

Estructura de bandas del cristal de ondas térmicas de Cattaneo - Vernotte sin el término de amortiguamiento

Para encontrar la estructura de bandas por medio del método de expansión de ondas planas (MEOP), partimos de la ecuación de propagación de Cattaneo-Vernotte

$$\frac{1}{T} \frac{\partial}{\partial t} T(x,t) + \frac{\partial^2}{\partial t^2} T(x,t) = c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} T(x,t).$$

y pasamos a la aproximación libre de amortiguamiento al despreciar el primer término

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

Pasamos al dominio de las frecuencias por medio de la transformada de Fourier de  $T(x,t)$

$$T(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int T(x,\omega) e^{-i\omega t} d\omega$$

Al sustituir la transformada, tenemos

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int T(x, \omega) e^{-i\omega t} dt = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int T(x, \omega) e^{-i\omega t} dt,$$

desarrollando

$$\frac{1}{c^2} \int -\omega^2 T(x, \omega) e^{-i\omega t} dt = \int \frac{\partial^2 T(x, \omega)}{\partial x^2} e^{-i\omega t} dt,$$

$$\int \left[ -\frac{\omega^2}{c^2} T(x, \omega) \right] e^{-i\omega t} dt = \int \frac{\partial^2 T(x, \omega)}{\partial x^2} e^{-i\omega t} dt,$$

de donde

$$\frac{\partial^2 T(x, \omega)}{\partial x^2} = -\frac{\omega^2}{c^2} T(x, \omega),$$

$$\text{o bien } c^2 \frac{\partial^2 T(x, \omega)}{\partial x^2} + \omega^2 T(x, \omega) = 0.$$

Para obtener soluciones tipo Bloch, desarrollamos

$$T(x, \omega) = \sum_g T_g e^{i(g+k)x}$$

$$c^2 = \sum_g v_g e^{i\alpha x}$$

donde  $k$  es el vector de onda de Bloch.

Sustituyendo los desarrollos en la ED

$$\sum_g V_g e^{i g x} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \sum_{g'} T_{g'} e^{i(g'+k)x} + \omega^2 \sum_g T_g e^{i(g+k)x} = 0,$$

$$\sum_g \sum_{g'} V_g T_{g'} e^{i g x} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{i(g'+k)x} + \omega^2 \sum_g T_g e^{i(g+k)x} = 0,$$

$$- \sum_{g, g'} V_g T_{g'} e^{i g x} (g'+k)^2 e^{i(g'+k)x} + \omega^2 \sum_g T_g e^{i(g+k)x} = 0,$$

$$- \sum_{g, g'} V_g T_{g'} (g'+k)^2 e^{i(g+g'+k)x} + \omega^2 \sum_g T_g e^{i(g+k)x} = 0,$$

Haciendo  $g+g'=g''$  en la primera suma ( $g=g''-g'$ )

$$- \sum_{g', g''} V_{g''-g'} T_{g'} (g'+k)^2 e^{i(g''+k)x} + \omega^2 \sum_g T_g e^{i(g+k)x} = 0$$

Renombrando en la primera suma  $g \rightarrow g''$

$$- \sum_{g, g'} V_{g-g'} T_{g'} (g'+k)^2 e^{i(g+k)x} + \omega^2 \sum_g T_g e^{i(g+k)x} = 0$$

$$\sum_g \left\{ \omega^2 T_g - \sum_{g'} V_{g-g'} T_{g'} (g'+k)^2 \right\} e^{i(g+k)x} = 0$$

$$\sum_{g'} V_{g-g'} (g'+k)^2 T_{g'} = \omega^2 T_g.$$

Ecuación  
Maestra del  
Cristal de Ondas  
Térmicas libre de  
Amortiguamiento.

Resta por determinar los coeficientes de Fourier.

La velocidad de la onda térmica es periódica en el cristal

$$c^2 = c^2(x) = c^2(x+d)$$

donde  $d$  es el periodo.

