Nancy-Université
Université Henri Poincaré

AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

➢ Contact SCD Nancy 1 : theses.sciences@scd.uhp-nancy.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4
Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10
http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php
http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm

Université Henri Poincaré
Faculté des Sciences et Techniques
Ecole doctorale EMMA

Nancy-Université
Université Henri Poincaré

Thèse

présentée pour l'obtention du titre de

Docteur de l'Université Henri Poincaré, Nancy I

Spécialité : Plasmas, Optique, Opto-électronique et Micro-nanosystèmes

par

Mourad OUDICH

Contribution à l'étude des cristaux phononiques à résonance locale dans les régimes sonique et hypersonique : approches théorique et expérimentale.

Soutenue le 4 novembre 2011 devant la commission d'examen

Président

M. Jean-Louis IZBICKI, Professeur, Université du Havre, Le Havre

Rapporteurs

M. Bernard BONELLO, Directeur de Recherches CNRS, Université Pierre et Marie Curie, Paris
M. Vincent LAUDE, Directeur de Recherches CNRS, Institut FEMTO-ST, Besançon

Examinateurs

M. Bahram DJAFARI-ROUHANI, Professeur, Université Lille 1, Villeneuve d'Ascq
M. Jamal BOUGDIRA, Professeur, Nancy Université, Nancy
M. Badreddine ASSOUAR, Chargé de Recherches CNRS (HDR), Nancy Université, (Directeur de thèse)

Institut Jean Lamour - UMR 7198 CNRS - Nancy Université
Faculté des Sciences et Technologies, Université Henri Poincaré, BP 70239 – 54506 Vandœuvre-lès-Nancy

A la mémoire de ma grande mère, Aïcha Ressam

à mes parents, Lahcen et Khira,

à ma soeur Aliae

à mes frères Fayssal, Hamza et Younes

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier particulièrement Messieurs les membres du Jury de ma soutenance de thèse, M. Vincent Laude, M. Bernard Bonello, M. Bahram Djafari-Rouhani, M. Jean-Luis Izbicki et M. Jamal Bougdira, d'avoir accepté d'examiner et de rapporter sur mes travaux de thèse. Je les remercie également pour leurs discussions et remarques qui m'ont éclairé sur certains aspects de mes travaux et qui m'ont permis d'améliorer la qualité de ce manuscrit.

Ensuite, et quoique je ne puisse jamais le faire autant que je voudrais, je tiens à remercier vivement Badreddine Assouar, qui est bien plus qu'un directeur de thèse pour moi. En effet, non seulement il m'a prodigué temps et conseils au niveau professionnel, mais aussi, il m'a fortement étayé sur le plan personnel. Je lui dois beaucoup, notamment l'amour de la recherche scientifique, entre autres, et les moments agréables partagés ensemble, et gravés à jamais dans ma mémoire. Je lui témoigne toute ma gratitude la plus sincère et mes respects les plus profonds.

J'adresse aussi mes remerciements à tous les membres de ma famille qui m'ont tant épaulé et soutenu durant toutes mes études; une pensée spéciale est adressée à ma grande mère paternelle décédée au mois d'octobre de cette année 2011; paix sur son âme.

Je remercie tous aussi bien nos collaborateurs : Zhilin Hou, Jia-Hong Sun, Matteo Senesi, Yong Li, Massimo Ruzzene, Tsung-Tsong Wu, Driss Bria, Bahram Djafari-Rouhani, Yan Pennec et Brice Vincent, avec lesquels j'ai eu un grand plaisir à travailler et pu ainsi produire des publications parues dans des revues internationales.

Mes remerciements particuliers aussi à Karim Ramdani et Francis Causior pour leur aide précieuse quant à la mise en place des outils numériques et leur intervention dans la résolutions des problèmes relatifs aux langages de programmation que j'ai appris durant ma thèse.

Je n'oublierai pas non plus de remercier vivement les ingénieurs de la salle blanche et lithographie, Stefan Mc Murtry, Laurent Bouvot et Gwladys Lengaigne qui font un travail remarquable et qui m'ont beaucoup aidé, par leur présence permanente et leurs conseils enrichissants, pour mener à terme mon travail expérimental.

Je remercie aussi tous les membres de notre équipe 105 et ceux du département P2M entier de l'IJL, dont je cite : mon collègue de bureau Thierry Aubert, Ahmed Hamdan, Thibault Roux-Marchand, Dominique Mulot, Jean-Georges Mussot , Christian Causse, Christian Senet, Jamal Bougdira, Eloi Blampain, Bartasyte Ausrine, Ouarda Legrani, Ismail Ben Youssef, Frédéric Sarry, Denis Beyssen, Didier Rouxel, Rachid Hadji, Laurent Badie, et notre chef d'équipe Omar Elmazria; je leur dois tous l'ambiance de travail très sympathique qu'ils créent dans mon entourage.

Je m'arrête aussi un moment pour adresser une pensée spéciale au feu Professeur Patrick Alnot , fondateur de l'équipe 105 " Micro- et nanosystèmes " et mon professeur à l'Ecole des Mines de Nancy en 2007, qui nous a quittés pendant ma thèse. Qu'il repose en paix.

Un remerciement spécial est destiné à mes collègues de déjeuner, avec lesquels j'ai savouré de bons moments, à savoir : Brigitte Vigolot, Alexandre Desforges, Guillaume Mercier, Johann Lejosne, Sébastien Fontana, Emeline Remy.

Finalement, j'adresse un grand merci à M. Jean François Pierson, mon professeur à l'Ecole des Mines, qui n'a pas hésité à me conseiller et m'encourager vivement pour choisir ce parcours de thèse, ce qui m'a permis de découvrir un nouveau monde aussi vaste que passionnant qu'est la recherche scientifique.

Table des matières

Introduction générale 12

Chapitre 1: Généralités sur les cristaux phononiques (CP) et leurs applications 16

Introduction 17

I. Introduction aux cristaux phononiques : état de l'art 19
I.1. Bref historique et contexte 19
I.2. Propagation des ondes élastiques dans les milieux périodiques 21
I.2.1. Ondes acoustiques 21
I.2.2. Cristal phononique 23
I.2.3. Structures de bandes et bandes interdites phononiques 25

II. Cristaux phononiques à résonance locale (CPRL) 27
II.1. Ouverture des bandes interdites par résonance locale (RL) 27
II.2. Propriétés des CPRL 28
II.3. Métamatériaux acoustiques 30

III. Etudes expérimentales et applications 31
III.1. Exemples de réalisations expérimentales 32
III.1.1. Mises en évidence des bandes interdites phononiques 32
III.1.2. Guidage dans les structures phononiques 35
III.2. Applications potentielles des CP 36

Conclusion 38

Références 40

Chapitre 2: Méthodes numériques pour l'étude des cristaux phononiques 46

Introduction 47

I. Equations de propagation des ondes élastiques 49
I.1. Formulation générale 49
I.1.1. Equations de mouvement 49
I.1.2. Conditions aux limites 50
I.1.2.1. Conditions aux limites libres et fixes 51
I.1.2.2. Conditions aux limites périodiques 51
I.2. Cas des systèmes isotropes finis ou semi-infinis : ondes de Lamb et de surface 52
I.3. Cas des systèmes isotropes infinis: ondes de volume 52

II. Méthodes numériques de calcul des structures de bandes, champ de déplacement et coefficient de transmission pour les cristaux phononiques 53
II.1. La méthode de décomposition en ondes planes (*Plane Wave Expanssion*) 53
II.1.1. Principe de décomposition en ondes planes 54
II.1.2. Formulation des conditions aux limites libres 58

II.1.3. Formulation indirecte des conditions aux limites libres par la technique de la "Super cellule" 59
II.1.4. Champ de déplacement et représentation dans les structures de bandes 61
II.1.5. Convergence 62
II.2. La méthode des éléments finis 64
II.2.1. Principe général 64
II.2.1.1. Formulation variationelle ou forme faible 65
II.2.1.2. Maillage, fonctions de forme et résolution 66
II.2.2. Application de la méthode FEM pour le calcul des structures de bandes et champs de déplacement 69
II.2.3. Convergence 69
II.3. La méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD) : *Finit Difference Time Domaine* 70
II.3.1. Principe général 71
II.3.2. Calcul de structure de bandes 71
II.3.3. Calcul du coefficient de transmission 72
II.3.3.1. Domaines absorbants (*Perfectly Matched Layer* : PML) 73
II.3.3.2. Coefficient de transmission 74
II.4. Bref descriptif du principe de la méthode de décomposition en ondelettes 74

Conclusion 75

Références 77

Chapitre 3 : Ondes évanescentes dans les cristaux phononiques ... 80

Introduction 81

I. Calcul des modes évanescents par la méthode PWE 83
I.1. Ondes évanescentes 83
I.2. Calcul des modes évanescents par décomposition en ondes planes 84
I.3. Structure phononique en plaque 84
I.4. La formulation EPWE 85

II. Structures de bandes évanescentes pour les systèmes en plaque : ondes de Lamb .. 91
II.1. Cristaux phononiques à ondes de Lamb 91
II.2. Structures de bandes des ondes évanescentes 92
II.2.1. Plaque phononique en air/silicium 92
II.2.1.1. Structure de bandes complexes 92
II.2.1.2. Analyse de la structure de bandes complexes 94
II.2.2. Plaque phononique en or/époxy 97

Conclusion 98

Références 100

Chapitre 4 : Etudes théorique et expérimentale des Cristaux Phononiques à Résonance Locale (CPRL) en plaque 102

Introduction 103

I. Structures à RL formées de cylindres arrangés sur une plaque 106
I.1. Configurations des structures d'étude 107
I.2. Choix des matériaux 108

I.3. Modélisations par éléments finis sous Comsol Multiphysics 109
I.3.1. Modèle numérique 109
I.3.2. Implémentation des équations 109
I.3.3. Conditions aux limites (CL) 110
I.3.4. Maillage et convergence 111
I.3.5. Calcul de la structure de bandes et du champ de déplacement 113
I.4. Structures de bandes CPLR : cylindre simple sur plaque 114
I.4.1. Effet du rayon du cylindre sur la bande interdite 115
I.4.2. Effet de l'épaisseur du cylindre sur la bande interdite 117
I.4.3. Le modèle de l'oscillateur harmonique (" *Spring mass model* ") 119
I.5. Structures de bandes du système à cylindres « composites » 121
I.6. Discussion et conclusion 126

II. Etude expérimentale 127
II.1. Fabrication des échantillons 128
II.1.1. Choix des matériaux 129
II.1.2. Fabrication des échantillons 129
II.2. Mesure des propriétés élastiques 129
II.2.1. Mesure de la vitesse longitudinale par spectroscopie Brillouin 130
II.2.2. Autre mesure de la vitesse longitudinale 133
II.3. Implémentation des paramètres physiques mesurés dans le modèle numérique 135
II.4. Caractérisation expérimentale 137
II.4.1. Principe des mesures par SLDV 137
II.4.2. Banc de mesure SLDV 138
II.4.3. Résultats et discussion 139

Conclusion 143

Références 145

Chapitre 5 : Guidage des ondes de Lamb dans les CPRL : régimes sonique et hypersonique 146

Introduction 147

I. Transport et guidage dans le régime sonique 149
I.1. Confinement des ondes de Lamb dans une plaque phononique à RL (cas du cylindre simple) 149
I.1.1. Présentation de la structure à défaut linéaire 150
I.1.2. Modèle théorique : technique de la "super cellule" 150
I.1.3. Résultats et discussion 151
I.1.3.1. Structures de bandes et modes guidés 153
I.1.3.2. Champs de déplacement 154
I.1.4. Effet de la largeur du guide d'ondes 156
I.2. Transmission 158
I.2.1. Modèle de calcul 158
I.2.2. Transmission dans le guide d'onde 159
I.3. Confinement et guidage dans un guide coudé 160
I.4. Conclusion 161

II. Transport et guidage dans le régime hypersonique 161
II.1. Modèle de la structure étudiée 162
II.2. Résultats et discussion 163

II.2.1. Préambule 163
II.2.2. Effet des paramètres géométriques sur la bande interdite 164
II.2.3. Autre propriété physique potentielle 167
II.2.4. Guidage des ondes de Lamb en régime hypersonique 169

Conclusion 171

Références 173

Chapitre 6 : Transport et guidage des ondes acoustiques de surface (SAW) dans les CPRL 174

Introduction 175

I. Propagation des ondes acoustiques de surface dans les CPRL 177
I.1. Modèle théorique 177
I.1.1. Modèle de la structure étudiée 177
I.1.2. Cône du son 179
I.1.3. Convergence des modes de surface 180
I.2. Structures de bandes et bandes interdites 181
I.3. Guidage des ondes de surface dans les CPRL 187
I.3.1. Modèle théorique (super cellule) 188
I.3.2. Résultats : structures de bandes et modes de défaut 188
I.4. Conclusion 191

II. Approche expérimentale : CPRL hypersonique pour les ondes de surface 191
II.1. Elaboration des structures 191
II.1.1. Matériaux utilisés 191
II.1.2. Procédé de fabrication des échantillons 193
II.1.3. Résultats 194
II.2. Caractérisation des échantillons 196
II.2.1. Technique de caractérisation 196
II.2.2. Résultats et discussion 197

Conclusion 199

Références 200

Conclusion et perspectives 202

Glossaire 206

Annexes 208

Introduction générale

L'environnement tout entier de l'Homme, allant des galaxies, et peut-être au-delà, jusqu'à l'atome, et bien en deçà, regorge de systèmes et phénomènes périodiques dont il profite ou subit l'influence. Ceux-ci peuvent être matériels ou non, et incarnent l'ordre dans la nature. Si la plupart d'entre eux sont naturels, d'autres sont par contre l'œuvre pure du génie et de l'imagination de l'Homme. En effet, fasciné par tout ce qui est périodique autour de lui, et mû par le désir de l'exploiter à ses fins, l'Homme a toujours mené des études pour en cerner le comportement et pouvoir ainsi orienter en conséquence son intervention.

Parmi les sujets qui ont tant suscité la convoitise et l'intérêt des scientifiques, on cite la cristallographie. Ce sont les recherches sur l'arrangement périodique des atomes, expliquant l'essentiel des différentes propriétés physico-chimiques des matériaux, qui ont permis d'asseoir les bases de la physique de l'état solide. Le changement des bandes d'énergie électronique par la disposition des atomes, résultant de la diffraction des ondes électroniques par un cristal, constitue un des axes impliquant directement la propriété de périodicité. Cette dernière peut doter le cristal de la capacité de prohiber des états d'énergie aux électrons (réflexion de Bragg), d'où la naissance des notions de *structure de bandes* et *bandes interdites*. Ainsi, partant des résultats de la physique de l'état solide, la fin des années 80 a connu l'émergence des *cristaux photoniques*. Ces derniers sont constitués d'un arrangement périodique de matériaux ayant des propriétés diélectriques différentes, constituant de la sorte un milieu dispersif aux ondes électromagnétiques. Dans ce cas, on parle aussi de structure de bandes photoniques, alors qu'une bande interdite consiste en un intervalle de fréquences où l'onde électromagnétique ne peut pas se propager dans le cristal photonique. Ce comportement de "barrière" photonique a doté les scientifiques d'un nouvel outil efficace pour le contrôle des ondes électromagnétiques.

Par ailleurs et dans ce même ordre d'idées, les scientifiques ont pu élaborer ce qu'on appelle aujourd'hui les *cristaux phononiques*, milieux dispersifs pour les ondes acoustiques ou élastiques. Ces cristaux sont des structures élastiquement périodiques, constituées d'au moins deux matériaux aux propriétés élastiques différentes. La passion des scientifiques aux cristaux phononiques est essentiellement due à leur remarquable propriété de présence d'une bande interdite pour les ondes acoustiques ou élastiques, à l'instar des cas électronique et photonique. A partir de l'an 2000, un nouveau rebondissement touche la classe des cristaux phononiques avec l'apparition d'une nouvelle catégorie de milieux dotés de comportements physiques

inhabituels. En effet, la composition et la configuration de ces structures phononiques leur confère la capacité d'empêcher la propagation d'ondes ayant des longueurs d'ondes largement supérieures à la périodicité de la structure. L'origine de cette manifestation réside dans le fait que cette dernière est dotée de résonateurs qui peuvent vibrer localement à de très basses fréquences. Par ailleurs, ce type de structure particulière peut manifester dans sa globalité un comportement élastique inverse en se dotant de constante élastique et de masse effectives négatives à certaines de ses fréquences de résonance. Le mécanisme moteur de ces comportements est ainsi appelé *résonance locale*, d'où le nom de *cristaux phononiques à résonance locale*, qui ont défini en partie une nouvelle classe de matériaux dits métamatériaux acoustiques.

Compte tenu de l'attrait des cristaux phononiques pour leur capacité d'empêcher la propagation des ondes élastiques pouvant ainsi donner lieu à des applications nouvelles d'une part, et en se basant sur des activités développées jusqu'alors dans notre laboratoire (LPMIA - IJL à partir de 2009) concernant la propagation des ondes élastiques dans les structures homogènes d'autre part, la thématique phononique y a émergé en 2006. Ceci a été suivi à partir de 2008 par la présente thèse qui constitue donc la première sur l'activité phononique à l'IJL.

Dans le cadre de la présente thèse, nous nous sommes intéressés dans un premier temps à l'étude des cristaux phononiques pour des applications en basses fréquences (régime sonique). Les structures les mieux adaptées pour ce genre d'applications étant les cristaux phononiques à résonance locale, ou plus largement les métamatériaux acoustiques. Notre objectif s'est donc orienté vers la conception de nouvelles structures qui pourraient permettre une meilleure compréhension du mécanisme d'action de la résonance locale dans la création de la bande interdite, mais aussi par lesquelles on pourrait contrôler et mettre en évidence expérimentalement ladite bande interdite. A l'issue des résultats de nos études en basses fréquences, nous avons été amenés dans un deuxième temps à explorer la possibilité de créer une structure phononique à résonance locale opérant dans le régime hypersonique, et ce en vue d'en étendre le champ d'application aux hautes fréquences.

S'agissant du plan de présentation du présent manuscrit, le premier chapitre retrace l'émergence des cristaux phononiques jusqu'à l'apparition des métamatériaux acoustiques. Nous y avons repris une synthèse succincte des travaux de recherches antérieurs, de façon non exhaustive certes, mais en guise de points d'ancrage et de références concernant les principales découvertes théoriques et expérimentales relatives à la propagation des ondes acoustiques/élastiques dans ces structures périodiques particulières.

Le second chapitre sera consacré quant à lui à une présentation détaillée des principales méthodes de calcul numérique utilisées pour les prédictions des comportements vibratoires et dispersifs des cristaux phononiques, dont notamment la décomposition en ondes planes, appelée PWE (de son appellation en anglais *plane wave expansion*). Cette méthode est la plus utilisée par les scientifiques pour le calcul des structures de bandes photoniques et phononiques.

Dans le troisième chapitre, nous avons repris et transformé ladite méthode PWE afin d'étudier le comportement des ondes évanescentes au voisinage des bandes interdites dans un cristal phononique bidimensionnel en plaque. Nous avons donc développé un modèle numérique permettant de simuler les structures de bandes complexes pour des structures fluide/solide et solide/solide.

Notre intérêt s'est par ailleurs tourné vers l'étude de nouvelles structures phononiques à résonance locale. Ainsi, le quatrième chapitre de ce manuscrit abordera les études théoriques relatives à l'ouverture des bandes interdites dans le régime sonique au moyen d'un cristal phononique à résonance locale en plaque. Ensuite, nous procéderons à l’étude expérimentale de la structure proposée en traitant l'aspect "matériaux" et l'aspect "caractérisation acoustique" pour la mise en évidence des bandes interdites ouvertes par résonance locale.

Une première étude de guidage des ondes élastiques dans ce type de cristal est entamée dans le cinquième chapitre. Les résultats obtenus dans le régime sonique nous ont conduits à explorer la possibilité de les reproduire dans le régime hypersonique. Nous exposerons dans la deuxième partie de ce chapitre les résultats obtenus moyennant une nouvelle structure phononique en plaque.

Enfin, le sixième chapitre du manuscrit portera sur l'étude d'un nouveau cristal phononique permettant l'ouverture de bandes interdites pour les ondes acoustiques de surface (SAW) dans le régime hypersonique par le mécanisme de résonance locale. Une étude de guidage des ondes de surface dans cette nouvelle structure a révélé la possibilité d'élargir le champ d'application des cristaux phononiques à résonance locale pour des finalités concernant le filtrage et le démultiplexage des ondes acoustiques/élastiques.

Chapitre 1

Généralités sur les cristaux phononiques (CP) et leurs applications

Introduction

Durant ces vingt dernières années, la propagation des ondes acoustiques/élastiques dans de nouvelles structures artificielles élastiquement périodiques, appelés cristaux phononiques (CP), a suscité un intérêt croissant et des progrès importants. Ceci de par la "nouvelle physique" liée à la présence plutôt de trois modes propagatifs acoustiques au lieu de deux dans les cristaux photoniques, et compte tenu des multiples applications potentielles auxquelles ils peuvent donner lieu. Les CP sont des milieux "composites", constitués d'un arrangement périodique de matériaux ayant des propriétés élastiques et/ou des densités différentes. Les nombreuses études menées sur les CP se sont soldées par la mise en évidence de plusieurs de leurs propriétés acoustiques remarquables. Ces dernières résultent de leur caractère dispersif particulier aux ondes acoustiques/élastiques, qui dépend fortement du choix des matériaux constituant le cristal ainsi que son "design" et sa conception, c'est-à-dire l'agencement et l'espacement entre ses éléments constitutifs. La principale propriété de ces milieux périodiques, qui a tant attiré les chercheurs, est la possibilité d'existence d'intervalles de fréquences où le CP se comporte comme une barrière pour les ondes acoustiques/élastiques. Ces intervalles de fréquence sont appelés bandes interdites phononiques, par analogie avec les bandes interdites des électrons dans les semi-conducteurs, ou encore celles des cristaux photoniques.

La plupart des travaux consacrés aux effets dispersifs dans les CP sont de nature théorique et se basent sur différents outils de simulations numériques[15-53] complexes. Ceci a permis aux chercheurs de couvrir un large éventail de systèmes phononiques, et de cerner leur comportement physique. La persévérance de la communauté scientifique a même conduit à la conception de nouvelles structures qui manifestent des comportements physiques sortant de l'ordinaire, et qui forment une nouvelle classe de matériaux appelés "métamatériaux acoustiques".

Ce chapitre constitue une présentation succincte et générale sur quelques exemples des principaux CP étudiés par les chercheurs, avec l’ensemble de leurs caractéristiques acoustiques. La première partie sera consacrée à la définition générale d'un CP avec les différents types de structures étudiées dans la littérature suivant le type d'ondes qui s’y propagent (Lamb, SAW, volume). Nous présenterons aussi des travaux réalisés concernant le calcul des structures de bandes qui décrivent les comportements vibratoires observés dans un cristal phononique lors de son interaction avec une onde acoustique / élastique. La deuxième

partie de ce chapitre sera consacrée à des structures phononiques découvertes ces dix dernières années et présentant des comportements dispersifs particuliers. Ces structures peuvent constituer des barrières phononiques (soniques) en basses fréquences grâce au phénomène de résonance locale (RL). Elles sont appelées cristaux phononiques à résonance locale (CPRL). Cette nouvelle génération de CP aux propriétés particulières fait partie de la classe des métamatériaux acoustiques. Enfin, nous terminerons ce chapitre par une synthèse des études expérimentales menées jusqu'ici sur les CP, avec les différents champs d'applications potentielles. La liste des travaux que nous présenterons dans ce chapitre n'est pas exhaustive, certes, mais elle mentionnera l'essentiel des résultats de quelques travaux menés sur les propriétés des CP.

I. Introduction aux cristaux phononiques : état de l'art

I.1. Bref historique et contexte

Les études relatives à la propagation des ondes électromagnétiques dans les structures périodiques ont commencé à la fin des années 40 et ont abouti en 1990 avec la conception du premier des cristaux photoniques. Ces derniers sont des structures périodiques de matériaux diélectriques constituant des milieux dispersifs pour les ondes électromagnétiques. En 1987, les travaux de E. Yablonovitch[1] et S. John[2] ont montré que ces systèmes peuvent présenter, dans certains cas, une ou plusieurs bandes de fréquences où les ondes électromagnétiques sont complètement réfléchies par le cristal. Ces domaines fréquentiels sont appelés bandes interdites photoniques. Depuis ces premiers résultats, les travaux sur les structures périodiques photoniques se sont multipliés, mettant en évidence d'autres propriétés dispersives remarquables, avec diverses applications dans les domaines de l'optique ondulatoire, l'électronique et l'optoélectronique[3-12].

S'inspirant des structures photoniques, les scientifiques ont inventé une nouvelle classe de structures périodiques, appelées cristaux phononiques (PC), faits de matériaux aux propriétés élastiques et/ou densités différentes, constituant ainsi des milieux dispersifs pour les ondes acoustiques ou élastiques. L'année 1988 a connu la publication des travaux de Tamura *et al*[13] qui sont les premiers à avoir étudié la propagation de phonons dans des super-réseaux. Ils ont pu théoriquement montrer la possibilité d'une réflexion totale de l'onde acoustique par un super réseau unidimensionnel conçu avec une succession de deux matériaux différents. En 1993, Sigalas et Economou[14, 15] ainsi que Kushwaha *et al*[16, 17] ont mis en évidence la présence d'une bande interdite pour les ondes acoustiques dans une structure élastiquement périodique bidimensionnelle. Depuis lors, de nombreux travaux théoriques sur les CP ont suivi durant les deux dernières décennies, traitant différents systèmes, en utilisant une multitude de méthodes de simulations numériques. L'émergence des outils de calcul numérique dans les 30 dernières années a permis aux chercheurs d'explorer les propriétés des CP et partant diversifier les études sur ces structures. Concernant l'aspect expérimental, celui-ci n'a pas connu un développement similaire à celui de son équivalent théorique, et ce faute de moyens qu'il fallait inventer ou mettre en œuvre afin de bien mener ce genre d'études.

S'agissant du volet théorique, la méthode de décomposition en ondes planes appelée "PWE" (acronyme de son appellation en anglais *Plane Wave Expansion*) a été l'une des premières à être utilisée par les scientifiques dans les années 90 pour le calcul des structures

de bandes des CP, et continue d'être utilisée jusqu'à nos jours[15-38], ceci grâce à son exploitation du caractère périodique des CP dans la décomposition des solutions recherchées. La méthode FDTD *(Finite Difference Time Domain)*, très fréquente en photonique[39-41], a été utilisée en 2000 par Sigalas et Garcia[42] afin de déterminer le coefficient de transmission des ondes acoustiques dans une structure phononique tridimensionnelle. Cette méthode a montré son efficacité tant pour le calcul du coefficient de transmission que pour celui des structures de bandes[43-48]. D'autres algorithmes ont aussi vu le jour et s'adaptent de manière plus efficace à la nature des structures phononiques étudiés[49, 50]. Enfin, la méthode des éléments finis (FEM : *Finite Elements Method*)[51-53] a commencé à être utilisée pour calculer les courbes de dispersion ainsi que la distribution du champ de déplacement issu de l'interaction des ondes acoustiques avec le CP. Nous aurons l'occasion de décrire plus en détail quelques unes de ces méthodes dans le chapitre 2 de ce manuscrit.

Ces méthodes de simulation ont permis non seulement d'explorer un large éventail de structures phononiques plus complexes, mais aussi de découvrir et mettre en évidence de nouvelles propriétés remarquables qui vont au-delà de la création des bandes interdites. En effet, Page *et al*[56] et Schriemer *et al*[57] ont démontré la possibilité d'avoir un ralentissement de la vitesse de groupe de l'onde acoustique dans un milieu phononique très dispersif. En 1998, Sigalas[21, 22] a montré qu'un défaut de structure dans le CP permet de générer la création d'états d'ondes localisés dans la bande interdite, ce qui lui a permis de mettre en place un premier guide d'ondes linéaire pour les ondes élastiques utilisant un CP[22]. D'autres études ont par la suite exploité les bandes interdites phononiques pour explorer le confinement des ondes élastiques et leur guidage dans des structures phononiques présentant un défaut ponctuel, linéaire ou coudé [28, 29, 33, 35, 44-48, 52-54]. Qui *et al*[55] ont montré d'un autre coté que les CP peuvent présenter, à certaines fréquences, des directions préférentielles de propagation des ondes acoustiques.

Par ailleurs, de nouvelles structures phononiques artificielles ont été conçues et ont fait l'objet d'études sur la propagation et la diffusion d'ondes acoustiques à larges longueurs d'onde par rapport à la périodicité des structures. En 2000, Liu *et al*[68] ont en effet réalisé un nouveau CP, appelé cristal phononique à résonance locale (CPRL), capable d'ouvrir des bandes interdites dans le régime sonique en utilisant une périodicité largement inférieure aux longueurs d'ondes qui s'y propagent. Ils ont montré que leur CP se comporte comme un milieu ayant une constante élastique effective négative, ce qui l'intègre dans la catégorie des métamatériaux acoustiques. Dès lors, plusieurs travaux ont vu le jour et se sont intéressés à l'étude des métamatériaux acoustiques ayant une densité effective et/ou une constante

élastique effective négatives[69-76]. D'autres travaux ont permis la découverte de nouveaux phénomènes comme, par exemple, la réfraction négative[105, 58-67] des ondes acoustiques par un CP, mise en évidence en 2000 par Pendry[105].

I.2. Propagation des ondes élastiques dans les milieux périodiques

Avant d'entamer notre description des CP et leurs comportements dispersifs aux ondes acoustiques, nous allons présenter quelques généralités sur les caractéristiques principales des différents types d'ondes élastiques relatives aux supports matériels dans lesquels elles peuvent se propager.

I.2.1. Ondes acoustiques

La propagation d'une onde acoustique se traduit par une variation temporelle d'une série de déformations dans le milieu support de la propagation. Ce comportement vibratoire est dû aux forces d'inertie et celles de rappel élastique qui concourent entre elles en agissant sur les particules du milieu. Ainsi, les caractéristiques d'une onde acoustique dépendent-elles des propriétés élastiques et de la densité du support matériel dans lequel elle se propage.
Sachant qu'un matériau adopte un comportement élastique spécifique suivant la direction des déformations qu'il subit par rapport à son orientation et sa structure cristallographiques, les propriétés de l'onde seront déterminées par sa direction de propagation et sa polarisation. Dans un milieu homogène isotrope par exemple, si l'onde élastique se propage sans rencontrer d'obstacle, elle garde ses propriétés physiques tout au long de son parcours. Autrement dit, si les dimensions de ce milieu sont supposées infinies dans toutes les directions de l'espace, comparées aux distances parcourues par le déplacement de l'onde, celle-ci pourra alors se propager dans le volume du milieu. Ses propriétés physiques ne dépendront que de sa polarisation quelle que soit la direction de propagation. On parle alors d'une onde de volume. Dans le cas des milieux solides isotropes, la vitesse des ondes à polarisation longitudinale est supérieure à celle des ondes à polarisation transverse.

Les ondes acoustiques/élastiques peuvent aussi se propager le long d'une surface libre délimitant un milieu élastique. On parle alors d'onde acoustique de surface (*Surface acoustic wave* (SAW)). Lord Rayleigh[77] était le premier à mettre en évidence l'existence des ondes de surface en 1885. Il remarqua alors que les ondes issues des tremblements de terre peuvent aussi se propager parallèlement à la surface de la terre sous forme d'ondes localisées en surface avec une profondeur de pénétration de l'ordre d'une longueur d'onde. Ces ondes de surface se caractérisent par une décroissance exponentielle de leurs champs de déplacement

depuis la surface vers la profondeur. Elles ont une polarisation elliptique qui résulte de la superposition d'un mode longitudinal et d'un mode transverse, déphasés d'un quart de longueur d'onde (polarisation elliptique). L'intérêt porté aux ondes acoustiques de surface, connues aussi sous le nom d'ondes de Rayleigh, s'est accru à partir des années soixante et soixante-dix pour la fabrication de dispositifs à ondes de surface. Ainsi, de multiples applications qui concernent les domaines de télécommunication, les radars, le filtrage, les capteurs[78] etc ont pu voir le jour.

