$$C_{mjml} = \eta \delta_{jl}, \quad (\text{A.38})$$

donde λ, μ, ν y σ son constantes. Sustituyendo estos resultados en las ecuaciones (A.29) a (A.32), tenemos

$$2C_{ijkl} + C_{jikl} + C_{kjil} + C_{ljki} = \nu \delta_{kl} \delta_{ij} + \eta \delta_{jl} \delta_{ik} + \mu \delta_{jk} \delta_{il}, \quad (\text{A.39})$$

$$2C_{ijkl} + C_{jikl} + C_{ikjl} + C_{ilkj} = \nu \delta_{kl} \delta_{ij} + \tau \delta_{ik} \delta_{jl} + \sigma \delta_{il} \delta_{jk}, \quad (\text{A.40})$$

$$2C_{ijkl} + C_{kjil} + C_{ikjl} + C_{ijlk} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \eta \delta_{jl} \delta_{ik} + \sigma \delta_{il} \delta_{jk}, \quad (\text{A.41})$$

$$2C_{ijkl} + C_{ljki} + C_{ilkj} + C_{ijlk} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \tau \delta_{ik} \delta_{jl} + \mu \delta_{jk} \delta_{il}. \quad (\text{A.42})$$

Restando (A.39) de (A.40) y (A.41) de (A.42) se obtienen las ecuaciones

$$C_{ikjl} + C_{ilkj} - C_{kjil} - C_{ljki} = (\tau - \eta) \delta_{jl} \delta_{ik} + (\sigma - \mu) \delta_{jk} \delta_{il}, \quad (\text{A.43})$$

$$C_{ljki} + C_{ilkj} - C_{kjil} - C_{ikjl} = (\tau - \eta) \delta_{jl} \delta_{ik} + (\mu - \sigma) \delta_{il} \delta_{jk}, \quad (\text{A.44})$$

respectivamente. Sumando (A.43) y (A.44), queda

$$C_{ilkj} - C_{kjil} = (\tau - \eta) \delta_{jl} \delta_{ik}. \quad (\text{A.45})$$

Restando (A.43) y (A.44),

$$C_{ikjl} - C_{ljki} = (\sigma - \mu) \delta_{jk} \delta_{il}. \quad (\text{A.46})$$

Si $i = j = k = l$, el lado izquierdo de las ecuaciones (A.45) y (A.46) se anula, entonces

$$\tau - \eta = 0 \quad \Rightarrow \quad \tau = \eta, \quad (\text{A.47})$$

$$\mu - \sigma = 0 \quad \Rightarrow \quad \mu = \sigma. \quad (\text{A.48})$$

Sustrayendo (A.39) de (A.41) y (A.40) de (A.42), y haciendo uso de (A.48), llegamos a

$$C_{ikjl} + C_{ijlk} - C_{jikl} - C_{ljki} = (\lambda - \nu)\delta_{ij}\delta_{kl} \quad (\text{A.49})$$

$$C_{ljki} + C_{ijlk} - C_{jikl} - C_{ikjl} = (\lambda - \nu)\delta_{ij}\delta_{kl} \quad (\text{A.50})$$

Al sumar (A.49) con (A.50)

$$C_{ijlk} - C_{jikl} = (\lambda - \nu)\delta_{ij}\delta_{kl}, \quad (\text{A.51})$$

haciendo $i = j = k = l$, se deduce que

$$\lambda = \nu. \quad (\text{A.52})$$

Usando los resultados obtenidos en (A.47), (A.48) y (A.52) en las ecuaciones (A.45), (A.46) y (A.51) obtenemos las relaciones

$$C_{ilkj} = C_{kjil}, \quad (\text{A.53})$$

$$C_{ikjl} = C_{ljki}, \quad (\text{A.54})$$

$$C_{ijlk} = C_{jikl}. \quad (\text{A.55})$$

De estas ecuaciones junto con (A.47), (A.48) y (A.52) se deduce que las ecuaciones (A.39)-(A.42) son equivalentes y se reducen a una sola ecuación

$$2C_{ijkl} + C_{ijlk} + C_{ikjl} + C_{ilkj} = \nu\delta_{ij}\delta_{kl} + \eta\delta_{ik}\delta_{jl} + \mu\delta_{il}\delta_{jk}. \quad (\text{A.56})$$

