



Universidade Federal do Rio Grande do Norte

Centro de Ciências Exatas e da Terra

Departamento de Física Teórica e Experimental

Programa de Pós-Graduação em Física

**TRANSMISSÃO DE ONDAS ELÁSTICAS EM ESTRUTURAS
FONÔNICAS QUASIPERIÓDICAS UNIDIMENSIONAIS**

Dissertação de Mestrado

por

Emanuel Caio Moreira Tinoco

Orientador: Prof. Dr. Claudionor Gomes Bezerra

Natal, Março / 2025

Emanuel Caio Moreira Tinoco

**TRANSMISSÃO DE ONDAS ELÁSTICAS EM ESTRUTURAS
FONÔNICAS QUASIPERIÓDICAS UNIDIMENSIONAIS**

Dissertação de Mestrado apresentada ao
Programa de Pós-Graduação em Física,
como requisito parcial para a obtenção do
Título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Claudionor Gomes Bezerra

Natal

2024

Universidade Federal do Rio Grande do Norte - UFRN
Sistema de Bibliotecas - SISBI
Catalogação de Publicação na Fonte. UFRN - Biblioteca Central Zila Mamede

Tinoco, Emanuel Caio Moreira.
Transmissão de ondas elásticas em estruturas fonônicas
quasiperiódicas unidimensionais / Emanuel Caio Moreira Tinoco. -
2024.
77f. : il.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal do Rio Grande
do Norte, Centro de Ciências Exatas e da Terra, Programa de Pós-
Graduação em Física, Natal, 2025.
Orientação: Dr. Claudionor Gomes Bezerra.

1. "Band Gap" - Dissertação. 2. Matriz de transferência -
Dissertação. 3. Quasicristais fonônicos - Dissertação. I.
Bezerra, Claudionor Gomes. II. Título.

RN/UF/BCZM CDU 53

Agradecimentos

Ao concluir esta dissertação, gostaria de expressar minha gratidão a todas as pessoas que, de alguma forma, contribuíram para a realização deste trabalho.

Primeiramente, agradeço a Deus pela força, saúde e perseverança que me permitiram chegar até aqui.

Agradeço ao meu orientador, Prof. Claudionor Gomes Bezerra, pelo apoio, paciência e valiosas orientações ao longo de todo o processo. Suas sugestões e críticas foram fundamentais para a construção deste trabalho.

Aos meus pais, por todo amor, incentivo e compreensão ao longo dos anos de estudo. Sem o apoio de vocês, nada disso seria possível.

Aos meus colegas de sala, Paulo Douglas, Marcos Davi Falcão e Diogo Duarte, pelas discussões enriquecedoras, apoio mútuo e pelos momentos de descontração que tornaram a jornada mais leve.

Aos meus amigos, Joab Varela, Lorena Beatriz, e aos amigos do Grupo Liões, em especial Tiago Câmara, Anibal Barbalho e Jefferson Freire, por estarem sempre ao meu lado, compartilhando alegrias e dificuldades. Sua amizade foi essencial para manter-me motivado.

Ao Programa de Pós-Graduação em Física (PPGF) e ao Departamento de Física Teórica e Experimental (DFTE), pela estrutura e suporte oferecidos ao longo do curso. A todos os professores que contribuíram para minha formação.

Um agradecimento especial ao Prof. João Medeiros de Araujo por me acolher no laboratório do CISCAPET, a todos os membros do projeto CISCAPET pelo apoio e colaboração durante minha pesquisa.

Finalmente, um agradecimento especial à CAPES pelo suporte financeiro indispensável para a realização desta pesquisa.

RESUMO

Neste estudo, empregamos um tratamento da matriz de transferência para investigar as propriedades de transmissão de cristais fonônicos quasiperiódicos unidimensionais baseados nas sequências de Fibonacci, Thue-Morse, Período Duplo e Kolakoski. Consideramos três modificações estruturais (convencional, simétrico e antissimétrico) em materiais compostos de chumbo-epóxi embutidos por duas camadas semi-infinitas de alumínio. Nossos experimentos numéricos concentram-se na propagação longitudinal e transversal de ondas em um regime de frequência de ultrassom para diferentes ângulos de incidência. O número de picos de transmissão perfeitos e a distribuição do intervalo de banda variam sensivelmente para os arranjos modificados. Os resultados obtidos ampliaram nosso entendimento das propriedades desses cristais, além de revelarem aplicações tecnológicas em dispositivos acústicos.

Palavras-chaves: “Band Gap”, Matriz de transferência, Quasicristais fonônicos, Ondas mecânicas.

ABSTRACT

In this study, we employed a transfer matrix approach to investigate the transmission properties of quasiperiodic one-dimensional phononic crystals arranged according to Fibonacci, Thue-Morse, Double Period, and Kolakoski sequences. We considered three structural modifications (conventional, symmetric, and antisymmetric) in lead-epoxy composite materials embedded between two semi-infinite aluminum layers. Our numerical experiments focus on the longitudinal and transverse wave propagation in an ultrasonic frequency regime for different incident angles. The number of perfect transmission peaks and the distribution of the band gap vary significantly for the modified arrangements. The results obtained have expanded our understanding of the properties of these crystals and reveal technological applications in acoustic devices.

Keywords: Band Gap, Transfer matrix, Phononic quasicrystals, Mechanical waves.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	Ilustração da propagação de ondas planas elásticas transversais e longitudinais em um sólido cristalino bidimensional. As ondas se propagam horizontalmente com vetores de onda \mathbf{k} . (a) Distribuição dos átomos (pontos vermelhos) em um material cristalino homogêneo em um estado de repouso. (b) Deslocamento dos átomos devido à propagação de ondas transversais. (c) Deslocamento dos átomos devido à propagação de ondas longitudinais.	15
Figura 2	Sólido elástico de volume V e superfície S sujeito a trações aplicadas.	16
Figura 3	Volume espacialmente fixo mostrando a taxa de fluxo de massa para dentro e fora do volume resultante do escoamento do fluido na direção x	24
Figura 4	Volume espacialmente fixo mostrando a taxa de variação da pressão na direção x	25
Figura 5	Escultura de E. Sempere, exposta ao ar livre em Madrid. [12]	29
Figura 6	Relação de dispersão em uma dimensão para ondas elásticas se propagando dentro de um cristal fonônico composto por camadas intercaladas de chumbo e epóxi. A figura à esquerda mostra a relação de dispersão para ondas elásticas transversais, enquanto à direita temos a mesma relação para ondas elásticas longitudinais. As áreas cinzas indicam os intervalos de frequência ω , representando faixas de frequência nas quais tanto as ondas elásticas transversais quanto as longitudinais são proibidas de se propagar dentro do cristal.	31
Figura 7	Modelo em duas dimensões para difração de Bragg para diferentes caminhos.	32
Figura 8	Dois osciladores acoplados.	33
Figura 9	À esquerda, em azul, temos a representação esquemática bidimensional do arranjo dos átomos em estruturas cristalinas, enquanto em vermelho temos a representação organizacional dos átomos em estruturas amorfas.	36

Figura 10	Padrões de difração de elétrons do icosaedro correspondente a $Al_{86}Mn_{14}$ ao longo do eixo de simetria da décima ordem descoberto por Shechtman [29].	38
Figura 11	(a) Padrão de difração de elétrons correspondente à liga quasicristalina $Al_{86}Mn_{14}$ descoberta por Shechtman. [29]. (b) Padrão de difração calculado teoricamente em um plano normal a um eixo de simetria quántupla para um quasicristal ideal com estrutura icosaédrica. [30]	39
Figura 12	Ilustração esquemática da sequência de Fibonacci a partir da geração S_2 .	41
Figura 13	Ilustração esquemática da sequência de Thue-Morse a partir da geração S_1 .	43
Figura 14	Ilustração esquemática da sequência de Período Duplo a partir da geração S_1 .	44
Figura 15	Ilustração esquemática da sequência clássica de Kolakoski para as quatro primeiras gerações.	46
Figura 16	Experimento típico de espalhamento. As ondas incidentes Ψ_E^+ e Ψ_D^- são espalhadas pela amostras. As ondas de Ψ_E^- e Ψ_D^+ consistem em ondas refletidas e transmitidas através da amostra.	48
Figura 17	Esquema do cálculo de transmissão através de duas barreiras.	50
Figura 18	Esquema ilustrativo para o sistema de transmissão consistindo em duas amostras combinadas em uma.	51
Figura 19	Representação de um quasicristal unidimensional. Cada cor representa um material diferente.	52
Figura 20	Esquema de nossas estruturas PnC compostas de chumbo (material A) e epóxi (material B) onde a espessura correspondente é d_B e d_A . A propagação da onda também é ilustrada onde uma onda (seta de cor azul) com ângulo de incidência θ é espalhada pelo PnC, gerando ondas refletidas (seta de cor vermelha) e transmitidas (seta de cor verde).	56

Figura 21	Um exemplo pedagógico para o caso $N = 3$ das três operações usadas para criar nossos PnCs baseados em Kolakoski. Painel (a) mostra a operação de espelho onde a sequência original é anexada com sua parte refletida. A conjugação no painel (b) primeiro aplica uma substituição espelhada e, em seguida, troca A por B. Finalmente, o painel (c) mostra a operação de multiplicação duplicando o sequência. Todos os arranjos possuem o mesmo número de elementos para um determinado número de geração N .	57
Figura 22	Espectros de transmissão em função da frequência reduzida f/f_0 das sequências Fibonacci (FB) duplicadas $\mathcal{D}(FB_N)$ (painel esquerdo), espelhadas $\mathcal{M}(FB_N)$ (painel central) e conjugadas $\mathcal{C}(FB_N)$ (painel direito), com diferentes números de gerações N . De cima para baixo, N aumenta.	60
Figura 23	Espectros de transmissão em função da frequência reduzida f/f_0 das sequências Thue-Morse (TM) duplicadas $\mathcal{D}(TM_N)$ (painel esquerdo), espelhadas $\mathcal{M}(TM_N)$ (painel central) e conjugadas $\mathcal{C}(TM_N)$ (painel direito), com diferentes números de gerações N . De cima para baixo, N aumenta.	61
Figura 24	Espectros de transmissão em função da frequência reduzida f/f_0 das sequências Período Duplo (DP) duplicadas $\mathcal{D}(DP_N)$ (painel esquerdo), espelhadas $\mathcal{M}(DP_N)$ (painel central) e conjugadas $\mathcal{C}(DP_N)$ (painel direito), com diferentes números de gerações N . De cima para baixo, N aumenta.	62
Figura 25	Espectros de transmissão em função da frequência reduzida f/f_0 das sequências Kalakoski (KK) duplicadas $\mathcal{D}(KK_N)$ (painel esquerdo), espelhadas $\mathcal{M}(KK_N)$ (painel central) e conjugadas $\mathcal{C}(KK_N)$ (painel direito), com diferentes números de gerações N . De cima para baixo, N aumenta.	63
Figura 26	Efeito do ângulo de incidência θ nos espectros de transmissão em função da frequência reduzida para a sequência de Fibonacci.	66
Figura 27	Efeito do ângulo de incidência θ nos espectros de transmissão em função da frequência reduzida para a sequência de Thue-Morse.	67

Figura 28	Efeito do ângulo de incidência θ nos espectros de transmissão em função da frequência reduzida para a sequência de Período Duplo.	68
Figura 29	Efeito do ângulo de incidência θ nos espectros de transmissão em função da frequência reduzida para a sequência de Kalakoski.....	69

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	Tabela de rotações.	38
Tabela 2	Constantes dos materiais considerados neste trabalho.....	56

LISTA DE SIGLAS

CCET	Centro de Ciências Exatas e da Terra
DFTE	Departamento de Física Teórica e Experimental
FIB	Fibonacci
KK	Kolakoski
PD	Período Duplo
PC	Photonic Crystal
PnC	Phononic Crystal
TM	Thue-Morse
TMM	Transfer Matrix Method
UFRN	Universidade Federal do Rio Grande do Norte

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
1.1	Ondas elásticas em materiais homogêneos	14
1.2	Ondas acústicas em materiais fluidos homogêneos.....	23
1.2.1	Conservação da massa	24
1.2.2	Equação de movimento	25
2	CRISTAIS FONÔNICOS	28
2.1	Introdução	28
2.2	Formação de Band Gap Fonônico.....	30
2.2.1	Gaps de Bragg	32
2.2.2	Gaps de Ressonância	33
3	SEQUÊNCIAS QUASIPERIÓDICAS	36
3.1	Introdução	36
3.2	Sequências substitucionais.....	39
3.3	A sequência de Fibonacci.....	40
3.4	A sequência de Thue-Morse	41
3.5	A sequência de Período Duplo	43
3.6	A sequência de Kolakoski.....	45
4	MÉTODO DA MATRIZ DE TRANSFERÊNCIA	47
4.0.1	Definição da Matriz de Transferência.....	47
4.0.2	Amplitudes de transmissão e reflexão	49
4.0.3	Multiplicação da matriz de transferência.....	50
4.0.4	Matriz de Transferência para PnC.....	52
5	EXPERIMENTOS E ANÁLISE DE RESULTADOS	56
6	CONCLUSÃO E TRABALHOS FUTUROS	70

1 INTRODUÇÃO

O primeiro capítulo desta dissertação introduz os princípios fundamentais da acústica, fornecendo a estrutura matemática necessária para a análise de cristais fonônicos e suas propriedades.

Diferentemente dos cristais fotônicos (PCs, do inglês *photonic crystals*), que são construídos considerando suas propriedades ópticas, os cristais fonônicos (PnCs, do inglês *phononic crystals*) são confeccionados com base nas propriedades mecânicas do material, visando à manipulação de ondas acústicas. Embora seja possível estabelecer semelhanças entre um cristal fotônico e um fonônico, eles se diferenciam no que tange à propagação da onda, uma vez que as ondas mecânicas se propagam de maneira distinta em materiais sólidos e fluidos. Neste capítulo, serão apresentadas noções básicas sobre os conceitos das ondas mecânicas.

1.1 Ondas elásticas em materiais homogêneos

Grande parte dos sólidos que conhecemos são cristalinos, ou seja, são formados por átomos igualmente espaçados em um arranjo periódico. Apesar de, em média, esses átomos estarem em repouso, na realidade, eles executam pequenas vibrações aleatórias em torno das posições de equilíbrio.

Quando uma onda plana elástica, com vetor de onda \mathbf{k} , se propaga na rede, acaba excitando esses átomos, gerando perturbações na rede e resultando em um movimento coletivo dos mesmos. O deslocamento sofrido pelo átomo em torno do seu ponto de equilíbrio, causado pela onda elástica, é representado pelo vetor $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$.

Dependendo de como os átomos se movem em relação à direção da propagação da onda, podemos classificar as ondas em transversais planas, quando o vetor de deslocamento $\mathbf{u}_T(\mathbf{r}, t)$ é perpendicular à direção da propagação da onda, ou em longitudinais planas, quando os movimentos dos átomos ocorrem na mesma direção da propagação da onda e o vetor de deslocamento $\mathbf{u}_L(\mathbf{r}, t)$ é paralelo à direção da propagação da onda. Os vetores deslocamento podem ser escritos como:

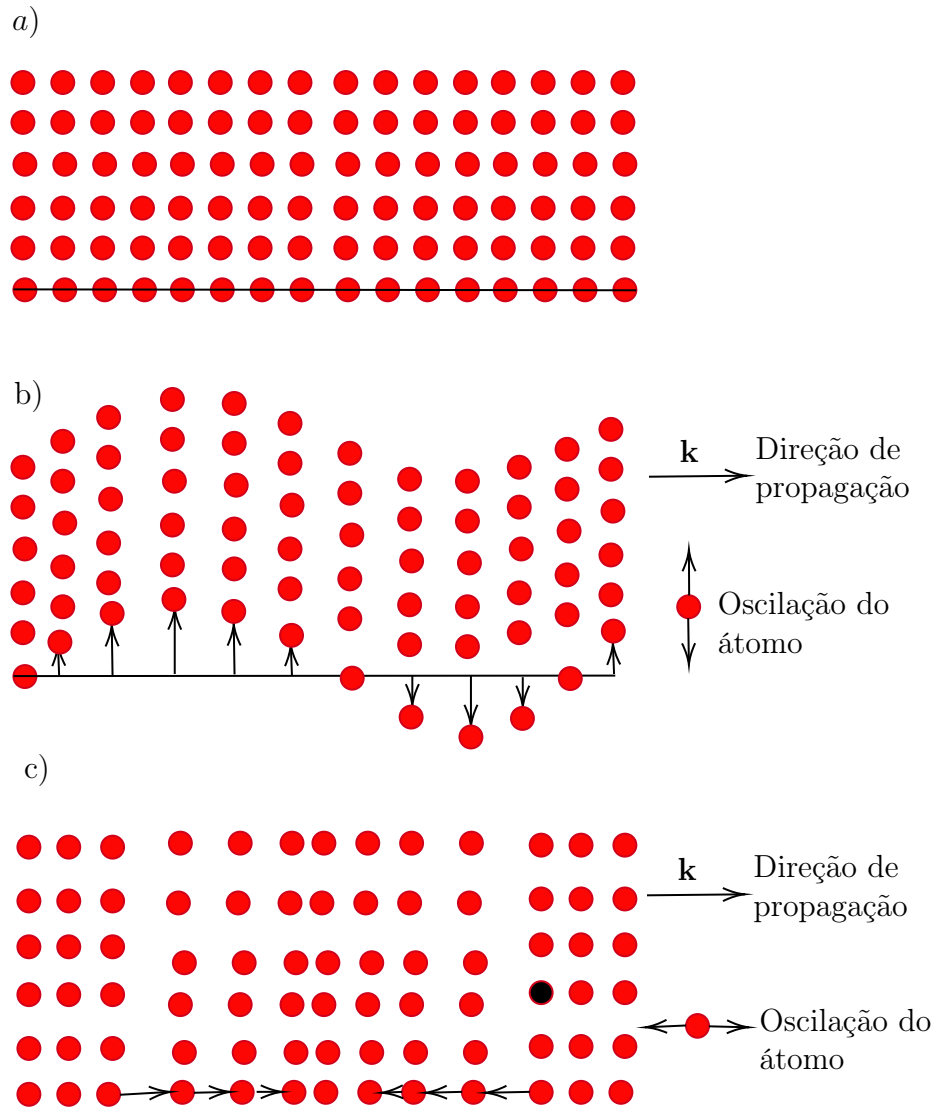


Figura 1: Ilustração da propagação de ondas planas elásticas transversais e longitudinais em um sólido cristalino bidimensional. As ondas se propagam horizontalmente com vetores de onda \mathbf{k} . (a) Distribuição dos átomos (pontos vermelhos) em um material cristalino homogêneo em um estado de repouso. (b) Deslocamento dos átomos devido à propagação de ondas transversais. (c) Deslocamento dos átomos devido à propagação de ondas longitudinais.

$$\mathbf{u}_T(\mathbf{r}, t) = \text{Re} [\mathbf{u}_{T0} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}] , \quad (1.1)$$

e

$$\mathbf{u}_L(\mathbf{r}, t) = \text{Re} [\mathbf{u}_{L0} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}] , \quad (1.2)$$

aonde ‘Re’ é a abreviação para ‘parte real de’. A dinâmica desses movimentos em um material homogêneo é matematicamente descrita pela equação da onda elástica. Para isso, consideremos inicialmente um volume superficial sujeito à uma força que gera um estresse superficial conhecido como tração. Matematicamente, essa força é representada por,

$$\mathbf{T} = \hat{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \Delta S . \quad (1.3)$$

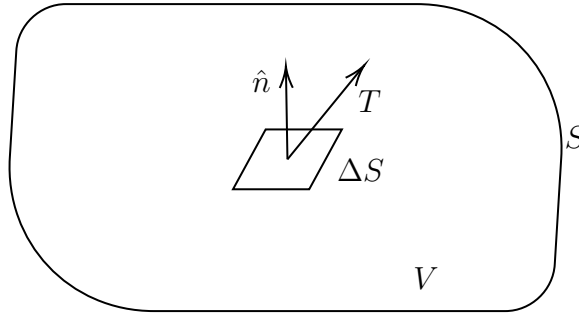


Figura 2: Sólido elástico de volume V e superfície S sujeito a trações aplicadas.