Finalement, le comportement des ondes acoustiques change au voisinage des frontières du milieu dans lequel elles se propagent, surtout lorsque les dimensions de celui-ci deviennent proches de la longueur d'onde. En 1916, Horace Lamb a exploré les propriétés des ondes élastiques dans une plaque isotrope à frontières libres. Une plaque solide se comporte comme un guide d'ondes élastiques dans les directions parallèles à ses surfaces libres. Les ondes guidées au niveau de la plaque sont la résultante d'un couplage entre les ondes de surface guidées sur chaque coté de la plaque quand la longueur d'onde est du même ordre de grandeur que l'épaisseur de la plaque en question[79]. Le caractère dispersif de ces ondes dans la plaque, appelées ondes de Lamb, est très complexe, mais nous pouvons en gros distinguer entre deux catégories de modes. D'abord, les modes ayant une distribution de champ de déplacement symétrique, puis ceux avec une distribution antisymétrique par rapport au plan parallèle aux surfaces libres de la plaque et coupant celle-ci au milieu (Figure 1.1). Les modes symétriques ont un champ de déplacement longitudinal dominant, alors que les antisymétriques ont une polarisation transverse dominante.

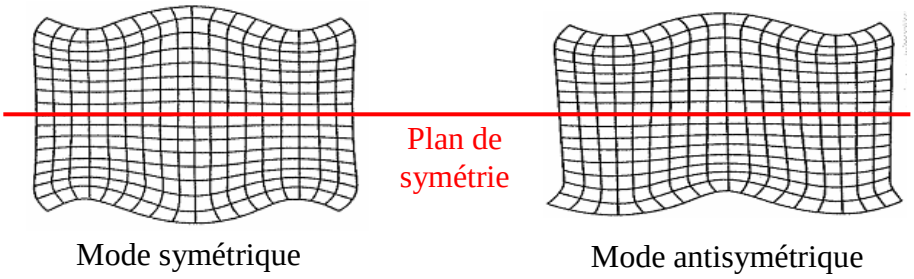


Figure 1.1 : Modes de Lamb symétrique et antisymétrique dans une plaque d'épaisseur finie[79]

La plupart des études menées sur les CP se sont intéressées aux interactions des ondes de volume, de surface ou de Lamb avec la périodicité des structures phononiques, ceci en fabriquant des structures infinies, semi infinies ou sous forme de plaques à épaisseur finie.

I.2.2. Cristal phononique

Un cristal phononique est une structure périodique de matériaux ayant des propriétés élastiques différentes. La figure 1.2 montre quelques exemples de CP tridimensionnels (3D) ou bidimensionnels (2D) qui ont fait l'objet de la plupart des études menées pendant ces 20 dernières années.

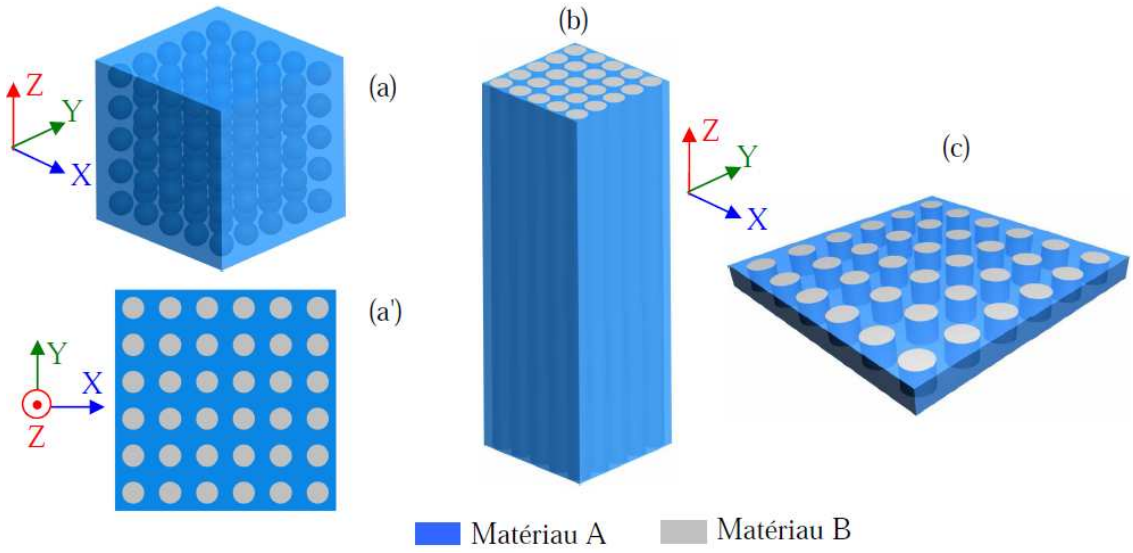


Figure 1.2 : Cristaux phononiques constitués de répétitions périodiques d'inclusions de matériau B dans une matrice en matériau A. (a) CP tridimensionnel, (a') CP bidimensionnel à ondes de volume, (b) CP à ondes de surface et (c) CP à ondes de Lamb

Les CP peuvent se présenter sous différents aspects d'arrangement périodique avec des éléments de périodicité de différentes formes. La conception du CP dépend du type d'ondes auxquelles on s'intéresse au niveau de l'interaction avec le milieu phononique. Les premières structures phononiques bidimensionnelles étudiées étaient semblables à celle présentée dans la figure 1.2(a') pour les ondes de volume. Ces structures sont périodiques dans les deux direction X et Y et les inclusions sont infiniment longues dans la direction Z. Sigalas et Economou[14, 15] ainsi que Kushwaha *et al*[16, 17] ont été les premiers à étudier en 1993 ce type de CP ayant des inclusions de forme cylindrique. Dès lors, beaucoup d'études ont traité du même type de CP constitué de différents milieux. Elles ont concerné, par exemple, des inclusions solides dans une matrice solide[15-18, 20-23, 28, 36, 43-47, 54], ou encore des inclusions solides dans une matrice fluide[19, 35, 38, 55, 58, 63-66]. Ce type de structures bidimensionnelles ont été les plus étudiées, notamment en matière de mise en évidence de nouvelles propriétés dispersives, ceci grâce à l'avantage qu'elles offrent en termes d'étude théorique, à savoir la simplicité de

résolution du système d'équations de propagation d'ondes, qui deviennent moins couplées dans ce cas. La propagation des ondes de volume dans les CP tridimensionnels a aussi fait l'objet de plusieurs travaux[49, 54, 60, 68-70]. Ces systèmes phononiques sont semblables à celui de la figure 1.2(a) avec des arrangements en configuration cubique simple ou cubique à faces centrées d'inclusions dans une matrice solide ou fluide.

Par ailleurs, d'autres travaux ont porté sur les dispersions des ondes de surface dans des structures semblables à celle de la figure I.2.(b)[24, 27, 30-32 48, 52, 53, 59]. Ce type de structures sont considérées semi infinies, c'est-à-dire qu'elles présentent une surface libre dans la direction Z positif (figure 1.2.(b)) et sont infinies dans la direction opposée (Z négatif). Dans ce cas, les deux types d'ondes, de volume et de surface, interviennent dans ces structures et leur séparation peut se faire parfois par quelques techniques : cône du son, distribution des champs de déplacement, milieux absorbants pour les ondes de volume.

Les CP sous forme de plaque finie (figure I.2.(c)) ont aussi fait l'objet de plusieurs études en vue d'explorer le comportement des ondes de Lamb dans un milieu élastiquement périodique[20, 25, 33, 34, 51, 52]. Sigalas et Economou[20] ont étudié en 1994 un CP bidimensionnel à base d'une plaque d'épaisseur finie. Ils ont ainsi montré qu'en jouant sur l'épaisseur de la plaque, ils peuvent créer une bande interdite complète pour les ondes de Lamb. Depuis lors, différents travaux avaient porté sur ces structures avec la mise en place de nouveaux moyens de calcul numérique[33, 34, 51, 52, 82]. D'autres études sur les structures phononiques à ondes de Lamb ont aussi vu le jour en adoptant des arrangements périodiques de cylindres disposés sur une plaque[53, 80, 81] (voir figure 1.3).

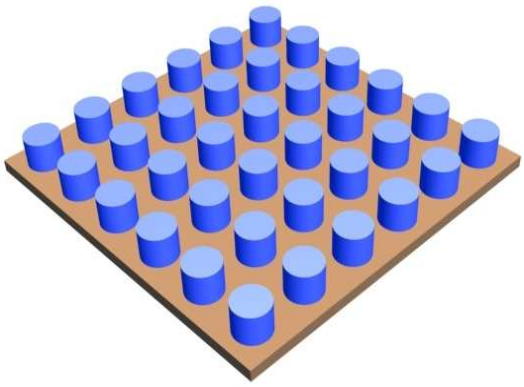


Figure 1.3 : CP à ondes de Lamb constitué d'un arrangement périodique de cylindres disposés sur une plaque.

Toutes ces différentes configurations de CP ont fasciné et fascinent encore les scientifiques par leur comportement dispersif qui leur permet d'avoir plusieurs propriétés remarquables, dont l'ouverture de bandes interdites phononiques.

I.2.3. Structures de bandes et bandes interdites phononiques

Dans les études qui traitent de la propagation des ondes dans un milieu quelconque, l'objectif est de cerner le comportement de celles-ci en termes de relation entre la fréquence et le vecteur d'onde en fonction des autres paramètres liés au milieu de la propagation. Cette relation est appelée relation de dispersion. Dans un milieu élastique homogène, par exemple, cette relation peut être simple et linéaire : $\omega(k)=V.k$, V représentant la vitesse de propagation de l'onde dans le milieu, qui dépend directement des propriétés élastiques et de la densité de ce dernier; dans ce cas, nous ne sommes pas en présence de dispersion de l'onde. Cette dernière a lieu quand la relation entre la fréquence et le vecteur d'onde devient plus complexe, où la vitesse de phase et celle de groupe peuvent être distinguées.

Afin de comprendre les comportements des ondes élastiques/acoustiques dans les milieux périodiques, les chercheurs se sont depuis toujours intéressés à calculer les relations de dispersion, qu'ils représentent sous forme de courbes reliant la fréquence au vecteur d'onde suivant différentes directions de propagation. Cette forme de visualisation du comportement dispersif est appelée **structure de bandes phononique**. En effet, en exploitant la périodicité élastique du CP, le théorème de Bloch précise que chaque onde solution qui se propage dans le CP, est le produit d'une onde plane et d'une fonction périodique. Le calcul de la structure de bande se limite donc à une zone réduite de l'espace des vecteurs d'onde : une cellule de périodicité appelée zone de Brillouin comme dans le cas des états d'énergies électroniques dans une structure cristalline périodique d'un matériau. Ainsi, la structure de bandes phononique présente les différents modes de propagation possibles des ondes élastiques qui diffusent dans le CP.

La principale propriété remarquable qu'offrent les CP est la possibilité de création de bandes interdites au niveau de la structure de bande. Une bande interdite se présente dans ce cas sous forme d'un intervalle de fréquences où aucun lien n'est défini entre la fréquence et le vecteur d'onde. La figure 1.4 présente un exemple[34] de structure de bande phononique pour un CP bidimensionnel à ondes de Lamb (semblable à celui de la figure 1.2.(c)) constitué d'un arrangement carré périodique d'inclusions cylindriques en or dans une plaque d'époxy d'épaisseur e=0.25a, a étant la périodicité de la structure. Cette structure de bande est calculée

puis représentée suivant les trois directions de propagation ΓX, XM et MΓ, axes principaux de symétrie de la première zone de Brillouin, déterminés par le vecteur d'onde $\vec{k}$.

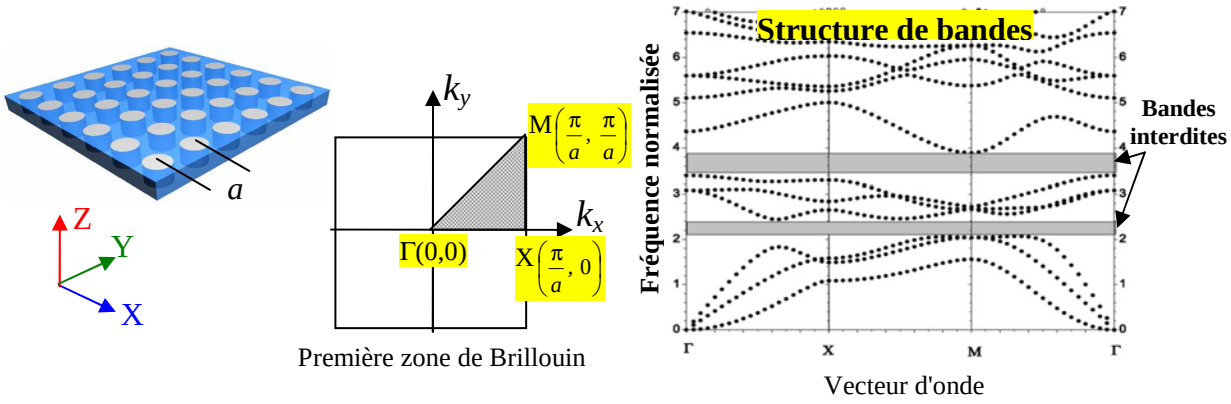


Figure 1.4 : Exemple de calcul de structure de bandes aux axes principaux de symétrie de la première zone de Brillouin pour un CP à ondes de Lamb[34].

Les premières études menées sur les systèmes phononiques ont permis de mettre en évidence le mécanisme responsable de la création des bandes interdites, à savoir la diffusion de Bragg. Tamura *et al*[13] étaient parmi les premiers à étudier en détail le mécanisme de réflexion de Bragg dans un CP unidimensionnel. Ils ont ainsi montré la possibilité d'avoir un CP se comportant comme une barrière pour les modes longitudinaux et transverses dans des intervalles de fréquences bien déterminés dans toute la première zone irréductible de Brillouin. De plus, ils ont mis en évidence une forte atténuation des ondes à ces intervalles lors de leur transmission dans le CP. Par la suite, d'innombrables travaux se sont attelés à étudier l'ouverture de bandes interdites par le mécanisme de Bragg dans différents systèmes phononiques, tout en explorant l'influence des paramètres géométriques et physiques sur le comportement de ces bandes prohibant toute propagation[14-38]. Ainsi, et de manière générale, il est bien établi que ce type de bandes interdites dépend fortement de la périodicité et de la symétrie du CP. En outre, les ondes ayant leur fréquence dans la bande interdite ont une longueur d'onde de l'ordre de la périodicité de la structure phononique. Enfin, le CP adopte le même comportement dispersif indépendamment de sa périodicité, et les fréquences d'ouverture des bandes interdites sont inversement proportionnelles à la périodicité de la structure phononique.

Cependant, et dans certains CP spécifiques, la création de la bande interdite peut être causée par un tout autre mécanisme qui a été mis en évidence par Liu *et al*[68] en 2000, à savoir le mécanisme de la résonance locale. Ces systèmes périodiques sont dans ce cas appelés

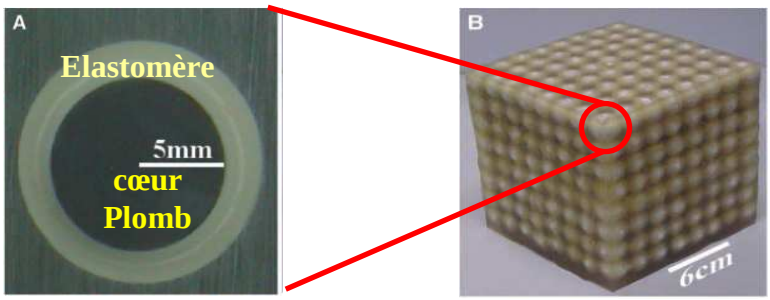
cristaux phononiques à résonance locale (CPRL). La deuxième partie de ce chapitre y sera consacrée.

II. Cristaux phononiques à résonance locale (CPRL)

Comme évoqué auparavant, en 2000, Liu *et al*[68] ont mis en œuvre une nouvelle structure phononique aux propriétés dispersives qui sortent de l'ordinaire, comparée aux autres CP classiques basés sur le mécanisme de Bragg. En effet, grâce à leur structure périodique, ils ont montré qu'une bande interdite peut exister pour des ondes ayant une longueur d'onde largement supérieure à la périodicité du cristal, lequel comportement est dû au phénomène de résonance locale. L'étude entamée par Liu *et al*[68] a été le premier pas réel vers la création d'une nouvelle classe de matériaux acoustiques aux comportements inhabituels, appelés métamatériaux acoustiques.

II.1. Ouverture des bandes interdites par résonance locale (RL)

Dans le CP conçu par Liu *et al*[68], les éléments de périodicité sont constitués de résonateurs ayant des modes de résonance propres qui se situent à de très basses fréquences en raison de l'utilisation d'un matériau très mou. Chaque résonateur est constitué d'un cœur massif en plomb enrobé par un élastomère élastiquement très mou, comparé aux autres matériaux constituant le CP. Ces résonateurs sont arrangés périodiquement suivant une structure cubique simple dans une matrice en époxy (figure 1.5).



Résonateur Cristal phononique

Figure 1.5 : (A) Résonateur sphérique constitué d'un cœur en plomb enrobé par un élastomère très mou. (B) Cristal phononique tridimensionnel à résonance locale[68].

L'ensemble élastomère-plomb se comporte comme un système de ressort lié à une masse, formant ainsi un résonateur ayant des modes de résonance propres à de très basses fréquences. Le principe d'ouverture des bandes interdites dans ce type de structures repose sur

le couplage entre les modes de résonance des résonateurs (modes localisés) et les modes de volume qui se propagent dans le CP. Lorsqu'une onde élastique se propage dans le milieu phononique avec une fréquence qui correspond à la fréquence de résonateurs, ces derniers entrent en interaction avec elle. Sous certaines conditions, ce couplage entraîne l'atténuation de l'onde. Ce mécanisme de résonance permet ainsi la création de bandes interdites localisées en très basses fréquences, là où les longueurs d'ondes dans l'époxy (la matrice) dépassent de loin la périodicité du CP. Dans la structure de la figure 1.5, Liu *et al*[68] ont pu mesurer la transmission sonique dans le cristal en utilisant une source émettrice de sons et des microphones détecteurs placés sur le cristal. Des atténuations de l'onde acoustique ont pu être détectées au niveau des bandes interdites à environ 380 et 1350Hz où la longueur d'onde des ondes longitudinales dans l'époxy compte 300 fois la périodicité de la structure (Figure 1.6).

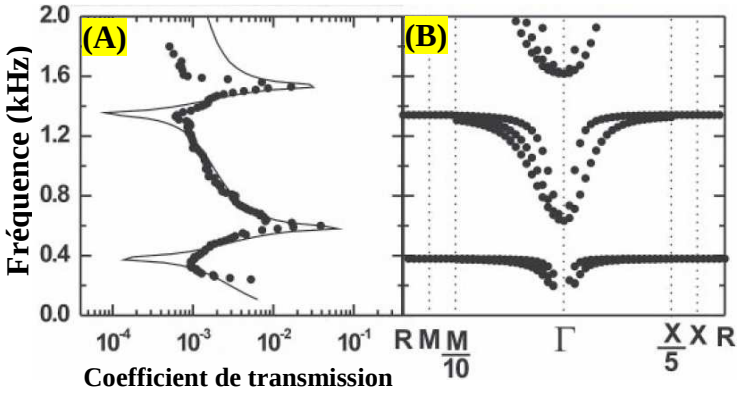


Figure 1.6 : Coefficient de transmission (A) mesuré dans le CP de la figure 1.5 ainsi que la structure de bandes calculée (B)[68]

D'autres travaux, essentiellement théoriques, ont porté ensuite sur les CPRL en élaborant d'autres structures tridimensionnelles[83-86]. De même, des systèmes bidimensionnels à base d'inclusions de cylindres infinis ont fait l'objet de plusieurs études pour la RL[87-92], sans oublier les CPRL sous forme de plaques pour les ondes de Lamb[93, 94]. L'ouverture de la bande interdite par RL a même été mise en évidence dans une structure unidimensionnelle simple par Wang *et al*[95].

II.2. Propriétés des CPRL

Depuis la mise en évidence de la possibilité d'ouverture des bandes interdites par le mécanisme de la résonance locale, les travaux sur ces structures à RL se sont multipliés, mettant en valeur leurs propriétés particulières et permettant de mieux comprendre leurs comportements vibratoires. Ainsi, d'autres travaux théoriques ont vu le jour concernant de

nouveaux CPRL constitués d'arrangements de résonateurs en configuration cubique simple ou cubique à faces centrée[83-86]. La condition d'ouverture de la bande interdite dans ce cas repose essentiellement sur un choix judicieux des matériaux constituant les résonateurs. En effet, ces derniers doivent contenir un matériau élastiquement très mou, comparé aux autres matériaux de la structure. Ainsi, dans une autre étude, Liu *et al*[84] comparent deux CP, le premier constitué de résonateurs à base de plomb enrobés d'un élastomère très mou et incorporés dans une matrice en silicium, et le deuxième à résonateurs en plomb enrobés d'un matériau aux propriétés élastiques très proches et incorporés dans la même matrice en silicium. Ils ont montré qu'avec le premier système, ils obtiennent des modes de vibration très localisés au niveau des résonateurs, ce qui génère des bandes interdites complètes aux fréquences de résonance qui sont très basses. Quant au deuxième CP, où les comportements élastiques des matériaux sont très proches, aucune résonance n'y est localisée, et la bande interdite créée est due au mécanisme de la diffusion de Bragg. De ce fait, les bandes interdites créées par le mécanisme de RL dépendent essentiellement des modes de résonance très localisés des résonateurs. Cet effet est très visible au niveau de la structure de bande des CPRL où nous pouvons remarquer la présence de modes plats (figure 1.6.(B)) dans lesquels la fréquence ne dépend pratiquement pas du vecteur d'onde. Ceci implique une vitesse de groupe nulle pour ces modes, qui caractérise leur aspect ondulatoire très localisé dans le CP.

Par ailleurs, ce type de bandes interdites ne dépendent ni de la périodicité ni de la symétrie du CP. En effet, et à titre d'exemple, nous pouvons citer les travaux de P. Sheng *et al*[97]. Ces derniers ont étudié une structure à RL semblable à celle de la figure 1.2.(a) où les résonateurs, constitués d'un cœur en plomb enrobé par un élastomère, sont arrangés de manière à ne pas respecter une quelconque périodicité. Ils ont montré que leur structure présente une atténuation d'ondes à environ 400Hz. Ce résultat a été obtenu aussi avec un CPRL semblable, mais avec un arrangement périodique en cubique simple des résonateurs. Cette indépendance de la bande interdite de la symétrie et de la périodicité est valable sous condition que les résonateurs soient suffisamment espacés entre eux pour que leurs modes de résonance n'entrent pas en interaction et éviter ainsi tout couplage en eux.

Finalement, les CPRL adoptent un comportement qui a tant attiré et attire encore les chercheurs puisqu'ils peuvent se comporter sous certaines configurations et conditions comme des milieux ayant une constante élastique et/ou une densité effectives négatives, qu'on notera respectivement k_{eff} et ρ_{eff}. Ce comportement a été souligné par Liu *et al*[68] dans leur structure présentée dans la figure 1.5, qui s'intègre donc dans la classe des métamatériaux acoustiques.

II.3. Métamatériaux acoustiques

Le nom de métamatériau acoustique est donné aux milieux dotés de propriétés élastiques hors du commun pour la propagation des ondes acoustiques ou élastiques. L'origine de ces milieux spéciaux vient de l'analogie faite avec les métamatériaux optiques pour les ondes électromagnétiques qui ont longtemps suscité l'intérêt des scientifiques. L'idée de l'existence de ce type de milieu artificiel remonte à 1968 quand Veselago a proposé un nouveau matériau ayant un indice de réfraction négatif[98].

Les métamatériaux optiques sont généralement des structures dotées de résonateurs dans leur conception, leur permettant de se comporter, sur des intervalles de fréquences bien déterminés, comme des milieux ayant une permittivité et/ou une perméabilité effectives négatives[99-102]. Dans le cas d'une négativité simultanée, on est en présence d'une "double négativité"[102]. Cette propriété confère ainsi à ces milieux des comportements remarquables menant à des effets inversés, comme la réfraction négative[103-105] qui offre la possibilité de fabrication de "superlentille"[105] ou "superprisme"[106], ou la création d'un effet Doppler inverse[107, 108]. On note cependant que la réfraction négative peut aussi être créée avec un cristal photonique sans que celui-ci présente nécessairement une "double négativité"[104].

Par analogie aux métamatériaux électromagnétiques, il est devenu évident d'explorer la possibilité de reproduire les mêmes effets remarquables pour les ondes acoustiques en inventant ce qui est appelé aujourd'hui métamatériaux acoustiques. Ces derniers sont des structures périodiques dotées de résonateurs donnant lieu à des ouvertures de bandes interdites. Ils se comportent comme des milieux ayant une constante élastique effective négative et/ou une densité effective négative aux fréquences de résonance.

Par analogie avec la "double négativité" en électromagnétisme[102], Jensen Li et C. T. Chan[71] ont démontré théoriquement la possibilité d'avoir à la fois une constante élastique et une densité effectives négatives dans un CPRL (sphères de "rubber" suspendues dans l'eau) pour des longueurs d'ondes dépassant largement la périodicité du cristal, c'est-à-dire une « double négativité » acoustique de leur structure. Cela s'explique physiquement par le fait que le milieu peut manifester un comportement élastique anormal, comme par exemple une réponse à un effort de compression par une dilatation ou un déplacement en sens inverse à l'effort exercé. Ce comportement physique est bien évidemment impossible et ne peut être naturellement intrinsèque à un milieu, contrairement au cas électromagnétique où la permittivité et la perméabilité peuvent bien être négatives. Cependant, dans les CPRL, composés de résonateurs très mous, comparés au matériau très dur de la matrice, le

raisonnement adopté pour décrire son comportement dynamique change en présence du phénomène de la résonance locale. En effet, Milton et Willis[109] montrent que le comportent d'un matériau composite, c'est-à-dire du CPRL dans notre cas, doit être défini dans le cadre d'une nouvelle loi qui remplace celle décrivant le mouvement Newtonien. Ils mettent ainsi en place une nouvelle formulation plus généralisée des équations élastodynamiques qui permettent d'analyser certains cas extrêmes, où le milieu étudié manifeste une densité effective négative aux fréquences de résonance locale. En adoptant cette approche, l'effet de « double négativité » de la densité et de la constante élastique effectives a été mis en évidence sur plusieurs CPRL conçus par des chercheurs s'intéressant aux métamatériaux acoustiques[70, 72, 73-76].

Finalement, et afin de mieux comprendre les comportements vibratoires des métamatériaux acoustiques, notamment aux fréquences de résonance, quelques études analytiques ont été menées sur des modèles simples. Ces derniers sont composés d'un agencement et groupement bien déterminés de masses et de ressorts modélisant un système à résonance locale[110-113]. Avec ce dernier, les chercheurs ont facilement pu reproduire un effet de masse effective négative aux fréquences de résonance où l'énergie élastique de l'onde est essentiellement confinée, menant à une atténuation de l'onde dans l'ensemble du système.

L'ensemble des études menées sur les CP et les métamatériaux acoustiques sont essentiellement théoriques certes, mais les chercheurs n'ont pas manqué l'occasion d'entamer un ensemble de réalisations expérimentales permettant de compléter les observations théoriques et mettre en évidence la plupart des propriétés des systèmes phononiques. La troisième partie de ce chapitre sera consacrée aux principales études expérimentales réalisées sur les PC, en vue de développer leur utilisation dans la vie quotidienne de l'Homme.

III. Etudes expérimentales et applications

Les premières études portant sur les CP entre la fin des années 80 et le début des années 90 étaient purement théoriques[13-16]. Elles ont permis d'explorer leurs propriétés dispersives pour les ondes acoustiques et prédire notamment la possibilité de présence de bandes interdites. Il était donc nécessaire d'entamer des études expérimentales afin de mettre en évidence ce comportement de "barrière" acoustique. Ceci n'était pas très évident à l'époque, compte tenu des difficultés liées non seulement à la conception du CP, mais aussi et surtout aux moyens de caractérisation fiables qu'il fallait concevoir et mettre en place. En dépit de

cela, la course vers les études expérimentales était déjà lancée dès l'apparition des premiers travaux théoriques sur les CP.

Cette partie du présent chapitre liste quelques travaux expérimentaux réalisés durant ces deux dernières décennies, non de façon exhaustive certes, mais en vue de situer les principaux axes relatifs à l'étude des structures phononiques.

III.1. Exemples de réalisations expérimentales

III.1.1. Mises en évidence des bandes interdites phononiques

En 1995, Mártinez-Sala *et al*[114] réalisent les premières études expérimentales phononiques sur une sculpture du célèbre artiste Eusebio Sempere (1923-1985), sise au centre ville de Madrid près de la Fondation Juan March. Cette sculpture est constituée d'un agencement périodique carré de tiges cylindriques en acier bien poli, ayant des hauteurs différentes, et déposées sur un support rotatif. Elle donne lieu à un bel effet visuel lorsque la lumière du soleil se réfléchit sur les barres métalliques brillantes (figure 1.7).



Figure 1.7 : Sculpture de Eusebio Sempere (1923-1985) située à Madrid[115]

En plaçant des haut-parleurs et microphones autour de la sculpture, et donc perpendiculairement aux axes des tiges métalliques, Mártinez-Sala *et al*[114] ont pu mesurer la transmission acoustique de la sculpture suivant différentes directions de propagation de l'onde par rapport à l'arrangement carré des tiges. Une forte atténuation de l'onde acoustique a été alors observée pour une fréquence de 1670Hz suivant une direction de propagation bien déterminée. Une première mise en évidence expérimentale d'une bande interdite phononique a ainsi vu le jour. D'ailleurs, des études théoriques[19, 116] ont par la suite confirmé ce résultat expérimental, appuyant ainsi le mécanisme responsable de la présence de la bande interdite, à savoir la diffusion de Bragg.

L'expérience de Mártinez-Sala *et al*[114] est certes originale puisque c'est la première en son genre, mais la forte atténuation de l'onde acoustique n'est observée que suivant une seule direction de propagation dans l'arrangement périodique de la sculpture; de plus, cette dernière n'était pas évidemment destinée à ce genre d'expérience. Il fallait attendre l'année 1998 pour que Montero de Espinosa *et al*[117] fabriquent un premier CP présentant une bande interdite complète, c'est-à-dire une forte atténuation de l'onde acoustique quelle que soit la direction de propagation. Leur structure est constituée d'un arrangement périodique de trous remplis de mercure dans une plaque d'aluminium, et a été dimensionnée afin de travailler dans la gamme fréquentielle des ultrasons. Ainsi, en utilisant des transducteurs à ultrasons capables de générer des ondes à large bande fréquentielle (0.5 à 2MHz), et grâce à un récepteur lié à un oscilloscope, la transmission de l'onde à travers le cristal a pu être mesurée suivant différentes directions de propagation. Leur étude a été faite pour différentes valeurs du taux de remplissage des cylindres de mercure dans la matrice d'aluminium, pour enfin montrer qu'une forte atténuation de l'onde est observée à 1060kHz pour un taux de remplissage de 40%. Ceci correspond à la position théorique de la bande interdite complète[117] prédite par le calcul de la structure de bande.

Depuis ces deux premiers travaux sur le comportement des CP, de nouvelles études expérimentales sur les bandes interdites ont vu le jour[118-120]. En effet, Sánchez-Pérez *et al*[118] ont conçu une structure phononique triangulaire, grâce à laquelle ils ont pu avoir un recouvrement entre les intervalles de fréquences d'atténuation de l'onde acoustique associés aux différentes directions de symétrie de la première zone de Brillouin. Cependant, leur résultat expérimental ne concorde pas avec le calcul théorique de la structure de bande, car cette dernière présente des modes "particuliers" dans la gamme d'atténuation de l'onde, qui ne peuvent pas être excités expérimentalement. Ils les ont qualifiés de modes "sourds" (*Deaf band*). Nous citons aussi le travail de Rubio *et al*[122] qui se sont particulièrement intéressés à ce type de modes. D'autres études de mise en évidence expérimentale des bandes interdites ont pu être réalisées sur des structures composites solide/solide[119, 125], solide/fluide[120, 121, 126], ou fluide/solide[124], et ont porté sur des CP bidimensionnels constitués d'inclusions cylindriques longues dans une matrice. En réalité, ce type de cristaux ne peuvent pas être infiniment périodiques et longs, mais leurs dimensions sont choisies telles qu'elles permettent une atténuation suffisante des ondes dans la gamme des fréquences de la bande interdite.