Recordemos que  $c^2(x) = \sum_g V_g e^{igx}$

donde  $g = \frac{2\pi}{d} n$  con  $n = \dots, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, \dots$

Resolvamos para  $V_g$

$$c^2(x) e^{-ig'x} = \sum_g V_g e^{i(g-g')x}$$

$$\int_{-d/2}^{+d/2} c^2(x) e^{-ig'x} dx = \sum_g V_g \underbrace{\int_{-d/2}^{d/2} e^{i(g-g')x} dx}_{\text{Int}}$$

Estudieemos la integral

$$\text{Int} = \int_{-d/2}^{+d/2} e^{i(g-g')x} dx = \int_{-d/2}^{d/2} \left\{ \cos[(g-g')x] + i \text{Sen}[(g-g')x] \right\} dx$$

$$\text{Int} = \int_{-d/2}^{d/2} \cos[(g-g')x] dx + i \int_{-d/2}^{d/2} \text{Sen}[(g-g')x] dx$$

$$= \frac{1}{g-g'} \text{Sen}[(g-g')x] \Big|_{-d/2}^{d/2} - i \left\{ \frac{1}{g-g'} \cos[(g-g')x] \Big|_{-d/2}^{d/2} \right\}$$

$$I_{nt} = \frac{1}{g-g'} \left( \text{Sen} \left[ (g-g') \frac{d}{2} \right] - \text{Sen} \left[ -(g-g') \frac{d}{2} \right] \right)$$

$$- \frac{i}{g-g'} \left( \text{Cos} \left[ (g-g') \frac{d}{2} \right] - \text{Cos} \left[ -(g-g') \frac{d}{2} \right] \right)$$

$$= \frac{1}{g-g'} \left( \text{Sen} \left[ \frac{2\pi}{d} (n-n') \frac{d}{2} \right] - \text{Sen} \left[ -(n-n') \pi \right] \right)$$

$$- \frac{i}{g-g'} \left( \text{Cos} \left[ (n-n') \pi \right] - \text{Cos} \left[ -(n-n') \pi \right] \right)$$

Recordar

$$\text{Sen}(-x) = -\text{Sen}(x)$$

$$\text{Cos}(-x) = \text{Cos}(x)$$

$$= \frac{1}{\frac{2\pi}{d}(n-n')} \left\{ \text{Sen} \left[ (n-n') \pi \right] + \text{Sen} \left[ (n-n') \pi \right] \right. \\ \left. - i \left[ \text{Cos} \left[ (n-n') \pi \right] - \text{Cos} \left[ (n-n') \pi \right] \right] \right\}$$

$$= \frac{d}{2\pi(n-n')} \left\{ 2 \text{Sen} \left[ (n-n') \pi \right] \right\},$$

$$= d \frac{\text{Sen} \left[ (n-n') \pi \right]}{(n-n') \pi}$$

Si  $n \neq n' \Rightarrow n-n' \in \mathbb{Z} \quad \therefore I_{nt} = 0 \neq n \neq n'$

Si  $n = n'$  tendría que considerar el límite

$$I_{nt} = d \lim_{\sigma \rightarrow 0} \frac{\text{Sen} \sigma}{\sigma} = d$$

Podemos concluir que  $I_{nt} = d \delta_{gg'}$

Sustituyendo el valor de Int,

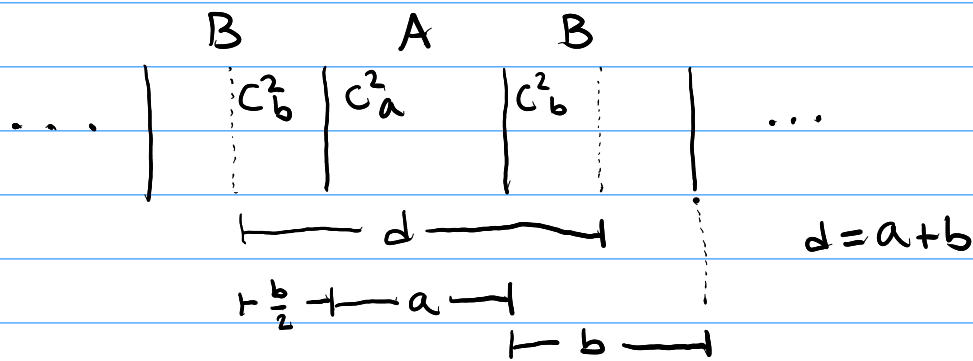
$$\int_{-d/2}^{+d/2} c^2(x) e^{-ig'x} dx = \sum_g V_g d \delta_{gg'}$$