Permutando los índices j , k y l por pares

$$2C_{ijkl} + C_{ijkl} + C_{iljk} + C_{iklj} = \nu\delta_{ij}\delta_{kl} + \mu\delta_{ik}\delta_{jl} + \eta\delta_{il}\delta_{jk}, \quad (\text{A.57})$$

$$2C_{ilkj} + C_{iljk} + C_{iklj} + C_{ijkl} = \mu\delta_{ij}\delta_{kl} + \eta\delta_{ik}\delta_{jl} + \nu\delta_{il}\delta_{jk}, \quad (\text{A.58})$$

$$2C_{ikjl} + C_{iklj} + C_{ijkl} + C_{iljk} = \eta\delta_{ij}\delta_{kl} + \nu\delta_{ik}\delta_{jl} + \mu\delta_{il}\delta_{jk}. \quad (\text{A.59})$$

Sumando las ecuaciones (A.57)-(A.58) queda

$$2(C_{ijkl} + C_{ilkj} + C_{ikjl}) + 3(C_{ijkl} + C_{iljk} + C_{iklj}) = (\nu + \eta + \mu)(\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}). \quad (\text{A.60})$$

Intercambiando los índices l y k

$$3(C_{ijkl} + C_{iklj} + C_{iljk}) + 3(C_{ijlk} + C_{ikjl} + C_{ilkj}) = (\nu + \eta + \mu)(\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{il}\delta_{jk} + \delta_{ik}\delta_{jl}). \quad (\text{A.61})$$

Restando las ecuaciones (A.60) y (A.61), tenemos que

$$C_{ijlk} + C_{ilkj} + C_{ikjl} = C_{ijkl} + C_{iljk} + C_{iklj}. \quad (\text{A.62})$$

Haciendo uso de esta expresión en (A.60)

$$C_{ijlk} + C_{ikjl} + C_{ilkj} = \frac{1}{5}(\nu + \eta + \mu)(\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}). \quad (\text{A.63})$$

Finalmente, sustituyendo este resultado en (A.56) obtenemos la expresión general para un tensor isotrópico de rango 4

$$C_{ijkl} = \alpha\delta_{ij}\delta_{kl} + \beta\delta_{ik}\delta_{jl} + \gamma\delta_{il}\delta_{jk}, \quad (\text{A.64})$$

donde α , β y γ son constantes.

Apéndice B

Código para FDTD elástico unidimensional

```
Program FDTD

Implicit none

Real*8 :: Dz,Dt,W,L_0,L_a,L_b,c_0,c_a,c_b,rho_0,rho_a,rho_b
Real*8, Dimension(:), Allocatable :: U, U_1, U_2, S, D, R
Integer :: i, j, N, N_0, n_R, K, K_0, K_a, K_b, M

!Funcion pulso
Real*8, External :: Pulso

!Parametros usados
L_0=50.0      !Ancho del medio externo a la multicapa
L_a=0.108     !Ancho de las capas del medio A
L_b=0.221     !Ancho de las capas del medio B
rho_0=2.49    !Densidad del medio externo
rho_a=2.49    !Densidad del medio A
```

APÉNDICE B. CÓDIGO PARA FDTD ELÁSTICO UNIDIMENSIONAL

```
rho_b=1.24 !Densidad del medio B
c_0=5.62d5 !Velocidad longitudinal en el medio externo
c_a=5.62d5 !Velocidad longitudinal en el medio A
c_b=1.93d5 !Velocidad longitudinal en el medio B

!Ancho de los pasos espaciales
Dz=L_a/10.0d0

!Ancho de los pasos temporales
Dt=0.5d0*Dz/c_0

!Numero de celda unitarias
M=10

!Numero de divisiones en cada medio
K_0=nint(L_0/Dz)
K_a=nint(L_a/Dz)
K_b=nint(L_b/Dz)

!Numero total de divisiones
K=2*K_0+M*(K_a+K_b)

!Numero total de pasos temporales
N_0=nint(L_0/c_0/Dt)
N=2*N_0 + M*(nint(L_a/c_a/Dt)+nint(L_b/c_b/Dt))

!Numero de pasos temporales necesarios para atravesar la multicapa
n_R=N-N_0

!Define el numero de elementos de cada arreglo
Allocate(U(0:K),U_1(0:K),U_2(0:K),D(0:K),S(0:K),R(0:K))
```

```

!Construye el arreglo que contiene los valores de la densidad
Call Medio(D,rho_0,rho_a,rho_b,K,K_0,K_a,K_b,M)

!Construye el arreglo auxiliar R(k)
Call Medio(R,c_0,c_a,c_b,K,K_0,K_a,K_b,M)

R=D*R*R/Dz
D=Dt/(c_0*D)

!Amplitud inicial de la deformacion
U=0.0d0
U_1=U

!Tensor de esfuerzos inicial
S=0.0d0

!Abre los archivos donde se guardan los datos
Open(25,File="Pulso.dat",Status="Unknown",Action="Write")
Open(26,File="Transmision.dat",Status="Unknown",Action="Write")

!Aplica el algoritmo del FDTD
Do i=1,N
  U_2=U_1
  U_1=U
  S(0:K-1)=R(0:K-1)*(U(1:K)-U(0:K-1))
  U(1:K)=D(1:K)*(S(1:K)-S(0:K-1))+2.0*U_1(1:k)-U_2(1:K)

!Condiciones de absorcion
U(0)=U_1(1)-(U(1)-U_1(0))/3.0d0
U(K)=U_1(K-1)-(U(K-1)-U_1(K))/3.0d0