Les travaux expérimentaux menés sur les CP jusqu'ici n'ont fait qu'augmenter de plus en plus "l'appétit" des scientifiques pour leur trouver des applications potentielles comme le filtrage par exemple. En effet, avec l'émergence des dispositifs à ondes acoustiques de surface

qui interviennent dans notre vie quotidienne, notamment dans la téléphonie mobile, il est devenu évident d'explorer expérimentalement le caractère dispersif des CP pour les ondes de surface. Meseguer *et al*[123] ont été parmi les premiers a réaliser une étude théorique et expérimentale d'atténuation des ondes de surface dans deux CP bidimensionnels, l'un avec une symétrie triangulaire, et l'autre en nid d'abeilles, construits en perçant des trous cylindriques dans une couche de marbre très épaisse (160cm). En utilisant un choc à la surface de ces structures au moyen d'une bille en acier pour générer les ondes de surface, et grâce à un détecteur, ils ont pu mesurer la transmission des ondes de surface dans ces cristaux. Des atténuations de l'onde sur des intervalles de fréquences, suivant les directions de symétrie de la première zone de Brillouin, ont été mesurées, prouvant ainsi l'existence d'une bande interdite complète pour les ondes de surface. Ces résultats ont été corroborés par les calculs de structures de bandes le long de ces directions[123].

En 2005, Wu *et al*[127] ont pu étudier la propagation des ondes élastiques de surface dans un CP bidimensionnel, conçu à une échelle micrométrique (périodicité de 10 µm) et constitué d'un arrangement carré de trous d'air dans un substrat de silicium. La fabrication de cette structure a été réalisée grâce à la technologie MEMS, et l'excitation ainsi que la détection de l'onde de surface ont été faites au moyen de transducteurs interdigités (*interdigital transducer* : IDT) sur une couche mince piézoélectrique en ZnO déposée de part et d'autre du CP (figure 1.8). Avec des paramètres géométriques bien choisis, la bande interdite est prédite théoriquement entre 194.64 et 223.53MHz dans ce cas. La réponse fréquentielle de ce dispositif a été mesurée pour deux longueurs d'ondes différentes : une à λ=32.8µm correspondant à une gamme de réponse fréquentielle du dispositif hors de la bande interdite, et l'autre à λ=21.6µm donnant lieu à une réponse fréquentielle au niveau de la bande interdite. Une forte atténuation du signal a été observée pour le deuxième cas[127]. Ce dispositif est le premier filtre en son genre à base de CP, ce qui constitue une première voie pour des applications potentielles des CP dans le domaine radio fréquence (RF) à base d'ondes acoustiques de surface[127, 128].

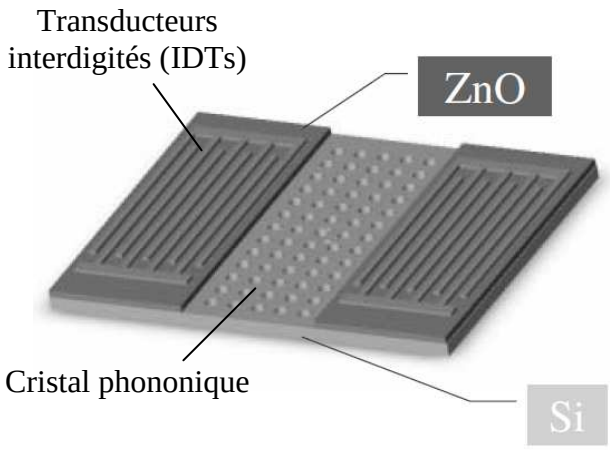


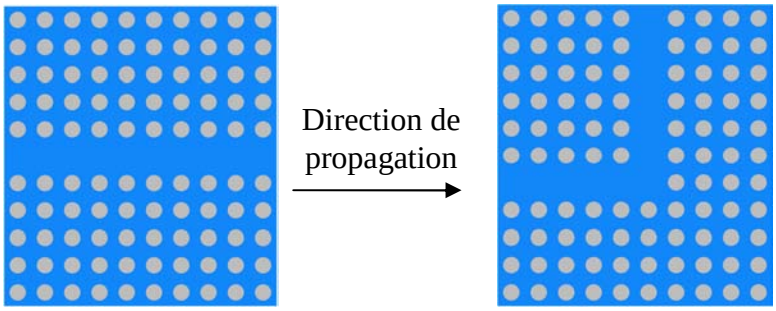
Figure 1.8 : Schéma du dispositif phononique à ondes de surface conçu par Wu *et al*[127]

Moyennant un principe de caractérisation similaire à celui utilisé par le groupe du professeur Wu[127, 128], Benchabane *et al*[129] ont mis en évidence l'existence d'une bande interdite complète (entre 203 et 226 MHz) pour les ondes de surface dans un CP constitué d'un arrangement de trous d'air au niveau de la surface d'un substrat en niobiate de lithium connu pour ses propriétés piézoélectriques et optiques remarquables. Ce résultat concorde avec leurs calculs théoriques en la matière.

Finalement, les chercheurs ont su résoudre les problèmes relatifs à la caractérisation des CP pour mettre en évidence leurs propriétés remarquables prédites théoriquement, grâce au progrès technologique en matière de micro et nano fabrication. Des techniques de pointe ont vu le jour récemment comme celle qui repose sur le balayage spatio-temporel du champ de déplacement acoustique au moyen d'excitation et détection optiques pulsées ultrarapides[130-133]. Cette technique, dite "acoustique picoseconde", permet non seulement d'imager en temps réel la propagation des ondes de surface dans le CP, mais aussi d'accéder à la relation de dispersion par transformée spatiotemporelle inverse de Fourier.

III.1.2. Guidage dans les structures phononiques

Avec l'avancement de la recherche sur les CP, notamment au niveau de la mise en évidence de leur propriété de barrière d'onde acoustique, les chercheurs ont exploré les possibilités de réalisation de guides d'ondes acoustiques performants en exploitant les bandes interdites. Un guide d'ondes phononique est construit à partir d'un défaut de structure dans le CP, en laissant un espacement continu entre les unités de périodicité, suivant la direction de guidage de l'onde souhaitée. La figure 1.9 présente un exemple de guides d'ondes, parmi les plus étudiés dans la littérature, en l'occurrence le guide linéaire et le guide coudé.



(a) Guide d'onde linéaire (b) Guide d'onde coudé

Figure 1.9 : Guides d'ondes phononiques linéaire et coudé.

En 1999, Torres *et al*[134] ont publié les résultats d'un premier travail expérimental sur l'étude d'un CP présentant un défaut ponctuel en enlevant un élément de périodicité, et d'un autre CP avec un défaut linéaire à l'image de celui présenté à la figure 1.9(a). Partant d'une structure périodique carrée qui présente une bande interdite dans une direction bien déterminée, ils ont expérimentalement montré que le guide linéaire introduit dans cette même direction, permet une transmission de l'onde au niveau du défaut pour des modes de propagation ayant leurs fréquences dans la bande interdite. Cette mise en évidence expérimentale de guidage des ondes élastiques a amorcé une série d'études théoriques[33, 46, 47, 135-137] et expérimentales[46, 138-141] sur le guidage au moyen des CP.

Par ailleurs, en utilisant un CP constitué d'un arrangement carré de cylindres en acier immergés dans l'eau, Khelif *et al*[46, 138-140] ont pu exploiter la présence d'une bande interdite, pour y créer des états d'énergie élastique très localisés au moyen d'un défaut ponctuel créé en enlevant un élément de périodicité. Ce résultat a été exploité afin de construire des guides d'ondes capables de confiner l'énergie acoustique à travers un défaut linéaire ou coudé dans le CP, avec un minimum de perte au niveau de la transmission de l'onde. De plus, ils ont montré que l'introduction d'un (des) défaut(s) ponctuel(s) attenant au guide linéaire peut y altérer, voire y annuler la propagation de l'onde, et ce à cause du couplage entre les modes guidés et les modes de résonance localisés produits par le(s) défaut(s) ponctuel(s)[46, 138-140].

III.2. Applications potentielles des CP

A travers les études des propriétés de dispersion des ondes acoustiques dans les CP, les scientifiques ont découvert un nouvel outil de manipulation des ondes acoustiques ou élastiques, comme dans le cas des ondes électromagnétiques dans les cristaux photoniques. L'existence des bandes interdites et la possibilité de guidage dans les structures phononiques

peuvent ainsi être exploitées pour des applications potentielles de filtrage et multiplexage des ondes acoustiques.

La propriété de filtrage est la capacité de séparer et sélectionner des éléments à partir d'un flux. Dans notre cas, il s'agit de séparer les ondes acoustiques ayant des fréquences déterminées à partir d'un paquet de fréquences initiales. En fait, les études menées sur les CPs que nous avons citées jusqu'ici, sont des applications théoriques et pratiques de filtrage[19, 33, 46, 49, 114-141]. En effet, en exploitant la bande interdite phononique, il est possible d'éliminer certains paquets d'ondes indésirables sur des intervalles de fréquences bien déterminés. Le guidage permet, quant à lui, de laisser passer certaines fréquences dans la gamme fréquentielle de la bande interdite afin d'isoler une information parmi d'autres transportées par l'onde.

S'agissant de la possibilité de démultiplexage phononique, Pennec *et al*[144] l'ont étudié théoriquement grâce à un système de tiges pleines en acier immergés dans l'eau, semblable à celui adopté par Khelif *et al*[46, 138-140]. A partir de cette structure, ils ont construit un guide d'ondes linéaire en remplaçant une rangée de tiges par des cylindres creux, et ont montré qu'ils peuvent contrôler la fréquence de l'onde guidée en jouant sur le rayon intérieur de ces cylindres. Ils ont ainsi construit un système de guide d'ondes acoustiques permettant de mixer ou de séparer deux modes à fréquences différentes.

Certes, le système de cylindres en acier immergé dans l'eau, étudié par Khelif *et al*[46, 138-140] et Pennec *et al*[144], permet d'atteindre ces objectifs, mais il était surtout conçu pour mettre en évidence la possibilité de concevoir un CP remplissant les caractéristiques principales d'un filtre acoustique. A priori, ce système ne pourrait pas servir, du moins facilement, dans une application concrète. Il serait, par contre, intéressant de mettre en place des dispositifs phononiques à ondes acoustiques de surface, comme celui proposé par Wu *et al*[127, 128] (figure 1.8), Benchabane *et al*[129] ou Mohammadi *et al*[146, 147]. L'optimisation de ces derniers n'est pas encore au point certes, mais, étant tout à fait perfectibles, ils constituent un grand pas vers une utilisation potentielle des CP qui pourraient intervenir dans des capteurs ou filtres pour différentes applications de détection et de mesure. En outre, ce type de dispositifs ont des dimensions miniaturisées avec des CP ayant une périodicité micrométrique, voire sub-micrométrique. Ceci fait que leur gamme fréquentielle de fonctionnement se situe entre les centaines de MHz et quelques GHz, ce qui les rend parfaitement adaptés à leur champ d'application dans le domaine des télécommunications.

Par ailleurs, une autre application potentielle des CP, éminemment intéressante, est leur utilisation comme barrières pour les ondes sonores dans les bâtiments, autoroutes, aéroports,

etc. Cependant, dans ce cas, les ondes ont des fréquences très basses (entre 10Hz et 20kHz)[142] avec de très larges longueurs d'ondes associées pouvant aller d'une dizaine de centimètres à quelques mètres. Dans ce cadre, les CP doivent avoir des périodicités du même ordre de grandeur si l'on veut utiliser le mécanisme de Bragg pour atténuer ces ondes. Autrement dit, des systèmes phononiques encombrants et de dimensions très larges sont incontournables pour servir à ce type d'application. A titre d'exemple, nous rappelons les travaux de Mártinez-Sala *et al*[114] sur la sculpture de Eusebio Sempere à Madrid, où la périodicité de la sculpture, de 10cm, permet d'arrêter les ondes sonores à 1.67kHz. Une autre application du même genre concerne le domaine de la géophysique, où il serait intéressant d'envisager une solution de barrière phononique pour les ondes sismiques. Dans ce cas, la difficulté du problème est encore plus accentuée car ces ondes ont des longueurs d'ondes très larges, allant de centaines de mètres au kilomètre. Enfin, une dernière application du genre cataclysmique concerne l'atténuation des vagues des mers et des océans, surtout lorsqu'il s'agit des côtes à risque de tsunamis. Nous citons même la proposition de Hu et Chan[143] ayant l'idée de conception d'une lentille phononique pour focaliser les vagues de la mer afin de convertir leur énergie mécanique en énergie électrique.

Pour ce genre d'applications en très basses fréquences, il s'avère évident que la solution la plus prometteuse est celle de l'utilisation des CPRL, ou d'une manière générale, des métamatériaux acoustiques.

Enfin, plusieurs chercheurs pensent que l'utilisation des CP est beaucoup plus prometteuse au niveau microscopique, où les domaines de fréquences des bandes interdites s'apprêtent mieux aux applications en télécommunication. De plus, avec l'avancée technologique en matière de micro et nano fabrication, les CP peuvent être facilement fabriqués et intégrés dans des dispositifs de différentes natures.

Conclusion

La principale propriété des CP, qui a tant passionné les chercheurs, est leur capacité dispersive remarquable pour les ondes acoustiques/élastiques, pouvant donner lieu à des bandes interdites phononiques. Ces intervalles de fréquences où le CP adopte un comportement de « barrière » pour les ondes, offrent des solutions très convoitées en matière d'applications. Ces dernières concernent essentiellement deux axes :

- Les applications hautes fréquences, par le biais de la conception de dispositifs phononiques miniaturisés pour des fins d'utilisation dans le domaine des radio-télécommunications :

filtrage, démultiplexage, capteurs etc; les bandes interdites utilisées dans ce cas peuvent être de différentes origines;

– et les applications basses fréquences pour l'isolation sonore, systèmes anti-sismiques, invisibilité acoustique … Ce genre d'applications nécessite donc la présence des cristaux phononiques à résonance locale, ou des métamatériaux acoustiques qui offrent la possibilité d'atténuation de l'onde par le mécanisme de résonance locale.

Dans le cadre des travaux de cette thèse, nous nous sommes intéressés aux deux axes concernant l'utilisation des CPRL dans les deux régimes, sonique et hypersonique. Nous verrons que le mécanisme de résonance locale, objet des études et applications essentiellement en basses fréquences, peut également avoir un intérêt potentiel et une valeur ajoutée dans les hautes fréquences.

Références

[1] E. Yablonovitch, Phys. Rev. Lett. **58**, 2059 (1987)

[2] S. John, Phys. Rev. Lett. **58**, 2486 (1987)

[3] Z. Zhang, and S. Satpathy, Phys. Rev. Lett. **65**, 2650 (1990)

[4] K. M. Ho, C. T Chan, and C. M. Soukoulis, Phys. Rev. Lett. **65**, 3152 (1990)

[5] E. Yablonovitch, T. J. Mitter, and K. M. Leung, Phys. Rev. Lett. **67**, 2295 (1991)

[6] R. D. Meade, K. D. Brommer, A. M. Rappe, and J. D. Joannopoulos, Appl. Phys. Lett. **61**, 495 (1992)

[7] U. Gruning, V. Lehman, and C.M. Englehardt, Appl. Phys. Lett. **66**, 3254 (1995)

[8] T. F. Krauss, R. M. DeLaRue, and S. Brand, Nature, **383**, 699 (1996)

[9] J P. Dowling, M. Scalora, M. J. Bloemer, and C. M. Bowden, J. Appl. Phys. **75**, 1896 (1994)

[10] J. C. Knight, J. Broeng, T. A. Birks, and P. St. J. Russell, Science **282**, 1476 (1998).

[11] O. Painter, R. K. Lee, A. Scherer, A. Yariv, J. D. O'Brien, P. D. Dapkus, and I. Kim, Science, **284**, 1819 (1999)

[12] P. Russell, Science **299**, 358 (2003).

[13] S.Tamura, D. C. Hurley, and J. P. Wolfe, Phys. Rev. B 38, 1427 (1988).

[14] M. Sigalas, and E. N. Economou, J. Sound Vib. **158**, 377 (1992)

[15] M. Sigalas, and E.N. Economou, Solid State Commun. **86**, 141 (1993)

[16] M. S. Kushwaha, P. Halevi, L. Dobrzynski, and B. Djafari-Rouhani, Phys. Rev. Lett. **71**, 2022 (1993)

[17] M. S. Kushwaha, P. Halevi, G. Martinez, L. Dobrzynski, and B. Djafari-Rouhani. Phys. Rev. B **49**, 2313 (1994)

[18] J. O. Vasseur, B. Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski, M. S. Kushawaha, and P. Halevi, J. Phys. : Condens. Matter, **6,** 8759 (1994).

[19] M. M. Sigalas and E. N. Economou, Europhys. Lett. **36,** 241 (1996).

[20] M. M. Sigalas and E. N. Economou, J. Appl. Phys. **75,** 2845 (1994)

[21] M. M. Sigalas, J. Acoust. Soc. Am. **101**, 1256 (1997)

[22] M. M. Sigalas, J. Appl. Phys. **84**, 3026 (1998).

[23] Y. Tanaka, and S-I. Tamura, Phys. Rev. B **58**, 7958 (1998).

[24] Y. Tanaka, and S. I. Tamura, Phys. Rev. B **60**, 13294 (1999).

[25] M. Wilm, S. Ballandras, V. Laude, and T. Pastureaud, J. Acoust. Soc. Am. **112**, 943 (2002)

[26] B. Manzanares-Martinez, Phys. Rev. B **68**, 134303 (2003)

[27] T-T. Wu, Z-G. Huang and S. Lin, Phys. Rev. B **69**, 094301 (2004)

[28] A. khelif, M. Wilm, V. Laude and S. Ballandras, Phys. Rev. E **69**, 067601 (2004)

[29] Z. G. Huang and T-T. Wu, IEEE Ultrason. Symp. **1**, 77 (2005)

[30] V.Laude, M. Wilm, Sarah Benchabane, and A. Khelief, Phys. Rev. E **71**, 036607 (2005)

[31] T-T. Wu, Z-C. Hsu, and Z-G. Huang, Phys. Rev. B **71,** 064303 (2005)

[32] J-C. Hsu, and T-T. Wu, Phys. Rev. B **74**, 144303 (2006).

[33] J. O. Vasseur, P. A. Deymier, B. Djafari-Rouhani, Y. Pennec, and A-C. Hladky-Hennion. Phys. Rev. B **77**, 085415 (2008)

[34] Z. Hou, and B. M. Assouar, Phys. Lett. A **372**, 2091 (2008).

[35] L-Y. Wu, L-W. Chen and C-M. Liu, Phys. Lett. A **373**, 1189 (2009).

[36] V. Laude, Y. Achaoui, S. Benchabane, and A. Khelif, Phys. Rev, B **80**, 092301 (2009).

[37] Z. Hou, and B. M. Assouar, J. Phys. D : Appl. Phys. **42**, 085103 (2009).

[38] V. Romero-Garcia, J. V. Sanchez-Pérez, and L. M. Garcia-Raffi, J. Appl. Phys. **108**, 044907 (2010)

[39] J. B. Pendry and A. MacKinnon, Phys. Rev. Lett. **69**, 2772 (1992)

[40] C. T. Chan, Q. L. Yu, and K. M. Ho, Phys. Rev. B **51**, 16635 (1995)

[41] K. Sakoda and J. Kawamata, Optics Express **3**, 12 (1998)

[42] M. M. Sigalas and N. García J. Appl. Phys. **87**, 3122 (2000)

[43] Y. Tanaka, Y Tomoyasu, and S-I Tamura, Phys. Rev. B **62**, 7387 (2000)

[44] T. Miyashita and C. Inoue, Jpn. J. Appl. Phys. **40**, 3488 (2001)

[45] A. Khelif, B. Djafari-Rouhani, V. Laude, and M. Solal, J. Appl. Phys. **94**,7944 (2003)

[46] Khelif, A. Choujaa, S. Benchabane, B. Djafari-Rouhani, and V. Laude, Appl. Phys. Lett. **84**, 4400 (2004).

[47] Y. Pennec, B. Djafari-Rouhani, J. O. Vasseur, and H. Larabi, Appl. Phys. Lett. **87**, 261912 (2005)

[48] J-H. Sun and T-T. Wu, Phys. Rev. B **74**,174305 (2006).

[49] Z. Liu, C. T. Chan, P. Sheng, A. L. Goertzen, and J. H. Page, Phys. Rev. B **62**, 2446 (2000).

[50] Z-Z. Yan, and Y-S. Wang, Phys. Rev. B **74**, 224303 (2006).

[51] A Khelif, B. Aoubiza, S. Mohammadi, A. Adibi, and V. Laude, Phys. Rev. E **74**, 046610 (2006).

[52] B. Djafari-Rouhani, J. O. Vasseur, A. C. Hladky-Hennion, P. Deymier, F. Duval, B. Dubus, and Y. Pennec, Photonics Nanostruct. Fund. Appl. **6**, 32 (2008).

[53] T-C. Wu, T-T. Wu, and J-C Hsu, Phys. Rev. B **79**, 104306 (2009).

[54] P-F. Heisch, T-T. Wu, and J-H Sun, IEEE Trans. Ultrason., Ferroelectr. Freq. Control, **53**, 148 (2006).

[55] C. Qiu, and Z. Liu, Appl. Phys. Lett. **89**, 063106 (2006).

[56] J. H. Page, Ping Sheng, H. P. Schriemer, I. Jones, Xiaodun Jing, and D. A. Weitz, Science, **271**, 634 (1996).

[57] H. P. Schriemer, M. L. Cowan, J.H. Page, P. Sheng, Z. Liu, and D.A. Weitz, Phys. Rev. Lett. **79**, 3166 (1997).

[58] X. D. Zhang, and Z. Y. Liu, Appl. Phys. Lett. **85**, 341 (2004).

[59] X. Hu, Y. Shen, X. Liu, R. Fu, and J. Zi, Phys. Rev. E **69**, 030201 (2004).

[60] S. Yang, J. H. Page, Z. Liu, M. L. Cowan, C. T. Chan, and Ping Sheng, Phys. Rev. Lett. **93**, 024301 (2004).

[61] K. Imamura, and S. Tamura, Phys. Rev. B **70**, 174308 (2004).

[62] C. Qiu, X. Zhang, and Z. Liu, Phys. Rev. B **71**, 054302 (2005).

[63] L.Feng, X-P. Liu, Y-B. Chen, Z-P. Huang, Y-W. Mao, Y-F. Chen, J. Zi, and Y-Y. Zhu, Phys. Rev. B **72**, 033108 (2005)

[64] M. Ke, Z. Liu, C. Qiu, W. Wang, J. Shi, W. Wen, and Ping Sheng, Phys. Rev. B **72**, 064306 (2005).

[65] L. Feng, X-P. Liu, M-H. Lu, Y-B. Chen, Y-F. Chen, Y-W. Mao, J. Zi, Y-Y. Zhu, S-N. Zhu, and N-B. Ming, Phys. Rev. Lett. **96**, 014301 (2006)

[66] L. Feng, X-P. Liu, M-H. Lu, Y-B. Chen, Y-F. Chen, Y-W. Mao, J. Zi, Y-Y. Zhu, S-N. Zhu, and N-B. Ming, Phys. Rev. B **73**, 193101 (2006).

[67] M-H. Lu, C. Zhang, L. Feng, J. Zhao, Y-F. Chen, Y-W. Mao, J. Zi, Y-Y. Zhu, S-N. Zhu, and N-B. Ming. Nature Mater. **6**, 744 (2007).

[68] Z. Liu, X. Zhang, Y. Mao, Y. Y. Zhu, Z. Yang, C. T. Chan, and P. Sheng, Science **289**, 1734 (2000).

[69] J. Li, and C. T. Chan, Phys. Rev. E **70**, 055602 (2004).

[70] Z. Liu, C. T. Chan, and Ping Sheng, Phys. Rev. B **71**,014103 (2005).

[71] X. H. Hu, and C. T. Chan, Phys. Rev. E **71**, 055601 (2005).

[72] J. Mei, Z. Liu, W. Wern, and Ping Sheng, Phys. Rev. Lett. **96**, 024301 (2006).

[73] J. Mei[1], Z. Liu, W. Wen, and Ping Sheng, Phys. Rev. B **76**, 134205 (2007).

[74] N. Fang, D. Xi, J. Xu, M. Ambati, W. Srituravanich, C. Sun, and X. Zhang Nature Mater. **5**, 452 (2006).

[75] Y. Ding, Z. Liu, C. Qiu, and J. Shi Phys. Rev. Lett. **99**, 093904 (2007).

[76] Y. Cheng, J. Y. Xu, and X. J. Liu, Appl. Phys. Lett. **92**, 051913 (2008).

[77] Lord Rayleigh, Proc. London Math. Soc. **17**, 4 (1885).

[78] Thèse de Thierry Aubert "*Contribution à l'élaboration de capteurs sans-fil, opérant à très haute température (500-1000°C), à base de dispositifs à ondes acoustiques de surface : choix des matériaux constitutifs.*" (2010).

[79] B.A. AULD , "*Acoustic fields and waves in solids*" Volume II (1973).

[80] T.-T. Wu, Z.-G. Huang, T.-C. Tsai, and T.-C. Wu, Appl. Phys. Lett. **93**, 111902 (2008).

[81] Y. Pennec, B. Djafari-Rouhani, H. Larabi, J.O. Vasseur, and A. C. Hladky-Hennion, Phys. Rev. B **78**, 104105 (2008).

[82] T-T. Wu, Y-T. Chen, J-H. Sun,S-C. S. Lin, and T. J. Huang, App. Phys. Lett. **98**, 171911 (2011).

[83] Ping Sheng, X.X. Zhang, Z. Liu, and C.T. Chan, Physica B **338**, 201 (2003).

[84] Z. Liu, C.T Chan, and P. Sheng, Phy. Rev. B **65**, 165116 (2002).

[85] X. Zhang, Z. Liu and Y. Liu, Eur. Phys. J. B **42,** 477 (2004).

[86] Z. Liu, C.T Chan, and P. Sheng, Phys. Rev. B **71**, 014103 (2005).

[87]C. Goffaux, J. Sanchez-Dehesa, and A. L. Yeyati, Phys. Rev. Lett. **88**, 225502 (2002).

[88] C. Goffaux, and J. Sanchez-Dehesa, Phys. Rev. B **67**, 144301 (2003)

[89] H. Larabi, Y. Pennec, B. Djafari-Rouhani, and J. O. Vasseur, Phys. Rev. E **75**, 066601 (2007).

[90] G. Wang, X. Wen, J. Wen, L. Shao and Y. Liu, Phys. Rev. Lett. **93**, 154302 (2004).

[91] M. Hirsekorn, P. P. Selsanto, N. K. Betra, and P. Matic, Ultrasonics **42**, 231-235 (2004).

[92] M. Hirsekrn, Appl. Phys. Lett. **84,** 17 (2004).

[93] J.C. Hsu and T.T Wu, Appl. Phys. Lett. **90**, 201904 (2007).

[94] W. Xiao, G. W. Zeng and Y. S. Chen, Applied Acoustics **69**, 255 (2008).

[95] G. Wang, D. Yu, J. Wen, Y. Liu, and X Wen, Physics Letters A **327**, 512 (2004).

[96] S.Yao, X. Zhou, and G Hu, New Journal of Physics **10,** 043020 (2008).

[97] P. Sheng, X. X. Zhang, Z. Liu, and C.T. Chan, Physica B **338**, 201 (2003).

[98]V. G. Veselago, Sov. Phys. Usp. **10**, 509 (1968).

[99] J. B. Pendry, A. J. Holden, W. J. Stewart, and I. Youngs, Phys. Rev. Lett.**76**, 4773 (1996).

[100] D. R. Smith, D. C. Vier, W. J. Padilla, S. C. Nemat-Nasser, and S. Schultz, Appl. Phys. Lett. **75**, 1425 (1999).

[101] J. B. Pendry, A. J. Holden, D. J. Robbins, and W. J. Stewart, IEEE Trans. Microwave Theory Tech. **47**, 2075 (1999).

[102] D. R. Smith, W. J. Padilla, D. C. Vier, S. C. Nemat-Nasser, and S. Schultz Phys. Rev. Lett. 84, 4184 (2000).

[103] R. A. Shelby, D. R. Smith, and S. Schultz, Science **292**, 77 (2001).

[104] M. Notomi, Phys. Rev. B **62**, 10696 (2000).

[105] J. B. Pendry, Phys. Rev. Lett. **85**, 3966 (2000)

[106] H. Kosaka, T. Kawashima, A. Tomita, M. Notomi, T. Tamamura, T. Sato, and S. Kawakami, Phys. Rev. B **58**, 10096 (1998).

[107] E. J. Reed, M. Soljacic, and J. D. Joannopoulos, Phys. Rev. Lett. **91**, 133901 (2003).

[108] J. Chen, Y. Wang, B. Jia, T. Geng, X. Li, L. Feng, W. Qian B. Liang, X. Zhang, M. Gu, and S. Zhuang. Nature Photonics **5**, 239 (2011).

[109] G. W. Milton, and J. R Willis, Proc. R. Soc. A **463**, 855 (2007).

[110] M. Hirsekorn, Appl. Phys. Lett. **84**, 3364 (2004).

[111] S. Yao, N. J. Phys. **10**, 043020 (2008).

[112] H. H. Huang, and C. T. Sun, N. J. Phys. **11**, 013003 (2009).

[113] H. H. Huang, C.T. Sun, and G.L. Huang, Int. J. Eng. Sc. **47**, 610 (2009).

[114] R. Mártinez-Sala, J. Sancho, J. V. Sánchez, V. Gómez, J. Llinares, and F. Meseguer, Nature (London) **378**, 241 (1995).

[115] A. Hall, "Sculpter le son ", Pour la Science, 343 (2006)

[116] M. S. Kushwaha, Appl. Phys. Lett. **70**, 3218 (1997).

[117] F. R. Montero de Espinosa, E. Jiménez, and M. Torres, Phys. Rev. Lett. **80**, 1208 (1998).

[118] J. V. Sánchez-Pérez, D. Caballero, R. Mártinez-Sala, C. Rubio, J. Sánchez-Dehesa, F. Meseguer, J. Llinares, and F. Gálvez, Phys. Rev. Lett. **80**, 5325 (1998).

[119] J. O. Vasseur, P. A. Deymier, G. Frantziskonis, G. Hong, B. Djafari-Rouhani and L. Dobrzynski, J. Phys. Condens. Matter **10**, 6051 (1998).

[120] W. M. Robertson, and J. F. Rudy, J. Acoust. Soc. Am. **104**, 694 (1998).

[121] D. Caballero, J. Sánchez-Dehesa, C. Rubio, R. Mártinez-Sala, J. V. Sánchez-Pérez, F. Meseguer, and J. Llinares, Phys. Rev. E **60**, R6316 (1999).

[122] C. Rubio, D. Caballero, J. V. Sanchez-Perez, R. Martinez-Sala, J. Sanchez-Dehesa, F. Meseguer, and F. Cervera, J. Lightwave Technol. **17**, 2202 (1999).

[123] F. Meseguer, M. Holgado, D. Caballero, N. Benaches, J. Sanchez-Dehesa, C. Lopez, and J. Llinares, Phys. Rev. B **59**, 12169 (1999).

[124] D. Garica-Pablos, M. Sigalas, F. R. Montero de Espinosa, M. Torres, M. Kafesaki, and N. Garcia, Phys. Rev. Lett. **84**, 4349 (2000).

[125] J. O. Vasseur, P. A. Deymier, B. Chenni, B. Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski, D. Prevost, Phys. Rev. Lett. **86**, 3012 (2001).

[126] J. O. Vasseur, P. A. Deymier, A. Khelif, Ph. Lambin, B. Djafari-Rouhani, A. Akjouj, L. Dobrzynski, N. Fettouhi, and J. Zemmouri Phys. Rev. E **65**, 056608 (2002).

[127] T-T. Wu, Z. G. Huang, and S. Y. Liu, Z. Kristallogr. **220**, 841 (2005).

[128] T-T. Wu, L-C. Wu, and Z-G. Huang, J. App. Phys. **97**, 094916 (2005).

[129] S. Benchabane, A. Khelif, J.-Y. Rauch, L. Robert, and V. Laude, Phys; Rev. E **73**, 065601 (2006).

[130] Y. Sugawara, O. B. Wright, and O. Matsuda, Appl. Phys. Lett. **83**, 1340 (2003).

[131] X. Y. Zhang, T. Jackson, E. Lafond, P. Deymier, and J. Vasseur, Appl. Phys. Lett. **88**, 041911 (2006).

[132] D. M. Profunser, O. B. Wright, and O. Matsuda, Phys. Rev. Lett. **97**, 055502 (2006).

[133] D. M. Profunser, E. Muramoto, O. Matsuda, and O. B. Wright, and U. Lang, Phys. Rev. B, **80**, 014301 (2009).