$$\frac{1}{d} \int_{-d/2}^{d/2} c^2(x) e^{-ig'x} dx = V_{g'}$$

quitando el primado

$$\frac{1}{d} \int_{-d/2}^{d/2} c^2(x) e^{-igx} dx = V_g$$

La siguiente es la geometría de la celda unitaria



Basándonos en la figura, la velocidad de la onda térmica es

$$c^2(x) = c_b^2 + (c_a^2 - c_b^2) \Theta\left(\frac{a}{2} - |x|\right)$$

donde

$$\Theta\left(\frac{a}{2} - |x|\right) = \begin{cases} 1 & -a/2 \leq x \leq a/2 \\ 0 & |x| > a/2 \end{cases}$$

Sustituimos esta expresión en los coeficientes de Fourier

$$V_g = \frac{1}{d} \int_{-d/2}^{+d/2} \left[ C_b^2 + (C_a^2 - C_b^2) \Theta\left(\frac{a}{2} - |x|\right) \right] e^{-igx} dx,$$

desarrollamos

$$V_g = \frac{C_b^2}{d} \int_{-d/2}^{d/2} e^{-igx} dx + \frac{C_a^2 - C_b^2}{d} \int_{-d/2}^{d/2} \Theta\left(\frac{a}{2} - |x|\right) e^{-igx} dx,$$

$$= \frac{C_b^2}{d} \frac{1}{(-ig)} e^{-igx} \Big|_{-d/2}^{d/2} + \frac{C_a^2 - C_b^2}{d} \frac{1}{(-ig)} e^{-igx} \Big|_{-a/2}^{a/2},$$

$$= \frac{C_b^2}{d} \frac{1}{(-ig)} \left\{ e^{-i \frac{2\pi}{d} n \frac{d}{2}} - e^{i \frac{2\pi}{d} n \frac{d}{2}} \right\}$$

$$+ \frac{C_a^2 - C_b^2}{d} \frac{1}{(-i \frac{2\pi}{d} n)} \left\{ e^{-i \frac{2\pi}{d} n \frac{a}{2}} - e^{i \frac{2\pi}{d} n \frac{a}{2}} \right\}$$

$$= \frac{C_b^2}{(-i2\pi n)} \left\{ \cancel{\cos(-n\pi)} + i \text{Sen}(-n\pi) - \cancel{\cos(n\pi)} - i \text{Sen}(n\pi) \right\}$$

$$+ \frac{C_a^2 - C_b^2}{(-i2\pi n)} \left\{ \cancel{\cos(-n\pi \frac{a}{d})} + i \text{Sen}(-n\pi \frac{a}{d}) - \cancel{\cos(n\pi \frac{a}{d})} - i \text{Sen}(n\pi \frac{a}{d}) \right\}$$

$$= \frac{C_b^2}{(-i2\pi n)} \left\{ -2i \text{Sen}(n\pi) \right\} + \frac{C_a^2 - C_b^2}{(-i2\pi n)} \left\{ -2i \text{Sen}(n\pi \frac{a}{d}) \right\},$$

$$= C_b^2 \frac{\text{Sen}(n\pi)}{n\pi} + (C_a^2 - C_b^2) \frac{\text{Sen}(n\pi \frac{a}{d})}{n\pi \frac{a}{d}} \frac{a}{d}$$

$\frac{d}{dt} = f$  es el factor de llenado

$$V_g = C_b^2 \frac{\text{Sen}(n\pi)}{n\pi} + (C_a^2 - C_b^2) \frac{\text{Sen}(n\pi f)}{n\pi f} f$$

