



**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL  
ESTADO DE MÉXICO**



**FACULTAD DE CIENCIAS**

**DISEÑO DE CRISTALES FONÓNICOS CONTENIENDO  
DEFECTOS LOCALES PARA LA TRANSMISIÓN  
CONTROLADA DE ONDAS DE ULTRASONIDO**

**MODALIDAD**

(TESIS POR ARTICULOS ESPECIALIZADOS)

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

DOCTOR EN CIENCIAS

P R E S E N T A:

M. en C. de M. DAVID MARTÍNEZ ESQUIVEL

DIRECTORES DE TESIS:

Dr. En C. DELFINO REYES CONTRERAS

Dr. En C. MIGUEL MAYORGA ROJAS

Dr. En C. ARUP NEOGI

TOLUCA, ESTADO DE MÉXICO

2023

# ÍNDICE GENERAL

1. Resumen.....	(4)
2. Introducción .....	(5)
3. Revisión Bibliográfica.....	(6)
3.1 Aspectos Generales... ..	(7)
3.2 Definición de Cristal Fonónico .....	(8)
3.3 Posibles Aplicaciones. ....	(11)
3.4 Modelo de Enlace Fuerte (Tight-Binding)...	(11)
3.4.1 Tight-Binding en Cristales Fonónicos...	(12)
3.5 COMSOL Multiphysics .....	(13)
3.6 Módulo de Acústica “Acoustic Module” .....	(14)
4. Planteamiento del Problema .....	(16)
5. Objetivos del Proyecto .....	(18)
5.1 Objetivo General .....	(18)
5.2 Objetivos Particulares.....	(18)
6. Descripción Metodológica.....	(20)
6.1 Diseño General de los Cristales Fonónicos.....	(21)
6.1.1 Efecto del Radio .....	(24)
6.1.2 Efecto de la Presencia de Defectos.....	(25)
6.1.3 Disposición Espacial Optimizada de Defectos .....	(26)
6.1.4 Factor de Calidad (Q) .....	(26)
6.2 Mallado.....	(28)
6.3 Interferómetro Acústico .....	(30)
6.3.1 Modelado .....	(30)
6.4 Tight Binding.....	(31)
6.4.1 Enfoque Matemático de la Matriz de Dispersión .....	(31)
7. Resultados y Discusión .....	(33)
7.1 Resumen del Artículo 1.....	(34)
Artículo 1 .....	(35)
7.2 Resumen del Artículo 2 .....	(44)
Artículo 2 .....	(45)
7.3 Conclusiones.....	(55)
8. Anexos.....	(56)
8.1 Anexo A: Descripción Metodológica .....	(56)
8.1.1 Demultiplexor .....	(56)
8.1.2 Demultiplexor sin Hidrogel .....	(56)
8.1.3 Demultiplexor con Hidrogel.....	(57)

8.1.4 Modelado del Efecto de la Temperatura sin Hidrogel .....	(58)
8.1.5 Hidrogel PNIPAm .....	(59)
8.1.6 Efecto de la Temperatura con Hidrogel .....	(60)
8.2 Anexo B: Resultados; Demultiplexor con y sin Hidrogel, Efecto de la Temperatura.....	(62)
8.2.1 Sin Hidrogel.....	(62)
8.2.2 Demultiplexor con Hidrogel poli (N-iospropilacrilamida).....	(64)
8.2.3 Análisis de la Guía de Ondas .....	(68)
8.2.3.1 Efecto del Número de Defectos .....	(68)
8.2.3.2 Efecto de la Temperatura.....	(69)
8.2.4 Simulaciones con Hidrogel.....	(73)
9. Referencias.....	(76)

## 1. RESUMEN

En la presente tesis, se describe el diseño, simulación, manufactura y caracterización experimental de diversos cristales fonónicos para demostrar la transmisión controlada de ondas de ultrasonido mediante defectos locales inducidos. Las estructuras fonónicas analizadas estuvieron conformadas por cilindros de acero inoxidable dispuestos periódicamente en una matriz de agua. Los cilindros, dispuestos cuadráticamente en un arreglo de 19 x 19 con un parámetro de red de 2mm, fueron de 1.6 mm de diámetro. Para el diseño y la simulación se utilizó la plataforma computacional COMSOL-*Multiphysics*, el proceso de manufactura en un centro de maquinado, mientras que la caracterización se hizo utilizando espectroscopía ultrasónica.

En este proyecto se analizaron tres formas de controlar la propagación de ondas de ultrasonido a través de estructuras fonónicas. La primera forma de controlar la propagación fue mediante la disposición espacial de los defectos dentro del cristal. Los defectos se generaron al extraer los cilindros metálicos en posiciones específicas, para construir guías de onda basadas en líneas de defectos, dispuestos de manera vertical, horizontal y diagonal, con respecto a la dirección de propagación. Las propiedades acústicas, de las tres configuraciones propuestas se compararon con el cristal perfecto (sin defectos), estudiando también los efectos de la variación del diámetro de los dispersores de acero inoxidable. Los resultados fueron correlacionados tanto teórica como experimentalmente. La segunda forma de demostrar fue a través de la construcción de interferómetros acústicos formados por líneas de defectos dispuestos horizontal, vertical o diagonalmente, inspirados en los resultados de la primera forma de distribución de los defectos. A través de ello, se demostró como la disposición espacial de los defectos afecta la propagación de ondas acústicas, siendo una propagación restringida a un intervalo de frecuencias en el caso de disposiciones diagonales, en comparación de las horizontales.

La tercera forma controlar la propagación de ondas acústica a través del cristal fue mediante la construcción de un demultiplexor acústico de dos brazos asimétricos, conformado también por defectos. Aquí, también se analizó el caso en el que los defectos están conformados por un sistema hidrogel termosensible base Poli-N-Isopropilacrilamida, PNIPAM, cuyas propiedades acústicas dependen de la temperatura. Para este caso, la transmisión acústica se analizó a 20, 30 y 40°C, en el caso en el que los defectos son de agua, así como cuando contienen el sistema PNIPAM. Los resultados mostraron el efecto de la temperatura en la transmisión acústica, y cómo esta se vuelve selectiva y modulable con la presencia del sistema hidrogel.

## 2. INTRODUCCIÓN

El objetivo del presente proyecto de investigación doctoral estuvo centrado en el diseño de cristales fonónicos para demostrar una transmisión controlada de ondas de ultrasonido mediante la inducción de defectos locales. Para este propósito, se utilizó la plataforma COMSOL-Multiphysics para el diseño y simulación de los cristales fonónicos y espectroscopía ultrasónica para su caracterización experimental. Un cristal fonónico se define como una estructura compuesta por dispersores de sonido inmersos periódicamente en una matriz de un material diferente. Una de las características distintivas de los cristales fonónicos es el amplio contraste entre la velocidad del sonido y la densidad de sus componentes (dispersores y matriz), lo que origina la formación de estructuras de bandas. Esta variación conduce a una distribución periódica de la densidad o velocidad del sonido en el espacio, lo que provoca perturbaciones periódicas en la propagación de una onda a través del cristal [1, 2]. Cuando las ondas interactúan con un cristal fonónico, algunas pueden propagarse a través de él mientras que otras no, lo que permite diseñar cristales fonónicos que permitan o inhiban la propagación de ondas en un intervalo de frecuencias deseado. Las ondas dentro del intervalo de frecuencias que no pueden propagarse a través del cristal forman lo que se conoce como banda prohibida fonónica [3]. Este intervalo de frecuencias puede modificarse mediante la alteración del número de dispersores de sonido, su tamaño, distribución espacial, parámetro de red y características materiales de los componentes, matriz y dispersores de sonido, así como la presencia de defectos en la estructura cristalina. El análisis de las propiedades acústicas en estructuras periódicas de este tipo ha demostrado que es posible controlar y manipular la propagación de ondas acústicas, lo que tiene implicaciones para diversas aplicaciones científicas y tecnológicas. Una propiedad intrínseca de estos sistemas es la atenuación de la energía acústica debido a la reflexión y absorción de ondas acústicas en intervalos específicos de frecuencia, lo que puede llevar a la inhibición de la transmisión total. Esto posibilita el diseño de atenuadores acústicos o espejos acústicos perfectos, donde la transmisión se reduce a cero [4]. Gracias a diversas técnicas de manufactura implementadas en los últimos años, ha sido posible construir cristales fonónicos activos con propiedades acústicas modulables ante estímulos externos, como radiación infrarroja, campos eléctricos o magnéticos, o corriente eléctrica, entre otros [5-7]. El control tanto de la frecuencia como de la posición espacial donde se libera la energía acústica es uno de los retos fundamentales en el estudio y la propuesta de diferentes enfoques de interés para posibles aplicaciones de estructuras fonónicas. Esta capacidad se ha demostrado a través de la manufactura de estos cristales, funcionando como guías de onda o demultiplexores acústicos. El diseño de guías de onda mediante la eliminación de cilindros metálicos en posiciones específicas dentro del cristal fonónico perfecto permite la transmisión de ondas de ciertas frecuencias o longitudes de onda a puntos muy específicos. La creación de guías de onda con diversas características utilizando defectos como medio de transporte es de interés, ya que puede tener un impacto en la transmisión controlada de señales acústicas, que en última instancia es información. La propagación controlada puede llevar al diseño de estructuras acústicas con un alto factor de calidad y su modulación, así como a la liberación controlada de energía acústica en puntos específicos [8, 9].

# **3. Revisión Bibliográfica**

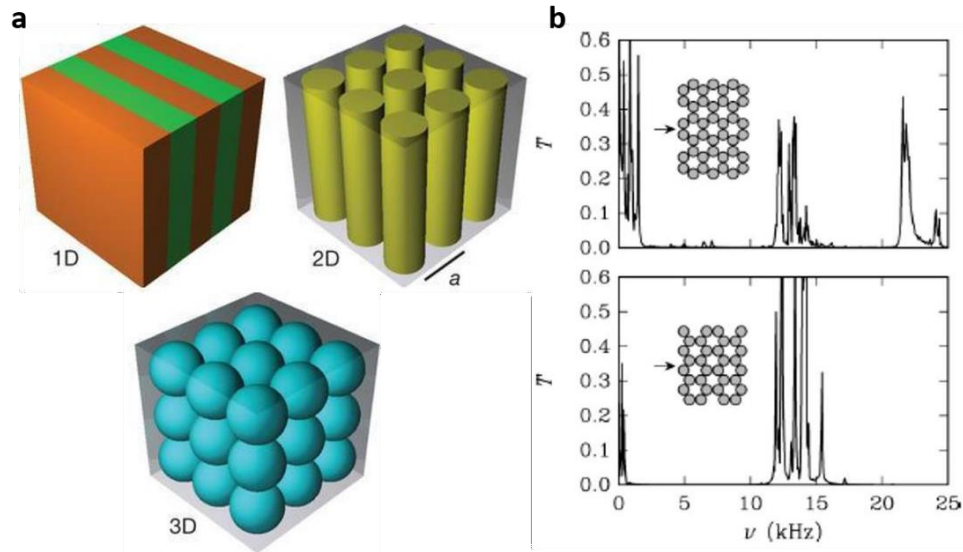
En la presente sección se describen las generalidades de los cristales fonónicos; se parte con los tipos de cristales fonónicos que existen, seguida de una breve descripción de los fenómenos físicos presentes, así como sus posibles aplicaciones en el campo de la industria y la tecnología. Por último, una breve reseña histórica donde se explica el desarrollo y funcionamiento para su mayor comprensión y estudio.

### 3.1 Aspectos Generales

Un cristal fonónico, se puede definir como un arreglo de dispersores de sonido (ondas mecánicas) o elásticas de un material, inmerso periódicamente en una matriz de un material diferente, con la característica principal de que debe de existir un amplio contraste entre las propiedades elásticas de sus componentes, a saber: velocidad del sonido, densidad, módulo de Young, etc. [1]. Los cristales fonónicos pueden clasificarse de diferentes formas, por ejemplo, pueden ser unidimensionales, bidimensionales o tridimensionales, e incluso 4D al incluir al tiempo como una variable que controla sus propiedades acústicas [10]. Un cristal fonónico unidimensional, está conformado por una capa de un material dispuesta entre dos capas de un material diferente, por ejemplo, capas alternadas de cera-gel y/o vidrio [11]. Los cristales fonónicos bidimensionales son los más estudiados, debido a su fácil manufactura y a la alta posibilidad de combinar dispersores/matriz con diferentes materiales. Se han reportado estructuras fonónicas sólido/sólido, es decir, tanto los dispersores como la matriz son sólidas; así mismo, se han manufacturado cristales, sólido/líquido, sólido/gas, entre otros más [12, 13]. Con respecto a los cristales tridimensionales, éstos se han reportado esencialmente como un arreglo de esferas o “cuentas” de cierto material, periódicamente distribuidos en aire o agua, siendo éstos los menos estudiados por su manufactura compleja [14]. Un esquema representativo de los tres tipos de cristales fonónicos que existen se visualiza en la Figura 1-a.

El hecho de que exista un amplio contraste entre las propiedades elásticas de los componentes del cristal origina la formación de estructuras de bandas, propias de cada estructura fonónica. Esto se basa en el hecho de que, si el cristal fonónico esta conformado por materiales cuya densidad, por ejemplo, difiera menos del 10% entre ellos, el arreglo periódico no presenta un *bandgap* definido, debido que una onda propagándose a través de dicho arreglo interactúa con dos sistemas muy similares, por ejemplo, plástico ABS en agua,  $1020 \text{ kg/m}^3$  y  $1000 \text{ kg/m}^3$ . El caso, por ejemplo, de cilindros de acero inmersos en agua, será de  $7800 \text{ kg/m}^3$  y  $1000 \text{ kg/m}^3$ , por lo que una onda propagándose en dicho sistema experimentará perturbaciones al pasar de un medio a otro. El *bandgap* fonónico, por lo tanto, se definirá como el intervalo de frecuencias o longitudes de onda que no pueden propagarse a través del cristal fonónico; dicho *bandgap* tiene su equivalente en otras estructuras periódicas, como el *bandgap* fotónico, así como en el electrónico en un arreglo de átomos [15].

Uno de los aspectos importantes en el diseño de cristales fonónicos, es la posibilidad de modificar la posición o anchura de la banda prohibida, debido a que a través de ello será posible permitir o inhibir la propagación de ondas acústicas. Este hecho puede observarse en un espectro de transmisión acústica, como una transmisión intensa para un cierto cristal fonónico, pero que tiende a cero en otro arreglo, con los mismos materiales [16, 17]. La Figura 1-b, muestra un espectro típico de transmisión acústica donde se puede apreciar una modificación del *bandgap* fonónico con respecto a la modificación de la geometría de los dispersores de sonido. La intensidad de la onda sonora que se transmite en el cristal disminuye considerablemente [18].



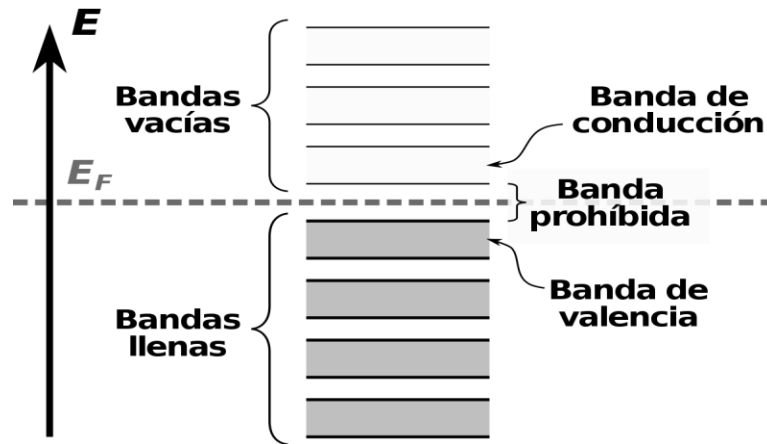
**Figura 1.** a-Diferentes tipos de cristales en función de su dimensión, b-Espectro de transmisión acústica de dos cristales fonónicos [18].

### 3.2 Definición de Cristal fonónico.

Se define un cristal (electrónico), como un arreglo de átomos dispuestos periódicamente en el espacio, de tal forma que un electrón que viaja a través de él estará sujeto a un potencial periódico tipo pozo que se encuentra determinado principalmente por la distancia interatómica. Dichas distancias son del orden de los *Angstroms*, es decir,  $1 \times 10^{-10}$  m. Tales arreglos cristalinos pueden ser de una, dos o tres dimensiones, y la periodicidad atómica origina estructuras de bandas, que permiten identificar tanto energías permitidas, como prohibidas para los electrones. Del mismo modo, en la teoría de semiconductores y semimetales, también es posible describir su estructura electrónica mediante una estructura de bandas, donde los niveles energéticos están agrupados mediante bandas continuas, separadas por intervalos suprimidos. Dichas bandas se presentan como la diferencia de energía entre el punto más bajo de la banda de conducción y el más elevado en la banda de valencia [19]. Un esquema de esto puede visualizarse en la Figura 2.

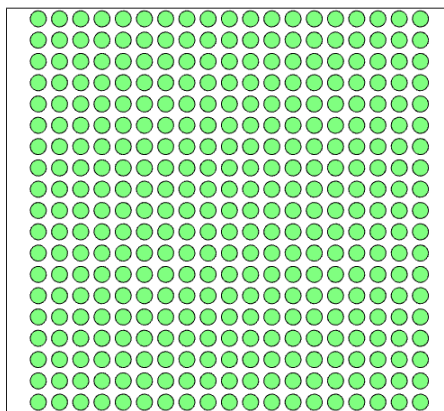
En décadas recientes se han desarrollado nuevas clases de materiales artificiales, que tienen la propiedad de propagar luz, que se conocen como "*metamateriales ópticos*", conocidos como cristales fotónicos. Los cristales fotónicos, son materiales estructurados periódicamente, de tal forma que su constante dieléctrica varía periódicamente en toda la estructura y se pueda afectar el movimiento de los fotones de un modo similar a un cristal semiconductor con los electrones. En otras palabras, la dinámica del fotón se ve sujeta a una función dieléctrica periódica asignada por los componentes del cristal [20]. Básicamente los cristales fotónicos contienen regiones internas con constantes dieléctricas diferentes, que se repiten periódicamente. Por lo tanto, ondas de luz de ciertas frecuencias pueden propagarse generando bandas de transmisión para los fotones. Las regiones de longitudes de onda no permitidas originan lo que se conoce como bandgap fotónico [21].





**Figura 2.** Esquema de bandas correspondientes a la conductividad intrínseca de un semiconductor. A  $0^{\circ}\text{K}$  la conductividad es nula porque todos los estados en la banda de valencia están llenos mientras que están vacantes todos los estados de banda de conducción. Cuando aumenta la temperatura, los electrones se excitan térmicamente desde la banda de valencia hasta la banda de conducción y éstos se convierten en electrones móviles [21].

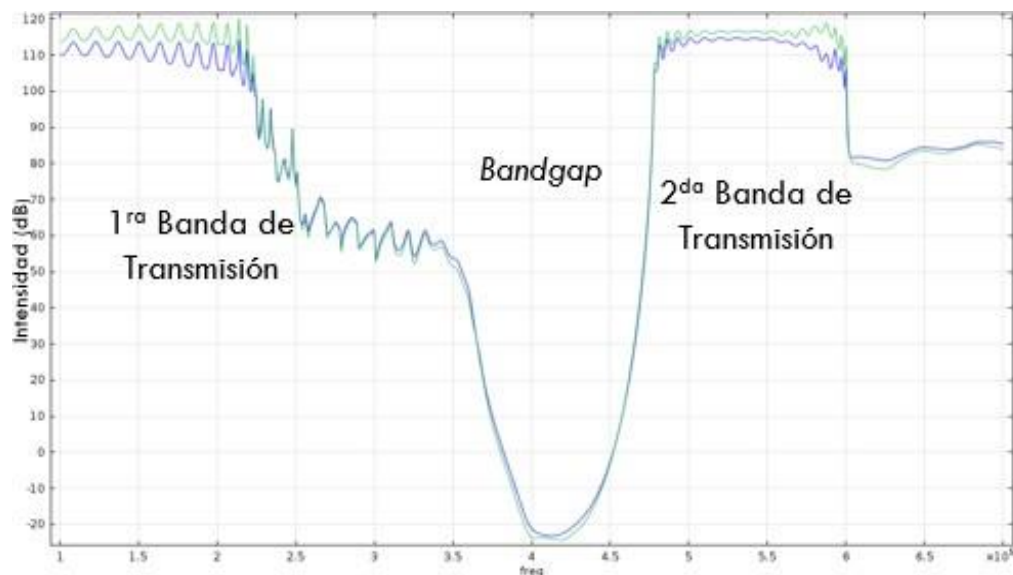
En resumen, la propagación de electrones se controla a través del arreglo periódico de átomos, y la propagación de fotones se controla a través de un arreglo periódico de materiales con diferentes constantes dieléctricas. Una vibración, denominada de manera general como un fonón, puede propagarse a través de un arreglo periódico de materiales con diferentes propiedades elásticas (velocidad del sonido o densidad), por lo que la propagación del fonón estará sujeto a una distribución periódica de la densidad, por ejemplo [22]. Estas estructuras, han mostrado tener una excelente capacidad para adaptarse a otros sistemas integrados y poder fortalecer más sus características primarias. Por ejemplo, un cristal fonónico cuadrático compuesto de un arreglo de  $20 \times 20$  dispersores de sonido de acero inoxidable con un radio de 0.8 mm y un parámetro de red fijo de 0.2 mm inmersos dentro de una matriz de agua está representado en la Figura 3. Los materiales del cristal se eligen en función de sus valores característicos de variable física para su valor de velocidad de sonido y densidad, y rectificar su amplio contraste elástico.



**Figura 3.** Cristal fonónico diseñado mediante la plataforma computacional COMSOL-Multiphysics. Se muestra un cristal conformado por una geometría cuadrática de  $20 \times 20$  de dispersores de sonido de acero inoxidable, sumergidos en una matriz de agua (área blanca).

Al caracterizar un cristal fonónico se busca, esencialmente determinar las ondas que pueden propagarse a través de él, y aquellas que no lo pueden hacer. Tanto una como otra característica puede controlarse a través de la modificación en la periodicidad de las propiedades elásticas en un cristal fonónico, es decir, la geometría espacial de los dispersores, que pueden tener un arreglo cuadrado, hexagonal, rectangular, etc. [23]. También se puede controlar mediante la variación de los parámetros materiales de los componentes, esencialmente con el tipo de material del que están hechos los dispersores y a matriz, etc. La presencia de defectos en un cristal fonónico conlleva a la generación de modos resonantes, lo que permite modificar el bandgap fonónico, particularmente permitiendo que dichos modos resonantes puedan propagarse, generando bandas estrechas dentro del intervalo de frecuencias de la banda prohibida. Otros reportes, establecen la posible modificación a través de un estímulo externo, el cual impacta directamente en una de las propiedades elásticas de uno o ambos componentes del cristal. Dicho estímulo, puede ser a través de radiación infrarroja, un campo eléctrico o magnético, corriente eléctrica, entre otros [24-26]. El poder controlar tanto la frecuencia como la posición espacial donde la energía acústica pueda ser liberada, así como la intensidad es uno de los retos fundamentales en el estudio y propuesta de posibles aplicaciones para este tipo de cristales acústicos con características periódicas en sus componentes.

Una forma de visualizar la frecuencia de las ondas que pueden propagarse a través de un cristal fonónico, y aquellas que no, es a través de lo que se conoce como espectro de transmisión. La Figura 5, es un espectro de transmisión para el cristal fonónico descrito en la Figura 3, en donde se puede observar claramente el ancho de un *bandgap* para una estructura fonónica, en donde se ha identificado la primera y segunda banda de transmisión, siendo el bandgap la región de frecuencias entre ambas bandas (380-480 kHz, aproximadamente).



**Figura 5.** En Teoría de Bandas, se describe la estructura electrónica de un sólido como una estructura periódica. Dichos bandgaps representan el rango de frecuencias de las ondas que no están dentro de la estructura fonónica y por lo tanto la transmisión a través del cristal es bloqueada. Los bandgaps de los cristales fonónicos [22].

### 3.3 Posibles Aplicaciones.

Los cristales fonónicos han sido propuestos como aislantes de sonido, espejos acústicos perfectos, supresores sónicos, resonadores de ondas acústicas y también como cavidades sonoras o guías de onda elástica. Algunos cristales que se encuentran dentro del rango de los Mega Hertz (MHz) son útiles en aplicaciones biomédicas de ultrasonido o microscopía acústica [27]. Es así que los cristales fonónicos proporcionarán nuevos componentes dentro de los campos de la acústica y ultrasonidos, ofreciendo nuevas funcionalidades y nivel de control comparable al campo de la radiación electromagnética. Los cristales fonónicos tienen aplicaciones potenciales se encuentran la ecografía, imágenes para medicina para pruebas no destructivas [28, 29]. Los dispositivos de enfocamiento de ondas hechos a partir de cristales fonónicos podrían ayudar a miniaturizar las lentes acústicas o hacerlas modulables [30].

Estos cristales han mostrado la posibilidad de poder seleccionar vibraciones sonoras a ciertas frecuencias que permiten la transmisión a través de estructuras fonónicas. Esta posibilidad de seleccionar ciertas frecuencias sonoras genera la posibilidad de poder enfocar o atenuar, colimar, filtrar y/o guiar ondas de cierta frecuencia específica en el interior de ellos [31]. Por lo tanto, el guiado de ondas usando cristales fonónicos ha permitido la construcción de sistemas sonoros complejos con un alto Factor de Calidad (*Q-Factor*), este factor de calidad es un parámetro que mide la relación entre la energía reactiva almacenada y la disipada durante el proceso de un ciclo completo de una señal [32]. Un valor alto de *Q*, implica una tasa baja de energía perdida en relación con la energía almacenada que resulta ser fundamental en sistemas de demultiplexado acústico, entre otros [33]. Del mismo modo, la resolución limitada por sub-difracción y blindaje acústico podrían alcanzarse mediante guías de onda hechas de cristales fonónicos [29]. Por lo tanto, el estudio y avance de este tipo de cristales permite manufacturar sistemas mecánicos de alta precisión. Entonces como ya se mencionó anteriormente, los cristales fonónicos se pueden utilizar como aislantes, espejos acústicos, supresores de sonido, mediante la introducción de líneas de defectos o cavidades para la guía de ondas elásticas o también para ampliar o disminuir el rango de frecuencia que resultan ser muy útiles en aplicaciones de ultrasonido biomédico o microscopía acústica [34].

### 3.4 Modelo de Enlace Fuerte (Tight-binding).

La teoría de enlace fuerte o tight-binding, es un marco teórico utilizado para describir la estructura electrónica de sólidos cristalinos, especialmente metales y semiconductores [35]. En esta teoría, se aproxima el comportamiento de los electrones en un sólido cristalino considerando principalmente las interacciones entre electrones localizados en átomos individuales cercanos. En lugar de tratar a todos los electrones como partículas independientes, la teoría del Tight-binding modela las interacciones entre los electrones y los núcleos atómicos cercanos, lo que permite describir con mayor precisión fenómenos como la estructura de bandas electrónicas, la conductividad eléctrica y las propiedades magnéticas de los materiales cristalinos. Esta teoría es fundamental para comprender la física de materiales y ha sido aplicada con éxito en una amplia gama de sistemas, desde metales simples hasta materiales compuestos más complejos [36, 37].

En el contexto de los cristales fonónicos, el modelo de Tight-binding se utiliza para describir las interacciones entre átomos vecinos y las vibraciones de la red cristalina [38]. En este enfoque, se consideran los potenciales de interacción entre los átomos adyacentes, lo que permite modelar cómo las vibraciones (fonones) se propagan a través del cristal. El modelo de tight-binding para cristales fonónicos implica diferentes niveles de complejidad, dependiendo de la precisión deseada

y de la naturaleza específica del sistema bajo estudio. Por ejemplo, se pueden considerar diferentes tipos de enlaces (como enlaces armónicos o anarmónicos), la disposición tridimensional de los átomos en la red cristalina, así como la influencia de imperfecciones o defectos en el material [39]. Al igual que en el caso de la estructura electrónica, el modelo de tight-binding para cristales fonónicos proporciona una manera sistemática de comprender y predecir propiedades como la dispersión de fonones, las bandas de frecuencia fonónicas, la densidad de estados fonónicos y la respuesta térmica del material [40].

### **3.4.1 Tight-binding en Cristales Fonónicos**

Este modelo se ha aplicado a cristales fonónicos conteniendo defectos con el objetivo de comprender cómo la presencia de imperfecciones, como vacancias, sustituciones atómicas o dislocaciones, afecta las propiedades vibracionales de la estructura periódica [38, 39]. Estos defectos pueden alterar significativamente la propagación de fonones a través de la red cristalina. En este enfoque, se pueden introducir términos adicionales en el Hamiltoniano de tight-binding para representar la interacción entre los fonones y los defectos. Estos términos pueden incluir potenciales de enlace modificados localmente en las proximidades del defecto, así como acoplamientos entre modos de fonones locales y modos extendidos en la red [40]. El estudio teórico de cristales fonónicos con defectos mediante el modelo esta teoría puede proporcionar información valiosa sobre cómo los defectos afectan la densidad de estados fonónicos, las bandas de frecuencia fonónicas y la localización de modos vibracionales en el material [41]. Además, permite prever cómo los defectos pueden influir en fenómenos como la dispersión de fonones, la difusión térmica y la atenuación de ondas acústicas [39].

Los defectos en un cristal fonónicos generan modos resonantes, los cuales dependen del número de defectos y la distancia de separación entre ellos, es decir, el número de periodos entre uno y otro defecto. El acoplamiento de modos resonantes en cristales fonónicos conteniendo defectos se ha descrito con éxito al ser tratados como guías de ondas acústicas de resonador acoplado (CRAWs, por sus siglas en inglés Coupled Resonator Acoustic Waveguides), en el marco del modelo de enlace fuerte [42-44]. Como se ha mencionado el modelo de enlace fuerte ha sido ampliamente utilizado en física del estado sólido para estudiar las propiedades electrónicas de los materiales y se ha utilizado para describir la propagación de fonones en un cristal fonónico [44]. En este enfoque, un CRAW basado en un cristal fonónico se discretiza en sitios separados y la dinámica de los fonones se describe considerando las interacciones entre sitios vecinos. La propagación de ondas en arreglos de defectos a través de la aproximación de enlace fuerte se puede analizar resolviendo las ecuaciones de movimiento de los fonones en la red cristalina del cristal fonónico considerando las fuerzas de interacción entre sitios adyacentes de la red [45]. En la matriz dinámica del cristal fonónico, que incorpora las interacciones entre sitios vecinos, proporciona información sobre los modos fonónicos permitidos [39, 45].

Los CRAW diseñados dentro de cristales fonónicos constan de múltiples segmentos de guías de ondas, acoplados a través de resonadores o defectos que forman una estructura de celdas unitarias interconectadas. Cada celda unitaria contiene el segmento de la guía de ondas y el resonador o defecto que compone el CRAW [46]. En el marco teórico basado en la teoría de tight-binding permite construir el hamiltoniano que describe la dinámica de las ondas acústicas que se propagan a lo largo de estas guías de ondas resonantes acopladas. El hamiltoniano incorpora términos cinéticos que representan la energía de las ondas en el segmento de guía de ondas y términos potenciales que dan cuenta del acoplamiento entre segmentos adyacentes a través de los resonadores o defectos [44, 45]. Este enfoque facilita la determinación de la fuerza de acoplamiento entre los segmentos

de guía de ondas, lo que impacta directamente las propiedades de transmisión y la formación de modos localizados [38]. Como resultado, resulta factible predecir las frecuencias de resonancia de la estructura de guía de ondas acoplada. Estas frecuencias resonantes están asociadas con la formación de modos localizados que representan modos de guía de ondas confinados dentro del resonador o regiones defectuosas.

El modelo general utilizado en parte de los resultados descritos en la sección de resultados se describe en la sección metodológica de la presente tesis.

### **3.5 COMSOL *Multiphysics*.**

COMSOL *Multiphysics* es un paquete de modelización para la simulación de cualquier proceso físico que se pueda describir mediante ecuaciones en derivadas parciales (partial differential equations PDEs). Está provisto de la última tecnología y algoritmos de solución que pueden manejar problemas complejos de forma rápida y precisa, mientras que su intuitiva estructura está diseñada para proporcionar facilidad de uso y flexibilidad. Con COMSOL, se puede modelar prácticamente cualquier fenómeno físico a través de plantillas de modelado predefinidas. Mediante las funcionalidades de modelado basado en ecuaciones es posible modificar estas plantillas para obtener aplicaciones específicas. Es posible modelar sistemas de fenómenos físicos acoplados y poder, así, manejar la creciente demanda de representaciones realistas del mundo que nos rodea. COMSOL *Multiphysics* proporciona un entorno de modelado multifísico amigable, rápido y versátil. Los resultados rápidos y su flexibilidad sin precedentes hacen de COMSOL el software de modelado y simulación ideal para la investigación, el desarrollo de productos y la educación [56]. Es un software establecido para el diseño y simulación que involucra los pasos de flujo de trabajo del modelado de geometrías que sirven para definir las propiedades de los materiales y la física de los fenómenos físicos involucrados en la solución y procesos posteriores, para generar así, resultados más precisos y confiables, antes del proceso de manufactura. Esta plataforma es útil como herramienta de modelado y análisis teóricos para el prototipaje virtual de fenómenos físicos, es decir, ayuda en el modelado computacional de cualquier fenómeno físico, incluyendo transferencia de calor, movimiento de fluidos, electromagnetismo, óptica, mecánica estructural, fenómenos acústicos, entre otro [47]. Las prestaciones multifísicas integradas en la plataforma COMSOL capacitan al usuario para modelar simultáneamente cualquier combinación de fenómenos físicos que se involucren específicamente en la simulación que el usuario necesite. Dicho en otras palabras, COMSOL *Multiphysics* cuenta con las librerías necesarias que lo convierten en una fuerte herramienta aplicable a un amplio abanico de las diferentes áreas de la física y la matemática, entre las que destacan: acústica, reacciones químicas, sistemas de control, modelado de componentes y complejos modelos matemáticos. Una de las características más importantes que brinda COMSOL, es la aplicación en diferentes áreas de la ciencia y tecnología, ya que cuenta con una interfaz gráfica muy amigable e interactiva para todas las etapas involucradas en el proceso de modelado. Entre otras notables características de COMSOL, se encuentran el poder formular de manera general modelos rápidos y sencillos, sistemas arbitrarios ajenos a los establecidos por el software. Los sistemas multifísicos que se modelan en COMSOL, son analizados desde un punto de vista multidimensional, lo que permite modelar sistemas de manera simultánea en una dimensión (1D), dos (2D) o tres (3D) dimensiones, según se requiera. Contiene una extensa biblioteca de modelos o módulos (ver Tabla 2.1) establecidos que documentan una generación automática de mallas de solución matemática con más de 80 ejemplos resueltos. Estos modelos se suelen adaptar mediante la disponibilidad de “*solvers*”, para los post-procesados interactivos, en la integración total de otras

plataformas como MATLAB o para importar y reparar la geometría de archivos en diferentes formatos (CAD, DXF, IGES) [47].