[134] M. Torres, F. R. Montero de Espinosa, D. Garica-Pablos, and N. Garcia, Phys. Rev. Lett. **82**, 3054 (1999).

[135] M. Kafesaki, M. M. Sigalas, and N. Garcia, Phys. Rev. Lett. **85**, 4044 (2000).

[136]A. Khelif, B. Djafari-Rouhani, J.O. Vasseur, P.A. Deymier, Ph. Lambin, and L. Dobrzynski, Phys. Rev. B **65**, 174308 (2002).

[137] A. Khelif, B. Djafari-Rouhani, V. Laude and M. Solal, J. Appl. Phys. **94,** 7944 (2003)

[138] A. Khelif, A. Choujaa, B. Djafari-Rouhani, M. Wilm, S. Ballandras, and V. Laude, Phys. Rev. B, **68** 214301 (2003).

[139] S. Benchabane, A. Khelif, A. Choujaa, B. Djafari-Rouhani, V. Laude, Europhys. Lett.**71**, 570 (2005).

[140] A. Khelif, A. Choujaa, S. Benchabane, B. Djafari-rouhani, and V. Laude, Z. Kristallogr. **220**, 836 (2005).

[141] J. O. Vasseur, P. Deymier, M. Beaugeois, Y. Pennec, B. Djafari-Rouhani, D. Prevost, Z. Kristallogr. **220**, 829 (2005).

[142] F. Everest, "The Master Handbook of Acoustics" (2001).

[143] X. Hu, and C. T. Chan, Phys. Rev. Lett. **95**, 154501 (2005).

[144] Y. Pennec, B. Djafari-Rouhani, J. O. Vasseur, A. Khelif, and P. A. Deymier, Phys. Rev. E **69**, 046608 (2004).

[145] Z. Yang, H. M. Dai, N. H. Chan, G. C. Ma, and P. Sheng. Appl. Phys. Lett. **96**, 041906 (2010)

[146] S. Mohammadi, A. A. Eftekhar, A. Khelif, W. D. Hunt, and A. Adibi, Appl. Phys. Lett. **92**, 221905 (2008)

[147] S. Mohammadi, A. A. Eftekhar, W. D. Hunt, and A. Adibi, Appl. Phys. Lett. **94**, 051906 (2009)

Chapitre 2

Méthodes numériques pour l'étude des cristaux phononiques

Introduction

Avec l'augmentation de la " soif " des scientifiques pour trouver des réponses à d'innombrables questions sur les comportements des systèmes et phénomènes physiques devenant de plus en plus complexes, il est devenu nécessaire de les " prédire " ou de les appréhender en développant des modèles rigoureux les plus réalistes possibles. Cette "prédiction" est basée sur des équations mathématiques dont la recherche de solutions a tant suscité et suscite encore une grande préoccupation de la part des scientifiques. A ce propos, on peut citer l'exemple des équations régissant le champ électromagnétique établies par James Clerck Maxwell au 19ème siècle; elles sont devenues depuis lors les équations de base pour décrire les comportements de tous les systèmes électroniques, optiques et optoélectroniques quelle que soit leur complexité. Par conséquent, plusieurs méthodes et techniques numériques ont été développées, mais elles avaient montré aussitôt leurs limites faute de moyens de calcul, laissant ainsi plus de place aux études analytiques. C'est durant ces trente dernières années que l'intérêt des chercheurs pour ces méthodes de calcul s'est accru avec le développement des ordinateurs et l'augmentation des capacités des calculateurs. Les méthodes numériques se sont ainsi développées, au moment où d'autres ont vu le jour, permettant de la sorte de traiter des problèmes ayant des géométries de plus en plus complexes. Les études numériques ont finalement englobé la quasi-totalité des domaines scientifiques.

Dans le domaine de propagation des ondes, la simulation numérique a longtemps été appliquée en électromagnétisme pour la résolution des équations de Maxwell, pour d'innombrables systèmes complexes. Parmi ces derniers, les cristaux photoniques qui ont fait l'objet d'une large application de méthodes numériques pour l'étude de leur comportement ondulatoire. On peut citer par exemple la méthode de décomposition en ondes planes appelée : PWE (*Plane Wave Expansion*), très utilisée pour le calcul de structures de bandes[1-4], et fondée sur le développement en série de Fourier. D'autres méthodes, basées aussi sur l'approche de décomposition, ont été développées, dont celle de Kohn-Korringa-Rostocker (KKR)[5,6], la méthode TMM (*The Transfer Matrix Method*)[7], la MST (*Multiple scattering Theory*)[8-10] et la décomposition en ondelettes[11] plus récemment. D'autres algorithmes basés sur d'autres approches de calcul ont été utilisés, comme la méthode des différences finies résolues dans le temps, appelée FDTD (*Finit Difference Time Domaine*)[12-14], et celle des éléments finis (*Finite Elements Method*)[15] qui utilise une base de fonctions définies sur un maillage du domaine de résolution.

Durant les deux dernières décennies, certaines de ces méthodes, en l'occurrence la PWE[20-42], la MST[16], la FDTD[52-57], les éléments finis[48-50] ainsi que la décomposition en ondelettes développée récemment[63, 64], ont été appliquées à l'étude théorique de la propagation des ondes élastiques/acoustiques dans les cristaux phononiques (CP). Dans ce cas, la propagation des ondes est régie par les équations de la mécanique classique. Les avantages et les inconvénients de chacune de ces méthodes numériques ont été pris en compte suivant la nature du système étudié.

Dans le cadre de cette thèse, notre intérêt s'est porté sur quelques unes de ces méthodes, que nous avons eu l'occasion de découvrir et de développer, pour atteindre des objectifs précis dans l'étude des CP. La première partie de ce chapitre sera consacrée à une présentation relativement restreinte de la théorie de la propagation d'ondes élastiques en termes d'équations de propagation appliquées à différents systèmes géométriques (fini, semi-infini et infini). La deuxième partie présentera en détail les méthodes de simulation numérique que nous avons développées et utilisées dans le cadre de nos travaux de thèse, en l'occurrence la PWE, les éléments finis et la FDTD. Nous terminerons ce chapitre par une brève description de la méthode de décomposition en ondelettes.

I. Equations de propagation des ondes élastiques

I.1. Formulation générale

I.1.1. Equations de mouvement

La propagation des ondes élastiques/acoustiques dans les solides est décrite par deux champs d'équations de base : l'équation reliant le tenseur de déformation au champ de déplacement $\mathbf{S} = \nabla_s \mathbf{u}$ et l'équation du mouvement $\nabla.\mathbf{T} = \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial \mathbf{t}^2}$ [17]. Cette dernière exprime le comportement vibratoire propre d'un milieu libre de toute interaction extérieure, où les forces d'inertie et celles de rappel élastique agissent sur les particules du milieu pour donner lieu aux mouvements d'oscillation. À ces deux équations, on ajoute la loi de Hooke $\mathbf{T} = \mathbf{c} : \mathbf{S}$ reliant le tenseur des contraintes à celui des déformations, permettant ainsi d'établir le lien entre les forces élastiques de rappel et la déformation du matériau au moyen des constantes élastiques du milieu. Un système d'équations en **T**, **S** et **u** est ainsi défini :

$$\begin{cases} \mathbf{S} = \nabla_s \mathbf{u} & (2.1) \\ \nabla.\mathbf{T} = \dfrac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial \mathbf{t}^2} & (2.2) \\ \mathbf{T} = \mathbf{c} : \mathbf{S} & (2.3) \end{cases}$$

où **T** et **S** représentent respectivement les tenseurs des contraintes et des déformations, **u** le vecteur champ de déplacement, et **c** le tenseur de rigidité élastique (*stiffness tensor*) regroupant les constantes élastiques du milieu.

Le produit désigné par les deux points ":" (*double dot product*) signifie que les deux tenseurs **T** et **S** sont liés par la relation suivante:

$$T_{ij} = \sum_{k,l} c_{ijkl} S_{kl}$$

L'expression $\mathbf{S} = \nabla_s \mathbf{u}$ implique $S_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$, avec $(i, j, k, l) \in \{x, y, z\}^4$, x, y et z étant les trois directions du repère cartésien dans l'espace tridimensionnel.

Le système décrit par les équations (2.1), (2.2) et (2.3) peut aussi être écrit sous la forme :

$$\frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \sum_j \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} = \sum_{j,k,l} \frac{\partial}{\partial x_j}\left(c_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \right)$$

Ces équations peuvent encore être simplifiées par les symétries des tenseurs **T** et **S**, à savoir $c_{ijkl} = c_{jikl}$, $c_{ijkl} = c_{ijlk}$ et $c_{ijkl} = c_{klij}$ [17], et en utilisant la notation de Voigt pour le tenseur de rigidité élastique et celui des contraintes : $c_{ijkl} = c_{IJ}$ et $T_{ij} = T_I$, avec :

ij, kl	*xx*	*yy*	*zz*	*yz, zy*	*xz, zx*	*xy, yx*
I,J	*1*	*2*	*3*	*4*	*5*	*6*

Tableau 2.1: Notation de Voigt

On obtient ainsi:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = \dfrac{\partial T_1}{\partial x} + \dfrac{\partial T_6}{\partial y} + \dfrac{\partial T_5}{\partial z} \\ \dfrac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} = \dfrac{\partial T_6}{\partial x} + \dfrac{\partial T_2}{\partial y} + \dfrac{\partial T_4}{\partial z} \\ \dfrac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} = \dfrac{\partial T_5}{\partial x} + \dfrac{\partial T_4}{\partial y} + \dfrac{\partial T_3}{\partial z} \end{cases} \text{ avec } \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \\ T_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{16} \\ c_{12} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & c_{26} \\ c_{13} & c_{23} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{36} \\ c_{14} & c_{24} & c_{34} & c_{44} & c_{45} & c_{46} \\ c_{15} & c_{25} & c_{35} & c_{45} & c_{55} & c_{56} \\ c_{16} & c_{26} & c_{36} & c_{46} & c_{56} & c_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \partial u_x / \partial x \\ \partial u_y / \partial y \\ \partial u_z / \partial z \\ \partial u_y / \partial z + \partial u_z / \partial y \\ \partial u_x / \partial z + \partial u_z / \partial x \\ \partial u_y / \partial x + \partial u_x / \partial y \end{bmatrix} \quad (2.4)$$

Dans un milieu isotrope par exemple, le tenseur élastique se présente sous la forme[17]:

$$c = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{bmatrix} \text{ avec } c_{44} = (c_{11} - c_{12})/2$$

En analyse numérique, la résolution de ces équations permet de simuler le comportement élastique d'un milieu solide quelconque, et donc sa réponse aux différentes sollicitations extérieures qu'il subit, notamment les excitations générant des ondes acoustiques ou élastiques.

I.1.2. Conditions aux limites

Dans une étude numérique, le CP constitue le domaine de résolution des équations (2.4). Celui-ci présente des interfaces et des frontières de différents types, qu'il faut définir en termes de comportement élastique et traduire en équations. Ainsi, des équations de conditions aux limites sur les champs de déplacement **u** et des contraintes **T** sont exprimées sur ces frontières selon leur nature qui peut être libre, fixe, ou présenter une propriété de périodicité.

I.1.2.1. Conditions aux limites libres et fixes

Les conditions aux limites libres ou fixes, sur une ou plusieurs frontières du domaine étudié, doivent être exprimées et jointes aux équations de propagation (2.4). Une surface libre ne subit aucune contrainte en aucun de ses points. Par exemple, dans un milieu présentant une surface plane libre située en $z = z_1$ et dont la normale $\mathbf{n_z}$ est suivant la direction de l'axe (OZ) du repère cartésien, la condition aux limites libres s'exprime par :

$$\mathbf{T}\Big|_{\mathbf{z=z_1}} \mathbf{.n_z} = 0$$

c'est-à-dire $$T_{xz}\Big|_{z=z_1} = T_{yz}\Big|_{z=z_1} = T_{zz}\Big|_{z=z_1} = 0$$

ou, avec la notation de Voigt : $$T_5\Big|_{z=z_1} = T_4\Big|_{z=z_1} = T_3\Big|_{z=z_1} = 0$$

En ce qui concerne une surface fixe, aucun déplacement n'est possible pour les particules du milieu la constituant. La condition aux limites s'exprime dans ce cas par un champ de déplacement nul **u=0**, c'est-à-dire $u_x = u_y = u_z = 0$ en tout point de cette surface.

I.1.2.2. Conditions aux limites périodiques

Les conditions aux limites périodiques ont été élaborées afin de modéliser des systèmes périodiques très larges, supposés infinis. Le principe consiste à réduire le domaine de résolution à un élément de périodicité constituant *une cellule unité* qui sera le nouveau domaine d'étude. Les conditions aux limites périodiques sont introduites sur les frontières de cette cellule suivant les directions de périodicité afin d'exprimer le fait que les propriétés de l'onde acoustique à l'entrée sont les mêmes qu'à la sortie de la cellule, avec un déphasage bien déterminé. Le système simulé est ainsi théoriquement infini. En termes d'équations, une formulation donnée par le théorème de Bloch-Floquet permet d'exprimer ce comportement périodique sur le champ de déplacement et les contraintes, s'agissant des problèmes traitant de la propagation des ondes. Ainsi, pour un domaine périodique infini, l'étude se fait sur une cellule unité en écrivant les conditions périodiques suivantes :

$$u_I\left(\vec{X} + \vec{a}\right) = e^{-i\vec{k}.\vec{a}} u_I\left(\vec{X}\right) \quad \text{et} \quad T_J\left(\vec{X} + \vec{a}\right) = e^{-i\vec{k}.\vec{a}} T_J\left(\vec{X}\right)$$

où u_I et T_J sont respectivement le champ de déplacement et les contraintes, $\vec{a}$ le vecteur de périodicité de la structure étudiée, $\vec{k}$ le vecteur d'onde et $\vec{X} = (x, y, z)$ le vecteur coordonnés dans le repère cartésien.

Nous aurons l'occasion de voir en détail l'utilisation de ces conditions périodiques dans les différentes méthodes de calculs présentées dans ce chapitre. Mais d'abord, intéressons

nous à quelques cas de systèmes classiques dans lesquels différents types d'ondes élastiques/acoustiques classiques se propagent.

I.2. Cas des systèmes isotropes finis ou semi-infinis : ondes de Lamb et de surface

Dans le cas des structures phononiques à milieux isotropes présentant des conditions aux limites (périodiques, libres ou fixes) et/ou des interfaces dans les trois directions de l'espace, les composantes du champ de déplacement sont couplées. Les équations (2.4) se ramènent dans ce cas à :

$$\begin{cases} \rho \dfrac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(c_{11}\dfrac{\partial u_x}{\partial x} + c_{12}\dfrac{\partial u_y}{\partial y} + c_{12}\dfrac{\partial u_z}{\partial z}\right) + \dfrac{\partial}{\partial y}\left(c_{44}\dfrac{\partial u_x}{\partial y} + c_{44}\dfrac{\partial u_y}{\partial x}\right) + \dfrac{\partial}{\partial z}\left(c_{44}\dfrac{\partial u_x}{\partial z} + c_{44}\dfrac{\partial u_z}{\partial x}\right) \\ \rho \dfrac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(c_{44}\dfrac{\partial u_x}{\partial y} + c_{44}\dfrac{\partial u_y}{\partial x}\right) + \dfrac{\partial}{\partial y}\left(c_{12}\dfrac{\partial u_x}{\partial x} + c_{11}\dfrac{\partial u_y}{\partial y} + c_{12}\dfrac{\partial u_z}{\partial z}\right) + \dfrac{\partial}{\partial z}\left(c_{44}\dfrac{\partial u_y}{\partial z} + c_{44}\dfrac{\partial u_z}{\partial y}\right) \\ \rho \dfrac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(c_{44}\dfrac{\partial u_x}{\partial z} + c_{44}\dfrac{\partial u_z}{\partial x}\right) + \dfrac{\partial}{\partial y}\left(c_{44}\dfrac{\partial u_y}{\partial z} + c_{44}\dfrac{\partial u_z}{\partial y}\right) + \dfrac{\partial}{\partial z}\left(c_{12}\dfrac{\partial u_x}{\partial x} + c_{12}\dfrac{\partial u_y}{\partial y} + c_{11}\dfrac{\partial u_z}{\partial z}\right) \end{cases} \quad (2.5)$$

Á ces équations, s'ajoutent les conditions aux limites.

Les propriétés des modes de propagation acoustiques ou élastiques changent en fonction de la configuration des paramètres géométriques et physiques du CP, des types de conditions aux limites, et des dimensions de la structure comparées aux longueurs d'ondes des modes qui s'y propagent. Les ondes de Lamb, par exemple, se propagent dans une plaque d'épaisseur finie. Ces ondes ont des longueurs d'onde de l'ordre de l'épaisseur de la plaque et sont guidées parallèlement aux surfaces de celle-ci[18].

Par contre, dans le cas de systèmes en plaque à épaisseur large devant la longueur d'onde, ou dans le cas de systèmes semi infinis présentant une surface libre, des ondes de surfaces peuvent exister. Celles-ci se propagent au niveau de la surface libre avec des vitesses plus faibles que celles des ondes de volume.

I.3. Cas des systèmes isotropes infinis: ondes de volume

Pour un système homogène isotrope infini et sans interface dans une direction de l'espace, l'onde élastique se propage sans rencontrer d'obstacle. Elle garde ainsi ses propriétés physiques tout au long de son parcours dans cette direction.

Si l'on considère, par exemple, un milieu isotrope infini dans la direction Z de l'espace, le champs de déplacement des modes qui se propagent dans ce milieu est invariant suivant la

direction Z: **u***(x,y,z)*=**u***(x,y)*. Au niveau des équations, les termes de dérivées partielles suivant z seront donc nuls, et partant le système (2.5) se ramène à :

$$\begin{cases} \rho \dfrac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(c_{11} \dfrac{\partial u_x}{\partial x} + c_{12} \dfrac{\partial u_y}{\partial y} \right) + \dfrac{\partial}{\partial y}\left(c_{44} \dfrac{\partial u_x}{\partial y} + c_{44} \dfrac{\partial u_y}{\partial x} \right) \\ \rho \dfrac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(c_{44} \dfrac{\partial u_x}{\partial y} + c_{44} \dfrac{\partial u_y}{\partial x} \right) + \dfrac{\partial}{\partial y}\left(c_{12} \dfrac{\partial u_x}{\partial x} + c_{11} \dfrac{\partial u_y}{\partial y} \right) \\ \rho \dfrac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(c_{44} \dfrac{\partial u_z}{\partial x} \right) + \dfrac{\partial}{\partial y}\left(c_{44} \dfrac{\partial u_z}{\partial y} \right) \end{cases} \qquad (2.6)$$

Ainsi, dans le cas où la direction de propagation de l'onde est dans le plan (X,Y), perpendiculaire à la direction Z, le couplage se fait entre les modes ayant une polarisation dans le plan de propagation.. Ces modes sont appelés modes plans (*In plane modes*). Par contre, les modes dont le champ de déplacement est suivant la direction Z, sont hors du plan (X,Y) *(out of plane)*; ce sont des modes de volume dans ce cas bien précis. Leur vitesse est constante, valant $c_t = \sqrt{c_{44}/\rho}$.

Nous aurons l'occasion d'illustrer les propriétés de ces différents types d'ondes à travers les calculs des structures de bandes et des champs de déplacement dans les études de structures phoniques que nous aborderons par la suite. Pour le moment, intéressons-nous d'abord aux différentes méthodes de modélisation existantes, qui permettent d'accomplir ces calculs.

II. Méthodes numériques de calcul des structures de bandes, champ de déplacement et coefficient de transmission pour les cristaux phononiques

II.1. La méthode de décomposition en ondes planes (*Plane Wave Expanssion*)

La décomposition en ondes planes, communément appelée PWE, est sans doute la méthode la plus utilisée par la communauté scientifique travaillant dans les domaines de la photonique et la phononique, où les systèmes étudiés sont généralement périodiques. L'une de ses premières applications a été son utilisation pour obtenir les états d'énergie électroniques dans les cristaux métalliques périodiques[19]. Elle a été ensuite largement utilisée en photonique[1-4] puis en phononique pour le calcul des structures de bandes.

Dans le domaine de la phononique, du fait de la périodicité des structures étudiées, le champ de déplacement et les paramètres d'élasticité sont décomposés en ondes planes

périodiques suivant les directions de la périodicité du CP. Le théorème de Bloch est appliqué afin de ramener l'étude au niveau d'une cellule constituant l'élément de périodicité du système en exprimant les conditions aux limites périodiques. Le système d'équations de mouvement est ensuite développé et ramené à un problème classique de recherche de valeurs propres. Ce dernier permet de calculer les modes de propagation des ondes et de tracer la structure de bandes.

Durant les deux dernières décennies, la PWE a largement montré son efficacité dans le calcul des structures de bandes phononiques pour différents types de systèmes : structures bidimensionnelles solides composites[20-22] ou solide-air[23], CP à une ou deux dimensions, constitués d'une plaque avec inclusions périodiques, pour la propagation d'ondes de Lamb[24-26], systèmes présentant un ou plusieurs défauts[27-31], ainsi que le guidage des ondes dans des systèmes finis[32]. La PWE a aussi fait ses preuves dans l'étude des milieux anisotropes[33] ou dispersifs pour les ondes de surfaces[34-36] ainsi que les milieux piézoélectriques[37-40]. Elle a également été modifiée et améliorée afin de calculer la structure de bandes complexes pour les ondes évanescentes[41, 42].

II.1.1. Principe de décomposition en ondes planes

Afin de décrire au mieux le principe de la PWE, nous traiterons un exemple de CP pour développer les équations de mouvement. Nous partirons d'une structure composite tridimensionnelle formée par une répétition cubique de deux matériaux : A et B, avec les périodes a_x, a_y et a_z, respectivement suivant les trois directions X, Y et Z de l'espace (figure 2.1). On désigne les vecteurs unitaires du repère cartésien (O,X,Y,Z) par $\vec{e}_x$, $\vec{e}_y$ et $\vec{e}_z$.

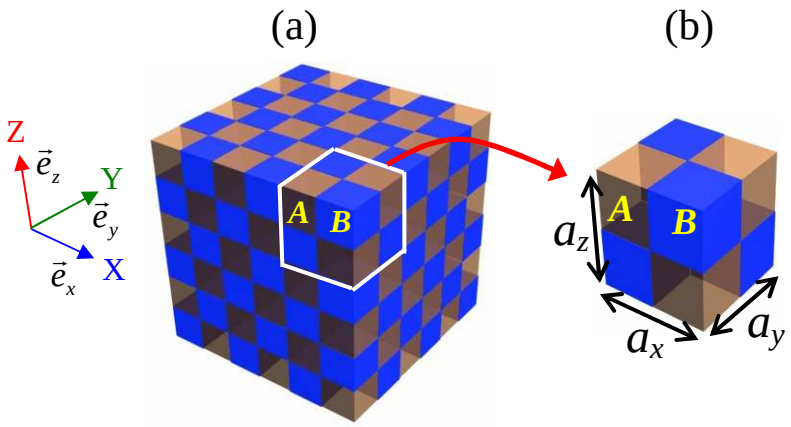


Figure 2.1: (a) Cristal phononique tridimensionnel constitué de deux matériaux isotropes : A (en marron transparent) et B (en bleu). (b) La cellule unité de périodicité de la structure phononique.

En considérant les milieux A et B isotropes, on commence d'abord par écrire sous forme fréquentielle les équations de mouvement (2.5) en posant $u_i = u_i(x,y,z)e^{i\omega t}$ pour une onde plane se propageant dans le CP; on obtient :

$$\begin{cases} -\rho\omega^2 u_x = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(c_{11}\dfrac{\partial u_x}{\partial x} + c_{12}\dfrac{\partial u_y}{\partial y} + c_{12}\dfrac{\partial u_z}{\partial z}\right) + \dfrac{\partial}{\partial y}\left(c_{44}\dfrac{\partial u_x}{\partial y} + c_{44}\dfrac{\partial u_y}{\partial x}\right) + \dfrac{\partial}{\partial z}\left(c_{44}\dfrac{\partial u_x}{\partial z} + c_{44}\dfrac{\partial u_z}{\partial x}\right) \\ -\rho\omega^2 u_y = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(c_{44}\dfrac{\partial u_x}{\partial y} + c_{44}\dfrac{\partial u_y}{\partial x}\right) + \dfrac{\partial}{\partial y}\left(c_{12}\dfrac{\partial u_x}{\partial x} + c_{11}\dfrac{\partial u_y}{\partial y} + c_{12}\dfrac{\partial u_z}{\partial z}\right) + \dfrac{\partial}{\partial z}\left(c_{44}\dfrac{\partial u_y}{\partial z} + c_{44}\dfrac{\partial u_z}{\partial y}\right) \\ -\rho\omega^2 u_z = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(c_{44}\dfrac{\partial u_x}{\partial z} + c_{44}\dfrac{\partial u_z}{\partial x}\right) + \dfrac{\partial}{\partial y}\left(c_{44}\dfrac{\partial u_y}{\partial z} + c_{44}\dfrac{\partial u_z}{\partial y}\right) + \dfrac{\partial}{\partial z}\left(c_{12}\dfrac{\partial u_x}{\partial x} + c_{12}\dfrac{\partial u_y}{\partial y} + c_{11}\dfrac{\partial u_z}{\partial z}\right) \end{cases} \quad (2.7)$$

Puisque nous sommes en présence d'un milieu composite, les constantes élastiques dépendent de la position spatiale dans le cristal. On a donc :

$$\rho = \rho(\vec{r}) \text{ et } c_{ij} = c_{ij}(\vec{r}) \text{ pour } (i,j) \in \{1;2;3;4;5;6\}^2 .$$

Ensuite, à partir de la structure de notre cristal, on définit l'espace réciproque correspondant, dont la base est notée $(\vec{b}_x, \vec{b}_y, \vec{b}_z)$ avec :

$$\vec{b}_x = 2\pi\frac{\vec{a}_y \times \vec{a}_z}{\vec{a}_x.(\vec{a}_y \times \vec{a}_z)},\ \vec{b}_y = 2\pi\frac{\vec{a}_z \times \vec{a}_x}{\vec{a}_y.(\vec{a}_z \times \vec{a}_x)}\ \vec{b}_z = 2\pi\frac{\vec{a}_x \times \vec{a}_y}{\vec{a}_z.(\vec{a}_x \times \vec{a}_y)}$$

Dans notre cas de structure cubique :

$$\vec{b}_x = \frac{2\pi}{a_x}\vec{e}_x,\ \vec{b}_y = \frac{2\pi}{a_y}\vec{e}_y \text{ et } \vec{b}_z = \frac{2\pi}{a_z}\vec{e}_z$$

La position de chaque point du réseau réciproque est repérée par :

$$\vec{G} = m_1\vec{b}_x + m_2\vec{b}_y + m_3\vec{b}_z = m_1\frac{2\pi}{a_x}\vec{e}_x + m_2\frac{2\pi}{a_y}\vec{e}_y + m_3\frac{2\pi}{a_z}\vec{e}_z$$

$$\text{avec } (m_i)_{i\in\{x,y,z\}} \in Z^3$$

Les vecteurs de base de ce réseau réciproque interviendront par la suite dans les fonctions de base de décomposition de Fourier des constantes élastiques et du champ de déplacement suivant la périodicité du CP.

Par ailleurs, du fait de la périodicité de la structure suivant les trois directions X, Y et Z de l'espace, le théorème de Bloch peut être appliqué à la fonction inconnue u_i :

$$u_i(\vec{r}) = e^{-\underline{i}\vec{k}\vec{r}}u_{i,\vec{k}}(\vec{r})$$

$\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$ étant le vecteur d'onde de l'onde solution à notre système d'équations (2.7).

$\underline{i}$ est le nombre complexe vérifiant $\underline{i}^2 = -1$

La fonction $u_{i,\vec{k}}$ est périodique suivant la variable $\vec{r}$:

$$u_{i,\vec{k}}(\vec{r}+\vec{a}_i)=u_{i,\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\text{et } i\in\{x,y,z\} \text{ et } x_x=x,\ x_y=y \text{ et } x_z=z$$

L'étude de la fonction $u_{i,\vec{k}}$ peut donc se ramener aux domaines $U_{\vec{a}}=[0,a_x]\times[0,a_y]\times[0,a_z]$ et $U_{\vec{k}}=\left[-\frac{\pi}{a_x},\frac{\pi}{a_x}\right]\times\left[-\frac{\pi}{a_y},\frac{\pi}{a_y}\right]\times\left[-\frac{\pi}{a_z},\frac{\pi}{a_z}\right]$ respectivement pour la variable $\vec{r}=(x,y,z)$ et le vecteur d'onde $\vec{k}$.

Par conséquent, le domaine de résolution se réduit à une cellule du CP définie par l'intervalle $U_{\vec{a}}$ (voir figure 2.1(b)). L'intervalle auquel se restreint le vecteur d'onde $\vec{k}$ dans l'espace réciproque, à savoir $U_{\vec{k}}$, est appelé la première Zone de Brillouin. Le calcul de la structure de bandes phononiques dans l'espace réciproque se limitera donc aux limites de cette zone.

La zone de Brillouin est définie comme étant une unité de l'espace réciproque qui peut être déterminée géométriquement comme suit : on repère d'abord un point du réseau réciproque et on le relie à ses premiers points voisins les plus proches. Ensuite, on trace les médiatrices des segments formées par ces derniers et le point considéré. La zone délimitée par ces médiatrices définit la première zone de Brillouin. Un exemple est présenté dans la figure 2.2 pour une structure périodique bidimensionnelle.

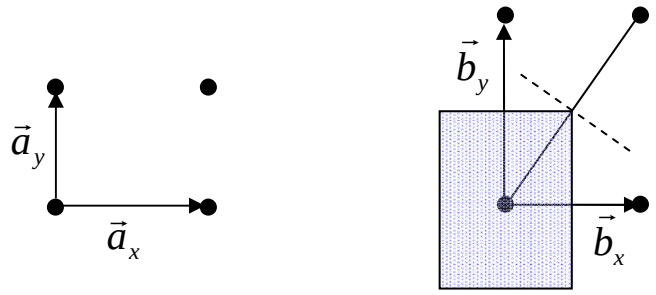


Figure 2.2: (a) Structure périodique bidimensionnelle, (b) Zone de Brillouin hachurée dans le réseau réciproque.

La fonction définie par :

$$u_i(\vec{r})=e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{i,\vec{k}}(\vec{r})$$

est solution du système (2.7) quel que soit $\vec{k}\in U_{\vec{k}}$.

Donc, dans l'ouvert $U_{\vec{a}}$, on se ramène à résoudre le système suivant :

$$\begin{cases} -\rho\omega^2\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{x,\vec{k}}(\vec{r})\right)=\dfrac{\partial}{\partial x}\left(c_{11}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{x,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial x}+c_{12}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{y,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial y}+c_{12}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{z,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial z}\right)+\dfrac{\partial}{\partial y}\left(c_{44}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{x,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial y}+c_{44}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{y,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial x}\right)+\dfrac{\partial}{\partial z}\left(c_{44}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{x,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial z}+c_{44}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{z,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial x}\right) \\ -\rho\omega^2\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{y,\vec{k}}(\vec{r})\right)=\dfrac{\partial}{\partial x}\left(c_{44}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{x,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial y}+c_{44}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{y,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial x}\right)+\dfrac{\partial}{\partial y}\left(c_{12}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{x,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial x}+c_{11}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{y,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial y}+c_{12}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{z,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial z}\right)+\dfrac{\partial}{\partial z}\left(c_{44}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{y,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial z}+c_{44}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{z,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial y}\right) \\ -\rho\omega^2\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{z,\vec{k}}(\vec{r})\right)=\dfrac{\partial}{\partial x}\left(c_{44}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{x,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial z}+c_{44}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{z,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial x}\right)+\dfrac{\partial}{\partial y}\left(c_{44}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{y,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial z}+c_{44}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{z,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial y}\right)+\dfrac{\partial}{\partial z}\left(c_{12}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{x,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial x}+c_{12}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{y,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial y}+c_{11}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{z,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial z}\right) \end{cases} \quad (2.8)$$

Du fait de leur périodicité suivant les trois directions de l'espace, les fonctions constantes élastiques, densité du cristal et champ de déplacement $u_{i,\vec{k}}$ peuvent être décomposées dans la base en exponentielle de Fourier exprimée dans l'espace réciproque :

$$\rho(\vec{r})=\sum_{\vec{G}}\rho_{\vec{G}}e^{i\vec{G}\vec{r}} \text{ et } c_{ij}(\vec{r})=\sum_{\vec{G}}c_{ij,\vec{G}}e^{i\vec{G}\vec{r}} \text{ pour } (i,j)\in\{1;2;3;4;5;6\}^2 \quad (2.9)$$

$$u_{i,\vec{k}}(\vec{r})=\sum_{\vec{G}}u_{i,\vec{k},\vec{G}}e^{i\vec{G}\vec{r}} \text{ pour } i\in\{x;y;z\} \text{ et donc } u_i(\vec{r})=\sum_{\vec{G}}u_{i,\vec{k},\vec{G}}e^{i\left(\vec{G}+\vec{k}\right)\vec{r}} \quad (2.10)$$

Les expressions (2.9) et (2.10) sont reportées dans l'équation (2.8) pour obtenir finalement un problème matriciel en valeurs propres ω^2 de la forme :

$$\omega^2 A\,\vec{U}_{\vec{G}}=B\left(\vec{k}\right)\vec{U}_{\vec{G}} \quad (2.11)$$

Les détails des calculs permettant d'aboutir au problème matriciel (2.11) ci-dessus sont décrits dans l'annexe A.