Portanto, se conhecemos a tração na superfície S de um volume V, a força total atuando no corpo é dada por [1],

$$\oiint_S \hat{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} dS , \quad (1.4)$$

onde \hat{n} é um vetor normal à superfície e $\boldsymbol{\sigma}$ é o tensor de tensões. A força resultante do estresse no sólido desloca suas partículas de suas posições de equilíbrio. A elasticidade do sólido fornece a força restauradora para as partículas deslocadas. Portanto, ao estudar o equilíbrio dessas forças, chegamos à equação da onda elástica,

$$\oiint_S \hat{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} dS + \iiint_V \mathbf{f} dV = \iiint_V \rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} dV . \quad (1.5)$$

Onde ρ é a densidade de massa e \mathbf{f} é uma densidade de força associada às forças de ação à distância. Ao aplicar o Teorema de Gauss na primeira parcela, conforme expresso na Eq. (1.5), é possível transformar a integral de superfície em uma integral de volume,

$$\oiint_S \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}} dS = \int_V \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} dV . \quad (1.6)$$

Com isso,

$$\int_V [\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f}] dV = \int_V \rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} dV , \quad (1.7)$$

onde a expressão acima ilustra que o lado esquerdo corresponde à divergência do tensor de tensão somada à densidade de força que representa todas as forças de campo presentes no sistema. Por sua vez, o lado direito denota a força total aplicada no corpo, relacionando essas quantidades à aceleração no campo de deslocamento \mathbf{u} , indicada por $\partial^2\mathbf{u}/\partial t^2$.

Reorganizando os termos, obtemos,

$$\int_V \left[\nabla \cdot \sigma + \mathbf{f} - \rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} \right] dV = 0 . \quad (1.8)$$

Na ausência de forças de ação à distância, temos a equação homogênea do movimento,

$$\nabla \cdot \sigma = \rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} . \quad (1.9)$$

Podemos relacionar o estresse e a deformação, que representam as propriedades do meio (força, rigidez), uma vez que são uma relação constitutiva. Com base na lei de Hooke, a relação entre o estresse e a deformação é dada por [1],

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} e_{kl} , \quad (1.10)$$

onde C_{ijkl} é o módulo de elasticidade, que descreve as propriedades do material. Aqui, consideramos que o nosso material é isotrópico, com isso a matriz de elasticidade é descrita como [1],

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{11} - 2C_{44} & C_{11} - 2C_{44} & 0 & 0 & 0 \\ C_{11} - 2C_{44} & C_{11} & C_{11} - 2C_{44} & 0 & 0 & 0 \\ C_{11} - 2C_{44} & C_{11} - 2C_{44} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} . \quad (1.11)$$

Conseqüentemente, a relação constitutiva é caracterizada por duas constantes λ e μ , que são conhecidas como constantes de Lamé, em que μ é chamado de módulo de cisalhamento,

enquanto λ está relacionado com o módulo de compressibilidade.

$$\begin{cases} \lambda = C_{11} - 2C_{44} \\ \mu = C_{44} \end{cases} . \quad (1.12)$$

Os coeficientes de Lamé, por sua vez, estão relacionados às propriedades mecânicas mais familiares, como o módulo de Young E e a razão de Poisson \mathcal{V} , por meio das relações,

$$\lambda = \frac{E\mathcal{V}}{(1 + \mathcal{V})(1 - 2\mathcal{V})} , \quad (1.13)$$

e

$$\mu = \frac{E}{2(1 + \mathcal{V})} . \quad (1.14)$$

Dessa forma, o módulo de elasticidade escrito em termos das constantes de Lamé tornam-se,

$$C_{ijkl} = \lambda\delta_{ij}\delta_{kl} + \mu(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) . \quad (1.15)$$

Usando a Eq. (1.15) em Eq. (1.10) chegamos à relação do estresse em termos de deformação,

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}e_{kl} , \quad (1.16)$$

$$\sigma_{ij} = [\lambda\delta_{ij}\delta_{kl} + \mu(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})] e_{kl} , \quad (1.17)$$

$$\sigma_{ij} = \lambda\delta_{ij}(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}) + \mu\delta_{ik}\delta_{jl}e_{kl} + \mu\delta_{il}\delta_{jk}e_{kl} , \quad (1.18)$$

onde $(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz})$ [2] é a dilatação volumétrica. Podemos simplificar essa expressão utilizando θ para representar a dilatação volumétrica. Assim, temos que,

$$\sigma_{ij} = \lambda\theta\delta_{ij} + 2\mu e_{ij} . \quad (1.19)$$

Na equação acima, σ_{ij} denota os componentes do tensor de tensão, e_{ij} representa as componentes do tensor de deformação. A substituição na equação do movimento resulta

em,

$$[\nabla \cdot \sigma]_i = \partial_j \sigma_{ij} = \partial_j [\lambda \theta \delta_{ij} + 2\mu e_{ij}], \quad (1.20)$$

$$= \partial_j [\lambda \theta \delta_{ij}] + \partial_j [2\mu e_{ij}], \quad (1.21)$$

$$= \partial_i [\lambda \theta] + 2\mu \partial_j e_{ij} + 2e_{ij} \partial_j \mu. \quad (1.22)$$

Utilizando a regra do produto [2],

$$e_{ij} = \frac{1}{2} (\partial_j u_i + \partial_i u_j), \quad (1.23)$$

e combinando x com y , podemos reescrever z como,

$$[\nabla \cdot \sigma]_i = \partial_i [\lambda \theta] + \mu \partial_j^2 \mu_i + \mu \partial_j \partial_i u_j + 2e_{ij} \partial_j \mu. \quad (1.24)$$

Os termos que aparecem na Eq. (1.24) podem ser reorganizados da seguinte forma,

- Para o primeiro termo,

$$\partial_i [\lambda \theta] = [\nabla(\lambda \theta)]_i. \quad (1.25)$$

- Para o segundo termo,

$$\frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x_j \partial x_j} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \\ \frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} \\ \frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \end{bmatrix} = \nabla^2 \mathbf{u}. \quad (1.26)$$

- O terceiro termo, assumindo que \mathbf{u} tem derivadas espaciais de segunda ordem contínuas,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right) = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \\ \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \\ \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \end{bmatrix}, \\ \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} (\nabla \cdot \mathbf{u}) &= \left[\frac{\partial}{\partial x_i} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \right] = \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) = \nabla \theta. \end{aligned} \quad (1.27)$$

- Para o desenvolvimento da última parcela de 1.24, iremos utilizar novamente a

relação 1.23,

$$e_{ij} \frac{\partial \mu}{\partial x_j} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \mu}{\partial x_j} . \quad (1.28)$$

Podemos reorganizar isso da seguinte forma,

$$e_{ij} \frac{\partial \mu}{\partial x_j} = \frac{1}{2} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial \mu}{\partial x_j} + \frac{1}{2} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \frac{\partial \mu}{\partial x_j} . \quad (1.29)$$

Agora, considerando o vetor de deformação $e_i = \partial u_i / \partial x_i$,

$$e_{ij} \frac{\partial \mu}{\partial x_j} = \frac{1}{2} e_i \frac{\partial \mu}{\partial x_i} + \frac{1}{2} e_j \frac{\partial \mu}{\partial x_j} . \quad (1.30)$$

Assim, podemos ver que,

$$e_{ij} \frac{\partial u}{\partial x_j} = \frac{1}{2} e_i \frac{\partial \mu}{\partial x_i} + \frac{1}{2} e_j \frac{\partial \mu}{\partial x_j} , \quad (1.31)$$

$$\frac{1}{2} (\mathbf{e} \cdot \nabla \mu + \mathbf{e} \cdot \nabla \mu) = \mathbf{e} \cdot \nabla \mu . \quad (1.32)$$

Combinando as expressões obtidas em Eq. (1.24), Eq. (1.25), Eq. (1.26), Eq. (1.27) e Eq. (1.32), obtemos finalmente a equação da onda elástica,

$$\nabla(\lambda\theta) + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mu \nabla \theta + 2\mathbf{e} \cdot \nabla \mu - \rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t} = 0 . \quad (1.33)$$

Precisamos fazer algumas considerações acerca da Eq. (1.33). Em frequências de ondas muito altas em comparação com o comprimento de escala das variações em μ , o gradiente $\nabla \mu$ tende a zero. Dessa forma, a Eq. (1.33) simplifica-se para,

$$\nabla(\lambda\theta) + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mu \nabla \theta - \rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t} = 0 , \quad (1.34)$$

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t} = \nabla(\lambda\theta) + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mu \nabla \theta , \quad (1.35)$$

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t} = (\lambda + \mu) \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) + \mu \nabla^2 \mathbf{u} . \quad (1.36)$$

Aqui $\nabla^2 \mathbf{u}$ é o vetor $(\nabla^2 u_1, \nabla^2 u_2, \nabla^2 u_3)$ em coordenadas cartesianas,

$$\nabla^2 \mathbf{u} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \nabla \times \nabla \times \mathbf{u} . \quad (1.37)$$

Através da Eq. (1.37) e Eq. (1.36), estabelecemos a forma simplificada da equação de onda elástica para meios homogêneos,

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = (\lambda + 2\mu) \nabla \nabla \cdot \mathbf{u} - \mu \nabla \times \nabla \times \mathbf{u} . \quad (1.38)$$

Usando a Eq. (1.38), é possível demonstrar que meios elásticos suportam tanto ondas de compressão (P) quanto ondas de cisalhamento (S) [3]. Em vez de resolver a equação de onda Eq. (1.38), podemos descrever o campo de deslocamento \mathbf{u} em termos de duas outras funções via o Teorema de Helmholtz [4],

$$\mathbf{u} = \nabla \Phi + \nabla \times \boldsymbol{\Psi} , \quad (1.39)$$

onde Φ é um potencial escalar, chamado de potencial de compressão, enquanto $\boldsymbol{\Psi}$ é um potencial vetorial conhecido como potencial de cisalhamento. Esses potenciais apresentam as seguintes identidades vetoriais,

$$\nabla \times (\nabla \Phi) = 0 , \quad (1.40)$$

e

$$\nabla \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\Psi}) = 0 . \quad (1.41)$$

Diante das identidades 1.40, 1.41 e do Teorema de Helmholtz, chegamos em,

$$\rho \left[\nabla \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} + \nabla \times \frac{\partial^2 \boldsymbol{\Psi}}{\partial t^2} \right] = (\lambda + 2\mu) \nabla(\nabla^2 \Phi) - \mu \nabla \times \nabla \times (\nabla \times \boldsymbol{\Psi}) . \quad (1.42)$$

Agora, tentamos igualar todos os termos de gradiente e também, separadamente, os termos de rotação desta equação,

$$\nabla \left[\rho \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} - (\lambda + 2\mu) \nabla^2 \Phi \right] = -\nabla \times \left[\rho \frac{\partial^2 \boldsymbol{\Psi}}{\partial t^2} + \mu \nabla \times \nabla \times \boldsymbol{\Psi} \right] . \quad (1.43)$$

Uma solução para a equação acima pode ser obtida ao definir ambos os termos entre colchetes iguais a zero. Isso resulta em duas equações de onda, uma para cada potencial,

$$\nabla \left[\rho \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} - (\lambda + 2\mu) \nabla^2 \Phi \right] = 0 , \quad (1.44)$$

$$\nabla \times \left[\rho \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} + \mu \nabla \times \nabla \times \Psi \right] = 0 . \quad (1.45)$$

Para o potencial escalar,

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} = \frac{(\lambda + 2\mu)}{\rho} \nabla^2 \Phi . \quad (1.46)$$

Para o potencial vetorial, precisamos da seguinte identidade,

$$\nabla \times \nabla \times (\nabla \times \Psi) = -\nabla^2 (\nabla \times \Psi) + \nabla (\nabla \cdot (\nabla \times \Psi)) = -\nabla^2 (\nabla \times \Psi) . \quad (1.47)$$

Logo,

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \Psi . \quad (1.48)$$

É perceptível que ambas as equações, Eq. (1.46) e Eq. (1.48), possuem a forma de uma equação de onda, isto é, podemos escrevê-las como,

$$\nabla^2 \mathbf{u}_L = \frac{1}{c_L^2} \frac{\partial^2 \mathbf{u}_L}{\partial t^2} , \quad (1.49)$$

e

$$\nabla^2 \mathbf{u}_T = \frac{1}{c_T^2} \frac{\partial^2 \mathbf{u}_T}{\partial t^2} . \quad (1.50)$$

No qual, as velocidades c_T e c_L são expressas por meio das expressões:

$$c_L = \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{\rho}} , \quad (1.51)$$

e

$$c_T = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}} , \quad (1.52)$$

onde ρ é a densidade, e λ e μ são os coeficientes de Lamé, que já foram definidos anteriormente e descrevem as propriedades mecânicas do material sólido homogêneo. Perturbações na parte compressional do vetor de deslocamento se propagam como ondas compressivas com a velocidade c_L através do meio, enquanto as perturbações de natureza de cisalhamento se propagam como ondas de cisalhamento com velocidades c_T . Estes são os dois tipos básicos de ondas que podem se propagar em um meio sólido. As ondas compressivas são chamadas de ondas longitudinais (onda P), possuindo polarização longitudinal, enquanto as ondas de cisalhamento são chamadas de ondas transversais (onda S) e possuem uma polarização transversal. Em um meio homogêneo, onde a onda se propaga com velocidade uniforme, ondas compressivas e ondas de cisalhamento se propagam de forma desacoplada, ou seja, de maneira independente uma da outra.

Em resumo, mostramos como as ondas elásticas planas se propagam em materiais sólidos, seu comportamento transversal ou longitudinal, além de mostrar que elas se propagam independentemente uma da outra e a diferentes velocidades, as quais são determinadas pelas propriedades mecânicas do sólido homogêneo através do qual as ondas se propagam.

1.2 Ondas acústicas em materiais fluidos homogêneos

Consideramos agora um meio de propagação diferente, um material homogêneo fluido. É de extrema importância diferenciar o meio no qual a onda se propaga, pois a análise real varia para cada meio. Por exemplo, os meios fluidos não oferecem suporte para ondas transversais, já que as deformações de cisalhamento não estão presentes nesses materiais. Portanto, nos materiais fluidos, apenas a propagação de ondas elásticas longitudinais é permitida, denominadas de ondas acústicas, que podem ser classificadas como pequenas variações de pressão no fluido ideal compressível [5].

Comumente, descrevemos as ondas acústicas em materiais fluidos homogêneos por meio do campo de pressão $p = p(\mathbf{r}, t)$. A equação que governa toda a dinâmica dessas ondas pode ser obtida a partir de dois princípios fundamentais: a conservação de massa e conservação de momento.

1.2.1 Conservação da massa

Para entendermos a equação da conservação da massa, consideremos uma caixa retangular de dimensões $dV = dxdydz$, na qual elementos fluidos se movem para o interior da caixa. Como na caixa não existem fontes ou sumidouros, então a taxa de massa de fluido que entra deve ser a mesma que sai. Com isso, o fluxo resultante na direção x é dado por,

$$\left[\rho v_x - \left(\rho v_x + \frac{\partial \rho v_x}{\partial x} dx \right) \right] dydz = -\frac{\partial \rho v_x}{\partial x} dV. \quad (1.53)$$

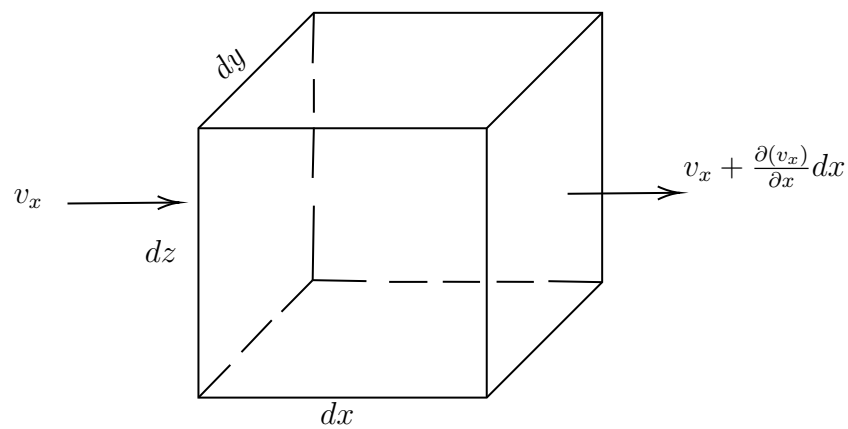


Figura 3: Volume espacialmente fixo mostrando a taxa de fluxo de massa para dentro e fora do volume resultante do escoamento do fluido na direção x .

Essa equação expressa a ideia da variação do fluxo de massa. No primeiro termo, temos a taxa de massa por unidade de área que entra na caixa. Os termos entre parênteses indicam a variação do fluxo que atravessa a caixa. A diferença entre essas duas grandezas nos fornece o fluxo total na região descrita. Podemos estender essa ideia para os demais eixos:

$$-\left(\frac{\partial \rho v_x}{\partial v_x} + \frac{\partial \rho v_y}{\partial y} + \frac{\partial \rho v_z}{\partial z}\right) dV = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) dV . \quad (1.54)$$

Baseado no princípio fundamental de que a variação temporal da massa deve ser congruente à taxa do fluxo que se dissipa da caixa, isso decorre do princípio já citado que é a ausência de fontes e sumidouros. Com isso chegamos à equação da continuidade:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 . \quad (1.55)$$

1.2.2 Equação de movimento

Vamos considerar agora o mesmo volume V sujeito a uma pressão hidrostática $p(x, t)$. Nosso objetivo é calcular a força resultante experimentada por esse volume. A força pode ser expressa de maneira simples como o produto da pressão pela área.

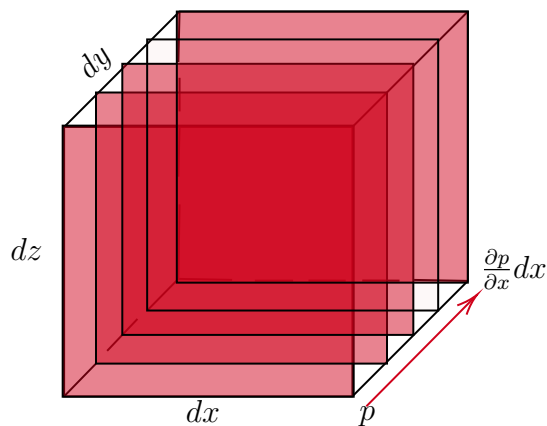


Figura 4: Volume espacialmente fixo mostrando a taxa de variação da pressão na direção x .

Vamos analisar a variação de pressão ao longo do eixo y deste volume, considerando um gradiente de pressão,

$$df_y = \left[p - \left(p + \frac{\partial p}{\partial y} dy \right) \right] dz dx = -\frac{\partial p}{\partial y} dV . \quad (1.56)$$

Para os demais eixos, o raciocínio é análogo; com isso, chegamos em,

$$d\mathbf{f} = -\nabla p dV . \quad (1.57)$$

Quando o elemento de fluido com velocidade $\mathbf{v}(x, y, z, t)$ na posição (x, y, z) e tempo t se move para uma nova localização $(x + dx, y + dy, z + dz)$ em um tempo posterior $t + dt$, sua nova velocidade é expressa pelos termos principais de sua expansão de Taylor.

$$\mathbf{v}(x + v_x dt, y + v_y dt, z + v_z dt, t + dt) \approx \quad (1.58)$$

$$\mathbf{v}(x, y, z, t) + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x} v_x dt + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial y} v_y dt + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial z} v_z dt + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} dt .$$

Uma vez que a aceleração é a derivada temporal da velocidade, a aceleração pode ser descrita da seguinte forma,

$$\mathbf{a} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + v_x \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x} + v_y \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial y} + v_z \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial z} . \quad (1.59)$$

Se definirmos o operador vetorial $(\mathbf{v} \cdot \nabla)$ como,

$$(\mathbf{v} \cdot \nabla) = v_x \frac{\partial}{\partial x} + v_y \frac{\partial}{\partial y} + v_z \frac{\partial}{\partial z} . \quad (1.60)$$

Então \mathbf{a} pode ser escrito na forma,

$$\mathbf{a} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} . \quad (1.61)$$

Dado que a massa dm do elemento é ρdV , a substituição em $d\mathbf{f} = \mathbf{a} dm$ resulta em,

$$-\nabla p dV = \rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right) dV . \quad (1.62)$$

Na equação acima, a aceleração é composta por dois fatores. O primeiro, $\partial \mathbf{v} / \partial t$, chamado de aceleração local, representa a variação da velocidade das partículas em um determinado ponto do espaço com o tempo. O segundo, $(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v}$, também conhecido como termo advectivo da aceleração, descreve a aceleração resultante da movimentação de partículas entre regiões de velocidade diferente. Em um regime laminar de escoamento, podemos

assumir que $|(\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v}|$ é muito menor que $\partial\mathbf{v}/\partial t$, logo:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = -\nabla p . \quad (1.63)$$

Para obtermos a equação da onda, precisamos combinar as relações obtidas nas Eq. (1.55) e Eq. (1.63), bem como a relação entre a pressão acústica p e a condensação s [5]. Tomando a divergência da Eq. (1.63):

$$\nabla \cdot \left(\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \right) = -\nabla^2 p , \quad (1.64)$$

Se escrevemos ρ como $\rho = \rho_0(1 + s)$, exigirmos que ρ_0 não tenha dependência temporal e assumirmos que s é muito pequeno. O resultado obtido é:

$$\rho_0 \frac{\partial^2 s}{\partial t^2} + \nabla \cdot \left(\rho_0 \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \right) = 0 , \quad (1.65)$$

o termo de divergência pode ser removido combinando Eq. (1.64) e Eq. (1.65). Com a combinação dessas duas equações, obtemos,

$$\nabla^2 p = \rho_0 \frac{\partial^2 s}{\partial t^2} . \quad (1.66)$$

A condensação pode ser expressa em termos da pressão acústica e módulo de compressibilidade $s = p/B$ [5], sendo que a taxa de mudança da função B em relação ao tempo é pequena.

$$\nabla^2 p = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} , \quad (1.67)$$

onde c é a velocidade do som definida por $c^2 = B/\rho$. A Eq. (1.67) governa toda a propagação da onda em meio fluido homogêneo.

