

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS E INGENIERÍA

CONTROL DE LAS VIBRACIONES DE UNA REJILLA METÁLICA
DE 9 CELDAS: SIMULACIONES NUMÉRICAS

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

INGENIERO INDUSTRIAL

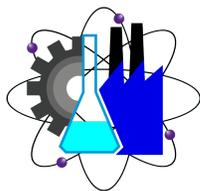
P R E S E N T A :

DIEGO MARCELINO CORTÉS REYNA

TUTOR

INTERNO: MTRO. JUAN MANUEL ZAGAL SÁNCHEZ
EXTERNO: DR. RAFAEL ALBERTO MÉNDEZ SÁNCHEZ

CUERNAVACA MORELOS, AGOSTO 2022





Facultad de Ciencias
Químicas e Ingeniería



FORMA T-4A
NOMBRAMIENTO COMITÉ REVISOR

Cuernavaca, Mor., a 15 de Marzo del 2022

MTRO. ANDRES AGUILAR NEGRETE
DR. RAFAEL ALBERTO MENDEZ SANCHEZ
MTRO. JUAN MANUEL ZAGAL SANCHEZ
DR. JOSE ALFREDO ARIZA ESPINOZA
ING. CATHERINE BEATRIZ VALDEZ MAYTORENA
P R E S E N T E

Me permito comunicarles que han sido designados integrantes del **COMITÉ REVISOR** del trabajo de:

TESIS

Titulado:

**Control de las vibraciones de una rejilla metálica de 9 celdas: simulaciones
numéricas**

Que presenta (el) o (la) **C. DIEGO MARCELINO CORTES REYNA**
Del programa educativo de: **INGENIERÍA INDUSTRIAL**

Atentamente
Por una humanidad culta
Una universidad de excelencia

DRA. VIRIDIANA AYDEÉ LEÓN HERNÁNDEZ
Directora de la FCQel
Firmado Electrónicamente



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MORELOS



Facultad de Ciencias
Químicas e Ingeniería



FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS e INGENIERÍA

Programas educativos de calidad reconocidos por CIEES, CACEI y CONACYT
SGC Certificada en la norma ISO 9001:2015

DICTAMEN

DRA. VIRIDIANA AYDEÉ LEÓN HERNÁNDEZ
DIRECTORA DE LA FCQeI
P R E S E N T E

En respuesta a su amable solicitud para emitir DICTÁMEN sobre el trabajo que se menciona, me permito informarle que los abajo firmantes otorgan su voto aprobatorio y firman electrónicamente para dar validez.

VOTO	NOMBRE	FIRMA
	MTRO. ANDRES AGUILAR NEGRETE	
	DR. RAFAEL ALBERTO MENDEZ SANCHEZ	
	MTRO. JUAN MANUEL ZAGAL SANCHEZ	
	DR. JOSE ALFREDO ARIZA ESPINOZA	
	ING. CATHERINE BEATRIZ VALDEZ MAYTORENA	



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MORELOS

Se expide el presente documento firmado electrónicamente de conformidad con el ACUERDO GENERAL PARA LA CONTINUIDAD DEL FUNCIONAMIENTO DE LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS DURANTE LA EMERGENCIA SANITARIA PROVOCADA POR EL VIRUS SARS-COV2 (COVID-19) emitido el 27 de abril del 2020.

El presente documento cuenta con la firma electrónica UAEM del funcionario universitario competente, amparada por un certificado vigente a la fecha de su elaboración y es válido de conformidad con los LINEAMIENTOS EN MATERIA DE FIRMA ELECTRÓNICA PARA LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE ESTADO DE MORELOS emitidos el 13 de noviembre del 2019 mediante circular No. 32.

Sello electrónico

RAFAEL ALBERTO MÉNDEZ SÁNCHEZ | Fecha:2022-05-31 12:18:04 | Firmante

K1i2Al3xY+iKGu8QFY/FYfWWhbQ5GYB965eWVlwbgrghmGH8ITvoHhclly+NhOrOreaV0W7BBvcdLA0hGJ/8U3WdCdISAvlr55tXedckloVD6RxxcMPTn7xNkzjY1c0T7hW+MmjYz7lW1mPfwaWEIb9diYuWErQuC1CuZ1bPqlsFuUTWYWWiJlata7hyT6uWBix/Njr8xQiGzRCYVlfa3xiWCWpDWDK8BS/UdAjB4nCmQW5+tafdttznwczmlgppqnJcxYzabqItRyijzMaNS5lvRaXSPaN5P4UxmAh00+QLgAyRHxbT4vXVV1hbCKpGizFloSkrKXzvQyBlmOFEMyMeA==

CATHERINE BEATRIZ VALDEZ MAYTORENA | Fecha:2022-06-01 11:46:47 | Firmante

t8dl893r8oXiYBOGOLq1m4SoTqAvC0/q8x2Eaj3SaleVU6B15eZblvMlbAnqO5lqUD4Jy3Q9s8GgCPb7fNIWnSQhISrLUKdasbD82n+LNkQIEeKx9pXqNKJbe6u0G4iywsC+p1/26qfqRUK0ficZYtNCDk9JbD1EekczwZFnTe9GIUj56jPNLodY6hSwlCqvx6+y2CFWoxqtVF1jnz3QRRE0amGfxY7pLQskjuc0aQcbkEG8JRHUaZQIJ/YdFAkKcYK8df8fz6JsPFTW6ZsqATVcVvAckwwmRma4SpkwxNf4lbTxrrywm4puiLnlpqzNr+XH3H6morB6AA7Cuw==

JUAN MANUEL ZAGAL SANCHEZ | Fecha:2022-06-02 18:39:03 | Firmante

inmuTgadu6LoupbQLwkgDUBX7OyLJiBPp09rfdPnpjXFQ1ff07YrLHGColZFNfERTrtjt4ULj3UZPOv+EZICJAhXVpOKMF8jOYFg7onPbFgU98TsR+39Fx5LdBoD6mF9zy7KuhbDl901ZJkXy3JJ98Vgfy6M2GBTqZ1Z4Yxp4DuXPUeUN6aYDUNYxbcwiOih802EzqdX3F19BY9YRlnDkzDslq2dSbSR90Xr7F+YnclzlyazPQNxmuyvRZxy7sDZ91UBpSgmO5MdbMaM4fW5YlnS2HPCW78nVRDfyTqR1IR4vGhr5o1g8eRlKUZ7veBZzq3PPqFUj+Imayo83g==

ANDRES AGUILAR NEGRETE | Fecha:2022-06-02 21:51:01 | Firmante

Fo2zliU1D74BlwXz5CEtCjoJGbnPOkw7xbq3gr/mqkrt8pdXgwkOONS7XdAAxtcy0rTI3dy333b03hllGtbJFDVTT09603D2mYq1pUdxwxt4UnyKWysJnGz+FOEUnYHMF3Oc6tU2ztblmCCsXapVX203mutZLlUpuz012FRQxNnyjxURqkD3WF30+1ubpb5x5ZAu3nnH18F09OEdGR2qK+35E7PVktYE74Hb3Y4oxYRGhLDgu9Qa/ctSyrG8PUOq0deaCuVPAmn4o6QG2BeJY9QckGplhZ13y2/CMZVwY7UzplKURkbdocxAgThzFBaYqkZxCzrAo2fxqcP0RTbsCg==

JOSE ALFREDO ARIZA ESPINOZA | Fecha:2022-06-03 20:24:55 | Firmante

ZCV38k/hgmCvjigHa6nUIMIS7KksPYyCM7rYLDKipuVo7efhn+8/+UfZMOe9AoyjxPPNlfPxSGHw596P07Y+Jj0F6r4GQZUPPJ7iJ5ukK/F24CUoPzGGZmm2sq//vOPWyuwtuZwe6RNQdzc9dGPeX0j4Nh66ExSBZu2FO/kq4MMuA9zUq3gLctrGsw8T9j08Dvv41PjIVIRUY1PthWbd6pLcg+0gttcKONCcxHoiZHKCCxoKaAVv6YYKfomZE4CbTSPzkUOVdWvix9Fnmv86QJUPJlxXV38qPJT4KHaNmsWegYhNaUqk4Jnxfo0ri59x31abKUQvdiTj5IOFO0UvA==

Puede verificar la autenticidad del documento en la siguiente dirección electrónica o escaneando el código QR ingresando la siguiente clave:



hliiVH1z4

<https://efirma.uaem.mx/noRepudio/8VH70yP1ItrTeQGulc7b47D3o4W6Oo>



A Dios, a la Virgen de Guadalupe y a mis Santos por protegerme e iluminarme en cada paso que di al elaborar este proyecto y los pasos que doy en la vida.

A mi mamá Victoria que siempre confía en mí y en mi capacidad para poder realizar mis metas. Por su paciencia y por su fe puesta sobre mí, para verme prosperar en mi carrera profesional, por su linda sonrisa que fue y es la principal razón de motivación en mi vida.

A mi papá Emilio por su arduo trabajo de años, por su motivación y apoyo para estudiar una carrera profesional y por todos sus consejos y conversaciones, por exigirme más para mejorar como persona en todos los aspectos.

A mi novia Rosa María por alentarme siempre, hacerme ver que puedo con todo, además de la motivación que me da, al verla hacer su esfuerzo también en la universidad, por ser así la impulsora de mis sueños.

A mi tía Rufi, mi tía Rocío y a mi tía Minga (q.e.p.d.) por permitirme vivir en un espacio de su hogar y de su corazón, eternamente agradecido, mi amistad y cariño les pertenece.

A mis hermanas Milagros, Itzel, Jaquelin y Sherlyn por su confianza puesta en mí, por darme paz y tranquilidad en casa, y por su motivación al verlas también tan dedicadas a la escuela y al trabajo, mis mejores deseos para ustedes siempre.

Y en especial este trabajo esta dedicado a mi abuelita Cirila Contreras Jaimés, que falleció el día 1 de marzo de 2022 y que sin su amor, cariño, alegría y protección no hubiera llegado con bien a ningún lugar, ahora sé que me cuida desde el cielo, gracias por tanto mamáCiri.

Agradecimientos

Agradezco a mi asesor externo: Dr. Rafael Méndez Sánchez, por ser mi mentor al desarrollar este gran proyecto, por impulsarme a trabajar de forma autodidacta, por su tiempo en las videollamadas realizadas, en las dudas consultadas, por su apoyo y transmisión de conocimiento.

Agradezco a mi asesor interno: Mtro. Juan Manuel Zagal Sánchez por su asesoría y por su ayuda en la realización de este proyecto hasta su culminación, por darme la oportunidad de desarrollar una tesis con todos los retos y aprendizajes que conlleva hacerla, y con motivación.

Agradezco a las instalaciones del Centro Internacional de Ciencias A.C y del Instituto de Ciencias Físicas de la UNAM, Campus Morelos por su buen recibimiento y estancia en lo poco que los visité en este periodo de crisis sanitaria por COVID-19.

Al proyecto CONACYT 284096 por el apoyo recibido y al proyecto PAPIIT IN111021 de la DGAPA UNAM.

A mis compañeros del grupo de ondas y materiales: el Ing. Bryan Manjarrez, el Ing. Esteban Terán, y al Ing. Edgar Sotelo por la ayuda brindada en la resolución de dudas en mi capacitación de software.

A mi tía Geña por su motivación, preocupación y su fuerza para salir adelante. Agradezco a mis sobrinos Juan Jesús, Kevin Ariel, Edwin Usaí y mi prima Katerine, por su comprensión y apoyo al no poder divertirnos juntos por mucho tiempo, hoy ha valido la pena.

Agradezco a toda mi familia en general por su comprensión y apoyo al no poder asistir a sus eventos y reuniones, por la poca convivencia este tiempo en que realice mi tesis.

Finalmente agradezco a la condición mundial de salud por hacerme valorar la vida y el esfuerzo pese a las condiciones adversas, y por la oportunidad de aprender desde casa, por todos los retos que conlleva estudiar de manera virtual.

Resumen

En esta tesis se estudia una estructura mecánica que llamamos molécula artificial elástica. La molécula artificial está compuesta por 9 resonadores, en un arreglo de 3×3 , conectados entre si por acopladores o cristales fonónicos finitos, también conocidos como sistemas localmente periódicos. Estos últimos se caracterizan por poseer una estructura de bandas en su espectro de frecuencias. Se busca un régimen de parámetros de la estructura mecánica, en la que los modos de vibrar coincidan con la fenomenología que arroja el modelo TB (*tight binding*, modelo de enlace fuerte) del estado sólido, para una molécula en red cuadrada de 3×3 . El modelo TB predice que las amplitudes de onda están localizadas en los cruces de la malla y que los autovalores están acomodados de la siguiente manera: singulete, doblete, triplete, doblete y singulete. Cuando una frecuencia propia del resonador cae en la brecha prohibida del cristal fonónico, las ondas se quedan atrapadas en los resonadores y se acoplan débilmente con los resonadores vecinos, emulando así el modelo de enlace fuerte del estado sólido.

Se hace uso del método de elementos finitos a través del programa COMSOL Multiphysics, para realizar las simulaciones numéricas y la ingeniería de bandas de la placa. Con el fin de cumplir con el objetivo, se analizan las diversas partes de la molécula artificial elástica, como son los resonadores y los acopladores. Se eligió una brecha lo suficientemente ancha para alojar a un gran número de frecuencias propias de los resonadores. Se realizó también el análisis variando los parámetros de la celda resonante para ubicar el grupo de frecuencias asociados a los resonadores e incrustarlos dentro de una brecha de los acopladores previamente seleccionada. Se hace también

un estudio del vector de onda k en una trayectoria de la zona irreducible de Brillouin para una red de Bravais rectangular bidimensional de la estructura infinita. Se logró observar el modo de vibrar deseado, se obtuvo una brecha ancha y después se usaron esos mismos parámetros en la placa finita de 9 celdas resonantes.

A partir de los ajustes dados, el grupo de resonancias se ubica dentro de la brecha prohibida consiguiendo modos de vibrar que se rigen por el modelo enlace fuerte del estado sólido y con el modo deseado en una brecha suficientemente grande.

Abstract

In this thesis a mechanical structure that we call elastic artificial molecule is studied. The artificial molecule is composed of 9 resonators, in a 3 by 3 array, connected to each other by couplers or finite phononic crystals, also known as locally periodic systems. The latter are characterized by a band structure in their frequency spectrum. A regime of parameters of the structure is sought in which the vibration modes coincide with the phenomenology that the tight-binding (TB model) of the solid state yields for a molecule in a 3×3 square lattice. The TB model predicts that the wave amplitudes are located at the grid junctions and that the eigenvalues are arranged as follows: singlet, doublet, triplet, doublet, and singlet. In the mechanical structure, when a resonator eigenfrequency falls into the forbidden gap of the phononic crystal the waves get trapped in the resonators, and weakly couple with neighboring resonators, thus emulating the tight-binding model of the solid state.

The finite element method is used through the COMSOL Multiphysics program to perform the numerical simulations and the band engineering of the plate. In order to obtain the objective, the various parts of the elastic artificial molecule are analyzed, such as the resonators and the couplers. A wide enough gap to accommodate a large number of resonator eigenfrequencies, was chosen. The analysis was also carried out by varying the parameters of the resonant cell to locate the group of frequencies associated with the resonators and embed them within the previously selected gap of the couplers. Use is made of periodic Floquet conditions in COMSOL that allows traversing the Brillouin zone. A study is also done of the wave vector k in a trajectory of the irreducible Brillouin zone for a two-dimensional rectangular Bravais lattice. The

desired vibrating mode was observed, a wide gap was obtained and then those same parameters were used in the finite plate of 9 resonant cells.

From the given settings, the group of resonances is located within the forbidden gap, achieving vibration modes that satisfy the tight-binding model of solid state and with the desired mode in a sufficiently large gap.

Índice general

Agradecimientos	II
Resumen	III
Abstract	V
1. Introducción	1
1.1. Objetivos	3
1.1.1. Objetivo general	3
1.1.2. Objetivos específicos	3
1.2. Justificación	4
1.3. Antecedentes	4
1.4. Alcances	6
2. Marco teórico	7
2.1. Sólidos cristalinos	7
2.1.1. Reflexión de Bragg	8
2.1.2. Bandas y brechas	11
2.1.3. Teorema de Bloch	12
2.2. Ondas en placas elásticas	13
2.2.1. Teoría de placas elásticas	14
2.2.2. Ondas elásticas en sistemas periódicos	15
2.2.3. Modelo de enlace fuerte	17

2.2.4. Modelo de enlace fuerte elástico	17
3. Metodología	21
3.1. Elementos finitos	21
3.2. Celda unidad del conector	23
3.2.1. Simetrización de la geometría	24
3.2.2. Simetría de la malla	25
3.3. Definición de la super celda	26
3.4. Uso de malla tipo cuadrático libre y barrido	27
3.5. Condiciones periódicas de Floquet para su aplicación en un estudio numérico infinito	27
3.6. Placa de 3×3	29
3.6.1. Geometría	29
3.6.2. Efecto de borde en la placa	29
3.6.3. Discretización final de la placa	30
4. Resultados	32
4.1. Espectros de la molécula artificial mecánica	33
4.1.1. Estudio paramétrico de los resonadores en la placa de 3×3	35
4.2. Análisis numérico considerando condiciones de periodicidad	42
4.2.1. Estudio de la zona irreducible de Brillouin del conector	42
4.2.2. Estudio de la zona irreducible de Brillouin de la super celda	44
4.2.3. Nuevos estudios de la placa de 3×3	45
5. Conclusiones y perspectivas	49
Bibliografía	51
Apéndice A. Resultados finales de las vibraciones en la placa de 3 por 3 celdas	54
A.1. Grupo de frecuencias	55
A.2. Modos de vibrar	55

Índice de figuras

2.1. Cristales de cloruro de sodio [6].	8
2.2. Representación de una celda unidad en la red cristalina.	8
2.3. Dispersion de onda sobre una partícula.	9
2.4. Dispersion de Bragg [7].	10
2.5. Dispersión de Bragg en una red lineal [7].	10
2.6. Estudio de SiO ₂ (cuarzo) [8].	12
2.7. Ondas longuitudinales en el sonido.	14
2.8. Tipos de vibracion en un sistema bidimensional	14
2.9. Region de una placa [9].	15
2.10. Bandas y brechas de un material elástico [12].	17
2.11. Representación de un sistema de átomos comunicados debilmente entre sí, por medio del modelo de enlace fuerte en una dimensión.	19
2.12. Representación de un sistema de átomos vecinos comunicados debil- mente entre sí en dos dimensiones.	20
3.1. (a) es una placa simple continua; (b) es una placa discretizada en pe- queños elementos.	22
3.2. Discretización, en elementos finitos, de un disco y pastilla de freno de un automovil [13].	23
3.3. Celda unidad.	24
3.4. Vibraciones fuera del plano con nodo en los pivotes	24
3.5. Division de la celda unidad en partes iguales	25

3.6. Dominios en color amarillo corresponde a los objetos ya mallados, dominios en color rosa a objetos por mallar.	26
3.7. Definicion de la super celda	26
3.8. Malla de la super celda	27
3.9. (a): Modo tetrahédrico libre, 7712 elementos, calidad minima: 29.72 %, calidad media: 62.46 %; (b): Modo cuadrático libre, 2752 elementos, calidad mínima: 98.59 %, calidad media: 99.9%.	28
3.10. Seleccin de contornos para un análisis numérico en una dimensión. .	28
3.11. Zona irreducible de Brillouin bidimensional para una red de Bravais cuadrada.	29
3.12. Geometria de la placa con 3 filas y 3 columnas	30
3.13. Geometria final de la placa	30
3.14. Mallado simétrico entre superceldas	31
3.15. Mallado final de todos los dominios	31
4.1. Espectro de frecuencia con respecto a la variación del lado del cuadrado de la celda unidad del sistema periódico	33
4.2. Valores de frecuencia propia en 35 mm de lado de la celda unidad . .	34
4.3. Brechas prohibidas encontradas en la placa de 3×3 con medida del lado de la celda unidad del conector de 35 mm	34
4.4. Variación del valor del lado del resonador cuadrado, de 20 mm a 34 mm	35
4.5. Espectro donde se muestra una linea de trazos que indica la localización de las frecuencias de los resonadores	36
4.6. Resonadores encontrados en 35 mm	37
4.7. Frecuencias resonantes en una variación que va desde 32 mm a 34 mm de lado del resonador.	37
4.8. Grupo de frecuencias correspondiente a las resonancias con valor de 33.7 mm de lado de los resonadores.	38
4.9. 1er Singulete:17.512 kHz	39
4.10. 1er Doblete: 17.53(1)	39

4.11. 1er Doblete: 17.53(2)	40
4.12. 1er Triplete: 17.547(1)	40
4.13. 1er Triplete: 17.547(2)	40
4.14. 1er Triplete: 17.547(3)	40
4.15. 2do Doplete: 17.564(1)	40
4.16. 2do Doplete: 17.564(2)	40
4.17. 2do Singulete: 17.58	41
4.18. Vibracion de los resonadores	41
4.19. Estudio de la celda conectora, en placa con grosor de 6.05 mm	43
4.20. Estudio de la celda conectora, en placa con grosor de 9.535 mm . . .	43
4.21. Banda de frecuencia del resonador con modo de vibrar fuera del plano, encontrado en 22527 Hz	44
4.22. Banda de frecuencia subida de 22527 Hz a 29838 Hz	45
4.23. Espectro de frecuencia del grupo aislado	46
4.24. Barrido paramétrico del ancho del conector que va desde 5 a 8 mm, de paso de 1 mm.	47
4.25. Barrido paramétrico en razón de la variación del tamaño del resonador.	48
A.1. Grupo de frecuencias con una diferencia de 29 Hz entre el valor de la frecuencia mas baja y la mas alta. Desde la frecuencia mas baja hacia arriba: entre el primer singulete y el primer doblete existe un espacio de 7 Hz, entre el primer doblete y el triplete 8 Hz, entre el triplete y el segundo doblete 7 Hz y entre éste último y el segundo singulete también 7 Hz. La brecha energética existente entre la frecuencia más alta del grupo de frecuencias y la energía de las otras bandas es de 1081 Hz, y la de la frecuencia mas baja y la energía de las otras bandas es de 1094 Hz.	56
A.2. Frecuencia 29350 Hz	57
A.3. Frecuencia 29357 (1) Hz	57
A.4. Frecuencia 29357 (2) Hz	58

A.5. Frecuencia 29365 (1) Hz	58
A.6. Frecuencia 29365 (2) Hz	59
A.7. Frecuencia 29365 (3) Hz	59
A.8. Frecuencia 29372 (1) Hz	60
A.9. Frecuencia 29372 (2) Hz	60
A.10.Frecuencia 29379 Hz	61

Capítulo 1

Introducción

La ingeniería industrial es la disciplina encargada de asegurar los productos y/o servicios de una organización, para su venta y distribución, a partir de la obtención y uso eficiente de recursos humanos, materiales, financieros y energéticos, aumentando la productividad de la empresa. Por lo tanto el campo de trabajo de un ingeniero industrial no se queda definido solamente en un área, como producción o calidad, sino que se ve expandido a otras, como por ejemplo, logística, seguridad e higiene, almacenes e inventarios, investigación y desarrollo, y en subáreas más específicas como, diseño del producto y mejora de procesos, por mencionar algunas. En sí, todo departamento que inspire innovación, mejora de productos, procesos, servicios y normatividad aplicable y actualizada a la organización, es un lugar de oportunidad laboral de la ingeniería industrial.