Les matrices *A* et *B* sont connues et dépendent des coefficients de Fourier, des constantes élastiques, de la densité et du vecteur d'onde $\vec{k}$.

$\vec{U}_{\vec{G}}=\begin{pmatrix} u_{x,\vec{k},\vec{G}} \\ u_{y,\vec{k},\vec{G}} \\ u_{z,\vec{k},\vec{G}} \end{pmatrix}$ est le vecteur propre associé à la valeur propre recherchée ω^2

La résolution du problème en valeurs propres (2.11) permet d'obtenir les modes ω et les champs de déplacement $\vec{U}_{\vec{G}}$ associés à chaque valeur du vecteur d'onde $\vec{k}$, et ainsi tracer la structure de bandes du CP dans la première zone de Brillouin.

II.1.2. Formulation des conditions aux limites libres

L'exemple du CP tridimensionnel présenté dans la figure 2.1 ne présente aucune frontière libre ou fixe. Nous avons exploité la périodicité de la structure dans les trois directions de l'espace pour introduire les conditions aux limites périodiques en utilisant le théorème de Bloch-Floquet. Si l'on est en présence d'une structure finie dans une direction donnée, par exemple un CP bidimensionnel constitué d'une plaque d'épaisseur finie dans la direction Z (figure 2.3), les conditions aux limites libres s'imposent aux surfaces supérieures et inférieures dans cette direction, auquel cas il faut les définir et les ajouter au système d'équations (2.8).

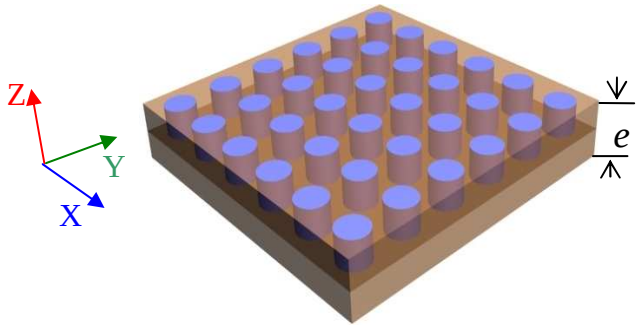


Figure 2.3 : Exemple de cristal phononique bidimensionnel constitué d'inclusions cylindriques dans une plaque d'épaisseur finie sur un substrat.

Dans l'exemple de la figure 2.3, la périodicité bidimensionnelle du cristal fait qu'on a un réseau réciproque à deux dimensions $\vec{G} = (G_x, G_y)$. Les conditions aux limites libres, définissant les contacts libres au niveau des surfaces supérieure et inférieure du CP, s'expriment par l'annulation des contraintes à ces surfaces. On a ainsi aux frontières $z=0$ et $z=e$:

$$\mathbf{T}.\vec{\mathbf{e}}_{\mathbf{z}} = 0$$

c'est-à-dire :

$$T_{5|z=0,e} = T_{4|z=0,e} = T_{3|z=0,e} = 0$$

Dans le cas où les milieux du CP sont isotropes, on a :

$$\begin{cases} c_{12}\dfrac{\partial u_x}{\partial x}\Big|_{z=0,e} + c_{12}\dfrac{\partial u_y}{\partial y}\Big|_{z=0,e} + c_{11}\dfrac{\partial u_z}{\partial z}\Big|_{z=0,e} = 0 \\ c_{44}\dfrac{\partial u_y}{\partial z}\Big|_{z=0,e} + c_{44}\dfrac{\partial u_z}{\partial y}\Big|_{z=0,e} = 0 \\ c_{44}\dfrac{\partial u_x}{\partial z}\Big|_{z=0,e} + c_{44}\dfrac{\partial u_z}{\partial x}\Big|_{z=0,e} = 0 \end{cases} \qquad (2.12)$$

Afin de résoudre ce système, le champ de déplacement est développé en série de Fourier suivant les deux directions de la périodicité de la structure :

$$u_i(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} e^{i(\vec{k}+\vec{G})\vec{r}} a_{\vec{G}}(z) \text{ avec } \vec{k} = (k_x, k_y)$$

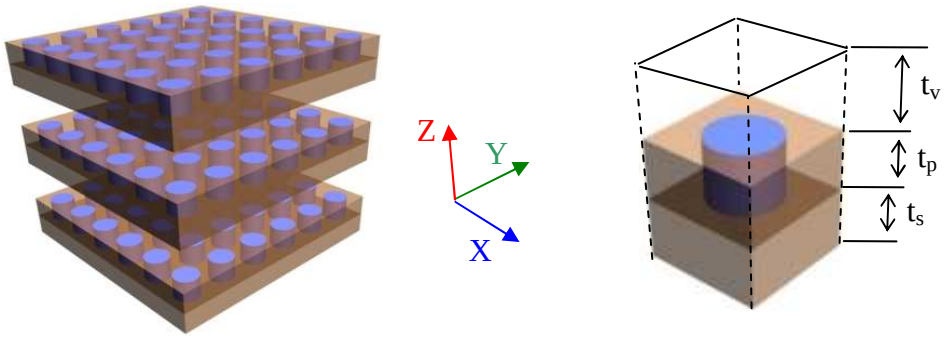
Cette décomposition du champ de déplacement ainsi que celles des constantes élastiques et de la densité sont introduites dans les deux systèmes d'équations (2.8) et (2.12). Deux problèmes matriciels sont ainsi obtenus et doivent être résolus simultanément afin d'obtenir les modes ω de Lamb pour les différentes valeurs du vecteur d'onde $\vec{k}$.

La méthode de résolution par PWE des problèmes faisant intervenir une surface de contact libre a été initialement introduite par Tanaka et Tamura[34] qui ont cherché les modes de surface pour un système phononique bidimensionnel semi-infini. Cette méthode à été ensuite utilisée pour étudier des problèmes similaires à celui de l'exemple de la figure 2.3 présentant deux surfaces libres[43-44]. Par ailleurs, Hsu et Wu[45] ont proposé une autre méthode pour résoudre les problèmes des conditions aux limites, en combinant la théorie Mindlin de plaque et la PWE pour calculer les premières courbes de dispersion pour les ondes de Lamb. Finalement Laude *et al*[65] ont étudié les ondes de surfaces dans un CP piézoélectrique en appliquant les conditions aux limites mécaniques et électriques libres à la surface étudiée.

Exceptée la méthode de Hsu et Wu, la principale contrainte que présente l'introduction des conditions aux limites libres sous la forme (2.12), est la difficulté de résoudre simultanément deux systèmes matriciels. En effet, le calcul des modes dans ce cas nécessite une procédure itérative bien déterminée[43, 46]. Une solution simple basée sur ce qu'on appelle la "super cellule" permet de contourner cette complexité.

II.1.3. Formulation indirecte des conditions aux limites libres par la technique de la "Super cellule"

Dans certains cas d'étude, on peut contourner les problèmes des conditions aux limites libres en construisant une structure phononique imaginaire utilisant une "super cellule" comme unité de périodicité. Partant de l'exemple de la figure 2.3, cette méthode consiste à reproduire infiniment à intervalles réguliers la plaque phononique suivant la direction Z de l'espace en laissant du vide entre les plaques. On crée ainsi une périodicité de la structure suivant la troisième direction Z (figure 2.4).



(a) (b)

Figure 2.4: (a) Plaque phononique bidimensionnelle répétée dans la direction Z afin de contourner les conditions aux limites libres. (b) La "super cellule" unité du cristal contenant l'espacement vide dans la direction Z

On se ramène donc à un système périodique dans les trois directions de l'espace avec $\vec{G} = (G_x, G_y, G_z)$ et $\vec{k} = (k_x, k_y)$. Dans ce cas, la période a_z sera égale à la somme de l'épaisseur de la plaque et celle du vide séparant deux plaques. Cette idée a été introduite, pour la première fois, par Hou et Assouar[25], dans le but de calculer la structure de bandes d'un cristal à inclusions cylindriques dans une plaque constituée de différents matériaux; les plaques sont séparées par des couches de vide. Une étude a été faite sur l'épaisseur de celles-ci afin de déterminer l'espacement optimal entre les plaques, c'est-à-dire permettant un calcul convergent de la structure de bandes. Il est à noter que le vide dans cette approche a été représenté par un matériau ayant des constantes élastiques et une densité nulles.

Dans d'autres études, et à la place du vide séparant les plaques, Manzanares-Martinez et Ramos-Mendieta[36] ainsi que Vasseur *et al*[32] ont introduit un milieu artificiel assimilé à un matériau avec de faibles valeurs de constantes élastiques et de densité. L'objectif est de permettre une décroissance rapide à zéro du champ de déplacement, et donc une atténuation de l'onde acoustique dans le milieu artificiel au voisinage de l'interface entre celui-ci et le cristal. Plus la décroissance est rapide, meilleure est la simulation du comportement de l'onde à la surface. La clé d'un bon choix réside à la fois dans les paramètres élastiques du milieu artificiel et son épaisseur qui doit être suffisamment large pour ne pas permettre la transmission de l'onde entre plaques voisines.

Pour bien illustrer cette situation en termes d'équations, reprenons l'exemple précédent de la figure 2.4. Au niveau de l'interface entre le cristal et le milieu artificiel, dont la normale est suivant la direction Z, la continuité des contraintes normales et tangentielles T_5, T_4 et T_3

doit être assurée. En exprimant ces contraintes en termes de vitesses de propagation longitudinale $C_l = \sqrt{c_{11}/\rho}$ et transverse $C_t = \sqrt{c_{44}/\rho}$, pour un milieu isotrope, on a :

$$\begin{cases} T_3 = \rho\left(C_l^2 - 2C_t^2\right)\dfrac{\partial u_x}{\partial x} + \rho\left(C_l^2 - 2C_t^2\right)\dfrac{\partial u_y}{\partial y} + \rho C_l^2 \dfrac{\partial u_z}{\partial z} \\ T_4 = \rho C_t^2\left(\dfrac{\partial u_y}{\partial z} + \dfrac{\partial u_z}{\partial y}\right) \\ T_5 = \rho C_l^2\left(\dfrac{\partial u_x}{\partial z} + \dfrac{\partial u_z}{\partial x}\right) \end{cases}$$

Pour que ces équations puissent modéliser un contact libre d'une surface avec le vide, les contraintes doivent tendre vers zéro à un niveau proche de l'interface dans le milieu artificiel, ce qui se traduit par $\rho C_{l,t}^2$ tendant vers 0. Les grandeurs $\rho C_{l,t}^2$ doivent être choisies aussi faibles que possible en prenant en considération aussi les paramètres élastiques du cristal afin de ne pas avoir d'instabilité numérique. Ainsi Manzanares-Martinez et Ramos-Mendieta[36] proposent le choix suivant :

$$\frac{\left(\rho C_{l,t}^2\right)_{milieu\quad artificiel}}{\left(\rho C_{l,t}^2\right)_{cristal\quad phononique}} \to 0$$

A cette condition, ils ajoutent le fait que les vitesses $C_{l,t}$ doivent être deux à quatre fois plus grandes que celles dans les matériaux constituant le CP étudié, et ce afin de permettre une décroissance évanescente rapide de l'onde dans le milieu prévu à cet effet[36].
Dans le cade de cette thèse, nous avons adopté cette dernière approche dans le calcul des structures de bande des ondes de Lamb.

II.1.4. Calcul du champ de déplacement et représentation dans les structures de bandes

Partant du problème matriciel (2.11), on peut calculer la distribution du champ de déplacement dans le CP en récupérant les vecteurs propres $\vec{U}_{\vec{G}'} = \left(u_{x,\vec{G}'}, u_{y,\vec{G}'}, u_{z,\vec{G}'}\right)$ correspondant à la décomposition de Fourrier des trois composantes du champ de déplacement. Pour chaque mode $\left(\omega, \vec{k}\right)$ de la structure de bandes, on peut calculer le champ de déplacement en chaque point du cristal par : $u_i(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} u_{i,\vec{k},\vec{G}} e^{i\left(\vec{k}+\vec{G}\right)\vec{r}}$ et ainsi le représenter sur la cellule du cristal. Plusieurs exemples peuvent être cités tels ceux de Manzanares-Martinez et F. Ramos-Mendieta[36], et Vasseur *et al*[32].

Le champ de déplacement peut aussi être représenté au niveau des structures de bandes en déterminant pour chaque mode sa composante $u_{i,\vec{k}}$ dominante (longitudinale $\left(u_{x,\vec{k}}\right)$, transverse horizontale $\left(u_{y,\vec{k}}\right)$ ou verticale $\left(u_{z,\vec{k}}\right)$). Achaoui *et al*[47] ont ainsi identifié les différents types de modes par leur polarisation dominante en calculant la grandeur suivante :

$$p_i = \frac{\int \left|u_{i,\vec{k}}\right|^2 dr}{\int \left(\left|u_{x,\vec{k}}\right|^2 + \left|u_{y,\vec{k}}\right|^2 + \left|u_{z,\vec{k}}\right|^2\right) dr} \text{ avec } i \in \{x, y, z\}$$

Leur but était d'étudier l'influence aussi bien de l'anisotropie des matériaux d'un CP bidimensionnel que de sa périodicité sur le couplage des modes et leur polarisation. Certes, cette méthode de visualisation de la polarisation ne permet pas de savoir le comportement vibratoire exact des modes, mais elle donne une idée suffisamment claire quant à leur nature (longitudinale, transverse verticale et horizontale), ainsi qu'aux couplages et les "*level repulsions*" qui peuvent exister entre eux[47].

II.1.5. Convergence

La convergence des calculs dépend fortement de la décomposition des paramètres d'élasticité et de densité, ainsi que du champ solution $\left(u_{i,\vec{k}}(\vec{r})\right)_{i\in\{x,y,z\}}$ dans la base de Fourier. Prenant comme exemple de CP celui de la figure 2.1 ou de la figure 2.4, la décomposition de Fourier se fait sur la base exponentielle en utilisant l'espace réciproque :

$$u_i(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} u_{i,\vec{k},\vec{G}} e^{i\left(\vec{k}+\vec{G}\right)\vec{r}} \quad (2.13)$$

avec :

$$\vec{G} = m_1 \frac{2\pi}{a_x}\vec{e}_1 + m_2 \frac{2\pi}{a_y}\vec{e}_2 + m_3 \frac{2\pi}{a_z}\vec{e}_3$$

et la somme se fait infiniment sur les entiers relatifs m_j.

En calcul numérique, ces sommes doivent être limitées en choisissant le bon nombre d'éléments de la base de Fourier permettant de se rapprocher le plus possible de la solution. Notons $\left(N_j\right)_{j\in\{x,y,z\}}$ trois entiers naturels supérieurs à 1 et prenons les valeurs de $\vec{G}$ telles que $-N_j \le m_j \le N_j$ avec $j \in \{x, y, z\}$. Le nombre d'éléments de la sommation (2.13) dans la base de Fourier est alors égale à :

$$N = (2N_x + 1)(2N_y + 1)(2N_z + 1)$$

Plus les $\left(N_j\right)_{j\in\{x,y,z\}}$ sont grands, meilleure est l'approximation de la solution.

Sachant que la taille des matrices du problème en valeurs propres (2.11) vaut $3N$, celle-ci devient plus grande en augmentant le nombre des éléments de la base de décomposition de Fourier, ce qui rend la résolution du problème contraignante en termes de temps requis. Une étude de convergence est donc nécessaire afin de déterminer le nombre minimal de décompositions à effectuer pour atteindre une bonne convergence. L'exemple de calcul de structure de bandes présenté dans la figure 2.5 ci-dessous, issu d'un programme que nous avons réalisé, montre qu'une bonne convergence est atteinte pour $N_x = 5$, $N_y = 5$ et $N_z = 2$ pour une structure périodique en plaque, semblable à celle présentée dans la figure 2.4.

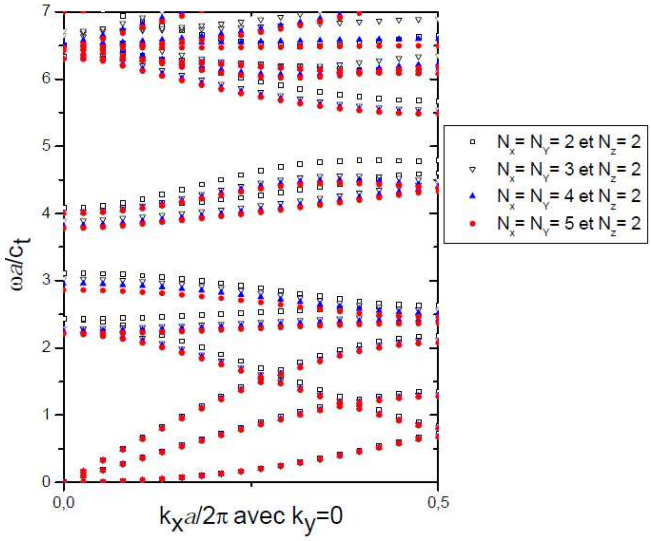


Figure 2.5 : Structure de bandes d'une plaque phononique semblable à celle de la figure 2.4, pour différents nombres d'éléments de décomposition dans la base de Fourier suivant la direction de périodicité du CP. Le nombre de décomposition suivant la direction Z est fixé à N_z=2 dans cet exemple.

Le principe de la PWE repose sur la décomposition des fonctions étudiées dans la base de Fourier. Certes, la méthode est efficace pour le calcul des modes élastiques mais, elle présente certaines limites suivant le cas étudié, que plusieurs chercheurs ont pu contourner par des transformations. Pour un nombre fixé d'ondes planes de décomposition, la méthode perd sa précision pour le calcul des modes à haute fréquences. Elle est donc plus adaptée pour déterminer les premiers modes dans la structure de bandes, car la convergence y est vite atteinte (Figure 2.5). De plus, la méthode requiert rapidement beaucoup de temps et de mémoire des machines de calcul pour traiter des problèmes nécessitant un grand nombre d'ondes planes de décomposition pour une bonne convergence. Enfin, la PWE peut poser des problèmes de stabilité quant au calcul des structures de bandes pour des systèmes phononiques faisant intervenir des interfaces à fort contraste élastique, ou des interfaces

solide-fluide à cause de la vitesse transverse nulle des ondes dans les fluides. Ainsi, d'autres méthodes de calcul sont donc utilisées comme la méthode des éléments finis ou la FDTD qui sont nettement plus efficaces au niveau de ces derniers points.

II.2. La méthode des éléments finis

Contrairement à la PWE, la méthode des éléments finis, appelée FEM (*Finit Element Method*), est largement utilisée dans la simulation numérique pour la résolution des équations aux dérivées partielles, décrivant les phénomènes physiques. Historiquement, ses premières et larges utilisations concernent les problèmes liés aux structures mécaniques nécessitant la recherche des solutions de contraintes et de déformations dans les milieux élastiques. Tel est aussi le cas de l'étude de propagation des ondes acoustiques/élastiques dans les milieux phononiques. En effet, la méthode s'apprête facilement à l'application dans l'élaboration des problèmes en valeurs propres permettant le calcul des structures de bandes. Parmi ses applications en phononique, on peut citer les travaux de Khelif *et al*[48] qui l'ont utilisée pour calculer les courbes de dispersion d'un CP bidimensionnel constitué d'inclusions cylindriques dans une plaque. L'ouverture de bandes interdites ainsi que le guidage des ondes élastiques dans ces structures phononiques à inclusions ont été aussi étudiés par Djafari-Rouhani *et al*[49] en utilisant la méthode des éléments finis. T. Chen et T-T. Wu[50] se sont intéressés aussi aux structures de bandes et au guidage des ondes élastiques, mais dans un nouveau type de CP constitué de cylindres déposés périodiquement sur une plaque d'aluminium. Dans toutes ces études, la FEM a montré son efficacité en termes de convergence et de temps de calcul, comparée à la PWE, notamment dans le cas des plaques finies.

II.2.1. Principe général

La méthode des éléments finis est adaptée pour résoudre presque tous les types d'équations aux dérivées partielles (EDP) régissant un problème physique quelconque, en particulier les équations relatives à la propagation des ondes élastiques.

Pour une onde acoustique ou élastique se propageant dans un milieu cubique ou isotrope, les équations de propagation s'écrivent comme suit :

$$\begin{cases} -\rho\omega^2 u_x = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(c_{11}\dfrac{\partial u_x}{\partial x}+c_{12}\dfrac{\partial u_y}{\partial y}+c_{12}\dfrac{\partial u_z}{\partial z}\right)+\dfrac{\partial}{\partial y}\left(c_{44}\dfrac{\partial u_x}{\partial y}+c_{44}\dfrac{\partial u_y}{\partial x}\right)+\dfrac{\partial}{\partial z}\left(c_{44}\dfrac{\partial u_x}{\partial z}+c_{44}\dfrac{\partial u_z}{\partial x}\right) \\ -\rho\omega^2 u_y = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(c_{44}\dfrac{\partial u_x}{\partial y}+c_{44}\dfrac{\partial u_y}{\partial x}\right)+\dfrac{\partial}{\partial y}\left(c_{12}\dfrac{\partial u_x}{\partial x}+c_{11}\dfrac{\partial u_y}{\partial y}+c_{12}\dfrac{\partial u_z}{\partial z}\right)+\dfrac{\partial}{\partial z}\left(c_{44}\dfrac{\partial u_y}{\partial z}+c_{44}\dfrac{\partial u_z}{\partial y}\right) \\ -\rho\omega^2 u_z = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(c_{44}\dfrac{\partial u_x}{\partial z}+c_{44}\dfrac{\partial u_z}{\partial x}\right)+\dfrac{\partial}{\partial y}\left(c_{44}\dfrac{\partial u_y}{\partial z}+c_{44}\dfrac{\partial u_z}{\partial y}\right)+\dfrac{\partial}{\partial z}\left(c_{12}\dfrac{\partial u_x}{\partial x}+c_{12}\dfrac{\partial u_y}{\partial y}+c_{11}\dfrac{\partial u_z}{\partial z}\right) \end{cases} \quad (2.14)$$

où les fonctions inconnues sont les composantes du champ de déplacement $(u_i)_{i\in\{x,y,z\}}$. A ce système d'équations sont ajoutées les conditions aux limites qui contraignent les solutions recherchées.

Afin de décrire plus aisément la méthode des éléments finis, nous partirons d'une formulation plus générale en écrivant le système (2.14) plutôt sous la forme suivante :

$$-\nabla.(C\nabla u) = \omega^2 u$$

Cette équation est à résoudre sur un domaine Ω de IR^3, avec les conditions aux limites sur la frontière $\partial\Omega$ du domaine Ω.

On précise que l'adhérence de Ω, notée $\overline{\Omega} = \Omega \cup \partial\Omega$, est un ensemble compact.

Le principe de la méthode des éléments finis peut se résumer ainsi :

- L'écriture sous la forme variationnelle : les équations aux dérivées partielles sont écrites sous une forme variationnelle vérifiée pour des fonctions test appartenant à un espace vectoriel bien défini V. Cette forme s'appelle la forme faible du problème;
- et la discrétisation : la solution du problème variationnel est décomposée dans la base d'un espace vectoriel de dimension finie $V_N \in V$. Les éléments de cette base sont appelés les fonctions de forme.

La formulation variationelle du problème est ensuite exprimée en fonction des fonctions de forme de l'espace V_N, et le système est finalement écrit sous forme matricielle. La résolution du système matriciel permet d'obtenir la fonction solution du problème.

II.2.1.1. Formulation variationelle ou forme faible

Le point de départ est notre équation ci-dessous, définie précédemment :

$$-\nabla.(C\nabla u) = \omega^2 u \quad (2.15)$$

La résolution se fait sur un domaine Ω ouvert borné et connexe de IR^3. Ce domaine constitue le milieu dans lequel on veut étudier la propagation des ondes acoustiques. *u* étant la fonction champ de déplacement inconnue et appartenant à $C^2(\overline{\Omega}, IR^3)$ qui est l'espace des fonctions définie de $\overline{\Omega}$ vers IR^3 et deux fois différentiable sur l'ouvert Ω.

Pour les conditions aux limites, nous partirons de l'exemple de condition de Neumann généralisée sur la frontière $\partial\Omega$, à savoir :

$$\vec{n}\cdot(C\nabla u) + qu = g \text{ sur } \partial\Omega \quad (2.16)$$

$\vec{n}$ étant la normale extérieure à la frontière $\partial\Omega$, q et g sont des fonctions connues définies sur $\partial\Omega$. Dans le cas où q et g sont nulles, la condition de Neumann exprime la condition aux limites d'une surface en contact libre.

Si u est solution de l'équation (2.15), on multiplie par une fonction test arbitraire v et on intègre sur Ω :

$$\int_{\Omega} -\left(\nabla \cdot \left(C\nabla u\right)\right)v \; dx = \int_{\Omega} \omega^2 uv dx$$

En utilisant la formule de Green, on obtient :

$$\int_{\Omega} \left(C\nabla u\right)\cdot\nabla v \; dx - \int_{\partial\Omega} \vec{n}\cdot\left(C\nabla u\right)v \; dx = \int_{\Omega} \omega^2 uv dx$$

L'intégrale sur la frontière $\partial\Omega$ peut donc être remplacée par la condition aux limites (2.16) :

$$\int_{\Omega} \left(C\nabla u\right)\cdot\nabla v \; dx - \int_{\partial\Omega} \left(g - qu\right)v \; dx = \int_{\Omega} \omega^2 uv dx \qquad (2.17)$$

Cette forme du problème est appelée forme variationelle ou forme faible du système différentiel défini par les deux équations (2.15) et (2.16).

On montre que la résolution du système d'équations (2.15) et (2.16) revient à trouver les fonctions solutions u dans un espace vectoriel de fonctions V bien défini, vérifiant la forme faible (2.17) quelle que soit la fonction test v appartenant à ce même espace V.

II.2.1.2. Maillage, fonctions de forme et résolution

La résolution du problème (2.16) se fait dans un espace de fonction V bien défini à dimension infinie. Pour le calcul numérique, l'étape suivante consiste à choisir un sous-espace vectoriel de travail V_N, de dimension finie N, inclus dans V, avec $\lim_{N\to\infty} V_N = V$, condition nécessaire pour assurer la convergence vers la solution.

L'espace d'approximation V_N est construit par la mise en place d'un maillage du domaine $\overline{\Omega}$. Le maillage est un découpage du domaine de résolution $\overline{\Omega}$ en un nombre fini de sous domaines disjoints deux à deux et définis par des points appelés nœuds. Les bords de ces sous domaines définissent un réseau de frontières liant ces nœuds dans tout le domaine compact $\overline{\Omega}$. La figure 2.6 présente un exemple de maillage sur un domaine bidimensionnel Ω.

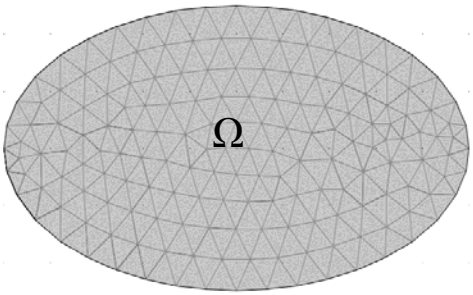


Figure 2.6 : Exemple de maillage tétraédrique sur un domaine Ω

Les fonctions du sous espace vectoriel V_N sont définies et continues sur chaque nœud et vérifient les conditions aux limites du problème aux bords du domaine $\overline{\Omega}$. Elles s'écrivent sous forme de combinaisons linéaires d'éléments d'une base bien choisie et simple de V_N. Les éléments de cette base sont appelés fonctions de forme, et sont en général constitués de polynômes d'ordre 1, 2 ou 3. Ces fonctions de forme sont définies localement sur chaque noeud du domaine, continues sur tout le domaine, et vérifient aussi les conditions aux limites du problème. On peut citer comme exemple de fonctions de forme les polynômes de Lagrange où chaque fonction de base prend la valeur 1 sur un noeud et la valeur 0 sur les autres nœuds. Dans ce cas bien précis, il y a autant de fonctions de base que de noeuds. Pour ce type d'éléments d'approximation, la solution est continue entre sous domaines mais pas forcément sa dérivée. Ainsi, l'approximation lagrangienne n'est pas adaptée qu'aux problèmes d'équations aux dérivées partielles du second ordre. Pour les problèmes EDP (Equations aux Dérivées Partielles) d'ordre supérieur, un autre exemple de fonctions de base est adopté, en l''occurrence les éléments Hermitiens où deux fonctions de bases sont associées à chaque noeud, la première ayant pour rôle d'ajuster la solution tandis que la deuxième est définie pour sa dérivée.

Si l'on note ces fonctions de forme par $(\phi_i)_{1\le i\le N}$, la forme variationnelle (2.17) est vérifiée pour toutes ces fonctions. Ainsi :

$$\int_{\Omega} (C\nabla u)\cdot\nabla\phi_i dx - \int_{\partial\Omega} (g - qu)\phi_i dx = \omega^2 \int_{\Omega} u\phi_i dx \quad \forall i \in \{1,..., N\} \quad (2.18)$$

Puisqu'on cherche une solution u dans V_N, celle-ci peut être décomposée dans la base $(\phi_i)_{1\le i\le N}$:

$$u(x, y, z) = \sum_{j=1}^{N} U_j \phi_j (x, y, z) \qquad (2.19)$$

Dans le cas où les $(\phi_j)_{1\le j\le N}$ sont des polynômes lagrangiens, le nombre de nœuds est de *N*, et U_j correspond à la valeur recherchée de la fonction *u* au nœud *j*. Ainsi, en reportant la décomposition (2.19) dans (2.18), on obtient :

$$\sum_{j=1}^{N}\left(\int_{\Omega}\left(C\nabla\phi_j\right)\cdot\nabla\phi_i dx+\int_{\partial\Omega}q\phi_j\phi_i dx-\omega^2\int_{\Omega}\phi_j\phi_i dx\right)U_j=\int_{\partial\Omega}g\phi_i dx$$

Dans le cas où les fonctions *q* et *g* sont nulles (conditions aux limites libres), nous avons :

$$\sum_{j=1}^{N}\left(\int_{\Omega}\left(C\nabla\phi_j\right)\cdot\nabla\phi_i dx-\omega^2\int_{\Omega}\phi_j\phi_i dx\right)U_j=0$$

Cette dernière formulation peut être écrite sous la forme d'un problème en valeurs propres

$$KU=\omega^2 MU \quad (2.20)$$

où *K* et *M* sont des matrices d'ordre *N*, et *U* une colonne de dimension *N* regroupant les coefficients de décomposition de la solution recherchée dans la base $(\phi_j)_{1\le j\le N}$, telles que :

$$U=\left(U_j\right)_{1\le j\le N}$$

$$K_{i,j}=\int_{\Omega}\left(C\nabla\phi_j\right)\cdot\nabla\phi_i dx$$

et

$$M_{i,j}=\int_{\Omega}\phi_j\phi_i dx$$

K et *M* s'appelles respectivement matrice de rigidité (*stiffness matrix*) et matrice de masse (*mass matrix*). Selon la nature de celles-ci, le problème matriciel (2.20) est résolu par une méthode itérative type Arnoldi ou Lanczos[51] permettant de déterminer les valeurs propres λ ainsi que les vecteurs propres associés pour avoir la solution *u* du problème.

Les calculs effectués par les éléments finis dans le cadre de nos travaux de thèse ont été élaborés en utilisant le logiciel Comsol Multiphysics 3.5a mis en place pour faciliter toutes les étapes de la méthode. Il suffit ainsi de bien introduire les équations aux dérivées partielles décrivant le problème, définir le domaine de résolution et les conditions aux limites, puis choisir un maillage ainsi que les fonctions de forme adaptées, et enfin le solveur de calcul des solutions.