**Tabla 1.** Biblioteca de los diferentes establecidos para generación automática de mallas de solución [57].

<b>Biblioteca de los distintos módulos establecidos en COMSOL <i>Multiphysics</i>.</b>	
AC/DC Module	Fatigue Module
Acoustics Module	File Import for CATIA v5 Module
Batteries and Fuel Cells Module	Geomechanics Module
CAD Import Module	Heat Transfer Module
CFD Module	LiveLink for AutoCAD Module
Chemical Reaction Module	LiveLink for Creo Parametric Module
Engineering Module	LiveLink for Excel Module
Corrosion Module	LiveLink for Inventor Module
ECAD Module	LiveLink for MATLAB Module
Electrochemistry Module	LiveLink for Pro/Engineer Module
Electrodeposition Module	LiveLink for SolidEdge Module
LiveLink for SolidWorks Module	Molecular Flow Module
LiveLink for SpaceClaim Module	Multibody Dynamics Module
Material Library Module	Nonlinear Structural Materials Module
MEMS Module	Semiconductor Module
Microfluids Module	Structural Mechanics Module
Optimization Module	Subsurface Flow Module
Particle Tracing Module	Wave Optics Module
Pipe Flow Module	Plasma Module
RF Module	-----

### 3.6 Módulo de Acústica “*Acoustic Module*”

*Acoustic Module* es una colección de interfaces físicas adaptadas a una gran variedad de simulaciones acústicas en fluidos y sólidos. El hecho de que COMSOL permita acoplar una simulación acústica a otras simulaciones arbitrarias o independientes en cualquier interfaz física, origina la formación de un poderoso modelo computacional multifísico capaz de resolver varias ecuaciones simultáneamente. *Acoustic Module* también permite, transformar cualquier modelo acústico en un modelo descrito por ecuaciones diferenciales subyacentes, ofreciendo una manera única de interpretar las leyes físicas de una simulación [48]. Este módulo de acústica está diseñado específicamente para dispositivos que producen, miden y manejan ondas acústicas. Sus modos de aplicación, proporcionan todas las herramientas para modelar la propagación de ondas acústicas a través de sólidos y fluidos estacionarios. *Acoustic Module* se puede considerar como un complemento de COMSOL para establecer funciones especializadas para visualizar campos acústicos y crear diferentes prototipos virtuales de dispositivos o componentes. Este módulo resulta muy necesario para estudios detallados de combinación entre acústica y mecánica estructural; acústica y flujo de fluidos, entre otros tantos más. Contiene acoplamientos multifísicos para evaluar el desempeño de productos o diseños entorno al mundo real. El módulo de acústica también incluye formulaciones especializadas y modelos de materiales usados específicamente en ciertas áreas de la física e ingeniería. El entorno multifísico se amplía aún más con los varios métodos numéricos incluidos en el FEM (Método de Elementos Finitos), por sus siglas en inglés. Otra característica importante de este módulo es que proporciona diagramas de flujo consistentes y muy sencillos como son: definición geométrica, selección de materiales, selección de interfaces adecuadas,

definición de límites y condiciones iniciales, mallado de elementos finitos, resolución de problemas físicos y visualización de resultados [49].

También es importante describir algunos de los estudios que COMSOL realiza mediante este módulo, como son [50]:

- **Dominio de frecuencias:** el dominio de frecuencias es un estudio que permite determinar la respuesta acústica, así como el comportamiento en un determinado rango de frecuencias.
  
- **Transitorio:** permite calcular el tiempo de vuelo, simular el tiempo de acumulación transitoria o temporal de un sistema, analizar señales acústicas de banda ancha, simular comportamientos no lineales entre otros.
  
- **Frecuencias propias (Eigenfrequency):** este estudio nos permite analizar todos los modos de vibración y frecuencias de resonancia dentro de espacios y estructuras cerradas, además de calcular el Factor de Calidad (Q) y el Factor de Pérdida.
  
- **Análisis de Modo:** permite calcular e identificar los modos de propagación y de no propagación en guías de onda y diferentes conductos.

Como se puede ver, las interfaces de estudio que maneja este módulo, nos ayudan a analizar la acústica tanto en sólidos como en fluidos, es decir, mediante el acoplamiento de fluidos e interfaces de físicas sólida, se puede resolver problemas relacionados con la interacción entre estructuras acústicas sólidas y/o líquidas. Estas categorías se encuentran disponibles en dos y tres dimensiones. Para dos dimensiones, el módulo acústico ofrece interfaces en el plano para los problemas con una simetría plana y cilíndrica. Además de que se pueden utilizar las interfaces físicas de acústica fluida en una dimensión y geometrías axisimétricas unidimensionales. La acústica, es el área encargada de analizar todas las propiedades del sonido y su interacción con otros medios. El sonido, es la sensación de pequeños cambios en la presión del aire que son detectados por medio del oído. Físicamente, el sonido en el aire es una onda longitudinal moviéndose en la dirección de propagación de la energía. Las crestas en las ondas representan los puntos máximos de presión, mientras que los valles (depresiones), representan los valores mínimos de presión [48].

El sonido se origina cuando la presión del aire se ve perturbada por alguna fuente como puede ser, la vibración de cualquier objeto, o cualquier bocina de un sistema de audio. En ese sentido, el módulo de acústica proporciona interfaces físicas con condiciones de contorno de modelos adjuntos, dependiendo de la variable dependiente básica del campo acústico. Las interfaces se dividen en dos categorías:

- i) **Presión acústica:** la variable dependiente, es la misma presión acústica.
  
- ii) **Aeroacústica:** la variable dependiente para este caso es el Potencial,  $\Phi$ , que representa la velocidad de la partícula para el campo acústico, a saber  $v = \nabla\Phi$ . En una situación típica, el fluido se mueve con una velocidad  $V_{tot} = V + v$ , donde  $V$ , es la velocidad estacionaria de flujo y  $v$ , representa la velocidad de la partícula asociada a las ondas acústicas.

Un análisis acústico, se puede categorizar por uno de los siguientes escenarios, o problemas fundamentales de COMSOL *Multiphysics* [47, 48].

**Problemas de Radiación:** una estructura vibratoria o un altavoz, por ejemplo, radia sonido en todo su alrededor, por lo que es necesaria una condición de límite de campo lejano o PML (*Perfect Matched Layer*), por sus siglas en inglés.

**Problemas de Dispersión:** una onda incide sobre un cuerpo, y se crea una onda de dispersión. Fenómeno por el cual un conjunto de ondas que se mueven en cierta dirección rebota sucesivamente entre sí, perdiendo su dirección privilegiada de movimiento. Para lo cual es necesaria una condición de límite de radiación de campo lejano.

Por lo cual COMSOL diseñó el proceso de modelado para poder resolver dichas dificultades

**Un campo de sonido en un ambiente interior:** las ondas acústicas en este caso permanecen en un volumen finito para el cual no es necesario las condiciones de límite de radiación.

**Acoplamiento de interacción de una estructura fluido-elástica:** si la estructura de radiación o dispersión consiste en un material elástico, debemos considerar la interacción entre el cuerpo y el fluido que lo rodea.

**Problemas de Transmisión:** una onda de sonido incidente se propaga en un cuerpo, en el cual puede tener diferentes propiedades acústicas y, por lo tanto, la presión y la aceleración son continuas en los límites.

**Problemas de Aeroacústica:** el sonido es generado por el movimiento de un fluido turbulento o por la interacción de un fluido y una superficie.

Con lo anterior, se puede observar que existen algunas dificultades durante el proceso de modelado acústico como también en la solución de mallado del sistema, el modelado de los límites artificiales y el modelado de los materiales amortiguadores reales. y simplificar el proceso de modelado. A continuación, se describen algunas de las características de COMSOL que nos ayudan a modelar los sistemas en la simulación y resolver las dificultades acústicas que se presenten.



#### **4. Planteamiento del Problema**

La propagación de ondas de ultrasonido en cristales fonónicos depende de las propiedades materiales de sus componentes. Un cristal fonónico, se define como un sistema artificial compuesto por dispersores de sonido de un material A, dispuestos periódicamente en una matriz de un material B. Una de las características principales es la diferencia entre la velocidad del sonido, densidad, entre otras, de componente A con respecto al componente B, lo que da lugar a bandas prohibidas. Las bandas prohibidas o bandgap fonónico, son regiones de frecuencias, es decir, ondas acústicas con frecuencias específicas, que no pueden propagarse a través del cristal. El bandgap fonónico, puede alterarse, como en cualquier sistema periódico (fotónico o electrónico), al alterar la periodicidad o al incorporar impurezas. Las impurezas en un cristal fonónico se incorporan al inducir defectos locales en su estructura, las cuales generalmente se inducen al remover dispersores de sonido en puntos específicos dentro del cristal.

Los defectos en el cristal fonónico, inducen modos resonantes cuyas frecuencias corresponden al intervalo del bandgap, que pueden acoplarse entre sí, y generar nuevas bandas de transmisión dentro de dicho intervalo. A partir de un arreglo de defectos, puede formarse una guía de ondas acústicas, a través de la cuál es posible dirigir ondas acústicas con frecuencias dentro del bandgap. Por tal motivo, mediante el diseño de guías de onda en un cristal fonónico, optimizando la disposición espacial de los defectos, será posible, por un lado, el control de la propagación de ondas de ultrasonido con diferentes frecuencias, en función del arreglo de defectos. Por otro lado, y, debido a que, las propiedades de un material dependen de la temperatura, variaciones en ella, modificarán la respuesta acústica de cristales fonónicos conteniendo materiales termosensibles, como hidrogeles PNIPAM y/o defectos conteniendo dicho material.

El problema planteado es, por lo tanto, la descripción de la propagación controlada de ondas de ultrasonido a través de defectos, inducidos en un cristal fonónico, para conformar guías de onda conformadas por defectos. La optimización de los defectos en el cristal permitirá determinar las configuraciones adecuadas para la transmisión de señales acústicas con mayor factor de calidad, procesos de interferometría acústica y demultiplexores acústicos modulables.

## 5. Objetivos del Proyecto

El estudio de nuevos materiales representa un área de investigación multidisciplinaria cuyo objetivo principal se basa en el estudio de los procesos físicos y/o químicos que permiten obtener ciertos materiales con características muy específicas que se pueden controlar mediante la variación adecuada de dichos procesos. En el campo de estudio de nuevos materiales resulta de primordial importancia el impacto del conocimiento generado en diversas áreas prioritarias de aplicación y el desarrollo de un país. Los cristales fonónicos, son materiales que en la actualidad representan una amplia tendencia en cuestión de desarrollo e investigación que permiten manipular, transformar, procesar los materiales ya existentes, para buscar nuevos campos de aplicación. Es por eso que en este apartado se presentan los objetivos que se pretendían alcanzar en un inicio, para un mayor entendimiento de los parámetros que rigen las características definitivas finales de los materiales fabricados.

### 5.1 Objetivo General

- Diseñar, simular, manufacturar y caracterizar experimentalmente cristales fonónicos conformados por cilindros de acero inoxidable dispuestos periódicamente en una matriz de agua para poder determinar el efecto de la disposición espacial de defectos locales en sus propiedades acústicas que permitan la construcción de guías de onda y demultiplexores acústicos. Así como también, analizar como las propiedades acústicas se verán afectadas al modificar el radio de los dispersores de sonido y al reemplazar la matriz de agua por un sistema hidrogel termosensible base *PNIPAm*.

### 5. 2 Objetivos Particulares

- Modelar y analizar la distribución espacial con respecto a la dirección de propagación, de defectos locales para conformar guías de onda que permitan optimizar el guiado de ondas con frecuencias específicas.

- Analizar las frecuencias guiadas y determinar el efecto de acoplamiento entre los defectos, para optimizar el guiado de ondas acústicas.

- Modelar un demultiplexor acústico a partir de defectos locales, conformado por una entrada y dos salidas o brazos diferentes para determinar las frecuencias en cada brazo.

- Se considerará un demultiplexor dentro de una matriz de agua y uno más en una matriz de un hidrogel termosensible base *PNIPAm*.

- Manufacturar y caracterizar mediante la técnica de espectroscopía ultrasónica las propiedades acústicas de todas las estructuras *fonónicas* diseñadas.

- Calcular la estructura de bandas de todas y cada una de las estructuras diseñadas con ayuda de la plataforma *COMSOL-Multiphysics*.

- Publicar un artículo en una revista indexada y someter un segundo artículo a publicación.

- Realizar al menos una estancia de investigación en la Universidad del Norte de Texas, con el grupo de trabajo del asesor externo, el Dr. Arup Neogi con el propósito específico de aprender y afinar los detalles de la parte experimental y tener el conocimiento necesario para realizar y comprender los experimentos realizados correspondientemente.
- Por último, realizar un registro de propiedad intelectual de los cristales fonónicos obtenidos en este proyecto.

# **6. Descripción Metodológica**

En la presente tesis doctoral se propone el diseño, simulación, manufactura y caracterización de guías de onda, a partir de cristales fonónicos. Las estructuras fonónicas estarán conformadas por cilindros de acero inoxidable dispuestos periódicamente en una matriz de agua. La guía de ondas acústica se obtendrá al remover dispersores de sonido, uno por uno en posiciones específicas del cristal, lo que genera líneas de defectos a través de los cuales las ondas serán guiadas. Será una guía basada en defectos, para conformar una estructura similar a un demultiplexor. El análisis de las propiedades acústicas de cristales fonónicos, ha permitido establecer que, a través de ellos, es posible controlar la propagación de ondas acústicas y conferirles diferentes propiedades de interés. Para el caso de la guía de ondas, se eliminan algunos dispersores simultáneamente para observar qué sucede dentro de las bandas prohibidas.

El diseño de guías de onda, a partir de la sustracción de dispersores, con posiciones específicas conllevará a que ondas de frecuencias específicas puedan atravesar el cristal y alcanzar puntos específicos. La capacidad de adaptar las propiedades acústicas a los cristales fonónicos y más específicamente de las guías de ondas hace que los cristales fonónicos sean particularmente adecuados para una alta gama de aplicaciones tecnológicas en transductores hasta el filtrado y lentes acústicas [1]. Con lo anterior, se permitirá determinar el valor de las frecuencias guiadas. A lo largo de este capítulo, se detallan las características de la simulación de los cristales fonónicos diseñados.

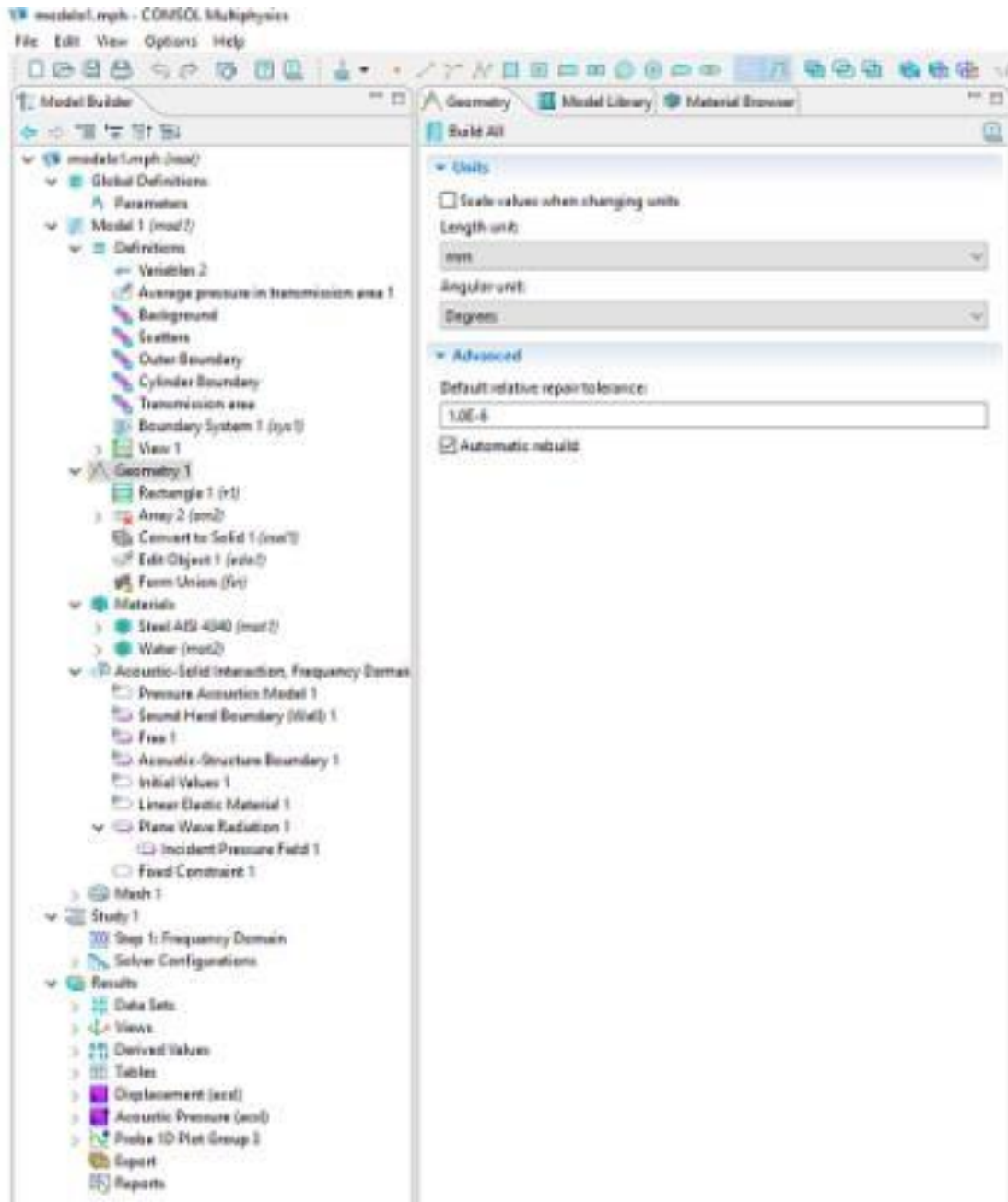
## **6.1 Diseño General de los Cristales Fonónicos**

Como se ha mencionado, el objetivo del presente proyecto es diseñar y manufacturar guías de onda a partir de cristales fonónicos, así como caracterizar las propiedades acústicas experimentalmente mediante espectroscopía ultrasónica. Así que, en este capítulo se explicarán todos los elementos considerados en el diseño y análisis de los dispersores de sonido en la plataforma COMSOL.

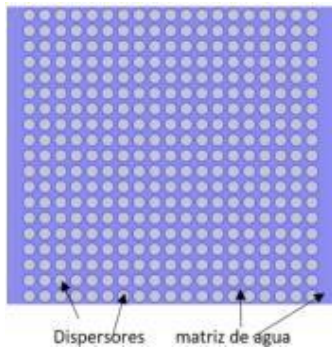
Cuando se trabaja en los ajustes de simulación en la plataforma de COMSOL, se parte primeramente por la discretización de los modelos donde se declaran las constantes físicas y los parámetros de geometría. Es por eso que, la mayoría de las interfases de física de COMSOL Multiphysics utilizan el método de elementos finitos para resolver las ecuaciones diferenciales parciales subyacentes.

El método de elementos finitos funciona discretizando los dominios de modelado en dominios más pequeños y simples llamados elementos. La solución se calcula ensamblando y resolviendo un conjunto de ecuaciones sobre todos los elementos del modelo. La solución de estas ecuaciones se aproxima a la solución real de la ecuación diferencial parcial [2]. En la Figura 1, se muestra la ventana de inicio de la plataforma COMSOL, donde se muestran los diferentes apartados necesarios para los detalles de la simulación de las estructuras fonónicas.

Para poder investigar el efecto de la configuración espacial de los defectos inducidos en un cristal fonónico perfecto (sin defectos), se consideran tres cristales cuadráticos de 19 x 19, es decir, 19 cilindros sobre el eje X y 19 en el Y, simulados mediante la plataforma COMSOL Multiphysics. La forma cuadrada de la matriz es considerada de esa forma para poder reducir el esfuerzo computacional (Figura 2).



**Figura 1** Ventana de inicio de plataforma COMSOL Multiphysics. Cuando se trabaja en una interfaz de COMSOL, se muestra la ventanilla de ajustes donde se puede ajustar los parámetros físicos y geométricos de los cristales fonónicos. Esta elección es importante porque tiene efectos directos sobre la malla y la solución del sistema. La solución se calcula ensamblando y resolviendo un conjunto de ecuaciones sobre todos los elementos que integran el sistema físico [2].



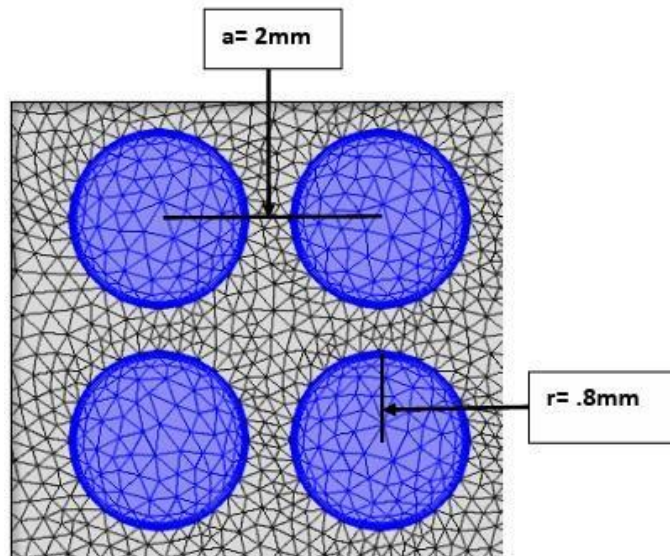
**Figura 2.** Esquema de un cristal perfecto a simular conformado por un arreglo de 19 x 19 dispersores de sonido de acero inoxidable dispuestos cuadráticamente sobre una matriz de agua.

Los parámetros materiales de los dispersores y la matriz se encuentran en la tabla 1

**Tabla 1.** Parámetros materiales de los componentes del cristal fonónico. Este contraste entre sus variables físicas origina la aparición del bandgap fonónico.

Material	Propiedades		Radio (mm)	Parámetro de red
	Densidad	Velocidad del sonido		
Acero inoxidable	7780 Kg/m <sup>3</sup>	5825 m/seg	0.7, 0.75, 0.80,	a= 2mm
Agua	1000 Kg/m <sup>3</sup>	1480 m/seg	0.85, 0.90, 0.95	Constante

Como se mencionó anteriormente, la formación de bandas prohibidas depende de las características elásticas de los materiales componentes de la estructura fonónica, por lo que es necesario mencionar que los cristales de este trabajo se conforman por cilindros de acero inoxidable inmersos en agua formando una matriz, manteniendo el parámetro de red constante (2mm) y variando el radio de los cilindros como se muestra en la Figura 3.



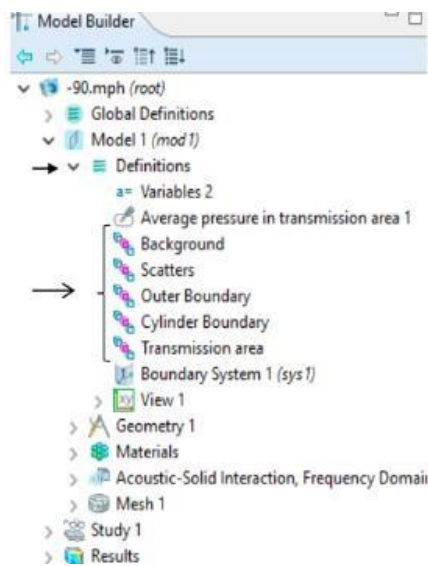
**Figura 3.** Las simulaciones de los cristales perfectos se inician variando el diámetro de los dispersores de sonido manteniendo constante el parámetro de red  $a=2mm$ .

Para declarar las variables utilizadas en la visualización, se utiliza la subcarpeta “*Definitions*”, mostrada en la Figura 4. En esta ventana se declaran los valores de las constantes físicas del agua y el acero (Tabla 1). También se agregan las constantes físicas y geométricas de los materiales y del cristal (Figura 4). Ahora, en la subcarpeta “*Explicit*” se delimitan las posibles configuraciones sobre la geometría que pertenece a las llamadas “*Selecciones definidas por el usuario*”.

Dentro de las múltiples ventanas de la interfase que ofrece COMSOL para el diseño y modelado de fluidos se encuentra la opción de la subcarpeta *Definitions*. El apartado *Definitions* sirve para identificar las partes que serán aisladas dentro de la geometría del sistema.

Esta función, permite elegir la manera en que se dividirá la figura considerada para el cristal fonónico, conformada por cilindros de acero sobre una matriz de agua; en la barra aparecen los límites para el fondo del sistema, los dispersores, el límite exterior, límite de los cilindros, así como la delimitación del área de transmisión.

La siguiente subcarpeta (*Geometry*), ayuda a definir tanto los parámetros geométricos del sistema (cuadrático), así como de los dispersores de sonido (circulares). Permite editar la forma del arreglo final de la estructura, es decir, un arreglo cuadrático de 19 x 19 con cilindros circulares, que puede asumirse desde una vista superior de las estructuras, embebidos en una matriz de agua.



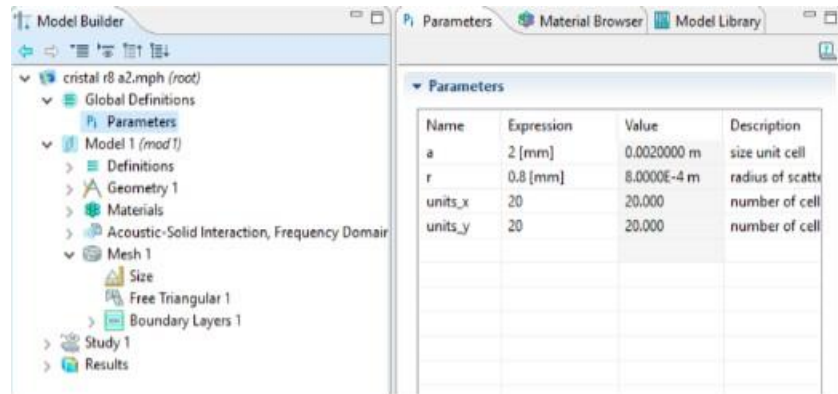
**Figura 4.** La carpeta *Model Builder*, permite definir los parámetros globales del sistema simulado, también permite diferenciar las áreas de transmisión de los componentes del sistema. En la subcarpeta *Definitions*, se designan los límites de los dominios componentes del cristal fonónico.

### 6.1.1 Efecto del radio

Con respecto a los objetivos de la tesis, se diseñarán guías de onda acústicas a partir de cristales fonónicos que permitan el guiado y manipulación de ondas ultrasónicas. Como ya sabemos, las guías de onda ayudan a dirigir las ondas modificando el número de cilindros, el radio o la disposición espacial, así como el parámetro de red o las características elásticas de los materiales que conforman la matriz y/o los dispersores de sonido. En este sentido, se dedica esta sección al desarrollo del proceso de las guías de onda para dirigir ciertas frecuencias. Concretamente el radio se modificó manteniendo el parámetro de red constante a 2mm. La modificación del radio se realiza



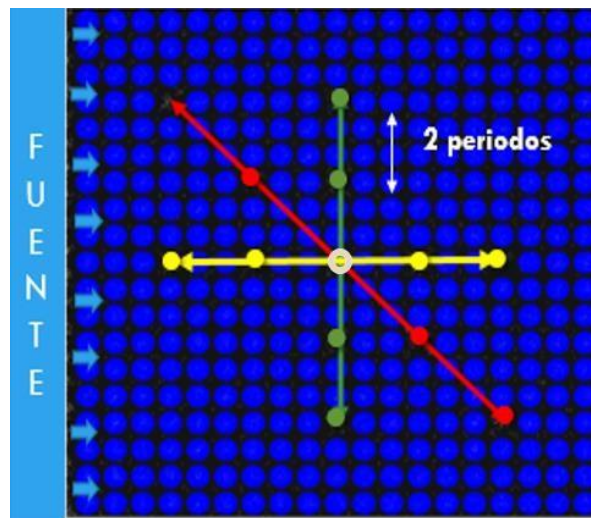
con la subcarpeta *Parameters* de la carpeta *Global Definitions*; ahí se definen los valores tanto del parámetro de red como del radio. Para este trabajo de tesis doctoral, se varió el intervalo del radio en 0.5mm entre cada simulación, es decir, se inició con un valor de 0.7mm y la siguiente simulación se fija un valor de 0.75mm y así sucesivamente hasta llegar a un valor de 0.95mm (tabla 1). En la Figura 5 se representa la subcarpeta de *Parameters* donde se visualiza la carpeta donde se designan los valores del radio y el parámetro de red.



**Figura 5.** Esta carpeta define los parámetros y límites del arreglo fonónico. El parámetro de red lo definimos mediante la letra *a*, que se definió como  $a = 2$  mm, mientras que el valor del radio fue de  $r = 0.8$  mm en un arreglo de 20 x 20, tanto en el eje X como en el eje Y.

### 6.1.2 Efecto de la Presencia de defectos

Para crear las guías de onda, primero se extraen cilindros en posiciones específicas uno por uno generando líneas de defectos. Las configuraciones propuestas en esta tesis son tres: diagonal, horizontal y vertical, como se aprecia en la Figura 6.



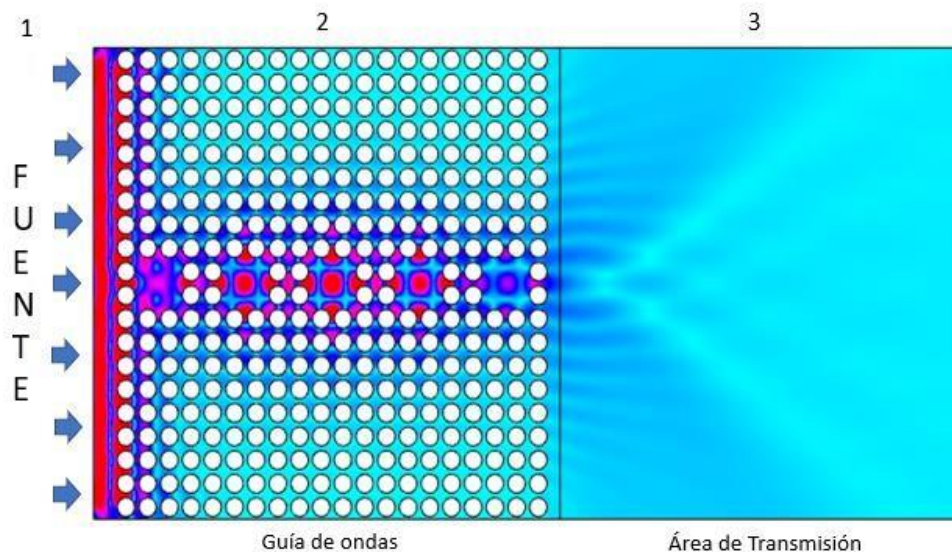
**Figura 6.** Optimización topológica en las estructuras de los cristales fonónicos. De manera general, todas las simulaciones se realizaron con las siguientes configuraciones en función de la emisión de la fuente de las frecuencias [32].

La optimización topológica de los dispersores de sonido se realiza en cristales de 19 x 19 cilindros para efectos de simetría y optimización. Las tres configuraciones propuestas en la tesis son diseñadas cuidadosamente para formar las líneas de defectos y poder controlar la onda de propagación dentro de los cristales. La Figura 6 refleja las tres configuraciones; la línea roja

representa la configuración diagonal, la línea verde el arreglo vertical y amarillo para la horizontal. De igual manera, se indica el punto del centro como punto de partida para los tres tipos de arreglos totalmente simétricos; a partir de ahí, se extrajo un cilindro cada dos periodos o cada dos cilindros hasta tener una línea de cinco defectos para cada arreglo. En cada arreglo se modificó el valor del radio de los cilindros y el parámetro de red se mantuvo constante para elegir el arreglo lineal adecuado utilizado para generar la guía de ondas adecuada.

### 6.1.3 Disposición espacial optimizada de defectos

Continuando con el estudio de la propagación de las ondas elásticas en medios periódicos, se describe en esta sección el proceso de optimización de la guía de ondas. La propuesta de las tres configuraciones hace que ese tipo de sistemas tiene el objetivo de demostrar experimentalmente que el guiado de ondas se puede lograr en estructuras fonónicas quitando las varillas metálicas; esto en función de las simulaciones teóricas en COMSOL. Es por eso el interés en desarrollar guías de ondas óptimas para un guiado eficiente de frecuencias acústicas usando cristales fonónicos. En la Figura 7 se muestra una guía de ondas con cinco defectos horizontales. Se puede apreciar que ahora los defectos son cuadráticos con dos periodos cada uno, confinados en el cristal fonónico para forma una simetría y distribución eficiente.



**Figura 7.** Guía de ondas formada por una línea de cinco defectos en forma horizontal. Este esquema representa las tres partes que conforman fundamentales de las simulaciones teórica en COMSOL; 1 una fuente emisora de frecuencias, 2 una guía de ondas o un cristal perfecto y 3 un área de transmisión donde obtendremos los espectros de transmisión y las bandas prohibidas. Cada defecto origina un modo de vibración propio del sistema acústico que se estará midiendo mediante el Factor de Calidad Q.

### 6.1.4 Factor de Calidad (Q)

Al introducir guías de onda se pueden usar filtros de onda para manipular ciertas frecuencias, mejorar la selectividad, así como reducir la pérdida de inserción o desacoplar el resonador con un alto factor de calidad. Cada defecto o cilindro removido genera modos de vibración en la cavidad originada en el sistema. Además, los filtros de ondas acústicas se pueden extender a la multiplexación como divisor de frecuencias en sistemas acústicos [32]. El factor de calidad determina la resolución de la operación de filtrado, por lo que un factor Q mejora en gran medida

el rendimiento general del sistema fonónico. Además, un alto valor de Q reduce el umbral de potencia de los dispositivos acústicos. Por lo que es necesario diseñar filtros sólidos de alto Q a frecuencias dadas mediante el uso de acoplamiento simples de guías de ondas [51]. La optimización topológica como propuesta innovadora ofrece rutas más amplias en diferentes aplicaciones y campos en investigaciones tecnológicas hoy en día. De manera particular, los arreglos topológicos proporcionan una visión más amplia en diferentes áreas de la ciencia y la tecnología. Es por eso que en vista de la reciente necesidad de crear filtros selectivos y de las ventajas de la optimización espacial, en esta tesis doctoral se presentarán los estudios correspondientes a la optimización topológica en guías de onda basados en cristales fonónicos. Es por esto que se proponen tres diferentes configuraciones para ondas transversales y/o longitudinales a diferentes frecuencias y poder optimizar el factor de calidad Q, regulando únicamente la posición espacial de los defectos; que generan modos vibracionales [52].