2 CRISTAIS FONÔNICOS

Os cristais fonônicos são estruturas constituídas por materiais distintos, seguindo uma determinada sequência substitucional. A forma e a disposição desses materiais modificam a propagação da onda, gerando o mecanismo de interferência destrutiva e, conseqüentemente, impedindo a propagação da onda dentro da estrutura para determinada faixa de frequência. Essa faixa de frequência proibida é chamada de gap fonônico. Entender e controlar os mecanismos responsáveis pelos gaps fonônicos fornecem uma excelente plataforma para o desenvolvimento de dispositivos como filtros [6], colimadores acústicos [7], guias de ondas [8], entre outras aplicações.

Neste capítulo, apresentaremos uma revisão sobre os cristais fonônicos, suas principais propriedades, como classificá-los e os mecanismos de “band gap”.

2.1 Introdução

Nos últimos 20 anos, o campo da fonônica experimentou um notável crescimento. De maneira simplificada, podemos traçar o surgimento dos cristais fonônicos até o famoso artigo escrito por Kushwaha e seus colaboradores em 1993 [9]. Eles introduziram a ideia de cristais fonônicos, estabelecendo uma analogia com os cristais fotônicos, que controlam a luz, e que, por sua vez, foram inspirados na teoria dos elétrons em redes cristalinas.

A primeira observação de uma estrutura periódica para o controle da propagação de fônons remonta a 1972, quando Narayanamurti e outros pesquisadores [10] utilizaram uma super-rede composta de GaAs/AlGaAs. Embora não tenha sido considerado um cristal fonônico na época, atualmente é classificado como um cristal fonônico unidimensional. A formalização de cristais fonônicos bidimensionais e tridimensionais ocorreu na década de 90, quando Sigalas e Economou demonstraram a existência de bandas proibidas nas estruturas de bandas de ondas acústicas e elásticas [11].

Em 1995, Francisco Meseguer e seus colaboradores realizaram um experimento pioneiro ao determinar, de forma experimental, as propriedades de filtragem acústica de um cristal fonônico real. Este cristal fonônico não intencional era uma escultura de Eusebio Sempere, localizada em um parque em Madrid, Espanha. A escultura consistia em um arranjo periódico bidimensional de tubos de aço. Neste experimento, microfones foram colocados ao redor da escultura, e as medições revelaram a atenuação das ondas

sonoras em frequências específicas.



Figura 5: Escultura de E. Sempere, exposta ao ar livre em Madrid. [12]

O coeficiente de transmissão para ondas sonoras propagadas perpendicularmente às hastes apresentou um mínimo em torno da frequência de 1,67 kHz [13] que foi atribuído a uma “band gap” fonônico. No entanto, cálculos precisos da estrutura de banda subsequente [14] revelaram que a atenuação observada resulta de um mínimo de mergulho na densidade de estados fonônicos, e não de um gap de banda completo.

A origem desse mínimo está associada à difração de ondas na rede, onde a interferência de ondas é predominantemente destrutiva na frequência de 1,67 kHz. Nessa frequência, as ondas não se compensam completamente, resultando em uma baixa (mas finita) densidade de estados.

Os primeiros cristais fonônicos com um “band gap” completo foram relatados em 1998. Essas estruturas periódicas incluíam uma rede quadrada de furos cilíndricos perfurados em uma chapa de liga de alumínio e preenchidos com mercúrio [15], bem como uma

rede quadrada (e triangular) de hastes metálicas no ar [16]. Durante a última década, uma variedade de estruturas periódicas diferentes com gaps de banda fonônicos em uma ampla gama de frequências foram fabricadas. Podemos nos referir a uma revisão abrangente de Kushwaha [17] e a uma revisão tópica mais recente de Olsson III e El-Kady [18].

2.2 Formação de Band Gap Fonônico

A interação entre a rede cristalina e a onda exibe propriedades únicas quando o comprimento de onda é compatível com o parâmetro de rede. Nesta seção, apresentaremos os dois principais mecanismos pelos quais podemos explicar o surgimento dos “band gaps”: interferência [19] e ressonância [20]. O gap de tipo interferência pode ser imaginado como análogo a uma aproximação de elétron quase livre, enquanto o gap de tipo ressonância é melhor visto como um sistema “tight-binding”. Ambos os mecanismos são bem descritos na física do estado sólido.

A evolução temporal de um estado cristalino é regida pela equação de Schrödinger, cujas soluções são funções de onda dadas pela teoria de Floquet unidimensional [21] ou teoria de Bloch tridimensional [22]. No entanto, nesta dissertação as ondas vibracionais estão associadas à propagação de ondas elásticas. Em uma dimensão, a equação do movimento [23], é dada por,

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[E \frac{\partial u}{\partial x} \right] = \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} , \quad (2.1)$$

onde u é deslocamento, ρ a densidade e E o módulo de Young. Nos cristais fonônicos sólidos-sólidos, assume-se que as ondas elásticas se propagam como ondas de Bloch, descritas pela fórmula detalhada por Maldovan [24],

$$\mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \text{Re} \left[\mathbf{f}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega(\mathbf{k})t)} \right] , \quad (2.2)$$

onde $\mathbf{f}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ é uma função vetorial periódica, com o mesmo período espacial que o cristal fonônico, que depende do valor particular do vetor de onda \mathbf{k} . Mais uma vez, é útil agrupar as dependências espaciais e temporais e escrever a onda de Bloch como,

$$\mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \text{Re} \left[\mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{-i\omega(\mathbf{k})t} \right] , \quad (2.3)$$

onde $\mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathbf{f}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$. Considerando uma onda elástica se propagando perpendicular

às camadas do cristal com vetor $\mathbf{k} = k_x \hat{\mathbf{x}}$, para um meio elástico e homogêneo podemos assumir $E = \rho c^2$ [25], temos que a propagação das ondas de Bloch elástica dentro do cristal fonônico, ou seja, a Eq. (2.1) se reduz a,

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho c_L^2 \frac{\partial u_x}{\partial x} \right) = -\rho(\omega(\mathbf{k}))^2 u_x, \quad (2.4a)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho c_T^2 \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) = -\rho(\omega(\mathbf{k}))^2 u_y, \quad (2.4b)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\rho c_T^2 \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) = -\rho(\omega(\mathbf{k}))^2 u_z, \quad (2.4c)$$

onde $\rho = \rho(x)$, $c_T = c_T(x)$ e $c_L = c_L(x)$ são as propriedades mecânicas do cristal fonônico unidimensional, e $u_x = u_x(x)$, $u_y = u_y(x)$ e $u_z = u_z(x)$ são as componentes cartesianas do vetor de deslocamento espacial $\mathbf{u} = \mathbf{u}_{\mathbf{k}}(x)$. As soluções numéricas das equações de onda 2.4 são apresentadas nas Figura 6. O cristal explorado foi composto por camadas de chumbo e epóxi. Da análise gráfica, podemos observar a existência de faixas de frequências

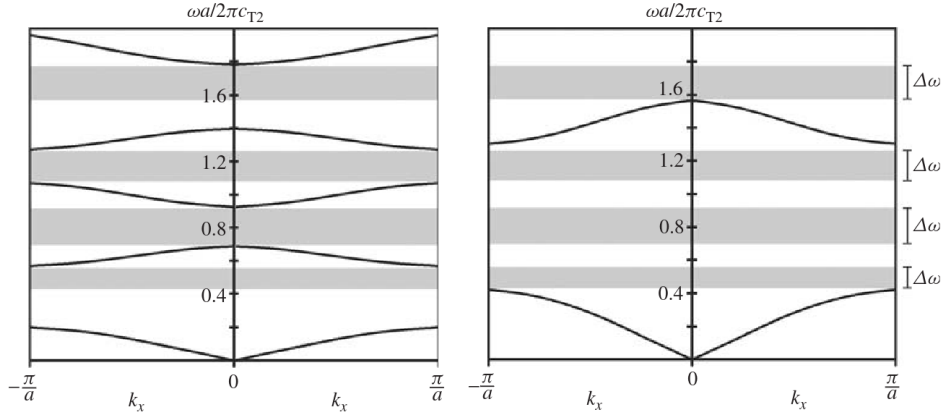


Figura 6: Relação de dispersão em uma dimensão para ondas elásticas se propagando dentro de um cristal fonônico composto por camadas intercaladas de chumbo e epóxi. A figura à esquerda mostra a relação de dispersão para ondas elásticas transversais, enquanto à direita temos a mesma relação para ondas elásticas longitudinais. As áreas cinzas indicam os intervalos de frequência ω , representando faixas de frequência nas quais tanto as ondas elásticas transversais quanto as longitudinais são proibidas de se propagar dentro do cristal.

$\Delta\omega$ para as quais não há vetor de onda associado. Isso significa que uma onda elástica geral com frequência dentro dessas faixas de $\Delta\omega$ não é permitida a se propagar dentro do cristal fonônico. Essas faixas de frequências $\Delta\omega$ onde não existe propagação são os “band gap” fonônicos.

2.2.1 Gaps de Bragg

Para uma compreensão mais aprofundada do “band gap”, começaremos examinando o caso do espalhamento de Bragg. O espalhamento de Bragg ocorre quando o vetor de onda \mathbf{k} da onda incidente aponta para as fronteiras de uma zona de Brillouin (planos de rede). O espalhamento de Bragg permite a reflexão de ondas em certos conjuntos de espalhadores [26]. A interação das ondas incidentes e refletidas impõe uma divisão na relação de dispersão para ondas elásticas em um cristal fonônico. Uma possível explicação fenomenológica para isso é o efeito de interferência. Para uma melhor compreensão do funcionamento do espalhamento de Bragg, consideremos um cristal fonônico com uma rede ortogonal bidimensional de parâmetros “a” e “b”, (ver a [Figura 7](#)), onde ondas elásticas são incididas no cristal com ângulo θ em relação a direção de “a”, dispersa nos planos, e parte da onda é refletida em cada plano de átomos.

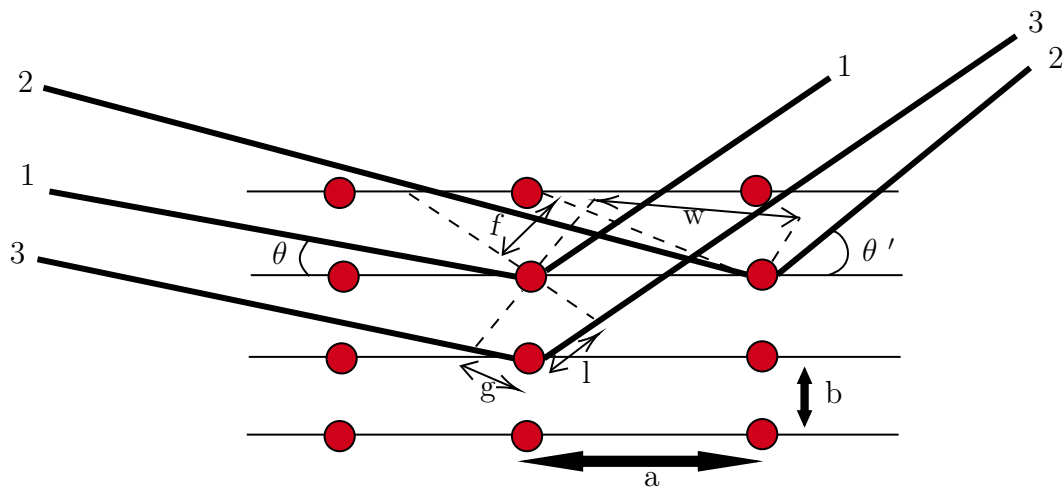


Figura 7: Modelo em duas dimensões para difração de Bragg para diferentes caminhos.

Dependendo da distância entre os planos cristalográficos, os componentes refletidos podem interferir na onda incidente, impedindo a propagação da onda através do cristal, resultando nas lacunas de banda no diagrama de banda de um cristal fonônico convencional e no espalhamento de Bragg. Se a dispersão ocorrer na direção θ' , então as ondas elásticas dispersas nessa direção devem estar exatamente em fase com as de cada outro ponto da rede, e para que isso ocorra a diferença de caminho entre as ondas interferentes deve ser igual a um múltiplo inteiro de seu comprimento de onda λ . Para as onda 1 e 2

estarem em fase após a dispersão, a diferença de caminho PD_1 será:

$$PD_1 = w - f = a\cos\theta - a\cos\theta' = h\lambda , \quad (2.5)$$

onde h é um número inteiro. Da mesma forma, a diferença de caminho PD_2 para as ondas 1 e 3 dispersas por átomos separados por b também deve ser um número inteiro de comprimentos de onda.

$$PD_2 = g + l = b\sin\theta + b\sin\theta' = k\lambda . \quad (2.6)$$

Uma consequência das propriedades do “band gap” é a reflexão total da onda elástica incidida na superfície do cristal fonônico com frequência dentro do “band gap”. Isso ocorre porque a onda não é permitida se propagar dentro da estrutura. Além disso, se a onda mecânica é gerada dentro do cristal fonônico, sua propagação é proibida.

2.2.2 Gaps de Ressonância

Além dos band gaps do tipo Bragg, também existem aqueles do tipo ressonante, que podem surgir em frequências abaixo do limite de Bragg. Neste último caso, torna-se possível obter band gaps absolutos em frequências de uma a duas ordens de magnitude inferiores ao limiar de difração de Bragg. Para compreendermos o conceito de ressonância local, é necessário entender o acoplamento de dois osciladores.

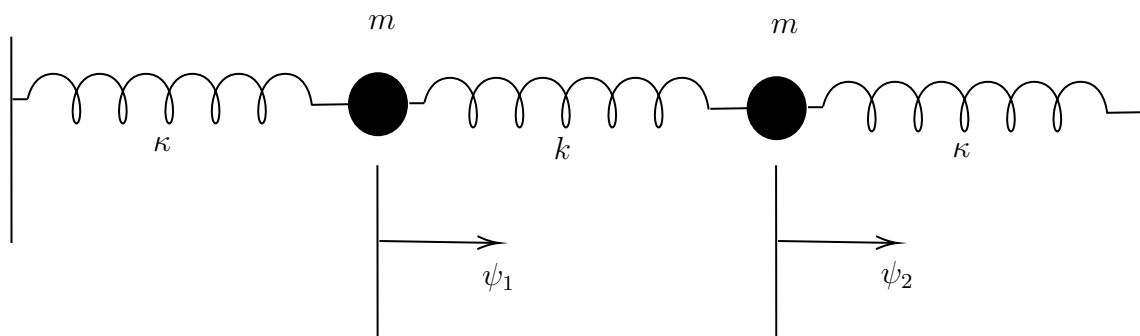


Figura 8: Dois osciladores acoplados.

Sistemas como esses podem ser descritos por [27],

$$\ddot{\psi}_1(t) = -\omega_0^2\psi_1(t) + \gamma^2\psi_2(t) , \quad (2.7)$$

e

$$\ddot{\psi}_2(t) = -\omega_0^2 \psi_2(t) + \gamma^2 \psi_1(t) , \quad (2.8)$$

onde $\omega_0^2 = (\kappa + k)/m$ e $\gamma^2 = \kappa/m$. Como o movimento resultante tem comportamento oscilatório, é razoável assumir as funções abaixo como solução para o caso de $\gamma \neq 0$,

$$\begin{bmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{bmatrix} = e^{i\omega t} \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{bmatrix} . \quad (2.9)$$

Os coeficientes ϕ_1 e ϕ_2 são complexos. Eventualmente, tomaremos as partes reais para obter o movimento real. Portanto, podemos descrever nosso sistema como,

$$-\omega^2 \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\omega_0^2 & \gamma^2 \\ \gamma^2 & -\omega_0^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix} . \quad (2.10)$$

Para encontrar os autovalores associados a ω ,

$$\det \begin{pmatrix} \lambda - \omega_0^2 & \gamma^2 \\ \gamma^2 & \lambda - \omega_0^2 \end{pmatrix} = (\lambda - \omega_0^2)^2 - \gamma^4 = 0 , \quad (2.11)$$

com,

$$\lambda_{\pm} = \omega_0^2 \pm \gamma^2 \Rightarrow \omega_{\pm} \sqrt{\omega_0^2 \pm \gamma^2} . \quad (2.12)$$

Uma outra forma de escrever nossa relação é,

$$\begin{bmatrix} -\omega_0^2 & \gamma^2 \\ \gamma^2 & -\omega_0^2 \end{bmatrix} = -\omega_0^2 \mathbf{1} + \gamma^2 \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.13)$$

$$= -\omega_0^2 \mathbf{1} + \sum_{i=1}^3 d_i \sigma_i . \quad (2.14)$$

Com,

$$\mathbf{d} = (\gamma^2, 0, 0) \text{ e } \sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} . \quad (2.15)$$

Dessa forma,

$$\lambda_{\pm} = -\omega_0^2 \pm |\mathbf{d}| = -\omega_0^2 \pm \gamma^2 . \quad (2.16)$$

Podemos facilmente generalizar esse ideia para dois osciladores acoplados que têm frequências diferentes,

$$\begin{bmatrix} -\omega_x^2 & \gamma^2 \\ \gamma^2 & -\omega_y^2 \end{bmatrix} = -\frac{\omega_x^2 + \omega_y^2}{2} \mathbb{1} + \gamma^2 \sigma_1 - \frac{\omega_x^2 - \omega_y^2}{2} \sigma_3 \Rightarrow \mathbf{d} = \left(\gamma^2, 0, -\frac{\omega_x^2 - \omega_y^2}{2} \right) . \quad (2.17)$$

E as novas frequências próprias são,

$$\omega_{\pm} = \sqrt{\frac{\omega_x^2 + \omega_y^2}{2} \pm \left[\frac{\omega_x^2 - \omega_y^2}{2} + \gamma^2 \right]^2} . \quad (2.18)$$

A principal função de γ é dividir a frequência do sistema de osciladores. O efeito da ressonância local interfere na dispersão da seguinte forma: devido ao acoplamento, o sistema será dividido em um sistema degenerado composto pela onda e pelo oscilador local. Esse efeito é mais intenso quando as duas frequências se cruzam. Como resultado desse fenômeno, uma faixa de frequência se abre, similar ao efeito de espalhamento de Bragg, onde nenhuma onda se propaga. Essa frequência é determinada pela frequência do oscilador local.

3 SEQUÊNCIAS QUASIPERIÓDICAS

Neste capítulo, iremos brevemente discutir as principais descobertas acerca dos cristais quasiperiódicos e suas definições. No âmbito do nosso estudo, o objetivo é analisar o crescimento de estruturas quasiperiódicas por meio de sequências substitucionais. Para isso iremos explorar quatro notáveis sequências de substituição: Fibonacci, Thue-Morse, Período Duplo e Kolakoski, as quais são categorizadas de acordo com a natureza de seus espectros de Fourier [28].