La investigación y desarrollo, o mejor conocida por las siglas I&D o como I+D+i (innovación), es una parte fundamental de empresas multinacionales y globales que buscan innovar y/o mejorar los productos y servicios que ofrecen. Esto con la intención de ampliar su mercado y obtener nuevas tecnologías, tanto para producir nuevos productos y servicios, como para mejorar los procesos de trabajo que se realizan en la elaboración de los mismos. La I&D nace desde la idea de permanecer vigente en el mercado o ampliarlo, crear conocimiento y generar mejora continua. Además de

la investigación en organizaciones privadas también existe la investigación en universidades, donde se incentiva la creación de proyectos, es decir, la manifestación de conocimiento. La educación superior prepara a los futuros profesionistas para ser capaces de desarrollar conocimiento al atender líneas de investigación multidisciplinarias, desarrollar métodos de trabajo y tecnología de alto nivel para la eficiencia de procesos y sistemas, además de la aplicación práctica de filosofías y teorías. La educación en ingeniería provee conocimiento y bases sólidas en matemáticas, física, química y computación, así mismo de la universidad, pueden llegar a resultar empresas *spin-off* que utilizan los resultados de la investigación para resolver un problema específico de la sociedad o para desarrollar una innovación tecnológica, como por ejemplo, la que fue el nacimiento de la red social facebook. La investigación es el núcleo de la innovación y la mejora, es de donde se parte para crear conocimiento científico. La investigación puede ser básica, que a su vez puede ser teórica, numérica o experimental, y aplicada.

Este proyecto es de índole en investigación básica numérica, es decir, se realizan cálculos matemáticos a partir de un software de simulación de elementos finitos, para obtener los valores de frecuencia naturales de vibración de un material. En el caso de esta tesis se trabaja con la ingeniería o estructuración de una placa de aluminio que pretende servir como aisladora de frecuencias resonantes. Este proyecto desemboca en la aplicación de esta fenomenología al control de vibraciones en este tipo de estructuras mecánicas, para la posible utilidad práctica en el área automotriz, de construcción, aeroespacial, electrónica y algunas otras ramas de interés. Se tiene así un gran abanico de campos de aplicación. Para desarrollar las posibles aplicaciones es sumamente vital la investigación básica que se presenta en este proyecto.

En este trabajo nos enfocamos en diseñar un cristal mecánico elástico que muestre el fenómeno del enlace fuerte o acoplamiento evanescente (débil) entre resonadores. La estructura mecánica consta de una placa delgada con 9 resonadores unidos entre sí por un sistema periódico finito de celdas unidad. Hacemos uso del método de elementos finitos para encontrar las bandas y brechas de la estructura que pueda cumplir con

las condiciones del acoplamiento por enlace débil en un placa finita.

La tesis consta de lo siguiente: el capítulo 2 contiene el marco teórico, describiendo lo que son las bandas y brechas en un cristal finito, la definición de la reflexión de Bragg, el acoplamiento evanescente de Bloch, la teoría de resonadores acoplados débilmente. En el capítulo 3 se describe el método de los elementos finitos, metodología utilizada para llevar a cabo los objetivos planteados, definir la super celda y de ahí los parámetros del sistema periódico. También se da la geometría de la malla y su respectiva simetría. El capítulo 4 muestra los resultados obtenidos que son las estructuras de bandas bajo diversos valores de los parámetros, las bandas y brechas resultantes, la forma del modo de vibrar, la parametrización final y la deformación debido a las vibraciones de la placa finita con 9 resonadores, así como sus 9 frecuencias propias. El último capítulo trata sobre las conclusiones de esta tesis.

1.1. Objetivos

1.1.1. Objetivo general

El objetivo general de esta tesis es diseñar un cristal artificial finito cuyas vibraciones estén localizadas en los sitios de una malla bidimensional localmente periódica de 9 átomos artificiales y que se rijan por el modelo de enlace fuerte.

1.1.2. Objetivos específicos

1. Tratar a una placa metálica como un cristal artificial finito.
2. Construir un sistema mecánico localmente periódico.
3. Diseñar y simular el sistema de conectores y resonadores acoplados usando el método de elementos finitos.
4. Estudiar el modelo de enlace fuerte para resonadores en un cristal artificial finito.

5. Obtener la estructura de bandas haciendo una variación del tamaño de los resonadores.
6. Encontrar un acoplamiento débil entre resonadores.
7. Optimizar la brecha prohibida dónde estarán ubicadas las bandas de frecuencia de los resonadores.
8. Proponer las dimensiones para los 9 resonadores.

1.2. Justificación

Se ha sugerido [1] que átomos y moléculas podrían servir como componentes básicos de dispositivos electrónicos. Para esto se necesita un control muy preciso de la molécula y de los contactos a los cuales se conecta. Aunque las técnicas experimentales actuales permiten fabricar dispositivos en una escala atómica y molecular, el estudio de tales dispositivos no sólo es difícil sino muy costoso.

El Grupo de ondas y metamateriales inició estudios con moléculas artificiales elásticas, que tienen las mismas propiedades de conducción que las moléculas reales. Se usan ondas elásticas en placas, con átomos artificiales para emular una molécula microscópica de átomos artificiales. Las ondas elásticas se atrapan gracias a la reflexión de Bragg, que entonces permite un acoplamiento evanescente entre resonadores. En un inicio se busca estudiar la molécula para estudiar posteriormente el transporte de ondas a través de ella, lo cual daría predicciones en el transporte electrónico en moléculas reales.

1.3. Antecedentes

En el grupo de Ondas y Materiales se llevan a cabo proyectos donde se estudian ondas en cristales artificiales mecánicos como el trabajo realizado por el Dr. Filiberto Ramírez, referencias [2] y [3] donde, con vibraciones mecánicas, se emula el comportamiento de electrones fuertemente ligados en una red de átomos artificiales. Esto a partir de

los modos de vibrar desde dos y hasta seis resonadores en una viga unidimensional. Con estos estudios de simulación numérica comparados con otros métodos numéricos y experimentales se hace posible caracterizar una molécula artificial unidimensional en un material mecánico donde los átomos artificiales están débilmente conectados a través del modelo de enlace fuerte igual al que conecta orbitales electrónicos.

Otro trabajo fue realizado por el I. M. Esteban Terán Juárez, véase referencia [4], donde llevo a cabo el estudio numérico de una molécula artificial que emula el comportamiento de los electrones P_z del Boraceno. Su finalidad era encontrar similitud entre los modos de vibrar de la molécula artificial y los datos obtenidos teóricamente de la ecuación de Schrödinger. El análisis del sistema bidimensional finito se llevo a cabo por medio del programa COMSOL Multiphysics y los resultados espectrales mostraron correspondencia según las hipótesis.

Un trabajo de tesis fue llevado a cabo por la I.Q. Mayra P. Toledano, referencia [5], donde ratificó la congruencia entre el método experimental que llevo a cabo, y los resultados numéricos y teóricos, acerca de la estructura electrónica del benceno, mediante el uso de la técnica de ARS (*acoustic resonant spectroscopy*, espectroscopia acústica resonante). El análisis experimental arrojó un espectro de frecuencia así como amplitudes de onda de los resonadores definiendo los orbitales atómicos artificiales y consecuentemente los orbitales moleculares del benceno artificial. Existe congruencia entre los orbitales experimentales del benceno artificial y el benceno artificial numérico diseñado con elementos finitos y la predicción teórica de enlace fuerte. Los orbitales π son los responsables de las propiedades electrónicas del benceno y son representados como los modos de vibrar de la molécula artificial finita. Esto tiene como practicidad el desarrollo de microcomponentes electrónicos en base a éstas y el inicio de estudios de moléculas más complejas.

1.4. Alcances

Este proyecto considera el análisis numérico, en dos dimensiones, de un sistema localmente periódico con 9 resonadores, uno en cada intersección de filas y columnas. Se realiza la ingeniería de bandas necesaria para, obtener los modos de vibrar de acuerdo a las predicciones del modelo de enlace fuerte para una molécula con 9 átomos artificiales, y optimizar los resultados (brecha prohibida donde se alojará el paquete de frecuencias de los resonadores). Los estudios numéricos se llevan a cabo por el método de elementos finitos.

Se consideran pequeñas deformaciones que obedecen las ecuaciones de la elasticidad lineal, pero no se considera el transporte de ondas en el material, más que simplemente la ubicación de los modos de vibrar en los resonadores. No se incluyen análisis en 3 dimensiones, ni la búsqueda de vibraciones en el plano como modos de interés para los resonadores. Tampoco se estudian otras geometrías, que no sean la cuadrada, tanto de la celda unidad del conector como de la celda unidad resonante ni se realizan estudios experimentales a la placa. No se profundiza en el análisis teórico de los modos de vibrar para una molécula artificial de 9 átomos en una red localmente periódica según el modelo de enlace fuerte ya que este modelo solamente se usa para corroborar los resultados numéricos.

Capítulo 2

Marco teórico

2.1. Sólidos cristalinos

Se les denomina sólidos cristalinos a aquellos que presentan un arreglo periódico y ordenado de átomos, moléculas o iones en las tres dimensiones del espacio, por lo que presentan una forma invariable. En un sólido los átomos o moléculas están unidos fuertemente y mantenidos en posiciones fijas. En consecuencia, la forma y volumen de un sólido permanecen esencialmente constantes hasta tanto las condiciones físicas, tales como por ejemplo la presión y la temperatura, no experimenten cambio apreciable. El arreglo periódico y ordenado forman una red tridimensional de átomos o red cristalina. A los sólidos cristalinos se les llama así porque las partículas macroscópicas que los componen (cristales) tienen formas regulares, por ejemplo en la Figura 2.1 se observan pequeñas formas cubicas definidas de cristales de cloruro de sodio desde una lente con aumento.

Para comprender la estructura de un sólido cristalino basta con analizar un pequeño fragmento de su red tridimensional de átomos, conocido como celda unidad o celda básica, ya que las propiedades del sólido se repiten de una celda a otra. Una celda unidad es la unidad más pequeña de una estructura cristalina, la cual muestra las mismas propiedades geométricas y de simetría bajo operaciones de traslación, como



Figura 2.1. Cristales de cloruro de sodio [6].

se observa en el ejemplo de la Figura 2.2.

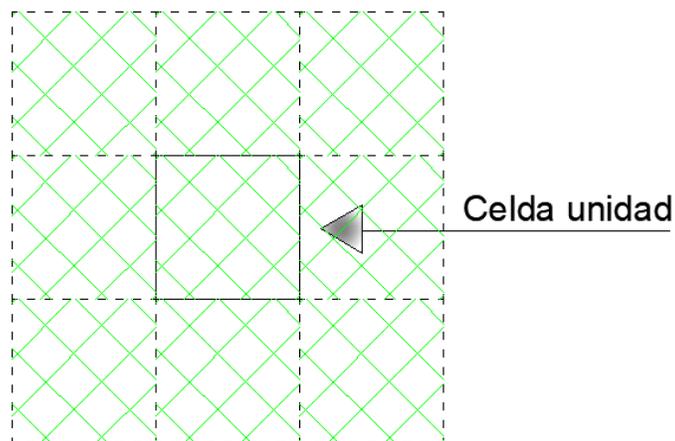


Figura 2.2. Representación de una celda unidad en la red cristalina.

2.1.1. Reflexión de Bragg

En un sólido cristalino existen arreglos de átomos de manera periódica y ordenada. El electron puede entenderse no sólo como una partícula sino también como una onda. Por lo tanto, el movimiento de los electrones en la red cristalina es similar a la propagación de una onda en el agua.

La dispersión de una onda ocurre cuando una fuente de energía envía una onda a un plano de átomos de una red cristalina, un átomo absorbe esa energía y la devuelve hacia cualquier direccion es decir se dispersa. Asimismo, cuando una onda choca frente

a un cuerpo cristalino parte de la energía es reflejada y parte es transmitida, como se observa en la Figura 2.3.

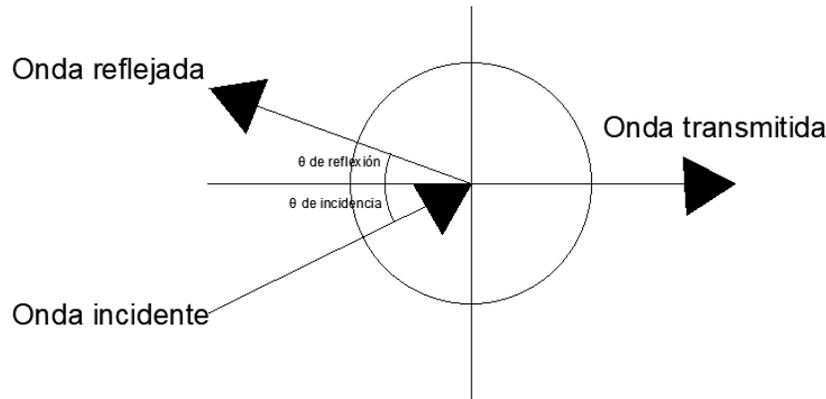


Figura 2.3. Dispersion de onda sobre una partícula.

Cuando la onda choca con un átomo y su energía es mayormente transmitida hacia el interior del cristal, dicha energía se sigue transmitiendo y permite a los átomos interactuar entre sí. En el caso contrario, la onda incidente excita a los electrones de un átomo en un plano de la red, en primera instancia, y devuelve mayormente la energía que adquirió hacia el exterior, la poca energía que llega a transmitirse se va reflejando hasta dejar de interactuar en capas de átomos más profundas.

Cuando dos o más ondas chocan frente a planos distintos de una red cristalina y los átomos que fueron energizados reflejan una onda con la misma longitud de onda con las que fueron golpeados ocurre una superposición o interferencia de las ondas. Una interferencia puede ser de ondas constructivas o destructivas si las ondas superpuestas se encuentran en fase o se encuentran desfasadas, respectivamente.

La reflexión de Bragg (también conocida como difracción o dispersión de Bragg) resulta cuando las ondas son reflejadas con interferencia constructiva, en este caso, la longitud de onda es del mismo valor de las ondas incidentes y las ondas dispersadas, el valor de la amplitud de onda dispersada debe ser la suma de la amplitud de las ondas incidentes. La condición de Bragg expresa que, un múltiplo de la longitud de onda incidente, es igual a la diferencia del camino recorrido por las ondas, matemáticamente deducido como, 2 veces la distancia interplanar, multiplicadas por el seno del ángulo

de reflexión; esto es

$$n\lambda = 2a\sin\theta,$$

donde a es la distancia entre los planos y θ es el ángulo que la dirección de propagación forma con los planos de la red (ver Figura 2.4). La ecuación anterior se llama Ley de Bragg en honor de los físicos William Bragg (padre e hijo) que la derivaron por primera vez después de su descubrimiento en 1912, a partir de la difracción de rayos X en cristales, por lo que obtuvieron el premio Nobel de Física en 1915. Cuando se trata

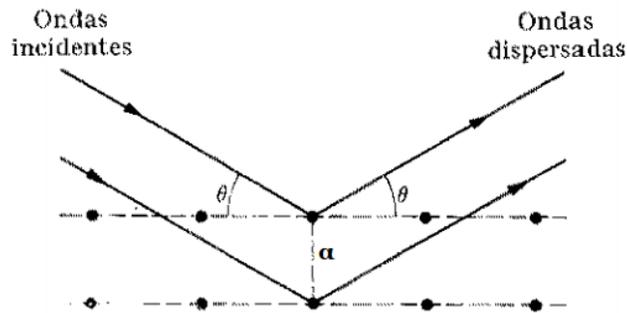


Figura 2.4. Dispersión de Bragg [7].

de una incidencia normal ($\theta = \pi/2$), la condición de Bragg se convierte en $2a = n\lambda$. Esta es la condición a aplicar para la propagación de ondas a lo largo de una red lineal (ver Figura 2.5).

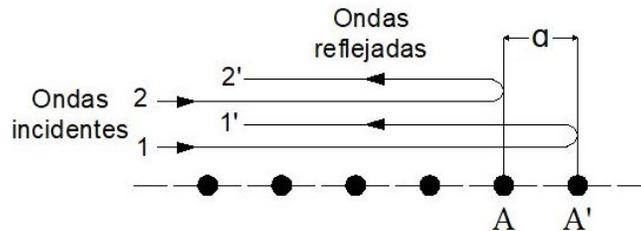


Figura 2.5. Dispersión de Bragg en una red lineal [7].

2.1.2. Bandas y brechas

En un material cristalino existen bandas de energía donde los electrones se mueven libremente. Estas bandas son el resultado de la superposición de los niveles atómicos de los átomos que constituyen un cristal. Cuando los átomos individuales se acercan para formar el cristal (en un arreglo periódico formando una red cristalina), sus niveles de energía atómicos interactúan entre sí, dando lugar a bandas de energía.

Los electrones en los cristales están repartidos en bandas de energía, es decir, en zonas del espacio energético donde los electrones puedan encontrarse realizando movimientos ondulatorios (transmisión de energía). Estas bandas están separadas por regiones en las que no existen estados electrónicos. A estas regiones no permitidas se les llama brechas o bandas prohibidas y son el resultado de la interferencia destructiva de las ondas electrónicas de la banda de conducción.

La Figura 2.6 muestra un estudio en el desplazamiento de la zona de Brillouin del dióxido de silicio (SiO_2) en su forma cristalina, mejor conocida como cuarzo, a partir de un modelo de enlace fuerte elaborado en el programa Fortran y donde se muestra lo que son gráficamente las bandas y brechas, las bandas se muestran como las líneas en color negro y las brechas prohibidas son los espacios donde no hay líneas (bandas de energía) de L a $\Gamma(2)$, para indagar más sobre este estudio se puede consultar la referencia [8].

La zona de Brillouin es la celda primitiva de Wigner-Seitz de la red recíproca, es decir, en una red cristalina equivale al área más cercana a un solo punto de la red y que se replica infinitamente en el cristal sin dejar espacios. Es de utilidad ya que en ésta se puede analizar el sistema de energía a partir de condiciones periódicas y el Teorema de Bloch. La zona irreducible de Brillouin es el área de menor simetría en la cual al multiplicarse, completa la zona de Brillouin en su totalidad, así se estudia la onda a partir de un análisis de su vector de onda (k) que parte de Γ que es el origen y donde la onda no tiene velocidad alguna, hasta tomar velocidad en dirección hacia algún punto de la zona de Brillouin y con ello su longitud de onda permanece variable. Es

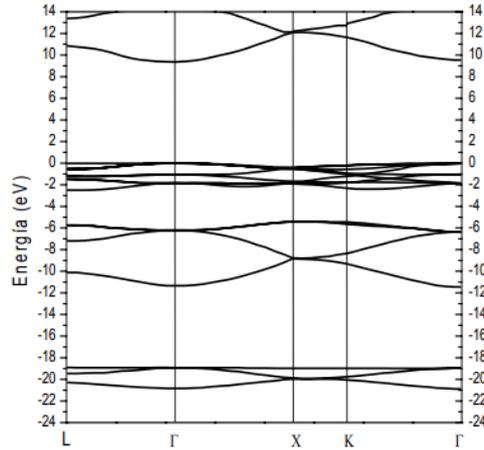


Figura 2.6. Estudio de SiO_2 (cuarzo) [8].

de suma importancia considerar la zona de Brillouin de una red en el espacio recíproco, así como el espacio real ya que, por ejemplo, un espectro de difracción es un gráfico o visualización del espacio recíproco y una fotografía microscópica del cristal es una imagen del espacio real. En este trabajo al ser una placa bidimensional el análisis recae en el área de la zona en dos dimensiones con trayectorias en los ejes k_x y k_y .