El Factor de Calidad Q es el parámetro que expresa la relación existente entre la energía reactiva y la energía de disipación durante un ciclo completo de una señal emitida por una onda en un sistema acústico. Por lo que un alto valor de Q, indica una baja variación de la pérdida de energía acústica en relación con la energía almacenada por el circuito resonador. El Factor de Calidad es un parámetro muy importante para los sistemas osciladores, filtros acústicos o circuitos sintonizados, debido a que proporciona una medida de la calidad de resonancia propio del sistema, por lo que Q es una medida adimensional. Todos los sistemas resonantes responden a una frecuencia determinada, llamada "*frecuencia natural del sistema*", y es propia de cada sistema oscilador.

El valor recíproco de la calidad del sistema, es el factor de pérdida (d), y también carece de dimensiones. Dependiendo de la frecuencia, las cavidades resonantes pueden llegar a alcanzar valores de Q extraordinariamente altos, esto debido a que las únicas partes disipativas del sistema son las paredes de la cavidad originada por la remoción de los cilindros metálicos.

Entonces, por definición el Factor de Calidad Q se encuentra dado por:

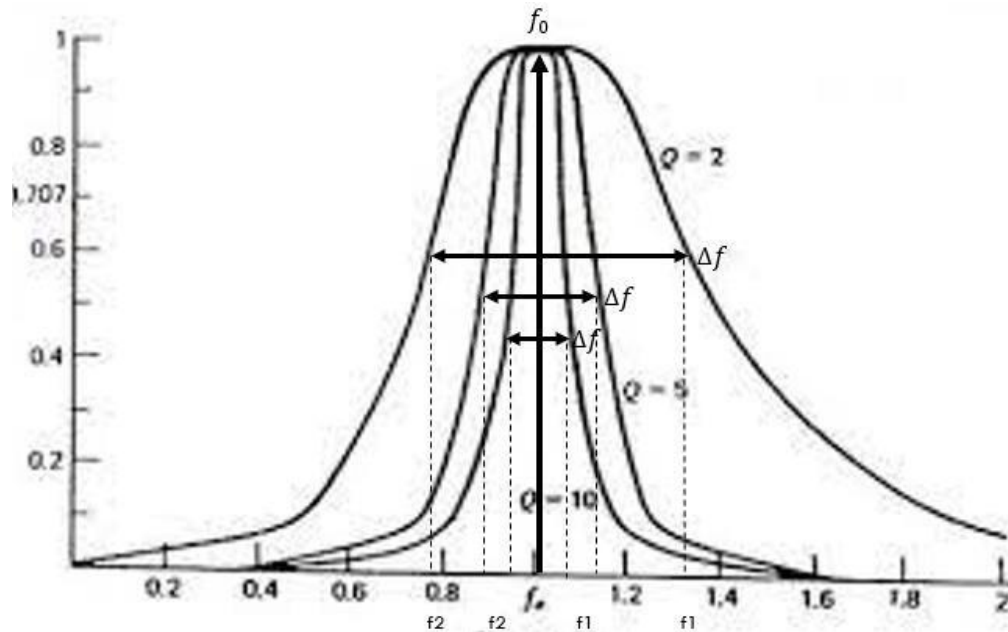
$$Q = \frac{2\pi \text{Energía máxima almacenada por ciclo}}{\text{Energía disipada por ciclo}} \quad (1)$$

El Factor Q, está definido como la frecuencia de resonancia ( $f_0$ ) o el punto más alto alcanzado por la frecuencia, dividida por el ancho de banda ( $f_2 - f_1$ ) obtenido de la misma señal, por lo que Q queda definido como:

$$Q = \frac{f_0}{f_2 - f_1} = \frac{f_0}{\Delta f} \quad (2)$$

El factor de Calidad de un sistema acústico, es por tanto la razón de cambio de su valor de reactancia inductiva con respecto al valor de la resistencia a una frecuencia dada y es, por ende, una medida de la calidad de su eficiencia.

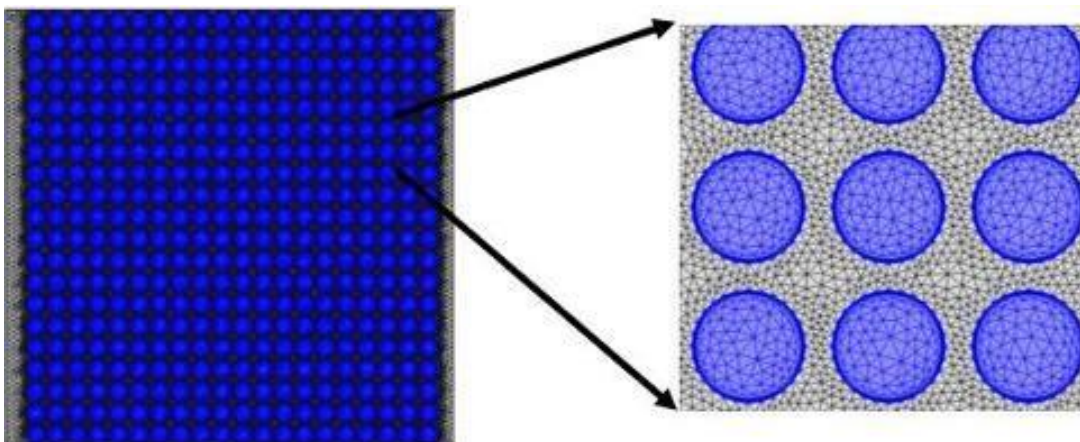
En otras palabras, cuanto mayor sea el valor del Factor de Calidad del sistema, éste estará más próximo a comportarse de manera ideal, es decir, el sistema no presentará una considerable pérdida de energía acústica. En la Figura 8 se representa esquemáticamente la definición de Factor de Calidad Q [32].



**Figura 8.** El factor Q, o también Factor de Calidad o de selectividad, es un parámetro que mide la relación entre la energía reactiva almacenada por un sistema oscilante y la energía que se disipa durante un ciclo completo de la señal localizada [8].

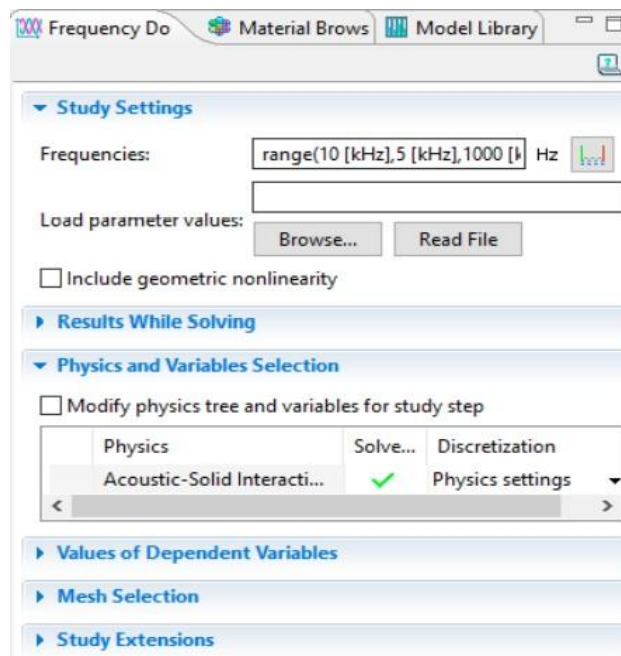
## 6.2 Mallado

El proceso de mallado consiste básicamente que, una vez creado el modelo geométrico, el software subdivide el modelo en partes pequeñas de formas sencillas llamadas elementos, conectadas en puntos comunes llamados "nodos". El mallado genera elementos sólidos de forma tetraédrica, para modelos en 3D, triangulares para simulaciones de modelos 2D (Figura 9) y lineales para sistemas 1D.



**Figura 9.** Arreglo final del mallado en dos dimensiones de un cristal perfecto de varillas de acero inoxidable sumergidas en una matriz de agua. Se destaca que tanto la matriz como los cilindros de acero inoxidable tienen su malla en los límites curvos solo para obtener una representación más detallada de las fronteras de los componentes materiales del modelo simulado.

Todos los modelos simulados poseen su malla determinada en consecuencia a la configuración y al número de periodos que se hayan hecho para cada modelo de una guía de ondas. Posteriormente a la generación de la malla de todos los modelos, se define el rango del intervalo de frecuencias en el que se realiza la simulación. Sólo cuando COMSOL muestre la finalización de la malla del modelo, la ventanilla correspondiente se despliega en la barra de menú. Para este caso se despliega la subcarpeta *Study* que adiciona los cambios de la frecuencia en la que se desea simular las estructuras fonónicas. Para finalizar el modelado y dar entrada a la simulación, se identifica el botón con el ícono *Compute* para iniciar la simulación en COMSOL. En un inicio todos los modelos de los cristales perfectos se simularon en un intervalo de 100 a 800 kHz, para poder identificar las bandas de transmisión para cada valor correspondiente al radio.



**Figura 10.** La sección *Study*, adiciona los cambios involucrados al rango de frecuencias en el cual se desea analizar el cristal fonónico.

Hasta este momento sabemos que COMSOL es una plataforma de software basado en métodos numéricos avanzados para el modelado y simulación de diversos problemas basados técnicamente en la Física. COMSOL Multiphysics, se conforma por una gran variedad de funcionalidades como herramienta teórica en el modelado de estos problemas, incluida la multifísica. Ahora, para el desarrollo del estudio de la presente tesis doctoral se utiliza específicamente el módulo *Acoustic Module* que está diseñado para la producción, utilización y análisis de ondas acústicas. En las secciones anteriores se ha descrito las diferentes interfaces con la descripción de las herramientas útiles en el modelado de la generación de las ondas que se propagarán en sólidos y líquidos. Esta herramienta computacional permite una mejor comprensión de problemas difíciles de ser manipulados experimentalmente, así como en el diseño teórico previo a su manufactura. El módulo de *Acoustic* básicamente resuelve la ecuación de onda para las ondas mecánicas y elásticas en medios sólidos y líquidos, debido a que las ondas también se pueden describir mediante el movimiento de las partículas del medio por el que se mueven. La posición de las partículas del medio se puede modelar matemáticamente como función de onda, de las cuales se usan para calcular la

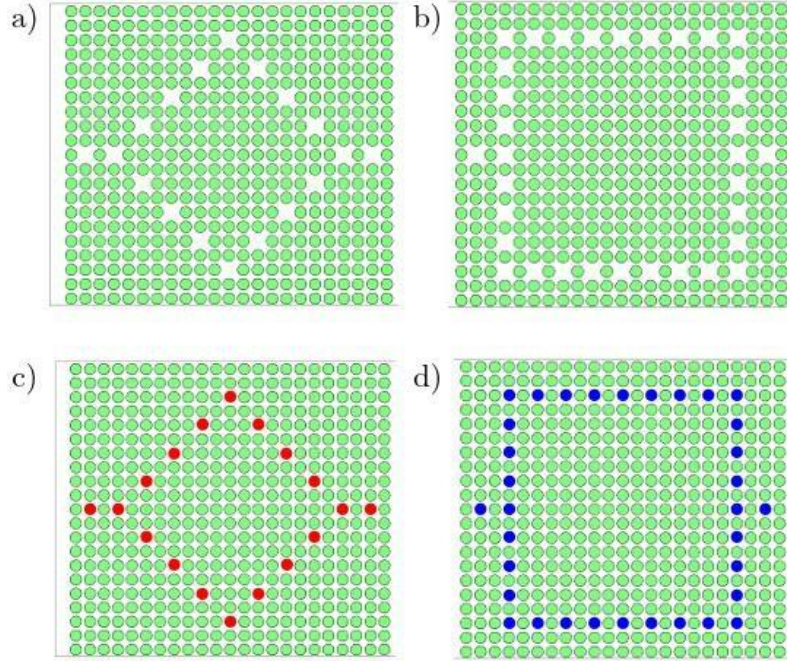
posición, la velocidad y la aceleración de las partículas del medio de la onda elástica en cualquier momento. A continuación, se describe matemáticamente la ecuación de onda.

### 6.3 Interferómetro Acústico

La interferometría es un método de medición que aplica el fenómeno de interferencia de ondas (generalmente, ondas de luz, ondas de radio u ondas acústicas). Las mediciones pueden incluir otras características de las propias ondas y de los materiales por los que se propagan. Además, la interferometría se utiliza para describir las técnicas que utilizan diferentes tipos de onda para estudiar los cambios de desplazamiento. Mediante dos ondas elásticas (normalmente una onda desdoblada en dos), se forma un patrón de interferencia donde se superponen las dos ondas. Puesto que la longitud de onda es ultrasónica, pueden detectarse pequeños cambios en las diferencias de las trayectorias acústicas (distancia recorrida), entre las dos ondas, ya que las diferencias producen cambios notables en el patrón de interferencia. Por consiguiente, la interferometría acústica ha sido una técnica de aplicación tecnológica muy valiosa en los últimos años. Su precisión se ha mejorado con la manipulación y guiado de ondas mecánicas [53]. En 1887, Albert A. Michelson desarrolló el primer interferómetro y demostró el uso del principio de la interferencia de la luz como herramienta de medición. Y aunque la tecnología y la precisión de medición ha avanzado con el paso de los años, el principio básico del interferómetro de Michelson subyace en el núcleo de la interferometría, incluso en la acústica [53].

#### 6.3.1 Modelado

Esta sección trata de la simulación y detalle de las propiedades de transporte de las llamadas guías de onda acústicas de resonador acoplado o CRAW's por sus siglas en inglés. Los esquemas de los modelos de interés, compuestos por cilindros dispuestos en una estructura bidimensional, como se muestran en la Figura 11. Las figuras a) y b) corresponden a los cristales fonónicos con defectos simulados en la plataforma COMSOL, con los mismos parámetros materiales descritos en la tabla 1. Allí los sitios desocupados, incrustados en una estructura bidimensional localmente periódica como un cristal fonónico finito, corresponden a defectos en el cristal fonónico. Se define un modelo diagonal y un modelo horizontal, como los mostrados en la Figura 11. Los defectos o cavidades están diseñados de tal manera que sus correspondientes frecuencias de resonancia se encuentran dentro del bandgap fonónico del cristal fonónico finito, lo que a su vez también permite localizar el modo de resonancia de la impureza respectiva. El acoplamiento "débil" existente entre los resonadores vecinos se describe a través de ondas de Bloch evanescentes, que da lugar a la aproximación de enlace estrecho o *Tight binding*, del vecino más cercano que generalmente se encuentra sustentado en la física del estado sólido [33]. Los esquemas c) y d) muestran una representación del modelo del sistema correspondiente definido por los puntos rojos (azules) para el modelo diagonal (horizontal). Así, la diagonal y los modelos horizontales de la Figura 11 pueden describirse mediante el siguiente vecino más cercano Hamiltoniano de unión estrecha



**Figura 11.** Esquemas de los modelos de estudio compuestos por cilindros metálicos (parte superior). Los sitios no ocupados representan cavidades defectuosas en la matriz y definen el arreglo a) diagonal y b) horizontal. Estos modelos pueden describirse efectivamente mediante el método de *Amarre Fuerte*.

## 6.4 Tight Binding

Con el modelo de Tight Binding se pueden describir mediante el vecino siguiente más cercano de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{n,m} f_{n,m} |n, m \rangle \langle n, m| \\
 + & \sum_{n,m} [v(n, m), (n + 1), m) |n, m \rangle \langle n + 1, m| + v(n, m), (n - 1), m) |n, m \rangle \langle n - 1, m| \\
 & + v(n, m), (n, m + 1) |n, m \rangle \langle n, m + 1| + v(n, m), (n, m - 1) |n, m \rangle \langle n, m - 1 \rangle \dots (1)
 \end{aligned}$$

Donde  $f_{n,m}$  es la frecuencia de resonancia de las cavidades defectuosas en las posiciones  $|n, m \rangle$  y  $v_{i,j}$  es la frecuencia de salto de los vecinos más cercanos. Para cada modelo, ambos parámetros  $f$  y  $v$  se determinan en base al ajuste de los cálculos en los datos experimentales.

### 6.4.1 Enfoque Matemático de la Matriz de Dispersión

Los modelos aislados tanto diagonales como horizontales se muestran en la Figura 19, en los paneles c) y d), se pueden abrir uniéndose a dos conductores perfectos monomodo semi-infinitos con una fuerza de acoplamiento  $\gamma^{L,R}$  a los defectos de la izquierda ( $L$ ) y a los de la derecha ( $R$ ) respectivamente.

El sistema matricial de dispersión de  $2 \times 2$ , se representa como:

$$S(f) = \begin{bmatrix} r & t \\ t & r \end{bmatrix} = \mathbf{1} - 2i \operatorname{sen}(k) W^T (f \mathbf{1} - H_{eff})^{-1} W \dots (2)$$

Donde  $r(r)$  y  $t(t)$  son las amplitudes de reflexión y transmisión cuando la incidencia es por la derecha (izquierda),  $\mathbf{1}$  es la matriz unitaria de dimensión  $2$ ,  $k = \arccos(f/2)$ , el vector de onda correspondiente a la frecuencia  $f$ , y  $H_{eff}$  es el Hamiltoniano no Hermitiano dado por:

$$H_{eff} = H - \frac{e^{ik}}{2} W W^T \dots (3)$$

Donde  $H$  es la matriz Hamiltoniana  $N \times N$  que describe la muestra del sistema (ver ecuación (1)) con  $N$  estados resonantes. En las ecuaciones (2) y (3), la matriz  $W$ , donde el superíndice  $T$  indica la matriz transpuesta  $N \times 2$ , que se acopla a los  $N$  modos resonantes, para un modelo cerrado a los que dos de esos modos se propagan en esa misma dirección. Estos elementos están definidos mediante la expresión:

$$W_{ij} = 2\pi \sum_{c=L,R} A_i^c(f) A_j^c(f) \dots (4)$$

Con las amplitudes acopladas dadas por:

$$A_{L,R}^i(f) = \sqrt{\frac{\overline{L,R}}{\pi}} (1 - \frac{f^2}{4})^{1/4} (\delta_{i,L} + \delta_{i,R}) \dots (5)$$

Donde  $\delta_{i,j}$  es la delta de Kronecker. Además, la dependencia de la frecuencia en  $H_{eff}$  se puede despreciar, ya que  $\arccos(f/2)$  varía ligeramente en el centro de la banda de transmisión. Entonces, a partir de la matriz  $S(f)$  de dos canales de la ecuación (2), la transmisión se obtiene a partir de la amplitud de la transmisión como  $|t|^2 = |r|^2$ .



# 7. Resultados y Discusión

# Artículo 1

D. Reyes, D. Martínez, M. Mayorga, H. Heo, E. Walker, A. Neogi, *Optimization of the Spatial Configuration of Local Defects in Phononic Crystals for High Q Cavity*, *Front. Mech. Eng.*, 6 (2020) 592787.

## Resumen General

En el artículo que se incluye a continuación, como producto del trabajo desarrollado en el proyecto doctoral, se reportó el como la disposición espacial de defectos inducidos en un cristal fonónico afecta la propagación de ondas de ultrasonido, así como el efecto del radio en el factor de calidad (Q-factor). Se describe el cómo al introducir defectos en una red periódica 2-D, conlleva a tener cavidades fonónicas o guías de ondas en un cristal fonónico en el rango de frecuencia ultrasónica. El cristal analizado, compuesto por dispersores de sonido de acero inoxidable de 0.8 mm de radio, estuvieron periódicamente inmersos en agua, en un arreglo cuadrado con un parámetro de red de 2 mm; el cristal fue modelado en la plataforma COMSOL y caracterizado experimentalmente mediante espectroscopía ultrasónica; los defectos fueron inducidos al remover cilindros en disposiciones específicas dentro del cristal. Se demostró que la disposición de estos defectos en el cristal fonónico da como resultado la modificación del factor Q de la guía de ondas. Las guías de ondas basadas en líneas de defectos dentro del cristal fonónico tuvieron una configuraron horizontal, vertical y diagonal a lo largo de la dirección de propagación de las ondas acústicas. Las simulaciones numéricas respaldadas por demostraciones experimentales indican que el factor Q de la guía de ondas basado en defectos mejora más de 15 veces para la configuración diagonal en comparación con la configuración horizontal. Se demostró que la configuración de defectos diagonal controla la propagación de ondas de ultrasonido a través del cristal, con una banda de transmisión angosta (3 kHz) dentro del intervalo de frecuencias correspondiente al bandgap. Para el caso horizontal el ancho de banda fue de 45 kHz. También aumenta debido a un aumento en el radio de los dispersores, que varió de 0.7 a 0.95 mm; para el último radio el factor de calidad teórico fue de aproximadamente 3200.



# Optimization of the Spatial Configuration of Local Defects in Phononic Crystals for High Q Cavity

Delfino Reyes<sup>1,2\*</sup>, David Martínez<sup>3</sup>, Miguel Mayorga<sup>1</sup>, Hyeonu Heo<sup>2</sup>, Ezekiel Walker<sup>2,4</sup> and Arup Neogi<sup>2\*</sup>

<sup>1</sup>Faculty of Science, Autonomous University of the State of Mexico, Toluca, Mexico, <sup>2</sup>Department of Physics, University of North Texas, Denton, TX, United States, <sup>3</sup>PhD in Science Programme, Faculty of Science, Autonomous University of the State of Mexico, Toluca, Mexico, <sup>4</sup>Echonovus Inc., Denton, TX, United States

## OPEN ACCESS

### Edited by:

Chengzhi Shi,  
Georgia Institute of Technology,  
United States

### Reviewed by:

Yan-Feng Wang,  
Tianjin University, China  
Jin-Chen Hsu,  
National Yunlin University of Science  
and Technology, Taiwan

### \*Correspondence:

Delfino Reyes  
dreyes.fc@gmail.com  
Arup Neogi  
arup@unt.edu

### Specialty section:

This article was submitted to  
Micro- and Nanoelectromechanical  
Systems,  
a section of the journal  
Frontiers in Mechanical Engineering

**Received:** 08 August 2020

**Accepted:** 15 October 2020

**Published:** 23 December 2020

### Citation:

Reyes D, Martínez D, Mayorga M,  
Heo H, Walker E and Neogi A (2020)  
Optimization of the Spatial  
Configuration of Local Defects in  
Phononic Crystals for High Q Cavity.  
Front. Mech. Eng. 6:592787.  
doi: 10.3389/fmech.2020.592787

Defects can be introduced within a 2-D periodic lattice to realize phononic cavities or phononic crystal (PnC) waveguides at the ultrasonic frequency range. The arrangement of these defects within a PnC lattice results in the modification of the Q factor of the cavity or the waveguide. In this work, cavity defects within a PnC formed using cylindrical stainless steel scatterers in water have been modified to control the propagation and Q factor of acoustic waveguides realized through defect channels. The defect channel-based waveguides within the PnC were configured horizontally, vertically, and diagonally along the direction of the propagation of the acoustic waves. Numerical simulations supported by experimental demonstration indicate that the defect-based waveguide's Q factor is improved by over 15 times for the diagonal configuration compared to the horizontal configuration. It also increases due to an increase in the scatterers' radius, which was varied from 0.7 to 0.95 mm.

**Keywords:** phononic crystal, waveguides, defects, quality factor, ultrasound

## INTRODUCTION

Over the past three decades, the growing development and understanding of artificial crystal arrangements composed of periodically disposed materials with different physical properties have led to novel metamaterials. This phononic crystal and metamaterials have been utilized to control and manipulate acoustic and mechanical wave propagation (Wagner, 2016). The phononic crystal's elastic properties and the periodicity of the lattice and dimension of the scatterers produce the well-known phononic bandgaps (PnBGs). PnBGs represent the frequency ranges of the waves that are not supported within the phononic structure, and thereby their transmission through the crystal is blocked. The PnBGs can be modified by tailoring the impedance contrast among their components, i.e., elastic constants or the mass density of the scatters and matrix, by adjusting the filling fraction ratio or the material parameters (Zhou, 2009; Pennec, 2010) or the spatial distribution of their components (Zhang Z., 2017; Reyes, 2019). Several manufacturing techniques have been used for the design of PnCs with tunable PnBGs through external stimulus directly acting on one or both of their components, making it possible to realize active PnCs whose acoustic properties are sensitive to electric or magnetic fields (Allein, 2016; Ponge, 2016), stress (Zhang P., 2017), or heat absorption (Walker, 2014), among other factors. The sensitivity of materials to external stimulus has resulted in the concept of tunable PC structures that has been proposed to manipulate acoustic wave propagation. The modification of material properties and configuration has led to bandgap engineering and the tunable mechanical reconfiguration and materials with coupling between waveguides and defects (Walker, 2017; Wang, 2020).

PnBGs are composed of forbidden eigenmodes, which, as in solid-state theory, can be modified by inducing defects in the perfect PnC through the removal or distortion of the scatterers (Aly, 2017). Introducing a defect into the otherwise regular structure, either a point defect or a linear defect, can open up small transmission windows within the PnBGs (Lucklum, 2010). It can result in an acoustic waveguide device's formation to guide waves at frequencies within the PnBG. It has been demonstrated that in a defect-based waveguide, the interdefects separation is critical for the quality and transmissivity of the wave at the guided frequencies (Escalante, 2013; Dong, 2017). The quality factor,  $Q = f_0/\Delta f$ , describes the bandwidth of a signal, where  $f_0$  is the central frequency of the source and  $\Delta f$  is the bandwidth or the full width at half maxima (FWHM) of the source. A high Q of the waveguide or cavity implies a narrow bandwidth with minimal damping and has been used as an efficient filter (Otter, 2014; Han, 2019). High-Q resonator PCs' developments are essential for developing passive acoustical waveguides and modulators within integrated wireless systems and efficient acoustic signal processing systems (Mohammadi, 2009; Han, 2019). Micromechanical resonators have been used for Q factor management by tuning the external feedback control and various external pumping schemes such as optical, mechanical, thermo-piezoresistive, and parametric pumping (Lehto Miller, 2018). The mechanical quality factor of micro- or nanomechanical resonator operating in MHz or GHz is a significant parameter to estimate the figure of merit. It is a measure of the energy decay rate in each cycle of vibrations. Q is related to the thermomechanical displacement noise, which is vital for designing force sensors and highly sensitive mechanical structures (Park, 2017; Lehto Miller, 2018). PnC-based Q-factor structures are mainly supported by inducing defect states due to broken periodicity. At the same time, in microresonators, it is achieved by applying an external time-varying (ac) or static (dc) energy source to the resonator (Eichler, 2011).

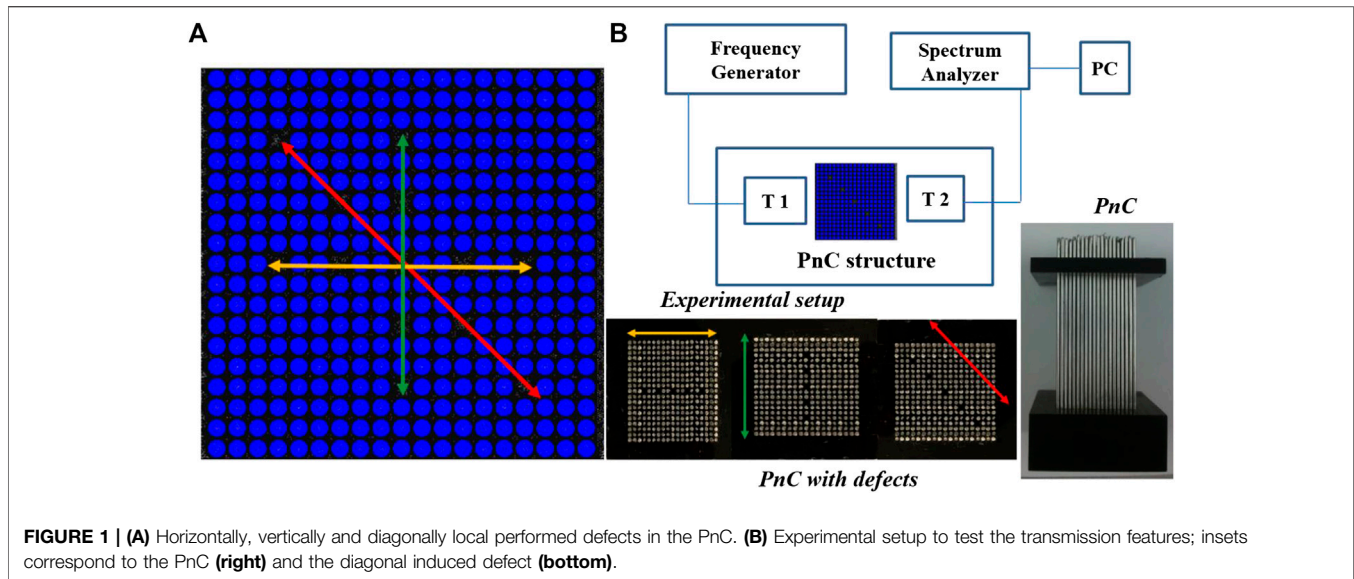
Phononic crystals with various Q factors have been reported and tailored mainly for operation in the high-frequency range of MHz to GHz. These structures were mostly based on microengineering hollowed plates (Mohammadi, 2009; Bahr, 2014). The lattice parameters of PnCs with resonance frequencies in the GHz or MHz are mostly micrometric devices with the active component of a few microns. Phononic crystals designed for low-frequency applications suffer relatively reduced scattering losses compared to GHz or MHz devices. The absolute phononic gaps in high-frequency GHz or MHz micrometric structures appear at a frequency below the Bragg limit. The localization of resonant high-frequency acoustic modes occurs within a defect band of the PnCs (Liu, 2000). The inclusion of tungsten in a silicon lattice yields a Q factor of  $10^4$  at 1.314 GHz (Goettler, 2010). A fully planar 2D optomechanical crystal of silicon microchip consisting of a nanoscale photonic crystal cavity was shown to operate at 1.4 GHz frequency for 57 nm cavities, yielding a Q of  $1.5 \times 10^6$ , which strongly depends on the operation and device temperature (Mayer Alegre, 2011). Silicon carbide PnC cavities operating in the RF and microwave showed Q factors of 2000 and 500 for 2.24 and 2.55 GHz frequency, respectively (Ziaei-Moayyed, 2011). The fabrication of

high-frequency PnCs uses standard CMOS processes to realize high-Q RF MEMS resonators operating at 2.81 (Q ~ 903) and 4.54 (Q ~ 54) GHz (Bahr, 2014).

Q factors in the MHz region have also been explored. A PnC with line defects realized by embedding a honeycomb array (lattice parameter of 15  $\mu\text{m}$ ) of cylindrical holes (6.5  $\mu\text{m}$ ) within a thin Si slab showed Q factors of 6,300 and 2,128 at 126.52 and 149.1 MHz, respectively (Mohammadi, 2009). A silicon PnC micromechanical resonator, manufactured by removing two rows of scattering holes from the center of the PnC was able to induce resonances in the MHz range. Q factors ranging from 1,000 to 100 were reported in this structure (Wang, 2014). A quasi-1D phononic crystal performed using dielectric membranes with a lattice parameter of ~1 mm was used to realize high Q factors,  $2.2 \times 10^6$  and  $5.2 \times 10^6$  at 2.81 and 2.73 MHz, respectively (Tsaturyan, 2014). A quality factor value of 105,900 at 261.5 MHz was reported in PnC using 14.2  $\mu\text{m}$  AlN unit cells with 4.7  $\mu\text{m}$  air holes [24]. A Fabry-Perot SAW resonators formed between tapered PnC mirrors and patterned on a GaN-on-sapphire material platform were used to increase the Q factor at 194.07 MHz (Xu, 2018). All these reports demonstrate Q factors in the high-frequency range. However, there is not much work on optimizing the Q factor of cavities or waveguides at the low frequency. A two-dimensional PnC consisting of PZT-4D rods (175  $\mu\text{m}$ ) in air ambient with its lattice parameter optimized for 490 kHz was reported (Shakeri, 2019). A rod with a strain-dependent radius was introduced as a defect site within the PnC to control the defect frequency. This active phononic structure induced a resonance frequency in the kHz regime, 426.14 and 433.13 kHz, with a Q factor of around 1,100. Low-frequency ultrasound in the kHz frequency range is essential for nondestructive evaluation of materials and imaging at depth.

The corresponding filtering and coupling between defects can be improved or tuned to yield Q factor optimized for different frequency intervals by adjusting the geometrical and material parameters or even the scatterers' orientation (Lu, 2009; Wang, 2020). The coupling strength can essentially control the Q factor of PnC with defect-based waveguides. The periodicity of separation between each defect can significantly modify the Q factor when the defect is made of a scatterer with different features with respect to the rest of the defects within the PnC (Wang, 2018; Reyes, 2019). Besides, the material and geometrical features of the defect can also influence the Q factor. In complex PnC-based Q factor structures, it can depend on the temperature and the dimensionality of the defect (Ziaei-Moayyed, 2011).

In this work, the Q factor of a defect-based waveguide is optimized. A PnC with stainless steel scatterers in water was considered with a bandgap in the kHz ranges as the basic platform for controlling acoustic wave propagation. Phononic crystals formed with varying radii of the scatterers were simulated. Acoustic waveguides were formed by defect channels that were created in a direction along and orthogonal to the direction of the propagation of the ultrasonic waves within the phononic crystal as well in a direction diagonal to the wave propagation. Results reveal that the quality factor is enhanced by over 15 times for the diagonal configuration and is also improved by increasing the cylinders' radius while keeping the lattice

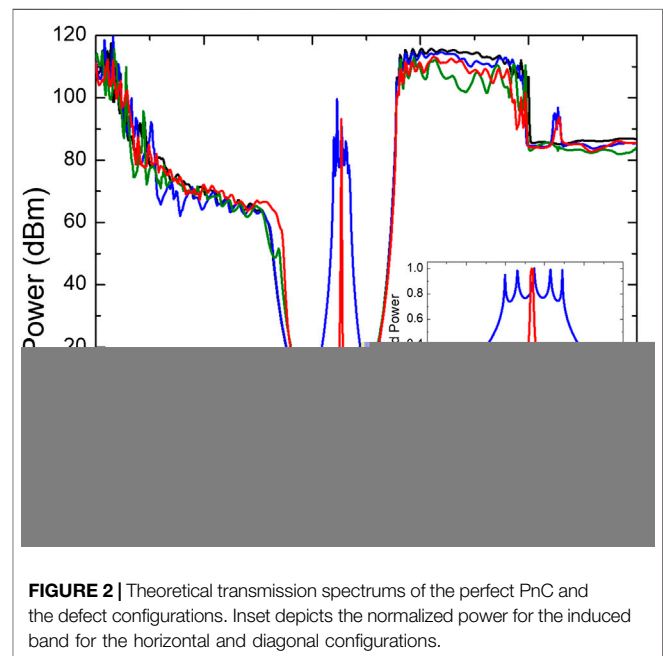


parameter constant. The efficiency of the diagonal waveguide channel was corroborated using an experimental demonstration.