3.1 Introdução

Os átomos em um sólido podem adotar três distintas configurações de organização e classificação. A primeira delas é a estrutura cristalina, na qual os átomos se dispõem de maneira ordenada e periódica em cadeias de longo alcance. Por outro lado, temos os sólidos amorfos, que carecem de qualquer arranjo atômico regular e sistemático ao longo de distâncias relativamente grandes entre átomos. Por fim, existe uma categoria intermediária entre esses dois, denominada quasicristais, onde os átomos são arranjados de forma não periódica, mas com simetria rotacional.

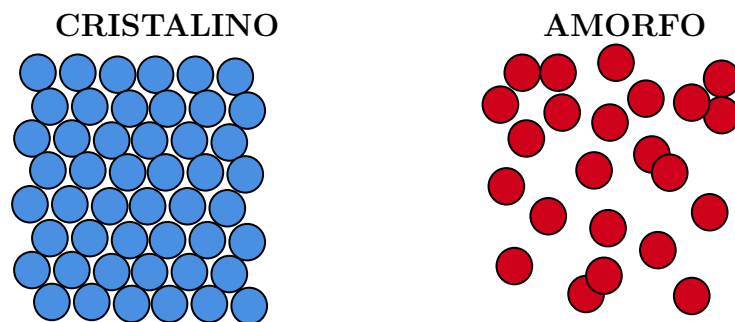


Figura 9: À esquerda, em azul, temos a representação esquemática bidimensional do arranjo dos átomos em estruturas cristalinas, enquanto em vermelho temos a representação organizacional dos átomos em estruturas amorfas.

A descoberta dos quasicristais por Daniel Shechtman em 1984 desafiou as premissas fundamentais da cristalografia do século XX. A cristalografia, enraizada na crença de que átomos em cristais formam arranjos periódicos ordenados, havia explicado com sucesso estruturas por 70 anos. Esses arranjos eram descritos como reticulados no espaço euclidiano tridimensional de modo que os vetores que descrevem os pontos da rede tenham a forma geral $\mathbf{r} = n_1\hat{e}_1 + n_2\hat{e}_2 + n_3\hat{e}_3$, onde \hat{e}_i é uma base vetorial adequada e

as coordenadas são números inteiros. Fisicamente, a periodicidade da rede garante que qualquer ponto dentro do cristal se repita exatamente em todo o espaço, ou seja, tenha simetria translacional e rotacional.

Rotações e translações estão envolvidas nesses arranjos no espaço euclidiano. Dizemos que uma estrutura dada possui simetria m -rotacional se ela permanecer inalterada quando girada por um ângulo $2\pi/m$ em relação a um determinado eixo, onde m é um número inteiro pertencente aos naturais. Ou seja, a simetria das redes periódicas permanece a mesma sob rotação. Os pontos da rede podem ser representados por um conjunto de matrizes da forma,

$$\mathbf{R}_\alpha = \begin{bmatrix} n_{11} & n_{12} & n_{13} \\ n_{21} & n_{22} & n_{23} \\ n_{31} & n_{32} & n_{33} \end{bmatrix}. \quad (3.1)$$

Onde as entradas são números inteiros. As rotações podem ser expressas em matrizes ortogonais:

$$M_x = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\phi & -\sin\phi \\ 0 & \sin\phi & \cos\phi \end{bmatrix}, M_y = \begin{bmatrix} \cos\phi & 0 & \sin\phi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\phi & 0 & \cos\phi \end{bmatrix}, M_z = \begin{bmatrix} \cos\phi & -\sin\phi & 0 \\ \sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (3.2)$$

Onde os termos $\cos\phi$ e $\sin\phi$ descrevem uma rotação em torno do ângulo ϕ , enquanto x , y , z representam o eixo cartesiano. De acordo com a cristalografia clássica, apenas eixos de simetria que satisfaçam a seguinte equação (3.3) são permitidos:

$$1 + 2\cos\phi = n_{11} + n_{22} + n_{33} = n \in \mathbb{Z}. \quad (3.3)$$

Isso implica que, ao reescrever a expressão como $\cos\phi = (n - 1)/2$, os únicos valores inteiros de n que satisfazem a condição $|\cos\phi| \leq 1$ são $n = -1, 0, 1, 2, 3$. Dessa forma, obtemos os ângulos de rotação permitidos listados na [Tabela 1](#).

n	(ϕ)	Eixos
-1	π	2-Rotações
0	$2\pi/3$	3-Rotações
1	$\pi/2$	4-Rotações
2	$\pi/3$	6-Rotações
3	0	Identidade

Tabela 1: Tabela de rotações.

Portanto, um número muito pequeno de rotações é compatível com a condição de periodicidade, ou seja, apenas os eixos de simetria de 2-, 3-, 4- e 6-rotações são permitidos em estruturas periódicas $3D$. Essa limitação forneceu a base para a construção das chamadas redes de Bravais, oferecendo assim a ferramenta básica para catalogação dos cristais. Por muitos anos, a crença de que a simetria rotacional quártupla era impossível em fases condensadas bem ordenadas levou à ideia de que a simetria pentagonal, amplamente encontrada no mundo dos seres vivos, não deveria existir.

O estudo de difração de elétrons da liga $Al_{86}Mn_{14}$ de Shechtman, revelou não apenas um eixo de simetria 5-rotações, mas quando a amostra foi inclinada em vista de outros ângulos, eixos de simetria 2- e 3-rotações também foram constatados, além dos 120 elementos de simetria característicos do grupo central. Essa descoberta inesperada contradiz a ideia clássica da cristalografia. A nova fase da matéria foi apresentada à comunidade

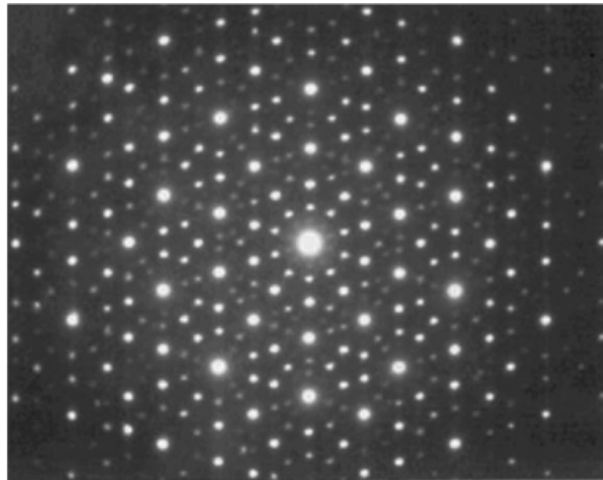


Figura 10: Padrões de difração de elétrons do icosaedro correspondente a $Al_{86}Mn_{14}$ ao longo do eixo de simetria da décima ordem descoberto por Shechtman [29].

científica por Daniel Shechtman, Ilan Blech, Denis Gratios e John W.Cahn no célebre artigo “ Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry ”, publicado no Physical Review Letters em 12 de novembro de 1984 [29]. Seis semanas após

a publicação do artigo de Shechtman e seus colegas, Paul J. Steinhardt e Dov Levine publicaram um artigo intitulado “Quasicrystals: a new class of ordered structures” *Physical Review Letters* em 24 de dezembro de 1984 [30], introduzindo a noção de cristais quasicriсталicos e invocando a noção matemática de funções quasiperiódicas. Eles ampliaram os conceitos de distribuição atômica para além da periodicidade. Essa extensão foi realizada comparando detalhadamente o padrão de difração calculado numericamente de um modelo atômico quasiperiódico com os resultados experimentais de Shechtman, demonstrando uma relação próxima. Para descrever essa nova fase, o termo quasicristal foi

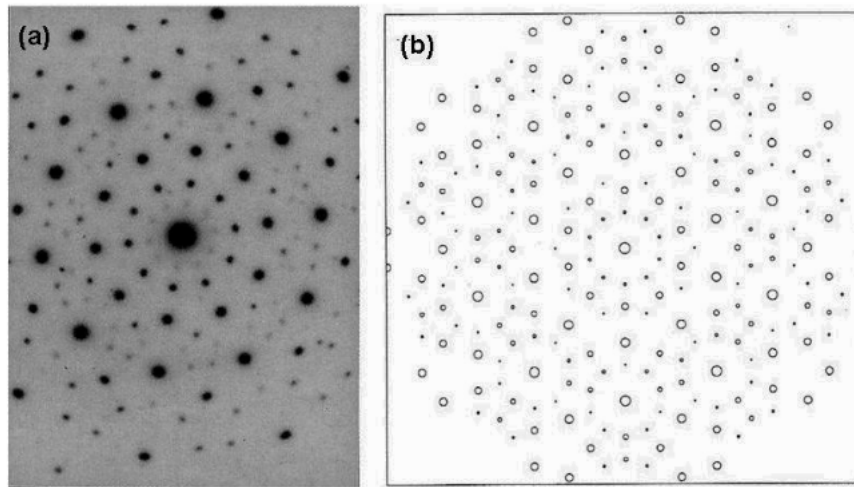


Figura 11: (a) Padrão de difração de elétrons correspondente à liga quasicristalina $Al_{86}Mn_{14}$ descoberta por Shechtman. [29]. (b) Padrão de difração calculado teoricamente em um plano normal a um eixo de simetria quántupla para um quasicristal ideal com estrutura icosaédrica. [30]

cunhado e incorporado nas definições cristalográficas. Steinhardt e Levine, por suas contribuições teóricas, receberam o Prêmio Oliver Beckley Condensed Matter da American Physical Society, enquanto Shechtman foi laureado com o Prêmio Nobel de Química em 2011 pela descoberta inovadora. Os quasicristais representaram uma mudança de paradigma na cristalografia, destacando a importância de considerar estruturas não periódicas na compreensão da organização da matéria.

3.2 Sequências substitucionais

Seja ε um conjunto finito, denominado alfabeto. Seja ε^* o conjunto de todas as palavras finitas que podem ser escritas utilizando esse alfabeto [31]. Agora, vamos definir ζ

como uma transformação de ε em ε^* , ou seja, uma regra que associa cada letra do alfabeto a uma palavra finita. Essa definição pode ser estendida para uma transformação de ε em ε^* , onde ζ age sobre uma palavra, substituindo cada letra α da palavra pela sua imagem correspondente $\zeta(\alpha)$. A transformação ζ é conhecida como a regra de substituição. Uma sequência será considerada substitucional se for um ponto fixo de ζ , ou seja, se permanecer inalterada quando cada letra da sequência for substituída pela sua imagem em ζ . A seguir, apresentaremos alguns exemplos de sequências substitucionais.

3.3 A sequência de Fibonacci

Uma das sequências quasiperiódicas mais antigas é a sequência de Fibonacci (FIB), desenvolvida pelo matemático italiano Leonardo Fibonacci (também conhecido como Leonardo de Pisa) em 1202. Ele a concebeu após investigar o crescimento populacional de casais de coelhos durante um período de doze meses. A estrutura de Fibonacci é composta por dois blocos de construção A e B, que são combinados em sequência através de uma transformação conhecida como regra de inflação,

$$A \rightarrow \zeta(A) = AB, \quad (3.4)$$

e

$$B \rightarrow \zeta(B) = A. \quad (3.5)$$

Uma maneira alternativa de obter a sequência é adicionando as duas gerações anteriores para obter a subsequente. Isso significa que a n -ésima geração é dada pela relação de recorrência, iniciada por $S_0 = B$ e $S_1 = A$,

$$S_n = S_{n-1}S_{n-2}, \text{ para } \geq 2. \quad (3.6)$$

Listamos a seguir as seis primeiras gerações da sequência de Fibonacci,

Esta estrutura se desenvolve de acordo com a sequência de Fibonacci, onde a quantidade de blocos pode ser determinada pela relação de Fibonacci:

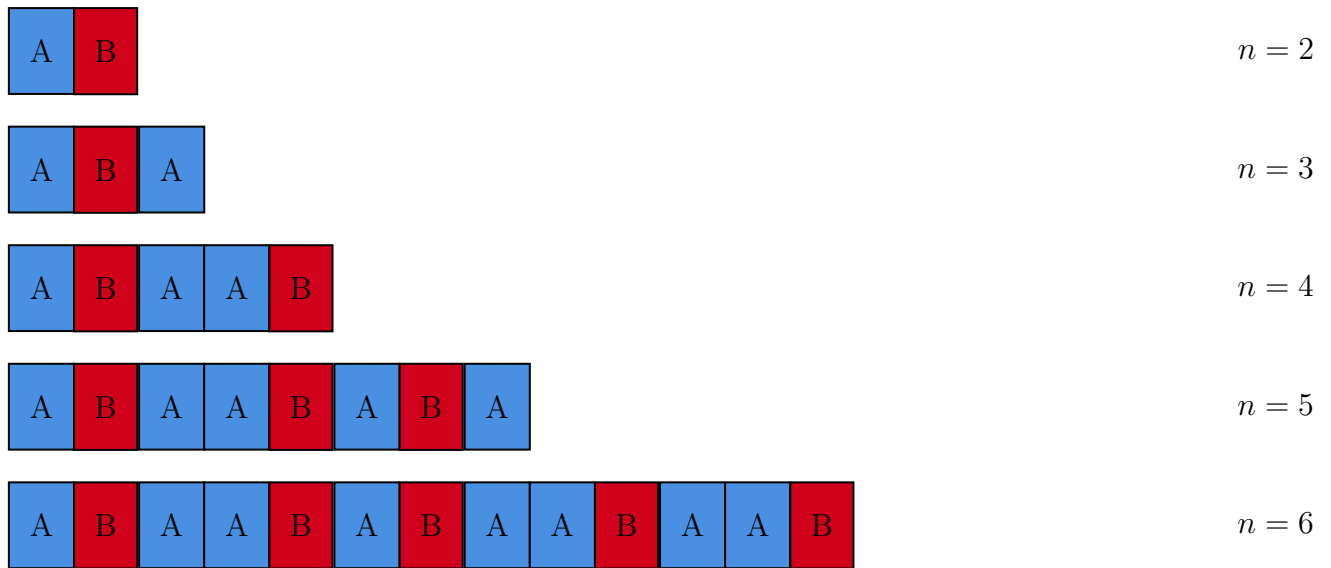


Figura 12: Ilustração esquemática da sequência de Fibonacci a partir da geração S_2 .

$$F_n = F_{n-1} + F_{n-2} . \quad (3.7)$$

Com $F_0 = F_1 = 1$. A medida que o número de gerações tende ao infinito, a razão entre o número de blocos de construção A (F_{n-1}) e o número de blocos de construção B (F_{n-2}) converge para o famoso “número de ouro” $\tau = (\sqrt{5} + 1) / 2 = 1.6180339887\dots$. Uma alternativa para determinar o número de letras, envolve a utilização da matriz de substituição da sequência [32]

$$\begin{bmatrix} N'_A \\ N'_B \end{bmatrix} = M_F \begin{bmatrix} N_A \\ N_B \end{bmatrix} , \quad (3.8)$$

onde (N_A, N_B) representa o número de letras na geração anterior, enquanto (N'_A, N'_B) denota o número de letras na geração subsequente. Para a sequência de Fibonacci, a matriz de substituição é,

$$M_F = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} . \quad (3.9)$$

3.4 A sequência de Thue-Morse

A sequência Thue-Morse (TM), também conhecida como sequência de Prouhet-Thue-Morse, é objeto de estudo de diferentes áreas do conhecimento. Foi primeiramente

investigada por Eugene Prouhet na teoria dos números [33], posteriormente definida por Alex Thue na área de combinatória [34], e redescoberta por Marston Morse no contexto da geometria diferencial [35]. Utilizando um alfabeto composto por duas letras $\{A, B\}$, a sequência TM pode ser definida mediante a regra de substituição ζ ,

$$A \rightarrow \zeta(A) = AB, \quad (3.10)$$

e

$$B \rightarrow \zeta(B) = BA.$$

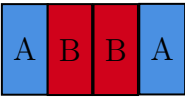
Ou em sua forma mais simplificada pela relação recursiva para $N \geq 1$,

$$\begin{cases} S_N = S_{N-1}S_{N-1}^+, \\ S_N^+ = S_{N-1}^+S_{N-1}, \end{cases} \quad (3.11)$$

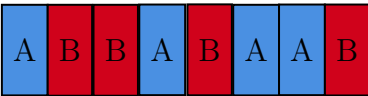
com as condições iniciais $S_0 = A$ e $S_0^+ = B$, o número de blocos aumenta com um crescimento proporcional a 2^N , e à medida que avançamos, a razão entre os blocos de letras A e B se aproxima de 2. Abaixo temos as quatro primeiras gerações da sequência Thue-Morse,



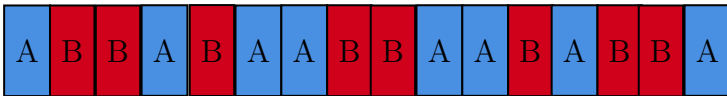
$$n = 1$$



$$n = 2$$



$$n = 3$$



$$n = 4$$

Figura 13: Ilustração esquemática da sequência de Thue-Morse a partir da geração S_1 .

Para uma estimativa mais precisa da quantidade de letras A e B em uma determinada geração, podemos recorrer à matriz de substituição, para sequência de Thue-Morse ela é dada por,

$$M_{TM} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad (3.12)$$

com uma relação análoga a Eq.(3.8) entre o número de letras A e B de gerações consecutivas,

$$\begin{bmatrix} N'_A \\ N'_B \end{bmatrix} = M_{TM} \begin{bmatrix} N_A \\ N_B \end{bmatrix}. \quad (3.13)$$

3.5 A sequência de Período Duplo

A sequência de período duplo (PD) tem sua origem relacionada às aplicações de laser em fibras ópticas não lineares [36]. Por meio da utilização do alfabeto binário $\{A, B\}$, podemos definir a sequência PD através da seguinte regra de substituição,

$$A \rightarrow \zeta(A) = AB, \quad (3.14)$$

e

$$B \rightarrow \zeta(B) = AA. \quad (3.15)$$

Ou pela regra de recorrência para $N \geq 1$,

$$\begin{cases} S_N = S_{N-1}S_{N-1}^+ , \\ S_N^+ = S_{N-1}S_{N-1} . \end{cases} \quad (3.16)$$

A sequência PD apresenta algumas semelhanças com a sequência TM, compartilhando as mesmas condições iniciais de $N = 1$, $S_0 = A$ e $S_0^+ = B$. Além disso, ambas sequências compartilham um fator de crescimento de 2^N e a proporção entre as letras A e B tende a 2 à medida que N se aproxima do infinito. As quatro primeiras gerações de período duplo são,

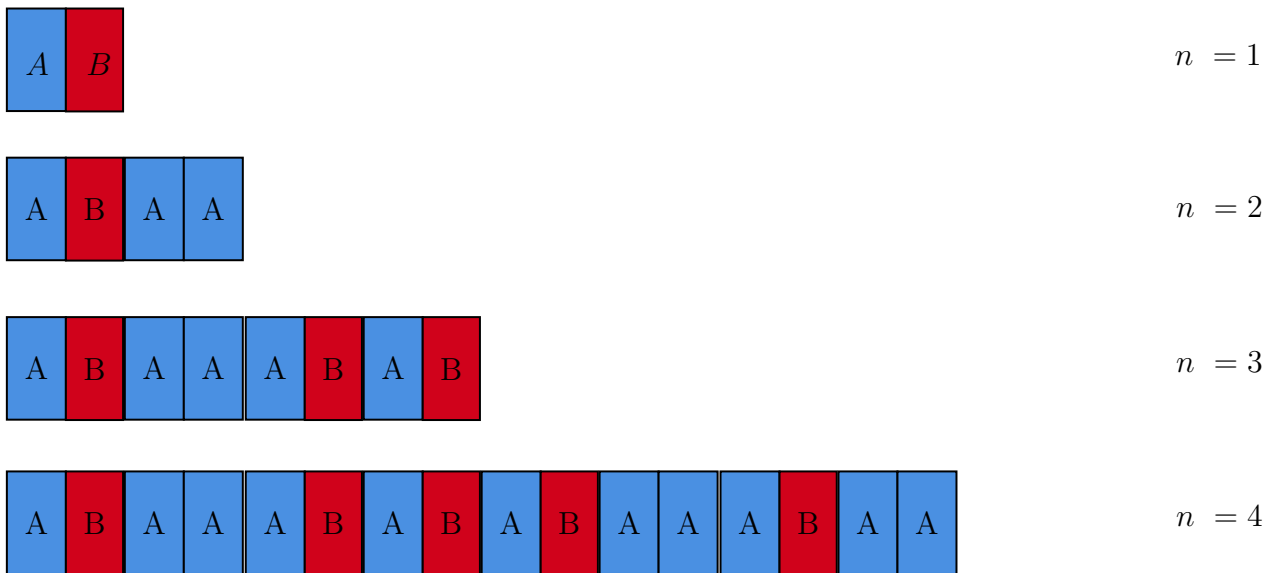


Figura 14: Ilustração esquemática da sequência de Período Duplo a partir da geração S_1 .