$\text{Sen}(n\pi)/n\pi$  es siempre cero, salvo en el caso  $n \rightarrow 0$ , donde  $\text{sen}(n)/n \rightarrow 1$ ,  $\therefore$

$$V_g = C_b^2 \delta_{g,0} + f (C_a^2 - C_b^2) \frac{\text{Sen}(n\pi f)}{n\pi f}$$

$$V_g = [C_b^2 + f(C_a^2 - C_b^2)] \delta_{g,0} + f(C_a^2 - C_b^2) \frac{\text{Sen}(n\pi f)}{n\pi f} [1 - \delta_{g,0}],$$

o bien

$$V_g = \begin{cases} C_b^2 + f(C_a^2 - C_b^2) & \text{si } g=0 \\ f(C_a^2 - C_b^2) \frac{\text{Sen}(n\pi f)}{n\pi f} & \text{si } g \neq 0 \end{cases},$$

o bien

$$V_{g-g'} = \begin{cases} C_b^2 + f(C_a^2 - C_b^2) & \text{si } g=g' \\ f(C_a^2 - C_b^2) \frac{\text{Sen}[(n-n')\pi f]}{(n-n')\pi f} & \text{si } g \neq g' \end{cases}.$$



La red 1D se caracteriza por un vector primitivo de la red directa

$$\vec{a} = d \hat{x}$$

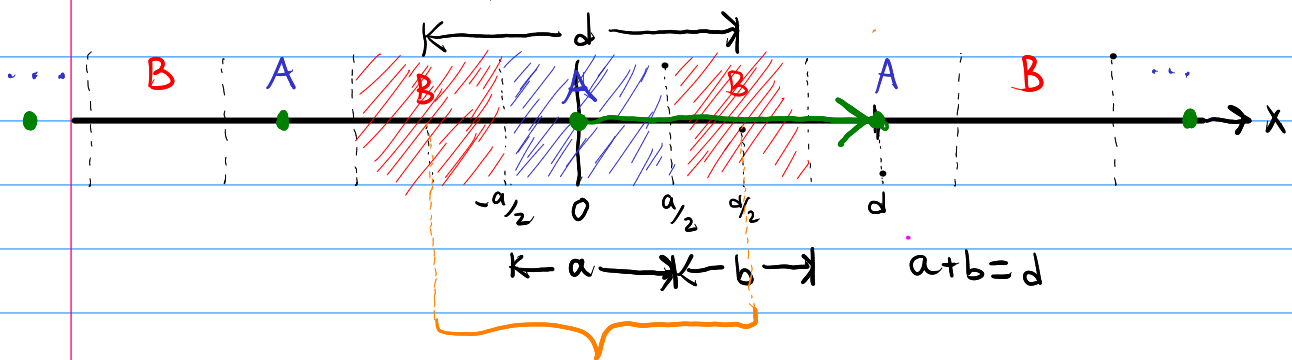
donde  $d$  es el ancho de la celda unitaria.

El vector primitivo de la red recíproca es

$$\vec{b} = \frac{2\pi d^2 (\hat{y} \times \hat{z})}{d^3 \hat{x} \cdot (\hat{y} \times \hat{z})}$$

$$\vec{b} = \frac{2\pi}{d} \hat{x}$$

La red directa es



La flecha  $\rightarrow$  verde es el vector primitivo de la red directa  $\vec{a} = d \hat{x}$ .

Esta es la celda unitaria de la red directa.

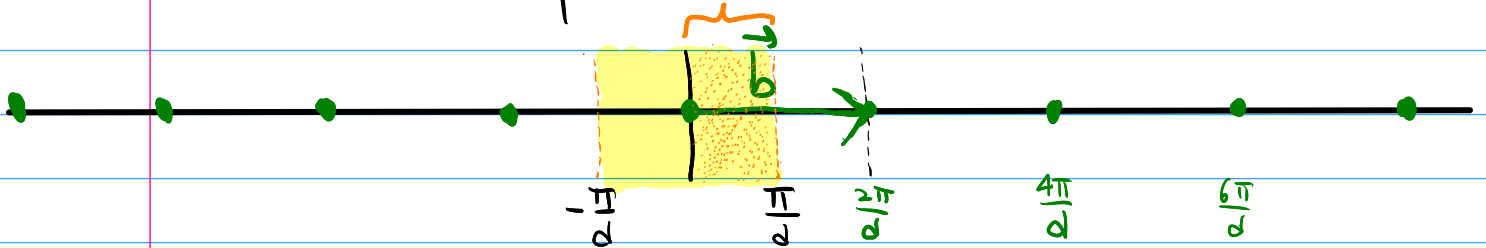
Los puntos verdes son los puntos de la red directa.