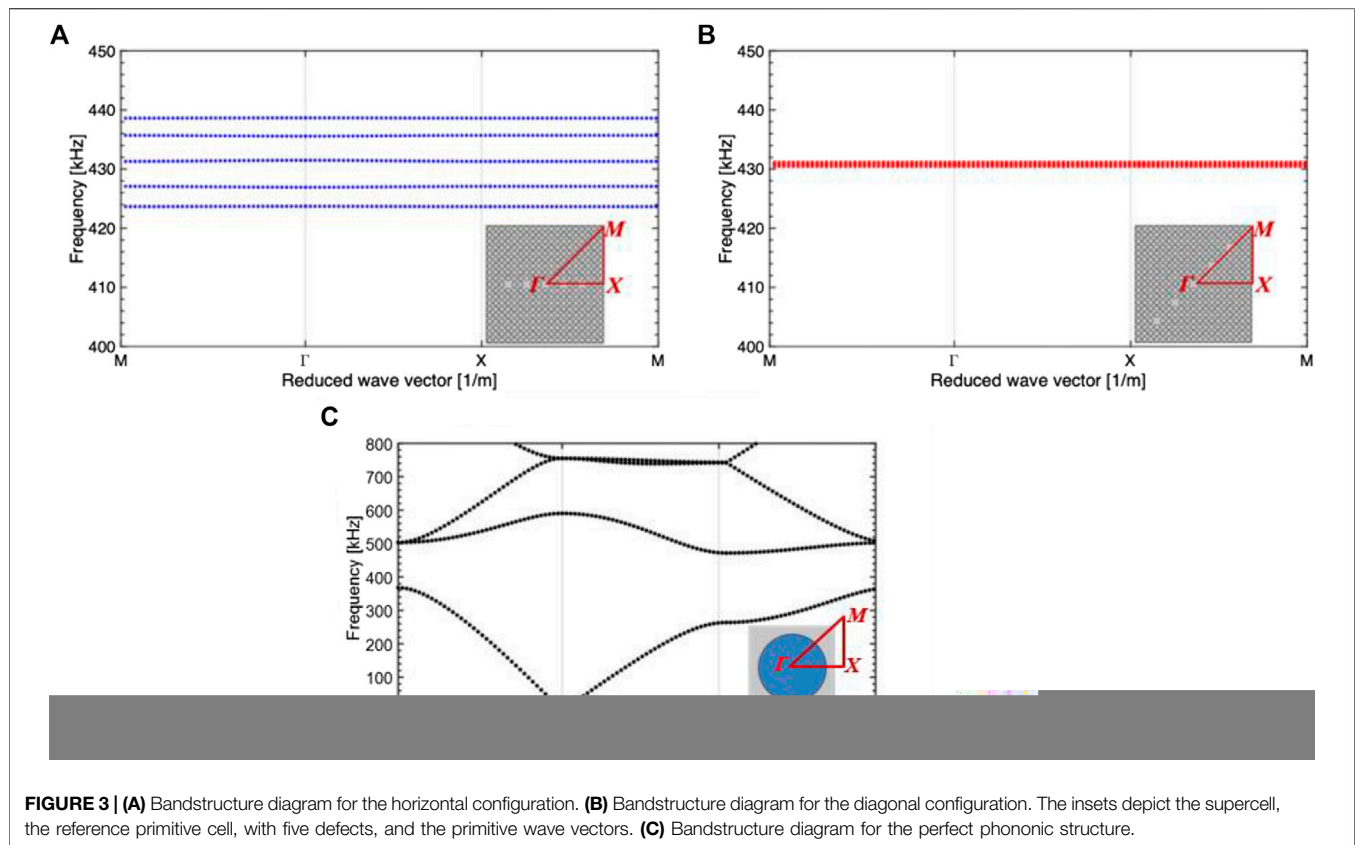
### Experimental and Simulation Details

In order to investigate the effect of the spatial configuration of the induced defects in a perfect PnC, three PnCs with defects were considered in the COMSOL-Multiphysics platform. The perfect PnC was simulated as an array of  $19 \times 19$  steel cylinders arranged as a square lattice and immersed within a water matrix. The square-shaped matrix was considered to reduce the computational effort. The cylinder diameter ( $d$ ) and lattice parameter ( $a$ ) were 1.6 and 2 mm, respectively, which yield a filling fraction of  $f = \pi d^2 / (4a^2) = 0.50$ . The density and speed of sound were  $1,000 \text{ kg/m}^3$  and  $1,480 \text{ m/s}$  and  $7,800 \text{ kg/m}^3$  and  $6,300 \text{ m/s}$  for water and steel, correspondingly. The defects were induced by removing five cylinders in the perfect crystal, as shown in **Figure 1A**; for each defect line, the inter-defect distance was two periods. The yellow double arrow corresponds to a defect line along the wave incident's direction on the crystal, i.e., for propagation along with the horizontal configuration. The green arrow denotes the vertical configuration when the defects are orthogonal to the incident wave's initial direction on the crystal. The red arrow represents the diagonal configuration. A separate figure depicts each defect line induced in a perfect PnC. The transmission spectrum was calculated from 200 to 700 kHz for the three defect-based structures and the PnC without defects.

The experimental transmission spectra of the PnCs and the different defect configurations were achieved using the ultrasonic spectroscopy technique, as shown in **Figure 1B**. According to the abovementioned lattice parameter and cylinder diameter, steel rods were periodically fixed and capped by a bottom and top Plexiglas bases (inset in **Figure 1B**, right). Two immersion transducers (*Olympus V301*) placed face to face were used as emitter and receiver (44 mm apart). The phonic structure was located between the transducers, with a distance of 2 mm of separation from either faces of the transducer to avoid the



near-field zone and the transducer facets' reflections. A broadband input signal from 200 to 700 kHz range was utilized from a frequency generator (*Teledyne LeCroy, WaveStation 2012*) to obtain each analyzed phonic structure's transmission spectrum experimentally. The output signal crossing the crystal was recorded by the other transducer that was connected to a spectrum analyzer (*Tektronix-MDO3024*) coupled to a PC for the data processing. PnC and transducers were located in a Plexiglas tank filled with 40 L of DI water at room temperature. A picture of the defect-based structures is illustrated in **Figure 1B** (bottom), for the horizontal, vertical, and diagonal defect configurations.



**FIGURE 3 | (A)** Bandstructure diagram for the horizontal configuration. **(B)** Bandstructure diagram for the diagonal configuration. The insets depict the supercell, the reference primitive cell, with five defects, and the primitive wave vectors. **(C)** Bandstructure diagram for the perfect phononic structure.

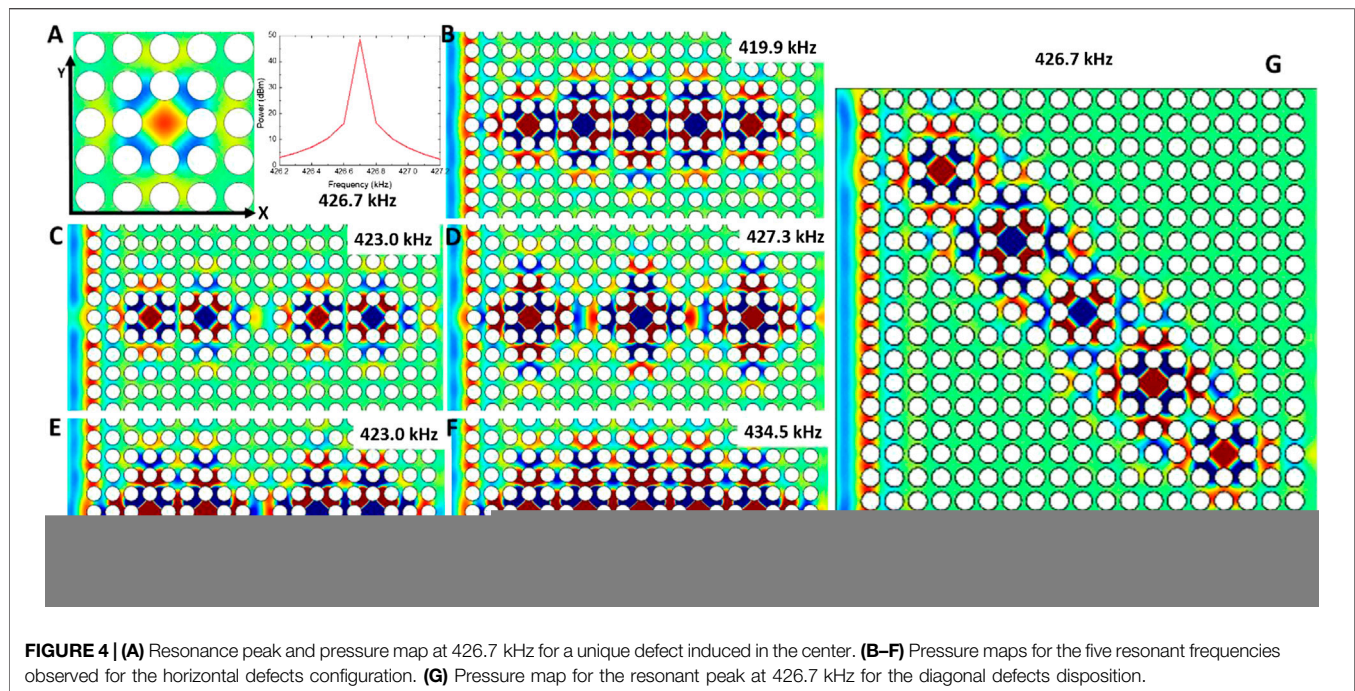
## RESULTS

Simulation results about the transmission features of the perfect  $19 \times 19$  PnC (black line in **Figure 2**) showed two well-defined transmission bands; the first band starts at 200 kHz, and its intensity decreases at 380 kHz, while the second one is clearly identified between 480 and 580 kHz. The PnC structure provides a phononic bandgap in the range  $380 < f < 480$  kHz. The blue line in **Figure 2** corresponds to the transmission spectrum of the PnC for the horizontal configuration, while the green is for the vertical configuration, and the red line corresponds to the diagonal configuration, as depicted in **Figure 1A**. It can be observed that the defect arrangement modifies the bandgap in different ways. The horizontal configuration induces a new transmission band inside the bandgap from 400 kHz  $< f < 445$  kHz, whereas the diagonal configuration has a narrow band from around 425 kHz  $< f < 428$  kHz. It implies that the horizontal configuration opens the bandgap by around 45%, while the diagonal opens it up by only 3%. The vertical defect lines do not induce strong transmission, as observed from the three peaks in the green line.

The inset plot within **Figure 2** shows the normalized transmission band induced by the defects for the horizontal and diagonal configuration with a higher resolution. For the horizontal arrangement, five resonant modes were induced; those peaks appear at 419.9, 423, 427.3, 431.5, and 434.5 kHz. The simulation of a unique defect (as will be shown below) introduced in the center of the crystal showed a nonintense peak centered at

426.7 kHz, which is not present at the multidefect horizontal. The transmission band due to the horizontal configuration is a result of the coupling of the individual resonances at each cavity defect. For the vertical configuration (green line in **Figure 2**), the three small-peaks peaks in the transmission spectra were observed at 419.9, 427.3, and 434.5 kHz, which were also present in the horizontal arrangement. Interestingly, for the diagonal configuration, a narrow peak centered at 426.7 kHz was recorded. However, for this configuration, a higher resolution shows that the narrow peak is still composed of three resonances whose frequencies are 426.43, 426.68, and 426.99 kHz and are separated by around 0.27 kHz.

Bulk bandstructure calculations of the phononic crystals having different combinations of five defects are presented in **Figure 3**. The whole phononic crystal was considered as the supercell, the reference primitive cell, and the primitive wave vectors of the supercell Brillouin zone were chosen to find the eigenvalues within the frequency ranging from 400 to 450 kHz. The supercell bandstructure was calculated using the finite element method, COMSOL Multiphysics software. In **Figure 3**, the bandstructure for the horizontal (**Figure 3A**) and diagonal (**Figure 3B**) configurations shows the possible modes. The horizontal defects have five distinct modes between 420 and 440 kHz, at 423.7, 427.1, 431.3, 435.7, and 438.6 kHz. In the diagonal defect configuration, the superposition of multiple modes leads to a single dominant mode at 430.8 kHz. These modes were separated by 0.2 kHz in

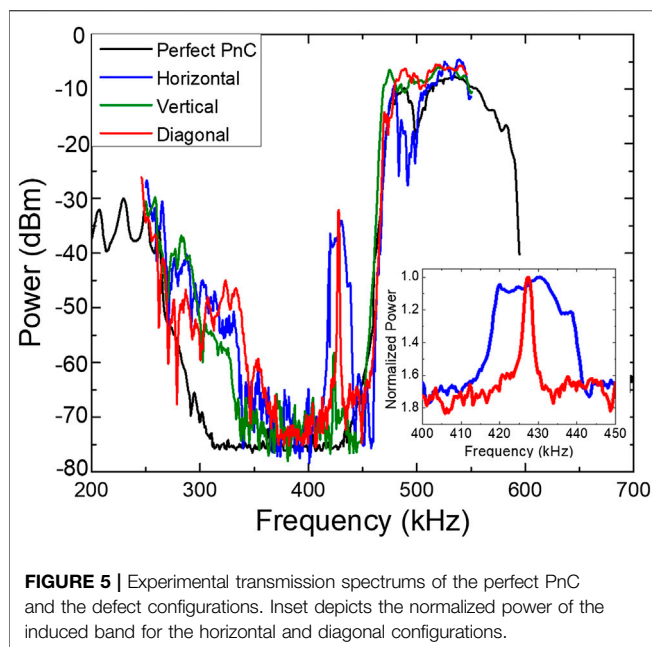


the transmission spectrum, with the central frequency around 430.8 kHz (430.4, 430.6, 430.8, 431, and 432.2 kHz). The calculated eigenmodes differ by 4 kHz with respect to the transmitted peaks in **Figure 2** and occur due to the system's finite length. It should be noted that the experimentally measured transmission spectrum in **Figure 2** and the pressure maps in **Figure 4** were for the finite PnC. In contrast, the bandstructure was calculated for the infinite supercell. However, there is a qualitative agreement of the same pressure maps in **Figure 4**. The bandstructure for the perfect PnC is displayed in **Figure 3C**. The phononic bandgap was calculated between 375 and 495 kHz, with a stopgap in the frequency interval 400–450 kHz at which the defect mode-induced transmission was observed for the defect configurations. The experimentally observed transmission characteristics well-matched with the calculated band structures and numerically calculated transmission.

From the inset in **Figure 2**, it was found that the FWHM, or simply  $\Delta f$ , reduces from 20.66 kHz for the horizontal configuration to 1.32 kHz for the diagonal configuration, which is around sixteen times lower. Using  $\Delta f$ , the quality factor can be calculated as  $Q = f_0/\Delta f$ , where  $f_0$  is the resonance frequency. For the horizontal (H) and diagonal (D) configurations, the quality factor is  $Q_H = 20.6$  (using the resonance peak at 427.3 kHz) and  $Q_D = 323$ , respectively, implying a quality factor improvement by sixteen times. This range of frequencies is particularly important for echo-sounder measurements that are performed in the zooplankton response monitoring (Churnside, 2005). It is well known that smaller energy losses result in larger Q factors. The results show that the spatial configuration of defects can be used to control dissipation, thereby improving the Q factor of the overall acoustic waveguide. The control in the direction and intensity

of propagation of ultrasonic waves can be used for pressure and temperature sensing applications. Recently the modification of the properties of cavity fluid has been used as a highly sensitive sensor platform (Rostami-Dogolsara, 2019).

As was aforementioned, a unique defect induced in the center of the crystal, i.e., nine periods away from the emitter and receiver, breaks the symmetry and leads to a transmission peak at 426.7 kHz, shown in **Figures 4A**. Here, the pressure field of this resonant frequency is also displayed. The pressure field of all the shown frequencies was obtained from COMSOL results. By exploring within the cavity, it is observed that the energy distribution is symmetrical in both X and Y directions. The resonance mainly occurs in the central region and is symmetrically spread out to the neighboring scatterers. **Figures 4B–F** depict the pressure fields at five resonant frequencies for the horizontal defect configuration, which were spectrally plotted in **Figure 2**. **Figures 4B** corresponds to the pressure field for the first resonant frequency at 419.9 kHz. The energy distribution observed in this case for the first, third, and fifth cavities shows the same energy distribution inside the cavity as observed for the single defect—the maxima energy is concentrated at the center of the cavity. However, for the second and fourth cavities, the minimum energy intensity is concentrated at the cavities' center. This observed pressure distribution is produced by the periodic propagation of the guided wave. **Figures 4B–F** show that each resonant frequency yields a different energy distribution at the five induced cavities. Those five resonant frequencies have a very similar wavelength between 3.46 and 3.40 mm. In **Figures 4G**, the energy distribution of the diagonal configuration at 426.7 kHz is presented. The first, fourth, and fifth energy distributions are similar to the single cavity, whereas showing an inversion in the



second and third cavities. The five cavities' energy distribution is different from those observed in any other frequency of the horizontal configuration.

In **Figure 5**, the experimental results for the case simulated in **Figure 2** are displayed. There is a good agreement of the experimental results and the numerical analysis. The inset in **Figure 5** shows the expanded plot in terms of normalized power. It can be seen that the width of the transmission peak is observed for the diagonal configuration at 427.43 kHz. The experimental results showed a quality factor of  $Q_H = 19.2$  (using the resonance peak at 430.26 kHz) for the horizontal arrangement and  $Q_D = 255.94$  for the diagonal configuration. Shakeri and coworkers reported a Q factor of 1,100 for low frequencies similar to the one reported here, 426.14 and 433.13 kHz (Shakeri, 2019); however, the reported PnC consisted of microengineering PZT-4D rods of 175  $\mu\text{m}$ , which requires higher and more expensive manufacturing technique than the phonic structure discussed here (steel cylinders of 0.8 mm radius).

## DISCUSSION

As can be seen from the previous results, the horizontal cavity configuration leads to a strong coupling between the allowed modes inside the bandgap in the presence of a defect. However, the diagonal configuration does not induce strong lateral coupling and back reflection. The decrease in the FWHM results from the tunneling of the single resonant mode, which is enhanced in the presence of the five defects. For the particular arrangement of the PnC, a defect located in the center induces asymmetry broken resonant transmission at 426.7 kHz, as is reported in **Figure 4**.

The transmission of this resonant peak is not higher in magnitude, but the bandwidth is narrower than the five-coupled

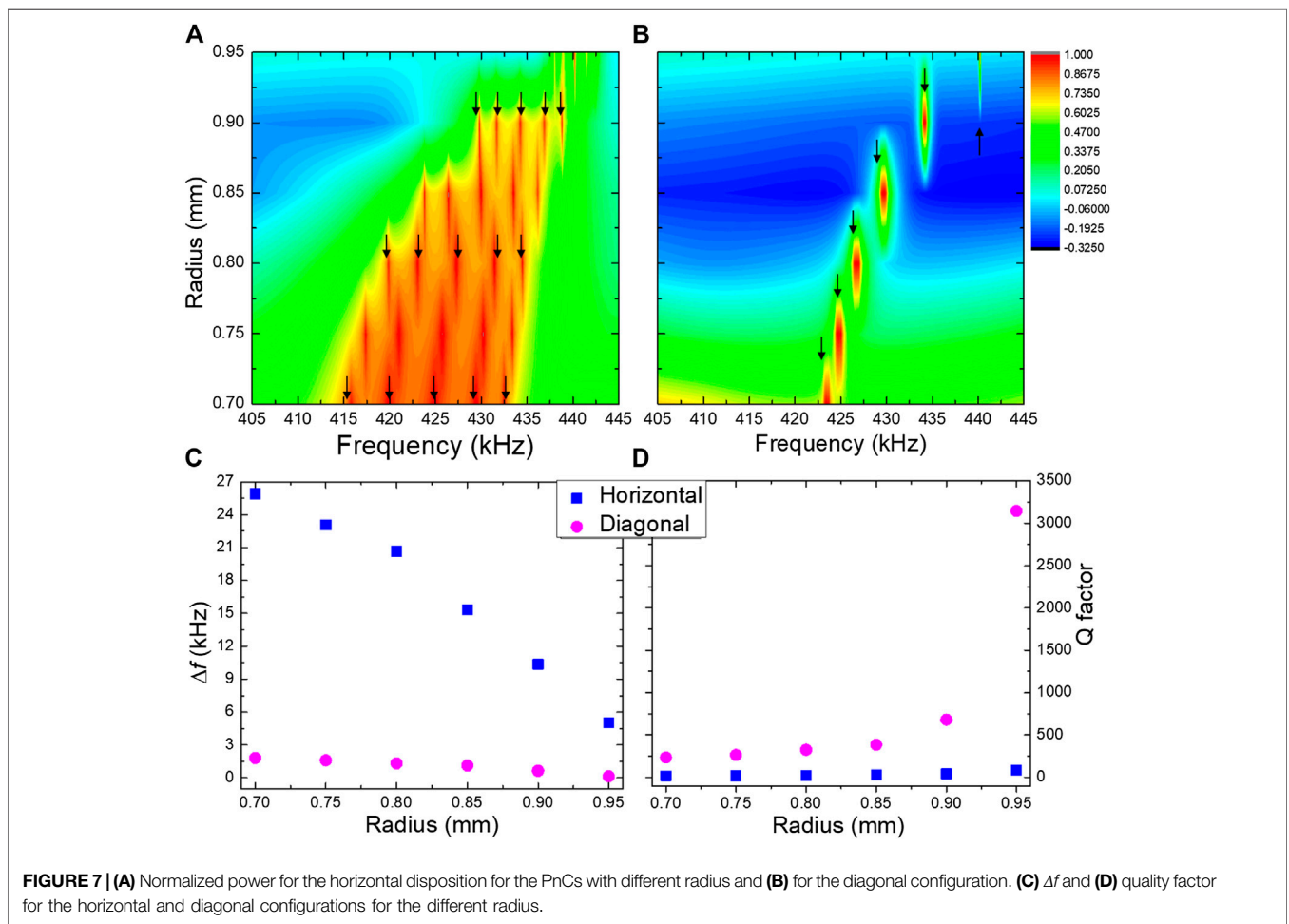
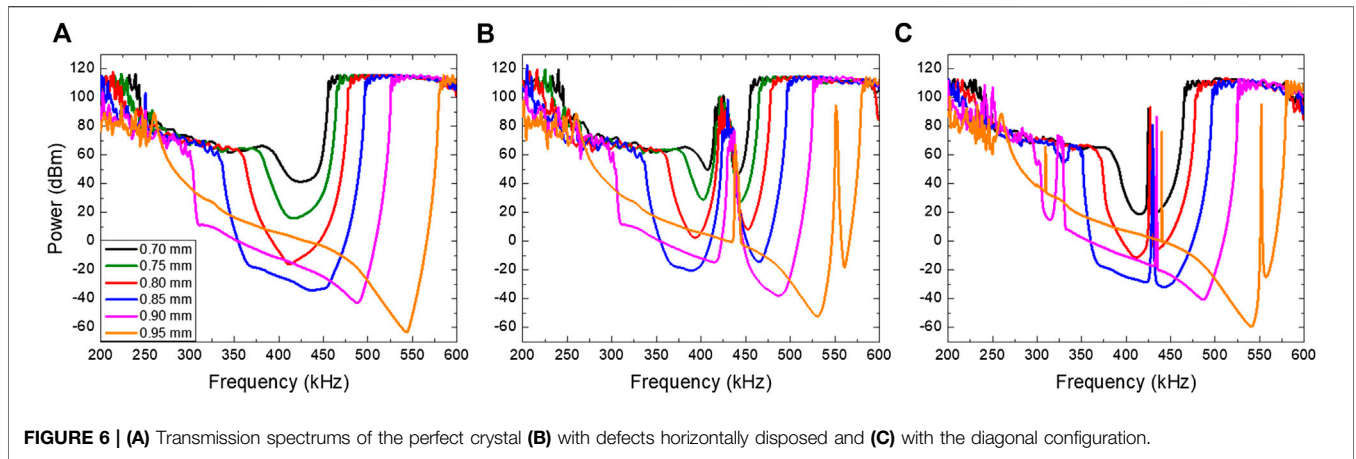
horizontal defects or the weakly coupled diagonal defects due to the highest possible Q factor within the PnC structure. As shown in **Figure 2**, five-defects' combination exhibits a narrower transmission with higher intensity than a single defect (100 dBm versus 50 dBm). Experimentally, our detection system's sensitivity did not permit the observation of the transmission change due to a single defect. The five diagonally arranged defects enhance the Q factor compared to the horizontal configuration and improve the transmitted signal's intensity compared to a single defect.

In order to help us to analyze and understand the diagonal and horizontal configuration of defects, five more PnCs were numerically analyzed, keeping the lattice parameter at 2 mm, but by varying the radii as 0.70, 0.75, 0.85, 0.90, and 0.95 mm, in addition to 0.80 mm which has been already described. The varying radius of the crystals results in different filling fraction  $f = \pi d^2 / (4a^2)$  as  $f_{0.70} = 0.38$ ,  $f_{0.75} = 0.44$ ,  $f_{0.80} = 0.50$ ,  $f_{0.85} = 0.56$ ,  $f_{0.90} = 0.63$ , and  $f_{0.95} = 0.71$ . The simulated transmission spectra of the PnCs with the varying radius of the scatters without any defects are shown in **Figures 6A**. The PnCs with the horizontal and diagonal defect's configurations are shown in **Figures 6B, C**, respectively. The horizontal arrangement induces the expected five resonance peaks, while the diagonal configuration's narrow peak is also observed. For the PnC with radius 0.95 mm, an extra narrow peak was observed close to the bandgap edge and centered at 552 kHz, for the diagonal arrangement (orange line).

The normalized power of each PnC with horizontal and diagonal configurations is shown in **Figures 7A, B**, respectively. Here, the transmission power is presented as a staircase plot from 405 to 445 kHz. For the horizontal configuration, it is observed that the induced band is wider, and the five resonant peaks can be observed as identified by the black arrows for 0.7, 0.8, and 0.9 mm radii to exemplify the five resonant peaks. It is observed that bandwidth tends to be narrower when the radius of the cylinders increases. For the diagonal configuration, only one resonance peak is observed (each identified with the black arrow), which becomes narrower as the scatters' radius increases. For 0.95 mm, only a very narrow peak can be observed.

The numerical analysis shows that for the defects' diagonal arrangement, the quality factor is improved by over fifteen times when the radii are 0.8 mm and 35 times when it is 0.95 mm. Those results are summarized in **Figures 7C, D**. Thus, the diagonal configuration allows a more efficient frequency-selective structure that could be used in sensing systems or wireless communication. The Q factor for the extra narrow peak recorded for the 0.95 mm radius PnC, as shown in **Figures 6B, C**, was also calculated. It is also composed of five resonant peaks for the horizontal disposition while it is narrower for the diagonal configuration and centered at 552 kHz. This peak's quality factor is 136 for the horizontal and 593 for the diagonal configurations, respectively. The quality factor of the PnC with a radius of 0.95 mm was over 35 times larger for the diagonal configuration compared to the horizontal ones, 3,174 vs. 89. It is well known that the coupling strength depends on the number of scatters between each defect. If the number increases, the coupling decreases, and then, the quality factor increases





(Dong, 2017; Wang, 2018). This effect was analyzed in this revised manuscript. We conclude that it is possible to increase the quality factor by increasing the separation between defects. However, an enhancement of the Q factor values implies a loss in the transmitted signal's intensity. Additionally, it also necessitates

an increased periodicity or a larger PnC. For practical applications, this fact would require a detector with higher sensitivity and a larger crystal. As the diagonal configuration does not induce strong coupling between adjacent defects, the transmission is independent of the number of defects and

separation between these defects. Thus the diagonal configuration will always yield higher Q values than the horizontal defects arrangement.

The manipulation of the inner radius in hollow steel cylinders squarely immersed in water was reported (Khelif, 2003) to be useful to tune the frequency and width of the guided ultrasonic signal (~170 kHz). Here, the configuration of defects induced in a perfect phononic structure and the radius of scatters shown to be crucial for Q factor and the transmitted frequency through the performed waveguide.

## CONCLUSION

Numerical simulations supported by experimental demonstration indicate that the Q factor of defect-based waveguides is improved by over 15 times for defects in a diagonal configuration along the propagation axis compared to their horizontal configuration, in a PnC composed of steel cylinders of 0.8 mm radius immersed in water. It also increases due to an increase in the scatterers' radius, which was varied from 0.7 to 0.95 mm. For a radius of 0.95 mm, the theoretical analysis showed that the diagonal configuration's Q factor was 35 times larger than the horizontal disposition. The reason was due to the horizontal inducing of five defects modes with a broader induced peak. In contrast, the diagonal defects allow a single mode due to this configuration that does not induce strong lateral coupling. Results will be useful for the high Q cavity operating in the low-frequency range using a cheap and simple PnC waveguide.

## REFERENCES

- Allein, F. T. (2016). Tunable magneto-granular phononic crystals. *Appl. Phys. Lett.* 108, 161903. doi:10.1063/1.4947192
- Aly, A. H. (2017). Phononic crystals with one-dimensional defect as sensor materials. *Indian J. Phys.* 91, 1021–1028. doi:10.1007/s12648-017-0989-z
- Bahr, B. M. (2014). "Phononic crystals for acoustic confinement in CMOS-MEMS resonators," in IEEE international frequency control symposium (FCS), Taipei, Taiwan, May 19–22, 2014 (New York City, USA: IEEE), 1–4.
- Churnside, J. H. (2005). Comparison of airborne lidar measurements with 420 kHz echo-sounder measurements of zooplankton. *Appl. Opt.* 44 (26), 5504–5511. doi:10.1364/ao.44.005504
- Dong, H. W. (2017). Inverse design of high-Q wave filters in two-dimensional phononic crystals by topology optimization. *Ultrasonics* 76, 109–124. doi:10.1016/j.ultras.2016.12.018
- Eichler, A. C. (2011). Parametric amplification and self-oscillation in a nanotube mechanical resonator. *Nano Lett.* 11 (7), 2699–2703. doi:10.1021/nl200950d
- Escalante, J. M. (2013). Dispersion relation of coupled-resonator acoustic waveguides formed by defect cavities in a phononic crystal. *J. of Physics D: Applied Physics*, 46, 1–10. doi:10.1088/0022-3727/46/47/475301
- Goettler, D. S.-K. (2010). Realizing the frequency quality factor product limit in silicon via compact phononic crystal resonators. *J. of App. Phys.* 108, 084505. doi:10.1063/1.3475987
- Han, Y. Y. (2019). High quality factor electromagnetically induced transparency-like effect in coupled guided-mode resonant systems. *Optics Express* 27, 7712–7718. doi:10.1364/oe.27.007712
- Khelif, A. D.-R. (2003). Two-dimensional phononic crystal with tunable narrow pass band: Application to a waveguide with selective frequency. *J. of App. Phys.* 94, 1308–1311. doi:10.1063/1.1557776

## DATA AVAILABILITY STATEMENT

The raw data supporting the conclusions of this article will be made available by the authors, without undue reservation.

## AUTHOR CONTRIBUTIONS

DR, MM, EW, and AN performed the experimental and simulations details, besides the discussion of the results to write the manuscript, which was mainly written by DR and AN. DM performed the numerical calculations of the acoustic properties of the designed phononic structures. HH carried out the bandstructure calculations.

## FUNDING

This work was supported by the National Science Foundation-sponsored EFRI: NewLAW project entitled, "GOALI: EFRI NewLaw: Non-reciprocal effects and Anderson localization of acoustic and elastic waves in periodic structures with broken P-symmetry of the unit cell" Award#1741677.

## ACKNOWLEDGMENTS

The authors acknowledge the above-referred funding from NSF. DR acknowledges the support from the NSF-EFRI project as a visiting researcher at UNT.

- Lehto Miller, J. M. (2018). Effective quality factor tuning mechanisms in micromechanical resonators. *App. Phys. Revs.* 5, 041307. doi:10.1063/1.5027850
- Liu, Z. Z. (2000). Locally resonant sonic materials. *Science*, 289 (5485), 1734–1736. doi:10.1126/science.289.5485.1734
- Lu, M. H. (2009). Phononic crystals and acoustic metamaterials. *Mater. Today*, 12 (12), 34–42. doi:10.1016/s1369-7021(09)70315-3
- Lucklum, R. L. (2010). 1D and 2D phononic crystal sensors. *Procedia. Eng.* 5, 436–439. doi:10.1016/j.proeng.2010.09.140
- Mayer Alegre, T. P.-N. (2011). Quasi-two-dimensional optomechanical crystals with a complete phononic bandgap. *Opt. Express* 19, 5658–5659. doi:10.1364/oe.19.005658
- Mohammadi, S. E. (2009). High-Q micromechanical resonators in a two-dimensional phononic crystal slab. *App. Phys. Lett.* 94, 051906. doi:10.1063/1.3078284
- Otter, W. J. (2014). 100 GHz ultra-high Q-factor photonic crystal resonators. *Sens. Actuator. A Phys.* 217, 151–159. doi:10.1016/j.sna.2014.06.022
- Park, Y. R. (2017). Biotunable nanoplasmonic filter on few-layer MoS<sub>2</sub> for rapid and highly sensitive cytokine optoelectronic immunosensing. *ACS Nano*. 11 (6), 5697–5705. doi:10.1021/acsnano.7b01162
- Pennec, Y. V.-R. (2010). Two-dimensional phononic crystals: examples and applications. *Surf. Sci. Rep.* 65, 229–291. doi:10.1016/j.surfrep.2010.08.002
- Ponge, M. F. (2016). Control of elastic wave propagation in one-dimensional piezomagnetic phononic crystals. *The J. of the A. Soc. of Am.* 139, 3288. doi:10.1121/1.4950756
- Reyes, D. W. (2019). All-acoustic signal modulation and logic operation via defect induced cavity effects in phononic crystal coupled-resonator acoustic waveguides. *New J. Phys.* 21, 113012. doi:10.1088/1367-2630/ab4f4f
- Rostami-Dogolsara, B. M.-F. (2019). Designing phononic crystal based tunable four-channel acoustic demultiplexer. *J. Mol. Liq.* 281, 100–107. doi:10.1016/j.molliq.2019.02.066

- Shakeri, A. D.-F. (2019). Designing a tunable acoustic resonator based on defect modes, stimulated by selectively biased PZT rods in a 2D phononic crystal. *Ultrasonics* 92, 8–12. doi:10.1016/j.ultras.2018.09.001
- Tsaturyan, Y. B. (2014). Demonstration of suppressed phonon tunneling losses in phononic bandgap shielded membrane resonators for high-Q optomechanics. *Opt. Express* 22, 6810–6821. doi:10.1364/oe.22.006810
- Wagner, M. R. (2016). Two-dimensional phononic crystals: disorder matters. *Nano. Lett.* 16, 5661–5668. doi:10.1021/acs.nanolett.6b02305
- Walker, E. R. (2014). Tunable ultrasonic phononic crystal controlled by infrared radiation. *Appl. Phys. Lett.* 105, 143503. doi:10.1063/1.4894489
- Walker, E. W. (2017). Radio-frequency actuated polymer-based phononic metamaterials for control of ultrasonic waves. *NPG Asia Mater.* 9, e350. doi:10.1038/am.2016.209
- Wang, N. H. (2014). Evidence on simultaneous improvement of motional impedance and Q-factor of silicon phononic crystal micromechanical resonators by variously engineering the cavity defects. *J. of App. Phys.* 115, 094904. doi:10.1063/1.4867044
- Wang, Y. F. (2018). Channeled spectrum in the transmission of phononic crystal waveguides. *J. Sound Vib.* 437, 410–421. doi:10.1016/j.jsv.2018.09.030
- Wang, Y. G. (2020). Tunable and active phononic crystals and metamaterials. *Appl. Mech. Rev.* 72 (4), 040801. doi:10.1115/1.4046222
- Xu, Y. F. (2018). High quality factor surface Fabry-Perot cavity of acoustic waves. *Appl. Phys. Lett.* 112, 073505. doi:10.1063/1.5013161
- Zhang, P. J. (2017). Soft phononic crystals with deformation-independent band gaps. *Proc. R. Soc. A* 473, 20160865. doi:10.1098/rspa.2016.0865
- Zhang, Z. L. (2017). Topological design of phononic band gap crystals with sixfold symmetric hexagonal lattice. *Comput. Mater. Sci.* 139, 97–105. doi:10.1016/j.commatsci.2017.07.037
- Zhou, X. Z. (2009). Effects of material parameters on elastic band gaps of two-dimensional solid phononic crystals. *J. of App. Phys.* 106, 014903. doi:10.1063/1.3159644
- Ziaei-Moayyed, M. S.-K. (2011). “Silicon carbide phononic crystal cavities for micromechanical resonators,” IEEE 24th international conference on micro electro mechanical systems, Cancun, Mexico, Jan 23–27, 2011, (IEEE), 1377–1381.