Para calcular exatamente o número de letras A e B em uma dada geração podemos utilizar novamente a matriz de substituição,

$$\begin{bmatrix} N'_A \\ N'_B \end{bmatrix} = M_{PD} \begin{bmatrix} N_A \\ N_B \end{bmatrix} , \quad (3.17)$$

onde, neste caso,

$$M_{PD} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} . \quad (3.18)$$

3.6 A sequência de Kolakoski

A sequência de Kolakoski, também conhecida como a sequência de Oldenburger-Kolakoski, foi introduzida pela primeira vez em 1939 por Rufus Oldenburger no artigo intitulado “ Trajetórias de expoentes na dinâmica simbólica ”[37], onde foi apresentada toda a estrutura da sequência. No entanto, essa sequência foi popularizada posteriormente pelo matemático recreativo William Kolakoski [38], que a introduziu de forma independente. Essa sequência pode gerar um fractal, objeto caracterizado por sua auto-similaridade, ou seja, ele contém, dentro de si, miniaturas de si mesmo. Seu padrão de formação é ligado à posição que cada símbolo ocupa dentro da própria sequência. As ordens clássicas de Kolakoski são representadas pelos conjuntos $K = \{A, B\}$ e $K' = \{B, A\}$.

O crescimento desta sequência resulta em uma espécie de “corrida” de seus próprios termos, onde cada número influencia diretamente os próximos. Para gerar uma sequência clássica de Kolakoski do tipo $K' = \{B, A\}$, um procedimento inicial envolve o uso da letra B como ponto de partida. Em seguida, são aplicadas as seguintes regras de substituição para continuar a sequência,

$$\sigma_0 = \begin{cases} A \rightarrow B , \\ B \rightarrow BB . \end{cases} \quad (3.19)$$

$$\sigma_1 = \begin{cases} A \rightarrow A , \\ B \rightarrow AA . \end{cases} \quad (3.20)$$

Aqui σ_0 indica as substituições dos dígitos em posições pares e σ_1 indica as substituições dos dígitos em posições ímpares. A seguir apresentamos parte da sequência clássica de Kolakoski iniciada pelo bloco B e formação da sequência até a quarta geração.

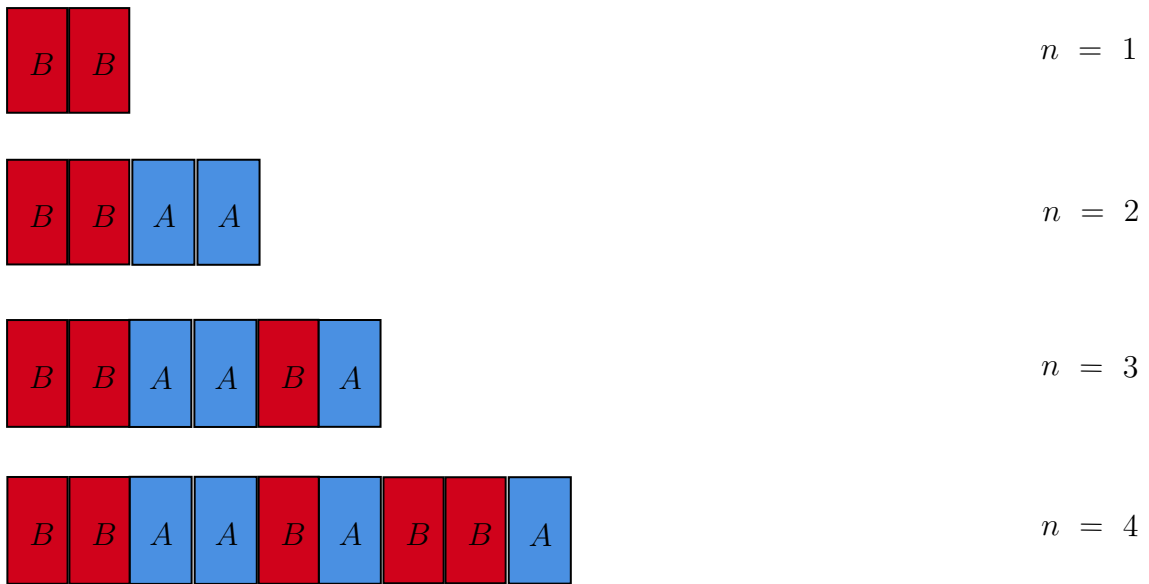


Figura 15: Ilustração esquemática da sequência clássica de Kolakoski para as quatro primeiras gerações.

Com as mesmas regras de substituição já apresentadas, podemos escrever a sequência de Kolakoski de forma numérica $K = \{2, 1\}$. Para isso, basta realizar a troca $A = 1$ e $B = 2$. Assim, a evolução da sequência de Kolakoski assume a forma:

$$K = \{2, 1\} = 2 \rightarrow 22 \rightarrow 2211 \rightarrow 221121 \rightarrow 221121221 \rightarrow \dots \quad (3.21)$$

Um fato curioso da sequência de Kolakoski é que seu comprimento em cada geração é igual à soma dos termos da geração precedente. Podemos ver o funcionamento dessa propriedade,

- $\{1, 2\}$ ($l = 2$ e $s = 3$),
- $\{1, 2, 2\}$ ($l = 3$ e $s = 5$),
- $\{1, 2, 1, 1, 1\}$ ($l = 5$ e $s = 7$),
- $\{1, 2, 2, 1, 1, 2, 1\}$ ($l = 7$ e $s = 10$),
- $\{1, 2, 2, 1, 1, 2, 1, 2, 2, 1\}$ ($l = 10$ e $s = 15$),

onde l representa o comprimento da sequência e s representa a soma dos termos.

4 MÉTODO DA MATRIZ DE TRANSFERÊNCIA

Neste capítulo, será apresentado o método matemático convencional utilizado no estudo da propagação de ondas elásticas em meios estratificados unidimensionais. Esse método é conhecido como matriz de transferência [39, 40]. A maior parte da metodologia empregada nesta seção está fundamentada na abordagem proposta por Markos e Soukoulis [41]. Os autores também destacam que essa técnica, uma vez desenvolvida para um determinado tipo de onda, pode ser facilmente generalizada para resolver qualquer outro problema relacionado a ondas.

As matrizes de transferência são ferramentas bastante úteis, sendo utilizadas para análise em diversos cenários, como propagação de ondas de spin [42], ondas eletromagnéticas [43] e acústicas [44].

Em particular, a descrição de sistemas elásticos pode envolver soluções de equações complexa. No entanto, podemos simplificar a solução por meio do método da matriz de transferência (TMM). Os coeficientes de transmissão e reflexão serão definidos a partir do formalismo da matriz de transferência.

4.0.1 Definição da Matriz de Transferência

Para ilustrar o método, abordaremos o caso específico de uma onda plana incidente em uma barreira arbitrária. Como resultado dessa interação, parte da energia é refletida de volta e outra parte é transmitida através da barreira. Em problemas como este, a equação da onda governa toda a dinâmica envolvida,

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} . \quad (4.1)$$

Nessa equação, sua solução geral pode ser expressa como uma superposição de ondas planas:

$$\psi_E(x) = \psi_E^+(x) + \psi_E^-(x), x \leq a , \quad (4.2)$$

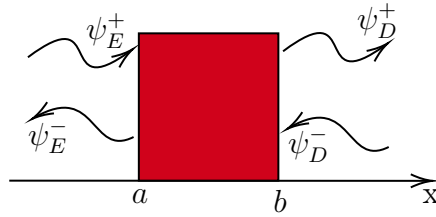


Figura 16: Experimento típico de espalhamento. As ondas incidentes Ψ_E^+ e Ψ_D^- são espalhadas pela amostra. As ondas de Ψ_E^- e Ψ_D^+ consistem em ondas refletidas e transmitidas através da amostra.

e

$$\psi_D(x) = \psi_D^+(x) + \psi_D^-(x), x \geq b, \quad (4.3)$$

onde os subscritos E (esquerda) e D (direita) indicam a posição da onda em relação à barreira. Enquanto isso, os sobrescritos (+) e (-) denotam o movimento da esquerda para a direita e da direita para a esquerda, respectivamente. As componentes da equação podem ser expressas por:

$$\begin{aligned} \psi_E^+(x) &= ae^{ikx}, & \psi_E^-(x) &= be^{-ikx}, \\ \psi_D^+(x) &= a'e^{ikx}, & \psi_D^-(x) &= b'e^{-ikx}, \end{aligned} \quad (4.4)$$

onde k é o vetor de onda.

Com os dados das componentes de onda $\psi_E^+(x_a), \psi_E^-(x_a)$ em uma posição inicial, nosso objetivo é calcular as componentes de onda $\psi_D^+(x_b), \psi_D^-(x_b)$ em outra localização. Em geral, podemos relacionar as funções de onda de ambos os lados por meio de seus coeficientes expressos na matriz M ,

$$\Psi_b = M(x_b, x_a)\Psi_a, \quad (4.5)$$

onde,

$$\Psi_b = \begin{bmatrix} \psi_D^+(x_b) \\ \psi_D^-(x_b) \end{bmatrix}; \Psi_a = \begin{bmatrix} \psi_E^+(x_b) \\ \psi_E^-(x_b) \end{bmatrix}. \quad (4.6)$$

A matriz de transferência 2x2 $M(x_b, x_a)$ é fundamental, pois dela podemos extrair informações valiosas sobre as amplitudes de transmissão e reflexão.

4.0.2 Amplitudes de transmissão e reflexão

Considerando o cenário anterior, onde temos um espalhamento confinado dentro das regiões $x_a \leq x \leq x_b$ e assumindo que a função de onda total seja uma combinação de uma onda incidente e uma onda espalhada,

$$\psi(x) = \psi_i(x) + \psi_s(x) . \quad (4.7)$$

Aqui a onda incidente se propaga da esquerda para a direita e é definida como,

$$\psi_i(x) = \Psi_i(x) \exp(ik_0(x - x_a)) , \text{ onde } k_0 = 2\pi f/v_x . \quad (4.8)$$

Para a onda espalhada, ao encontrar uma estrutura, parte dela é refletida de volta, enquanto a outra parte é transmitida para o lado direito. Podemos representar as amplitudes das ondas refletidas e transmitidas no ponto a e no ponto b da seguinte forma,

$$\Psi_b = \begin{bmatrix} \psi^+(x_a) \\ \psi^-(x_a) \end{bmatrix} = \Psi_i \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix} ; \quad \Psi_a = \begin{bmatrix} \psi^+(x_b) \\ \psi^-(x_b) \end{bmatrix} = \Psi_i \begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix} . \quad (4.9)$$

Neste contexto, os coeficientes de reflexão (r) e transmissão (t) desempenham um papel crucial. Podemos relacionar esses coeficientes com a matriz de transferência da seguinte maneira,

$$\begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix} = M(x_a, x_b) \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix} . \quad (4.10)$$

Os valores de r e t podem ser expressos em termos das componentes da matriz de transferência (M) da seguinte forma [45],

$$r = -\frac{M_{21}}{M_{22}}; \quad t = \frac{M_{11}M_{22} - M_{12}M_{21}}{M_{22}} = \frac{\det(M)}{M_{22}} . \quad (4.11)$$

Sabemos que o determinante da matriz de transferência $\det(M)$ é igual a 1 [41]. No entanto, vale ressaltar que os coeficientes r e t podem ser números complexos, mas estamos

interessados em quantidades reais. Portanto,

$$T = t^2 = \left| \frac{1}{M_{22}} \right|^2; \quad R = r^2 = \left| \frac{M_{21}}{M_{22}} \right|^2. \quad (4.12)$$

4.0.3 Multiplicação da matriz de transferência

Considerando o problema anterior, agora estamos adicionando uma camada extra de complexidade ao introduzir mais uma barreira. Ou seja, nosso problema agora envolve duas barreiras. A primeira barreira é representada pela figura vermelha 1, enquanto a segunda barreira é descrita pela barreira azul 2. Nessa configuração, o problema de espalhamento pode ser abordado de duas maneiras distintas.

A primeira abordagem envolve o uso das matrizes M_1 e M_2 para determinar as propriedades de espalhamento individualmente para cada barreira. A segunda abordagem consiste em considerar uma única barreira combinada.

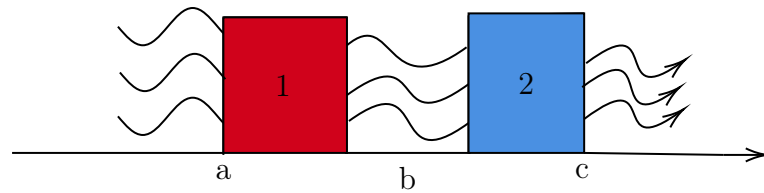


Figura 17: Esquema do cálculo de transmissão através de duas barreiras.

Sob o ponto de vista da física, ambas as abordagens são válidas. Portanto, os elementos das matrizes de transferência M_1 e M_2 podem ser empregados para determinar a matriz M_{12} . Para estabelecer a relação entre essas matrizes de transferência, é necessário considerar a função de onda nas seguintes regiões:

$$\Psi_L(x) = \Psi_L^+(x) + \Psi_L^-(x); \quad x \leq a; \quad (4.13)$$

$$\Psi(x=b) = \Psi^+(b) + \Psi^-(b); \quad x = b; \quad (4.14)$$

$$\Psi_R(x) = \Psi_R^+(x) + \Psi_R^-(x); \quad x \geq c. \quad (4.15)$$

Partindo das definições da matriz de transferência apresentada anteriormente, podemos escrever,

$$\begin{bmatrix} \Psi^+(b) \\ \Psi^-(b) \end{bmatrix} = M_1 \begin{bmatrix} \Psi_L^+(a) \\ \Psi_L^-(a) \end{bmatrix}; \quad \begin{bmatrix} \Psi^+(c) \\ \Psi^-(c) \end{bmatrix} = M_2 \begin{bmatrix} \Psi^+(b) \\ \Psi^-(b) \end{bmatrix}. \quad (4.16)$$

Agora, para nossa segunda situação, considerando uma única barreira formada pela união das duas,

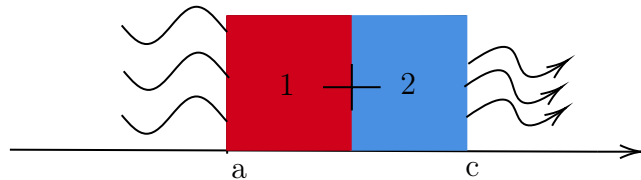


Figura 18: Esquema ilustrativo para o sistema de transmissão consistindo em duas amostras combinadas em uma.

Podemos combinar as matrizes descritas em 4.16,

$$\begin{bmatrix} \Psi_R^+(c) \\ \Psi_R^-(c) \end{bmatrix} = M_2 M_1 \begin{bmatrix} \Psi_L^+(a) \\ \Psi_L^-(a) \end{bmatrix}. \quad (4.17)$$

Conforme discutido, podemos descrever todo o sistema usando uma única matriz,

$$\begin{bmatrix} \Psi_R^+(c) \\ \Psi_R^-(c) \end{bmatrix} = M_{12} \begin{bmatrix} \Psi_L^+(a) \\ \Psi_L^-(a) \end{bmatrix}. \quad (4.18)$$

Da comparação entre as duas equações acima podemos obter a lei de composição,

$$M_{12} = M_2 M_1. \quad (4.19)$$

Mostrando assim que a matriz M_{12} , que representa a transferência de todo o sistema, pode ser expressa em termos das matrizes M_2 e M_1 . Essa ideia pode ser facilmente generalizada para o caso de N barreiras:

$$M = M_N M_{N-1} \dots M_2 M_1. \quad (4.20)$$

4.0.4 Matriz de Transferência para PnC

Para o cálculo numérico do coeficiente de transmissão das ondas elásticas, iremos considerar um cristal fonônico unidimensional, formado por dois materiais distintos organizados de forma periódica, conforme mostra a [Figura 19](#).

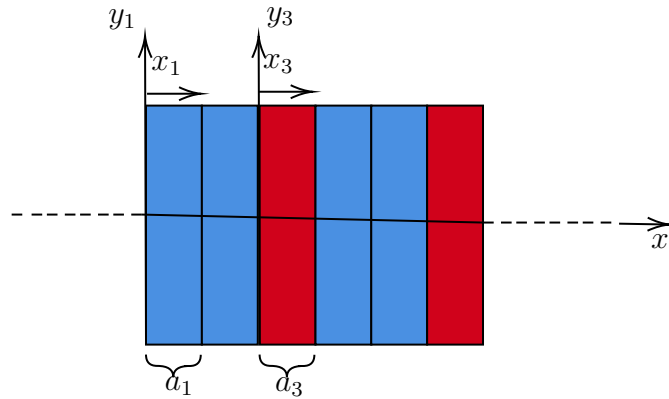


Figura 19: Representação de um quasicristal unidimensional. Cada cor representa um material diferente.

As espessuras, constantes de Lamé, módulo de cisalhamento e densidade de massa são denotados por a_j , λ_j , μ_j e ρ_j respectivamente. Como demonstrado na equação 1.38 a equação de movimento para um sólido elástico homogêneo, isotrópico e linear é dada por,

$$(\lambda + 2\mu)\nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \mu\nabla \times \nabla \times \mathbf{u} = \rho\ddot{\mathbf{u}} . \quad (4.21)$$

A propagação da onda plana na direção x , pode ser escrita por,

$$\mathbf{u}(r, t) = \mathbf{u}(r)e^{i\omega t} = u(x)e^{i\omega t} . \quad (4.22)$$

Assim, inserindo 4.22 em 4.21, obtemos a equação de Helmholtz 1D,

$$\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} + k^2 u(x) = 0 . \quad (4.23)$$

A solução é dada por,

$$u(x) = A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx} . \quad (4.24)$$

Para o caso da onda incidente do tipo S temos,

$$u(x) = u_z(x) , \quad (4.25)$$

$$\sigma = \sigma_{xz} = \mu \frac{\partial u}{\partial x} , \quad (4.26)$$

Para o caso da onda P ,

$$u(x) = u_x(x) , \quad (4.27)$$

$$\sigma = \sigma_{xx} = (\lambda + 2\mu) \frac{\partial u}{\partial x} . \quad (4.28)$$

Com a finalidade de desenvolver um método geral, definiremos a componente de tensão como sendo,

$$\sigma_\gamma = \Lambda_\gamma \frac{\partial u}{\partial x} , \quad (4.29)$$

onde $\Lambda_p = \lambda + 2\mu$ e $\Lambda_s = \mu$, para $\gamma = p$ e $\gamma = s$, respectivamente. Para a região entre dois materiais ser perfeita, significa que os vetores de deslocamento e tração são contínuos ao longo da direção normal e tangente da interface planar. Aplicando a condição de contorno em $x = 0$ de um determinado meio α para outro β .

$$u_\beta(0) = u_\alpha(0) , \quad (4.30)$$

e

$$\sigma_{\beta\gamma(0)} = \sigma_{\alpha\gamma(0)} . \quad (4.31)$$

Obtemos,

$$\beta e^{ik_\beta \cdot 0} + \bar{\beta} e^{ik_\beta \cdot 0} = \alpha e^{ik_\alpha \cdot 0} + \bar{\alpha} e^{ik_\alpha \cdot 0} , \quad (4.32)$$

$$\beta + \bar{\beta} = \alpha + \bar{\alpha} , \quad (4.33)$$

e

$$\Lambda_{\beta\gamma} \left[ik_{\beta}\beta e^{ik_{\beta}\cdot 0} - ik_{\beta}\bar{\beta} e^{-ik_{\beta}\cdot 0} \right] = \Lambda_{\alpha\gamma} \left[ik_{\alpha}\alpha e^{ik_{\alpha}\cdot 0} - ik_{\alpha}\bar{\alpha} e^{-ik_{\alpha}\cdot 0} \right] , \quad (4.34)$$

$$\Lambda_{\beta\gamma} k_{\beta} (\beta - \bar{\beta}) = \Lambda_{\alpha\gamma} k_{\alpha} (\alpha - \bar{\alpha}) . \quad (4.35)$$