2.1.3. Teorema de Bloch

En un cristal los iones del sólido generan un potencial periódico que pertenecen a cada átomo de la red cristalina. Bajo la influencia de ese potencial se encuentran los electrones moviéndose con amplitud variable. La función de onda del electrón que satisface la ecuación de Schrödinger para un potencial periódico es de la forma:

$$\psi_{nk}(r) = e^{ikr} U_{nk}(r)$$

donde $U_{nk}(r)$ es una función que posee la periodicidad de la red cristalina:

$$U_{nk}(r) = U_{nk}(r + R).$$

En la ecuación anterior n es el índice de banda de energía, k es el vector de onda, r es el vector de posición, R es cualquier vector de la red de Bravais del cristal.¹ El vector de posición de una red de Bravais es de la forma $R = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3$ donde a_n es un vector linealmente independiente tridimensional y n_1, n_2, n_3 son números enteros.

La relación 2.1.3 es conocida como el Teorema de Bloch y declara que la función de onda de un electrón sometido a un potencial periódico es una onda plana modulada por una función periódica. El Teorema de Bloch permite estudiar el movimiento de un electrón y apartir de éste interpretar el movimiento de todos los electrones de un sistema.

Estas soluciones a la ecuación de Schrödinger demuestran la aparición de niveles de energía permitidos y niveles de energía no permitidos (brechas prohibidas) en el sistema. Lo ancho de las brechas determinan las propiedades físicas de los materiales en cuestión, como por ejemplo si el material es conductor, aislante o semiconductor.

2.2. Ondas en placas elásticas

Las ondas mecánicas necesitan de un medio material para propagarse y pueden clasificarse en dos tipos: longitudinales o transversales. Son de la primer forma cuando la dirección de propagación de la onda es paralela al movimiento de las partículas que lo conforman, como el sonido (ver Figura 2.7). También pueden ser transversales cuando la dirección de la propagacion de la onda es perpendicular al movimiento de sus partículas.

Una placa es un elemento tridimensional en el cual una de las dimensiones (espesor) es mucho menor que las otras dos. Se pueden propagar dos tipos de ondas en una placa, según su deformación elástica: ondas en el plano y ondas fuera del plano (ver Figura 2.8). Para definir las, se considera que el plano de la placa es aquel formado por las dos dimensiones mayores. Las ondas son fuera del plano cuando la dirección

¹Una red de Bravais es un arreglo de puntos que representan átomos, ordenados y orientados, que se repite periódicamente por traslación en los cristales.

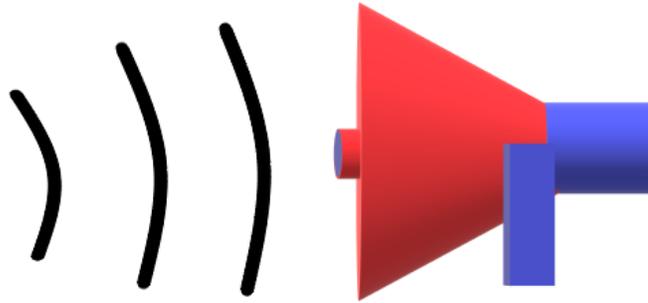
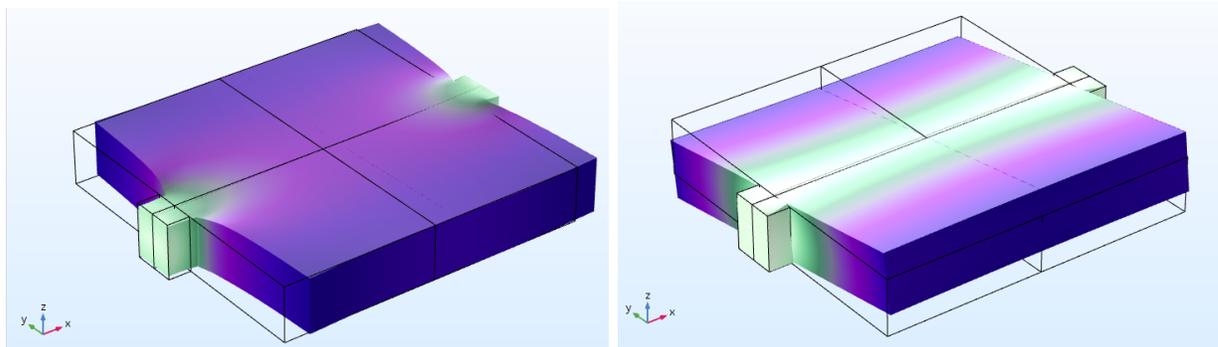


Figura 2.7. Ondas longitudinales en el sonido.

de la deformación de la vibración es perpendicular al plano de la placa. Son ondas en el plano cuando la dirección de deformación de la vibración es paralelo al plano de la placa. Las ondas fuera del plano serán las de interés en esta tesis.



(a) Vibracion en el plano

(b) Vibracion fuera del plano

Figura 2.8. Tipos de vibracion en un sistema bidimensional

2.2.1. Teoría de placas elásticas

La placa es el análogo bidimensional de la viga. Por tanto, estamos considerando el movimiento de un sistema elástico bidimensional en el que actúan los momentos de flexión y las fuerzas de corte transversales, como en una viga. Consideremos una placa de espesor h y de extensión infinita que tiene su superficie no deflectada en el plano x - y , como se muestra en la Figura 2.9.

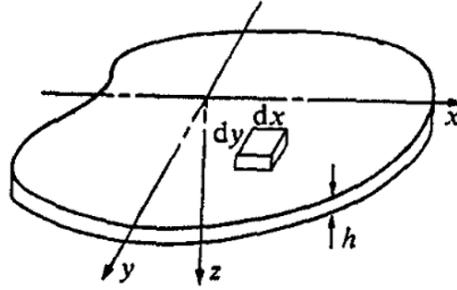


Figura 2.9. Region de una placa [9].

A bajas frecuencias, según la referencia [9], la ecuación que rige el movimiento de una placa delgada es

$$D\nabla^4 w(x, y, t) + \rho h \frac{\partial^2 w(x, y, t)}{\partial t^2} = q(x, y, t).$$

donde D es la rigidez flexional, ∇^4 es el operador biarmónico, w la deflexión como función del espacio y el tiempo, ρ la densidad, h el espesor y q es la distribución transversal de carga aplicada a la placa. Debido a que en esta tesis no se considera algún tipo de carga aplicada a la placa estudiada, $q = 0$. La ecuación anterior sólo permite una solución analítica para las placas simples como una circular pero se dificulta resolver para otras, como cuadradas o rectangulares. Por esta razón, para su solución, se utilizan métodos numéricos como el método de elementos finitos mediante el software COMSOL Multiphysics.

2.2.2. Ondas elásticas en sistemas periódicos

Las ondas son elásticas cuando se propagan en un medio material de manera uniforme y las vibraciones que produce no generan una deformación o cambio físico permanente en el material, pero si hay captación de energía.

En sistemas localmente periódicos elásticos se observan bandas de frecuencias permitidas y brechas de frecuencias prohibidas. Esta fenomenología es equivalente a la que se observa en cristales naturales, y en sistemas fotónicos, gracias a la interferencia constructiva y destructiva de ondas que señala la reflexión de Bragg. Entre mas

celdas unidad sean agregadas a un sistema elástico finito propiciará la aparición de más frecuencias agrupadas en bandas. La existencia de estas bandas y brechas para ondas elásticas se pueden comprobar experimentalmente a través de transductores electromagnéticos-acústicos también conocidos como EMAT's, de acuerdo a la ref. [10]. Estas mediciones en un sistema en físico permiten comparar además resultados espectrales teóricos y experimentales mostrando una gran similitud. En la referencia [11] se muestra la aparición de brechas prohibidas en una barra circular localmente periódica debido a la reflexión de Bragg. Cuando hay interferencia destructiva no hay frecuencias en un rango considerable, por su parte las ondas elásticas muestran diferentes formas de vibrar, como lo son vibraciones tipo compresional, flexional y torsional. Comparando los resultados de la barra localmente periódica con una barra circular uniforme con los mismos parámetros, se presentan diferentes resultados espectrales, ya que esta última presenta valores continuos de frecuencia a medida que aumenta su longitud, todo esto medido experimentalmente con los EMAT's como herramienta de medición.

Para la identificación de brechas prohibidas de energía en un sistema elástico basta con analizar una baja densidad de estados, gracias al análisis del vector de onda k , en una trayectoria en el contorno de la zona irreducible de Brillouin. De esta forma existe una correspondencia espectral respecto al comportamiento de las ondas en un estudio con múltiples frecuencias. El teorema de Bloch toma importancia debido a la representación de átomos artificiales en una red infinita periódica, y se estudia a partir de un solo átomo (celda resonante), considerando condiciones periódicas y creandose un potencial periódico como el que hay en un cristal natural o fotónico. Además de que, como ya se mencionó anteriormente, al estudiar una única solución de para el sistema de un átomo artificial se puede predecir el comportamiento de las demás vibraciones del sistema, y por lo tanto, el conjunto de las bandas que aparecen.

Un ejemplo se tiene en la Figura 2.10 que fue obtenida de la referencia [12] donde se estudia una placa reproducida infinitamente en la dirección X y Y mediante un desplazamiento de la zona irreducible de Brillouin donde muestra lo que son grafi-

camente las bandas y brechas. Las bandas se muestran como líneas de colores y en este ejemplo hay una sola brecha (Bandgap en inglés) que es el espacio donde no hay bandas de frecuencia.

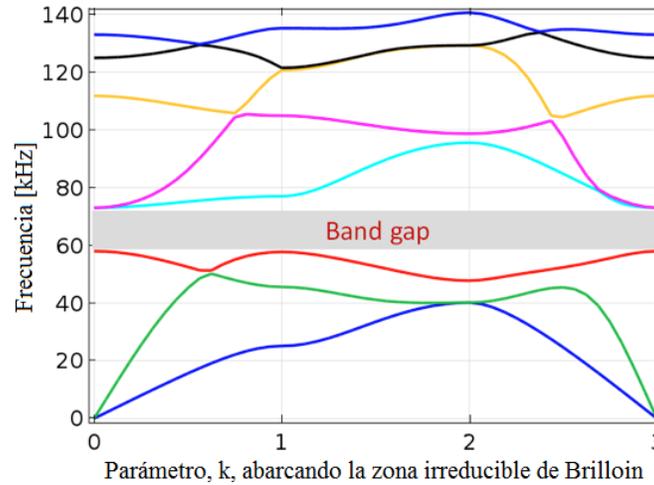


Figura 2.10. Bandas y brechas de un material elástico [12].

2.2.3. Modelo de enlace fuerte

La determinación de la estructura de banda electrónica en los cristales es uno de los problemas más importantes de la física del estado sólido. Afortunadamente, en muchos casos, los electrones de un cristal están fuertemente unidos a los átomos de la red y por lo tanto, la estructura de bandas puede calcularse fácilmente. Este hecho se recoge en el modelo de enlace fuerte (tight-binding model en inglés) en el que se supone una interacción muy débil con los átomos vecinos.

2.2.4. Modelo de enlace fuerte elástico

El grupo de Ondas y Materiales, usando vibraciones mecánicas, ha logrado emular el modelo de enlace fuerte del estado sólido. Esto abre la posibilidad de estudiar diversos sistemas del estado sólido usando vibraciones mecánicas. Para lograr esta emulación se lleva un proceso de ingeniería que consiste en lo siguiente:

1. Como se mencionó anteriormente un sistema periódico elástico, muestra bandas y brechas.
2. Cuando se introduce un defecto, o resonador cuya frecuencia resonante se encuentra dentro de la brecha prohibida del acoplador o sistema periódico, la amplitud máxima de onda se ubicará en la posición del resonador y a partir de ahí, la amplitud decaerá exponencialmente a través del sistema periódico.
3. Conectando resonadores vecinos a través de una estructura periódica finita, o acoplador, les permite comunicarse débilmente entre sí.

La fenomenología mencionada anteriormente es la misma que la de los orbitales atómicos por lo que este resultado se utiliza para construir “metamateriales mecánicos” con transporte a través de tales estados atrapados. Estos metamateriales emulan entonces los cristales atómicos.

La base del modelo mecánico de enlace fuerte estará formada por las amplitudes de las ondas $\{\phi_n(x)\}$, localizadas en la posición del defecto, con frecuencia f_n que se encuentra dentro de una brecha del acoplador, asociado a cada supercelda aislada en el sitio n . La amplitud de la onda $\theta(x)$ en el cristal elástico como función de la posición, puede expandirse en términos de la base como

$$\theta(x) = \sum_n A_n \phi_n(x) \quad (2.1)$$

El modelo de enlace fuerte para un cristal elástico se puede escribir como

$$-CA_{n-1} + f_n A_n - CA_{n+1} = f A_n \quad (2.2)$$

donde f es la frecuencia del sistema total, f_n , es la frecuencia de resonancia de una supercelda aislada en el sitio n , C es el coeficiente de acoplamiento entre los resonadores (vecinos) más cercanos que depende de las propiedades del acoplador, y A_{n-1} , A_n , y A_{n+1} es la amplitud de la onda en los sitios $n - 1$, n y $n + 1$, respectivamente (véase la Figura 2.11).

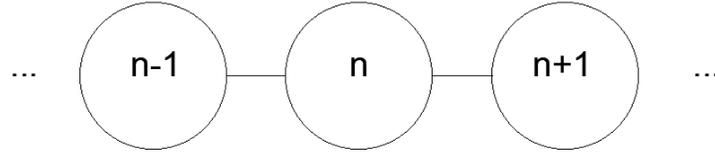


Figura 2.11. Representación de un sistema de átomos comunicados debilmente entre sí, por medio del modelo de enlace fuerte en una dimensión.

Este es el modelo de enlace fuerte más sencillo, ya que supone que los acoplamientos del vecino más cercano son idénticos para todos los resonadores. Las variables f , f_n , ϕ_n y C , en el modelo de enlace fuerte dado en las Ecs. (2.1) y (2.2) para ondas mecánicas, toman el papel de la energía, la energía del sitio, la función orbital y la amplitud de salto en el modelo cuántico, respectivamente.

Físicamente f_n corresponde aproximadamente a la frecuencia de resonancia del resonador aislado mientras que C está relacionado con la longitud de localización de la amplitud de onda de un resonador dentro de la estructura periódica. Ambos valores deben determinarse para generar el espectro de frecuencias del modelo de enlace fuerte para un cristal elástico con un número arbitrario de celdas. Los valores de f_n y C se obtienen a partir de los cálculos numéricos teóricos para una estructura con resonadores acoplados.

Para un cristal en dos dimensiones la ecuación es la siguiente:

$$-CA_{n-1,m} - CA_{n,m-1} + f_{n,m}A_{n,m} - CA_{n+1,m} - CA_{n,m+1} = fA_{n,m} \quad (2.3)$$

Ahora ya no sólo se contempla la ubicación de las celdas unidad a lo largo del eje x sino en el eje y , incorporando la variable m , como se observa en la Figura 2.12.

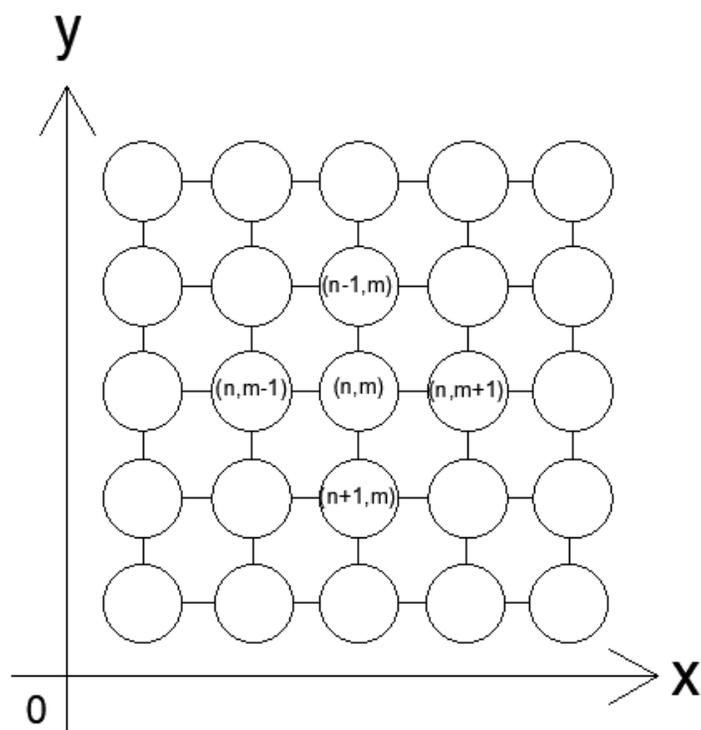


Figura 2.12. Representación de un sistema de átomos vecinos comunicados debilmente entre sí en dos dimensiones.

Capítulo 3

Metodología

En este capítulo, se presenta el método de los elementos finitos. Este método puede resolver ecuaciones diversas para dar la solución a múltiples sistemas. Luego se presenta el procedimiento de diseño y construcción de la placa de 3×3 resonadores, que se analizará en esta tesis. El estudio se realiza usando el software COMSOL Multiphysics, que es un programa de simulación numérica donde es posible diseñar y modelar objetos aplicando diversos estudios de la física y la ingeniería y cuya base de funcionamiento es el método de los elementos finitos. El laboratorio de ondas y materias, a cargo del Dr. Rafael Méndez, cuenta con una licencia de dicho software.

Particularmente el área de interés en este proyecto es la mecánica de sólidos. En la plataforma computacional mencionada se diseña la celda unidad del conector, un sistema periódico finito, el resonador y la celda unidad del sistema compuesto (super-celda) y la placa en su totalidad. Posteriormente se hace un análisis de frecuencia propia en dicha placa.

3.1. Elementos finitos

El método de los elementos finitos (MEF) es un método matemático donde la estructura continua o cuerpo sólido es discretizado. En el caso de esta tesis nos referimos a

una placa de aluminio, que se representará por un conjunto de subdivisiones llamadas elementos. Así la placa pasa de ser una estructura continua a una estructura dividida (o discretizada) en partes pequeñas y conectadas entre sí a través de interpolaciones de puntos nodales o nodos de borde del elemento finito. Se reproduce así la estructura real lo mas ajustadamente posible y se pasa de una estructura con un número infinito de grados de libertad a otra con un número finito de ellos, ver Figura 3.1. Los nodos suelen estar en los límites de los elementos, donde se considera que los elementos adyacentes están conectados por funciones interpolantes.

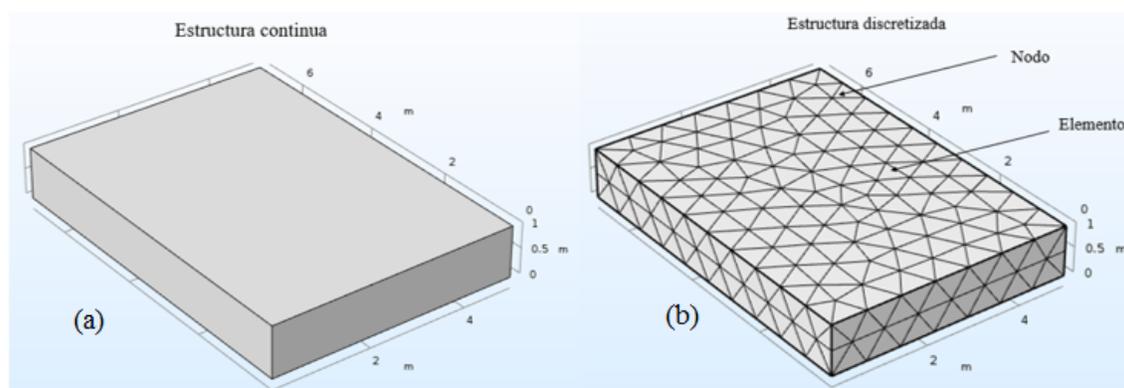


Figura 3.1. (a) es una placa simple continua; (b) es una placa discretizada en pequeños elementos.

El análisis por el MEF presenta convergencia debido a que si al disminuir el tamaño de los elementos, y por lo tanto aumentar el número de nodos y de elementos, la solución obtenida tiende hacia la solución exacta. Un mejor resultado también depende en gran medida del tipo y de la calidad de los elementos y su adaptación al mallado en cada dominio. Con ello ya es posible abordar el estudio del comportamiento de una estructura discretizada, ver Figura 3.2, mediante el empleo de una computadora y de un software especializado de resolución de este tipo de sistemas, como lo es COMSOL Multiphysics entre algunos otros.

Al resolver las ecuaciones de elementos finitos, que son generalmente en forma de ecuaciones matriciales, es decir un sistema de ecuaciones lineales, se conocerán los valores nodales. Una vez estos son conocidos, las funciones de aproximación definen todo el conjunto de elementos y la solución a la ecuación diferencial en el dominio

continuo se obtiene como una interpolación.

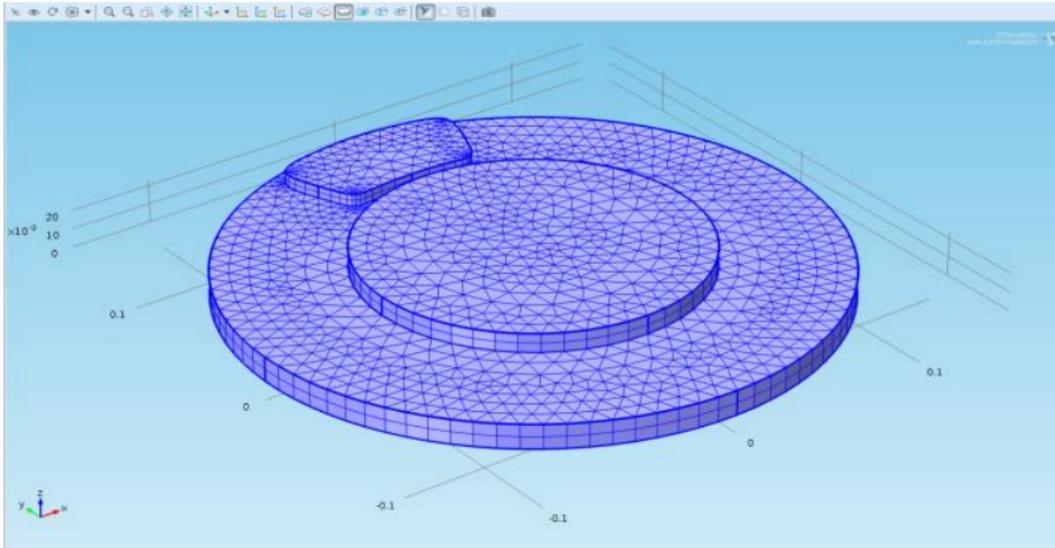


Figura 3.2. Discretización, en elementos finitos, de un disco y pastilla de freno de un automovil [13].