II.2.2. Application de la méthode FEM pour le calcul des structures de bandes et champs de déplacement

Partant du système d'équations (2.14) sur un domaine périodique, et en appliquant le théorème de Bloch, le problème se présente sous forme de système d'équations différentielles paramétrées par le vecteur d'onde $\vec{k}$. Le problème matriciel final donné par la FEM est de la forme :

$$K\left(\vec{k}\right)U = \omega^2 M\ U$$

Ainsi, comme dans le cas de la PWE, pour chaque valeur de $\vec{k}$, on calcule les modes propres du problème matriciel. La structure de bandes est ainsi déterminée pour un CP. En ce qui concerne le champ de déplacement, pour chaque vecteur d'onde et pour chaque mode, la solution est interpolée en calculant ses valeurs aux nœuds du maillage dans tout le domaine de résolution.

II.2.3. Convergence

Comme mentionné auparavant, la convergence de la solution dépend de la construction de l'espace d'approximation V_N. Plus la dimension N de ce dernier est grande, plus l'espace de décomposition est grand, et meilleure est l'interpolation de la solution qui se rapproche de la solution recherchée sur V. Au niveau du maillage, l'augmentation des éléments de la base de l'espace V implique un plus grand nombre de nœuds, et donc des sous domaines du maillage car, au moins une fonction de forme (élément de base de V_N) est associée à chaque nœud. En somme, plus le maillage est fin et bien distribué dans le domaine, mieux la solution est approchée.

Par ailleurs, le maillage est d'une importance capitale dans la méthode des éléments finis. En effet, le choix de la forme des sous-domaines du maillage ainsi que les fonctions de forme sont déterminants dans le degré d'approximation souhaité pour la solution recherchée. Aussi, il est très utile de prédire la forme et les variations de la fonction solution afin de déterminer le maillage le plus adapté pour mieux l'approcher. D'un autre coté, plus le nombre d'éléments du maillage est grand, plus le temps nécessaire au calcul de la solution est long, du fait de l'augmentation du nombre de fonctions de forme, et par conséquent des matrices de rigidité et de masse. Malgré cela, cette méthode reste, dans beaucoup de configurations, plus efficace et rapide comparée à d'autres méthodes.

II.3. La méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD) : *Finit Difference Time Domaine*

Durant ces dernières décennies, les scientifiques ont développé maintes méthodes numériques permettant la résolution de problèmes physiques complexes, dont celle des différences finies résolues dans le temps, aussi connue et utilisée que la méthode des éléments finis. Appelée souvent par son acronyme FDTD, elle a été mise en place dans les années soixante pour étudier les phénomènes régis par des équations différentielles impliquant le temps. Elle permet de suivre l'évolution des événements physiques depuis l'instant initial jusqu'à l'état permanent en passant par le régime transitoire. Il n'y a donc pas d'inversion de matrice ou de recherche de valeurs propres comme dans le cas de la PWE. De plus, l'approche temporelle qu'offre la FDTD la rend adaptée même aux phénomènes non linéaires et non stationnaires.

Offrant davantage de facilité dans sa compréhension et dans l'écriture de son algorithme, la FDTD est largement utilisée dans les études relatives à la mécanique des matériaux ainsi qu'à la propagation des ondes. Dans le domaine de la phononique, elle se rapproche plus de la réalité car elle offre la possibilité de générer une excitation (source) dans un CP et de suivre dans le temps le comportement de l'onde et son interaction avec le CP, ce qui permet d'y étudier sa transmission. Ainsi, elle a été appliquée en 2000 par Sigalas et Garcia pour déterminer le coefficient de transmission dans une structure phononique tridimensionnelle[52]. Ils ont montré qu'en plus de ses résultats concordant parfaitement avec ceux de la PWE dans la détermination des bandes interdites, la FDTD dépasse les limites de la PWE car elle permet l'étude de systèmes phononiques impliquant des éléments fluides (où la vitesse transverse est nulle) dans une matrice solide. La FDTD a de surcroît montré son efficacité pour différents types de systèmes périodiques solide-solide, solide-liquide et solide-vide[53].

En plus du calcul du coefficient de transmission, Myashita et Inoue[54] se sont intéressés au guidage d'ondes élastiques dans un cristal sonique fini. Ils ont ainsi construit une structure artificielle finie et ont montré l'efficacité de la FDTD dans l'analyse de propagation d'ondes élastiques dans ce type de système. D'autres études de transmission, de confinement d'ondes et de guidage ont pu être réalisées par la suite en recourant à la FDTD. On peut citer par exemple les travaux de Khelif *et al*[55, 56] et ceux de Pennec *et al*[57] sur des structures phononiques présentant des défauts avec des guides d'ondes simples et coudés, ou ayant des défauts de cavité pour des systèmes infinis à inclusions cylindriques périodiques. Heisch *et al*[58] ont pu mettre en place un algorithme FDTD pour le calcul de structures de bandes,

donnant des résultats qui concordent avec ceux de la PWE. De leur coté, Sun *et al*[59] se sont intéressés au guidage des ondes acoustiques de surface dans un CP bidimensionnel en utilisant des milieux absorbants appelées PML (*Perfectly Matched Layer*). Nous aurons l'occasion de revenir sur les propriétés de ce type de milieux par la suite.

II.3.1. Principe général

A partir des équations de mouvement qui régissent la propagation des ondes élastiques dans un milieu quelconque, la FDTD permet de rapprocher les solutions champ de déplacement et contraintes en se basant sur un développent en différences finies des dérivées partielles qui interviennent dans les équations en question. Ces différences finies reposent sur une discrétisation dans l'espace (pour les dérivées spatiales) et une autre temporelle (relative aux dérivées temporelles), lesquelles discrétisations doivent être bien choisies afin d'assurer la convergence des fonctions inconnues recherchées. Le détail du principe général de développement des équations du mouvement élastique est reporté en annexe B.

II.3.2. Calcul de structure de bandes

La première étape dans la résolution des équations de mouvement consiste à isoler une cellule de périodicité de la structure phononique en appliquant la condition périodique de Bloch, introduite en FDTD par Hsieh *et al*[58]. Si le calcul de structure de bandes dans la PWE et la FEM se ramène à la résolution d'un problème matriciel de recherche de valeurs propres, l'approche adoptée dans la FDTD est bien différente.

En effet, dans le calcul des courbes de dispersion par la FDTD, les modes de vibration de la structure phononique sont déterminés pour chaque valeur de $\vec{k}$. Pour se faire, une source d'excitation à large bande fréquentielle est introduite à un endroit de la cellule. Une onde acoustique est ainsi générée par cette source et se propage dans la cellule unité en conformément aux conditions de Bloch. Après plusieurs itérations temporelles, les modes de vibration de la cellule apparaissent. En relevant les valeurs du champ de déplacement en fonction du temps sur un point de la cellule, les modes peuvent être obtenus à partir des pics de résonance du spectre du champ de déplacement. La figure 2.7 montre un exemple de spectre de champ de déplacement pour une structure phononique bidimensionnelle infinie, avec des pics de modes longitudinaux, calculé par transformée de Fourier du champ u_x pour une valeur fixée du vecteur d'onde. Cet exemple est le résultat d'un algorithme FDTD que nous avons développé dans le cadre de cette thèse. Les valeurs des fréquences des pics sont

ainsi relevées pour chaque valeur du vecteur d'onde, ce qui permet de déterminer la structure de bandes du CP.

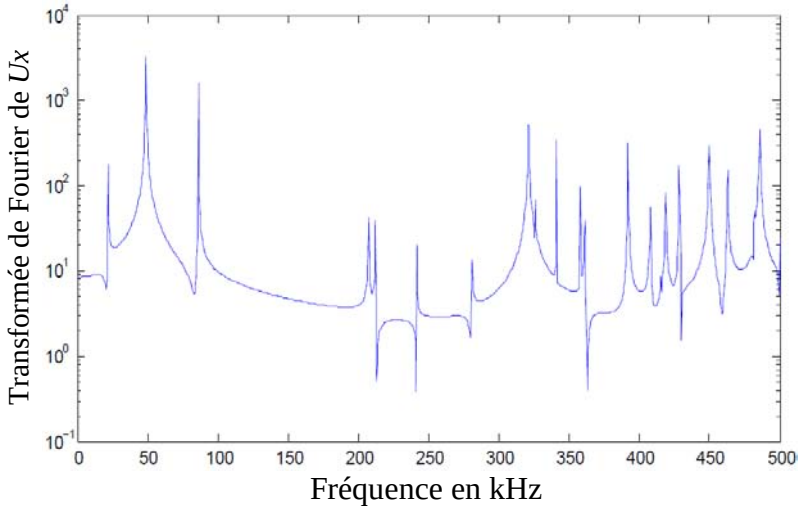


Figure 2.7 : Exemple de spectre de transmission dans un cristal phononique bidimensionnel pour un vecteur d'onde fixé

II.3.3. Calcul du coefficient de transmission

En phononique, la transmission est la capacité de l'onde élastique à traverser une structure périodique à une fréquence donnée. Elle se calcule en mettant en place une source générant des ondes élastiques à large bande de fréquences, qui vont traverser le cristal phononique pour être interceptées en enregistrant les valeurs de champ de déplacement en fonction du temps. Afin de comprendre le processus de calcul du coefficient de transmission, nous prendrons l'exemple du cristal phononique bidimensionnel de la figure 2.8 ci-dessous. Des cylindres en aluminium, infiniment longs suivant leur axe, sont arrangés dans une matrice d'époxy suivant une périodicité carrée dans les deux directions X et Y de l'espace. Les axes des cylindres sont parallèles à l'axe Z (figure 2.8).

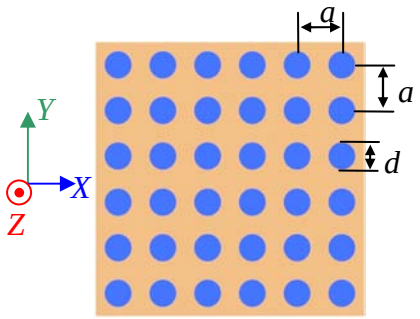


Figure 2.8 : Coupe transversale d'un cristal phononique bidimensionnel constitué de cylindres en aluminium (en bleu) infiniment longs suivant Z, disposés périodiquement suivant une structure carrée dans une matrice d'époxy (en orange).

Pour calculer le coefficient de transmission, on commence d'abord par choisir une direction de propagation qui définira l'arrangement des cylindres vus par l'onde élastique afin d'étudier sa transmission dans cette direction. Ensuite, une rangée de cylindres suffisamment nombreux est choisie afin d'avoir une bonne interaction entre l'onde et la structure. A tout cela, les conditions aux limites périodiques sont ajoutées sur les frontières dont la normale est perpendiculaire à la direction de propagation. Des domaines absorbants (PML) sont aussi joints aux frontières perpendiculaires à la direction de propagation afin d'éliminer les phénomènes de réflexion de l'onde sur les bords (voir figure 2.9).

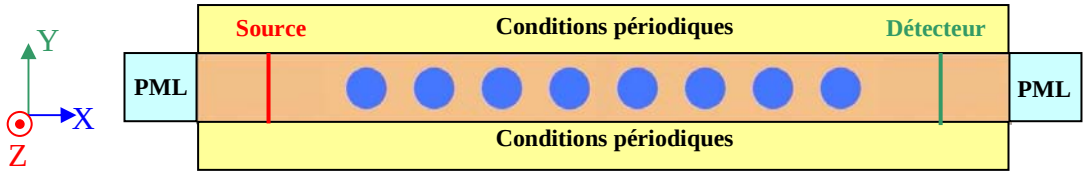


Figure 2.9 : Le modèle adopté pour le calcul du coefficient de transmission du cristal phononique de la figure 2.8

Dans l'exemple présenté ci-dessus, la direction de propagation choisie est suivant X et les domaines absorbants utilisés sont de type PML. Avant de continuer le calcul du coefficient de transmission, nous allons présenter brièvement ce type de condition absorbante.

II.3.3.1. Domaines absorbants PML (*Perfectly Matched Layer*)

La PML est un domaine artificiel créé pour le calcul numérique afin de traiter les problèmes de propagation d'ondes dans les milieux infinis. Sachant qu'en simulation numérique, les domaines conçus ne peuvent pas être infinis, l'idée est de mettre en place des conditions aux limites absorbantes aux frontières du domaine étudié. L'objectif est de pouvoir empêcher l'onde de se réfléchir au niveau de ces frontières. Les ondes passent ainsi l'interface entre le domaine Non PML et le domaine PML et sont absorbées au niveau de ce dernier. La formulation mathématique de la PML en FDTD a été introduite pour la première fois par Bérenger *et al*[60] en 1994 pour les ondes électromagnétiques régies par les équations de Maxwell. Elle a été ensuite reformulée par Chew et Liu[61] pour les ondes élastiques en ajoutant une propriété d'amortissement au niveau des discrétisations FDTD du domaine PML. Chagla *et al*[62] ont mis en place une extension de la PML pour étudier les cristaux phononiques piézoélectriques bidimensionnels. La formulation de la PML en termes d'équations est reportée en annexe C.

II.3.3.2. Coefficient de transmission

Revenons à l'exemple phononique bidimensionnel de la figure 2.8 pour le calcul du coefficient de transmission. Une fois que les domaines de propagation de l'onde sont bien définis, que les conditions aux limites périodiques sont introduites et les domaines PML définis aussi, une excitation de l'onde élastique à large spectre est produite au niveau de la source (marquée en rouge sur la figure 2.9) en appliquant une force extérieure introduite aux équations de mouvement (2.4). Au fur et à mesure de l'avancement des itérations temporelles, cette onde traverse le CP, puis elle est interceptée au niveau du détecteur (marqué en vert sur la figure 2.9). A ce niveau, l'évolution temporelle du champ de déplacement est enregistrée en fonction du temps, et le spectre du signal est calculé par transformée de Fourier, ce qui permet de tracer le coefficient de transmission en fonction de la fréquence. La figure 2.10 ci-dessous présente un exemple de résultat de calcul du coefficient de transmission pour des ondes planes par un algorithme que nous avons développé dans le cadre de notre thèse. Elle révèle la présence de deux principales bandes interdites phononiques situées aux intervalles de fréquences [90kHz, 210kHz] et [224 kHz , 257 kHz].

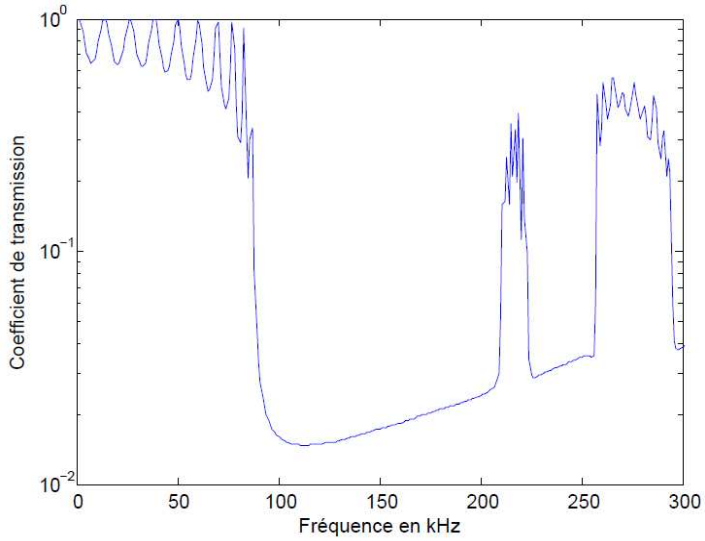


Figure 2.10 : Coefficient de transmission des ondes planes pour la structure présentée dans la figure II.9, composée de cylindres d'acier dans une matrice d'époxy. Les deux matériaux sont considérés isotropes

II.4. Bref descriptif du principe de la méthode de décomposition en ondelettes

Une des nouvelles méthodes apparues ces dernières années pour le calcul des structures de bandes est la méthode de décomposition en ondelettes utilisée largement dans le traitement

de signal et d'image aux cotés de la transformée de Fourier. Contrairement à cette dernière où les éléments de base de décomposition sont des fonctions sinusoïdales périodiques à support infini, ceux de la décomposition en ondelettes sont des fonctions oscillantes à support fini et de carré sommable. L'avantage de la décomposition en ondelettes est que les fonctions ondelettes sont bien localisées dans l'espace et dans le temps, ce qui permet de bien détecter et analyser les problèmes de discontinuité. Leurs formes oscillatoires sont mieux adaptées pour décrire le caractère vibratoire des ondes élastiques, comparées aux fonctions de bases de décomposition en éléments finis. De plus, l'étape de construction du maillage n'est plus nécessaire et les matrices ainsi construites sont plus réduites.

En se basant sur les travaux de Checoury *et al*[11], qui ont utilisé les ondelettes pour le calcul de la structure de bandes en photonique, Yan et Wang[63, 64] ont introduit la méthode des ondelettes pour la première fois en phononique et ont montré son efficacité en terme de rapidité de convergence dans le calcul des structures de bandes pour les systèmes solide/solide et solide/fluide, en la comparant à la PWE.

Brièvement, le principe de la méthode de décomposition en ondelettes est semblable à celui des éléments finis dans la mesure où les équations du problème sont d'abord réécrites sous la forme variationnelle vérifiée pour toutes les fonctions d'un espace vectoriel, sauf que la base de cet espace est constituée des fonctions ondelettes. Les composantes du champ de déplacement sont ensuite décomposées dans cette base d'ondelettes et introduites dans les équations sous forme variationnelle. Le système d'équations est enfin écrit sous forme matricielle définissant un problème de valeurs propres semblable à celui obtenu en éléments finis. Le fait que les fonctions ondelettes sont définies sur des compacts bien déterminés dans le domaine de résolution permet de s'affranchir de l'étape de maillage, contrairement aux éléments finis où celui-ci doit être mis en place pour définir les domaines des fonctions de forme.

Dans le cadre de cette thèse, nous avons entrepris un développement théorique à base d'un formalisme en ondelettes afin de se doter d'un nouvel outil numérique efficace permettant un calcul rapide des structures de bandes. Cependant, cette méthode n'a pu être complètement mise au point et nécessite par conséquent un travail complémentaire pour la finaliser. Pour cette raison, nous n'exposerons pas de support mathématique relatif au développement en ondelettes dans ce manuscrit.

Conclusion

En plus des méthodes PWE, FEM, FDTD et ondelettes présentées dans ce chapitre, d'autres méthodes, citées en introduction, ont fait l'objet d'un grand intérêt pour les scientifiques dans l'étude des systèmes phononiques. Ces méthodes sont devenues des outils incontournables pour simuler le comportement mécanique des CP lors d'une propagation d'onde acoustique dans ces milieux. Ainsi, à partir des équations de mouvement élastique, elles ont permis aux chercheurs d'accéder aux calculs des courbes de dispersion de ces systèmes ainsi que leurs coefficients de transmission d'onde acoustique / élastique. Chacune de ces méthodes numériques, ayant une formulation différente, présente des avantages et des inconvénients, et est plus ou moins adaptée à l'étude de tel ou tel autre système. Ainsi, le choix de la méthode de calcul se base essentiellement sur son degré de complexité et d'adéquation avec le système étudié, et dépend du comportement physique que l'on envisage d'observer, des objectifs fixés, et enfin des moyens de calculs.

Aussi, les chercheurs essaient-ils toujours de mettre en place d'autres méthodes numériques plus performantes à tous les égards. Simultanément, de nouvelles idées ont vu le jour pour palier des problèmes qui peuvent surgir lors de calcul numérique; il s'agit par exemple de la création de milieux artificiels ou absorbants pour l'atténuation de l'onde élastique afin d'éviter les problèmes de transmission ou de réflexion d'ondes.

Dans le cadre de notre thèse, nous avons eu l'occasion de découvrir quatre méthodes numériques de calcul de structure de bandes phononique, que nous avons présentées dans ce chapitre, dont une, la FDTD, permet d'accéder au coefficient de transmission. Les travaux théoriques que nous présenterons dans les chapitres suivants ont été faits essentiellement par la PWE et les éléments finis. Ainsi, dans le chapitre 3, nous présenterons une nouvelle méthode numérique PWE modifiée pour le calcul des structures de bandes évanescentes pour les ondes de Lamb dans le cristal phononique plaque. Les chapitres 4, 5 et 6 feront l'objet d'étude d'ouverture de bandes interdites pour de nouvelles structures phononiques dans les régimes sonique et hypersonique. Dans ces chapitres, les calculs théoriques on été faits par éléments finis en utilisant le logiciel Comsol Multiphysics. Nous aurons donc l'occasion de présenter en détail les différentes étapes de ces méthodes pour arriver à nos objectifs concernant le calcul des structures de bandes, des champs de déplacement et du coefficient de transmission.

Références

[1] M. Plihal and A. A. Maradudin, Phys. Rev. B **44**, 8565 (1991)

[2] P. R. Villeneuve, and Michel Piché, Phys. Rev. B **46**, 4969 (1992)

[3] K. M. Ho, C. T. Chan, and C. M. Soukoulis, Phys. Rev. Lett. **65**, 3152 (1990)

[4] R. D. Meade, K. D. Brommer, A. M. Rappe, and J. D. Joannopoulos, Appl. Phys. Lett. **61**, 495 (1992)

[5] K. M. Leung, and Y.Qiu, Phys. Rev. B **48**, 7767 (1993)

[6] K. Ohtaka, T. Ueta, and K. Amemeya, Phys. Rev. B **57**, 2550 (1998)

[7] Z. Y. Li, and K. M. Ho, Phys. Rev. B **68**, 155101 (2003)

[8] L. M. Li, and Z. Q. Zhang, Phys. Rev. B **58**, 9587 (1998)

[9] M. Kafesaki, and E. N. Economou, Phys. Rev. B **60**, 11993 (1999)

[10] Z. L. Liu, A. L. Goertzen, and J. H. Page, Phys. Rev. B **62**, 2446 (2000)

[11] X. Checoury, and J. M. Lourtioz, Opt. Commun. **259**, 360 (2006).

[12] J. B. Pendry, and A. MacKinnon, Phys. Rev. Lett. **69**, 2772 (1992)

[13] C. T. Chan, Q. L. Yu, and K. M. Ho, Phys. Rev. B **51**, 16635 (1995)

[14] K. Sakoda, and J. Kawamata, Optics Express **3**, 12 (1998)

[15] K Schmidt, and P. Kauf, Comp. Meth. App. Mech. Engr. **198** 1249 (2009)

[16] Z. Liu, C. T. Chan, P. Sheng, A. L. Goertzen, and J. H. Page, Phys. Rev. B **62**, 2446 (2000)

[17] B.A. AULD, "Acoustic fields an waves in solids" Volume I, Wiley-interscience (1973)

[18] B.A. AULD, "Acoustic fields an waves in solids" Volume II, Wiley-interscience (1973)

[19] C. Herring, Phys. Rev. **57,** 1169 (1940)

[20] M. S. Kushwaha, P. Halevi, L. Dobrzynski, and B. Djafari-Rouhani, Phys. Rev. Lett. **71**, 2022 (1993)

[21] M. M. Sigalas, and E. N. Economou, Solid State Commun. **86**, 141 (1993)

[22] J. O. Vasseur, B. Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski, M. S. Kushawaha, and P. Halevi, J. Phys : Condens. Matter, **6** 8759-8770 (1994)

[23] M. M. Sigalas, and E. N. Economou, Europhys. Lett. **36** 241-246 (1996)

[24] Z. Hou, and B. M. Assouar, J. Phys. D : Appl. Phys. **42** 085103 (2009)

[25] Z. Hou, and B. M. Assouar, Phys. Lett. A **372** 2091 (2008)

[26] M. M. Sigalas, and E. N. Economou, J. Appl. Phys. **75** 2845 (1994)

[27] Z. G. Huang, and T-T. Wu, IEEE Ultrason. Symp. **1**, 77 (2005)

[28] M. M. Sigalas, J. Appl. Phys. **84**, 3026 (1998)

[29] L-Y. Wu, L-W. Chen, and C-M. Liu, Phys. Lett. A **373** 1189 (2009).

[30] A. khelif, M. Wilm, V. Laude, and S. Ballandras, Phys. Rev. E **69**, 067601 (2004)

[31] M. M. Sigalas, J. Acoust. Soc. Am. **101**, 1256 (1997)

[32] J. O. Vasseur, P. A. Deymier, B. Djafari-Rouhani, Y. Pennec, and A-C. Hladky-Hennion. Phys. Rev. B **77**, 085415 (2008)

[33] T-T. Wu, Z-G. Huang, and S. Lin, Phys. Rev. B **69**, 094301 (2004)

[34] Y. Tanaka, and S-I. Tamura, Phys. Rev. B **58**, 7958 (1998)

[35] Y. Tanaka, and S. I. Tamura, Phys. Rev. B **60**, 13 294 (1999)

[36] B. Manzanares-Martınez, Phys. Rev. B **68** 134303 (2003)

[37] V.Laude, M. Wilm, S. Benchabane, and A. Khelief, Phys. Rev. E **71**, 036607 (2005)

[38] T-T Wu, Z-C Hsu, and Z-G. Huang, Phys. Rev. B **71** 064303 (2005)

[39] M. Wilm, S. Ballandras, V. Laude, and T. Pastureaud, J. Acoust. Soc. Am. **112**, 943 (2002)

[40] J-C. Hsu, and T-T. Wu, IEEE Trans. Ultrason. Ferro- electr. Freq. Control **53**, 1169 (2006)

[41] V. Laude, Y. Achaoui, S. Benchabane, and A. Khelif, Phys. Rev, B **80**, 092301 (2009)

[42] V. Romero-Garcia, J. V. Sanchez-Pérez, and L. M. Garcia-Raffi, J. Appl. Phys. **108**, 044907 (2010)

[43] J. J. Chen, B. Qin, and J. C. Cheng, Chin. Phys. Lett. **22**, 1706 (2005)

[44] B. Bonello, C. Charles, and F. Ganot, Ultrasonics **44**, 1209 (2006)

[45] J-C. Hsu, and T-T. Wu, Phys. Rev. B **74,** 144303 (2006)

[46] S. G. Joshi, and Y Jin, J. Appl. Phys. **69,** 8018 (1991)

[47] Y. Achaoui, A. Khelif, S. Benchabane, and V. Laude, J. Phys. D : Appl. Phys. **43,** 185401 (2010)

[48] A Khelif, B. Aoubiza, S. Mohammadi, A. Adibi, and V. Laude, Phys. Rev. E **74,** 046610 (2006)

[49] B. Djafari-Rouhani, J. O. Vasseur, A. C. Hladky-Hennion, P. Deymier, F. Duval, B. Dubus, and Y. Pennec, Photonics and Nanostruct. Fundament. and Applic. **6,** 32 (2008)

[50] T-C. Wu, T-T. Wu, and J-C Hsu, Phys. Rev. B **79,** 104306 (2009)

[51] G. H. Golub, and C. F. Van Loan "Matrix computations" Third edition, The Johns Hopkins University Press (1996)

[52] M. M. Sigalas, and N. García J. Appl. Phys. **87**, 3122 (2000)

[53] Y. Tanaka, Y. Tomoyasu, and S-I. Tamura, Phys. Rev. B **62,** 7387 (2000)

[54] T. Miyashita, and C. Inoue, Jpn. J. Appl. Phys. **40**, 3488 (2001)

[55] A. Khelif, B. Djafari-Rouhani, V. Laude, and M. Solal, J. Appl. Phys. **94,** 7944 (2003)

[56] A. Khelif, A. Choujaa, S. Benchabane, B. Djafari-Rouhani, and V. Laude, Appl. Phys. Lett. **84**, 4400 (2004).

[57] Y. Pennec, B. Djafari-Rouhani, J. O. Vasseur, and H. Larabi , Appl. Phys. Lett. **87**, 261912 (2005)

[58]P-F. Heisch, T-T. Wu, and J-H Sun, Trans. Ultrason. Ferro- electr. Freq. Control **53**, 148 (2006)

[59] J-H. Sun, and T-T. Wu, Phys. Rev. B **74**, 174305 (2006)

[60] Bérenger, J. Comput. Phys. **114**, 185 (1994)

[61] W. C. Chew, and Q. H. Liu, J. Comput. Acoust. **4,** 341 (1996)

[62] F. Chagla, C. Cabani, and P. M. Smith, Proc.- IEEE Ultrason. Symp. 517 (2004)

[63] Z-Z. Yan, and Y-S. Wang, Phys. Rev. B **74**, 224303 (2006)

[64] Z-Z. Yan, and Y-S. Wang, Phys. Rev. B **78**, 094306 (2008)

[65] V. Laude, M. Wilm, S. Benchabane, and A. Khelif, Phys. Rev. **71**, 036607 (2005)

Chapitre 3

Ondes évanescentes dans les cristaux phononiques

Introduction

La plupart des études menées en phononique et rapportées dans la littérature s'intéressent principalement aux ondes élastiques se propageant sans atténuation[1-5]. Les études théoriques réalisées permettent d'accéder aux ondes, solutions des équations de propagation dans la première zone de Brillouin afin de tracer les courbes de dispersion. L'analyse de ces dernières permet de déceler l'existence ou non de plages fréquentielles où aucune solution d'onde n'existe, c'est-à-dire des bandes interdites phononiques. Il en résulte que les ondes élastiques ayant des fréquences dans ces bandes interdites ne peuvent se propager dans le cristal phononique et y sont par conséquent atténuées. Ces ondes s'inscrivent donc parmi les ondes évanescentes qui sont aussi des solutions aux équations de mouvement et interviennent toujours dans les problèmes traitant de propagation des ondes en présence d'une interface. Elles sont souvent omises dans les structures de bandes car l'intérêt majeur est souvent porté sur les ondes se propageant sans atténuation dans le CP. Ainsi, les méthodes d'approche des équations de propagation adoptées pour le calcul des structures de bandes ne permettent pas d'accéder aux solutions d'ondes évanescentes dans la plupart des travaux sur la phononique.

Les ondes évanescentes se caractérisent par le fait que leurs amplitudes s'atténuent exponentiellement avec la distance parcourue en partant de l'interface par laquelle elles ont été générées. En effet, leurs vecteurs d'onde présentent une partie complexe non nulle, ce qui donne lieu à une exponentielle décroissante au niveau de l'amplitude de l'onde[6]. Dans le domaine de la phononique, peu de travaux se sont intéressés à ces ondes[7-9]. Les premiers calculs de structures de bandes complexes ont été réalisés par Hsue *et al*[10] dans le cas des cristaux photoniques où ils ont utilisé une extension de la méthode de décomposition en ondes planes (PWE). Ils ont ainsi pu déterminer les modes évanescents en calculant les valeurs complexes du vecteur d'onde pour deux types de cristaux photoniques: l'isotrope et l'anisotrope. Par ailleurs, Laude *et al*[7,8] et Romero-Garcia *et al*[9] ont développé une extension de la PWE adaptée pour les structures phononiques, dite EPWE (*Extended Plane Wave Expansion*)[7], permettant de calculer les structures de bandes des modes évanescents. Laude *et al*[7,8] ont étudié des CP bidimensionnels composés d'inclusions cylindriques périodiques infinies et constituées d'un matériau[8] ou de vide[7] dans une matrice homogène. En plus des modes de propagation, ils ont ainsi mis en évidence l'existence de modes évanescents de Bloch qui interviennent dans les phénomènes de diffraction, et plus particulièrement au niveau des bandes interdites. Romero-Garcia *et al*[9] se sont aussi basés sur la méthode EPWE qu'ils ont développée afin d'étudier la structure de bande des modes évanescents. Ils se sont

ainsi intéressés à leurs comportements au niveau de la bande interdite pour un CP présentant un défaut de structure. Ils ont également mis en évidence expérimentalement l'atténuation exponentielle de l'onde acoustique à l'intérieur d'un CP pour une fréquence dans la bande interdite.