Resolvendo esse sistema linear, obtemos,

$$\beta = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\Lambda_{\alpha\gamma} k_{\alpha}}{\Lambda_{\beta\gamma} k_{\beta}} \right) \alpha + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\Lambda_{\alpha\gamma} k_{\alpha}}{\Lambda_{\beta\gamma} k_{\beta}} \right) \bar{\alpha} , \quad (4.36)$$

e

$$\bar{\beta} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\Lambda_{\alpha\gamma} k_{\alpha}}{\Lambda_{\beta\gamma} k_{\beta}} \right) \alpha + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\Lambda_{\alpha\gamma} k_{\alpha}}{\Lambda_{\beta\gamma} k_{\beta}} \right) \bar{\alpha} . \quad (4.37)$$

Obtendo assim a matriz de transmissão que descreve a propagação da onda entre duas interfaces de meios distintos,

$$\begin{bmatrix} \beta \\ \bar{\beta} \end{bmatrix} = M_{\alpha\beta} \begin{bmatrix} \alpha \\ \bar{\alpha} \end{bmatrix} , \quad (4.38)$$

assumindo que $M_{\alpha\beta}$ é dada por,

$$M_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 + \frac{\Lambda_{\alpha\gamma} k_{\alpha}}{\Lambda_{\beta\gamma} k_{\beta}} & 1 - \frac{\Lambda_{\alpha\gamma} k_{\alpha}}{\Lambda_{\beta\gamma} k_{\beta}} \\ 1 - \frac{\Lambda_{\alpha\gamma} k_{\alpha}}{\Lambda_{\beta\gamma} k_{\beta}} & 1 + \frac{\Lambda_{\alpha\gamma} k_{\alpha}}{\Lambda_{\beta\gamma} k_{\beta}} \end{bmatrix} , \quad (4.39)$$

onde o termo, $k_{\alpha} = \left(\frac{2\pi f}{v_C} \right) \left(\frac{v_C^2}{v_{\alpha}^2} - \sin^2 \theta \right)^{1/2}$ representa o componente z do vetor de onda no meio incidente C , para um segundo meio α , em uma dada frequência f e ângulo de incidência θ , enquanto o termo, $k_{\beta} = \left(\frac{2\pi f}{v_C} \right) \left(\frac{v_C^2}{v_{\beta}^2} - \sin^2 \theta \right)^{1/2}$ representa o componente z do vetor de onda no meio incidente C , para um segundo meio β . Para a região do mesmo meio, a matriz de propagação pode ser obtida aplicando a condição de continuidade da função de onda, isso significa que a função repete seus valores após cada intervalo a ,

$$u_{\alpha}(a) = u_{\alpha}(0) , \quad (4.40)$$

e

$$ae^{ik_\alpha a} + \bar{a}e^{-ik_\alpha a} = \alpha + \bar{\alpha} . \quad (4.41)$$

De forma matricial,

$$\begin{bmatrix} a \\ \bar{a} \end{bmatrix} = M_\alpha \begin{bmatrix} \alpha \\ \bar{\alpha} \end{bmatrix} , \quad (4.42)$$

onde M_α é dada por,

$$M_\alpha = \begin{bmatrix} e^{-ik_\alpha a} & 0 \\ 0 & e^{ik_\alpha a} \end{bmatrix} . \quad (4.43)$$

Utilizando as matrizes [4.43](#) e [4.39](#), é possível calcular numericamente o coeficiente de transmissão de uma onda elástica em uma estrutura unidimensional PnQCs (do inglês, phononic quasicrystals). No próximo capítulo, realizaremos esse cálculo.

5 EXPERIMENTOS E ANÁLISE DE RESULTADOS

Nesta seção, iremos apresentar os resultados obtidos a partir das simulações que conduzimos. Os dados foram obtidos utilizando o método da matriz de transferência, aplicado à propagação de ondas elásticas através de quasicristais fonônicos que foram fabricados seguindo as sequências substitucionais apresentadas no capítulo 3.

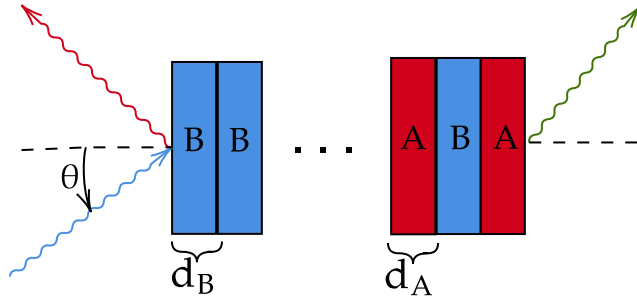


Figura 20: Esquema de nossas estruturas PnC compostas de chumbo (material A) e epóxi (material B) onde a espessura correspondente é d_B e d_A . A propagação da onda também é ilustrada onde uma onda (seta de cor azul) com ângulo de incidência θ é espalhada pelo PnC, gerando ondas refletidas (seta de cor vermelha) e transmitidas (seta de cor verde).

O nosso quasicristal foi construído combinando dois tipos de blocos, A (feitos de chumbo) e B (feitos de epóxi), e estes blocos foram delimitados por duas camadas semi-infinitas de C (feitas de alumínio), além de utilizamos a frequência central $f_0 = 10^6 Hz$. Todos os parâmetros de cada um desses materiais podem ser encontrados na [Tabela 2](#).

Material	Onda (γ)	Chumbo (A)	Epóxi (B)	Alumínio (C)
ρ_j ($\times 10^3$ kg/m ³)		11.4	1.18	2.699
λ_j ($\times 10^{10}$ N/m ²)		3.3	0.443	6.1
μ_j ($\times 10^{10}$ N/m ¹⁰)		0.54	0.159	2.5
v_j ($\times 10^3$ m/s)	p	1.96	2.54	6.413
	s	0.688	1.161	3.043

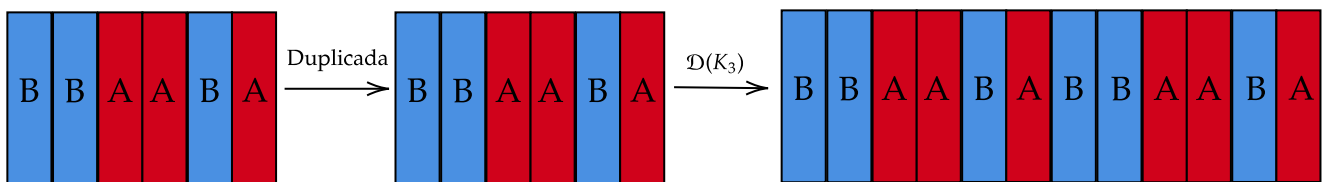
Tabela 2: Constantes dos materiais considerados neste trabalho.

As sequências exploradas foram submetidas a três operações de transformação: duplicação (\mathcal{D}), espelhamento (\mathcal{M}) e conjugação (\mathcal{C}). Essas transformações duplicam o número de blocos de construção da sequência original. Usando a [Figura 21](#) como exemplo

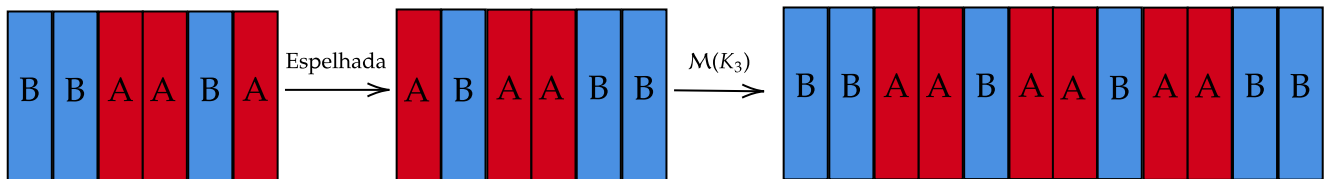
para ilustrar essas transformações, o caso escolhido foi a sequência de Kolakoski de terceira geração.

Na operação de duplicação, a sequência é repetida ao final, resultando no arranjo $\mathcal{D}(K_3) = \text{BBAABA|BBAABA}$, conforme mostrado em [Figura 21\(a\)](#). Por outro lado, a operação de espelhamento [46, 47] é realizada estabelecendo-se um plano de simetria ao final da primeira subestrutura, onde a sequência refletida é adicionada. A [Figura 21\(b\)](#) ilustra esse processo, no qual a sequência BBAABA é combinada com sua parte espelhada ABAABB, resultando em $\mathcal{M}(K_3) = \text{BBAABA|ABAABB}$.

(a)



(b)



(c)

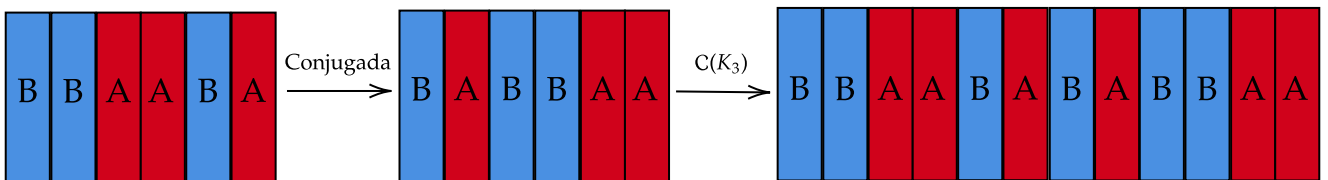


Figura 21: Um exemplo pedagógico para o caso $N = 3$ das três operações usadas para criar nossos PnCs baseados em Kolakoski. Painel (a) mostra a operação de espelho onde a sequência original é anexada com sua parte refletida. A conjugação no painel (b) primeiro aplica uma substituição espelhada e, em seguida, troca A por B. Finalmente, o painel (c) mostra a operação de multiplicação duplicando o sequência. Todos os arranjos possuem o mesmo número de elementos para um determinado número de geração N .

Finalmente, a operação de conjugação [48] envolve refletir a sequência e trocar os termos A por B (e vice-versa) na parte espelhada, anexando-a ao final da sequência original. A [Figura 21\(c\)](#) mostra essa transformação, onde a parte conjugada é BABBAA,

de modo que o arranjo resultante se torna $\mathcal{C}(K_3) = \text{BBAABA|BABBAA}$.

Para garantir que as camadas individuais estejam dispostas de acordo com a condição de Bragg, nós ajustamos as espessuras de forma a satisfazer a condição de um quarto do comprimento de onda, o que implica que as espessuras $d_j = v_j/(4f_0)$, onde $j = A, B$. Portanto, temos $d_A/v_A = d_B/v_B$. Pesquisas anteriores têm indicado uma maior transmitividade do sistema quando as espessuras dos blocos são proporcionais a um quarto do comprimento de onda transmitido pelo material [49, 50]. Além disso, em nosso modelo, consideramos um espalhamento acústico incidente com frequência variando entre 0 e 2 *MHz*, bem como polarização da onda p, respectivamente.

Iniciamos nosso estudo com o caso de incidência normal, ou seja, a onda incide paralelamente aos cristais com $\theta = 0$. A Figura 20 mostra o esquema de transmissão. Nas Figuras Figura 22, Figura 23, Figura 24 e Figura 25, apresentamos os espectros de transmissão da onda elástica em relação à frequência reduzida f/f_0 para casos de incidência normal de ondas elásticas nos modos de onda p, considerando as sequências de Fibonacci (Figura 22), Thue-Morse (Figura 23), Período Duplo (Figura 24) e Kolakoski (Figura 25), da 2^a à 5^a geração. Em cada gráfico, o número de gerações é apresentado pelas linhas, enquanto cada coluna descreve um tipo de transformação.

Uma característica compartilhada por todos os espectros de transmissão é a simetria de espelho em torno da frequência reduzida, o que é esperado uma vez que a condição de quarto de onda é atendida. Outro aspecto notável é o escalonamento dos picos de transmissão em relação ao número de gerações, com a maioria das lacunas de banda localizadas entre as frequências reduzidas de aproximadamente 0.25 e 1.75. Essa região também apresenta alta probabilidade para propagação de ondas, ou seja, são bandas permitidas.

Na investigação da transmissão para a sequência de Fibonacci, conforme ilustrado na Figura 22, observamos picos bem definidos, com intensidade máxima ocorrendo em torno da frequência reduzida para gerações superiores à segunda, nas transformações Duplicada e Espelhada. No entanto, esse padrão não é observado nas transformações Conjugadas, onde há um pico com intensidade abaixo da máxima na região de f/f_0 para $N = 4$. Além disso, para $\mathcal{D}(FB_2)$, não há presença de “band gap”. No caso das sequências de Fibonacci, a maioria dos “band gaps” se encontra na faixa de frequência reduzida entre aproximadamente 0.5 e 1.5, independentemente da transformação aplicada.

Continuando nossa análise do espectro de transmissão, agora tendo em vista a sequência de Thue-Morse (Figura 23), observamos um comportamento bastante análogo entre os três tipos de arranjos. Isso fica evidenciado, principalmente para a quarta geração ($N = 4$) e a quinta geração ($N = 5$), onde a diferença se encontra basicamente em uma pequena atenuação da intensidade dos picos em algumas regiões. Os “band gaps” para as duas primeiras gerações ($N = 2$ e $N = 3$) estão compreendidos na mesma faixa de frequência que a sequência de Fibonacci, enquanto nas demais gerações temos um pequeno alargamento da faixa, se estendendo aproximadamente de $f/f_0 = 0.25$ a $f/f_0 = 1.75$.

Para a sequência de Período Duplo (Figura 24), apenas a transformação espelhada de segunda geração ($\mathcal{M}(DP_2)$) apresentou um pico de intensidade máxima na região em torno de $f/f_0 = 1$. As quarta e quinta gerações apresentam bastante semelhança nos aspectos de transmissão. O arranjo antissimétrico da quinta geração apresentou a faixa de “band gaps” entre valores próximos de 0.20 a 1.80 de f/f_0 .

Finalizada nossa análise para o caso de incidência normal, temos a sequência de Kolakoski (Figura 25) para $N = 2$. As operações conjugada e duplicada fornecem, coincidentemente, o mesmo arranjo. No caso espelhado, $\mathcal{M}(K_2)$, notamos picos de transmissão perfeita ocorrendo em $f/f_0 = 0.5$ e $f/f_0 = 1.5$.

Quando o número de gerações aumenta para $N = 4$, a quantidade de picos de transmissão perfeita na sequência espelhada, $\mathcal{M}(K_4)$, é ligeiramente maior do que na sequência duplicada, enquanto o caso conjugado, $\mathcal{C}(K_4)$, não apresenta estados transparentes no espectro da banda intermediária. Além disso, uma banda proibida mais ampla no centro do espectro de frequências está presente quando a simetria espelhada é empregada. Esse comportamento se repete para $N = 5$, quando a sequência espelhada exhibe dois picos imperfeitos adicionais, localizados em $f/f_0 = 0.8$ e $f/f_0 = 1.2$.

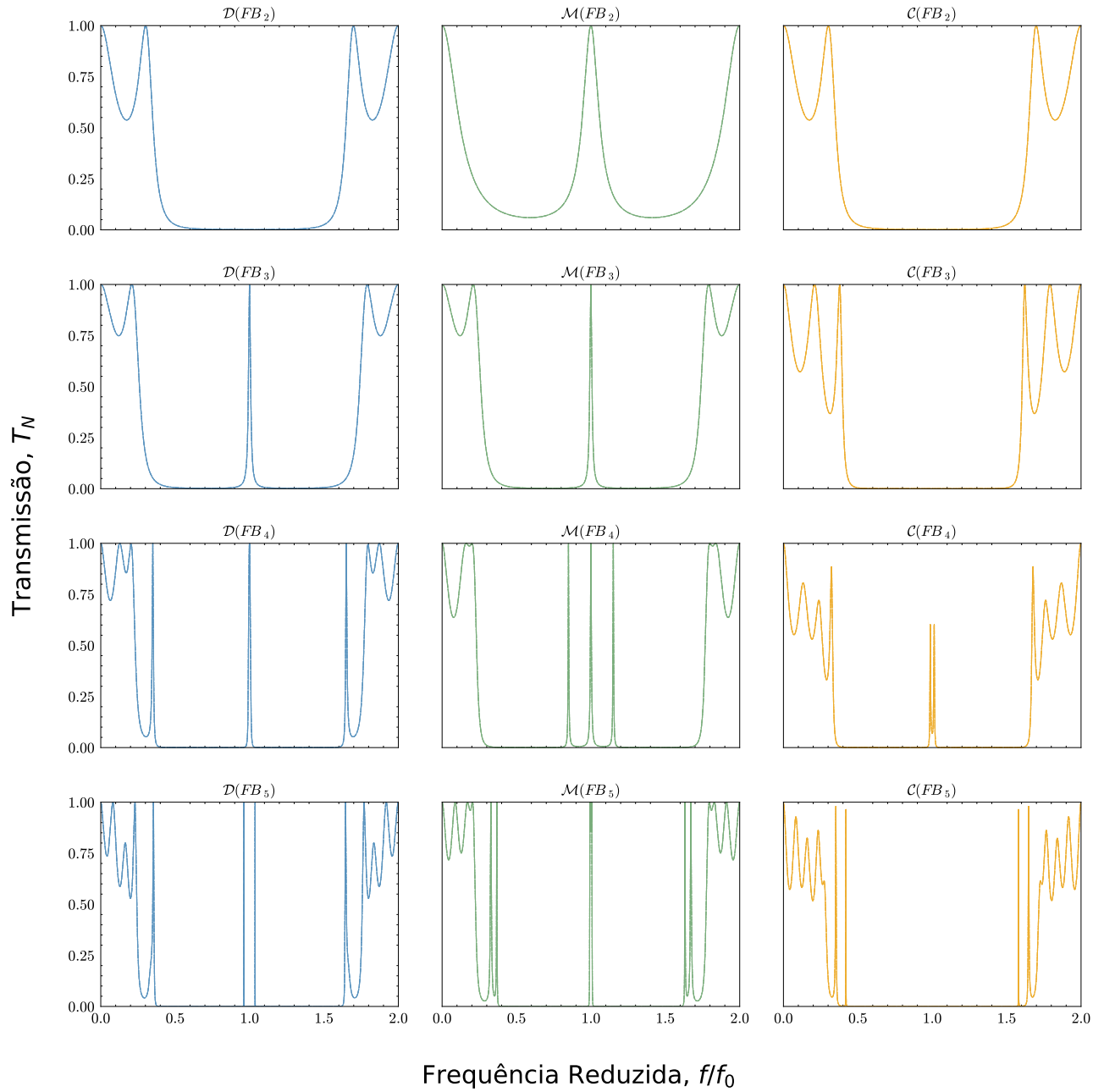


Figura 22: Espectros de transmissão em função da frequência reduzida f/f_0 das sequências Fibonacci (FB) duplicadas $\mathcal{D}(FB_N)$ (painel esquerdo), espelhadas $\mathcal{M}(FB_N)$ (painel central) e conjugadas $\mathcal{C}(FB_N)$ (painel direito), com diferentes números de gerações N . De cima para baixo, N aumenta.