3.2. Celda unidad del conector

La celda unidad es la unidad mínima básica de toda estructura periódica, y en particular del sistema mecánico del cual se estudiarán sus vibraciones. El acoplamiento de celdas unidad permite estudiar a la estructura como un sistema periódico. Hay dos celdas unidad que se estudiarán en esta tesis. La primera es la celda unidad de los conectores compuesta por una placa cuadrada con un valor inicial de lado de 35 mm y dos pivotes que se encuentran a ambos lados del cuadrado son utilizados como conectores entre una celda y otra, tienen medidas de 2.5 mm \times 5 mm, como se observa en la Figura 3.3. La celda unidad es de aluminio aleación 1145. La parte central de la celda unidad es cuadrada debido a que ya se han realizado estudios previos y esta placa presentan diferentes formas de vibrar que pueden utilizarse. Además, el costo de maquinado es menor que con algunas otras figuras ya que las cortes son lineales, por lo que se facilita su construcción.

El tipo de vibración que se busca, de acuerdo a estudios previos [4], son las que se

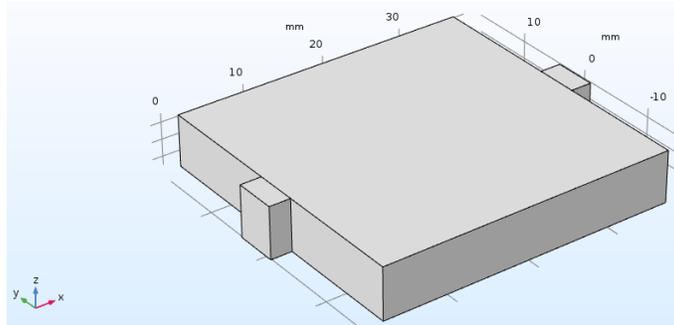


Figura 3.3. Celda unidad.

muestran en la siguiente Figura 3.4. Estas son vibraciones del modo flexional y por lo tanto son fuera del plano. Como se puede ver, estas vibraciones tienen un flujo pequeño de energía hacia celdas vecinas. Esto se logra debido a que hay un nodo localizado en los conectores del sistema periódico. Por ello la mayor cantidad de energía está en las esquinas, donde hay mayor de deformación y por el contrario, hay poca energía y vibraciones en la posición de los pivotes. Con las simulaciones creadas para llevar a cabo este trabajo se encontraron este tipo de vibraciones por arriba de los 15 kHz y es algo que se estudiará en el capítulo 4.

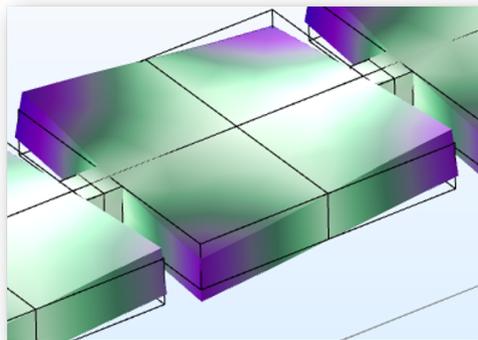


Figura 3.4. Vibraciones fuera del plano con nodo en los pivotes

3.2.1. Simetrización de la geometría

El proceso de simetrización se lleva a cabo tanto en la geometría de la placa como en la discretización de la malla. Esto garantiza al sistema de resolución del software de simulación tomar la misma cantidad de puntos nodales en cada dominio del sistema y

tener un efecto de reflexión a partir de un eje de simetría entre la parte mallada y por mallar. Así se obtiene el mismo número de elementos y de calidad de elementos en cada dominio para finalmente obtener un resultado homogéneo en toda la placa. Para simetrizar la geometría se parte la celda unidad en 4 partes iguales como se muestra en la Figura 3.5, también se divide el pivote conector en dos partes. El motivo de hacer la geometría simétrica es que los dominios a mallar deben ser simétricos para que la solución sea simétrica. Se garantiza una geometría simétrica si está compuesta por partes arregladas simétricamente partiendo desde la misma celda unidad. Después se replica de la misma forma hasta completar de definir toda la placa estructurada.

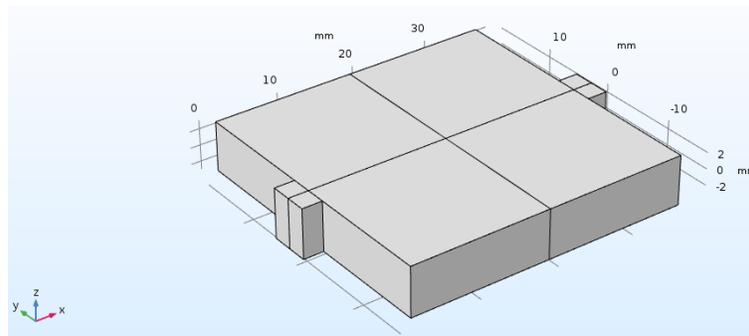


Figura 3.5. Division de la celda unidad en partes iguales

3.2.2. Simetría de la malla

Para iniciar con la discretización, en primer lugar se toma un par de dominios que se consideran simétricos en su geometría desde un inicio. Se malla seleccionando el generador de malla tipo tetrahedrico libre, que es la opción estandar de mallado del software. Después se copia la malla a los siguientes dominios tomando en cuenta la existencia virtual de un eje de simetría entre los dominios (ver Figura 3.6). Así se consigue un número igual de elementos y de la misma calidad de mallado en cada dominio, siendo simétricos en cada parte reflejada del sistema. Se utiliza un comando llamado copy domain y este realiza la acción de llevar el primer mallado construído a los demás dominios del sistema.

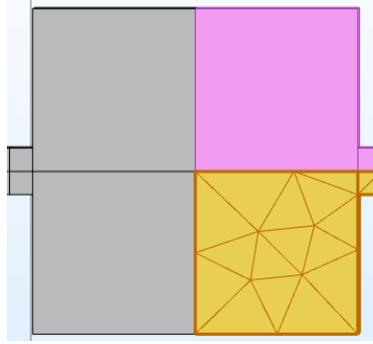


Figura 3.6. Dominios en color amarillo corresponde a los objetos ya mallados, dominios en color rosa a objetos por mallar.

3.3. Definición de la super celda

La super celda es la acoplamiento entre varias partes que tienen un arreglo particular. Esta celda contiene celdas unidad especiales a las que llamamos resonadores. El resonador se encuentra en el centro de la super celda rodeado de las celdas unidad del acoplador que actúan como el sistema periódico de la red (vease Figura 3.7). En un principio el resonador tiene las mismas medidas que las celdas unidad de su alrededor, después de analizar los resultados de la placa en el siguiente capítulo, se definen sus nuevas medidas. El sistema total está compuesto de 9 resonadores en una red de 3×3 resonadores. La malla de la super celda queda simétrica, como se muestra en la Figura 3.8.

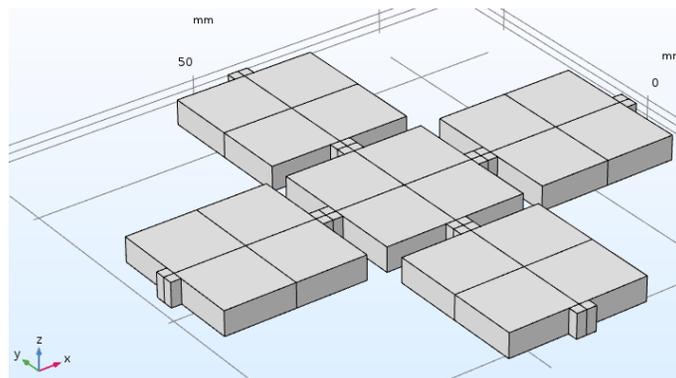


Figura 3.7. Definición de la super celda

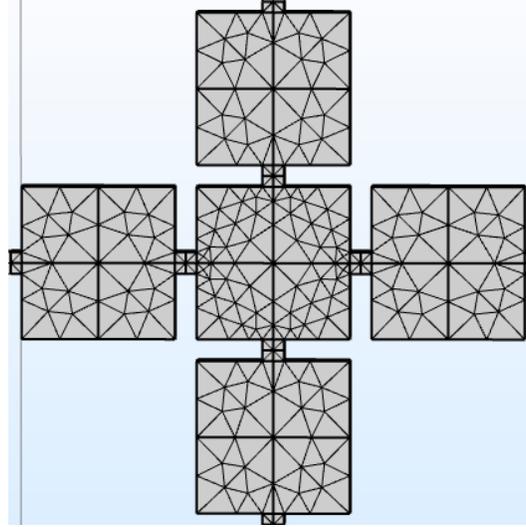


Figura 3.8. Malla de la super celda

3.4. Uso de malla tipo cuadrático libre y barrido

Una malla puede ser fina o gruesa dependiendo del objetivo del análisis en cuestión y del tiempo. Además puede ser conformada con diferentes formas de los elementos por dominio, entre ellos tetrahedrico libre y cuadrático libre. Es sabido que una malla fina genera mejores resultados debido a un mayor número de puntos nodales en el sistema y por lo tanto mejor cálculo numérico distribuido en el volumen del sistema a estudiar. Una malla cuadrada genera una mayor calidad del elemento en un sistema que por su naturaleza física es rectangular. Este tipo de elemento alcanza un 90 o hasta 100 por ciento de calidad por elemento, lo cual hace el estudio aún más efectivo. En la Figura 3.9 se muestra la comparación en la calidad de los elementos de tipo tetrahedrico libre y cuadrático libre en la supercelda.

3.5. Condiciones periódicas de Floquet para su aplicación en un estudio numérico infinito

Para estudiar el cristal mecánico artificial como una red infinita se requiere de agregar condiciones de periodicidad (también llamadas de Floquet) al objeto de estudio. Éste es básicamente la celda unidad del cristal artificial que se usará como conector. Para

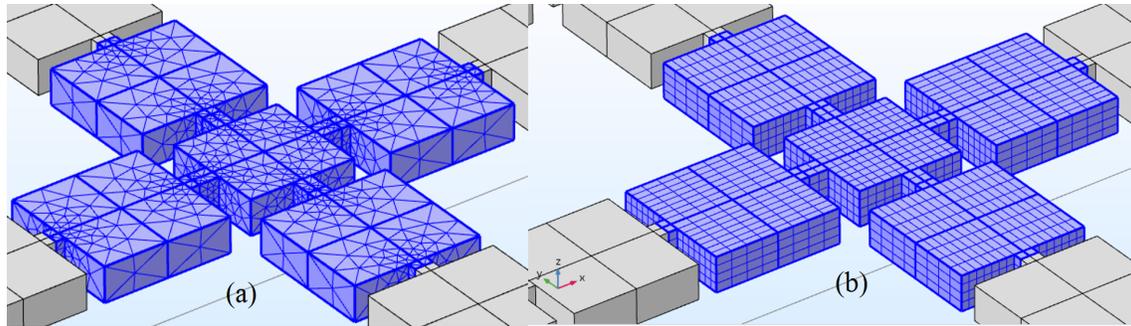


Figura 3.9. (a): Modo tetrahédrico libre, 7712 elementos, calidad mínima: 29.72%, calidad media: 62.46%; (b): Modo cuadrático libre, 2752 elementos, calidad mínima: 98.59%, calidad media: 99.9%.

ello desde la sección de la física en COMSOL, en este caso mecánica de sólidos, se seleccionan dos contornos en el dominio que representen una dimensión en el espacio, a estos se les llama origen y destino (ver Figura 3.10). Es importante señalar que se requiere el empleo de un vector k que es el valor que toma un punto de desplazamiento en la zona irreducible de Brillouin.

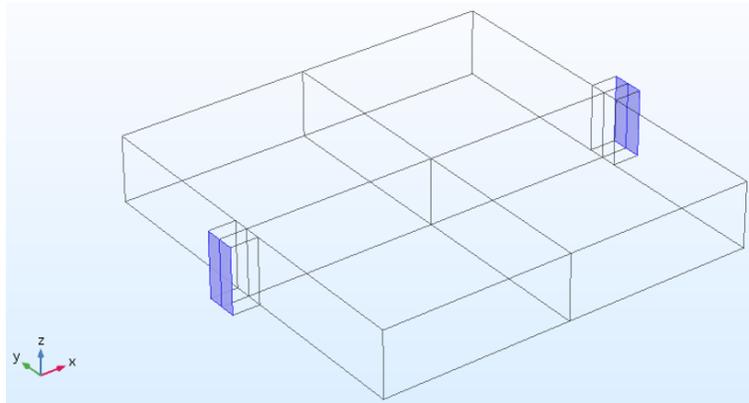


Figura 3.10. Selección de contornos para un análisis numérico en una dimensión.

Para un sistema unidimensional se analiza el vector de onda k en un desplazamiento $\Gamma - X$ entonces toma un valor de 0 a 1. Para un estudio en dos dimensiones toma el valor de 0 a 1 en un desplazamiento en $\Gamma - X$, de 1 a 2 en $X - M$ y de 2 a 3 en $M - \Gamma$, véase Figura 3.11.

Se pide un número de frecuencias propias para cada valor del parámetro k que cubra al menos hasta frecuencias de 40 kHz. Esto con la intención de trabajar en frecuencias

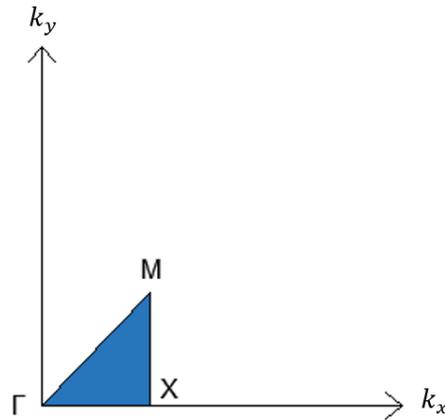


Figura 3.11. Zona irreducible de Brillouin bidimensional para una red de Bravais cuadrada.

óptimas tanto numéricamente como en el estudio experimental posterior en laboratorio.

3.6. Placa de 3×3

3.6.1. Geometría

Hasta ahora se ha construido, la celda unidad del sistema periódico y después la supercelda, su geometría y su mallado. Para continuar con la construcción del sistema estructurado se prosigue a construir la totalidad de la geometría de la placa usando el comando *array*, que multiplica los dominios según sea configurado. La geometría final de la placa se puede observar en la Figura 3.12. Después se distribuye el mallado con el comando *copy domain* en las super celdas construidas hasta abarcar toda la placa.

3.6.2. Efecto de borde en la placa

Se pueden generar efectos de borde debido a la energía que transita por la placa, el efecto de borde es el retorno de energía de los extremos hacia el interior, debido a la superficie libre, y que altera las formas de vibrar del sistema. Debido a esto se

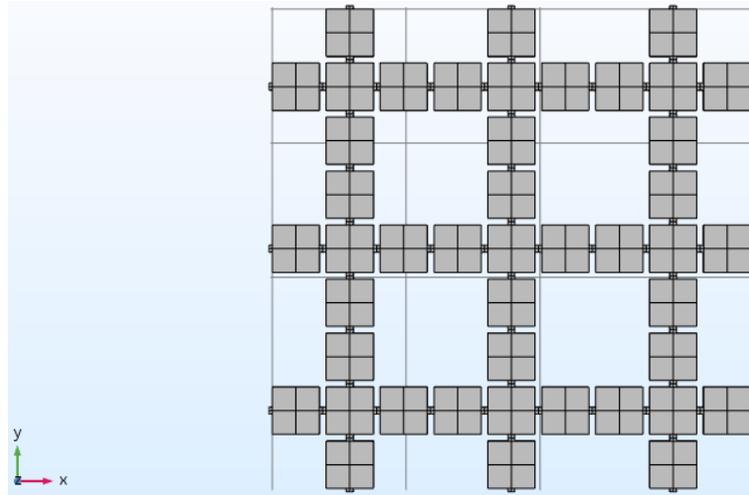


Figura 3.12. Geometría de la placa con 3 filas y 3 columnas

decide empalmar más celdas en los extremos de la placa y así de esta forma permitir una interacción genuina en cada parte del sistema sin tener efectos de borde. La placa queda finalmente como se muestra en la Figura 3.13.

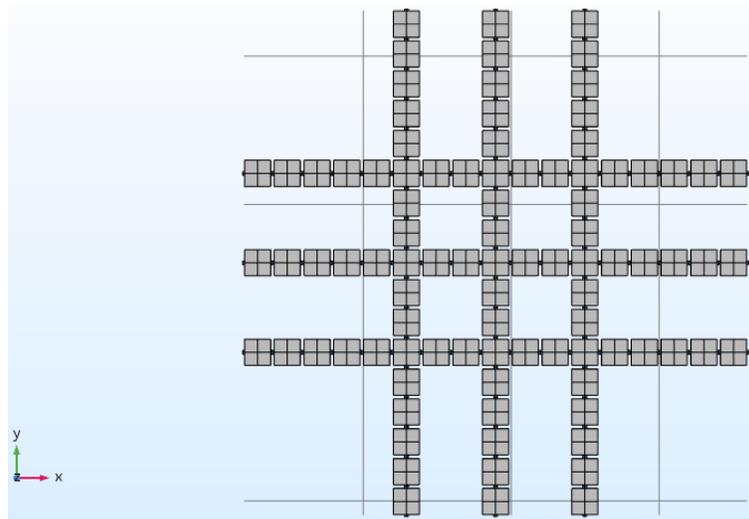


Figura 3.13. Geometría final de la placa

3.6.3. Discretización final de la placa

Después de haber creado la geometría total de la placa y tener definida la malla de la super celda, se continúa con el proceso de distribución de la malla en todos los dominios restantes. De nuevo se utiliza el comando *copy domain* del interfaz *mesh* de

COMSOL Multiphysics y se distribuye el patrón de mallado tal cual está en la super celda, siempre tomando en cuenta la simetría en todo momento y hasta abarcar todo el sólido (Vease Figura 3.14).

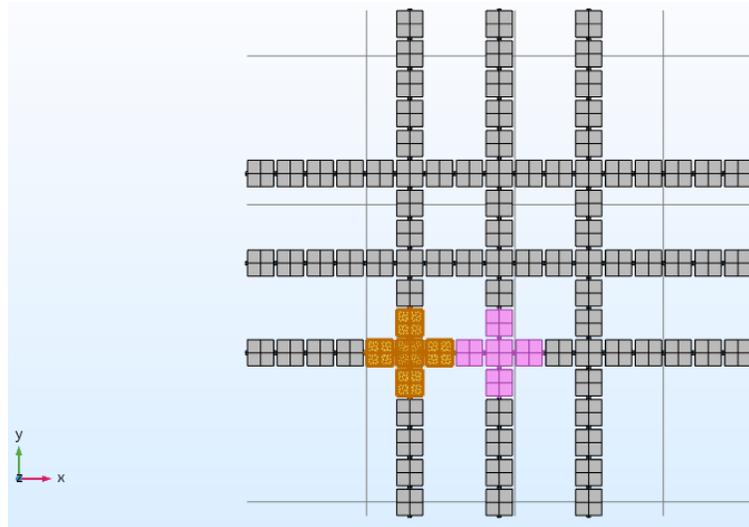


Figura 3.14. Mallado simétrico entre superceldas

Al terminar de mallar las superceldas se prosigue a mallar los extremos. Finalmente el producto es el que se observa en la Figura 3.15. La placa con 9 resonadores se encuentra lista para su análisis.

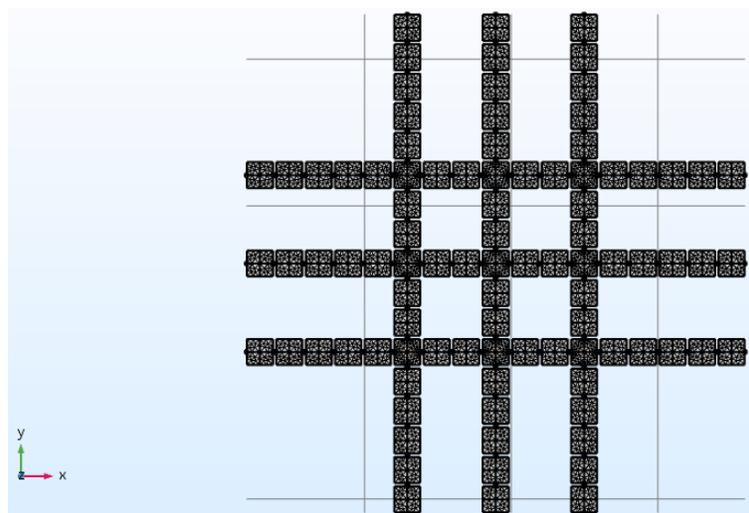


Figura 3.15. Mallado final de todos los dominios

Capítulo 4

Resultados

Resumimos el procedimiento para obtener los resultados del presente capítulo: Se comienza diseñando la placa de 3×3 resonadores como un sistema periódico finito, es decir, un sistema repetitivo de celdas unidad de la misma forma y tamaño. Después, se realiza un estudio de frecuencia propia, que es un análisis que se logra a través del programa COMSOL Multiphysics. Con este programa se obtienen las frecuencias propias de vibración (en Hertz) del sistema en cuestión. Este estudio arroja un espectro de frecuencias, es decir un gráfico que muestra los niveles o agrupamientos de frecuencias (bandas de frecuencias permitidas) y las brechas existentes entre bandas. Las frecuencias resultantes dependen de las propiedades del material, tales como la densidad, el modulo de Young y el coeficiente de Poisson. También dependen de las condiciones a la frontera, de la combinación de la geometría del sistema y la discretización de la malla de los dominios del sistema. A partir del estudio de frecuencia propia se desarrolla una variación paramétrica con la finalidad de obtener las bandas y las brechas como función de uno o más parámetros de la geometría. Esto se logra con el comando *parametric sweep* de la interfaz del programa de cómputo antes mencionado.