**Conflict of Interest:** EW was employed by the company Echnovus Inc.

The remaining authors declare that the research was conducted in the absence of any commercial or financial relationships that could be construed as a potential conflict of interest.

Copyright © 2020 Reyes, Martínez, Mayorga, Heo, Walker and Neogi. This is an open-access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License (CC BY). The use, distribution or reproduction in other forums is permitted, provided the original author(s) and the copyright owner(s) are credited and that the original publication in this journal is cited, in accordance with accepted academic practice. No use, distribution or reproduction is permitted which does not comply with these terms.

# Artículo 2

**David Martínez-Esquivel, Rafael Alberto Méndez-Sánchez,\* Hyeonu Heo,Angel Marbel Martínez-Argüello, Miguel Mayorga-Rojas,\* Arup Neogi,\*and Delfino Reyes-Contreras Coupled Resonator Acoustic Waveguides-Based Acoustic Interferometers Designed within 2D Phononic Crystals:Experiment and Theory**: Experiment and Theory, Adv. Physics Res., (2023) 2300093.

## Resumen General

En el presente trabajo, se estudió la respuesta acústica en interferómetros acústicos basados en línea de defectos, conocidos como guía de ondas acústicas de resonador acoplado (o CRAW por sus siglas en inglés) en cristales fonónicos bidimensionales (PnC). El PnC, se compone de cilindros de acero inoxidable dispuestos en una base cuadrada sumergida dentro de una matriz de agua con defectos inducidos mediante la eliminación selectiva de cilindros para crear interferómetros basados en defectos tipo Mach-Zehnder (MZ). Se fabricaron interferómetros con brazos orientados diagonal (DM) y horizontalmente (HM), para determinar experimentalmente sus características de transmisión mediante espectroscopía ultrasónica (US). Los datos experimentales son comparados con simulaciones basadas en el método de elementos finitos (FEM) y con los producidos por el modelo de Tight Binding o de Enlace Fuerte (TB), en el que cada defecto se trató como un resonador acoplado a sus vecinos más cercanos. Los resultados muestran una excelente concordancia que indican la confiabilidad del enfoque propuesto de manera significativa. Esta coincidencia es de suma importancia para poder predecir y optimizar con precisión los modos resonantes soportados por matrices de defectos, lo que permite la adaptación de estructuras fonónicas y guías de ondas basadas en defectos para cumplir con requisitos específicos para posibles aplicaciones. Esta implementación, ahora exitosa de los cálculos de FEM y TB en la investigación de sistemas CRAW dentro de la tecnología fonónica facilita el camino para el diseño de dispositivos acústicos avanzados con diversas funcionalidades prácticas demostrando la aplicación de principios de electrónica del estado sólido a la descripción de dispositivos acústicos de manera eficiente.

# Coupled Resonator Acoustic Waveguides-Based Acoustic Interferometers Designed within 2D Phononic Crystals: Experiment and Theory

David Martínez-Esquivel, Rafael Alberto Méndez-Sánchez,\* Hyeonu Heo, Angel Marbel Martínez-Argüello, Miguel Mayorga-Rojas,\* Arup Neogi,\* and Delfino Reyes-Contreras\*

The acoustic response of defect-based acoustic interferometer-like designs, known as Coupled Resonator Acoustic Waveguides (CRAWs), in 2D phononic crystals (PnCs) is reported. The PnC is composed of steel cylinders arranged in a square lattice within a water matrix with defects induced by selectively removing cylinders to create Mach-Zehnder-like (MZ) defect-based interferometers. Two defect-based acoustic interferometers of MZ-type are fabricated, one with arms oriented horizontally and another one with arms oriented diagonally, and their transmission features are experimentally characterized using ultrasonic spectroscopy. The experimental data are compared with finite element method (FEM) simulations and with tight-binding (TB) calculations in which each defect is treated as a resonator coupled to its neighboring ones. Significantly, the results exhibit excellent agreement indicating the reliability of the proposed approach. This comprehensive match is of paramount importance for accurately predicting and optimizing resonant modes supported by defect arrays, thus enabling the tailoring of phononic structures and defect-based waveguides to meet specific requirements. This successful implementation of FEM and TB calculations in investigating CRAWs systems within PnCs paves the way for designing advanced acoustic devices with desired functionalities for various practical applications, demonstrating the application of solid-state electronics principles to underwater acoustic devices description.

## 1. Introduction

Defects engineering in phononic crystals (PnCs) has convincingly demonstrated the feasibility of guiding waves within their acoustic bandgap when defects are optimally induced.<sup>[1–3]</sup> PnCs, also known as acoustic bandgap materials, consist of sound scatterers periodically arranged in a matrix in which both components exhibit different physical properties such as mass density, speed of sound, and Young's modulus. This spatially periodic mass distribution enables the observation of acoustic or elastic bandgaps. Similar to stopbands in electronic or photonic crystals, phononic bandgaps are frequency intervals where wave propagation is forbidden across the crystal. By introducing defects that break the crystal symmetry, typically induced by removing scatterers, defect modes become allowed within the bandgap.<sup>[3–6]</sup> While a single defect acts as a resonator, promoting a unique in-gap eigenmode, a group of defects gives rise to multiple coupled

D. Martínez-Esquivel  
Programa de Doctorado en Ciencias, Facultad de Ciencias  
Universidad Autónoma del Estado de México, Campus "El Cerrillo"  
Toluca, Estado de México 50200, México


R. A. Méndez-Sánchez  
Instituto de Ciencias Físicas  
Universidad Nacional Autónoma de México  
Cuernavaca, Morelos 62209, México  
E-mail: mendez@icf.unam.mx

H. Heo  
Graduate Program in Acoustics, The Pennsylvania State University  
University Park  
Pennsylvania 16802, USA

A. M. Martínez-Argüello  
Instituto de Física  
Benemérita Universidad Autónoma de Puebla  
Pue., Puebla C. P. 72570, México

M. Mayorga-Rojas  
Facultad de Ciencias  
Universidad Autónoma del Estado de México, Campus "El Cerrillo"  
Toluca, Estado de México 50200, México  
E-mail: mmr@uaemex.mx

A. Neogi  
Institute of Fundamental and Frontier Sciences  
University of Electronic Science and Technology of China  
Chengdu 610054, China  
E-mail: arup@uestc.edu.cn

 The ORCID identification number(s) for the author(s) of this article can be found under <https://doi.org/10.1002/apxr.202300093>

© 2023 The Authors. Advanced Physics Research published by Wiley-VCH GmbH. This is an open access article under the terms of the Creative Commons Attribution License, which permits use, distribution and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

DOI: 10.1002/apxr.202300093

eigenmodes leading to miniband transmission within the stop-band interval.<sup>[7]</sup>

The coupling of resonant modes in defect-based PnCs has been successfully described approximating these as Coupled Resonator Acoustic Waveguides (CRAWs) within the framework of tight-binding models (TBM).<sup>[8–13]</sup> TBM, widely employed in solid-state physics to study the electronic properties of materials, can be extended to investigate other excitations, such as phonons which represent the quantized vibrations of crystal lattices.<sup>[7,13]</sup> In this approach, a PnC-based CRAW is discretized into separate sites and the dynamics of phonons are described by considering the interactions between neighboring sites. The propagation of waves in CRAWs through the TBM approximation can be analyzed by solving the equations of motion for phonons in the crystal lattice and considering the interaction strengths between adjacent lattice sites.<sup>[13–15]</sup> The dynamical matrix of the phononic crystal, which incorporates the interactions between neighboring sites, provides information about the allowed phononic modes.<sup>[15,16]</sup>

CRAWs engineered within phononic crystals consist of multiple waveguide segments coupled through resonators or defects forming a structure of interconnected unit cells. Each unit cell contains the waveguide segment and resonator or defect composing the CRAW.<sup>[4,17]</sup> These structures enable precise manipulation and control of acoustic waves, facilitating the creation of waveguides with desirable transmission properties and the formation of localized modes within bandgaps. The theoretical framework based on TB theory allows for constructing the Hamiltonian that describes the dynamics of acoustic waves propagating along these coupled resonant waveguides. The Hamiltonian incorporates kinetic terms representing the waves energy in the waveguide segment and potential terms accounting for the coupling between adjacent segments through the resonators or defects.<sup>[13,15]</sup> This approach facilitates determining the coupling strength between the waveguide segments, which directly impacts the transmission properties and formation of localized modes.<sup>[7]</sup> As a result, it becomes feasible to predict the resonant frequencies of the coupled waveguide structure. These resonant frequencies are associated with the formation of localized modes representing waveguide modes confined within the resonator or defect regions.<sup>[16,18]</sup>

The application of the TB model in the design and optimization of CRAWs systems in PnCs with specific functionalities such as enhanced transmission within certain frequency ranges, strong localization of waveguide modes, and efficient filtering of acoustic waves, is experiencing significant growth in the field of acoustic and mechanical phononic crystal structures.<sup>[18–24]</sup> Besides that, 1D and 2D Phononic meta-materials can also be used to manipulate acoustic wave propagation by modeling 1D phononic structures with hyperbolic dispersion,<sup>[25,26]</sup> or in 2D phononic structures with tailorable equifrequency contour for focusing or beam steering.<sup>[27,28]</sup>

D. Reyes-Contreras  
Laboratorio de Acústica y Nanomateriales (LAN), Facultad de Ciencias  
Universidad Autónoma del Estado de México, Campus "El Cerrillo"  
Toluca, Estado de México 50200, México  
E-mail: dreyesc@uaemex.mx

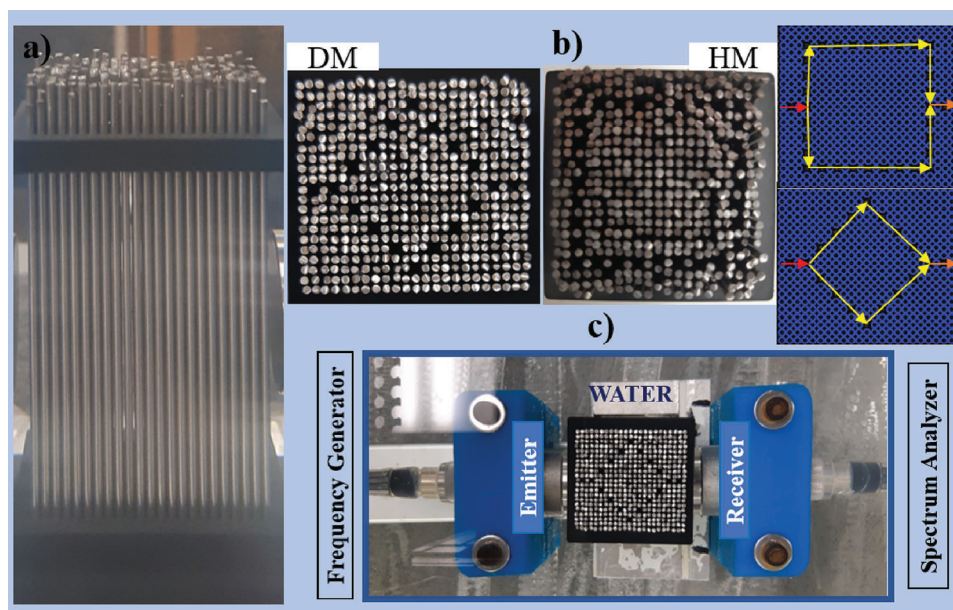
This study presents the adaptation of the TBM to describe the acoustic response of defect-based acoustic interferometer-like designs, referred to as CRAWs systems in 2D PnCs. The phononic crystal is composed of steel cylinders, arranged squarely in a water matrix, with defects induced by removing specific cylinders to create Mach-Zehnder-like defects-based interferometers. Two defect-based acoustic interferometers of MZ-type are constructed, one with arms oriented horizontally and another one with arms oriented diagonally, and their transmission features are experimentally measured using ultrasonic spectroscopy. The tight-binding approximation is applied to both models considering each defect as a resonator coupled to its neighboring ones. Finite element method (FEM) simulations and bandstructure calculations based on the linearized Navier-Stokes equation using the COMSOL platform are also considered. The obtained results are compared with the experimental data, demonstrating the application of solid-state electronics principles to underwater acoustic-devices analysis. Remarkably, our results show excellent agreement with the experimental and simulation data. This comprehensive match is crucial for predicting and optimizing resonant modes supported by defect arrays, enabling the customization of phononic structures and defect-based waveguides to specific requirements.

## 2. Results

### 2.1. Ultrasonic Spectroscopy Results

A phononic crystal (PnC) composed of a  $23 \times 21$  arrangement of stainless-steel cylinders of radius 0.8 mm is immersed in a water matrix with a lattice parameter of 2 mm, as depicted in **Figure 1a**. Two defect-based interferometers, inspired by Mach-Zehnder-type designs, as shown in **Figure 1b** are constructed. Those are labeled as the diagonal model (DM) and the horizontal model (HM), placed on the left and center side of **Figure 1b**, respectively. The DM-interferometer consists of a defect input and two arms built with defects diagonally arranged, which coincide with another defect, as illustrated on the left side of **Figure 1b**. The HM-interferometer has one input defect and two linear arms, as observed on the center side of **Figure 1b**. The right side of **Figure 1b** are schematic representations of the DM and HM interferometers; red and orange arrows describe the input and output points, respectively, and the yellow ones are the defect-paths within the phononic structure. To maintain their positions without perturbation, all cylinders are stacked on perforated ABS plastic bases. Experimental results have demonstrated that groups of defects continuously induced in a phononic crystal can function as waveguides for waves whose frequencies fall within their phononic bandgap.<sup>[3,5]</sup>

The experimental transmission spectra for both designed defect-based acoustic interferometers, DM and HM, are depicted in **Figure 2a** in red and blue lines, respectively, covering the frequency range from 400 to 460 kHz. Acoustic response was experimentally recorded in dBm units, which has its logarithmic equivalence in watt (+20 dBm (0.1 W)), and represent power quantity. It was selected to use this unit, which is related to the wave intensity when considering the transducer area, as simple as the raw information from the spectrum analyzer. It is evident that the transmitted acoustic power of the models differs



**Figure 1.** Actual interferometers and experimental setup for ultrasonic spectroscopy analysis. a) Lateral-actual view of the perfect PnC. b) Top-actual view of the DM (left) and HM (center) interferometers, (right)-schematic of both designs showing the defect paths. c) Ultrasonic spectroscopy setup.

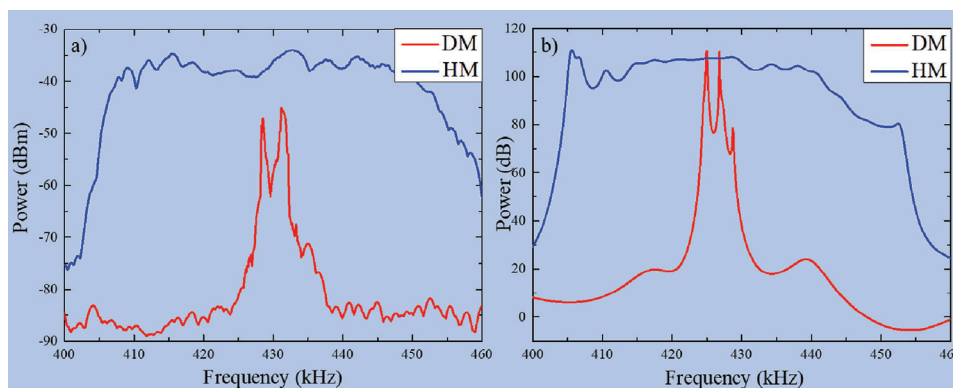
significantly depending on the spatial disposition of the defects forming each interferometer, which yields different transmitted power at the same frequencies. It has been reported the perfect crystal exhibits a full bandgap from approximately 380 to 480 kHz, as will be shown below, and previously reported by our group.<sup>[3,5,27]</sup>

For the DM array, a narrower transmission band is induced within the acoustic gap compared to the response recorded for the HM. This behavior indicates the selective transmission of waves through the first model. The observed differences in the acoustic response between both models are due to the spatial configuration of the defects, as it has been previously demonstrated that nine defects configured diagonally allow for a single peak approximately 16 times narrower ( $\approx 426\text{--}429\text{ kHz}$ ) than when defects are arranged horizontally (relative to the propagation axis), which results in multiple peaks ( $\approx 405\text{--}460\text{ kHz}$ ).<sup>[5]</sup> The DM in-

terferometer exhibits a miniband with at least two well-defined in-gap resonances at 427.4 and 431.2 kHz along with a smaller one at 434.8 kHz, see the red line in Figure 2a. In contrast, multiple resonant peaks were recorded for the HM design, resulting in a new well-defined, and broader in-gap transmission band. These multiple resonant peaks arise from the collectively coupled resonant modes supported by each individual defect.<sup>[3,5]</sup>

## 2.2. FEM Calculations

The experimentally analyzed PnCs structures are designed using the COMSOL Multiphysics platform (version 5.3), and their acoustic properties are calculated employing the Finite Element Method (FEM), which serves as the foundation of the cited platform. The 2D phononic structures consist of stainless-steel scatterers of radius 0.8 mm arranged in a  $23 \times 21$  square lattice within

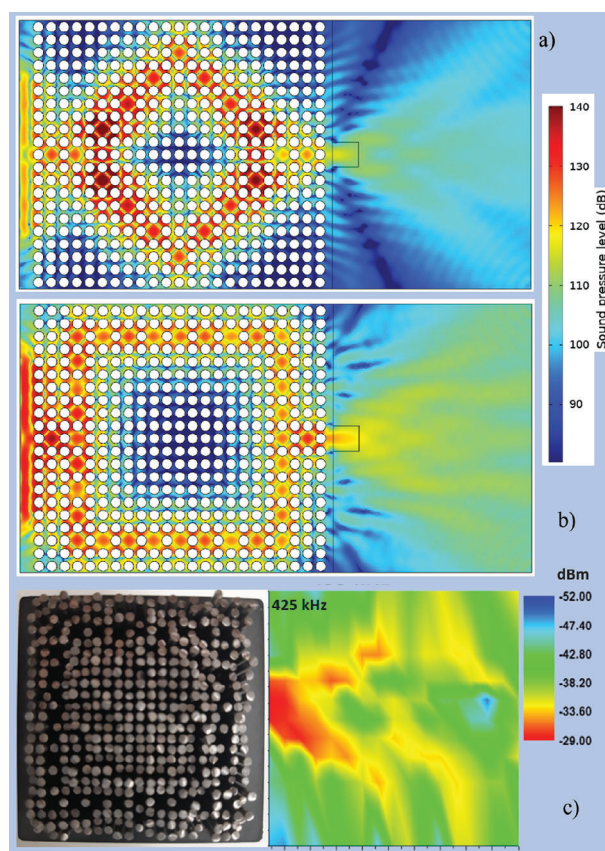


**Figure 2.** Experimental and theoretical (FEM) transmission characterization for the designed interferometers. a) Experimental transmission spectra for both DM (blue line) and HM (red line) interferometers: inset corresponds to the FEM simulated results. b) FEM spectra from the COMSOL platform for the two models.

a water matrix with a lattice parameter of 2 mm. The density and the longitudinal sound velocity values for stainless steel and water are obtained from the library included in the COMSOL platform:  $\rho_S = 7800 \text{ kgm}^{-3}$ ,  $\rho_W = 1000 \text{ kgm}^{-3}$ ,  $c_S = 5790 \text{ ms}^{-1}$ , and  $c_W = 1480 \text{ ms}^{-1}$ , all of them at 20 °C. For water and steel, we used the density and longitudinal speed of sound. Additionally, Young's modulus and Poisson ratio were incorporated for the solid steel, 205 GPa and 0.28, respectively, which are demandant for the simulations and were taken from the library. The simulations are obtained for the same frequency range as that of the experimental ones. The DM and HM interferometers are depicted in Figure 5, panels a) and b), respectively. The acoustic-solid interaction model is utilized to simulate the acoustic response of each model with a frequency sweep using a plane wave radiation source. Figure 2b corresponds to the FEM spectra, which nearly agree with the experimental results recorded through ultrasonic spectroscopy (Figure 2a). For the DM interferometer three numerical peaks were found at 425, 426.8, and 429 kHz, and are associated with the experimentally recorded peaks. It could be convenient to clarify that in COMSOL, the input signal is given in Pa, which is a unit of pressure that is equivalent to 93.9794 dB Sound Pressure Level (SPL), and that is the reason because the transmitted signal is in dB, representing the SPL.

Additionally, pressure maps were generated to gain insight into the acoustic energy distribution inside and outside the phonic structures. Figure 3a shows the pressure map for the DM interferometer at a frequency of 425.0 kHz that can be associated with the experimental in-gap resonant peak observed at 428.4 kHz. In the simulations, the source is placed at a distance of two millimeters from the crystal, which is consistent with the experimental setup and has a size of 25 mm, corresponding to the actual transducer size. Figure 3b contains the pressure map for the HM model at the same frequency, 425.0 kHz. These pressure maps are represented as SPL in dB, which has been clarified above. Pressure maps provide valuable insights into the behavior of the acoustic energy for this frequency in each model, revealing how the waves follow the designed defect paths to guide them. This can be visually observed as the sound pressure at the center of both models has the lowest levels (blue color), which implies that no wave propagation at these frequencies occurs due to the bandgap. The largest sound pressure levels (red color) are observed at the input and output points and along the defect paths due to the defect array being a CRAW by itself working as a waveguide to allow transmission at the in-gap frequencies.

To obtain an insight into the acoustic pressure distribution in the actual models, an experimental pressure map was obtained for the HM model based on the temporal evolution and equipment requirements (see experimental section). The experimental pressure map for this model is displayed in Figure 3c, where the acoustic pressure in dBm units has similar characteristics as that observed in Figure 3b. The sound pressure was measured 2mm away from the transducer facet. It was -17.86 dBm for a 20 Vpp from the frequency generator, implying a power loss of over 10 dBm. Here, 20 Vpp means the sinusoidal wave amplitude, which induces an input power (2mm in front of the transducer used as emitter) measured in the Spectrum analyzer of -17.86 dBm, which reduces to -29 dBm at the output point of the HM model, indicating a reduction in the experimentally measured power over 10 dB. This reduction in power is higher in the



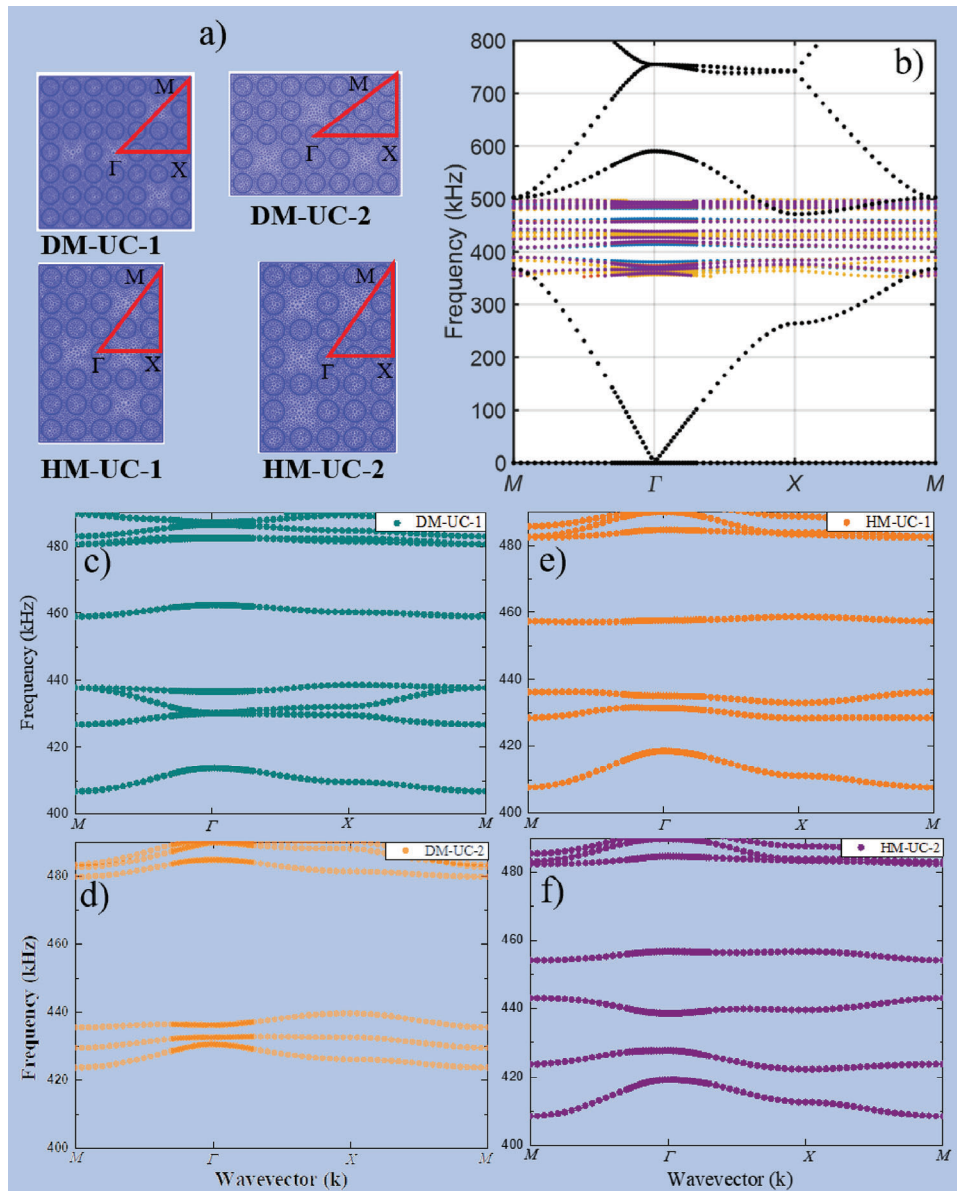
**Figure 3.** Pressure maps for the DM and HM interferometers obtained from COMSOL for the a) DM and b) HM interferometers for the frequency at 425.0 kHz. As observed, the acoustic energy is being transported across the defect paths. c) Experimental pressure map for the HM model, where the acoustic energy distribution has a similar distribution as for the FEM results.

rest of the selected area due to the green color meaning -40 dBm. The local acoustic energy measured using a needle hydrophone as a receiver drops in intensity compared to the global pressure recorded using a transducer (Figure 2a). However, it is still detectable by the used equipment, which means it is viable for practical measurements in actual devices or possible applications.

### 2.3. Band Structure Calculations

Figure 4 contains the bandstructure calculations performed to understand and correlate the observed results. For both DM and HM interferometers, two separate unit cells (UC) containing a group of defects were calculated and assigned as UC-1 and UC-2, as shown in Figure 4a. The band structure of each interferometer was calculated utilizing Pressure Acoustics in conjunction with Solid Mechanics and applying the Floquet periodic boundary condition. The band structure was calculated employing a wavevector normalized by the period of the crystal. Specifically, we defined the X and M points within the Brillouin Zone (BZ) as illustrated in 4a. Notably, we established the center of the superlattice as  $\Gamma$ , and the definitions of the X and M points are in accordance with the C4 symmetry axis. In Figure 4b, the black squares represent





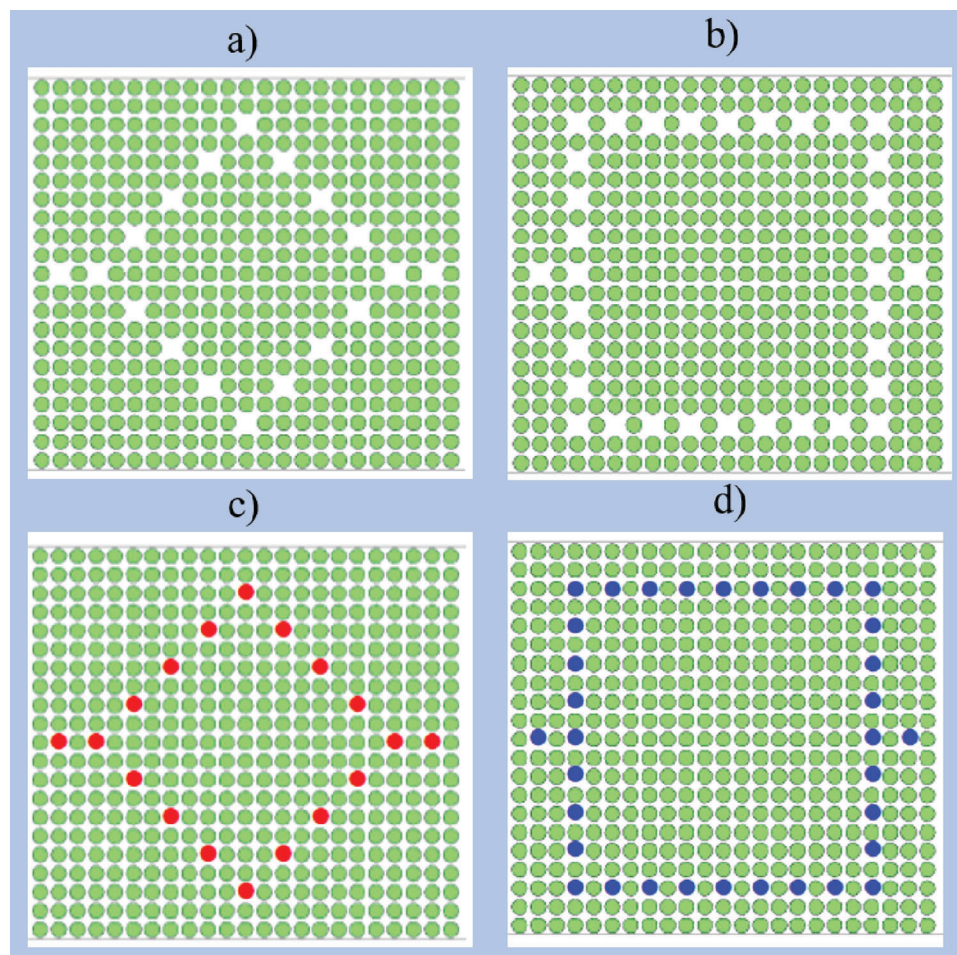
**Figure 4.** Band structure calculations for the selected unit cells. a) Unit cells where the k-vectors are sketched, b) Band structure for the perfect phononic crystal, where the corresponding unit cells are included. Zoomed bandstructure diagrams for the c) DM-UC-1, d) DM-UC-2, e) HM-UC-1, and f) HM-UC-2 unit cells for better visualization.

the calculated band structure for the perfect phononic crystal between 1 and 800 kHz. The other points in Figure 4b correspond to each model's unit cells, which are zoomed in Figures 4c–f.

For the two-unit cells of each interferometer, DM, and HM array, in-gap solutions were obtained in the 400–460 kHz frequency interval. For the PnC, it has been reported that one defect induces an alone resonant defect mode at 427 kHz,<sup>[5]</sup> while several aligned defects induce defect modes whose number is exactly the number of defects; the diagonal disposition of five defects induced a narrow band 4 kHz-width centered at around 427 kHz. It is hard to capture the entire coupling of all the induced resonant modes due to the presence of the 18 or 34 defects composing both, DM and HM models, respectively. In the

band structure diagram of the four UC, an in-gap solution in the frequency range of 424–429 kHz was recorded, which can be related to the fact that at each of these, there is diagonal coupling between at least two defects. As observed in Figure 4c–e, two or three allowed modes appear between 424 and 238 kHz, indicating that the diagonal coupling is dominating. This is more visible in Figure 4d, where only modes in this frequency interval were obtained, which agrees with the unit cell DM-UC-2 (Figure 4a), where only diagonal coupling can be assigned; the inter-period separation between the first and last defect is three, which reduces the coupling strength.

For the HM, in both unit cells the allowed modes are separated, covering the entire range of 400–460 kHz, as seen in Figure 4f.



**Figure 5.** Schematic top-view of the models under study. The unoccupied sites represent defect cavities in the array and define a) the DM and b) the HM interferometer. These models can effectively be described by a tight-binding model defined by the red and blue dots for c) the DM and d) the HM models.

The modes near 410 and 460 kHz in Figure 4c,e,f could be the result of the coupling between the two horizontal continuous defects, which are present in these three unit cells. Even when the band structure diagrams do not faithfully reproduce the results in Figure 2, the in-gap induced modes for the selected unit cells agree with the fact that the induced transmission band due to the HM array extends along a larger frequency interval compared with the DM model. Larger unit cells must be necessary to fully reproduce the entire behavior.

## 2.4. Tight Binding Model

As previously mentioned, the tight-binding approximation is employed to theoretically describe the experimental and FEM simulation results for the designed CRAWs, which constitute the defects-based Mach-Zehnder-type acoustic spectrometer. The schematic representation of the models, consisting of steel cylinder arrays (top view) is illustrated in **Figure 5**. The unoccupied sites within that 2D locally periodic structure or finite PnC correspond to defect cavities or impurities that define the diagonal and horizontal models shown in panels a) and b), respectively. These

defect cavities are intentionally designed such that their corresponding resonant frequencies lie within the bandgap of the finite PnC, thereby allowing the localization of the resonant modes associated with the respective impurities.