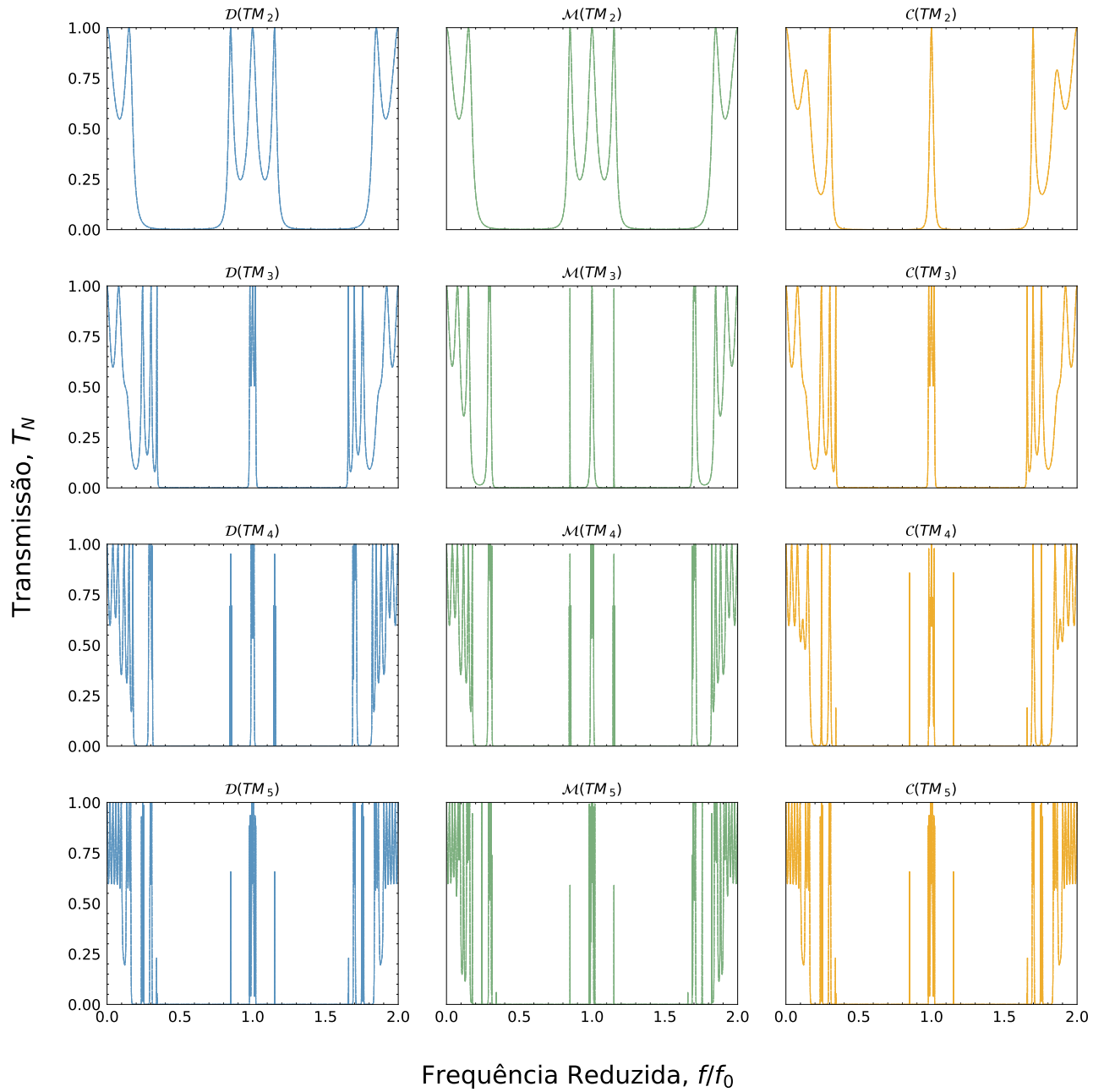


Figura 23: Espectros de transmissão em função da frequência reduzida f/f_0 das sequências Thue-Morse (TM) duplicadas $\mathcal{D}(TM_N)$ (painel esquerdo), espelhadas $\mathcal{M}(TM_N)$ (painel central) e conjugadas $\mathcal{C}(TM_N)$ (painel direito), com diferentes números de gerações N . De cima para baixo, N aumenta.

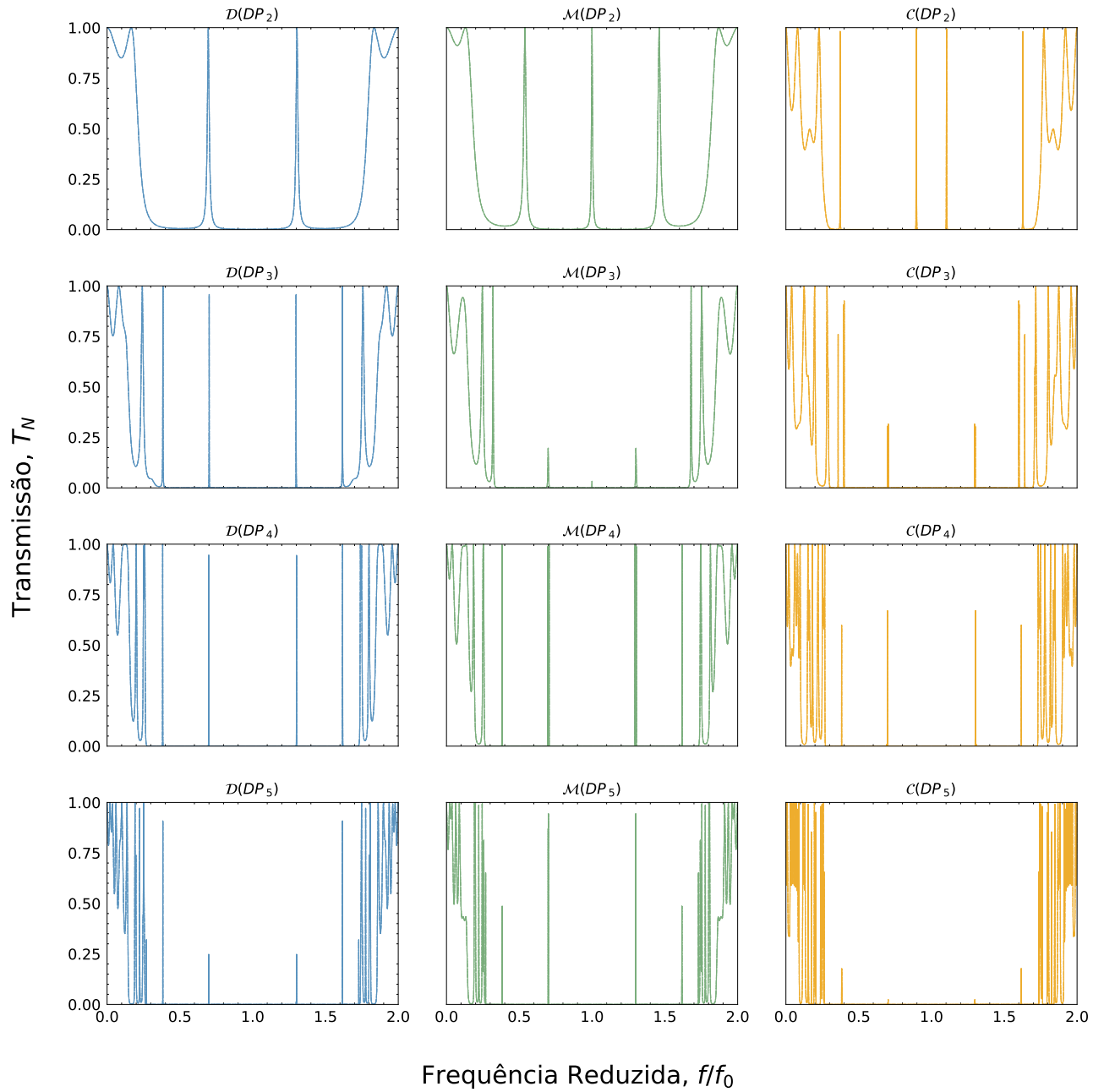


Figura 24: Espectros de transmissão em função da frequência reduzida f/f_0 das seqüências Período Duplo (DP) duplicadas $\mathcal{D}(DP_N)$ (painel esquerdo), espelhadas $\mathcal{M}(DP_N)$ (painel central) e conjugadas $\mathcal{C}(DP_N)$ (painel direito), com diferentes números de gerações N . De cima para baixo, N aumenta.

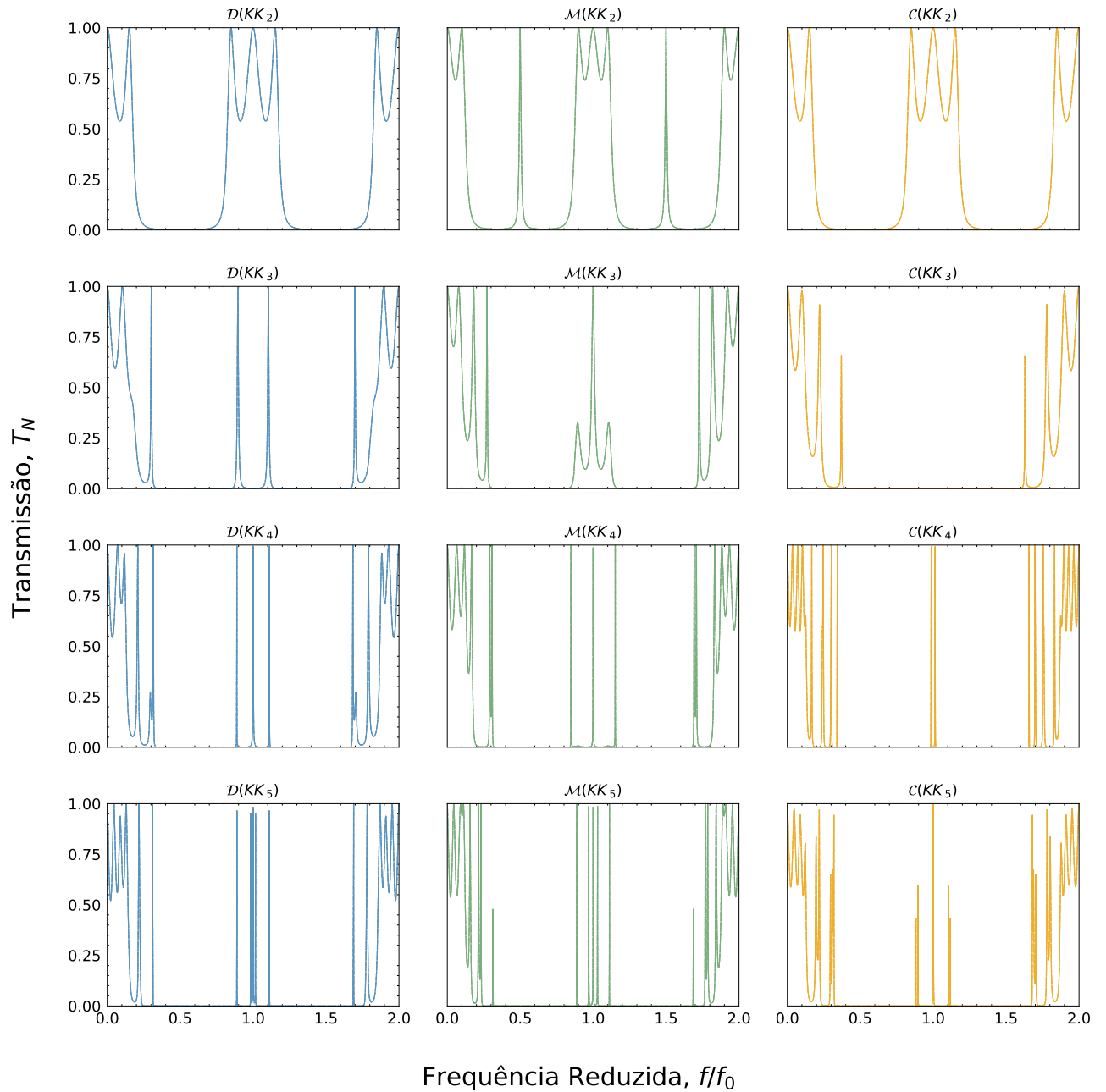


Figura 25: Espectros de transmissão em função da frequência reduzida f/f_0 das sequências Kalakoski (KK) duplicadas $\mathcal{D}(KK_N)$ (painel esquerdo), espelhadas $\mathcal{M}(KK_N)$ (painel central) e conjugadas $\mathcal{C}(KK_N)$ (painel direito), com diferentes números de gerações N . De cima para baixo, N aumenta.

Continuando nosso estudo, consideramos um cenário mais abrangente, no qual a incidência da onda é oblíqua na superfície dos nossos cristais fonônicos. Variamos o ângulo de incidência de 0 a 90 graus, com incremento de um grau. Neste estudo, exploramos as mesmas configurações descritas no caso de incidência normal.

Os resultados obtidos são descritos nos gráficos [Figura 26](#), [Figura 27](#), [Figura 28](#), [Figura 29](#), que mostram o coeficiente de transmissão em função da frequência reduzida (f/f_0) e do ângulo de incidência (θ) para as ondas longitudinais (p). O eixo das ordenadas representa a frequência reduzida, e o eixo das abscissas representa os ângulos de incidência.

As figuras apresentam uma representação visual, utilizando um mapa de cores que facilita a interpretação dos fenômenos em estudo. O gradiente de transmissão varia de cores escuras a claras, onde tons próximos ao azul escuro indicam baixa transmissão e tons mais claros, próximos ao amarelo, indicam alta transmissão.

Com o aumento do número de gerações, observa-se que as franjas nos gráficos tornam-se mais proeminentes. Esse comportamento era esperado, pois o aumento do número de camadas torna o processo de espalhamento mais eficiente. Cada camada adicional introduz uma nova interface, ampliando o número de reflexões internas. A condição λ desempenha um papel crucial nesse contexto, garantindo que essas reflexões ocorram de maneira coerente, reforçando os efeitos de interferência.

Além disso, com o aumento do número de gerações, percebe-se uma atenuação na transmissão para todas as sequências que apresentam picos de transmissão em regiões próximas a $f/f_0 = 1$. Outro aspecto notável é a redução da transmissão à medida que o ângulo de incidência aumenta; quando o mesmo atinge 90 graus, observamos regiões de “band gaps” mais intensificadas, o que ocorre porque a componente horizontal do vetor de onda, k_x , é diminuída.

Ao examinar a sequência de Fibonacci, observamos que, na segunda geração, as transformações $\mathcal{D}(FB_2)$ e $\mathcal{C}(FB_2)$ apresentam o mesmo comportamento de transmissão. Isso ocorre porque, nessa geração, as duas transformações são equivalentes. Além disso, essas transformações, juntamente com a transformação conjugada da quinta geração, exibem a maior faixa de “band gaps” omnidirecionais (regiões de gap onde a transmitância é zero, independentemente do ângulo de incidência). Essa faixa está localizada entre as frequências reduzidas de 0.5 e 1.5. Para todas as transformações espelhadas (\mathcal{M}), notamos a presença de picos centrais. A sequência de Thue-Morse foi a única que apresentou

um pico central na região $f/f_0 = 1$ para todas as transformações. Dando continuidade à nossa investigação, temos a sequência Período Duplo. Ao compararmos as transformações para a mesma geração, notamos que o fator significativo está nas intensidades de transmissão, enquanto o comportamento se encontrou bastante semelhante. Para concluir a análise dessas figuras, percebemos que a sequência de Kalakoski apresenta uma dependência considerável em relação à transformação aplicada. Ao analisarmos as mesmas gerações, porém com diferentes transformações, os “band gaps” de Bragg sofrem uma ampliação de espessura, o que fica mais perceptível à medida que aumenta o número N .

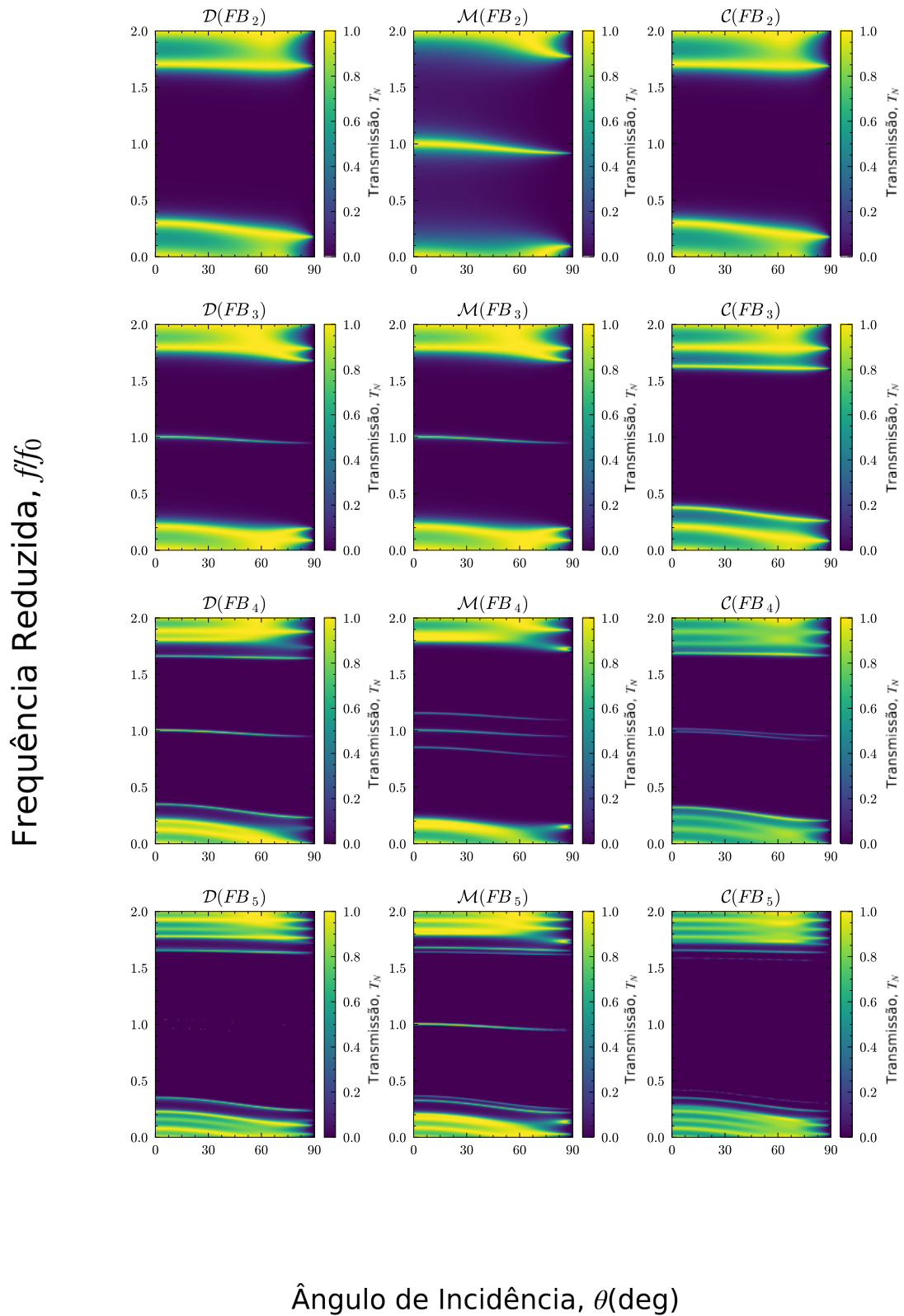
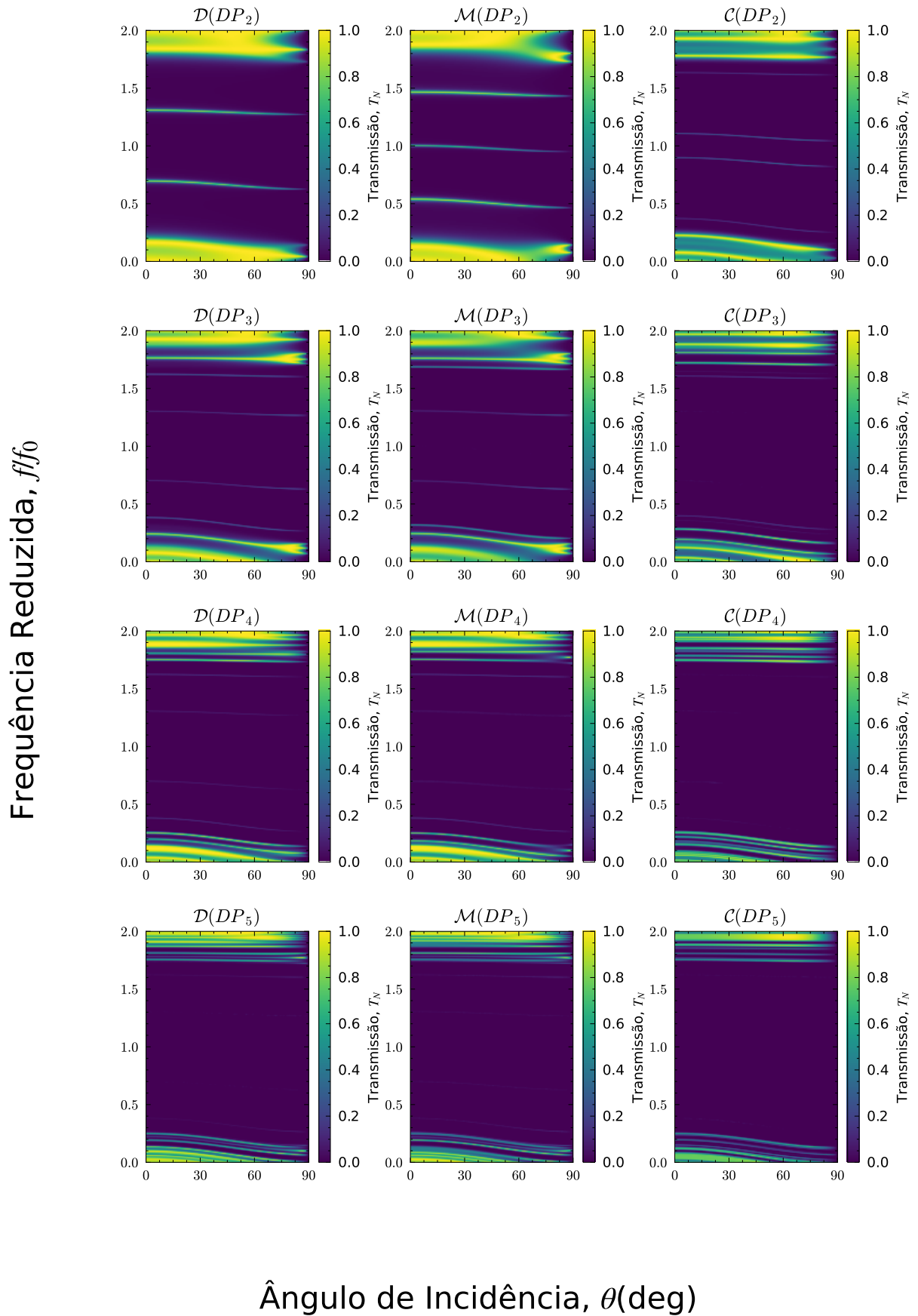


Figura 26: Efeito do ângulo de incidência θ nos espectros de transmissão em função da frequência reduzida para a sequência de Fibonacci.