4.1. Espectros de la molécula artificial mecánica

El espectro de frecuencia del sistema periódico finito, es decir de la placa con 3×3 resonadores, se presenta en la Figura 4.1. A simple vista se observa que hay una brecha en un rango de frecuencia entre 45 kHz y 55 kHz, aproximadamente, para el lado de la placa de 35 mm. Esta brecha sube de frecuencia para valores más pequeños del lado del cuadrado. En esta figura también puede verse que en todos los valores del parámetro usados, aparecen pequeñas brechas a frecuencias más bajas.

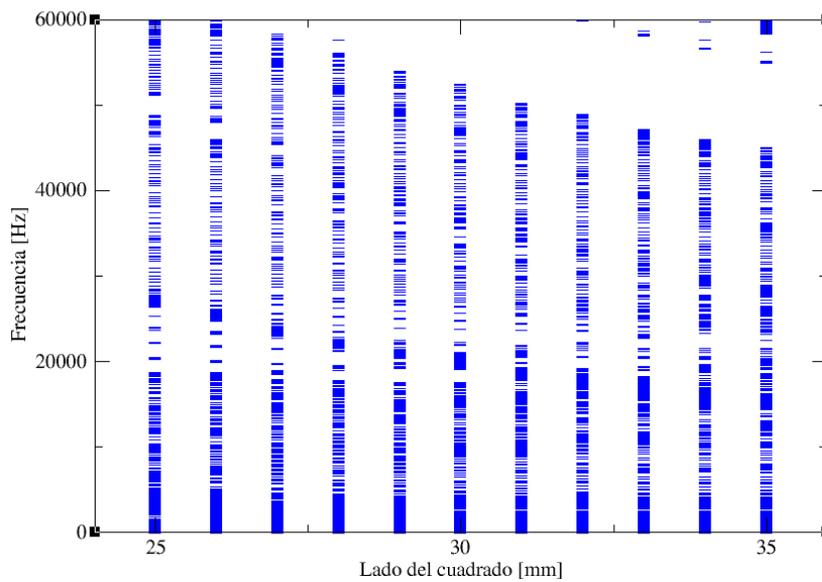


Figura 4.1. Espectro de frecuencia con respecto a la variación del lado del cuadrado de la celda unidad del sistema periódico

Para que las vibraciones de los resonadores estén conectadas débilmente entre ellas, y se gobiernen por el modelo de enlace fuerte, se necesita que sus frecuencias se encuentren aisladas del resto de las bandas, es decir deben estar localizadas dentro de una brecha, es decir una zona libre de otras frecuencias propias [2]. En la Figura 4.2 se tiene una visualización de los valores de frecuencia para la celda unidad del conector con medida de 35 mm de lado, hasta un máximo de frecuencia de 25 kHz.

En la Figura 4.3 se muestra un acercamiento a las frecuencias en un intervalo de 15-19 kHz. Como se puede ver, existen brechas prohibidas que pueden servir para aislar las frecuencias de los resonadores. Para que las frecuencias del sistema localmente

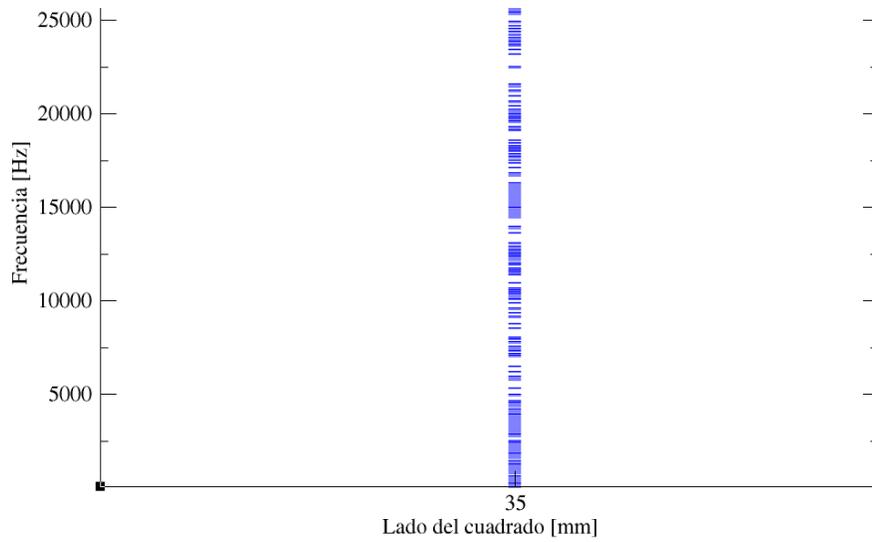


Figura 4.2. Valores de frecuencia propia en 35 mm de lado de la celda unidad

periódico estén separadas de las frecuencias de los resonadores se necesita una brecha con una dimension de 200 Hz como mínimo; en este caso ocurriría un acoplamiento evanescente entre resonadores, [2] y [14].

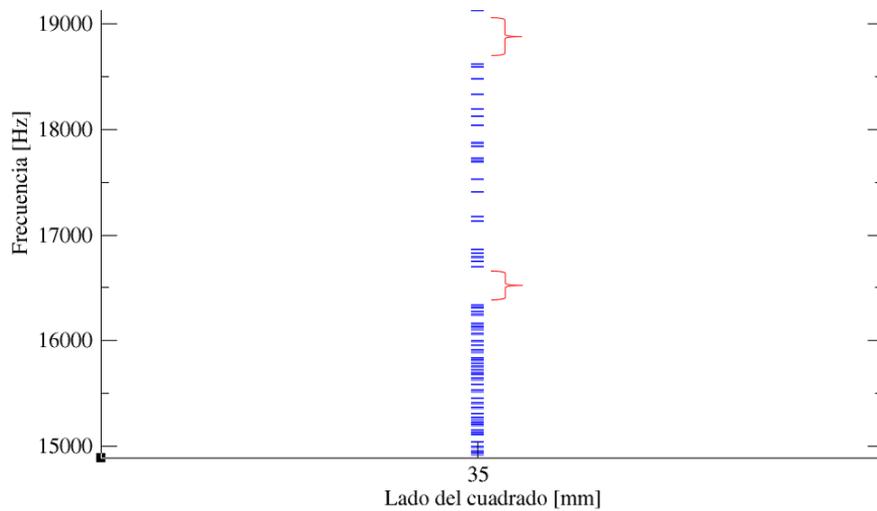


Figura 4.3. Brechas prohibidas encontradas en la placa de 3×3 con medida del lado de la celda unidad del conector de 35 mm

4.1.1. Estudio paramétrico de los resonadores en la placa de 3×3

Después de haber ubicado brechas de interés en el estudio de la placa localmente periódica, lo suficientemente anchas donde se puedan ubicar las frecuencias de los resonadores, aisladas de las demás bandas de frecuencia, se realiza un barrido paramétrico en la placa. Se hace una disminución del valor del lado de la celda resonante. Se inicia con una celda que tiene las mismas características de las celdas del sistema localmente periódico; lo único que las diferencia es la ubicación particular en la placa, la cual es precisamente en cada intersección o cruce entre celdas. Un acercamiento a las frecuencias obtenidas entre 15200 Hz y 19000 Hz se muestra en la Figura 4.4.

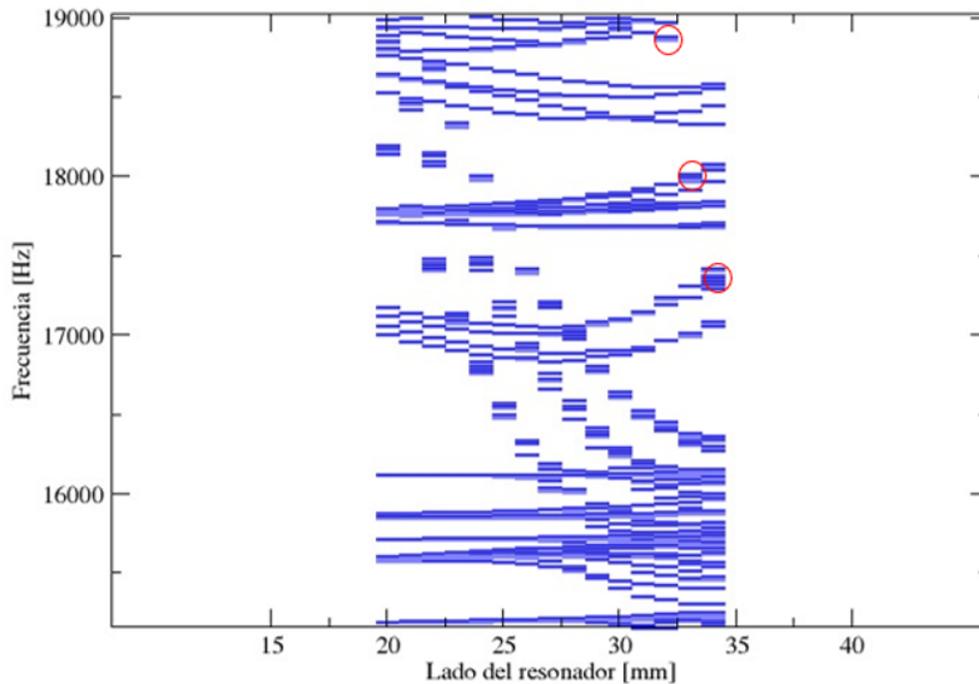


Figura 4.4. Variación del valor del lado del resonador cuadrado, de 20 mm a 34 mm

En el espectro a simple vista se pueden ver tres filas inclinadas hacia la izquierda de grupos de frecuencia, que conforme aumenta el valor del lado del resonador los grupos reducen su valor de frecuencia. Sin embargo no son grupos de 9 resonancias sino de 6 resonancias, el tipo de vibración es diferente a lo que se espera desde un principio, es así que no corresponden a bandas que se rijan por el modelo de enlace fuerte. Entre las

frecuencias calculadas se observa la banda deseada, que también baja al aumentar el lado del resonador, y que corresponde a las vibraciones de los resonadores en 34 mm, con ubicación por arriba de 17 kHz aproximadamente. Esta banda se encierra en el círculo rojo. De ahí se parte para encontrar una línea de predicción de la ubicación de las frecuencias que pertenecen a los resonadores, ver Figura 4.5. En las figuras previas el barrido paramétrico se hizo con un paso de 1 mm.

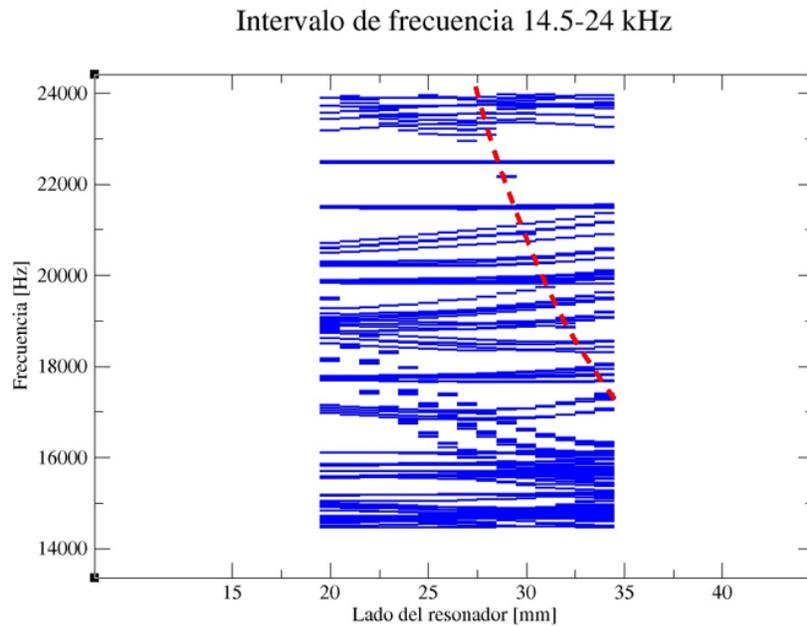


Figura 4.5. Espectro donde se muestra una línea de trazos que indica la localización de las frecuencias de los resonadores

En la Figura 4.6a se observan las vibraciones localizadas en los resonadores, desde 16705 hasta 16863 Hertz, para 35 mm de lado del resonador, donde dichas dimensiones coinciden con las de la celda conectora. Aunque a simple vista parecen 5 niveles, en realidad son 9 niveles de frecuencia y muestran un arreglo particular de interés para esta tesis: dos singuletes en los extremos, un triplete al centro y los dos restantes son dobletes.

Los modos de vibraciones correspondientes a las frecuencias de los resonadores se presentan la Figura 4.6b. Como se puede ver, las vibraciones están localizadas en los resonadores. Este tipo de vibraciones son de interés para esta tesis ya que se rijen por el modelo de enlace fuerte del estado sólido.

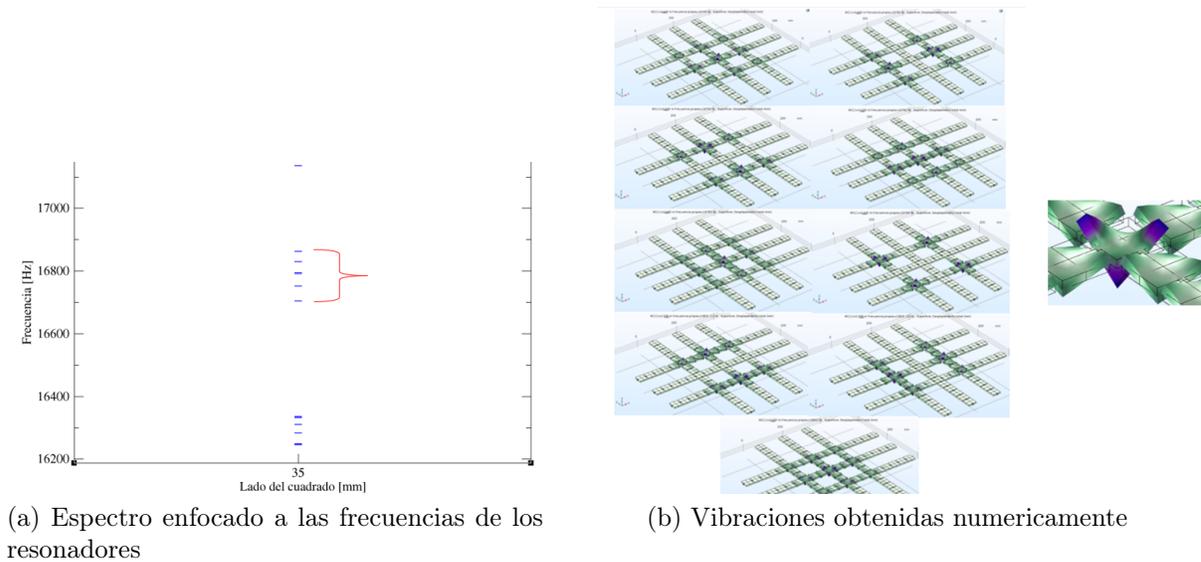


Figura 4.6. Resonadores encontrados en 35 mm

Para ubicarlos de manera mas detallada, se realiza un estudio con un paso más fino, de 0.1 mm en un intervalo de frecuencia de 17-19 kHz. En la Figura 4.7 se observan los grupos de resonancias buscadas que bajan al aumentar el lado del resonador, entre las demás bandas de frecuencia que suben o se mantienen constantes.

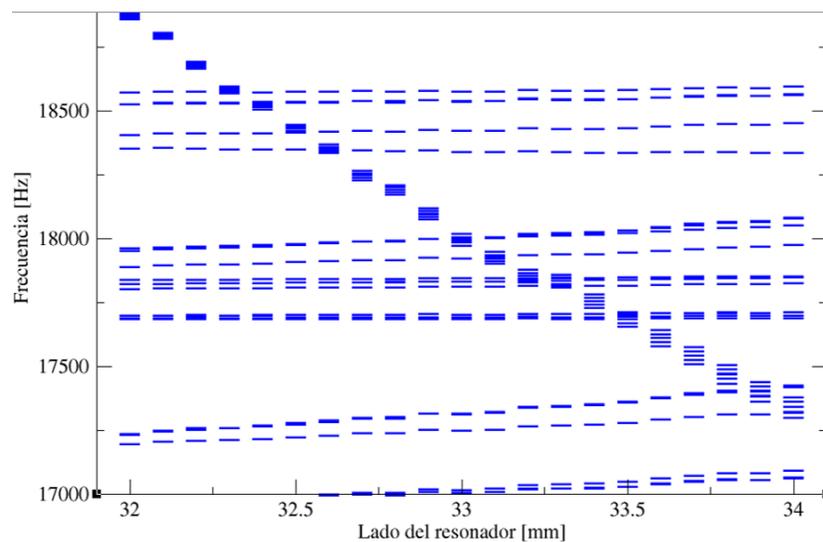


Figura 4.7. Frecuencias resonantes en una variación que va desde 32 mm a 34 mm de lado del resonador.

Como se puede observar en la imagen, mientras que las bandas de frecuencia de los resonadores caen conforme aumenta el tamaño del resonador, algunas bandas se van

ubicando en las brechas prohibidas, teniendo así las bandas buscadas dentro de las brechas. Entre más alta sea la frecuencia, los valores entre bandas en cada grupo, también llamado paquete, se van acercando más entre ellas y serían difícil de medir y distinguir si se llevara a cabo un estudio experimental posteriormente. Se hace mas factible utilizar un grupo de frecuencias mas bajas. Para esto se elije un grupo de frecuencias en el intervalo de 17400 Hz a 17600 Hz, aproximadamente. Como elección se toma el valor de 33.7 mm. En la Figura 4.8 se tiene un acercamiento sólo a este grupo de frecuencias en el espectro.

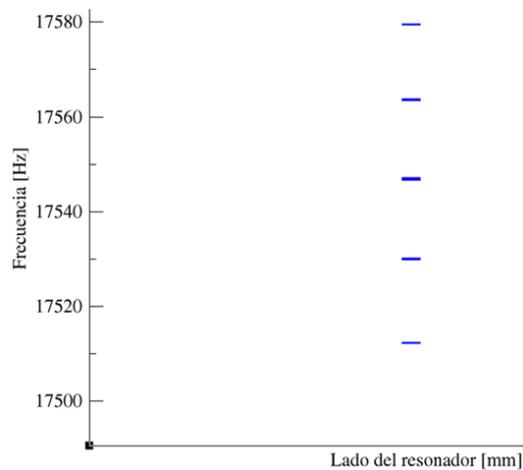


Figura 4.8. Grupo de frecuencias correspondiente a las resonancias con valor de 33.7 mm de lado de los resonadores.

A simple vista se distinguen 5 frecuencias pero sólo el primer y el último nivel son singuletes. De los estudios se obtuvo que estas frecuencias propias siguen el siguiente patron comenzando de alguno de los extremos: singulete, doblete, triplete, doblete y singulete, es decir, en total son 9 modos de vibrar donde es representativo este tipo de vibración. Hay una diferencia de 70 Hz entre el valor más alto de frecuencia y el más bajo. Las frecuencias de vibración obtenidas se muestran en la Tabla 4.1. La forma de vibrar de los modos se muestra desde la Figura. 4.9 hasta la Figura. 4.17. Las vibraciones mostradas en esas figuras están atrapadas o localizadas en el resonador y sus frecuencias están separadas de las demás frecuencias de vibración. Como se puede ver es una forma de vibrar fuera del plano y muestra una deformacion flexional donde hay flujo de poca energia hacia las celdas conectoras. La distribución obtenida de los

niveles de frecuencia presentan el arreglo teórico predicho por el modelo de enlace fuerte y están lo suficientemente separados entre sí para poder ser identificados por algún método experimental.

Tabla 4.1. Tabla del grupo de frecuencias de los resonadores.