The weak coupling between neighboring resonators, via evanescent Bloch waves, yields the nearest-neighbor tight-binding approximation usually found in solid state physics.<sup>[29]</sup> Note that this description is the same found in the coupled-resonator optical,<sup>[30,31]</sup> acoustical,<sup>[3,5,11,12,32,33]</sup> and elastic<sup>[7,13,15,16,34,35]</sup> waveguides. Panels c) and d) in Figure 5, show a schematic of the tight-binding model of the corresponding system defined by the red and blue dots for the diagonal and horizontal model, respectively. These models can be described by the following nearest-neighbour tight-binding Hamiltonian

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{n,m} f_{n,m} |n, m\rangle \langle n, m| + \sum_{n,m} [v_{(n,m),(n+1,m)} |n, m\rangle \langle n+1, m| \\
 & + v_{(n,m),(n-1,m)} |n, m\rangle \langle n-1, m| \\
 & + v_{(n,m),(n,m+1)} |n, m\rangle \langle n, m+1| \\
 & + v_{(n,m),(n,m-1)} |n, m\rangle \langle n, m-1|]
 \end{aligned} \quad (1)$$

where  $f_{n,m}$  is the resonance frequency of the defect cavity at positions  $|n, m\rangle$  and  $v_{i,j}$  is the hopping frequency to nearest neighbors.

#### 2.4.1. Scattering Matrix Approach

The isolated diagonal and horizontal samples of Figure 5c,d can be opened by attaching to them two semi-infinite single-mode perfect leads with coupling strength  $\gamma^{L,R}$  to the left (L) and right (R) sites, respectively. The  $2 \times 2$  scattering matrix,  $S$ -matrix, can be written as<sup>[36,37]</sup>

$$S(f) = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix} = \mathbf{1}_2 - 2i \sin(k) W^T (f - H_{\text{eff}})^{-1} W \quad (2)$$

where  $r(r')$  and  $t(t')$  are the reflection and transmission amplitudes when the incidence is from the left (right),  $\mathbf{1}_2$  is the unit matrix of dimension 2,  $k = \arccos(f/2)$  is the wave vector at frequency  $f$  supported in the leads, and  $H_{\text{eff}}$  is the effective non-Hermitian Hamiltonian given by

$$H_{\text{eff}} = H - \frac{e^{ik}}{2} W W^T \quad (3)$$

where  $H$  is the  $N \times N$  Hamiltonian matrix that describes the sample with  $N$  resonant states, see Equation (1). In Equations (2) and (3), the matrix  $W$ , where the superscript  $T$  indicates the matrix transposition operation, is an  $N \times 2$  matrix that couples the  $N$  resonant states of the closed sample to the two propagating modes in the leads. Its elements are defined by

$$W_{ij} = 2\pi \sum_{c=L,R} A_i^c(f) A_j^c(f) \quad (4)$$

with the coupling amplitudes given by

$$A_i^{L,R}(f) = \sqrt{\frac{\gamma^{L,R}}{\pi}} \left(1 - \frac{f^2}{4}\right)^{1/4} (\delta_{i,L} + \delta_{i,R}) \quad (5)$$

with  $\delta_{i,j}$  the usual Kronecker delta. Furthermore, the frequency dependence in  $H_{\text{eff}}$  can be neglected since  $\arccos(f/2)$  changes slightly at the center of the band. Then, from the two-channel  $S(f)$ -matrix of Equation (2), the transmission is obtained from the transmission amplitude as  $|t|^2$ .

The tight-binding model and the scattering approach, as described above, are applied to elucidate the behavior of both interferometers. For this purpose, further simplifications of Hamiltonian of Equation (1) can be made by noticing first that for both models (DM and HM) the defect cavities are roughly equivalent and then have the same resonance frequency, i.e.,  $f_{nm} = f_{mn} = f_0$ . Second, the hopping frequency depends on the distance between defects since the solutions in the PnC are evanescent, then for the diagonal and horizontal interferometers those hoppings are expected to be different [see Figure. 5c,d]. In addition, the hopping frequencies between nearest neighbors in the bulk defects can be considered the same, i.e.,  $v_{i,j} = v$ , while the ones at the left and right of the interferometers can be considered as  $v'$ . Thus, the TB model of Equation (1) only requires the knowledge of the parameters  $f_0$ ,  $v$ , and  $v'$  for each interferometer. Now since  $f_0$  determines

**Table 1.** Parameters for constructing Hamiltonian (1) and  $S$ -matrix (2) along with Equations (3)–(5) for both the horizontal and diagonal interferometer.

Interferometer	$f_0$ (kHz)	$v$ (kHz)	$v'$ (kHz)	$\gamma$ (kHz)
Horizontal	432.0	12.0	12.0	10.0
Diagonal	430.7	57.0	4.2	0.005

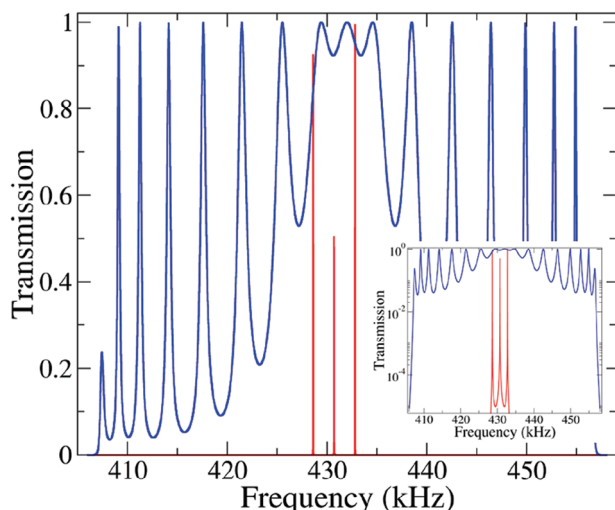
the center of the band, from the experimental spectrum, we obtain that  $f_0 \approx 432.0$  (430.7) kHz for the H (D) interferometer (see Figure 2a). Meanwhile, the nearest-neighbor frequency hopping determines the width of the band associated with the defects: the bandwidth is equal to four times the hopping frequency.<sup>[38]</sup>

On the one hand, from the experimental frequency spectrum for the horizontal model, the bandwidth is approximately 48.08 kHz and then  $v \approx 12.0$  kHz with  $v = v'$  as the distance between the defects is the same. For the diagonal model, on the other hand,  $v \neq v'$  since the distance between the defects for this model is different. For this case, we only have an experimental spectrum from 400 to 460 kHz, which covers only the miniband of interest of approximately 16.8 kHz shown in Figure 2a. This allows us to obtain the hopping frequency  $v' \approx 4.2$  kHz. To obtain the hopping frequency  $v$  experimentally, the full bandwidth is needed. However, by using TB calculations the value of  $v = 57.0$  kHz was obtained, which could be slightly different for an experimental spectra of 300–500 kHz, for example.

In order to obtain the  $S$ -matrix for each H (D) model, the coupling strength to the exterior,  $\gamma^{L(R)}$ , at the left (L) and right (R) sides has to be determined. For simplicity, we consider that for each model this coupling strength is the same, that is  $\gamma^{L(R)} = \gamma$ . Here, there are two main leaking mechanisms of each interferometer to the exterior. One is coming from the input and output defects and the other one coming from the interferometer arms. Notice that the leaking from the diagonal interferometer is much smaller than that from the horizontal interferometer since the defects forming the arms of the H-based interferometer are closer to the borders of the PnC. Then, the coupling strength  $\gamma$  is fixed by adjusting the width of the resonances within the band associated with each interferometer and corresponds to  $\gamma = 10.0$  (0.005) kHz for the horizontal (diagonal) interferometer. **Table 1** summarizes the TB and  $S$ -matrix parameters for each interferometer.

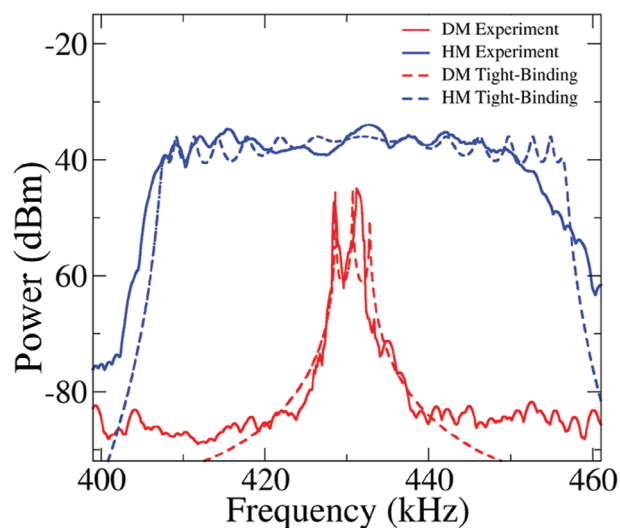
**Figure 6** displays the normalized transmission as a function of frequency for the diagonal and horizontal models in red and blue lines, respectively, obtained through the TB model of Equation (1) together with the  $S$  matrix of (2). The parameters for each model are given in Table 1. The inset in Figure 6 provides the normalized transmission in logarithmic scale. For the horizontal model (blue line), the resonant frequencies around 430 kHz align with the in-gap resonances obtained from the experiment for this model. Conversely, for the diagonal model (red line), it is noteworthy that due to the weak coupling to the outside, the resonances observed are narrower than those obtained for the horizontal model, which is in complete agreement with the experimental spectra and bandstructure results described above.

Finally, **Figure 7** summarizes the behavior of the transmitted intensity (power) as a function of frequency for both DM and HM interferometers experimentally obtained using ultrasonic



**Figure 6.** Transmission as a function of frequency obtained from the tight-binding model for both the diagonal and horizontal model in red and blue solid lines, respectively. The inset shows the transmission in logarithmic scale.

spectroscopy (continuous lines), and through the tight-binding model of Equation (1) together with Equation (2)–(5) (dashed lines). The plots have been overlapped in the same frequency range for a better comparison, and the intensities were adjusted to demonstrate the agreement and tendencies of the acoustic response of the designed interferometers for each experimental and theoretical analysis. It is convenient to point out that the obtained TB parameters and the coupling strength  $\gamma$  are used in Equations (3)–(5) and then into the S-matrix of Equation (2), which now is only a function of frequency  $f$ . The transmitted power as a function of  $f$  is obtained from the S-matrix element  $|t|$



**Figure 7.** Power as a function of frequency for the horizontal and diagonal models. Red and blue continuous lines are the experimental results for the DM and HM, respectively. The red and blue dashed lines are the results for the respective tight-binding model of Equation (1) together with Equations (2)–(5).

as  $10\log_{10}(|t|)$  varying the frequency range from 400 to 460 kHz, as shown in Figure 7 for each interferometer. This gives the TB acoustic power similar to the experimental ones, as previously described

In the experimental results, slight fluctuations due to errors in locating the cylinders on the respective arrays can be observed. Additionally, a certain degree of power loss is expected as seen in Figure 2. These effects can be accounted for in the tight-binding model by introducing a certain degree of disorder, such as in the frequency resonance of the defect cavities, and incorporating an imaginary part in the frequency resonance of the impurity to consider the effect of absorption. However, even without the inclusion of these effects, the tight-binding model presented here notably captures the essential features of the horizontal and diagonal models, as observed in both Figure 6 and 7, showing high concordance with the other methods of analysis discussed here. When comparing the results with FEM calculations using COMSOL, a left-shifting of 3.5 kHz can be observed. This shifting is attributed to the finite size of the simulated crystal in the FEM, which differs from the idealized infinite crystal assumption in the tight-binding model, and has been previously observed by our group.<sup>[5]</sup> Figure 7, which shows consistent results, leads to propose the possibility of predicting resonant peaks in CRAWs forming defects-based Mach-Zehnder-type acoustic spectrometers with different and optimized configurations for the selective transmission of ultrasonic waves.

### 3. Conclusion

In conclusion, this study successfully adapted the tight-binding model (TBM) to effectively describe the acoustic response of defect-based acoustic interferometer-like designs, specifically Coupled Resonator Acoustic Waveguides (CRAWs) in 2D phononic crystals (PnCs). The phononic crystal was fabricated with steel cylinders arranged in a square lattice immersed within a water matrix, and defects were induced by removing cylinders to create Mach-Zehnder-like (MZ) defects-based interferometers. Two MZ-type defect-based acoustic interferometers were constructed, with arms oriented horizontally or diagonally, and their transmission features were thoroughly characterized through experimental ultrasonic spectroscopy. By employing the tight-binding approximation, each defect was treated as a resonator coupled to its neighboring ones, which allowed for accurate predictions of the acoustic response within the CRAWs system. The obtained results were compared with experimental ultrasonic spectroscopy data, FEM simulations, and bandstructure calculations. Remarkably, our results exhibited outstanding agreement with the experimental and simulation data, providing robust evidence of the reliability and validity of the proposed TBM description, an approach of solid-state electronics principles successfully proposed for underwater acoustic devices performance. The achieved comprehensive match between the theoretical predictions and the experimental observations holds crucial significance, as it offers an essential tool for precisely predicting and optimizing resonant modes supported by defect arrays within the phononic crystal. Finally, the TBM formulation applied here for describing the CRAWs can straightforwardly be extended to study wave propagation in 3D configurations,<sup>[39]</sup> which will be a subject of research for future works.

## 4. Experimental Section

To observe the interferometric behavior of the guided waves occurring in the designed defects-based acoustic interferometers, the experimental setup illustrated in Figure 1c is used. The excitation of waves was provided by an arbitrary waveform generator (Teledyne Lecroy, Wave Station-2012) using an unfocused immersion transducer (Olympus V301, 0.5 MHz) as the emitter element. Another transducer, connected to a Spectrum Analyzer (Tektronix-MDO 3024b), serves as the receiver, which records the acoustic response. For the analysis, both transducers were positioned face to face at a distance of 50 mm, with the PnC placed in between. The three elements were then immersed in a tank filled with 40 liters of deionized water for measurements at room temperature (22 °C). The utilized PnC had been thoroughly characterized and possesses a bandgap approximately spanning from 380 to 480 kHz.<sup>[27]</sup> The acoustic response for both models DM and HM, along with the perfect crystal, is recorded in the frequency range from 390 to 475 kHz, corresponding to the bandgap of the perfect crystal.

The experimental pressure maps were obtained using the same set as in Figure 1c, however, the transducer used as the receiver was changed by a needle hydrophone (Muller) of 0.5 mm diameter connected to a pre-amplifier. The hydrophone was moved using a translation stage to record the pressure map covering an area of 40 × 60 mm in front of the HM interferometer (see Figure 2c), recording the transmitted signal each 2 mm in both directions, starting 2 mm away from the phononic structure. A group of 600 data points were used to generate the experimental pressure map for the frequency of interest.

## Acknowledgements

D.M.E. acknowledged CONAHCyT for the grant to develop Ph.D. studies at UAEMex. A.M.M.-A. acknowledged financial support from CONAHCyT under the program “Estancias Posdoctorales por México 2022”. D.R. thanks to UAEMex for the partial financial support through project 6753/2022CIB. A.N. acknowledged the support from the Distinguished Professorship start-up funds from UESTC and the Ministry of Science and Technology of China (MOST) International Collaboration Grant No. 2022YFE0129000 entitled “Cavity Acoustodynamics for nonreciprocal wave propagation”. RAMS was supported by DGAPA-UNAM under project PAPIIT-IN111021. A.N. acknowledges the support of National Science Foundation, Emerging Frontier and Research Innovation funds to support D.R. under the Research Experience and Mentoring program from the Grant # 1746177.

## Conflict Of Interest

The authors declare no conflict of interest.

## Data Availability Statement

No comments.

## Keywords

acoustic interferometer, defects, phononic crystals, tight-binding model

Received: August 21, 2023

Revised: October 28, 2023

Published online:

[1] Y. Pennec, J. O. Vasseur, B. Djafari-Rouhani, L. Dobrzyński, P. A. Deymier, *Surf. Sci. Rep.* **2010**, *65*, 229.

- [2] A. Shelke, S. Banerjee, A. Habib, E. K Rahani, R. Ahmed, T. Kundu, *J. Intell. Mater. Syst. Struct.* **2014**, *25*, 1541.
- [3] D. Reyes, E. Walker, Y. Zubov, H. Heo, A. Krokhin, A. Neogi, *New J. Phys.* **2019**, *21*, 113012.
- [4] V. Laude, *APL Mater* **2021**, *9*, 080701.
- [5] D. Reyes, D. Martínez, M. Mayorga, H. Heo, E. Walker, A. Neogi, *Front. Mech. Eng.* **2020**, *6*, 592787.
- [6] M. Ghasemi-Baboly, A. Raza, J. Brady, C. M. Reinke, Z. C. Leseman, I. El-Kady, *Appl. Phys. Lett.* **2016**, *109*, 183504.
- [7] J. M. Escalante, A. Martínez, V. Laude, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **2013**, *46*, 475301.
- [8] Y. F. Wang, T. T. Wang, J. W. Liang, Y. S. Wang, V. Laude, *J. Sound Vib.* **2018**, *437*, 410.
- [9] T. T. Wang, Y. F. Wang, Z. C. Deng, V. Laude, Y. S. Wang, *Compos. Struct.* **2023**, *303*, 116355.
- [10] H. Ji, F. Yang, A. Qi, X. Wu, B. Lv, J. Ni, *Appl. Phys. A* **2022**, *128*, 573.
- [11] R. Sainidou, N. Stefanou, A. Modinos, *Phys. Rev. B.* **2006**, *74*, 172302.
- [12] A. Cicek, A. Salman, O. A. Kaya, B. Ulug, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **2016**, *49*, 035103.
- [13] F. Ramírez-Ramírez, E. Flores-Olmedo, G. Báez, E. Sadurní, R. A. Méndez-Sánchez, *Sci. Rep.* **2020**, *10*, 10229.
- [14] N. Kaina, A. Causier, Y. Bourlier, M. Fink, T. Berthelot, G. Lerosey, *Sci. Rep.* **2017**, *7*, 15105.
- [15] A. M. Martínez-Argüello, M. P. Toledano-Marino, A. E. Terán-Juárez, E. Flores-Olmedo, G. Báez, E. Sadurní, R. A. Méndez-Sánchez, *Phys. Rev. A* **2022**, *105*, 022826.
- [16] R. A. Méndez-Sánchez, A. E. Terán-Juárez, A. M. Martínez-Argüello, E. Flores-Olmedo, G. Báez, E. Sadurní, Y. Hernández-Espinosa, *A. Phys. Pol. A.* **2021**, *140*, 532.
- [17] I. El kadmiri, Y. Ben-Ali, A. Khaled, D. Bria, *Mater. Today: Proc.* **2020**, *31*, S33.
- [18] T. X. Ma, X. S. Li, X. L. Tang, X. X. Su, C. Zhang, Y. S. Wang, *J. Sound Vib.* **2022**, *536*, 117115.
- [19] Y. Betancur-Ocampo, B. Manjarrez-Montañez, A. M. Martínez-Argüello, R. A. Méndez-Sánchez, arXiv: 2306.05595.
- [20] S. Martínez-García, N. Zamora-Romero, B. Manjarrez-Montañez, A. Fontes, M. Quintana-Moreno, E. Flores-Olmedo, G. Báez, R. A. Méndez-Sánchez, *Results in Eng.* **2023**, *19*, 101272.
- [21] Z. G. Chen, L. Wang, G. Zhang, G. Ma, *Phys. Rev. Applied* **2020**, *14*, 024023.
- [22] T. X. Ma, Q. S. Fan, C. Zhang, Y. S. Wang, *J. Appl. Phys.* **2021**, *129*, 145104.
- [23] H. Xue, D. Jia, Y. Ge, Y. Guan, Q. Wang, S. Yuan, H. Sun, Y. D. Chong, B. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **2021**, *127*, 214301.
- [24] C. Choi, S. Bansal, N. Münzenrieder, S. Subramanian, *Adv. Eng. Mater.* **2021**, *23*, 2000988.
- [25] Y. Zubov, B. Djafari-Rouhani, Y. Jin, M. Sofield, E. Walker, A. Neogi, A. Krokhin, *Comm. Phys.* **2020**, *1*, 155.
- [26] Y. Jin, Y. Zubov, T. Yang, T. Y. Choi, A. Krokhin, A. Neogi, *Materials* **2020**, *14*, 125.
- [27] E. Walker, Y. Jin, D. Reyes-Contreras, A. Neogi, *Nat. Comm.* **2020**, *11*, 5967.
- [28] H. Heo, A. Krokhin, A. Neogi, Z. Cui, Z. Yuan, Y. Hua, J. Ju, E. Walker, *Phys. Rev. Appl.* **2023**, *19*, 054008.
- [29] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Saunders, Philadelphia, Pa., **1976**.
- [30] A. Yariv, Y. Xu, R. K. Lee, A. Scherer, *Opt. Lett.* **1999**, *24*, 711.
- [31] E. Ozbay, M. Bayindir, I. Bulu, E. Cubukcu, *IEEE J. Quantum Electron.* **2002**, *38*, 837.
- [32] F. Lemoult, N. Kaina, M. Fink, G. Lerosey, *Crystals* **2016**, *6*, 82.
- [33] F. Taleb, S. Darbari, A. Khelif, H. Taleb, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **2021**, *54*, 225301.
- [34] T.-T. Wang, S. Bargiel, F. Lardet-Vieudrin, Y.-F. Wang, Y.-S. Wang, V. Laude, *Appl. Sci.* **2020**, *10*, 6751.

- [35] Y.-F. Wang, T.-T. Wang, J.-P. Liu, Y.-S. Wang, V. Laude, *Compos. Struct.* **2018**, *206*, 588.
- [36] C. Mahaux, H. A Weidenmüller, *Shell Model Approach in Nuclear Reactions*, North-Holland, Amsterdam **1969**.
- [37] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge University Press, Cambridge, UK **1995**.
- [38] P. Markoš, C. M. Soukoulis, *Wave Propagation: From Electrons to Photonic Crystals and Left-Handed Materials*, Princeton University Press, USA **2008**.
- [39] A. O. Krushynska, N. Anerao, M. A. Badillo-Ávila, M. Stokroos, M. Acuautila, *Mat. Des.* **2021**, *205*, 109714.

## 8. Conclusiones

Las simulaciones numéricas respaldadas por demostraciones experimentales indican que el Factor de Calidad (Q) de las guías de ondas basadas en línea de defectos se ve mejorada en más de 15 veces la Configuración Diagonal a lo largo del eje de propagación con respecto a la configuración horizontal, en un PnC compuesto por cilindros de acero de 0.8 mm de radio sumergidos en agua. También se observó un incremento en el Factor Q, debido a la variación del radio de los dispersores de sonido, que abarca un intervalo de 0.70 a 0.95 mm.

Para un radio de 0.95 mm, el análisis teórico mostró que el Factor Q de la configuración diagonal era 35 veces mayor que la disposición horizontal. La razón se debió a que los defectos horizontales inducen 5 modos de defectos con un pico inducido más amplio, mientras que los defectos diagonales permiten un solo modo, debido a esta configuración que no induce un fuerte acoplamiento lateral. Los resultados serán útiles para la cavidad de alto Q que opera en el rango de baja frecuencia utilizando una guía de ondas PnC sencilla y económica.

Por otro lado, para el segundo artículo se llegó a la conclusión de que: este estudio adaptó con éxito el modelo de Enlace Fuerte o Tight Binding (TB), para describir de manera efectiva la respuesta acústica de diseños similares a interferómetros acústicos basados en líneas de defectos, específicamente el resonador acoplado de guía de ondas acústicas (CRAW's). Se formaron guías de ondas acústicas mediante cristales fonónicos bidimensionales (PnC). El cristal fonónico fue fabricado a base de cilindros de acero inoxidable dispuestos en una base cuadrática, sumergidos dentro de una matriz de agua, los defectos fueron inducidos eliminando cilindros hasta formar el interferómetro basado en defectos tipo Mach-Zehnder.

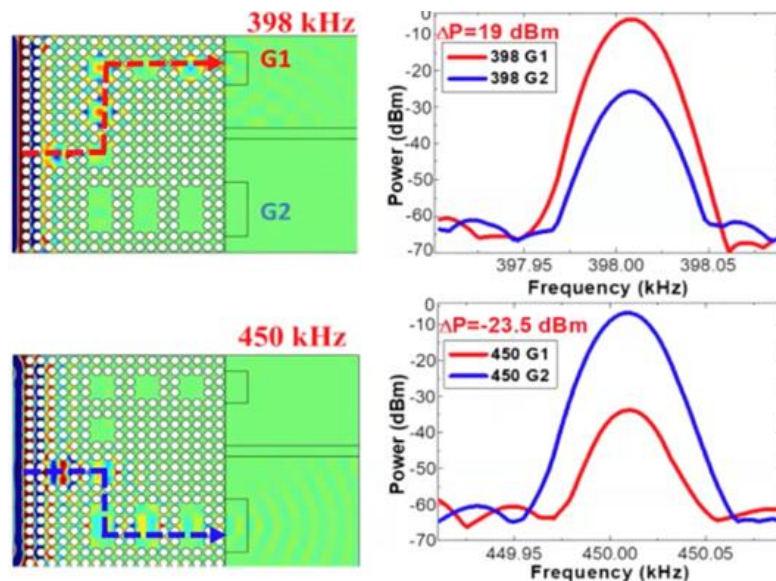
Además, se construyeron dos interferómetros acústicos basados en línea de defectos tipo Mach-Zehnder, con brazos orientados de manera horizontal y diagonal y sus características de transmisión se analizan minuciosamente mediante espectroscopía ultrasónica. Al emplear la aproximación del modelo de Amarre Fuerte, cada defecto fue tratado como un resonador acoplado a sus vecinos, lo que permitió predicciones precisas de la respuesta acústica dentro de un sistema CRAW. Los resultados obtenidos se compararon con los datos de la espectroscopía ultrasónica experimental con las simulaciones FEM y los cálculos de la estructura de bandas. Sorprendentemente, nuestros resultados mostraron una excelente congruencia con los datos experimentales y de simulación, proporcionando evidencia sólida de la confiabilidad y validez del análisis propuesto por el modelo de Amarre Fuerte basado en el enfoque de los principios básicos de la electrónica del estado Sólido propuesto para el funcionamiento de los dispositivos acústicos subacuáticos. El emparejamiento logrado entre las predicciones teóricas y las observaciones experimentales tienen una importancia crucial, ya que ofrecen una valiosa herramienta para predecir y optimizar con precisión los modos resonantes respaldados por el conjunto de defectos dentro del cristal fonónico. Finalmente, la formulación del modelo de Amarre Fuerte empleado en este estudio para la descripción de los sistemas CRAW, puede extenderse directamente para estudiar la propagación de ondas en configuraciones tridimensionales [39], lo que será un tema de investigación para trabajos posteriores.

## 8. ANEXOS

### 8.1 Anexo A: Descripción metodológica

#### 8.1.1 Demultiplexor

Los cristales fonónicos son formaciones sintéticas de materiales mixtos que tienen el atractivo de controlar y manipular ondas acústicas y elásticas. En ese sentido, se sabe que los defectos en la composición periódica se pueden diseñar de tal manera, que se produzcan modos de resonancia mediante defectos localizados dentro de la banda prohibida. Ahora, considerando las velocidades del sonido y las densidades de masa de los materiales constituyentes, la diferencia de una propiedad acústica origina una considerable variación en la función de transmisión de los cristales fonónicos, por lo que, ese cambio de las propiedades acústicas de las guías de ondas, da como resultado un posible cambio en los modos resonantes dentro del espectro de transmisión. Recientemente, se han realizado procedimientos de análisis numérico de selectividad para un cristal fonónico bidimensional sólido fluido basado en un demultiplexor acústico. El demultiplexor, actúa como un *switch* que selecciona diferentes frecuencias en el rango de frecuencias ultrasónicas. La *plataforma* fonónica consta de dos guías de onda modelo T con dos ramas o brazos, designadas con G1 y G2 que separan y dirigen frecuencias de 398 y 450 kHz, respectivamente. Las dos guías de onda se realizan eliminando cilindros de acero de manera específica en filas y columnas, como se muestra en la Figura 1.



**Figura 1.** Impacto del perfil del frente de onda incidente a la salida de los brazos G1 y G2 en función de la potencia de entrada. Las gráficas muestran el perfil de intensidad espacial normalizada para 398 y 450 kHz.

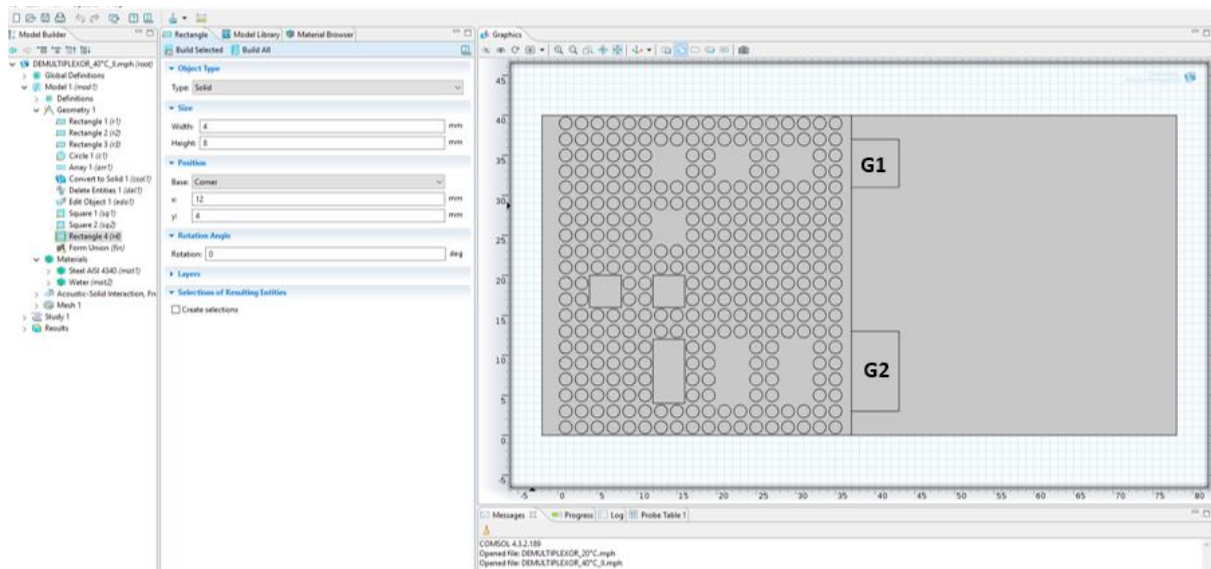
El aumento de potencia conduce a una relación no lineal entre G1 y G2 como lo muestran los espectros.

#### 8.1.2 Demultiplexor sin Hidrogel

De manera general, los defectos se pueden analizar sabiendo que provocan la localización de ondas incidentes confinadas dentro del defecto, generando modos resonantes dentro del bandgap. Por lo que, la frecuencia central, se correlaciona con el confinamiento de la onda y los, modos transmitidos dependiendo de la densidad y la velocidad del sonido en la cual se sumerge la plataforma fonónica.



En el apartado anterior se mencionó que el demultiplexor acústico se logra quitando varillas en posiciones estratégicas para originar los defectos dentro del cristal como una guía de ondas. De esta forma, se diseña un demultiplexor tipo T con dos brazos de salida G1 y G2, con tres defectos lineales cada uno. Destacando que G1, tiene cuatro defectos 2 x 2; tres horizontales y uno vertical, mientras que G2 tiene tres defectos de 2 x 4 como se muestra en la Figura 2. Para cada brazo se obtienen los modos resonantes, ya que cada modo representa un confinamiento alto de ondas acústicas.

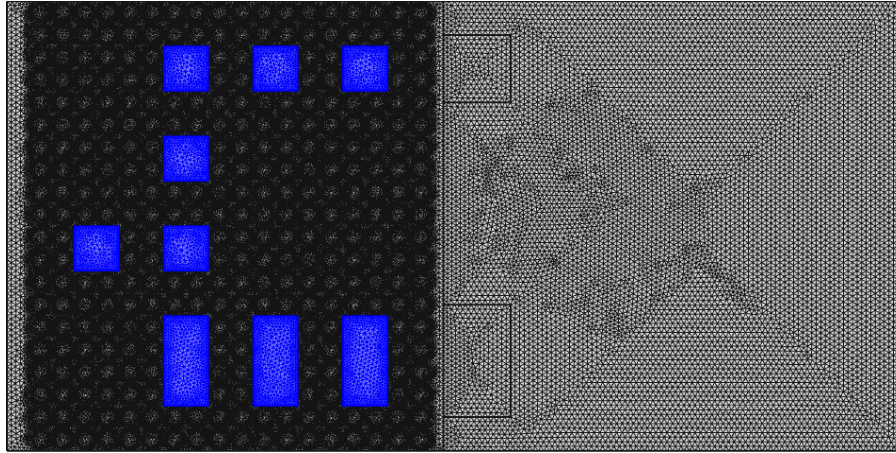


**Figura 2.** Esquema representativo del demultiplexor diseñado en este trabajo. Es un demultiplexor tipo T con dos brazos de salida G1 y G2 con cavidades de 2 x 2 y de 2 x 4, respectivamente.

### 8.1.3 Demultiplexor con Hidrogel

Los hidrogeles de poli(N-isopropilacrilamida), son polímeros térmicamente sensibles que son sometidos a una transición brusca de fase volumétrica alrededor de su temperatura crítica más baja de solución de alrededor de 33°C. Los hidrogeles poliméricos son materiales muy interesantes por sus propiedades mecánicas, además de ser sensibles a estímulos externos. Se sabe también que la densidad y la viscosidad del gel determinan la velocidad del sonido y la atenuación del demultiplexor. Por otro lado, Un cambio en la fase volumétrica del hidrogel, afecta cada una de las propiedades elásticas y mecánicas, lo que resulta en un cambio tanto en la velocidad del sonido como lo es en su atenuación.

Así, la estimulación térmica del PNIPAm debería afectar significativamente las propiedades acústicas y mecánicas. Los polímeros poli(N-isopropilacrilamida), son generalmente materiales altamente viscoelásticos y tienen cadenas poliméricas o redes entrecruzadas que pueden ser comparables con las longitudes de onda ultrasónicas o hipersónicas.



**Figura 3.** Mallado del demultiplexor diseñado para este trabajo doctoral, donde se puede apreciar las cavidades de las guías de onda rellenas de Hidrogel PNIPAm en color azul, mostrando las respectivas áreas de transmisión para cada brazo del demultiplexor.

Los cuadrados y rectángulos en color azul representan las cavidades rellenas de hidrogel PNIPAm. El brazo superior se conforma de tres cavidades 2 x 2, mientras que el brazo inferior se compone de tres rectángulos de 2 x 4. Se observa también la zona de transmisión, que para cada brazo se coloca una zona de la misma escala que los brazos que la conforman, teniendo así dos zonas de transmisión para los dos brazos que conforman el demultiplexor.