Frequência Reduzida, f/f_0

Ângulo de Incidência, θ (deg)

Figura 28: Efeito do ângulo de incidência θ nos espectros de transmissão em função da frequência reduzida para a sequência de Período Duplo.

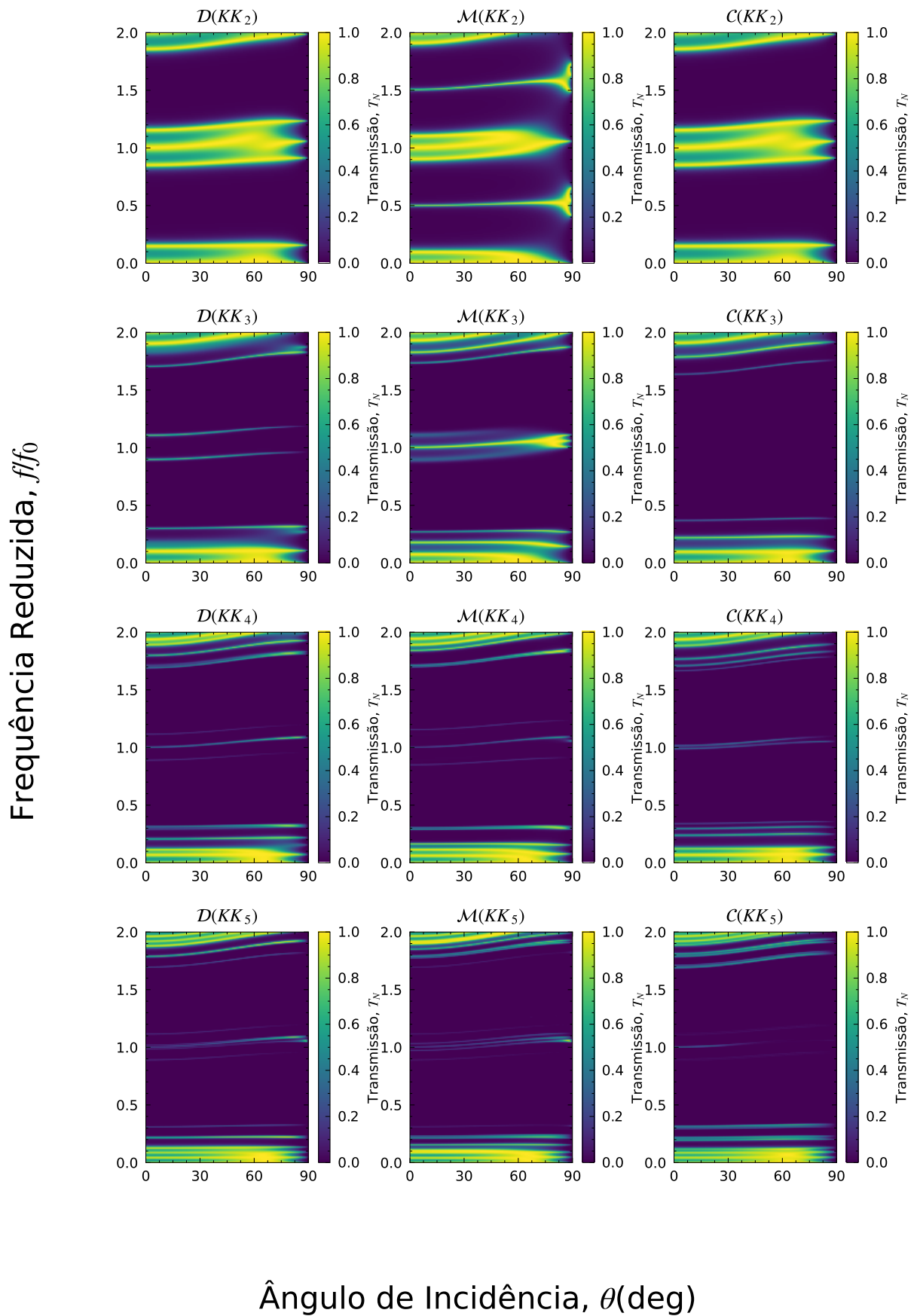


Figura 29: Efeito do ângulo de incidência θ nos espectros de transmissão em função da frequência reduzida para a sequência de Kalakoski.

6 CONCLUSÃO E TRABALHOS FUTUROS

Para fundamentar esse trabalho, apresentamos a fundamentação teórica da propagação de ondas em meios homogêneos. Nesse sentido analisamos a equação da onda, mostramos como as ondas elásticas planas se propagam em materiais sólidos, seu comportamento transversal ou longitudinal, além de mostrar que elas se propagam independentemente uma da outra e a diferentes velocidades, as quais são determinadas pelas propriedades mecânicas do material sólido homogêneo através do qual as ondas se propagam. Em seguida, os conceitos fundamentais associados aos quasicristais e a formação de “band gap”. Por fim, explanamos as regras de inflação de cada sequência substitucional.

Quanto à metodologia, aplicamos o método da matriz de transferência para o experimento numérico do espectro de transmissão. Inicialmente, consideramos a direção de propagação normal à interface dos meios. Os resultados da transmissão dos modos das ondas longitudinais (ou p) apresentaram a formação dos “band gap” de Bragg para praticamente todas as sequências exploradas, dentre elas, destacamos a sequência de Período Duplo de 5 geração com transformação conjugada ($\mathcal{C}(DP_5)$) por apresentar o maior “band gap” de frequência de borda, de aproximadamente entre 0.5 a 1.5 MHz, mostrando uma excelente plataforma para isoladores acústicos de dispositivos como ressonadores de RF, cuja faixa de trabalho é na faixa de MHz. Além disso, o comportamento dos “band gap” oriundos das reflexões de Bragg não sofreu influência significativa em decorrência da variação de N dentro mesmos arranjos, ao contrário do que ocorre nas regiões de bandas permitidas localizadas em frequências abaixo de 0.5 MHz e acima de 1.5 MHz. Nessas regiões, observamos um aumento significativo no número de picos de transmissão com intensidades máximas à medida que N aumenta.

Explorando um pouco mais os resultados para o caso de incidência oblíqua, percebemos que em regiões próximas de 50 graus, temos os maiores picos de transmissão. Outro fator relevante é que as regiões onde se observa transmissão em torno da frequência central $f/f_0 = 1$ não são significativamente afetadas pela variação dos ângulos. Isso ocorre independentemente da sequência, geração ou transformação aplicada.

Por fim, concluímos que, com o aumento de N , há uma maior incidência de “band gap” em todos os gráficos analisados. Além disso, os arranjos influenciam diretamente na extensão das larguras dos “band gap” omnidirecionais. Dentro dos arranjos simétricos, a

incidência foi maior.

Dentro das perspectivas futuras, podemos destacar a extensão desta pesquisa para casos bidimensionais e tridimensionais, além do acréscimo de uma interface constituída por três materiais distintos. Também podemos explorar como os defeitos topológicos típicos, como discordâncias e trincas, podem influenciar os comportamentos dos “band gap” e se podem ser amenizados por arranjos de geometrias distintas.

REFERÊNCIAS

- [1] M. Slawinski. *Seismic Waves and Rays in Elastic Media*. ISSN. Elsevier Science, 2003. ISBN: 9780080540894. URL: <https://books.google.com.br/books?id=Zd52BgAAQBAJ>.
- [2] K. Aki e P. Richards. *Quantitative Seismology*. G - Reference, Information and Interdisciplinary Subjects Series. University Science Books, 2002. ISBN: 9781891389634. URL: <https://books.google.com.br/books?id=pWhEPgAACAAJ>.
- [3] P. M. Shearer. *Introduction to seismology*. Cambridge university press, 2019.
- [4] B. Kusse e E. Westwig. *Mathematical Physics: Applied Mathematics for Scientists and Engineers*. Physics textbook. Wiley, 2010. ISBN: 9783527618149. URL: <https://books.google.com.br/books?id=XfcgPrUIYK4C>.
- [5] L. Kinsler et al. *Fundamentals of Acoustics*. Wiley, 2000. ISBN: 9780471847892. URL: <https://books.google.com.br/books?id=FecSEAAAQBAJ>.
- [6] F. Van Der Biest et al. “Resonant tunneling of acoustic waves through a double barrier consisting of two phononic crystals”. Em: *Europhysics Letters* 71.1 (2005), p. 63.
- [7] J. Shi, S.-C. S. Lin e T. J. Huang. “Wide-band acoustic collimating by phononic crystal composites”. Em: *Applied Physics Letters* 92.11 (2008).
- [8] J. O. Vasseur et al. “Waveguiding in two-dimensional piezoelectric phononic crystal plates”. Em: *Journal of applied physics* 101.11 (2007).
- [9] M. S. Kushwaha et al. “Acoustic band structure of periodic elastic composites”. Em: *Physical review letters* 71.13 (1993), p. 2022. URL: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.71.2022>.
- [10] V. Narayanamurti et al. “Selective transmission of high-frequency phonons by a superlattice: the “dielectric” phonon filter”. Em: *Physical Review Letters* 43.27 (1979), p. 2012. URL: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.43.2012>.

- [11] M. M. Sigalas. “Elastic and acoustic wave band structure”. Em: *Journal of sound and vibration* 158.2 (1992), pp. 377–382. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022460X92900597?via%3Dihub>.
- [12] *Órgano*. 1977. URL: <https://patrimoniopaisaje.madrid.es/portal/site/monumenta> (acedido em 03/04/2024).
- [13] R. Martínez-Sala. “Sound attenuation by sculpture”. Em: *nature* 378 (1995), p. 241.
- [14] M. S. Kushwaha. “Stop-bands for periodic metallic rods: Sculptures that can filter the noise”. Em: *Applied Physics Letters* 70.24 (1997), pp. 3218–3220. URL: <https://pubs.aip.org/aip/apl/article/70/24/3218/67228/Stop-bands-for-periodic-metallic-rods-Sculptures>.
- [15] F. M. De Espinosa, E. Jimenez e M. Torres. “Ultrasonic band gap in a periodic two-dimensional composite”. Em: *Physical Review Letters* 80.6 (1998), p. 1208. URL: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.80.1208>.
- [16] J. V. Sánchez-Pérez et al. “Sound attenuation by a two-dimensional array of rigid cylinders”. Em: *Physical Review Letters* 80.24 (1998), p. 5325. URL: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.80.5325>.
- [17] M. S. Kushwaha. “Classical band structure of periodic elastic composites”. Em: *International Journal of Modern Physics B* 10.09 (1996), pp. 977–1094. URL: <https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0217979296000398>.
- [18] R. H. Olsson e I. El-Kady. “Microfabricated phononic crystal devices and applications”. Em: *Measurement science and technology* 20.1 (2008), p. 012002. URL: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0957-0233/20/1/012002/meta>.
- [19] X. Tian et al. “Merging bragg and local resonance bandgaps in perforated elastic metamaterials with embedded spiral holes”. Em: *Journal of Sound and Vibration* 500 (2021), p. 116036.
- [20] Z. Liu et al. “Locally resonant sonic materials”. Em: *science* 289.5485 (2000), pp. 1734–1736.

- [21] G. Floquet. “Sur les équations différentielles linéaires à coefficients périodiques”. fr. Em: *Annales scientifiques de l'École Normale Supérieure* 2e série, 12 (1883), pp. 47–88. DOI: [10.24033/asens.220](https://doi.org/10.24033/asens.220). URL: <http://www.numdam.org/articles/10.24033/asens.220/>.
- [22] F. Bloch. “Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern”. Em: *Zeitschrift für Physik* 52 (1929), pp. 555–600. URL: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:120668259>.
- [23] M. I. Hussein et al. “Microdynamics of phononic materials”. Em: *Handbook of Micromechanics and Nanomechanics* 14 (2013).
- [24] M. Maldovan e E. Thomas. *Periodic Materials and Interference Lithography: For Photonics, Phononics and Mechanics*. Wiley, 2009. ISBN: 9783527625406. URL: <https://books.google.com.br/books?id=d0CF6wpzov8C>.
- [25] V. K. Kinra e V. Dayal. “Acoustic Methods of Evaluating Elastic Properties or, Will the Real Young’s Modulus Please Stand Up?” Em: *Manual on Experimental Methods for Mechanical Testing of Composites*. Ed. por R. L. Pendleton e M. E. Tuttle. Dordrecht: Springer Netherlands, 1989, pp. 97–103. ISBN: 978-94-009-1129-1. DOI: [10.1007/978-94-009-1129-1_14](https://doi.org/10.1007/978-94-009-1129-1_14). URL: https://doi.org/10.1007/978-94-009-1129-1_14.
- [26] Y. Jin et al. “Design of vibration isolators by using the Bragg scattering and local resonance band gaps in a layered honeycomb meta-structure”. Em: *Journal of Sound and Vibration* 521 (2022), p. 116721. ISSN: 0022-460X. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jsv.2021.116721>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022460X21007215>.
- [27] G. Dolfo e J. Vigué. “Damping of coupled harmonic oscillators”. Em: *European Journal of Physics* 39.2 (fev. de 2018), p. 025005. DOI: [10.1088/1361-6404/aa9ec6](https://doi.org/10.1088/1361-6404/aa9ec6). URL: <https://dx.doi.org/10.1088/1361-6404/aa9ec6>.
- [28] J. M. Luck. “Cantor spectra and scaling of gap widths in deterministic aperiodic systems”. en. Em: *Physical Review B* 39.9 (mar. de 1989), pp. 5834–5849. ISSN: 0163-1829. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.39.5834> (acedido em 18/09/2023).

- [29] D. Shechtman et al. “Metallic Phase with Long-Range Orientational Order and No Translational Symmetry”. Em: *Phys. Rev. Lett.* 53 (20 nov. de 1984), pp. 1951–1953. DOI: [10.1103/PhysRevLett.53.1951](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.53.1951). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.53.1951>.
- [30] D. Levine e P. J. Steinhardt. “Quasicrystals: A New Class of Ordered Structures”. Em: *Phys. Rev. Lett.* 53 (26 dez. de 1984), pp. 2477–2480. DOI: [10.1103/PhysRevLett.53.2477](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.53.2477). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.53.2477>.
- [31] E. Albuquerque e M. Cottam. *Polaritons in Periodic and Quasiperiodic Structures*. Elsevier Science, 2004. ISBN: 9780080539171. URL: <https://books.google.com.br/books?id=HHbGu6cmnj4C>.
- [32] L. Turban, P.-E. Berche e B. Berche. “Surface magnetization of aperiodic Ising systems: a comparative study of the bond and site problems”. Em: *Journal of Physics A: Mathematical and General* 27.19 (1994), p. 6349. URL: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0305-4470/27/19/009/meta>.
- [33] E. Prouhet. “Mémoire sur quelques relations entre les puissances des nombres”. Em: *CR Acad. Sci. Paris* 33.225 (1851), p. 1851.
- [34] A. Thue e T. Nagell. “Selected mathematical papers of Axel Thue”. Em: (*No Title*) (1977).
- [35] H. M. Morse. “Recurrent geodesics on a surface of negative curvature”. Em: *Transactions of the American Mathematical Society* 22.1 (1921), pp. 84–100. URL: <https://community.ams.org/journals/tran/1921-022-01/S0002-9947-1921-1501161-8/S0002-9947-1921-1501161-8.pdf>.
- [36] G. Steinmeyer, D. Jaspert e F. Mitschke. “Observation of a period-doubling sequence in a nonlinear optical fiber ring cavity near zero dispersion”. Em: *Optics communications* 104.4-6 (1994), pp. 379–384. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0030401894905746>.
- [37] R. Oldenburger. “Exponent trajectories in symbolic dynamics”. Em: *Transactions of the American Mathematical Society* 46 (1939), pp. 453–466. URL: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:53339342>.

- [38] W. Kolakoski. “Advanced problem 5304”. Em: *The American Mathematical Monthly* 72 (1965), p. 674.
- [39] Z.-Y. Li e L.-L. Lin. “Photonic band structures solved by a plane-wave-based transfer-matrix method”. en. Em: *Physical Review E* 67.4 (abr. de 2003), p. 046607. ISSN: 1063-651X, 1095-3787. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.67.046607> (acedido em 05/09/2023).
- [40] W. Cao e W. Qi. “Plane wave propagation in finite 2-2 composites”. en. Em: *Journal of Applied Physics* 78.7 (out. de 1995), pp. 4627–4632. ISSN: 0021-8979, 1089-7550. URL: <https://pubs.aip.org/jap/article/78/7/4627/492736/Plane-wave-propagation-in-finite-2-2-composites> (acedido em 05/09/2023).
- [41] P. Markos e C. Soukoulis. *Wave Propagation: From Electrons to Photonic Crystals and Left-Handed Materials*. Princeton University Press, 2008. ISBN: 9781400835676. URL: <https://books.google.com.br/books?id=RSVbFGGfEnsC>.
- [42] A. P. Valeriano, C. H. Costa e C. G. Bezerra. “Spin wave propagation spectra in Octonacci one-dimensional magnonic quasicrystals”. Em: *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 456 (2018), pp. 228–235. ISSN: 0304-8853. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2018.02.042>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304885317320620>.
- [43] B. Saleh e M. Teich. *Fundamentals of Photonics*. Wiley Series in Pure and Applied Optics. Wiley, 2019. ISBN: 9781118770092. URL: <https://books.google.com.br/books?id=rcqKDwAAQBAJ>.
- [44] P. Deymier. *Acoustic Metamaterials and Phononic Crystals*. Springer Series in Solid-State Sciences. Springer Berlin Heidelberg, 2013. ISBN: 9783642312328. URL: https://books.google.com.br/books?id=8eg_AAAAQBAJ.
- [45] R. B. BALILI. “TRANSFER MATRIX METHOD IN NANOPHOTONICS”. Em: *International Journal of Modern Physics: Conference Series* 17 (2012), pp. 159–168. DOI: [10.1142/S2010194512008057](https://doi.org/10.1142/S2010194512008057). eprint: <https://doi.org/10.1142/S2010194512008057>. URL: <https://doi.org/10.1142/S2010194512008057>.
- [46] P. Mauriz, M. Vasconcelos e E. Albuquerque. “Optical transmission spectra in symmetrical Fibonacci photonic multilayers”. Em: *Physics Letters A* 373.4 (2009), pp. 496–500. ISSN: 0375-9601. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physleta>.

2008.11.041. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960108017088>.

- [47] A. Augustyniak, M. Zdanowicz e T. Osuch. “Self-Similarity Properties of Complex Quasi-Periodic Fibonacci and Cantor Photonic Crystals”. Em: *Photonics* 8.12 (2021). ISSN: 2304-6732. DOI: [10.3390/photonics8120558](https://doi.org/10.3390/photonics8120558). URL: <https://www.mdpi.com/2304-6732/8/12/558>.
- [48] S. V. Zhukovsky. “Perfect transmission and highly asymmetric light localization in photonic multilayers”. Em: *Phys. Rev. A* 81 (5 mai. de 2010), p. 053808. DOI: [10.1103/PhysRevA.81.053808](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.81.053808). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.81.053808>.
- [49] A. Madani e S. R. Entezar. “Optical properties of one-dimensional photonic crystals containing graphene sheets”. Em: *Physica B: Condensed Matter* 431 (2013), pp. 1–5.
- [50] Q. Gong e X. Hu. *Photonic crystals: principles and applications*. CRC press, 2014.