No. frecuencia	Frecuencia (Hz)	Tipo de frecuencia
1	17.512	singlete
2	17.53 (1)	doblete
3	17.53 (2)	doblete
4	17.547 (1)	tripleto
5	17.547 (2)	tripleto
6	17.547 (3)	tripleto
7	17.564 (1)	doblete
8	17.564 (2)	doblete
9	17.58	singlete

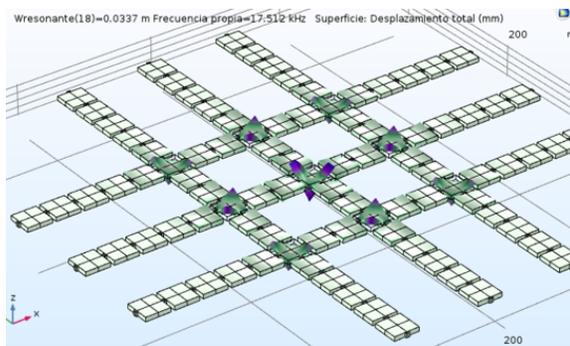


Figura 4.9. 1er Singlete:17.512 kHz

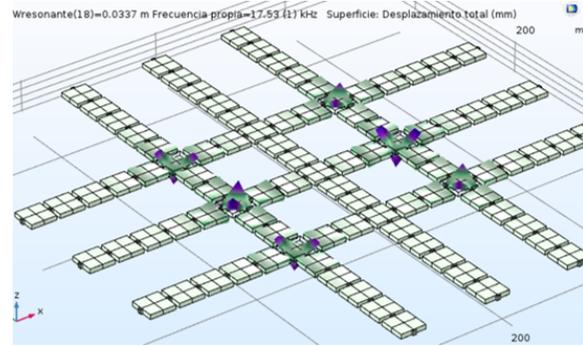


Figura 4.10. 1er Doblete: 17.53(1)

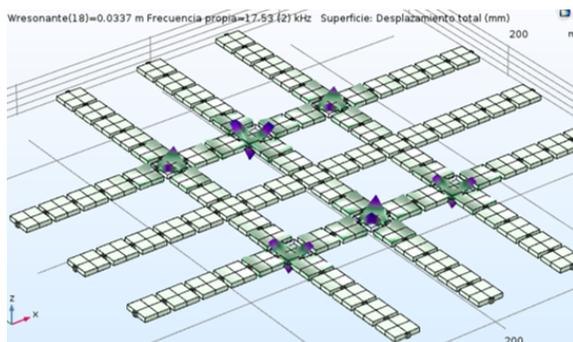


Figura 4.11. 1er Doblete: 17.53(2)

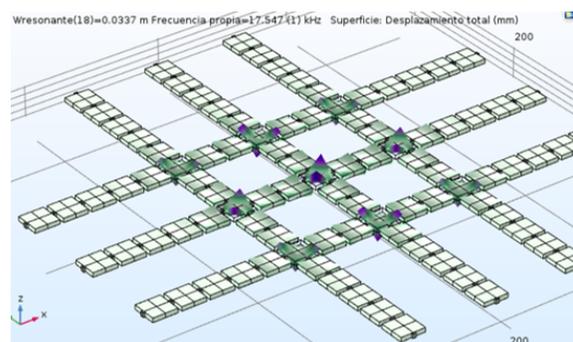


Figura 4.12. 1er Triplete: 17.547(1)

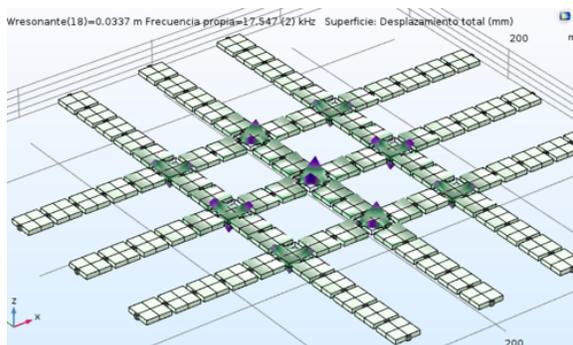


Figura 4.13. 1er Triplete: 17.547(2)

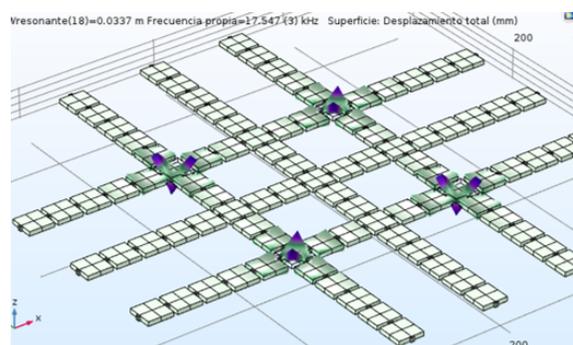


Figura 4.14. 1er Triplete: 17.547(3)

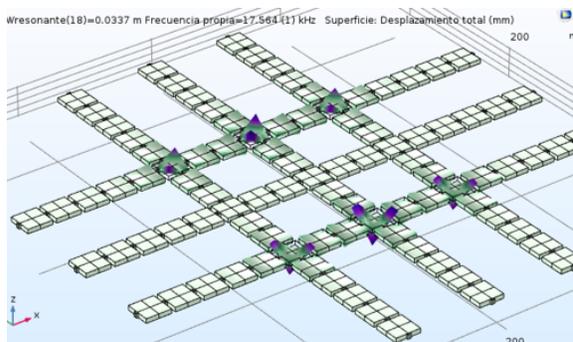


Figura 4.15. 2do Doplete: 17.564(1)

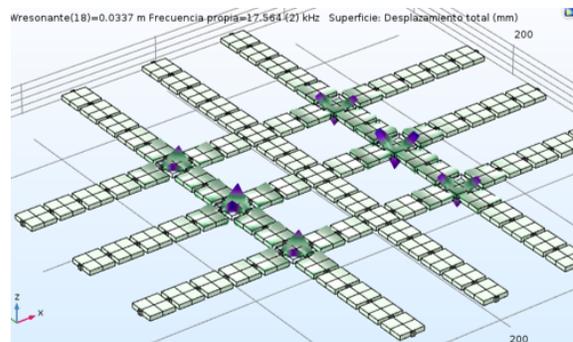


Figura 4.16. 2do Doplete: 17.564(2)

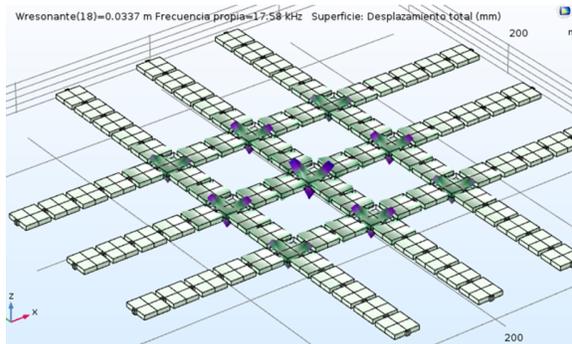


Figura 4.17. 2do Singulete: 17.58

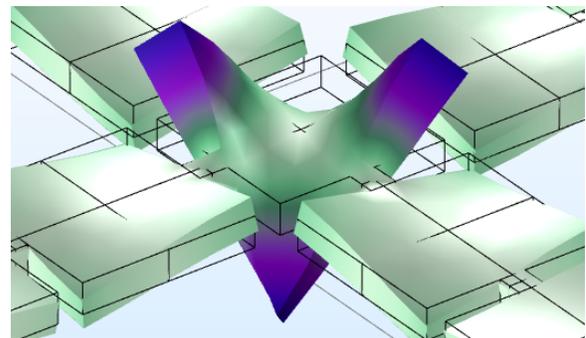


Figura 4.18. Vibracion de los resonadores

4.2. Análisis numérico considerando condiciones de periodicidad

Después de la obtención del resultado anterior, el grupo de frecuencias de los resonadores dentro de una brecha prohibida, se prosigue a modificar la estructura de la placa para encontrar una brecha prohibida de mayor dimensión y así poder aislar un mayor número de átomos artificiales, para lo cual desde un inicio se considera un análisis de la celda unidad así como de la super celda, estudios que toman en cuenta condiciones periódicas de Floquet.

4.2.1. Estudio de la zona irreducible de Brillouin del conector

Después de haber realizado el estudio finito de la placa (sistema periódico y resonadores), se realiza el estudio del conector en la zona irreducible de Brillouin. Este permite analizar el conector como si fuera replicado infinitamente en el espacio. En este caso, debido a que las celdas del conector están dispuestas en un arreglo unidireccional, se puede decir que el sistema se estará replicando infinitamente en una sola dimensión. El resultado del estudio de la celda unidad del conector se da en la Figura 4.19.

Como se puede observar hay tres brechas prohibidas pequeñas en 14, 19 y 25 kHz aprox. y una brecha visiblemente más amplia en 50 kHz. A partir de esto se hacen modificaciones respecto a los parámetros de la celda unidad, con la intención de que aparezca una brecha prohibida en una zona más baja de frecuencia, el resultado espectral se da en la Figura 4.20.

Como se puede observar en la imagen se abre una brecha energética entre los 23 kHz y los 31 kHz. Esta brecha es útil para poder aislar frecuencias resonantes en ese intervalo de frecuencias, sobre todo si se quiere ampliar el estudio incluyendo más átomos artificiales.

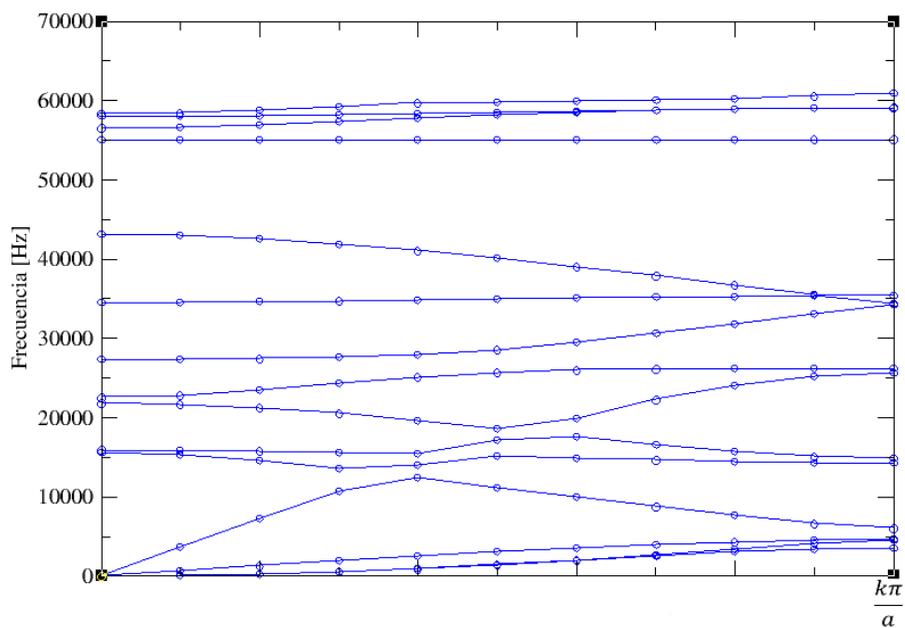


Figura 4.19. Estudio de la celda conectora, en placa con grosor de 6.05 mm

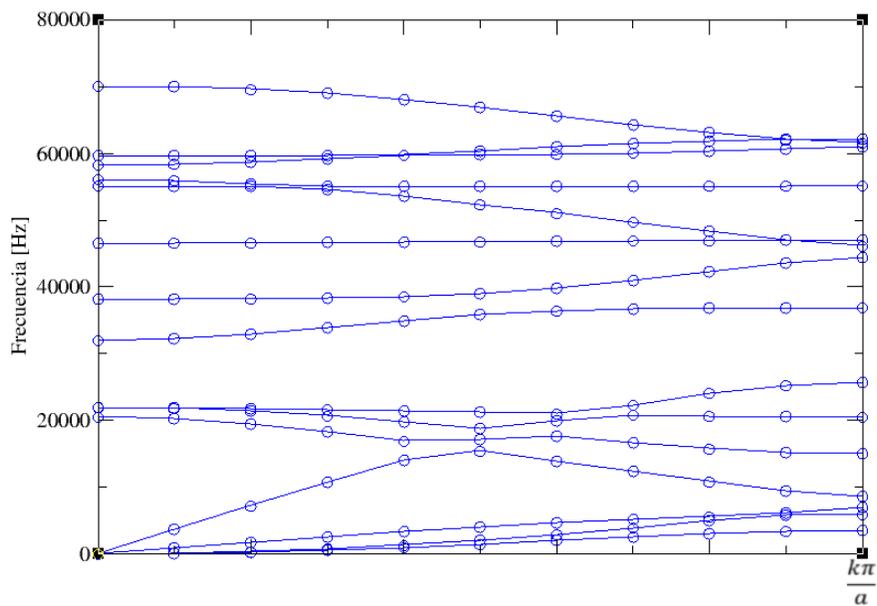


Figura 4.20. Estudio de la celda conectora, en placa con grosor de 9.535 mm

4.2.2. Estudio de la zona irreducible de Brillouin de la supercelda

A partir de la visualización de la brecha de los resultados de la celda conectora, se procede a realizar un estudio en la supercelda. Esto con la intención de encontrar la frecuencia correspondiente al modo localizado en el resonador y llevar su frecuencia a la brecha que va de 23 kHz a 31 kHz. En la Figura 4.21 podemos observar el espectro de la supercelda, donde el modo de vibración buscado se encuentra en 22527 Hz. Con la ayuda de COMSOL se comprobó que a esta frecuencia se tiene el modo de vibrar buscado. Desafortunadamente este banda se encuentra muy cerca de otras bandas permitidas. Para que la frecuencia se ubique en la zona de la brecha prohibida de 30 kHz se disminuye el tamaño del resonador para aumentar su frecuencia natural. A partir de varios estudios de frecuencia propia se logra aislar el modo de vibración en la brecha energética de 30 kHz. En la Figura 4.22 se puede observar el espectro cuando el valor del lado del cuadrado es de 29 mm y con la ubicación del modo de vibrar en 29838 Hz.

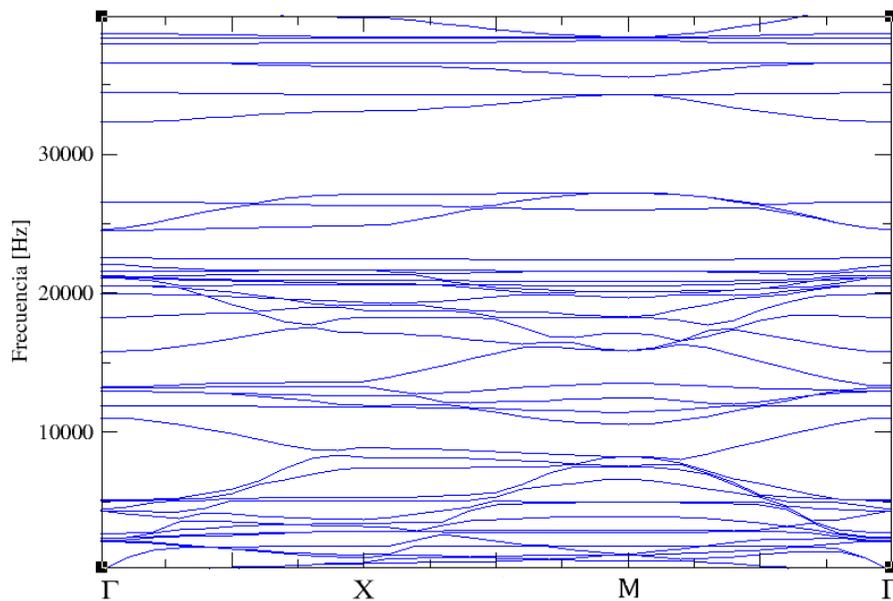


Figura 4.21. Banda de frecuencia del resonador con modo de vibrar fuera del plano, encontrado en 22527 Hz

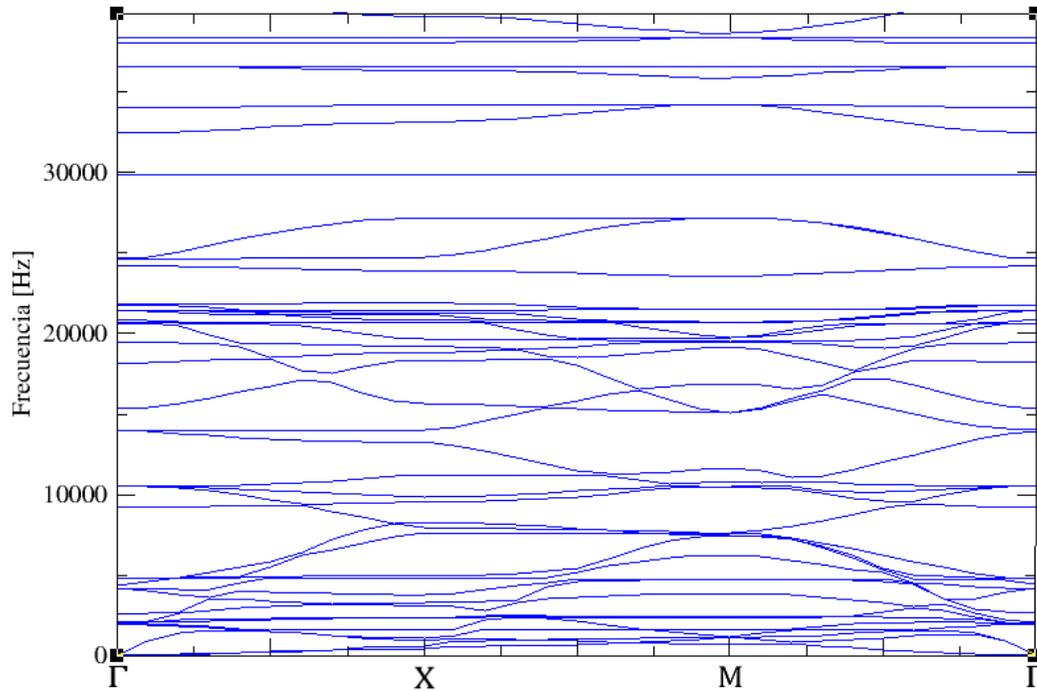


Figura 4.22. Banda de frecuencia subida de 22527 Hz a 29838 Hz

4.2.3. Nuevos estudios de la placa de 3×3

Después de haber realizado el estudio a la celda conectora y la super celda en su zona irreducible de Brillouin se efectúa un estudio de frecuencia propia a la placa finita de 9 átomos artificiales, con las medidas definidas del análisis que se hizo de los estudios con condiciones de periodicidad. Los cambios en el valor de los parámetros después de los estudios con periodicidad de Floquet son: grosor de 6.05 a 9.525 mm y lado del cuadrado del resonador de 29 mm.

En la Figura 4.23 se muestra el grupo de frecuencias obtenido con los nuevos parámetros, las frecuencias están centradas, con tendencia hacia arriba, en una brecha de energía de 27 kHz a 31 kHz pero además estas bandas están demasiado juntas entre ellas, estando 3 frecuencias propias en 29777 Hz y 6 frecuencias propias en 29778 Hz. Al tener sólo dos valores de frecuencia con 3 y 6 modos de vibrar se realizan modificaciones para poder separar las 9 frecuencias del grupo de resonancias entre sí hasta lograr el patrón de orbitales artificiales dictado por el modelo de enlace fuerte para la

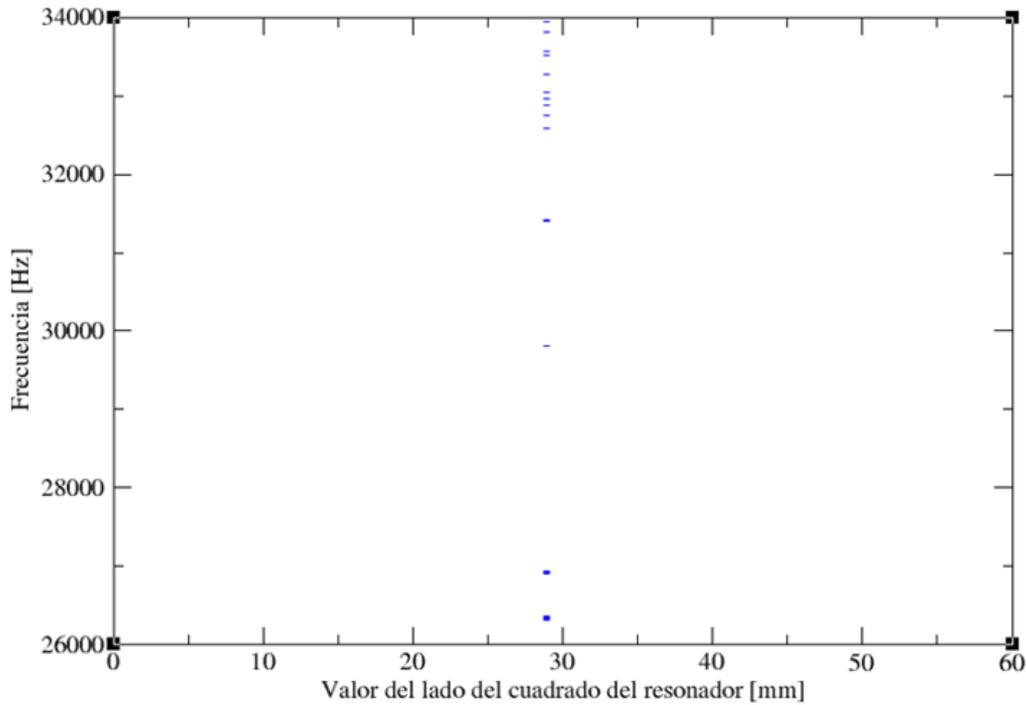


Figura 4.23. Espectro de frecuencia del grupo aislado

placa de 3×3 . La primera modificación a considerar es aumentar el valor del ancho de los conectores, para ello se realiza un barrido de 5 mm a 8 mm. El resultado del espectro obtenido se muestra en la Figura 4.24.