Les structures phononiques, étudiées dans les travaux que nous avons cités sur les ondes évanescentes, sont des systèmes infinis (en épaisseur) et concernent donc les ondes de volume. Cependant, et à notre connaissance, aucune étude ne s'est faite sur les ondes évanescentes dans le cas de CP en plaque, bien que la propagation des ondes de Lamb dans CP ait été l'objet de nombreuses études[11-14]. De ce premier constat, ce sujet a suscité notre intérêt, et partant ce chapitre constitue une présentation succincte de nos travaux réalisés pour l'étude des ondes évanescentes dans une structure phononique en plaque à ondes de Lamb. Néanmoins, la principale motivation derrière l'étude des ondes évanescentes dans les cristaux phononiques dans notre cas, a été de traiter la propagation des ondes évanescentes dans les cristaux phononiques à résonance locale (CPRL) et les métamatériaux acoustiques. En effet, dans le cas de ce type de structures, la compréhension des mécanismes de propagation, atténuation et conversion des ondes évanescentes, est primordiale pour avoir une bonne approche des nouveaux phénomènes caractérisant les métamatériaux acoustiques. A titre d'exemple, nous pouvons citer les phénomènes de réfraction négative[15-16], d'invisibilité acoustique[17], de super-focalisation[15]… . Les ondes évanescentes jouent un rôle clé dans ce genre de structures, et il nous a semblé intéressant de s'atteler dans un premier temps à l'étude du comportement de ces ondes dans les CPRL, et dans un second temps dans les métamatériaux acoustiques sous forme de plaque finie. Comme nous allons le voir par la suite dans ce chapitre, cette tâche s'est avérée très laborieuse et fort délicate.

Afin de développer notre modèle pour les structures finies, nous avons pris comme point de départ la méthode de calcul adoptée dans les travaux de Laude *et al*[7-8], à savoir la EPWE. Nous l'avons ensuite adaptée afin de pouvoir réaliser les calculs de structures de bandes pour les structures phononiques en plaque. L'objectif de ce chapitre est de présenter cette méthode ainsi que quelques résultats de calculs des structures de bandes complexes. Pour ce faire, nous nous sommes aussi inspirés de la méthode PWE mise en place par Hou et Assouar[11] pour le calcul des modes de Lamb. Nous commencerons d'abord par décrire le CP que nous allons étudier, qui est similaire à celui étudié par Hou et Assouar[11], puis exposer la méthode qu'ils ont développée pour contourner les problèmes de conditions aux limites libres. Nous procéderons ensuite à la description de la nouvelle méthode EPWE en partant des équations de mouvement jusqu'aux matrices permettant d'obtenir les vecteurs d'onde

complexes des modes évanescents. Nous finirons le chapitre en présentant les résultats des calculs pour deux structures phononiques à base de plaque finie, avec des discussions autour des différents modes évanescents qui interviennent dans les structures de bandes complexes.

I. Calcul des modes évanescents par la méthode PWE

I.1. Ondes évanescentes

Les ondes acoustiques (élastiques) peuvent être considérées comme une superposition d'ondes planes proportionnelles à la fonction d'onde $e^{i\omega t - i\vec{k}.\vec{r}}$. Si l'on s'intéresse aux propagations d'ondes dans le plan (X,Y), nous pouvons écrire le champs de déplacement associé sous la forme :

$$u(t,\vec{r}) = \sum_n a_n e^{i\omega t - i\vec{k}_n.\vec{r}} = \sum_n a_n e^{i\omega t - i\left(k_{xn}.x + k_{yn}.y\right)} \qquad (3.1)$$

i étant le nombre complexe vérifiant $i^2 = -1$

L'origine des ondes évanescentes peut être expliquée à partir de l'équation de dispersion :

$$k_n{}^2 = k_{x,n}^2 + k_{y,n}^2 = \left(\frac{\omega}{V}\right)^2 \qquad (3.2)$$

où V et ω sont respectivement la vitesse et la fréquence de propagation de l'onde dans le milieu étudié.

Si l'onde se propage avec une fréquence telle que $k_{x,n} > \frac{\omega}{V}$, alors $k_{y,n}$ devient purement imaginaire et vaut :

$$k_{y,n} = i\left(k_{x,n}^2 - \left(\frac{\omega}{V}\right)^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

ce qui donne lieu à une décroissance exponentielle vers zéro de la fonction d'onde intervenant dans l'expression (3.1) quand y tend vers l'infini :

$$\lim_{y\to\infty} e^{i\omega t - i\left(k_{xn}.x + k_{yn}.y\right)} = \lim_{y\to\infty} e^{-|k_{xn}|.y} e^{i\omega t - ik_{xn}.x} = 0 \qquad (3.3)$$

Ainsi, selon la fréquence avec laquelle l'onde se propage, elle peut dans certains cas être atténuée dans le milieu avec une décroissance exponentielle de son amplitude qui définit la distance à laquelle elle peut se propager. Ce type d'onde est appelé onde évanescente. Elle peut être calculée en cherchant les vecteurs d'ondes ayant une partie imaginaire non nulle dans la direction de propagation définie par ce même vecteur d'onde.

I.2. Calcul des modes évanescents par décomposition en ondes planes

La méthode de la décomposition en ondes planes classique présentée dans la section II du chapitre 2 permet d'obtenir les modes de propagation solutions de l'équation du mouvement pour le calcul des courbes de dispersion. Son principe repose sur la recherche des fréquences ω des modes propres en fixant au départ le vecteur d'onde $\vec{k}$ dans la première zone de Brillouin. On appellera cette procédure la méthode $\omega(\vec{k})$. Dans notre cas de quête des modes évanescents, le problème s'inverse car notre objectif est la recherche de vecteurs d'ondes possédant des valeurs complexes pour n'importe quelle direction dans la première zone de Brillouin. Ceci nous oblige donc à transformer et reformuler le problème en valeurs propres issu des équations du mouvement et de la décomposition en ondes planes. Cette reformulation permet d'isoler le vecteur d'onde qui deviendra notre nouvelle inconnue. Ainsi, pour chaque valeur de la fréquence ω, nous pourrons procéder à une recherche du vecteur d'onde solution de notre problème.

Avant d'aborder les développements des équations permettant de calculer les modes évanescents, nous décrirons d'abord le CP à ondes de Lamb qui fera l'objet de notre étude.

I.3. Structure phononique en plaque

Le cristal phononique que nous allons étudier est constitué d'une plaque d'épaisseur finie notée *e*, faite d'un matériau A, dans laquelle sont rangées périodiquement des inclusions cylindriques constituées d'un matériau B avec une symétrie carrée (figure 3.1).

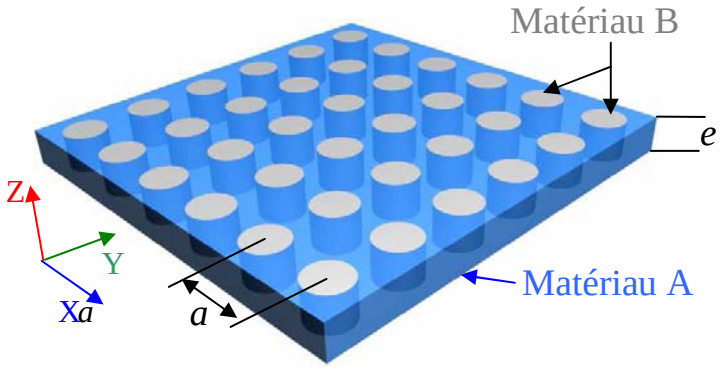


Figure 3.1 : Cristal phononique bidimensionnel constitué d'inclusions cylindriques périodiques dans une plaque d'épaisseur finie *e*. La périodicité de la structure est notée "*a*".

Nous avons déjà eu l'occasion de présenter cette structure dans la section II du chapitre 2. Dans ce dernier, nous avions présenté une méthode qui permet de contourner l'introduction des équations de conditions aux limites libres pour les surfaces inférieure et supérieure de la

plaque. Nous allons considérer que notre plaque est aussi infiniment périodique suivant la direction Z du repère cartésien. Le CP est ainsi répété suivant cette direction avec un espacement constitué d'une "couche de vide" entre chaque deux plaques voisines[11]. La figure 3.2 reprend ce schéma théorique du calcul adopté par Hou et Assouar[11].

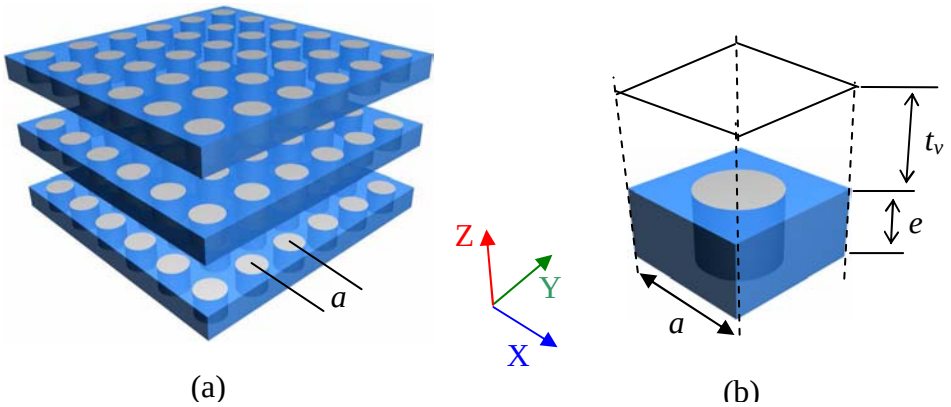


Figure 3.2 : (a) Plaque phononique bidimensionnelle répétée dans la direction Z. (b) La "super cellule" unité du cristal phononique contenant la « couche de vide » t_v dans la direction Z.

I.4. La formulation EPWE

Dans toute cette partie, nous allons considérer que les matériaux constituant notre CP sont cubiques. Autrement dit, leurs propriétés élastiques sont entièrement déterminées par les constantes élastiques c_{11}, c_{12} et c_{44}. Pour le cas isotrope, il suffit d'écrire que $c_{44}=(c_{11}-c_{12})/2$. Nous partons des équations de mouvement de propagation d'ondes élastiques écrites sous la forme suivante :

$$\begin{cases} -\rho\omega^2 u_x = \dfrac{\partial T_1}{\partial x} + \dfrac{\partial T_6}{\partial y} + \dfrac{\partial T_5}{\partial z} \\ -\rho\omega^2 u_y = \dfrac{\partial T_6}{\partial x} + \dfrac{\partial T_2}{\partial y} + \dfrac{\partial T_4}{\partial z} \\ -\rho\omega^2 u_z = \dfrac{\partial T_5}{\partial x} + \dfrac{\partial T_4}{\partial y} + \dfrac{\partial T_3}{\partial z} \end{cases} \qquad (3.4)$$

$$\text{avec} \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \\ T_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \partial u_x / \partial x \\ \partial u_y / \partial y \\ \partial u_z / \partial z \\ \partial u_y / \partial z + \partial u_z / \partial y \\ \partial u_x / \partial z + \partial u_z / \partial x \\ \partial u_y / \partial x + \partial u_x / \partial y \end{bmatrix} \qquad (3.5)$$

D'après le théorème de Bloch, nous pouvons écrire les champs de déplacement sous la forme exponentielle du vecteur d'onde $\vec{k}$:

$$u_j(\vec{r}) = e^{-i\vec{k}.\vec{r}} u_{j,\vec{k}} \qquad (3.6)$$

Aussi, compte tenu de la périodicité de la structure et donc des fonctions de champs de déplacement, de constantes élastiques et de densité, nous pouvons les écrire sous forme de décomposition de Fourier :

$$u_{j,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} u_{j,\vec{k},\vec{G}} e^{-i\vec{G}.\vec{r}} \qquad (3.7)$$

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} \rho_{\vec{G}} e^{-j\vec{G}.\vec{r}}\ ,\quad c_{kl}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} c_{kl,\vec{G}} e^{-i\vec{G}.\vec{r}} \text{ pour } (k,l) \in \{1;2;3;4;5;6\}^2 \qquad (3.8)$$

avec $\vec{G} = \frac{2\pi}{a}(m_1, m_2, m_3)$ vecteur de l'espace réciproque, et $(m_j)_{j\in\{x,y,z\}} \in \mathbf{Z}^3$

Les coefficients de Fourier $u_{j,\vec{k},\vec{G}}$, $c_{kl,\vec{G}}$ et $\rho_{\vec{G}}$ peuvent être calculés sur la "super cellule" unité par les formules inverses suivantes :

$$u_{j,\vec{k},\vec{G}} = \frac{1}{V} \int_{Cellule\ unité} u_{j,\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{G}.\vec{r}}$$

et

$$c_{kl,\vec{G}} = \frac{1}{V} \int_{Cellule\ unité} c_{kl}(\vec{r}) e^{i\vec{G}.\vec{r}}$$

où *V* est le volume de la "super cellule" unité.

Puisque notre intérêt se porte sur la propagation des ondes dans le plan (X,Y), nous avons donc $\vec{k} = (k_x, k_y, 0)$. Ce vecteur constitue l'inconnue de notre problème. Ainsi, la recherche des valeurs de ce vecteur d'onde dans n'importe quelle direction de la première zone de Brillouin nous donnera l'accès aux valeurs ayant une partie imaginaire non nulle correspondant aux modes évanescents. Afin de faciliter cette recherche, nous écrivons le vecteur d'onde sous la forme suivante :

$$\vec{k} = k(\cos\theta, \sin\theta, 0)$$

avec *k* la norme du vecteur d'onde et θ l'angle déterminant la direction de propagation dans laquelle nous souhaitons calculer les courbes de dispersions. $\theta = 0$ correspondra donc à la direction ΓX de la première zone de Brillouin. Nous noterons par la suite $\alpha_1 = \cos\theta$ et $\alpha_2 = \sin\theta$.

On commence par introduire l'expression (3.6) issue du théorème de Bloch dans les équations du système (3.5) en ajoutant les nouvelles notations $T_j = \hat{T}_j e^{-i\vec{k}.\vec{r}}$ avec $j \in \{1;2;3;4;5;6\}$. Nous avons donc :

$$T_1 = \left[c_{11} \frac{\partial u_{x,\vec{k}}}{\partial x} + c_{12} \frac{\partial u_{y,\vec{k}}}{\partial y} + c_{12} \frac{\partial u_{z,\vec{k}}}{\partial z} - ik\left(\alpha_1 c_{11} u_1 + \alpha_2 c_{12} u_2\right) \right] e^{-i\vec{k}.\vec{r}} = \hat{T}_1 e^{-i\vec{k}.\vec{r}} \qquad (3.9.a)$$

$$T_2 = \left[c_{12} \frac{\partial u_{x,\vec{k}}}{\partial x} + c_{11} \frac{\partial u_{y,\vec{k}}}{\partial y} + c_{12} \frac{\partial u_{z,\vec{k}}}{\partial z} - ik\left(\alpha_1 c_{12} u_1 + \alpha_2 c_{11} u_2\right) \right] e^{-i\vec{k}.\vec{r}} = \hat{T}_2 e^{-i\vec{k}.\vec{r}} \qquad (3.9.b)$$

$$T_3 = \left[c_{12} \frac{\partial u_{x,\vec{k}}}{\partial x} + c_{12} \frac{\partial u_{y,\vec{k}}}{\partial y} + c_{11} \frac{\partial u_{z,\vec{k}}}{\partial z} - ik\left(\alpha_1 c_{12} u_1 + \alpha_2 c_{12} u_2\right) \right] e^{-i\vec{k}.\vec{r}} = \hat{T}_3 e^{-i\vec{k}.\vec{r}} \qquad (3.9.c)$$

$$T_4 = \left[c_{44} \frac{\partial u_{y,\vec{k}}}{\partial z} + c_{44} \frac{\partial u_{z,\vec{k}}}{\partial y} - ik\left(\alpha_2 c_{44} u_z\right) \right] e^{-i\vec{k}.\vec{r}} = \hat{T}_4 e^{-i\vec{k}.\vec{r}} \qquad (3.9.d)$$

$$T_5 = \left[c_{44} \frac{\partial u_{x,\vec{k}}}{\partial z} + c_{44} \frac{\partial u_{z,\vec{k}}}{\partial x} - ik\left(\alpha_1 c_{44} u_z\right) \right] e^{-i\vec{k}.\vec{r}} = \hat{T}_5 e^{-i\vec{k}.\vec{r}} \qquad (3.9.e)$$

$$T_6 = \left[c_{44} \frac{\partial u_{x,\vec{k}}}{\partial y} + c_{44} \frac{\partial u_{y,\vec{k}}}{\partial x} - ik\left(\alpha_2 c_{44} u_1 + \alpha_1 c_{44} u_2\right) \right] e^{-i\vec{k}.\vec{r}} = \hat{T}_6 e^{-i\vec{k}.\vec{r}} \qquad (3.9.f)$$

Introduisant la notation $T_j = \hat{T}_j e^{-i\vec{k}.\vec{r}}$ et l'expression (3.6) dans l'équation (3.4), nous avons :

$$\begin{cases} -\rho\omega^2 u_x = \dfrac{\partial \hat{T}_1}{\partial x} + \dfrac{\partial \hat{T}_6}{\partial y} + \dfrac{\partial \hat{T}_5}{\partial z} - ik\left(\alpha_1 \hat{T}_1 + \alpha_2 \hat{T}_6\right) \\ -\rho\omega^2 u_y = \dfrac{\partial \hat{T}_6}{\partial x} + \dfrac{\partial \hat{T}_2}{\partial y} + \dfrac{\partial \hat{T}_4}{\partial z} - ik\left(\alpha_1 \hat{T}_6 + \alpha_2 \hat{T}_2\right) \\ -\rho\omega^2 u_z = \dfrac{\partial \hat{T}_5}{\partial x} + \dfrac{\partial \hat{T}_4}{\partial y} + \dfrac{\partial \hat{T}_3}{\partial z} - ik\left(\alpha_1 \hat{T}_5 + \alpha_2 \hat{T}_4\right) \end{cases} \qquad (3.10)$$

Ces nouvelles formulations (3.9) et (3.10) permettent ainsi d'isoler le vecteur d'onde *k* qui est essentiel à la détermination des modes évanescents. Nous introduisons ensuite les décompositions de Fourier (3.7) et (3.8) dans les équations (3.9). On obtient :

$$\hat{T}_1 = \sum_{\vec{G},\vec{G}'} \left[-i\left(G_x c_{11,\vec{G}'} u_{x,\vec{k},\vec{G}} + G_y c_{12,\vec{G}'} u_{y,\vec{k},\vec{G}} + G_z c_{12,\vec{G}'} u_{z,\vec{k},\vec{G}}\right) - ik\left(\alpha_1 c_{11,\vec{G}'} u_{x,\vec{k},\vec{G}} + \alpha_2 c_{12,\vec{G}'} u_{y,\vec{k},\vec{G}}\right) \right] e^{-i\left(\vec{G}+\vec{G}'\right).\vec{r}}$$

$$\hat{T}_2 = \sum_{\vec{G},\vec{G}'} \left[-i\left(G_x c_{12,\vec{G}'} u_{x,\vec{k},\vec{G}} + G_y c_{11,\vec{G}'} u_{y,\vec{k},\vec{G}} + G_z c_{12,\vec{G}'} u_{z,\vec{k},\vec{G}}\right) - ik\left(\alpha_1 c_{12,\vec{G}'} u_{x,\vec{k},\vec{G}} + \alpha_2 c_{11,\vec{G}'} u_{y,\vec{k},\vec{G}}\right) \right] e^{-i\left(\vec{G}+\vec{G}'\right).\vec{r}}$$

$$\hat{T}_3 = \sum_{\vec{G},\vec{G}'} \left[-i\left(G_x c_{12,\vec{G}'} u_{x,\vec{k},\vec{G}} + G_y c_{12,\vec{G}'} u_{y,\vec{k},\vec{G}} + G_z c_{11,\vec{G}'} u_{z,\vec{k},\vec{G}}\right) - ik\left(\alpha_1 c_{12,\vec{G}'} u_{x,\vec{k},\vec{G}} + \alpha_2 c_{12,\vec{G}'} u_{y,\vec{k},\vec{G}}\right) \right] e^{-i\left(\vec{G}+\vec{G}'\right).\vec{r}}$$

$$\hat{T}_4 = \sum_{\vec{G},\vec{G}'} \left[-i\left(G_z c_{44,\vec{G}'} u_{y,\vec{k},\vec{G}} + G_y c_{14,\vec{G}'} u_{z,\vec{k},\vec{G}}\right) - ik\left(\alpha_2 c_{44,\vec{G}'} u_{z,\vec{k},\vec{G}}\right) \right] e^{-i\left(\vec{G}+\vec{G}'\right).\vec{r}}$$

$$\hat{T}_5 = \sum_{\vec{G},\vec{G}'} \left[-i\left(G_z c_{44,\vec{G}'} u_{x,\vec{k},\vec{G}} + G_x c_{44,\vec{G}'} u_{z,\vec{k},\vec{G}}\right) - ik\left(\alpha_1 c_{44,\vec{G}'} u_{z,\vec{k},\vec{G}}\right)\right] e^{-i(\vec{G}+\vec{G}').\vec{r}}$$

$$\hat{T}_6 = \sum_{\vec{G},\vec{G}'} \left[-i\left(G_y c_{44,\vec{G}'} u_{x,\vec{k},\vec{G}} + G_x c_{44,\vec{G}'} u_{y,\vec{k},\vec{G}}\right) - ik\left(\alpha_2 c_{44,\vec{G}'} u_{x,\vec{k},\vec{G}} + \alpha_1 c_{44,\vec{G}'} u_{y,\vec{k},\vec{G}}\right)\right] e^{-i(\vec{G}+\vec{G}').\vec{r}}$$

Les expressions des contraintes $\hat{T}_j$ ci-dessus sont remplacées ensuite dans les termes en dérivées partielles des équations du système (3.10). De ce fait, après regroupement des coefficients des champs de déplacement, la première équation du système (3.10) devient :

$$\sum_{\vec{G},\vec{G}'} \omega^2 \rho_{\vec{G}'} u_{x,\vec{k},\vec{G}} e^{-i(\vec{G}+\vec{G}').\vec{r}} = \sum_{\vec{G},\vec{G}'} \begin{bmatrix} \left(G_x (G'_x + G_x) c_{11,\vec{G}'} + G_y (G'_y + G_y) c_{44,\vec{G}'} + G_z (G'_z + G_z) c_{44,\vec{G}'}\right) u_{x,\vec{k},\vec{G}} \\ + \left(G_y (G'_x + G_x) c_{12,\vec{G}'} + G_x (G'_y + G_y) c_{44,\vec{G}'}\right) u_{y,\vec{k},\vec{G}} \\ + \left(G_z (G'_x + G_x) c_{12,\vec{G}'} + G_x (G'_z + G_z) c_{44,\vec{G}'}\right) u_{z,\vec{k},\vec{G}} \end{bmatrix} e^{-i(\vec{G}+\vec{G}').\vec{r}}$$

$$+ k \sum_{\vec{G},\vec{G}'} \begin{bmatrix} \left(\alpha_1 (G'_x + G_x) c_{11,\vec{G}'} + \alpha_2 (G'_y + G_y) c_{44,\vec{G}'}\right) u_{x,\vec{k},\vec{G}} \\ + \left(\alpha_2 (G'_x + G_x) c_{12,\vec{G}'} + \alpha_1 (G'_y + G_y) c_{44,\vec{G}'}\right) u_{y,\vec{k},\vec{G}} \\ + \left(\alpha_1 (G'_z + G_z) c_{44,\vec{G}'}\right) u_{z,\vec{k},\vec{G}} \end{bmatrix} e^{-i(\vec{G}+\vec{G}').\vec{r}}$$

$$+ k\left(\alpha_1 \hat{T}_1 + \alpha_2 \hat{T}_6\right)$$

On multiplie cette équation par $e^{-i\vec{G}''\vec{r}}$ avec $\vec{G}''$un vecteur du réseau réciproque, et on intègre ensuite sur le volume de la "super cellule" sachant que la valeur de $\int_{Cellule} e^{i(\vec{G}+\vec{G}'-\vec{G}'').\vec{r}}\, dr$ vaut 0 si $\vec{G}'' \neq \vec{G} + \vec{G}'$ et 1 sinon. On obtient :

$$\sum_{\vec{G}} \omega^2 \rho_{\vec{G}''-\vec{G}} u_{x,\vec{k},\vec{G}} = \sum_{\vec{G}} \begin{bmatrix} \left(G_x G''_x c_{11,\vec{G}''-\vec{G}} + G_y G''_y c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + G_z G''_z c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right) u_{x,\vec{k},\vec{G}} \\ + \left(G_y G''_x c_{12,\vec{G}''-\vec{G}} + G_x G''_y c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right) u_{y,\vec{k},\vec{G}} \\ + \left(G_z G''_x c_{12,\vec{G}''-\vec{G}} + G_x G''_z c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right) u_{z,\vec{k},\vec{G}} \end{bmatrix}$$

$$+ k \sum_{\vec{G}} \begin{bmatrix} \left(\alpha_1 G''_x c_{11,\vec{G}''-\vec{G}} + \alpha_2 G''_y c_{44,\vec{G}''-\vec{G}'}\right) u_{x,\vec{k},\vec{G}} \\ + \left(\alpha_2 G''_x c_{12,\vec{G}''-\vec{G}} + \alpha_1 G''_y c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right) u_{y,\vec{k},\vec{G}} \\ + \left(\alpha_1 G''_z c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right) u_{z,\vec{k},\vec{G}} \end{bmatrix} \qquad (3.11.a)$$

$$+ k\tilde{T}_{1,\vec{G}''}$$

avec:

$$\tilde{T}_{1,\vec{G}''} = \int_{Cellule} \left(\alpha_1 \hat{T}_1 + \alpha_2 \hat{T}_6\right) e^{i\vec{G}''.\vec{r}}\, dr = \sum_{\vec{G}} \begin{bmatrix} \left(\alpha_1 G_x c_{11,\vec{G}''-\vec{G}} + \alpha_2 G_y c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right) u_{x,\vec{k},\vec{G}} \\ + \left(\alpha_1 G_y c_{12,\vec{G}''-\vec{G}} + \alpha_2 G_x c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right) u_{y,\vec{k},\vec{G}} \\ + \left(\alpha_1 G_z c_{12,\vec{G}''-\vec{G}}\right) u_{z,\vec{k},\vec{G}} \end{bmatrix}$$

$$+ k \sum_{\vec{G}} \begin{bmatrix} \left(\alpha_1^2 c_{11,\vec{G}''-\vec{G}} + \alpha_2^2 c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right) u_{x,\vec{k},\vec{G}} \\ + \alpha_1 \alpha_2 \left(c_{12,\vec{G}''-\vec{G}} + c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right) u_{y,\vec{k},\vec{G}} \end{bmatrix} \qquad (3.12.a)$$

En procédant de la même manière pour les deux autres équations du système (3.10), nous obtenons :

$$\sum_{\vec{G}} \omega^2 \rho_{\vec{G}''-\vec{G}} u_{y,\vec{k},\vec{G}} = \sum_{\vec{G}} \begin{bmatrix} \left(G_y G''_x c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + G_x G''_y c_{12,\vec{G}''-\vec{G}}\right) u_{x,\vec{k},\vec{G}} \\ + \left(G_x G''_x c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + G_y G''_y c_{11,\vec{G}''-\vec{G}} + G_z G''_z c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right) u_{y,\vec{k},\vec{G}} \\ + \left(G_z G''_y c_{12,\vec{G}''-\vec{G}} + G_y G''_z c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right) u_{z,\vec{k},\vec{G}} \end{bmatrix}$$

$$+ k \sum_{\vec{G}} \begin{bmatrix} \left(\alpha_2 G''_x c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + \alpha_1 G''_y c_{12,\vec{G}''-\vec{G}'}\right) u_{x,\vec{k},\vec{G}} \\ + \left(\alpha_1 G''_x c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + \alpha_2 G''_y c_{11,\vec{G}''-\vec{G}}\right) u_{y,\vec{k},\vec{G}} \\ + \left(\alpha_2 G''_z c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right) u_{z,\vec{k},\vec{G}} \end{bmatrix} \qquad (3.11.b)$$

$$+ k\tilde{T}_{2,\vec{G}''}$$

$$\sum_{\vec{G}} \omega^2 \rho_{\vec{G}''-\vec{G}} u_{z,\vec{k},\vec{G}} = \sum_{\vec{G}} \begin{bmatrix} \left(G_z G''_x c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + G_x G''_z c_{12,\vec{G}''-\vec{G}}\right) u_{x,\vec{k},\vec{G}} \\ + \left(G_z G''_y c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + G_y G''_z c_{12,\vec{G}''-\vec{G}}\right) u_{y,\vec{k},\vec{G}} \\ + \left(G_x G''_x c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + G_y G''_y c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + G_z G''_z c_{11,\vec{G}''-\vec{G}}\right) u_{z,\vec{k},\vec{G}} \end{bmatrix}$$

$$+ k \sum_{\vec{G}} \begin{bmatrix} \left(\alpha_1 G''_z c_{12,\vec{G}''-\vec{G}}\right) u_{x,\vec{k},\vec{G}} \\ + \left(\alpha_2 G''_z c_{12,\vec{G}''-\vec{G}}\right) u_{y,\vec{k},\vec{G}} \\ + \left(\alpha_1 G''_x c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + \alpha_2 G''_y c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right) u_{z,\vec{k},\vec{G}} \end{bmatrix} \qquad (3.11.c)$$

$$+ k\tilde{T}_{3,\vec{G}''}$$

avec :

$$\tilde{T}_{2,\vec{G}''} = \int_{Cellule} i\left(\alpha_1 \hat{T}_6 + \alpha_2 \hat{T}_2\right) e^{i\vec{G}''.\vec{r}} dr = \sum_{\vec{G}} \begin{bmatrix} \left(\alpha_1 G_y c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + \alpha_2 G_x c_{12,\vec{G}''-\vec{G}}\right) u_{x,\vec{k},\vec{G}} \\ + \left(\alpha_1 G_x c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + \alpha_2 G_y c_{11,\vec{G}''-\vec{G}}\right) u_{y,\vec{k},\vec{G}} \\ + \left(\alpha_2 G_z c_{12,\vec{G}''-\vec{G}}\right) u_{z,\vec{k},\vec{G}} \end{bmatrix}$$

$$+ k \sum_{\vec{G}} \begin{bmatrix} \alpha_1 \alpha_2 \left(c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + c_{12,\vec{G}''-\vec{G}}\right) u_{y,\vec{k},\vec{G}} \\ + \left(\alpha_1^2 c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + \alpha_2^2 c_{11,\vec{G}''-\vec{G}}\right) u_{x,\vec{k},\vec{G}} \end{bmatrix} \qquad (3.12.b)$$

$$\tilde{T}_{3,\vec{G}''} = \int_{Cellule} i\left(\alpha_1 \hat{T}_5 + \alpha_2 \hat{T}_4\right) e^{i\vec{G}''.\vec{r}} dr = \sum_{\vec{G}} \begin{bmatrix} \alpha_1 G_z c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\ u_{x,\vec{k},\vec{G}} \\ + \alpha_2 G_z c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\ u_{y,\vec{k},\vec{G}} \\ + \left(\alpha_1 G_x c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + \alpha_2 G_y c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right) u_{z,\vec{k},\vec{G}} \end{bmatrix}$$

$$+ k \sum_{\vec{G}} \left[\left(\alpha_1^2 c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + \alpha_2^2 c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right) u_{z,\vec{k},\vec{G}}\right] \qquad (3.12.c)$$

Les systèmes d'équations (3.11) et (3.12) sont valables quelque soit le vecteur $\vec{G}''$ dans l'espace réciproque et permettent ainsi de construire un problème matriciel en valeurs propres de la forme suivante:

$$\begin{pmatrix} -A_1 & I_d \\ B\omega^2 - C & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U \\ T \end{pmatrix} = k \begin{pmatrix} D & 0 \\ A_2 & I_d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U \\ T \end{pmatrix} \qquad (3.13)$$

avec : $U = \begin{pmatrix} u_{x,\vec{k},\vec{G}} \\ u_{y,\vec{k},\vec{G}} \\ u_{z,\vec{k},\vec{G}} \end{pmatrix}$ et $T = \begin{pmatrix} \hat{T}_{1,\vec{G}''} \\ \hat{T}_{2,\vec{G}''} \\ \hat{T}_{3,\vec{G}''} \end{pmatrix}$.