#### 8.1.4 Modelado del Efecto de la Temperatura sin Hidrogel

Con lo anterior, entendemos que los defectos funcionan como cavidades resonantes de longitudes iguales al periodo que se obtiene removiendo cilindros en la guía de ondas. También se sabe que las líneas de defectos no alteran considerablemente las propiedades de la transmisión a través de la guía. En ese sentido, se pretende demostrar experimentalmente la posibilidad de seleccionar vibraciones u ondas con ciertas frecuencias para permitir su transmisión a través de un cristal fonónico; esto es porque existe la posibilidad de atenuar, enfocar, colimar, filtrar, seleccionar, etc. El control del tamaño, la forma, el contraste de densidad elástica, la disposición de los elementos, así como los efectos de la temperatura en la estructura fonónica permiten el control artificial de la propagación de ondas elásticas o de presión acústica. Por ello, en esta sección definimos los elementos teóricos usados en el análisis del efecto de la temperatura en el control de las ondas elásticas en cristales periódicos. Los efectos de la temperatura y la presión sobre las propiedades de un gas se pueden extender a sólidos y líquidos. El efecto de la temperatura en materiales sólidos aumenta la vibración de las partículas y la estructura pierde fortaleza y rigidez al aumentar la temperatura. Al calentar el sólido, aumenta la vibración de sus partículas hasta vencer sus fuerzas de cohesión, es decir, la red cristalina se desmorona. En los líquidos, al aumentar la temperatura y la vibración de las partículas pueden alejarse con más facilidad de las partículas vecinas, es decir al calentar el líquido, cada vez más partículas adquieren la energía suficiente para abandonar su superficie, pasando a estado gaseoso. Para este fin, es importante mencionar que las propiedades elásticas de nuestros cristales experimentan cambios, que se tienen que analizar concisamente para evaluar los efectos del hidrogel a tres diferentes temperaturas, a saber 20, 30 y 40°C respectivamente. Para los valores de la densidad del acero se utilizó la expresión:  $\rho = \rho_t[1 + \gamma(t - 20)]$ , despejando fácilmente, tenemos:

$$\rho_t = \frac{\rho}{1 + \gamma(t - 20)} \quad \dots (1)$$

En donde,  $\rho = 7850 \text{ kg/m}^3$  es la densidad del acero a  $20^\circ\text{C}$  y  $\gamma$  es el coeficiente de expansión lineal igualmente a  $20^\circ\text{C}$  con un valor de  $1.75 \times 10^{-5}$ ,  $t$  es la temperatura a la que se desea obtener la densidad ( $\rho_t$ ); por ejemplo, deseamos calcular la densidad del Acero a  $40^\circ\text{C}$ , entonces sustituyendo los valores que se conocen, tenemos:

$$\rho_t = \frac{\rho}{1 + \gamma(t - 20)}$$

$$\rho_{t_{40}} = \frac{7850}{1 + 0.0000173(40 - 20)}$$

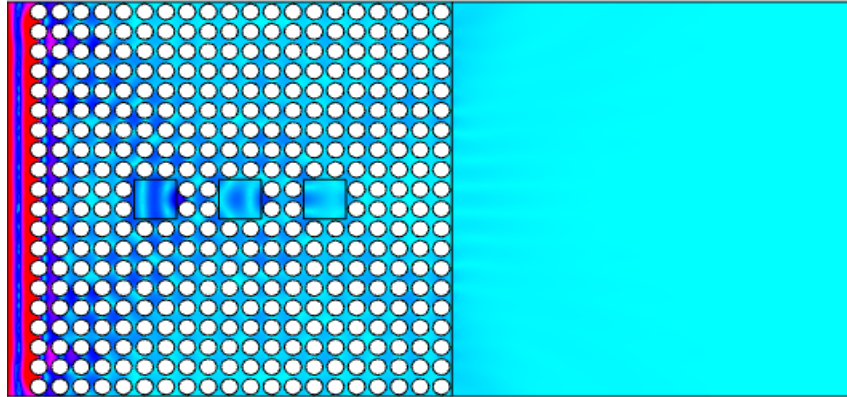
$$\rho_{t_{40}} = \frac{7850 \text{ kg/m}^3}{1.000346}$$

$$\rho_{t_{40}} = 7847.28 \text{ kg/m}^3$$

Para los valores restantes de la densidad y velocidad del sonido para las tres diferentes temperaturas y también para los tres diferentes tipos de material utilizados (acero, agua, hidrogel), se muestran en la Tabla 1.

### 8.1.5 Hidrogel PNIPAm

Un hidrogel es una red 3-D basada en la estructura polimérica reticulada que se puede obtener tanto de polímeros sintéticos como de polímeros naturales. Los hidrogeles de poli(N-isopropilacrilamida) (PNIPAm), son polímeros térmicamente sensibles que son sometidos a una transición brusca de la fase volumétrica alrededor de su temperatura crítica más baja alrededor de  $33^\circ\text{C}$ . En este trabajo, formamos cavidades resonantes formando guías de onda mediante línea de defectos. Los hidrogeles poliméricos de poli(N-isopropilacrilamida) han resultado ser materiales muy interesantes por sus propiedades mecánicas y su alta sensibilidad a estímulos externos [1]. La estimulación térmica del hidrogel PNIPAm, en solución acuosa da como resultado una fuerte transición de fase volumétrica alrededor de  $33^\circ\text{C}$ , llamada "*fase crítica de temperatura inferior de la solución*" o LCST por sus siglas en inglés. Por encima de la LCST, la unión existente entre las cadenas poliméricas se torna termodinámicamente más preferenciales, es decir, la red de cadenas de polímeros colapsa y una parte del agua es expulsada de su red polimérica y el gel se torna hidrófobo, precipitándose fuera de la solución acuosa [2]. Dicho de otra manera, este tipo de geles forman una sola fase con el agua hinchándose por debajo de su LCST debido a la polaridad de sus moléculas, mientras que por encima de esta temperatura colapsan (deshinchándose) para formar dos fases separadas. De esta manera, tanto la densidad como la viscosidad del gel determinan el factor de la velocidad del sonido y de atenuación. En la Figura 4, se muestran tres cavidades sin hidrogel y la forma en que se comporta la distribución de la presión de la energía acústica dentro de ellas con respecto al resto del cristal fonónico.



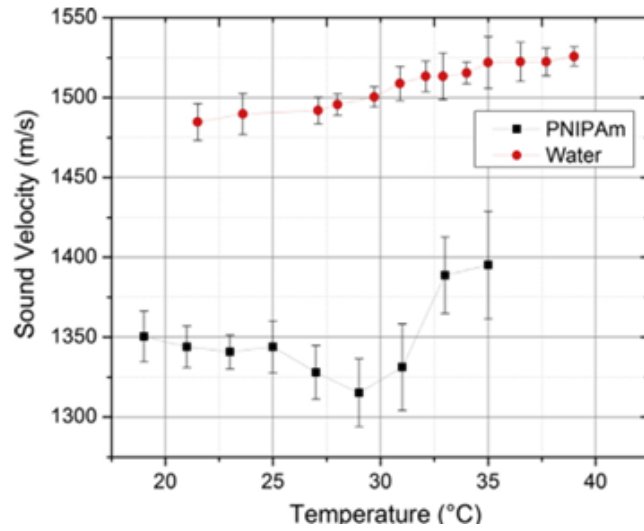
**Figura 4.** Guía de ondas con tres cavidades resonantes sobre una matriz de agua sin hidrogel.

### 8.1.6 Efecto de la Temperatura con Hidrogel

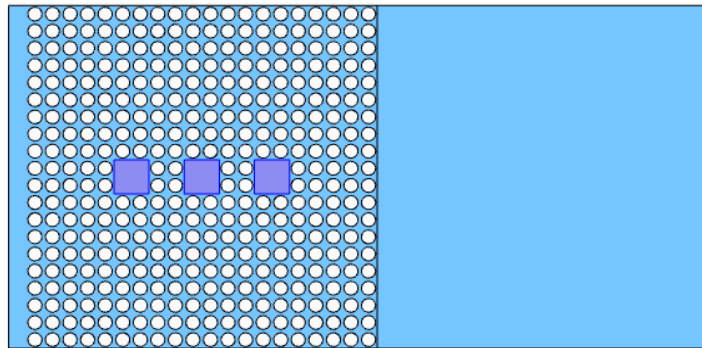
Ahora comprendemos, que un cambio de fase volumétrico en un hidrogel afecta cada una de sus propiedades fisicoquímicas, lo que resulta en un cambio neto en la velocidad del sonido y la atenuación. Así, para la estimulación térmica del gel PNIPAm, debería afectar significativamente sus propiedades acústicas. En particular, el hidrogel a base de PNIPAm se ha utilizado ampliamente para estudiar las reacciones químicas durante la polimerización de geles basados en acrilamida, y la influencia térmica en las propiedades mecánicas de varios polímeros. Los polímeros son generalmente materiales altamente viscoelásticos y pueden tener cadenas de polímeros o redes entrecruzadas que son comparables con la longitud de onda de las ondas ultrasónicas o hipersónicas. Estudios experimentales han reportado el comportamiento ultrasónico dentro del rango de 200 a 800 kHz, confirman una diferencia específicamente en la velocidad del sonido, como lo demuestra la Figura 5. Por lo que, surgen diversas preguntas al tratar de interpretar el comportamiento de este tipo de hidrogeles en sistemas periódicos. En este trabajo se reporta el comportamiento de las guías de onda con la introducción del hidrogel poli(N-isopropilacrilamida) dentro de las cavidades resonantes diseñadas. En la siguiente tabla se muestran los valores de los parámetros físicos para los tres materiales para los tres valores propuestos de la temperatura.

**Tabla 1.** Constantes físicas de los tres materiales que conforman la guía de ondas a tres diferentes temperaturas.

Material	Temperatura (°C)	Densidad (kg/m <sup>3</sup> )	Velocidad del Sonido (m/s)
Acero	20	7850	5950
	30	7848.62	5950
	40	7847.284	5950
Agua	20	998	1480
	30	995	1507
	40	992	1526
Hidrogel	20	1050	1345
	30	1075	1325
	40	1280	1425



**Figura 5.** Mediciones de la velocidad del sonido de PNIPAm (cuadros negros) y del agua (puntos rojos) con respecto a la temperatura [3].

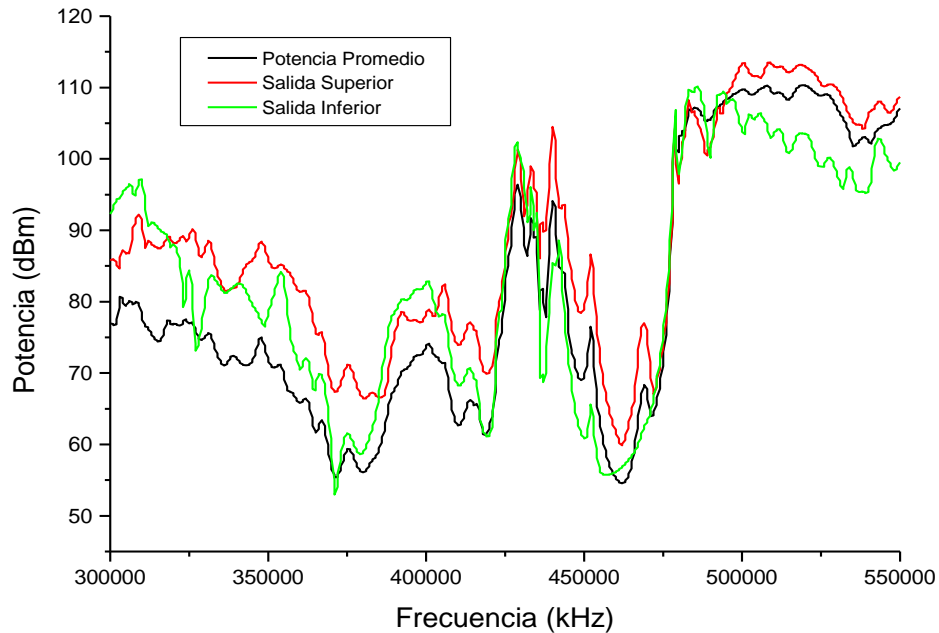


**Figura 6.** Representación esquemática de la guía de ondas con tres cavidades resonantes sobre una matriz de agua (azul) con hidrogel PNIPAm (morado) y dispersores de sonido (blanco). La *Afinación* de los cristales simulados, se logra modulando sus propiedades elásticas de los dispersores y de la matriz.

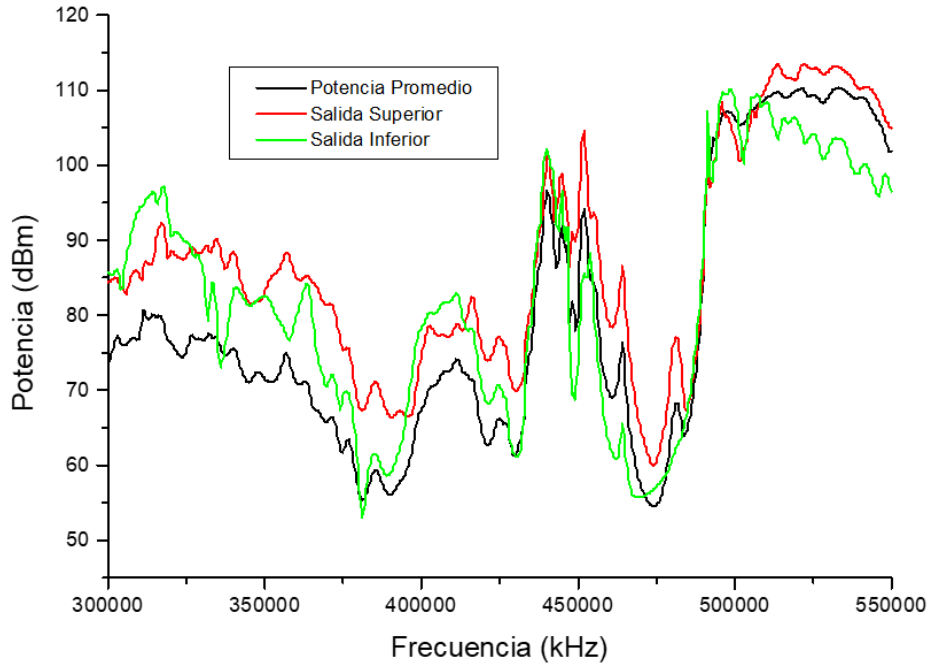
## 8.2 Anexo B: RESULTADOS: DEMULTIPLEXOR CON Y SIN HIDROGEL, EFECTO DE LA TEMPERATURA

### 8.2.1 Sin Hidrogel

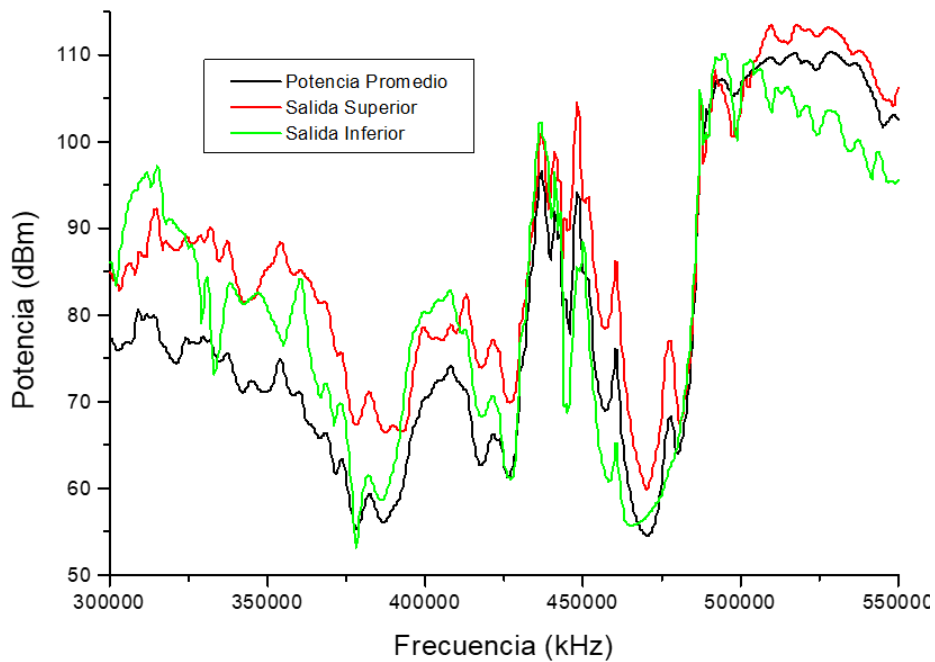
A continuación, vamos a analizar el campo de transmisión del demultiplexor. En la gráfica anterior y en las dos inmediatas se observan los diferentes espectros de los órdenes de corrimiento con respecto a la variación de la temperatura. Se aprecia claramente los efectos de los defectos propuestos, en donde la línea verde representa el arreglo rectangular, el rojo los arreglos cuadráticos y la línea negra, la potencia promedio. El sentido del objetivo es entender la dependencia de la posición de la banda prohibida en función de la posición y simetría (geometría) de los defectos inducidos en la red. Además, la simetría propuesta, divide la energía acústica que conduce a pequeñas degeneraciones de bandas prohibidas dentro de la banda plana. En ese sentido, la simetría de la red sigue siendo importante para controlar la dispersión de ondas ultrasónicas y poder construir más brechas de banda dentro de nuestro demultiplexor acústico. De hecho, con este modelo, nosotros podemos identificar las frecuencias guiadas por cada brazo e identificar así la dispersión permitida que se puede propagar en el demultiplexor. En otras palabras, se está investigado experimentalmente la propagación de ondas acústicas en cristales fonónicos con defectos inducidos en base a una configuración de diferentes arreglos con diferente simetría y geometría, para poder controlar ciertos valores de frecuencias en consecuencia del arreglo propuesto en esta tesis.



**Gráfica 1.** Diagramas de transmisión del Demultiplexor a una temperatura de 20°C.



**Gráfica 2.** Diagramas de transmisión del Demultiplexor a una temperatura de 30°C.



**Gráfica 3.** Diagramas de transmisión del Demultiplexor a una temperatura de 40°C.

Por lo tanto, ya pueden derivarse algunos análisis significativos en contraste a los que confieren los análisis previos y estudiar de manera local la dependencia de la resonancia que está afectada por la simetría del arreglo. Estas observaciones, por lo tanto, van a sugerir una forma práctica de prohibir la propagación de las ondas colocando arreglos simétricos de cilindros metálicos sobre una matriz de hidrogel (PNIPAm), sabiendo por donde se puede sintonizar una minibrecha a la banda de

transmisión y clasificar la frecuencia de cada brazo en función de su arreglo espacial. En otras palabras, se puede ver al demultiplexor como un filtro acústico que conduce solamente ciertas frecuencias en función a su arreglo geométrico, con ciertos materiales a ciertas temperaturas. En el párrafo anterior se realizaron los estudios correspondientes para entender fenomenológicamente el efecto de los arreglos inducidos sobre una matriz conformada por agua, pero del mismo tiempo se mencionó la reproducción del estudio bajo las mismas condiciones, pero cambiando la matriz acuosa por una a base de hidrogel.

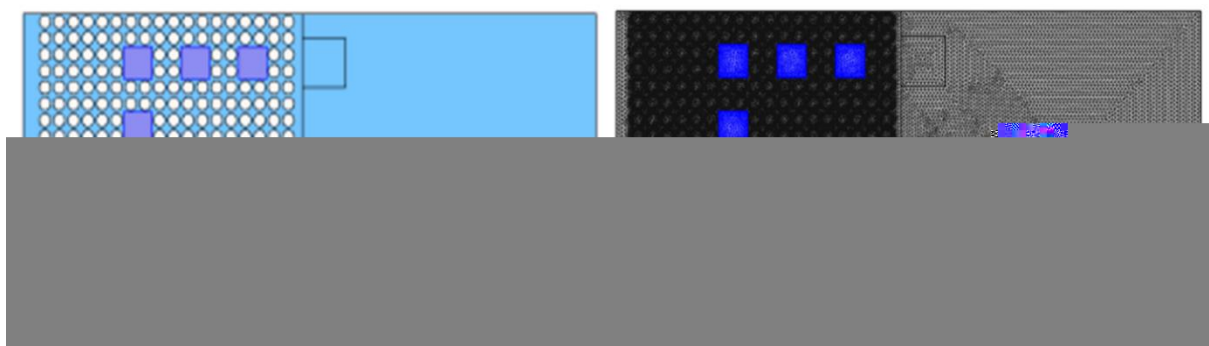
### **8.2.2 Demultiplexor con Hidrogel poli (N-isopropilacrilamida).**

De manera general, los hidrogeles son polímeros térmicamente sensibles conformados por una red tridimensional de cadenas flexibles, con la característica principal de poseer la capacidad de absorber de manera reversible ciertas cantidades de agua sometidos a una transición brusca de fase volumétrica con respecto a la variación de la temperatura. Esta temperatura de transición es intrínseca para cada tipo de hidrogel y se conoce como la *temperatura crítica más baja de la solución*, o también como *LCST* por sus siglas en inglés. Los hidrogeles poliméricos a base de poli N-isopropilacrilamida (*PNIPAm*), resultan ser materiales muy interesantes por sus propiedades mecánicas y ser altamente sensibles a estímulos térmicos exteriores. La estimulación térmica del PNIPAm, en solución acuosa da como resultado una fuerte transición de fase volumétrica alrededor de los 33°C. Por debajo de esta temperatura, la unión entre sus cadenas poliméricas y el agua se torna bastante preferible termodinámicamente hablando y la red reticulada se hincha hasta un punto que las cadenas logran poseer un carácter hidrofílico, es decir, atraen el agua. Mientras que, por encima de dicha temperatura, adquieren la propiedad de repeler el agua, provocando que sus cadenas colapsen y expulsen una parte del agua contenida en la red, convirtiéndose así en polímeros hidrófobos que se precipitan fuera de la red de unión de las cadenas poliméricas. Estos geles poliméricos, al poseer este tipo de redes reticuladas, suelen ser altamente viscoelásticos y poseen longitudes de onda que son apenas comparables a las frecuencias ultrasónicas que, por ende, al ser sometidos a estímulos térmicos exteriores sus propiedades afectan significativamente su masa, su densidad o su módulo elástico; afectando directamente la velocidad del sonido, así como la atenuación propia del sistema. Por lo cual, surgen algunos problemas al tratar de traducir los comportamientos, debido al entrecruzamiento y en consecuencia la afectación en las propiedades elásticas que ya sabemos, y que deben contener un amplio contraste entre la existencia de ellas [5]. En este trabajo, nos enfocamos en la comprensión de la dependencia de la temperatura y su dependencia con la velocidad del sonido usando arreglos inducidos generando cavidades de resonancia alrededor de tres diferentes temperaturas que oscilan alrededor de la LCST. Anteriormente se han realizado investigaciones más extensas, que verifican los efectos de la restricción mecánica de los hidrogeles tipo PNIPAm en la velocidad del sonido, y garantizar que restricciones del gel afectarían la velocidad del sonido con la temperatura. En la siguiente figura, se muestra una gráfica al cambio sistemático en el valor estándar del agua y el PNIPAm. Esta gráfica nos aporta los valores a los cuales el hidrogel cambia con mayor rapidez conforme a la densidad del material y también los cambios referentes al módulo volumétrico por debajo y por encima de la fase de transición y los efectos producidos en la velocidad del sistema. Con respecto a la Figura 5 podemos observar que, aunque el hidrogel se encuentre dentro de las cavidades, el tamaño de las redes poliméricas reticuladas y la reducción de los valores del módulo elástico y causar los mismos efectos cualitativamente hablando cuando no se encuentra dentro de las cavidades. Se aprecia también la existencia de un valor relativamente bajo en el efecto del cambio en el volumen, combinada con un valor poco alto de densidad, que da como resultado una disminución directa en la velocidad del sonido dentro del sistema.



Con este aspecto, se podría deducir que se relaciona la presencia de gases acumulados durante la preparación de hidrogel y dar una razón más para poder explicar la baja velocidad, pero esperaremos a reforzar comparando este tipo de argumentos conforme se desvelen los resultados faltantes. Procediendo con el análisis de los datos obtenidos en las simulaciones anteriores y fortalecer las futuras investigaciones, realizamos un comparativo de ambos comportamientos, es decir, los datos del agua y el hidrogel comparados entre ellos mismos.

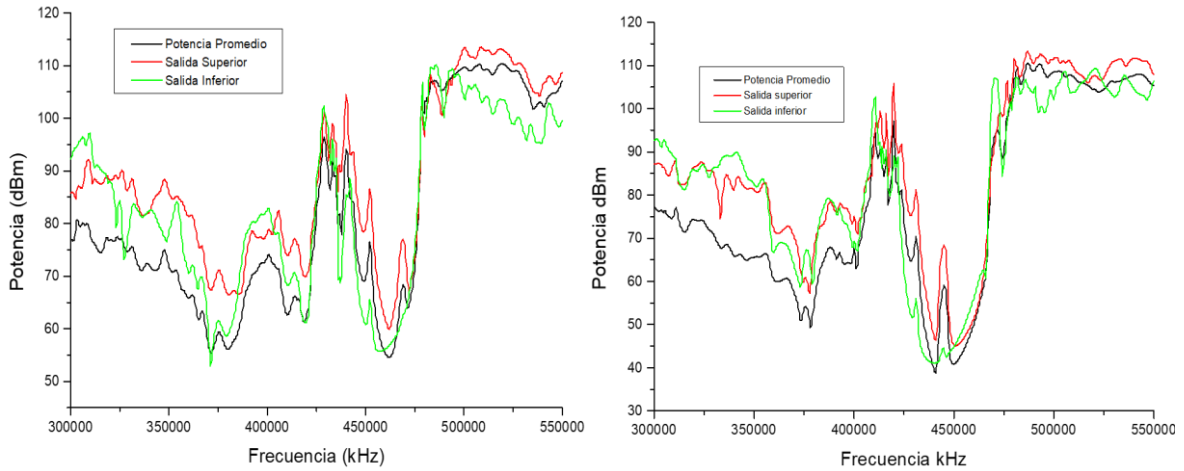
Pero antes de proceder en el comparativo numérico de los dos sistemas, mostramos la configuración de nuestro interés para identificar la localización del hidrogel en el demultiplexor. Esta representación, también nos ayuda a vislumbrar el estudio y dominio del buen manejo de la plataforma COMSOL, que como cualquier técnica que se pretenda dominar requiere de cierto esfuerzo en la claridad de la parte teórica del proyecto de Doctorado en Ciencias Físicas.



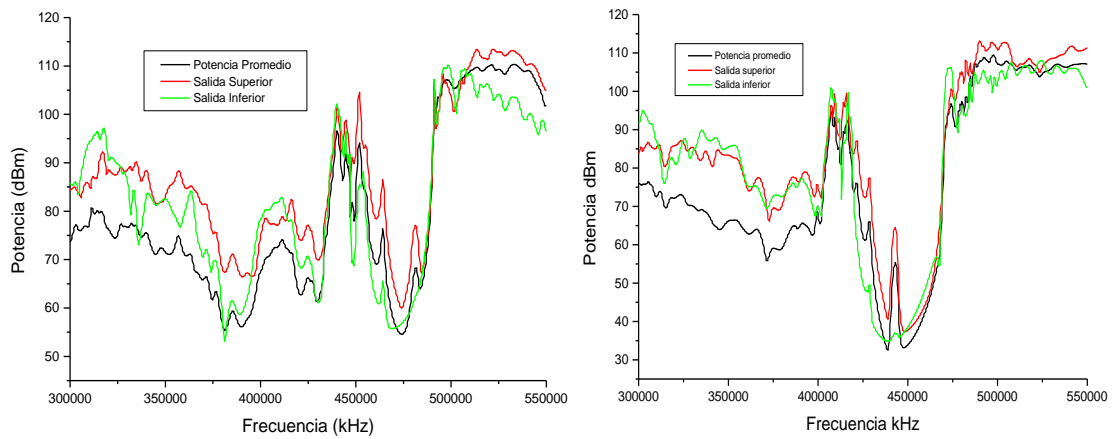
**Figura 7. (Izquierda)** Demultiplexor modelo T con una entrada y dos brazos como salida. Los recuadros morados representan el lugar donde será introducido el hidrogel. **(Derecha)** Mallado del sistema con PNIPAm, haciendo énfasis que COMSOL abarca tanto el sistema con los cilindros, tanto los intersticios en donde se introduce el Hidrogel. A la vista se observa que la parte superior se conforma por cuadrados  $2 \times 2$  con cuatro arreglos, mientras que la parte inferior son rectángulos  $2 \times 4$  con tan solo tres defectos. La ecuación de onda es resuelta para todos los elementos que conforman el demultiplexor que se van modificando, conforme a la temperatura.

Es importante mencionar que se consideró a los dispersores en la simulación como dispersores duros para que COMSOL los pueda ajustar en los límites del campo lejano y tener además un alto contraste acústico entre los dispersores y el medio acuoso o polimérico. Cabe destacar que por la crisis sanitaria por COVID-19, se ajustó el proyecto, reduciendo así este análisis en un sentido más superficial, y dejando abierta la posibilidad para futuras investigaciones y poder determinar los coeficientes de decaimiento del sonido tomando en cuenta la dispersión múltiple y la posible interferencia ocasionada por la difracción, y las investigaciones lo avalan.

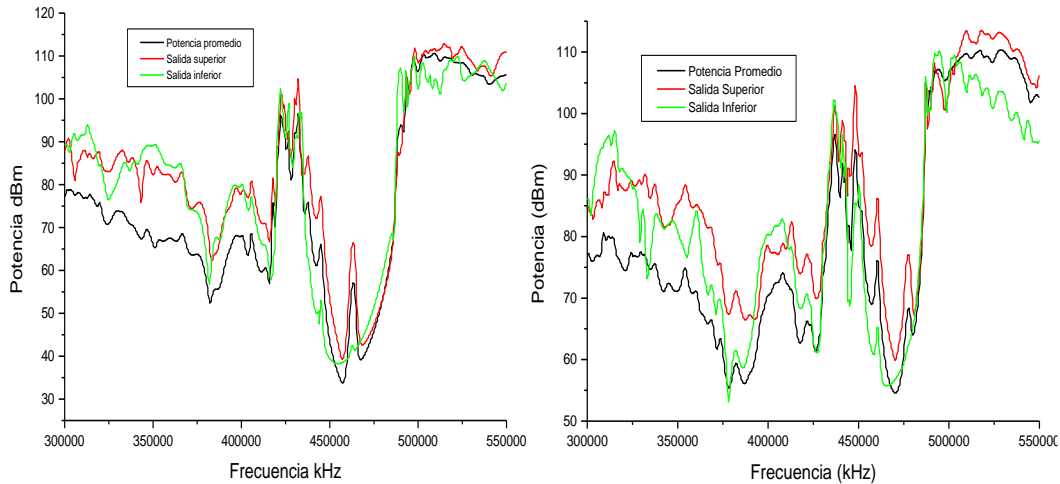
En consecuencia, es de esperarse que los resultados obtenidos, exista cierto desplazamiento en los picos de transmisión, sin contemplar la dispersión de los múltiples dispersores. Esto en referencia a la simetría de la red y del arreglo geométrico. Para dar mayor soporte a nuestro análisis numérico se van a rectificar de manera experimental como se hizo con los resultados del Factor de Calidad (Q). En ese sentido, la coincidencia existente por el momento entre los datos numéricos y los experimentales, aseguran el camino tomado entre los resultados obtenidos hasta este punto en relación con los objetivos de alcance propuestos en esta investigación. Sin más por el momento, presentamos las gráficas comparativas del agua y el hidrogel a sus diferentes valores de temperatura.



**Gráfica 4.** Esquema comparativo de los dos sistemas con diferente matriz de soporte. En la gráfica de la derecha se muestran los valores referentes al Agua, mientras que a la izquierda se muestran los valores correspondientes al sistema con hidrogel polimérico a 20°C.



**Gráfica 5.** Gráficas de los valores referentes al Agua (Derecha) y los obtenidos para el Hidrogel a una temperatura de 30°C. Notamos la existencia de ligeros desplazamientos tanto horizontales como verticales para el sistema hidrogel cumpliendo con lo esperado hasta el momento.



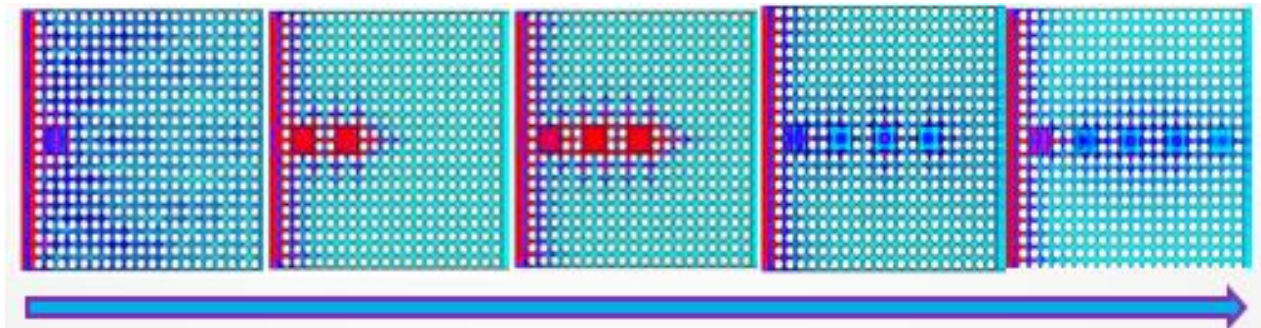
**Gráfica 6.** Último espectro comparativo entre los dos sistemas simulados. Se sigue el mismo patrón que las dos gráficas anteriores; un desplazamiento en los valores horizontales y una ligera disminución para el eje vertical. Valores correspondientes a una temperatura de 40°C.