Al realizar el barrido paramétrico la distribución de los niveles arroja el mismo que el del modelo de enlace fuerte, a partir de los 6 mm de valor del ancho de los conectores; entre más grande es el valor del ancho, hay mayor separación entre frecuencias. Se elige el valor del ancho del conector de 8 mm, ya que si llega a ser medido experimentalmente se podrían distinguir una banda respecto de otra del mismo grupo de frecuencia. Como se puede observar en el espectro, el grupo de frecuencias de interés está ubicado cerca de las otras bandas de la estructura mecánica. Por ello se realiza un ajuste en el tamaño del resonador para centrar el grupo de frecuencias en la brecha energética. Para lograr esto se hace un barrido paramétrico variando el tamaño de la celda resonante de la supercelda. En la Figura 4.25 se muestra el espectro de frecuencias obtenida del barrido paramétrico. Como se puede ver en la figura el grupo

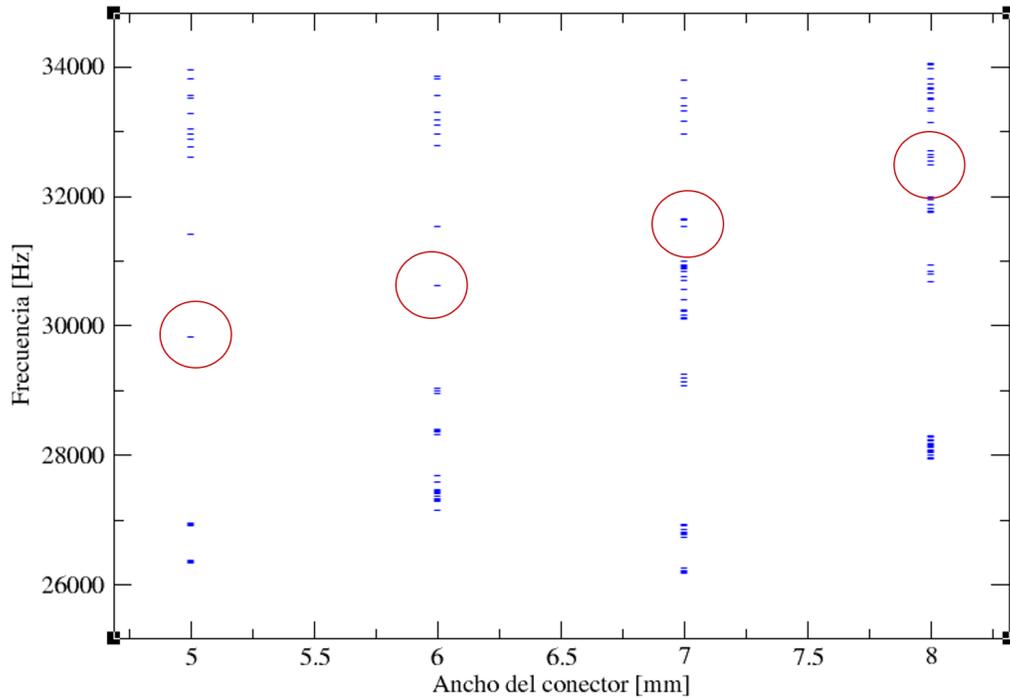


Figura 4.24. Barrido paramétrico del ancho del conector que va desde 5 a 8 mm, de paso de 1 mm.

de frecuencias queda centrado cuando el lado del resonador vale 31 mm, existiendo un espacio con las bandas de arriba y de abajo por 1 kHz aproximadamente. Aunque se redujo la brecha en la cual están localizadas las frecuencias de los átomos artificiales, en comparación con el estudio finito inmediato después de los estudios con periodicidad, aún así muestra un mejor resultado con respecto a la brecha obtenida al principio de este capítulo. Los resultados finales se dan en el apéndice.

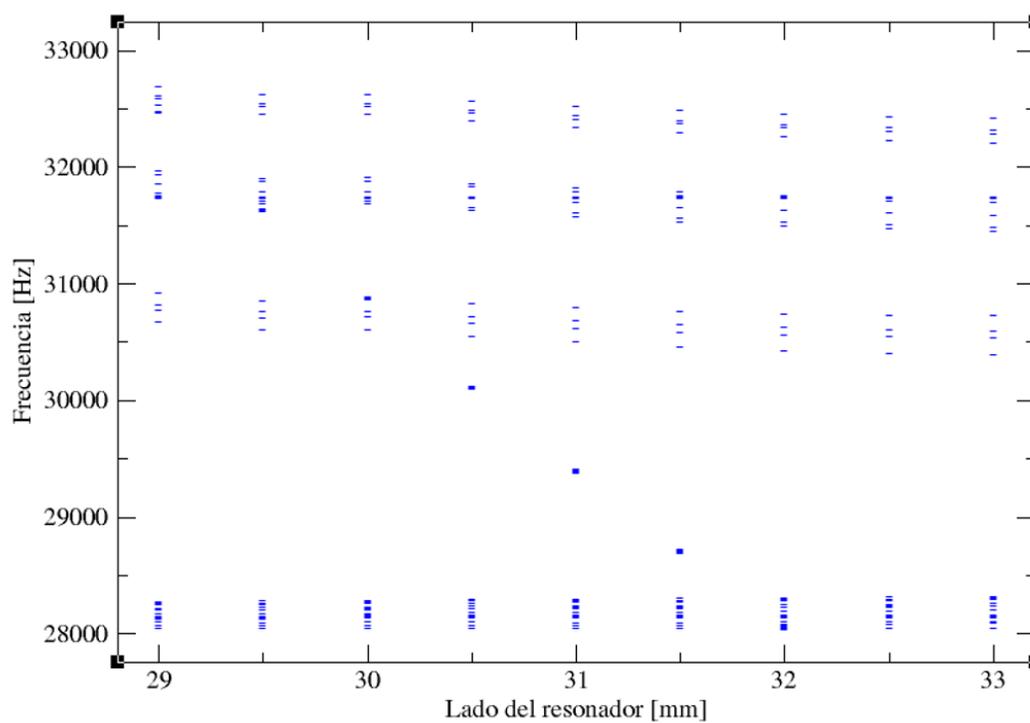


Figura 4.25. Barrido paramétrico en razón de la variación del tamaño del resonador.

Capítulo 5

Conclusiones y perspectivas

Con base en el trabajo realizado en esta tesis podemos concluir lo siguiente:

Usando el método de los elementos finitos se diseñó un cristal artificial elástico, en red cuadrada con una banda de frecuencias que se rige por el modelo de enlace fuerte. El cristal consiste en un conjunto de resonadores cuadrados unidos a través de acopladores, formados por cristales fonónicos finitos cuasi-unidimensionales. Ya que los acopladores son cristales fonónicos finitos, estos presentan bandas y brechas. Cuando la frecuencia de resonancia de los resonadores cae en la brecha de los acopladores, el acoplamiento con otros resonadores es evanescente a través de ondas de Bloch: las amplitudes de las resonancias son mayores en los resonadores y presentan un decaimiento exponencial en los conectores.

Se identificaron brechas prohibidas, donde poder alojar al grupo de frecuencias de los resonadores, en el espectro de frecuencia del sistema localmente periódico, de la placa con celda unidad cuadrada de 35 mm. de lado, por otra parte, se encontraron las bandas asociadas a las vibraciones de los resonadores, en el espectro de frecuencias de la variación del lado del resonador cuadrado de 20-34 mm.. A partir de esto, se plantearon diversos estudios para obtener un espectro que pueda ser medible en el laboratorio.

Se hallaron 3 grupos de frecuencias, uno de cada medida del lado del resonador en

32, 33 y 34 mm., y de ahí se partió para generar un estudio más preciso donde se hizo un acercamiento a detalle. Del estudio en detalle se lograron visualizar el grupo de frecuencias de resonancias teniendo una distribución que se rige por el modelo de enlace fuerte del estado sólido, es decir, de una orilla del espectro a otra se encuentran en el siguiente orden un singulete, un doblete, un triplete, un doblete y un singulete. La banda medible resultó en el orden de 17.5 kHz, los niveles de la banda están separados debidamente entre ellos y se ubican en una brecha de 200 Hz, lo que permitiría su desarrollo experimental. Con la intención de modificar la placa para incluir más resonadores, se optimiza la brecha prohibida gracias a un análisis infinito de la celda unidad del conector y de la supercelda, para lo cual se modificó el grosor de 6.05 mm a 9.525 mm, así se encontró una brecha de 4 kHz aprox. y la banda con el modo de vibrar deseado en 29.7 kHz, con los parámetros ajustados se analizó nuevamente la placa finita de 9 resonadores, debido a que faltaba tener el orden esperado de los modos de vibrar, y para eso se realizó un barrido en el pivote conector de 6 a 8 mm., logrando obtener un resultado óptimo en 8 mm. Se modificó por última vez el lado del resonador quedando de 31 mm. en la placa finita para finalmente ubicar un grupo de frecuencia en una brecha de rango de 28-30 kHz. aprox., un rango 10 veces más grande que la encontrada por primera vez. Los parámetros finalmente quedan: el lado del cuadrado del sistema localmente periódico es de 35 mm. con pivotes de 8 mm. de ancho, el lado del resonador de 31 mm. y un grosor de la placa de 9.535 mm.

Bibliografía

- [1] A. Martínez, M. Toledano, A. Terán, E. Flores, G. Báez, E. Sadurní y R. Méndez, “Molecular orbitals of an elastic artificial benzene”, *arXiv preprint arXiv:2108.12027*, 2021. doi: <https://arxiv.org/abs/2108.12027>
- [2] F. Ramírez, E. Flores, G. Báez, E. Sarduní y R. Méndez, “Emulating tightly bound electrons in crystalline solids using mechanical waves”, *Scientific Reports*, vol. 10, no. 1, pp. 1-7, 2020. doi: <https://doi.org/10.1038/s41598-020-67108-0>
- [3] F. Ramírez, “Construcción y caracterización de un cristal elástico”, tesis doctoral, Universidad Autónoma Metropolitana, 2021 [en línea]. Disponible en: <http://zaloamati.azc.uam.mx/handle/11191/7460> [Accedido: 21-may-2021]
- [4] E. Terán, “Diseño y construcción de una estructura mecánica que emule las propiedades electrónicas de una molécula diatómica”, tesis de licenciatura, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, 2020.
- [5] M. Toledano, “Caracterización experimental de una molécula artificial de benceno”, tesis de licenciatura, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, 2021.
- [6] “Halita, sal común, el cubo de la naturaleza”, *Matemolivares*, 10 de diciembre 2017. [En línea]. Disponible en: <http://matemolivares.blogia.com/2017/121002-halita-sal-comun-el-cubo-en-la-naturaleza..php> [Accedido: 07-jun-2019].
- [7] M. Alonso y E. J. Finn, *Física Vol. III Fundamentos cuánticos y estadísticos*, Washington D.C., USA: Fondo Educativo Interamericano, 1971.

- [8] M. E. Compean, “Estructura de bandas del Si y del SiO₂”, tesis de maestría, Instituto Politécnico Nacional Unidad Querétaro, 2004 [En línea]. Disponible en: <http://qro.cinvestav.mx/aherrera/tesisEstudiantes/tesisMarthaCompeanMaestria.pdf> . [Accedido: 02-feb-2020]
- [9] K. F. Graff, *Wave Motion in Elastic Solids*, Columbus, OH, USA: Dover Publications, 1991.
- [10] A. Morales, J. Flores, L. Gutiérrez y R.A. Méndez, “Compressional and torsional wave amplitudes in rods with periodic structures”, *The Journal of the Acoustical Society of America*, vol. 112, no. 5, pp. 1961-7, 2002. doi: <https://doi.org/10.1121/1.1509431>
- [11] A. Díaz, A. Pimentel, J. Flores, A. Morales, L. Gutierrez y R. A. Méndez, “Locally periodic Timoshenko rod: experiment and theory”, *Acoustical Society of America*, vol. 117, no. 5, pp. 2814–2819, 2005. doi: <https://doi.org/10.1121/1.1880732>
- [12] N. Elabbasi, “Modeling phononic band gap, materials and structures”, *COMSOL*, 10 de febrero 2016 [en línea]. Disponible en: <https://www.comsol.com/blogs/modeling-phononic-band-gap-materials-and-structures>. [Accedido: 09-jul-2020]
- [13] R. J. Montes, “Aplicación del programa comsol multiphysics en la ingeniería mecánica”, tesis de licenciatura, Universidad Tecnológica de Pereira, 2015 [en línea]. Disponible en: <https://repositorio.utp.edu.co/server/api/core/bitstreams/59a6e1c2-795d-472e-b666-541e431ee80c/content> [Accedido: 27-dic-2020]
- [14] J. López, G. Báez y R. A. Méndez, “Tight-binding model for torsional and compressional waves in high-quality coupled-resonator phononic metamaterials”, *Mechanics of Advanced Materials and Structures*, pp. 1-7, 2021. doi: <https://doi.org/10.1080/15376494.2021.1974989>
- [15] M.S. Kuswaha, P. Halevi, L. Dobsrinski y D. Jafari-Roumani, “Acoustic band structure of periodic elastic composites”, *Physical Review Letters*, vol. 71, no. 13,

- pp. 2022-2025, 1993. doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.71.2022>
- [16] C. Kittel, *Introducción a la física del estado sólido*, Barcelona, España: Reverté S.A., 2003.
- [17] A.P. French, *Vibrations and waves*, Nueva York, USA: Norton and Company INC, 1971.
- [18] B. Manjarrez, “Diseño de un metamaterial con velocidad de grupo cero”, tesis de licenciatura, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, 2020.
- [19] Y. Hernández, R. A. Méndez y E. Sadurní, “On the electronic structure of benzene of borazine: an algebraic description”, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 53, no. 10, p. 5101, 2020. doi: <https://doi.org/10.1088/1361-6455/ab7c3e>
- [20] M.L. Domínguez, R.M. Melgoza, L.O. Osornio y F.I. López, “Perspectivas de la Educación en Ingeniería en México”, *HYPATIA*, s.f. [en línea]. Disponible en: <https://www.revistahypatia.org/educacion-e-ingenieria.html>. [Accedido: 22-ene-2022]
- [21] A. Arreola, G. Báez, R. A. Méndez, A. Climente, F. Cervera, J. Sánchez, “Bloch oscillation in mechanical vibration”, *2018 Progress in Electromagnetics Research Symposium (PIERS-Toyama)*, pp. 2399-2404, 2018. doi: 10.23919/PIERS.2018.8598024.
- [22] F. Ramírez, R. A. Méndez, G. Báez, A. Morales, L. Gutiérrez, J. Flores, “Emulating tunneling with elastic vibrating beams”, *2018 Progress in Electromagnetics Research Symposium (PIERS-Toyama)*, pp. 410-413, 2018. doi: 10.23919/PIERS.2018.8597751.

Apéndice A

Resultados finales de las vibraciones en la placa de 3 por 3 celdas

A continuación se muestra los valores de frecuencia correspondiente a los resonadores en la placa, de acuerdo a los resultados del último estudio (sección 4.2.3):

Tabla A.1. Grupo de frecuencias perteneciente a los 9 resonadores.

No. frecuencia	Frecuencia (kHz)	Tipo de frecuencia
1	29.35	singulete
2	29.357 (1)	doblete
3	29.357 (2)	doblete
4	29.365 (1)	triplete
5	29.365 (2)	triplete
6	29.365 (3)	triplete
7	29.372 (1)	doblete
8	29.372 (2)	doblete
9	29.379	singulete

Los valores de los parámetros de la placa finalmente quedan como se muestra en la tabla A.2.

Tabla A.2. Valor final de los parámetros, que fueron modificados para obtener los resultados finales.

Parámetro.	Longitud (mm).
Lado del resonador	31
Lado del conector	35
Ancho del pivote del conector	8
Grosor de la placa	9.525

A.1. Grupo de frecuencias

En la figura A.1 se muestra finalmente el espectro de los valores del grupo de frecuencias correspondiente a los resonadores en la placa (tabla A.1):

A.2. Modos de vibrar

En la siguiente serie de figuras, (A.2-A.10), se muestran los modos de vibrar de los resonadores en la placa, de la frecuencias más baja a la más alta:

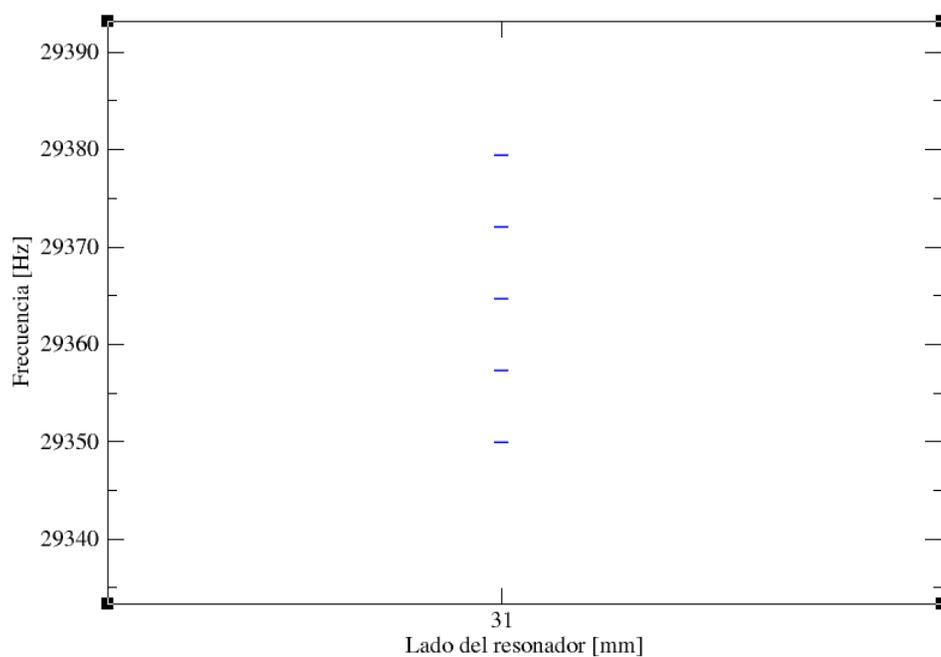


Figura A.1. Grupo de frecuencias con una diferencia de 29 Hz entre el valor de la frecuencia más baja y la más alta. Desde la frecuencia más baja hacia arriba: entre el primer singulete y el primer doblete existe un espacio de 7 Hz, entre el primer doblete y el triplete 8 Hz, entre el triplete y el segundo doblete 7 Hz y entre éste último y el segundo singulete también 7 Hz. La brecha energética existente entre la frecuencia más alta del grupo de frecuencias y la energía de las otras bandas es de 1081 Hz, y la de la frecuencia más baja y la energía de las otras bandas es de 1094 Hz.