```

APÉNDICE B. CÓDIGO PARA FDTD ELÁSTICO UNIDIMENSIONAL

```
!Fuente
U(1)=U(1)+Pulso(i*Dt)

!Guarda el pulso incidente
If(i < 2*N_0) Then
    Write (25,*) i*Dt, U(1)
End If

!Guarda la onda transmitida
If(i >= n_R) Write (26,*) real((i-n_R)*Dt), real(U(K-K_0+1))
End Do

Close(25)
Close(26)

End Program FDTD

!-----!
Function Pulso(t)

Real*8 :: Pulso, t, A, f, alfa
Real*8, Parameter :: Pi=4.0d0*atan(1.0d0)

f=1.0e6
alfa=0.5e-6
A=1.0

Pulso=A*exp(-(t-4.0*alfa)**2/(2.0*alfa**2))*sin(2.0*pi*f*t)

End Function Pulso
```

```

Subroutine Medio(P,P_0,P_a,P_b,K,K_0,K_a,K_b,M)

!-----!
!Construye el arreglo que contiene los valores del parametro P del medio !
!como funcion de la posicion. !
!-----!

Integer :: K,K_0,K_a,K_b,M,i
Real*8 :: P(0:K), P_0, P_a, P_b

!Medio de incidencia
P(0:K_0)=P_0
!Primera capa
P(K_0+1:K_0+K_a)=P_a
P(K_0+K_a+1:K_0+K_a+K_b)=P_b
!Capas restantes!
Do i=2,M
    P(K_0+(i-1)*K_a+(i-1)*K_b+1:K_0+i*K_a+(i-1)*K_b)=P_a
    P(K_0+i*K_a+(i-1)*K_b+1:K_0+i*(K_a+K_b))=P_b
End Do
!Medio de transmision
P(K_0+M*(K_a+K_b)+1:K)=P_0

END SUBROUTINE Medio

```


Bibliografía

- [1] M. S. Kushwaha, P. Halevi, G. Martínez, L. Dobrzynski y B. Djafari-Rouhani. *Theory of acoustic band structure of periodic elastic composites*. Physical Review B. **49**(4), 2313-2322(1994).
- [2] M. S. Kushwaha, P. Halevi, L. Dobrzynski y B. Djafari-Rouhani. *Acoustic Band Structure of Periodic Elastic Composites*. Physical Review Letters. **73**(13), 2022-2025(1993).
- [3] L. D. Landau y E. M. Lifshitz. *Fluid Mechanics*. Pergamon Press; 3ª edición (1959).
- [4] L. D. Landau y E. M. Lifshitz. *Theory of Elasticity*. Pergamon Press; 2ª edición (1970).
- [5] M. H. Sadd. *Elasticity Theory, Applications, and Numerics*. Elsevier; 1ª edición (2005).
- [6] Y. C. Fung. *A First Course In Continuum Mechanics*. Prentice-Hall.; 1ª edición (1969).
- [7] A. L. Fetter y J. D. Walecka. *Theoretical Mechanics of Particles and Continua*. Dover; 1ª edición (2003).
- [8] L. E. Kinsler, A. R. Frey, A. B. Coppens y J. V. Sanders. *Fundamentals of Acoustics*. John Wiley & Sons; 4ª edición (2000).
- [9] C. Kittel. *Introduction to Solid State Physics*. John Wiley & Sons; 8ª edición (2005).

- [10] D. M. Sullivan. *Electromagnetic simulation using the FDTD method*. IEEE Press; 1ª edición (2000).
- [11] G. Mur. *Absorbing Boundary Conditions for the Finite-Difference Approximation of the Time-Domain Electromagnetic-Field Equations*. IEEE Trans. Electromagn. Compat. **23**(4), 377-382(1981).
- [12] J. L. Rose. *Ultrasonic Waves in Solid Media*. Cambridge University Press; 1ª edición (1999).
- [13] G. Arfken. *Mathematical methods for physicists*. Academic Press; 3ª edición (1985).