Estos valores analizados, nos muestran el efecto de los defectos inducidos al esquema demultiplexivo de ondas acústicas en presencia de Agua e Hidrogel, respectivamente. Esto se debe en gran medida a la cercanía de superficie sólida de los dispersores de sonido, y el gradiente de variación con respecto a la velocidad dentro de las barreras viscosas debido al hidrogel, se ven reducidos gradualmente para el valor de la Potencia de transmisión. Por otro lado, las diferencias entre los desplazamientos en los picos de transmisión para el sistema con hidrogel aumentan ligera, pero notoriamente debido a la presencia a que los espacios (Geometría) se hacen más viscosos y aunado también a la naturaleza rígida del cilindro metálico. Esta disminución registrada en el desplazamiento en la frecuencia, y se podría entender con respecto a la función del aumento observado en la disipación térmica, gracias a la presencia de las cadenas poliméricas en interacción con agua adquiriendo cierto nivel de viscosidad. Por lo tanto, uno esperaría que exista superposición entre las cadenas de la red polimérica complicando las líneas energéticas de transmisión. Cada varilla dispersora, tiene una sección transversal cilíndrica con un radio fijo de 0.80mm y un parámetro de red constante de 0.20mm; además de que nuestro sistema es un cuadrado de 20 x 20 cilindros para cada eje dimensional, y en ambos casos COMSOL ajusta las fronteras límite para los diferentes campos; lejano o cercano, según sea mediante el uso de la ecuación Navier-Stokes, descrita anteriormente. Además de que las ondas emitidas por la fuente son: ondas incidentes planas. También no podemos pasar por alto el comportamiento del sonido en un tubo o cilindro metálico como es en este caso, con paredes rígidas dependiente además de las propiedades de la fuente emisora, de la longitud del tubo, del comportamiento de su sección transversal como función de la distancia de separación, y de las condiciones de frontera que describan alguna terminación. En ese sentido, se sabe también que la viscosidad es una propiedad dinámica y presenta anisotropía, por ello se ve reflejado una disminución en la potencia transmitida para los arreglos rectangulares a diferencia de los cuadráticos. El demultiplexor fue diseñado precisamente para poder explicar este tipo de fenómenos anisotrópicos, sin necesidad de ahondar en términos donde se incluyan mayores grados de anisotropía originado por los factores ya mencionados con anterioridad. Entonces, solo por hacer énfasis en este punto; recordemos que todos los resultados obtenidos mediante las simulaciones teóricas han sido dentro de las frecuencias ultrasónicas de resultados hasta ahora satisfactorios y en correcta convergencia con los datos esperados además de los experimentales de igual manera. Por último, mostramos los resultados y análisis de la simulación de la guía de ondas.

## 8.2.3 Análisis de la Guía de Ondas.

### 8.2.3.1 Efecto del número de defectos

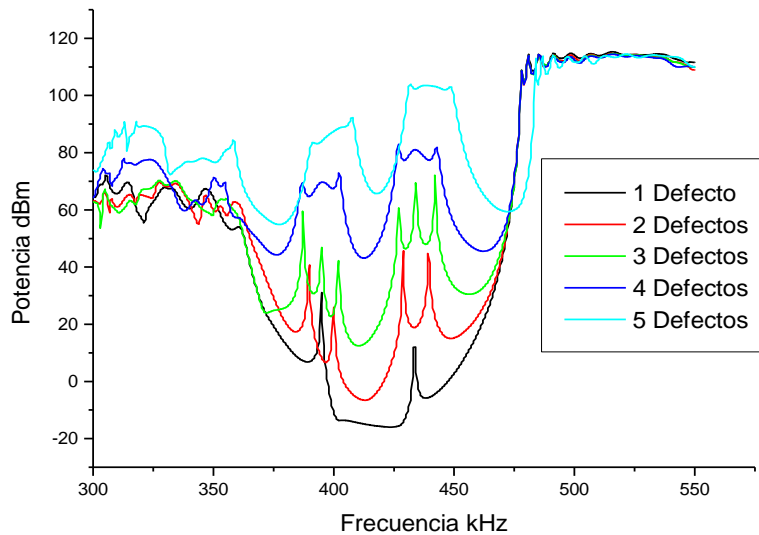
Una vez analizados los datos del demultiplexor con o sin hidrogel, procedemos al estudio de la guía de ondas de manera individual, es decir, analizar de manera individual las líneas de defectos de forma horizontal. En este apartado mostramos el análisis obtenido en función de los defectos inducidos de manera lineal. Para este estudio se propone iniciar la línea de defectos de izquierda a derecha, como se muestra en la Figura 7.



**Figura 8.** Configuración lineal de los defectos inducidos dentro de la guía de ondas.

En esta sección estamos interesados en estudiar las guías de onda en cristales fonónicos 2D constituidos por cilindros de acero inoxidable sumergidos en agua e hidrogel en el que conformamos una guía de ondas lineal de cinco defectos inducidos a lo largo de la dirección  $X$ , dispuestos en una red cuadrada de  $20 \times 20$ . Debido a las condiciones de frontera periódicas en la dirección  $X$ , cada guía está separada por dos cilindros. Esta separación es suficiente para evitar transmisiones significativas entre cada defecto inducido. La transmisión emitida por cada guía de ondas es lanzada en la misma dirección para cada guía acústica.

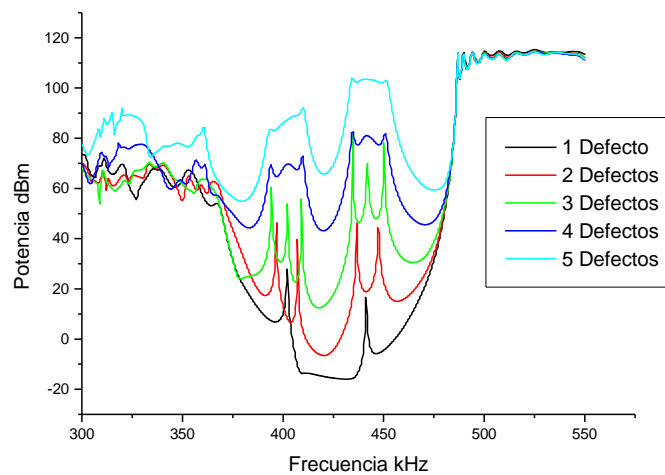
Dentro de cada defecto lineal inducido, esperamos la presencia de nodos o picos de transmisión por cada número de defectos inducidos. Los datos simulados se encuentran dentro del rango de los 300 a los 550 kHz cuando el radio se encuentra a 0.80mm y un parámetro de red de 0.20mm. En las siguientes gráficas, hemos representado las gráficas de transmisión de campo para las frecuencias consideradas.



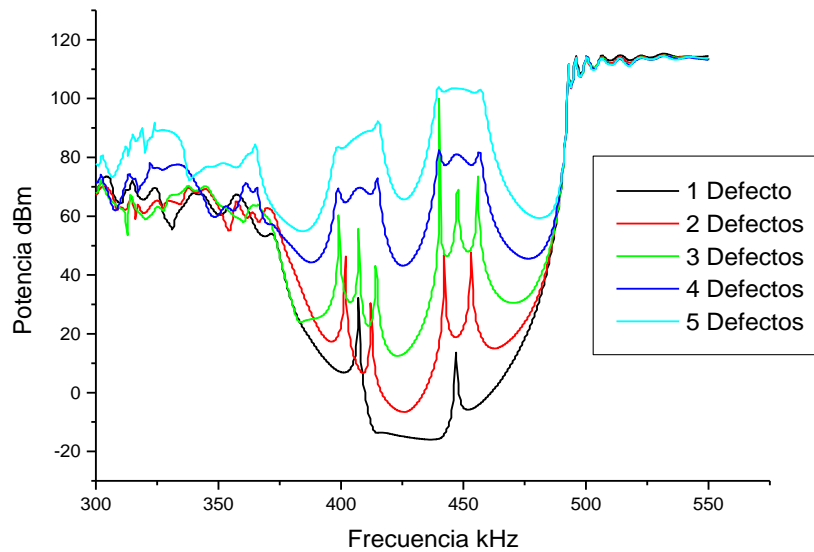
**Gráfica 7.** Espectros de transmisión del cristal fonónico constituido por cilindros de acero con un radio de 0.80mm, y un parámetro de red de 0.2mm, sobre una matriz de agua a una temperatura de 20°C. Los espectros observados corresponden a los defectos inducidos dentro de la brecha prohibida, podemos ver la evolución de las líneas con respecto a la variación de los defectos lineales.

En la gráfica anterior, se puede apreciar que emergen dos posiciones de bandas muy marcadas; una localizada alrededor de los 380 a los 420 kHz y otra marcada en 430 hasta los 460kHz aproximadamente. Es bastante notorio que para un solo pico inducido se crea un pico de transmisión en esas dos brechas. Ahora, también se puede observar que las dos brechas se mantienen hasta llegar a los cinco defectos, aunque los picos de transmisión tienden a desaparecer.

### 8.2.3.2 Efecto de la Temperatura

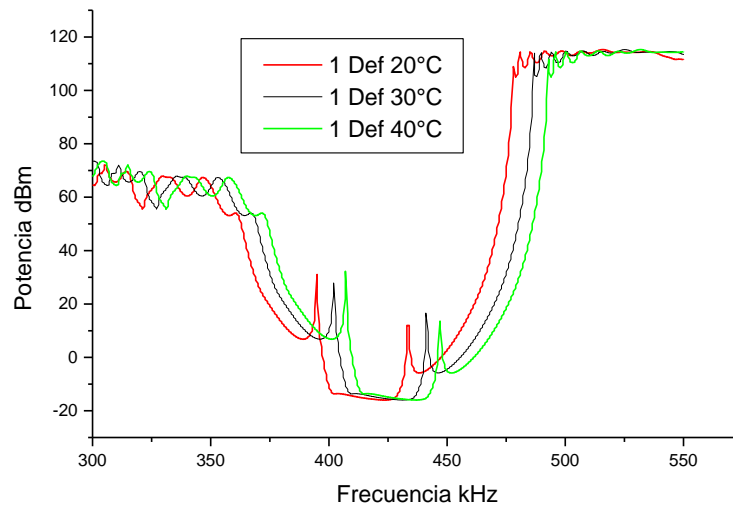


**Gráfica 8.** Espectros de transmisión de la guía de ondas con base matricial de agua a una temperatura de 30°C. Los parámetros físicos para estas simulaciones se mostraron en la Tabla 3, del capítulo 3, destinado a los detalles de las simulaciones computacionales.

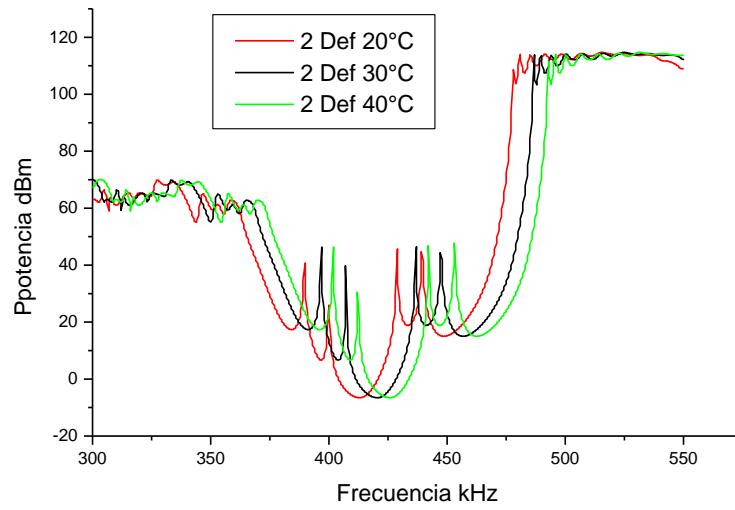


**Gráfica 9.** Espectros de transmisión de la guía de ondas con base matricial de agua a una temperatura de 40°C.

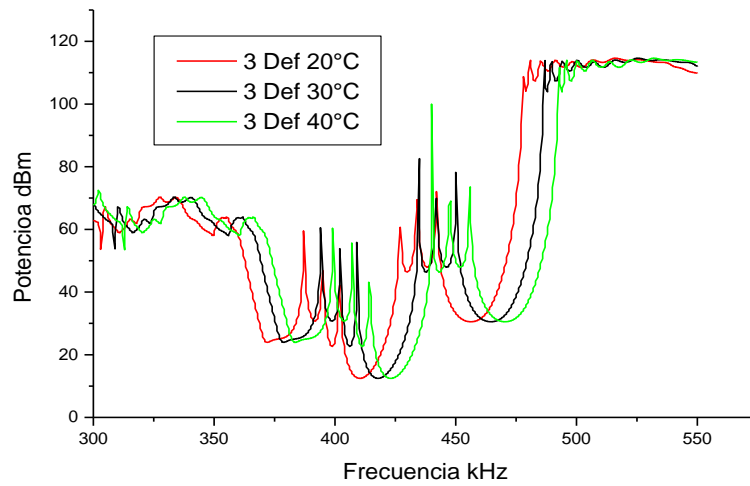
Exploremos ahora el caso comparativo de los tres valores de temperatura, donde se van a contrastar las simulaciones de los defectos por defecto, es decir, los valores de un solo defecto con los otros dos valores de temperatura. Los valores de un defecto se comparan con los valores respectivos a su valor de temperatura y detectar la posición del *bandgap* y su comportamiento de cada defecto a las tres diferentes temperaturas.



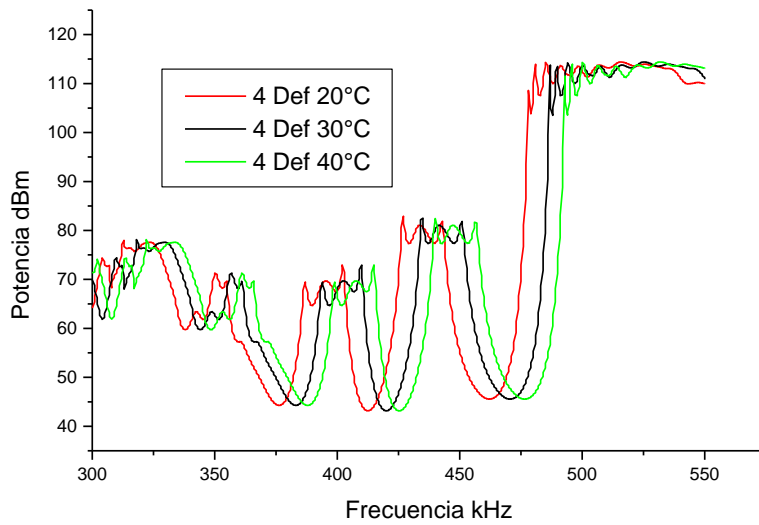
**Gráfica 10.** Representación esquemática comparativa de un solo defecto con respecto a los tres valores propuestos de temperatura. Vemos el desplazamiento de cada temperatura con respecto a la frecuencia ultrasónica.



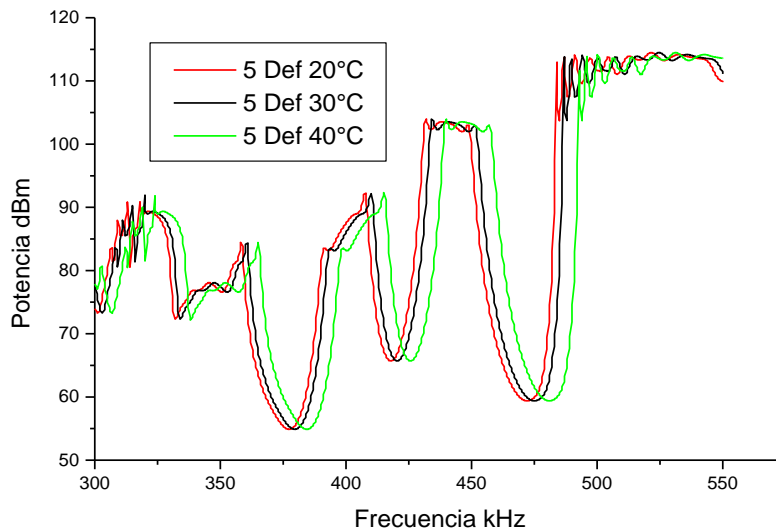
**Gráfica 11.** Gráfica comparativa de dos defectos a las diferentes temperaturas propuestas.



**Gráfica 12.** Gráfica comparativa de tres defectos a las diferentes temperaturas donde se aprecia el desplazamiento correspondiente por efecto de la temperatura.



**Gráfica 13.** Gráfica comparativa de cuatro defectos, que en este caso podemos ver la desaparición de picos pronunciados. Ahora, estos picos tienden a estabilizarse dentro del ancho del intervalo en función a la posición en el eje de la frecuencia.



**Gráfica 14.** Gráfica comparativa de los cinco defectos propuestos, podemos ver de una manera más clara la desaparición de picos pronunciados, y tender a un espectro con mayor estabilidad dentro del ancho de banda. Otro aspecto apreciable en este punto es la tendencia de las dos bandas que se forman desde un principio y se aprecian con más facilidad.

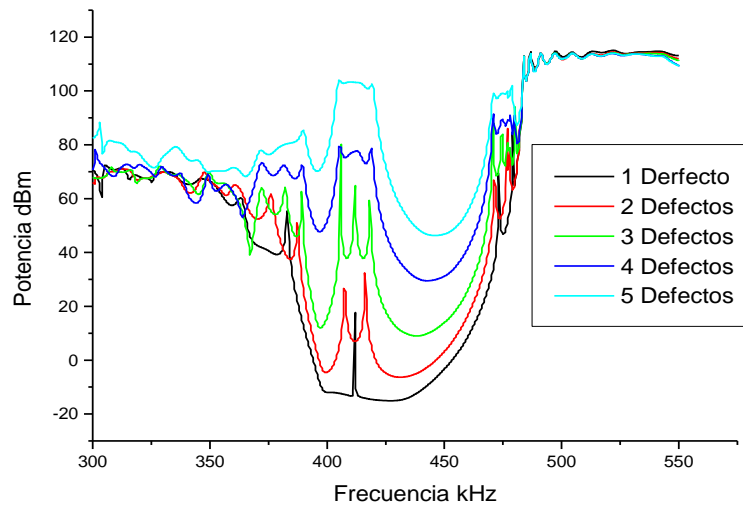
Entonces, teniendo en cuenta las aportaciones de filtrado y demultiplexión de nuestros cristales fonónicos, ahora investigamos el efecto de la modificación de los dispersores de sonido con una matriz a base de hidrogel. En concreto se analizará la modificación del desplazamiento en la frecuencia de la banda de transmisión dentro del *bandgap* propio del cristal acústico.



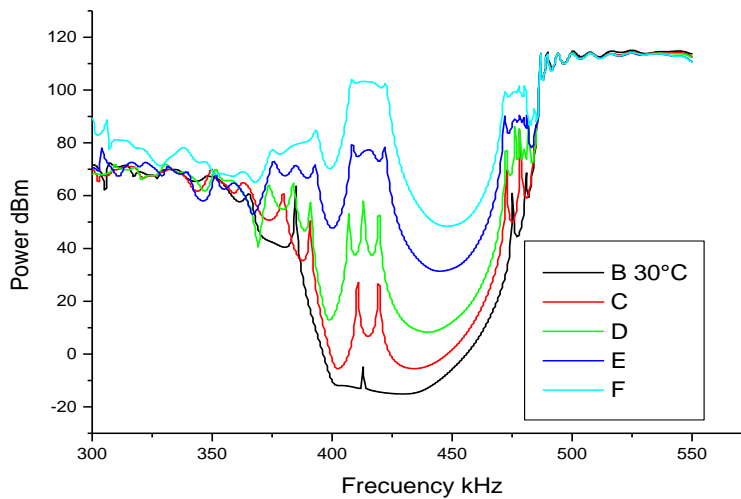
Se eligen los valores de los parámetros elásticos para cada temperatura y se procede a realizar la simulación teniendo en consideración que estamos tratando con un sistema acústico complejo y que cada simulación varía en esos parámetros.

### 8.3.4 Simulaciones con Hidrogel

El sistema demultiplexor ahora se compone de agua, acero e hidrogel, un sistema acústico más complejo que el anterior. Este proceso implica obviamente más tiempo de cómputo en las simulaciones correspondientes de cada estructura fonónica. El tiempo de simulación se alarga a casi 40 min en cada reproducción en COMSOL. El proceso de análisis de los datos obtenidos es el mismo que se llevó a cabo con el sistema con agua. La guía de ondas se constituye por cilindros de acero inoxidable sólidos que conservan el mismo valor de radio, en este sistema el hidrogel se coloca en los primeros cuatro cilindros removidos y se introduce el hidrogel, hasta llegar a los cinco defectos que implica la extracción de 20 cilindros metálicos. Por lo tanto, vamos a tener un máximo de cinco espacios con hidrogel.

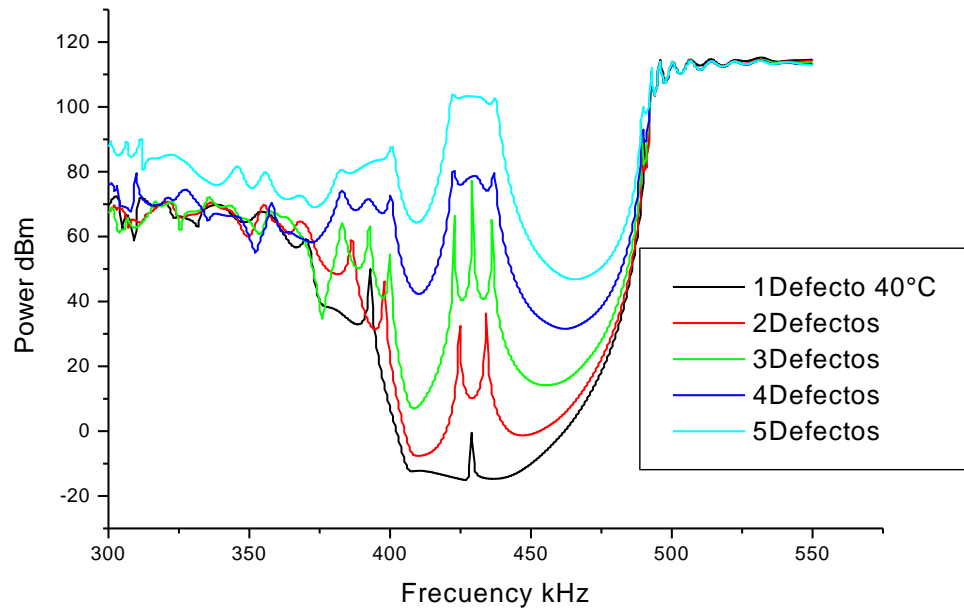


**Gráfica 15.** Espectros representativos de nuestro sistema acústico con hidrogel a 20°C.



**Gráfica 16.** Espectros representativos de nuestro sistema acústico con hidrogel a 30°C, para todos los cinco defectos inducidos en nuestro sistema cuadrático de 20 x 20.

A partir de las observaciones anteriores, estos espectros de frecuencia nos permiten conocer en qué frecuencias se transmite la mayor parte de la energía de los defectos inducidos para controlar y manipular diversas formas de ondas acústicas que pueden propagarse en el interior del cristal fonónico con diferentes medios elásticos. En sistemas más complejos como el que estamos estudiando, la velocidad de propagación de las ondas sonoras, dependen de las características de los diferentes medios en el que se transmite dicha propagación (tres para este caso), a saber: se considera la presión, la temperatura o la humedad. En ese sentido, sabemos que el sonido, es un tipo de ondas mecánicas longitudinales producidas por variaciones de presión en el medio en que se propagan. De los fenómenos físicos involucrados en este sistema, la onda envolvente, es el requisito más significativo debido a que se interpreta como la variación de la intensidad de la onda durante un intervalo de tiempo. Estas condiciones se logran obtener y dependen principalmente de las condiciones elásticas del medio, es decir, la capacidad para poder recuperar su forma inicial. El acero es bastante elástico para la propagación de las ondas dentro de nuestro cristal, así como la temperatura y la densidad. Esto se está viendo reflejado en el corrimiento mostrado en las gráficas. A continuación, mostramos la última gráfica referente a los espectros representativos de nuestro sistema hidrogel a 40°C.



**Gráfica 17.** Espectros representativos de nuestro sistema acústico con hidrogel a 40°C.

A

## 9. Referencias

- [1] A. Khelif, P. A. Deymier, B. Djafari-Rouhani, J. O. Vasseur and Dobrzynski, *Two-dimensional phononic crystal with tunable narrow pass band: Application to a waveguide with selective frequency*, J. Appl. Phys., 94 (2003) 1308.
- [2] D. Torrent, J. Sánchez-Dehesa, *Acoustic metamaterials for new two-dimensional Sonic devices*, New Journal of Physics., 9 (2007) 1-13.
- [3] J. Shin, S. Fan, *Three-Dimensional Metamaterials with an Ultrahigh Effective Refractive Index over a Broad Bandwidth*, Phys. Rev. Lett., 102 (2009) 093903-1-4.
- [4] Y. Ding, Z. Liu, C. Qiu, J. Shi, *Metamaterial with Simultaneously Negative Bulk Modulus and Mass Density*. Phys. Rev. Lett., 99 (2007) 093904.
- [5] E. Walker, D. Reyes, M. Mayorga Rojas, A. Krokhin, Z. Wang, A. Neogi, *Tunable ultrasonic phononic crystal controlled by infrared radiation*, Applied Physics Letters, 105 (2014) 143503.
- [6] G. Zhang, Z. He, J. Qin, J. Hong, *Magnetically tunable bandgaps in phononic crystal nanobeams incorporating microstructure and flexoelectric effect*, Applied Mathematical Modelling, 111 (2022) 554-566.
- [7] J.-F. Robillard, O. Bou Matar, J. O. Vasseur, P. A. Deymier, M. Stippinger, A.-C. Hladky-Hennion, Y. Pennec, B. Djafari-Rouhani, *Tunable magnetoelastic phononic crystals*, Appl. Phys. Lett., 95 (2009) 124104.
- [8] D. Reyes Contreras, E. Walker, Y. Zubov, H. Heo, A. Krokhin, A. Neogi, *All acoustic signal modulation and logic operation via defect induced cavity effect in phononic crystal coupled-resonator acoustic waveguide*, New J. Phys., 21 (2019) 113012.
- [9] Y. Pennec, B. Djafari-Rouhani, J. Vasseur, P. A. Deymier, A. Khelif, *Tunable filtering and demultiplexing in phononic crystals with hollow cylinders*, Phys. Rev. E, 69 (2004) 046608.
- [10] Y. Wang, X. Xu, L. Li, *Advances in Tunable Bandgaps of Piezoelectric Phononic Crystals*, Materials, 16 (2023) 6285.
- [11] N. Mukhin, M. Kutia, A. Aman, U. Steinmann. *Two-Dimensional Phononic Crystal Based Sensor for Characterization of Mixtures and Heterogeneous Wax-Liquids*. Sensorsd 2022, 22(7), 23816.
- [12] Y. Xin, P. Cai, Y. Sun, D. Qian, S. Cheng, Q. Zhao. *Compressive analysis of bandgap of phononic crystal structure and objective optimization based on genetic algorithm*. Physica B: Condensed Matter. Volume 667, 2023, 415157.
- [13] G. Wang, L. Qineng. *Dispersive study on the phononic bandgap and fluid phononic crystal*. S. Synt. Cryst. 38(1): 107-112.
- [14] H. Muhammad, C. W. Lim. *Phononic Metastructures with ultrawide low frequency three-dimensional bandgaps as broadband low frequency filter*. Scientific Reports 11, 7137 (2021).
- [15] Z. Zhan, P. Wei. *Influences of anisotropic on band gaps of 2D phononic crystal*. Acta Mechanica Solida Sinica. Volume 23, 181-183.
- [16] A. Khaligh, A. Bahrami, H. B. Ghavifekr. *Phononic Crystals locally-resonant cavity for detecting vinegar acidity*. Journal of Molecular Liquids. Vol. 343, 116972.
- [17] A. Duclos, D. Lafarge, V. Pagneux. *Transmission of Acoustic waves through 2D phononic crystal: visco thermal and multiple scattering effects*. The European Physical Journal Applied Physics 45 45, 1 (2009).

- [18] X. Zhang, Z. Liu, Y. Liu, F. Wu, F. *Elastic wave band gaps for three-dimensional phononic crystals with two structural units*, Physics Letters A, 313 (2003) 455-460.
- [19] M. Zubtsov, R. Lucklum, M. Ke, A. Oseev, R. Grundmann, B. Henning, U. Hempel. *2D phononic crystal sensor with normal incidence of sound*. Sensors and Actuators A: Physical. Vol. 186, 118-124.
- [20] M. A. Butt, S. N. Khonina, N. L. Kazanskiy, Recent advances in photonic crystal optical devices: A review, Optics & Laser Technology, 142, (2021) 107265
- [21] Kittel C., (1996) "*Introduction Solid State Physics*" Seventh Edition, Jhon Wiley & Sons, Inc., New York, Chichester, Toronto, Singapore. pp. 172-177.
- [22] Y. Pennec, B. Djafari-Rouhani B. *Fundamental Properties of Phononic Crystal*, Phononic Crystals; Springer, New York, NY.
- [23] A. Spadoni, M. Ruzzene, S. Gonella, F. Scarpa, *Phononic properties of hexagonal chiral lattices*, Wave Motion, 46 (2009) 435-450.
- [24] B. Li, W. Yan, Y. Gao, *Tunability of Band Gaps of Programmable Hard-Magnetic Soft Material Phononic Crystals*, Acta Mech. Solida Sin., 35 (2022) 719–732.
- [25] Y. Ding, Z. Liu, C. Qiu, J. Shi, *Metamaterial with Simultaneously Negative Bulk Modulus and Mass Density*, Phys. Rev. Lett., 99 (2007) 093904.
- [26] Z. G. Chen, Y. Wu, *Tunable Topological Phononic Crystals*, Phys. Rev. Applied, 5 (2016) 054021.
- [27] A. Mehaney. *Phononic as a Neutron detector*. Ultrasonics, Vol. 93, 2019, 37-42.
- [28] Y. Jin, T. Yang, M. Yao, Z. Wang, N. B. Dahotre, A. Neogi, *Non-invasive density and porosity fraction mapping of bituminous coal using ultrasound*, Journal of Applied Physics, 134 (2023) 1.
- [29] E. Walker, Y. Jin, D. Reyes-Contreras, A. Neogi, *Sub-wavelength lateral detection of tissue approximating masses using an ultrasonic metamaterial lens*, Nat. Comm., 11 (2020) 5967.
- [30] A. Neogi, E. L. Walker, D. Reyes-Contreras, Y. Jin, *Tunable hybrid phononic crystal lens using thermo-acoustic polymers*, ACS Omega, 4 (2019) 16585–16590.
- [31] J. Hyeong Park, P. Sik Ma, Y. Young Kim, *Design of phononic crystals for self-collimation of elastic waves using topology optimization method*, Structural and Multidisciplinary Optimization, 51 (2015) 1199–1209.
- [32] D. Reyes, D. Martínez, M. Mayorga, H. Heo, E. Walker, A. Neogi, *Optimization of the Spatial Configuration of Local Defects in Phononic Crystals for High Q Cavity*, Front. Mech. Eng., 6 (2020) 592787.
- [33] H. Zhu, J. E.-Y. Lee, *Design of Phononic Crystal Tethers for Frequency-selective Quality Factor Enhancement in AlN Piezoelectric-on-silicon Resonators*, Procedia Engineering, 120 (2015) 516-519.
- [34] J. Liu, H. Guo, T. Wang, *A Review of Acoustic Metamaterials and Phononic Crystals*, Crystals, 10 (2020) 305.
- [35] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, Solid State Physics (Saunders, Philadelphia, Pa., 1976).
- [36] F. Ramírez-Ramírez, E. Flores-Olmedo, G. Báez, E. Sadurní, R. A. Méndez-Sánchez, *Emulating tightly bound electrons in crystalline solids using mechanical waves*, Sci. Rep., 10, (2020) 10229.
- [37] A. Yariv, Y. Xu, R. K. Lee, and A. Scherer, *Coupled-resonator optical waveguide: a proposal and análisis*, Opt. Lett., 24 (1999) 711.
- [38] J. M. Escalante, A. Martínez, V. Laude, *Dispersion relation of coupled resonator acoustic waveguides formed by defect cavities in a phononic crystal*, J. Phys. D: Appl. Phys., 46 (2013) 475301.

- [39] D. Martínez-Esquivel, R. A. Méndez-Sánchez, H. Heo, A. M. Martínez-Argüello, M. Mayorga-Rojas, A. Neogi, D. Reyes-Contreras, *Coupled Resonator Acoustic Waveguides-Based Acoustic Interferometers Designed within 2D Phononic Crystals: Experiment and Theory*, *Adv. Physics Res.*, (2023) 2300093.
- [40] R. A. Méndez-Sánchez, A. E. Terán-Juárez, A. M. Martínez-Argüello, E. Flores-Olmedo, G. Báez, E. Sadurní, and Y. Hernández-Espinosa, *Emulation of  $\pi$ -electron systems with mechanical waves: borazine*, *A. Phys. Pol. A.*, 140 (2021) 532.
- [41] M. Mattarelli, M. Secchi, M. Montagna, *Phononic crystals of spherical particles: a tight binding approach*, *J Chem Phys.*, 139 (2013) 174710.
- [42] Y. F. Wang, T. T. Wang, J. W. Liang, Y. S. Wang, V. Laude, *Channeled spectrum in the transmission of phononic crystal waveguides*, *J. Sound Vib.*, 437 (2018) 410.
- [43] T. T. Wang, Y. F. Wang, Z. C. Deng, V. Laude, Y. S. Wang, *Reconfigurable coupled-resonator acoustoelastic waveguides in fluid-filled phononic metaplates*, *Compos. Struct.*, 303 (2023) 116355.
- [44] H. Ji, F. Yang, A. Qi, X. Wu, B. Lv, J. Ni, *Tunable coupled-resonator acoustic waveguides based on defect resonance body*, *Appl. Phys. A*, 128 (2022) 573.
- [45] A. M. Martínez-Argüello, M. P. Toledano-Marino, A. E. Terán-Juárez, E. Flores-Olmedo, G. Báez, E. Sadurní, R. A. Méndez-Sánchez, *Molecular orbitals of an elastic artificial benzene*, *Phys. Rev. A*, 105, (2022) 022826.
- [46] I. El kadmiri, Y. Ben-Ali, A. Khaled, D. Bria, *Acoustic filtering and guiding by the presence of a defect at the opened resonators level's in one-dimensional comb-like phononic structure*, *Mater. Today: Proc.*, 31 (2020) S33.
- [47] COMSOL (2016) by COMSOL Multiphysics® The platform for Physics Modeling and Simulation <https://www.COMSOL.com/COMSOL-multiphysics>.
- [48] COMSOL Platform Product: COMSOL MULTIPHYSICS; Understand, Predict, and Optimize Physics-Based Designs and Processes with COMSOL Multiphysics® <https://www.COMSOL.com/COMSOL-multiphysics>.
- [49] <https://www.comsol.com/support/learning-center/article/Understanding-and-changing-the-Element-Order-64391>
- [50] <https://www.comsol.com/model/electrical-heating-in-a-busbar-10206>
- [51] E. Ozbay, M. Bayindir, I. Bulu, and E. Cubukcu, *Investigation of localized coupled-cavity modes in two-dimensional photonic bandgap structures*, *IEEE J. Quantum Electron.*, 38 (2002) 837.
- [52] N. Mukhin, M. Kutia, A. Oseev, U. Steinmann, S. Palis, and R. Lucklum, *Narrow band solid-liquid composite arrangements: Alternative solutions for phononic crystal-based liquid sensors*, *Sensors*, 19 (2019) 3743.
- [53] E. Hecht, (1998), *Óptica*, 3<sup>rd</sup> Ed., Adisson Wesley Iberoamericana, Madrid.