Los puntos de la red ( $\bullet$ ) se obtienen de las posibles combinaciones lineales del vector primitivo de la red directa  $\rightarrow$

$$\vec{a} = d \hat{x}$$

- La celda unitaria (Wigner-Seitz) se repite en todos los puntos de la red ( $\bullet$ ).

La Red Recíproca es



Los puntos verdes son los puntos de la red recíproca.

La flecha verde es el vector primitivo de la red recíproca  
 $\vec{b} = \frac{2\pi}{d} \hat{x}$ .

Las distintas combinaciones lineales  $n\vec{b}$ , con  $n \in \mathbb{Z}$ , definen los puntos de la red recíproca.

La región amarilla corresponde a la 1era Zona de Brillouin.

De la 1era Zona de Brillouin, la zona con punteado Naranja ( $\bullet$ ) representa la Zona Irreducible de Brillouin.

La Zona Irreducible de Brillouin, va de 0 a  $\pi/d$ , y es toda la región en la cual nos interesa calcular la relación de dispersión.

Si el ancho de la celda unitaria fuera  $d = 0.00002\text{m}$  ( $d = 20\mu\text{m}$ ), el rango de la zona irreducible iría de

$$0.0 \rightarrow \pi / (0.00002\text{m}) = 157079.6327 \text{ m}^{-1}.$$

Calculemos la Velocidad de la Onda Térmica para 2 materiales, Stratum y Dermis.

Las constantes térmicas de estos materiales son:

Stratum-like	Dermis-like
$\kappa_A = 0.235$ (W/mK)	$\kappa_B = 0.445$ (W/mK)
$c_{pA} = 3600$ (J/kg K)	$c_{pB} = 3300$ (J/kg K)
$\rho_A = 1500$ (kg/m <sup>3</sup> )	$\rho_B = 1116$ (kg/m <sup>3</sup> )
$\tau_{qA} = 1$ (s)	$\tau_{qB} = 20$ (s)

La fórmula para calcular la velocidad de la onda térmica es

$$c^2 = \frac{\kappa}{\rho c_p \tau}$$

Calculemos la velocidad de la onda térmica en ambos materiales

$$c_s^2 = \frac{0.235 \frac{\text{W}}{\text{mK}}}{(1500 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}) (3600 \frac{\text{J}}{\text{kgK}}) (1\text{s})}$$

$$c_s^2 = 4.351851852 \times 10^{-8} \frac{\text{m}^2}{\text{s}^2}$$

Sacando la raíz cuadrada

$$c_s = 2.086109262 \times 10^{-4} \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

Las unidades

$$\frac{\frac{\text{W}}{\text{m}}}{\frac{\text{J} \cdot \text{s}}{\text{m}^3}} = \frac{\text{W m}^3}{\text{J} \cdot \text{s} \cdot \text{m}} = \frac{\frac{\text{J}}{\text{s}} \text{m}^2}{\text{J} \cdot \text{s}} = \boxed{\frac{\text{m}^2}{\text{s}^2}}$$

Velocidad de la onda térmica en el Stratum.

$$C_D^2 = \frac{0.445 \frac{\text{W}}{\text{mK}}}{\left(1116 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}\right) \left(3300 \frac{\text{J}}{\text{kgK}}\right) (20\text{s})}$$

$$C_D^2 = 6.041598784 \times 10^{-9} \frac{\text{m}^2}{\text{s}^2}$$

$$C_D = 7.77277221 \times 10^{-5} \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

Velocidad de la onda térmica en la Dermis.

$$C_s = 0.0002086 \frac{\text{m}}{\text{s}} = 208.6 \frac{\mu\text{m}}{\text{s}}$$

$$C_D = 0.00007773 \frac{\text{m}}{\text{s}} = 77.73 \frac{\mu\text{m}}{\text{s}}$$

Las ondas térmicas viajan más lento en la Dermis que en el Stratum.

En parte se debe a la diferencia que hay entre los tiempos de relajación de ambos materiales. La diferencia es grande ( $\tau_s = 1\text{s}$ ,  $\tau_D = 20\text{s}$ ). El cuadrado de la velocidad es inversamente proporcional al tiempo de relajación

$$C^2 \propto \frac{1}{\tau_q}$$

A mayor  $\tau_q$ , menor  $C^2$  y menor  $C$ .