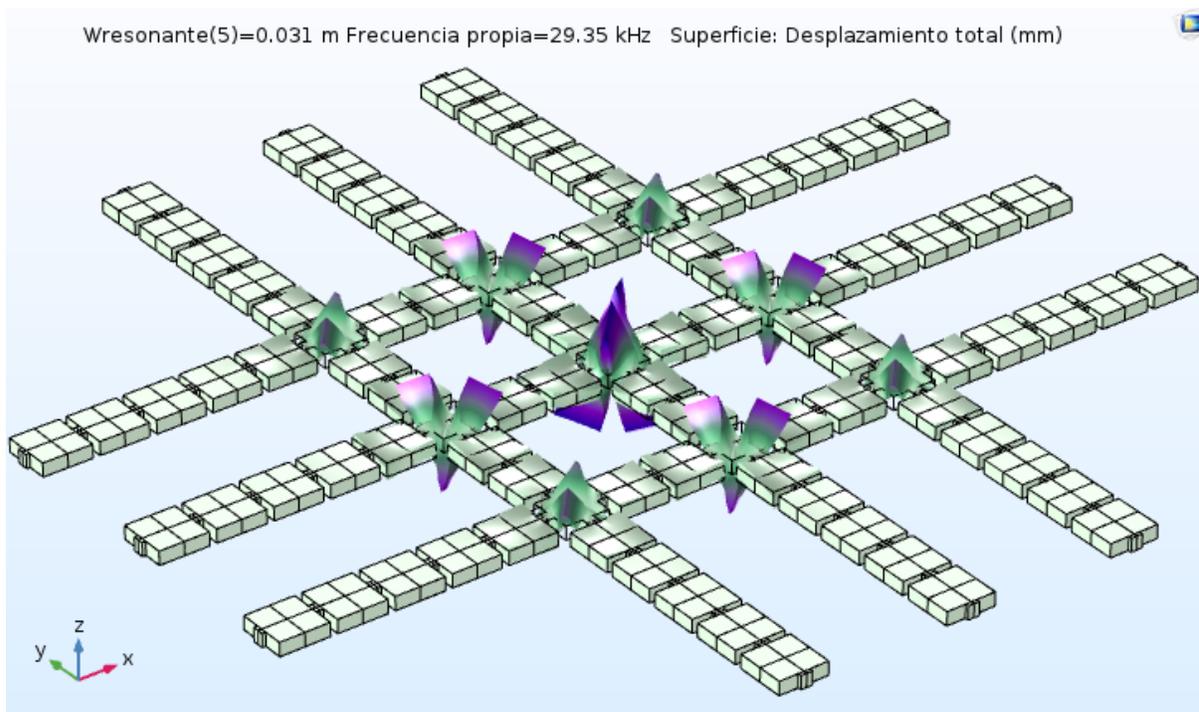


Figura A.2. Frecuencia 29350 Hz

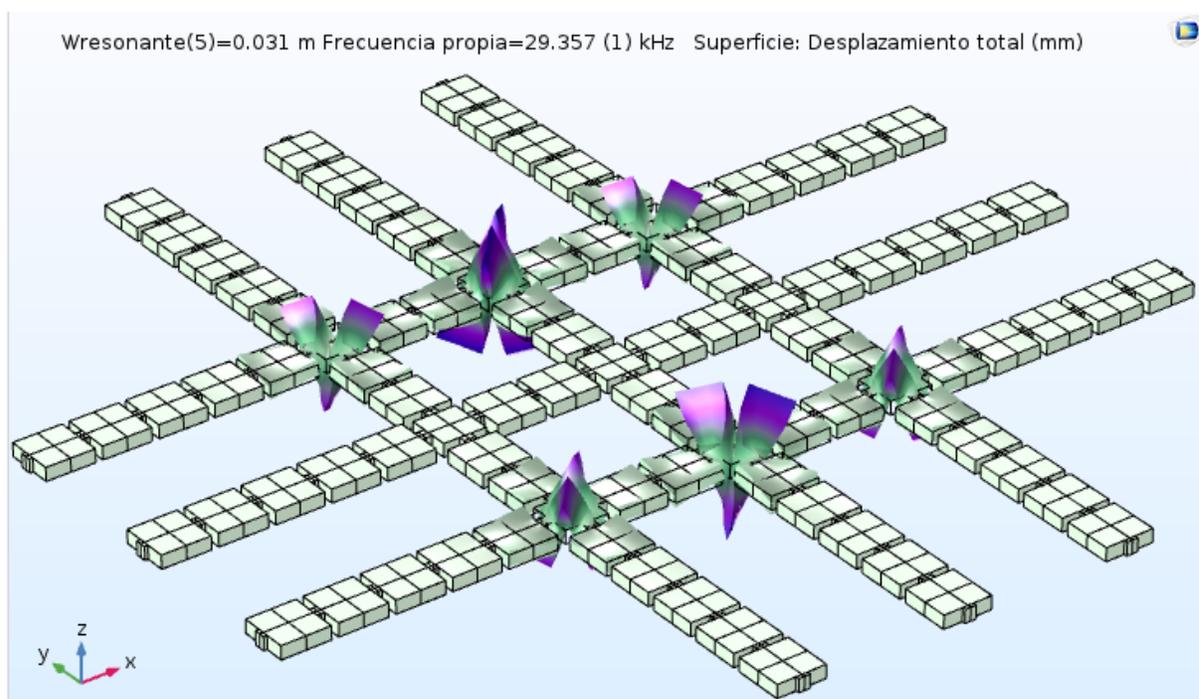


Figura A.3. Frecuencia 29357 (1) Hz

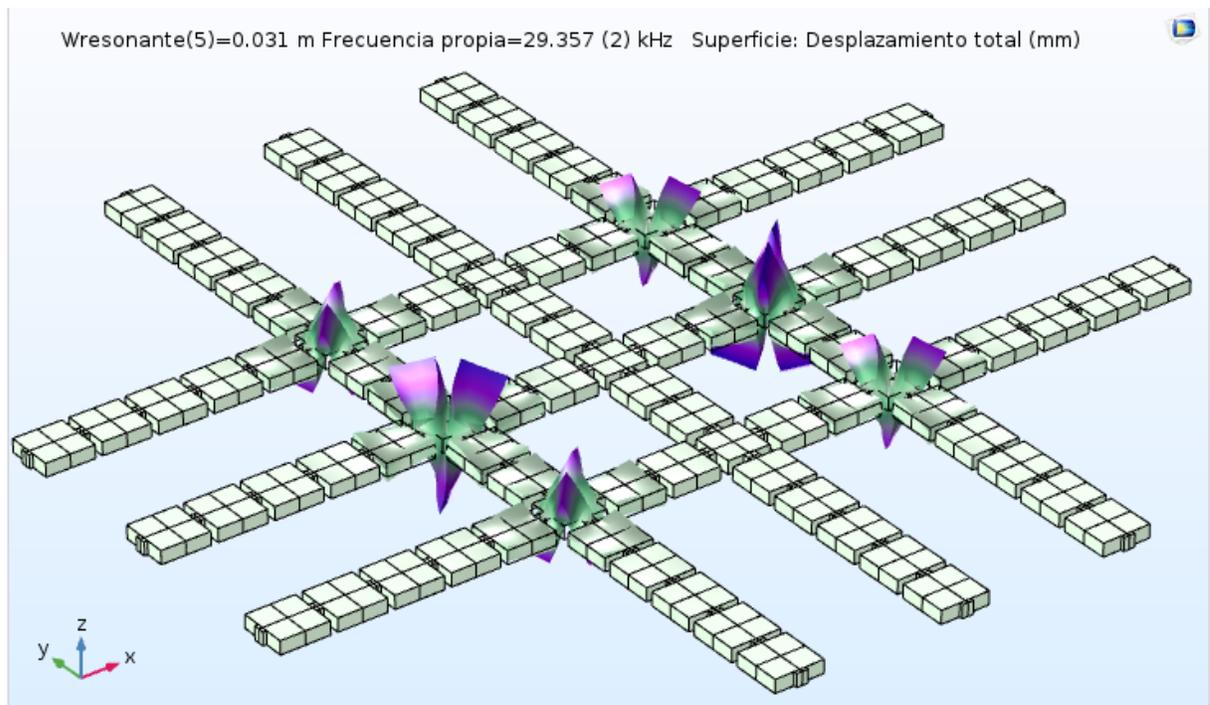


Figura A.4. Frecuencia 29357 (2) Hz

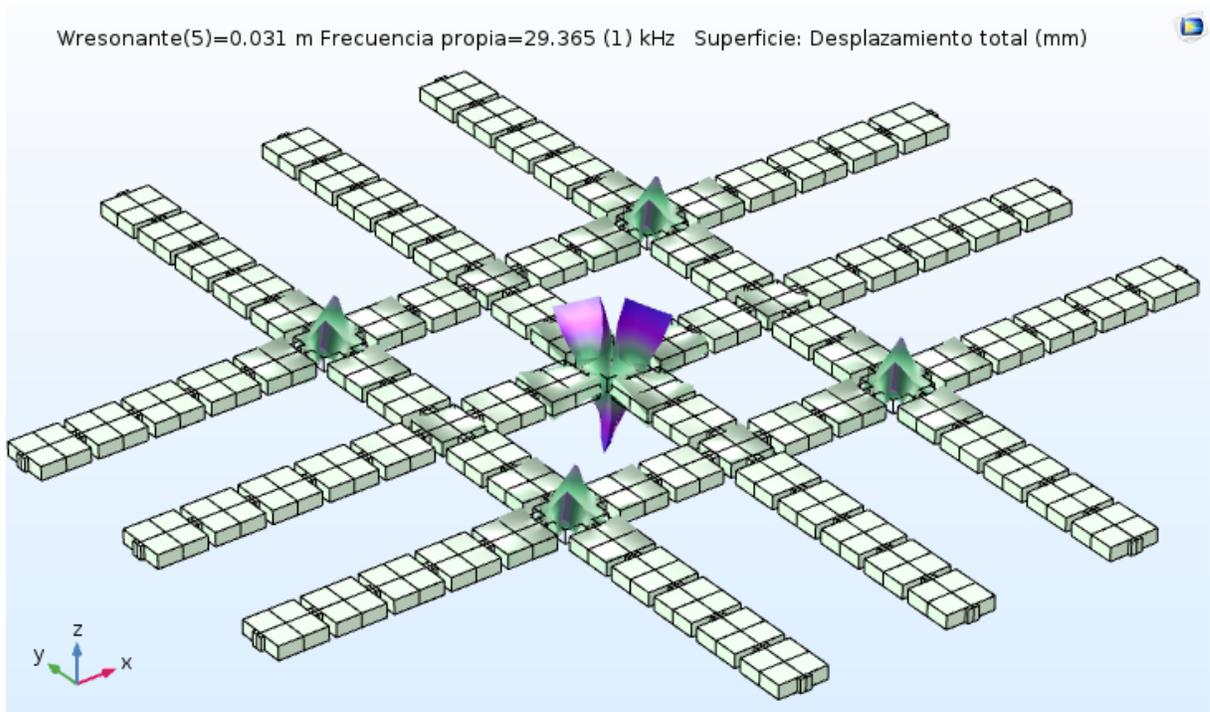


Figura A.5. Frecuencia 29365 (1) Hz

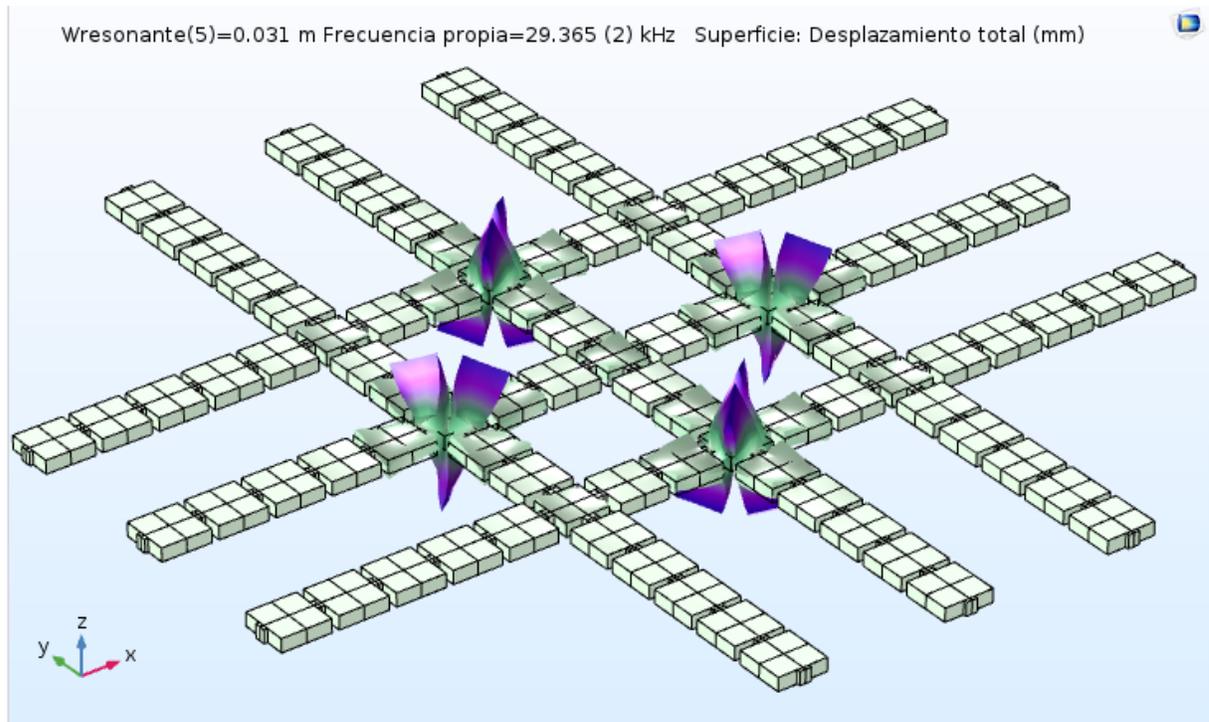


Figura A.6. Frecuencia 29365 (2) Hz

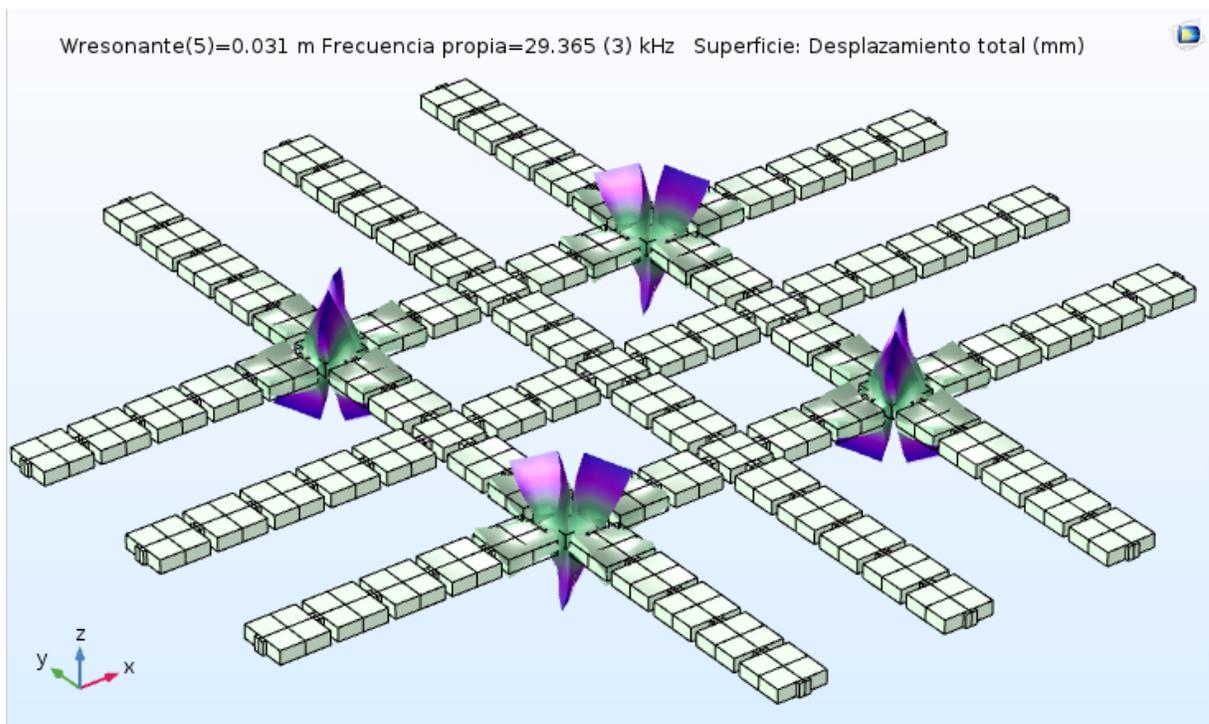


Figura A.7. Frecuencia 29365 (3) Hz

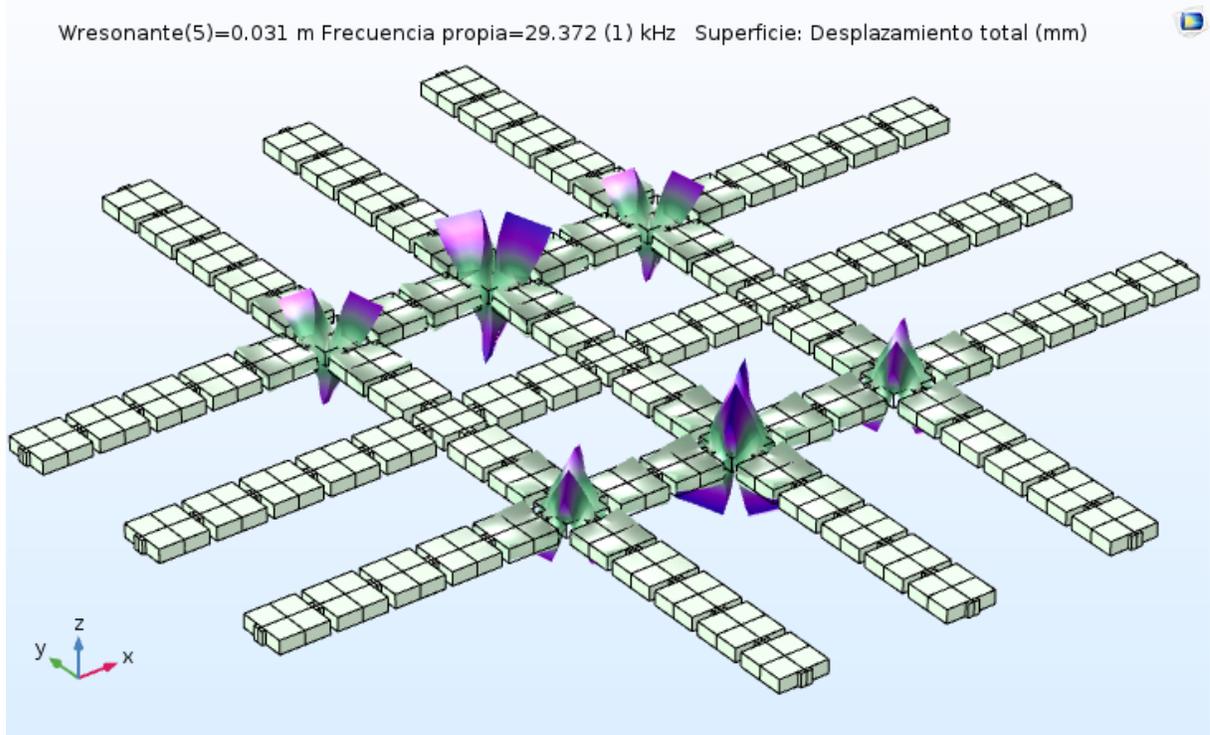


Figura A.8. Frecuencia 29372 (1) Hz

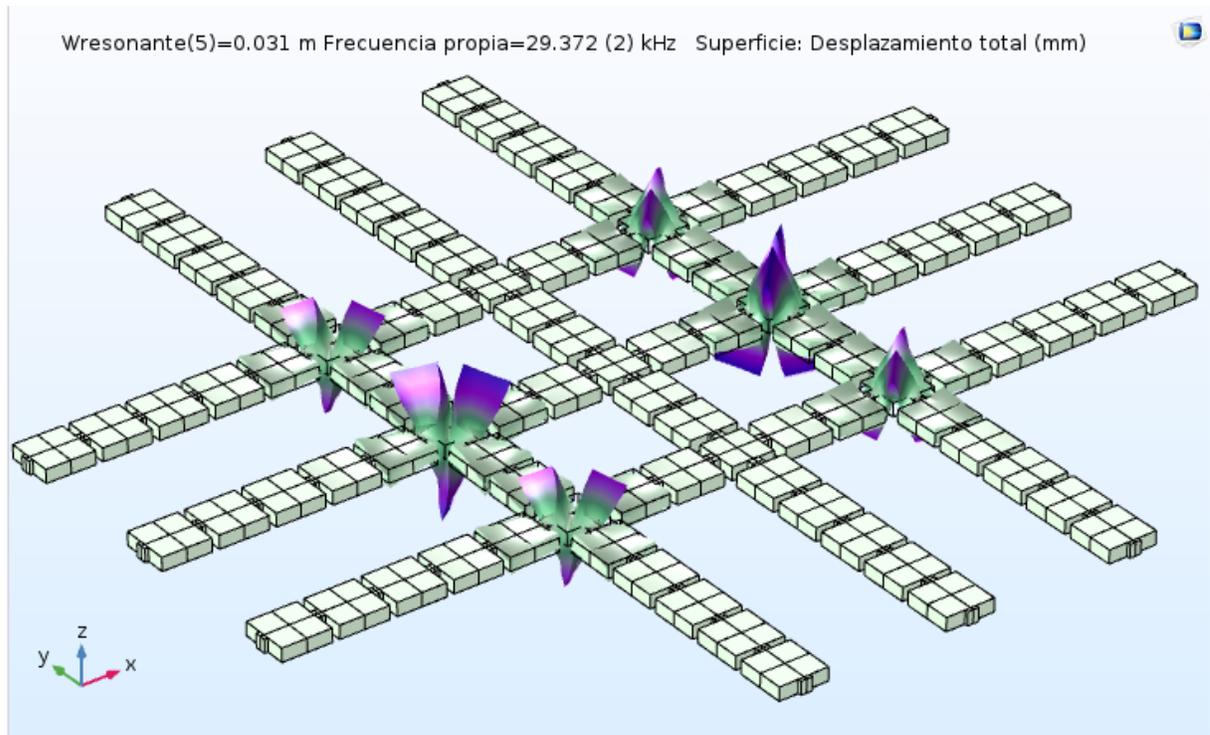


Figura A.9. Frecuencia 29372 (2) Hz

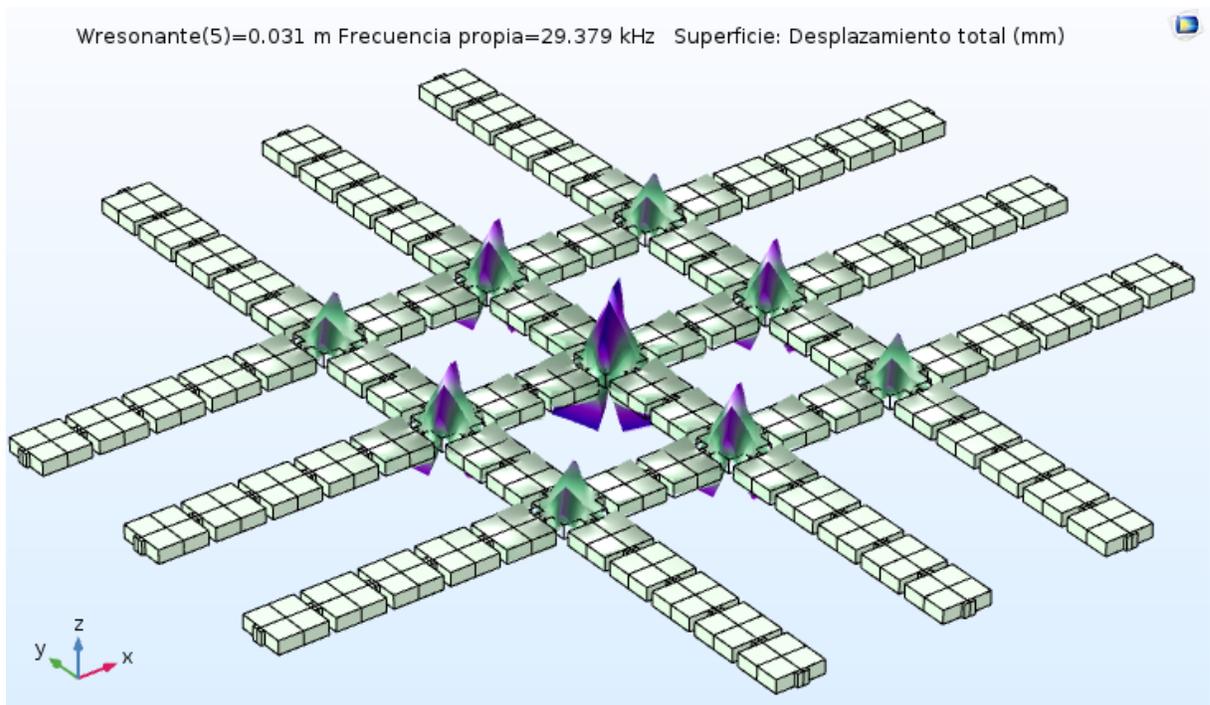


Figura A.10. Frecuencia 29379 Hz