Les matrices A_1, A_2, B, C et D sont construites en respectant les sommations sur $\vec{G}$ dans les équations (3.11) et (3.12). Elles sont fonctions des coefficients $c_{11,\vec{G}''-\vec{G}}$, $c_{12,\vec{G}''-\vec{G}}$, $c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}$, $\rho_{\vec{G}''-\vec{G}}$, α_1 et α_2. Leurs expressions sont :

$$A_1 = \begin{pmatrix} \left(\alpha_1 G_x c_{11,\vec{G}''-\vec{G}} + \alpha_2 G_y c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} & \left(\alpha_1 G_y c_{12,\vec{G}''-\vec{G}} + \alpha_2 G_x c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} & \left(\alpha_1 G_z c_{12,\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} \\ \left(\alpha_1 G_y c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + \alpha_2 G_x c_{12,\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} & \left(\alpha_1 G_x c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + \alpha_2 G_y c_{11,\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} & \left(\alpha_2 G_z c_{12,\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} \\ \left(\alpha_1 G_z c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} & \left(\alpha_2 G_z c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} & \left(\alpha_1 G_x c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + \alpha_2 G_y c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} \end{pmatrix}$$

$$A_2 = \begin{pmatrix} \left(\alpha_1 G''_x c_{11,\vec{G}''-\vec{G}} + \alpha_2 G''_y c_{44,\vec{G}''-\vec{G}'}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} & \left(\alpha_2 G''_x c_{12,\vec{G}''-\vec{G}} + \alpha_1 G''_y c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} & \left(\alpha_1 G''_z c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} \\ \left(\alpha_2 G''_x c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + \alpha_1 G''_y c_{12,\vec{G}''-\vec{G}'}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} & \left(\alpha_1 G''_x c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + \alpha_2 G''_y c_{11,\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} & \left(\alpha_2 G''_z c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} \\ \left(\alpha_1 G''_z c_{12,\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} & \left(\alpha_2 G''_z c_{12,\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} & \left(\alpha_1 G''_x c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + \alpha_2 G''_y c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} \end{pmatrix}$$

$$B = \begin{pmatrix} \left(\rho_{\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} & 0 & 0 \\ 0 & \left(\rho_{\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} & 0 \\ 0 & 0 & \left(\rho_{\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} \end{pmatrix}$$

$$C = \begin{pmatrix} \left(G_x G''_x c_{11,\vec{G}''-\vec{G}} + G_y G''_y c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + G_z G''_z c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} & \left(G_y G''_x c_{12,\vec{G}''-\vec{G}} + G_x G''_y c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} & \left(G_z G''_x c_{12,\vec{G}''-\vec{G}} + G_x G''_z c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} \\ \left(G_y G''_x c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + G_x G''_y c_{12,\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} & \left(G_x G''_x c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + G_y G''_y c_{11,\vec{G}''-\vec{G}} + G_z G''_z c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} & \left(G_z G''_y c_{12,\vec{G}''-\vec{G}} + G_y G''_z c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} \\ \left(G_z G''_x c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + G_x G''_z c_{12,\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} & \left(G_z G''_y c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + G_y G''_z c_{12,\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} & \left(G_x G''_x c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + G_y G''_y c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + G_z G''_z c_{11,\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} \end{pmatrix}$$

$$D = \begin{pmatrix} \left(\alpha_1^2 c_{11,\vec{G}''-\vec{G}} + \alpha_2^2 c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} & \alpha_1\alpha_2\left(c_{12,\vec{G}''-\vec{G}} + c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} & 0 \\ \alpha_1\alpha_2\left(c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + c_{12,\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} & \left(\alpha_1^2 c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + \alpha_2^2 c_{11,\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} & 0 \\ 0 & 0 & +\left(\alpha_1^2 c_{44,\vec{G}''-\vec{G}} + \alpha_2^2 c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\right)_{\vec{G},\vec{G}''} \end{pmatrix}$$

I_d étant la matrice d'identité.

Les vecteurs $\vec{G}$ et $\vec{G}''$ appartiennent à l'espace réciproque et valent:

$$\vec{G} = \frac{2\pi}{a}(m_1, m_2, m_3) \text{ et } \vec{G}'' = \frac{2\pi}{a}(m''_1, m''_2, m''_3) \text{ avec } \left(m_j, m''_l\right)_{j,l\in\{x,y,z\}} \in \left(\mathrm{Z}^3\right)^2$$

L'indexation des matrices du système matriciel (3.13) se fait sur les indices $\left(m_j\right)_{j\in\{x,y,z\}} \in \mathrm{Z}^3$ suivant les colonnes et $\left(m''_l\right)_{l\in\{x,y,z\}} \in \mathrm{Z}^3$ suivant les lignes.

En calcul numérique, le nombre de décompositions en éléments de Fourier est fini et doit être choisi de manière à approcher le plus possible les solutions recherchées. Plus ce nombre est grand, mieux est rapprochée la solution certes, mais plus grandes deviennent les matrices du système en valeurs propres (3.13), ce qui alourdit la résolution de ce dernier.

Considérons $(N_j)_{j\in\{x,y,z\}}$ trois entiers naturels supérieurs à 1 et prenons les valeurs de $\vec{G}$ et $\vec{G}''$ telles que $-N_j \le m_j \le N_j$ et $-N_j \le m_j'' \le N_j$ avec $j \in \{x,y,z\}$. Le nombre d'éléments dans la base de Fourier, intervenant dans les sommations (3.7), (3.8) et les systèmes (3.11) et (3.12) est ainsi égal à :

$$N = (2N_x+1)(2N_y+1)(2N_z+1)$$

Puisque nous avons 6 équations dans les systèmes (3.11) et (3.12) qui permettent de construire notre problème matriciel (3.13), les matrices de ce dernier ont une taille qui vaut $6N$. Ceci fait donc deux fois la taille des matrices obtenues pour le problème classique de calcul des modes de propagation $\omega(\mathrm{k})$ pour le même nombre d'éléments de décomposition en ondes planes.

A partir des équations de mouvement (3.4) et (3.5), et en utilisant la décomposition en ondes planes, nous avons pu construire le problème en valeurs propres (3.13), dont la résolution nous permet de calculer les vecteurs d'ondes solutions (réelles et imaginaires) pour une fréquence fixée. Nous appellerons cette résolution "la méthode *k(ω)*". L'écriture du programme de la résolution du problème s'est faite en utilisant le langage Fortran. De plus, puisque notre problème contient des matrices à valeurs complexes et que notre recherche de valeurs propres se fait dans l'espace complexe, nous avons utilisé une "*subroutine*" de la bibliothèque mathématique "Lapack" qui est un outil permettant de calculer les valeurs propres complexes ainsi que les vecteurs propres qui leur sont associés.

Dans ce qui suivra, nous présenterons les résultats des calculs de structures de bandes complexes des ondes évanescentes pour deux exemples de structures phononiques en plaque.

II. Les structures de bandes évanescentes pour les systèmes en plaque : ondes de Lamb

II.1. Cristaux phononiques à ondes de Lamb

Dans cette deuxième partie de ce chapitre, nous allons étudier deux structures phononiques constituées d'inclusions cylindriques périodiques dans une plaque d'épaisseur

finie (figure 3.1). Dans le premier système, la plaque est faite en silicium cubique avec des inclusions cylindriques vides, ce qui nous donne des trous périodiques dans la plaque. Le deuxième système est formé d'inclusions cylindriques en or dans une matrice d'époxy dont la structure de bande a été étudiée par Hou et Assouar[11].

II.2. Structures de bandes des ondes évanescentes

II.2.1. Plaque phononique en air/silicium

Les surfaces libres de la plaque de silicium, qui sont en contact avec le vide, ainsi que celles des trous doivent exprimer une propriété de contrainte nulle. Le choix du milieu représentant le vide dans le CP représente une étape cruciale pour la stabilité des calculs utilisant la méthode PWE. Certains travaux sur la PWE[18, 19] ont montré que celle-ci peut présenter des instabilités numériques lorsqu'on fixe à zéro les constantes élastiques du vide en contact direct avec un matériau. Afin de s'affranchir de cette difficulté, et comme mentionné dans la section II.1.3 du chapitre précédent, nous allons considérer le vide comme un milieu homogène et isotrope ayant des constantes élastiques et densité très faibles. Ce milieu artificiel qui remplace le vide présentera donc un environnement à faible impédance acoustique comparé au silicium qui constitue notre CP. Ainsi, le milieu artificiel choisi, dit "LIM" (*Low impedance Medium*), doit permettre une décroissance évanescente de l'onde au voisinage de l'interface entre celui-ci et le silicium. Cette condition implique un choix de vitesses de propagation dans le milieu artificiel largement plus grandes comparées aux vitesses de propagation de l'onde dans le silicium. En même temps, la condition de faibles constantes élastiques[20] impose :

$$\frac{\left(\rho C_{l,t}^2\right)_{milieu\ \ artificiel}}{\left(\rho C_{l,t}^2\right)_{Silicium}} = \frac{\left(c_{kk}\right)_{k=1,4,\ milieu\ \ artificiel}}{\left(c_{kk}\right)_{k=1,4,\ \ Silicium}} \to 0 \quad (3.14)$$

En se basant sur ces conditions, et sachant que pour le silicium cubique nous avons C_l=8432.3m/s, C_t=5842m/s et ρ=2329kg/m^3, notre choix s'est fixé sur $C_l = C_t$ =10^{5}m/s pour le milieu artificiel. La condition (3.14) nous ramène ainsi à faire un choix de densité faible pour le matériau artificiel, qui est de ρ=10^{-4}kg/m^3.

II.2.1.1. Structure de bandes complexes

La figure 3.3 présente le résultat d'un calcul de structure de bandes complexes dans la direction ΓX, c'est-à-dire en prenant $\vec{k} = k(\alpha_1, \alpha_2) = k(1,0)$, pour la structure phononique

air/silicium. Ce résultat a été comparé à un calcul classique $\omega(\vec{k})$ pour les modes de propagation des ondes de Lamb.

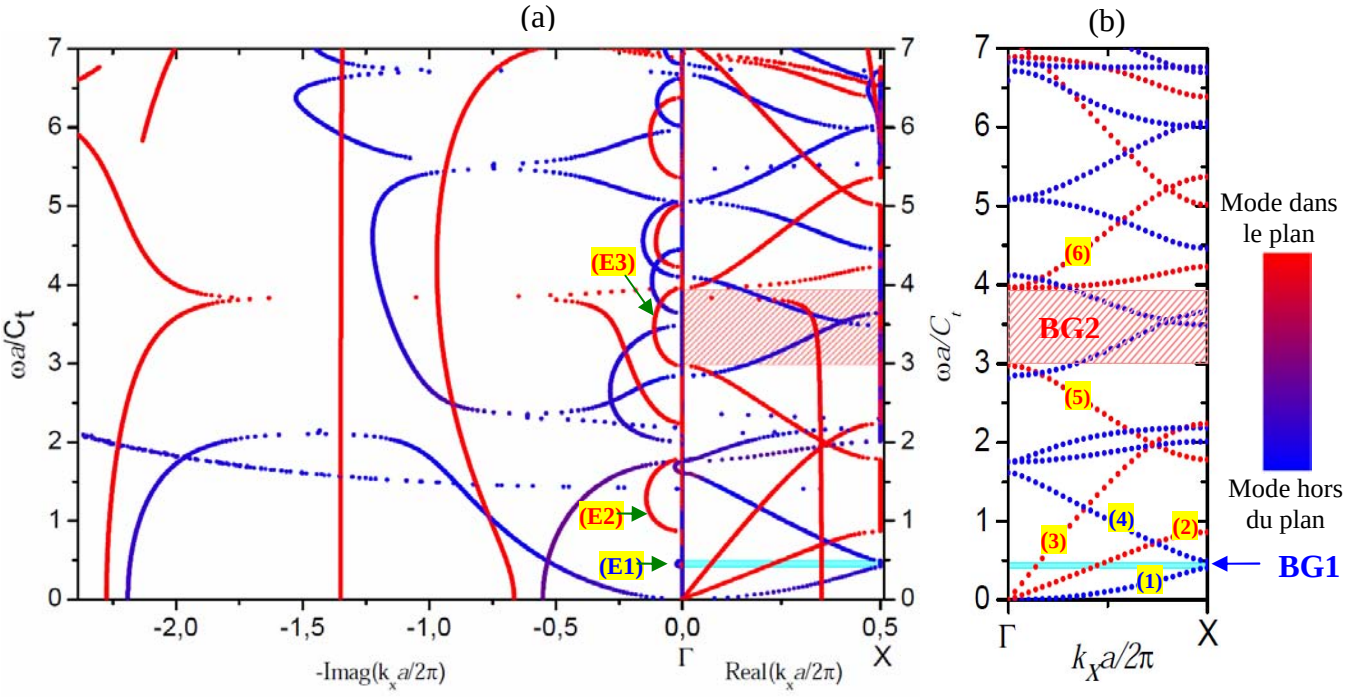


Figure 3.3: Structures de bandes complexes pour un arrangement carré de trous cylindriques de rayon $r = 0.425a$ dans une plaque de silicium d'épaisseur $e = 0.15a$. La profondeur des trous est sur toute l'épaisseur de la plaque. (a) Calcul $k(\omega)$ permettant d'avoir les modes évanescents. (b) Calcul $\omega(k)$ classique.

Dans la structure de bande de la figure 3.3(a), nous avons choisi une représentation des modes évanescents semblable à celle adoptée par Laude *et al*[7,8]. Pour chaque valeur de fréquence fixée, la résolution du problème (3.13) nous donne toutes les valeurs réelles et imaginaires possibles du vecteur d'onde solution. La représentation dans la structure de bandes se fait en séparant les parties réelles et imaginaires des vecteurs d'onde et en les traçant pour chaque fréquence qui leur est associée. La structure de bandes de la figure 3.3(a) est ainsi composée de deux parties: la première présentant les valeurs réelles du vecteur d'onde dans la direction ΓX (côté droit de la structure de bandes), et la deuxième rapporte les valeurs imaginaires (côté gauche de la structure de bandes). De plus, puisque nous sommes dans l'étude d'une structure à ondes de Lamb, nous avons pris le soin de distinguer les modes ayant une composante dominante hors du plan de propagation (couleur bleu) et ceux à composante

dominante dans le plan (couleur rouge). Cette distinction a été faite en faisant le calcul de la grandeur suivante pour chaque mode à partir du champ de déplacement[21]:

$$p_Z\left(\vec{k}\right)=\frac{\int\left|u_{z,\vec{k}}\right|^2 dr}{\int\left(\left|u_{x,\vec{k}}\right|^2+\left|u_{y,\vec{k}}\right|^2+\left|u_{z,\vec{k}}\right|^2\right)dr} \qquad (3.15)$$

$p_Z=1$ signifie que le mode a une composante dominante suivant la direction Z, et donc une polarisation hors du plan de propagation (O,X,Y) *(out of plane mode)*, alors que $p_Z=0$ indique que le mode en question est un mode dans le plan *(In plane mode)*. Cette identification de nature des modes a été représentée par une échelle de couleurs dans les deux structures de bandes de la figure 3.3, bleu pour les modes hors du plan, et rouge pour les modes à polarisation dans le plan.

Il est important de noter que dans cette même figure 3.3.(a), nous nous sommes limités aux vecteurs d'onde ayant une partie réelle dans la direction ΓX de la première zone de Brillouin, et une partie imaginaire *Imag*($ka/2\pi$) de valeur inférieure à 2,8. Les calculs ont été faits avec un nombre total de décompositions en ondes planes de :

$$N=(2N_x+1)(2N_y+1)(2N_z+1)=847$$

pour $N_x=N_y=5$ et $N_z=3$, ce qui donne une taille conséquente de $6N=5082$ pour les matrices du problème (3.13). Finalement, la figure 3.3(b) montre le résultat d'un calcul avec la méthode classique $\omega(k)$ afin de le comparer à celui de la structure de bandes 3.3(a) réalisé par la méthode $k(\omega)$.

II.2.1.2. Analyse de la structure de bandes complexes

L'examen de la figure 3.3 nous fait remarquer que les modes de Lamb calculés par la méthode $\omega(k)$ de la PWE classique (figure 3.3.(b)) sont bien présents dans la partie réelle de la structure de bande calculée par la méthode $k(\omega)$ (figure 3.3(a)). De plus, nous avons constaté que les vecteurs d'ondes calculés pour ces modes ont une partie imaginaire nulle, ce qui confirme bien leur nature "propagative" sans atténuation dans le CP. Outre ces modes de propagation, d'autres modes de formes inhabituelles sont présents dans la direction ΓX de la structure de bandes complexes, et n'apparaissent pas dans le calcul $\omega(k)$ classique. Ils ont une partie imaginaire non nulle, ce qui leur confère un caractère évanescent, et s'atténuent donc dans le CP sur une distance déterminée par ladite partie imaginaire.

Par ailleurs, la structure de bandes classique issue du calcul $\omega(k)$ (figure 3.3.(b)) ne présente pas de bandes interdites complètes pour tous les modes "propagatifs" existants. Toutefois, nous pouvons nous intéresser à quelques bandes interdites partielles existantes pour les modes hors du plan comme celle notée (BG1) (en bleu cyan), ainsi que celle notée (BG2) pour les modes dans le plan. Pour ces deux bandes interdites partielles, nous pouvons remarquer l'existence de modes évanescents, notés (E1) et (E3), qui ont la forme de demi-cercles et qui s'étendent sur les gammes de fréquences définies par ces bandes interdites. Ces dernières sont ainsi complètement fermées par les modes (E1) et (E3). Les vecteurs d'ondes associés à ces modes évanescents ont leur partie réelle nulle et sont donc imaginaires purs. La bande interdite (BG1), par exemple, se définit entre les deux modes (1) (mode antisymétrique A_0) et le mode (4) qui est de la même nature. Nous pouvons ainsi remarquer que le mode évanescent (E1) se définit à partir des frontières de la bande (BG1) et la ferme complètement. La même observation peut être faite pour la bande interdite (BG2) qui se définit entre les deux modes (5) et (6) qui ont la même polarisation. Le mode évanescent (E3) ferme cette bande interdite en formant aussi un demi cercle à partir des frontières de la (BG2). En ce qui concerne le mode évanescent (E2) qui existe pour les modes dans le plan, il a la même forme semi-circulaire que les autres modes (E1) et (E3). De plus, le vecteur d'onde associé à ce mode est purement imaginaire et n'est pas lié à une quelconque bande interdite partielle pour les modes dans le plan. Cependant, si l'on observe bien ce mode (E2), nous pouvons constater qu'il se définit sur une gamme de fréquences qui se situent entre le mode plan (2) (mode transverse horizontal SH) et le mode (5) qui a la même nature. A ce stade, nous pouvons conclure que les modes évanescents purement imaginaires se définissent dans les gammes de fréquences constituant des bandes interdites partielles pour les modes ayant la même polarisation. Pour les autres modes évanescents existants, l'analyse de leur comportement devient plus difficile à cause de leur complexité.

Afin de mieux cerner le comportement des modes évanescents, particulièrement en présence d'une bande interdite complète, les structures de bandes complexes pour différentes valeurs d'épaisseur de la plaque ont été calculées. La figure 3.4 montre les résultats obtenus pour les trois valeurs d'épaisseurs : $e = 0.15a$, $0.2a$ et $0.3a$.

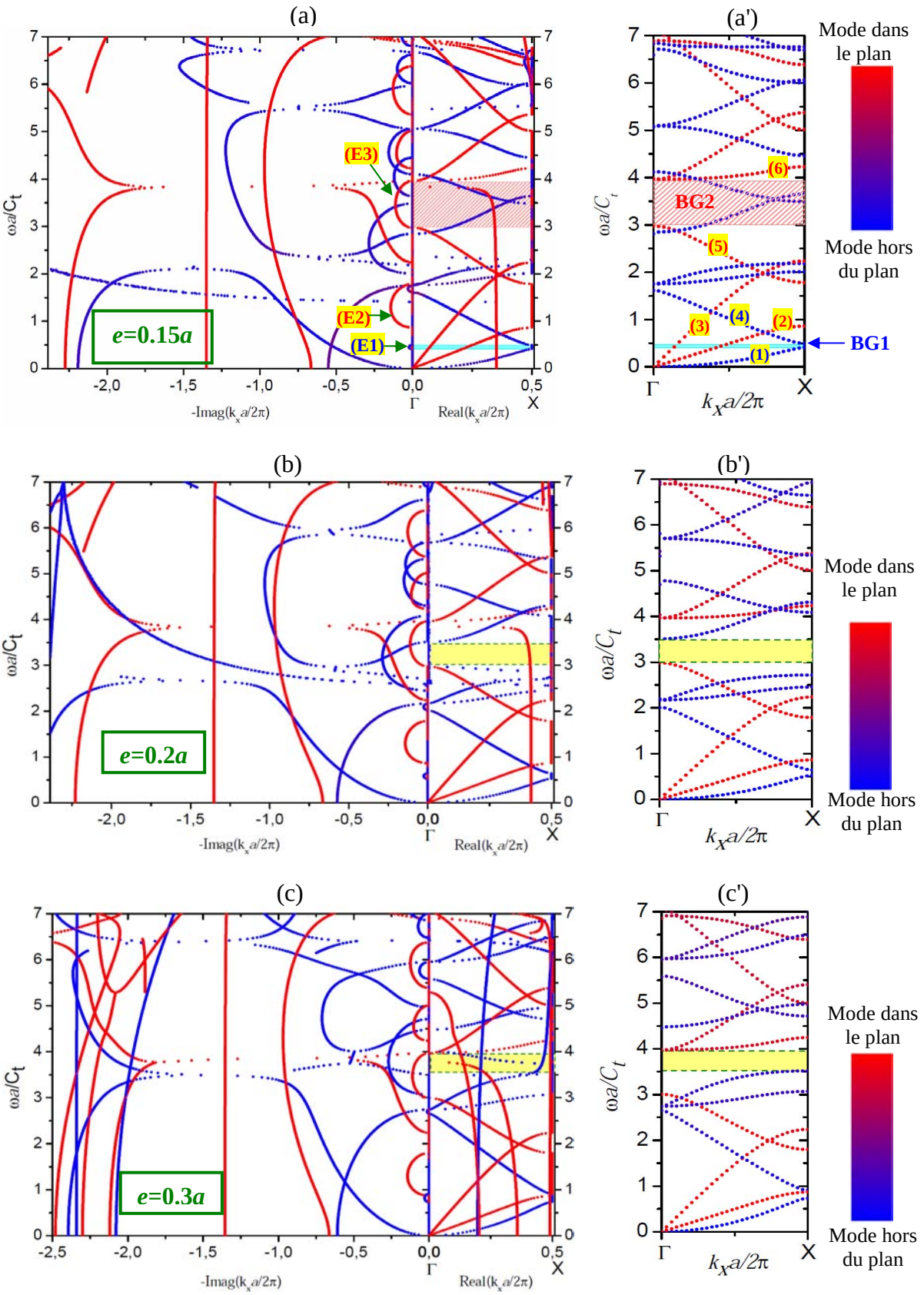


Figure 3.4: Structures de bande complexe $k(\omega)$ et « classique » $\omega(k)$ pour différentes épaisseurs *e* du cristal phononique. (a) et (a') : *e*=0.15*a*, (b) et (b') : *e*=0.2*a*, et (c) et (c') : *e*=0.3*a*.

Dans cet exemple de CP constitué de trous périodiques dans la plaque en silicium, une bande interdite complète apparaît pour les épaisseurs e=0.2*a* et 0.3*a*. Cette bande interdite est délimitée par un mode hors du plan (en bleu), et un mode dans le plan (en rouge) (figure 3.4 (b), (b'), (c), (c')). Elle est formée par la superposition de deux bandes interdites partielles associées aux modes dans le plan et ceux hors du plan. Chacune de ces bandes interdites partielles a un mode évanescent purement imaginaire qui lui est associé dans la structure de bandes. Ainsi, ces modes évanescents ferment aussi la bande interdite complète. De ce fait, si une onde ayant une fréquence dans la gamme de la bande interdite se propage dans le CP, elle sera atténuée par évanescence avec une décroissance qui dépendra de sa polarisation. Ceci est dû à la dépendance de la valeur imaginaire du vecteur d'onde qui lui est associé et qui intervient dans l'exponentielle décroissante, de la nature de polarisation de l'onde.

Finalement, nous soulignons le fait que les modes évanescents ont une valeur de vecteur d'onde qui augmente avec la largeur de la bande interdite qui lui est associée. Pour se rendre compte de cela, nous pouvons observer l'évolution du mode (E1) dans la figure 3.4 quand la bande interdite partielle qui lui est associée s'élargit avec l'épaisseur de la plaque. Ainsi, plus la bande interdite est large, plus grands deviennent les modules des vecteurs d'onde évanescents purement imaginaires qui ferment cette bande. De ce fait, l'atténuation des ondes ayant une fréquence dans cette bande interdite devient plus importante et se fait ainsi sur une plus courte distance. Enfin, parmi les ondes qui ont des fréquences au niveau de la bande interdite, les plus rapidement atténuées sont celles ayant une fréquence qui se situe au milieu d'elle.

II.2.2. Plaque phononique en or/époxy

Afin de compléter notre étude, d'approcher un autre type de structure (solide-solide) et pour des fins de reproductibilité, nous avons fait d'autres simulations numériques de structures de bandes complexes pour un autre CP semblable à celui de la figure 3.1. Celui-ci est constitué d'inclusions cylindriques d'or dans une plaque d'époxy. La figure 3.5 montre les résultats des simulations numériques des structures de bandes complexes pour différentes épaisseurs de la plaque: *e*=0.1*a*, 0.25*a*, 0.35*a* et 0.5*a*.

Les structures de bandes complexes du CP en question présentent deux bandes interdites pour les épaisseurs 0.25*a*, 0.35*a* et 0.5*a*. Les bandes interdites complètes sont des intersections entre différents bandes interdites partielles relatives aux différents modes ayant la même polarisation. De ce fait, les modes évanescents de vecteurs d'ondes purement imaginaires, notés (E1), (E2), (E3) et (E4) dans la structure de bande pour l'épaisseur *e*=0.25*a*

(Figure 3.5), sont de natures différentes et ferment les deux bandes interdites. Une onde se propageant dans le CP avec une fréquence dans la bande interdite sera atténuée sur une distance déterminée par l'un des modes évanescents (E1), (E2), (E3) ou (E4), suivant la nature de sa polarisation. Nous pouvons aussi noter la présence de plusieurs branches pratiquement verticales dans la partie réelle du vecteur d'ondes qui n'apparaissent pas dans le calcul classique $\omega(k)$. Ces branches correspondent à des modes avec des vecteurs d'ondes dont la partie imaginaire n'est pas nulle, c'est-à-dire des modes évanescents.

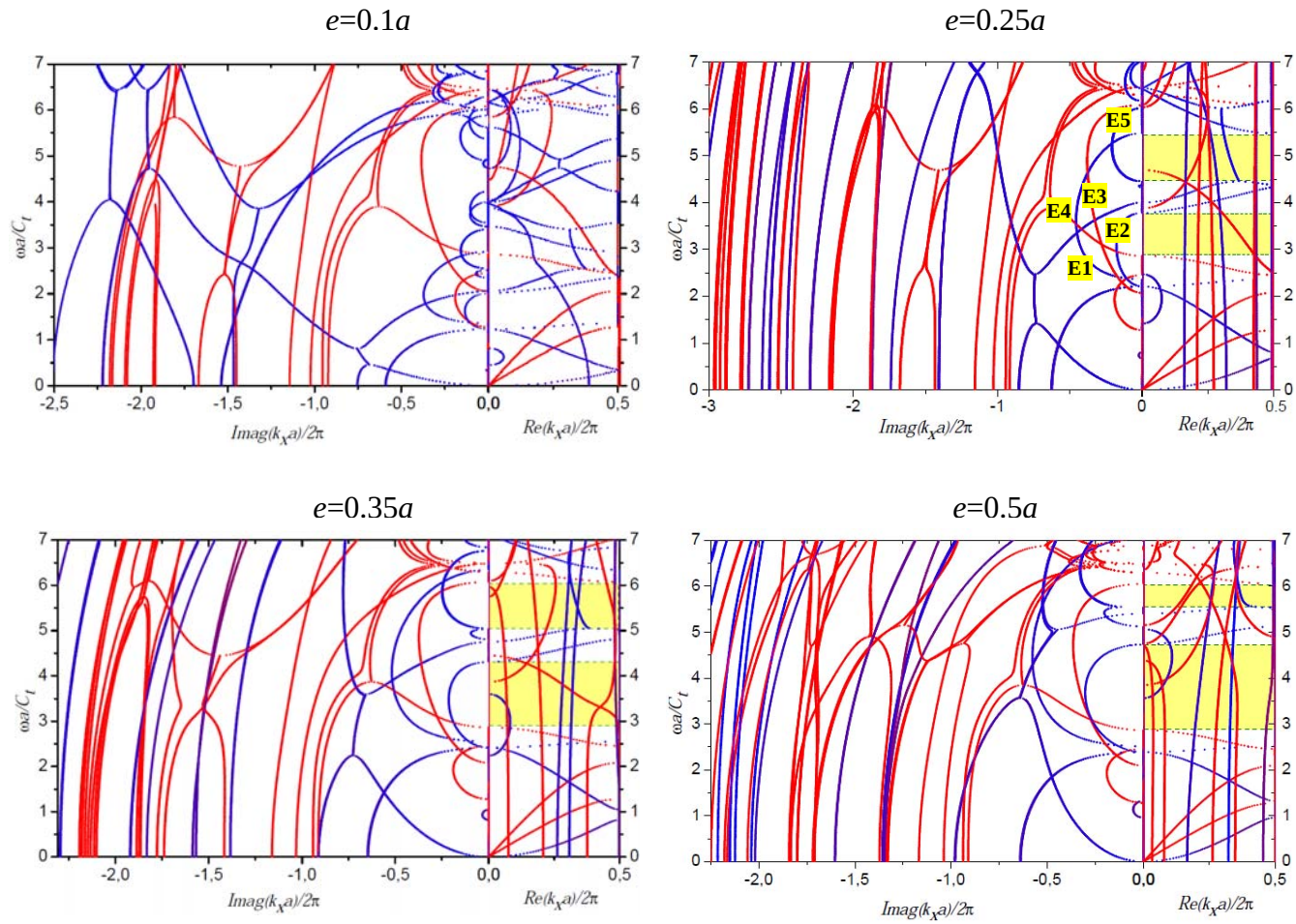


Figure 3.5 : Structures de bandes complexes et les structures des modes "propagatifs" calculées par la méthode $\omega(k)$ pour différentes valeurs de l'épaisseur *e* du cristal phononique à inclusions cylindriques d'or dans une plaque d'époxy : *e* = 0.1*a*, 0.25*a*, 0.35*a*, 0.5*a* .

Conclusion

Grâce à une nouvelle méthode numérique basée sur une transformation de la méthode de la décomposition en ondes planes, nous avons pu concevoir un outil de calcul des modes

évanescents dans des structures phononiques en plaque. Nous avons ainsi pu obtenir les courbes de dispersion relatives à ces modes, que nous avons analysées en termes de comportement au voisinage des bandes interdites. Ce travail a été entrepris afin d'initier l'élaboration d'un outil numérique capable de calculer les structures de bandes complexes pour n'importe quel système phononique, particulièrement les cristaux phononiques à résonance locale. L'objectif et de pouvoir explorer le comportement des ondes évanescentes au voisinage d'une bande interdite créée par le mécanisme de résonance locale, ce que nous n'avons pas pu réaliser à cause de plusieurs facteurs.

Tout d'abord, la méthode EPWE requiert énormément de temps de calcul avec les moyens limités dont nous disposons au laboratoire. A titre d'exemple, chaque structure de bandes complexes (cas air/Si) présentée dans ce chapitre a nécessité environ 9 semaines continues de calcul, nos programmes ayant été parallélisés. Le calcul d'une structure phononique plus complexe prendra évidemment plus de temps. De plus, pour les CPRL, le problème réside dans le contraste élastique important qui existe entre ses matériaux constitutifs, ce qui nécessite un nombre plus important de décompositions en ondes planes des solutions recherchées. Le calcul des courbes de dispersion par EPWE devient alors très difficile en termes de capacité de gestion devant l'énorme quantité de données à traiter. Par conséquent, notre plan de travail initial concernant l'étude des modes évanescents dans les CPRL n'a pas été maintenu. Mes travaux de thèse se sont donc focalisés sur l'étude des propriétés de nouveaux CPRL en matière de création et de contrôle des bandes interdites par le mécanisme de résonance locale et de guidage, et sur la possibilité de la mise en évidence expérimentale de leurs propriétés élastiques. Ceci fera l'objet des prochains chapitres du présent manuscrit.

Références

[1] M. S. Kushwaha, P. Halevi, L. Dobrzynski, and B. Djafari-Rouhani, Phys. Rev. Lett. **71**, 2022 (1993)

[2] F. R. Montero de Espinosa, E. Jimenez, and M. Torres, Phys. Rev. Lett. **80**, 1208 (1998)

[3] Z. Liu, X. Zhang, Y Mao, Y.Y. Zhu, Z. Yang, C.T Chan, and P. Sheng, Science **289**, 1734 (2000)

[4] C. Goffaux, and J. Sanchez-Dehesa, Phys. Rev. B **67**, 144301 (2003)

[5] J.C. Hsu, and T-T. Wu, Appl. Phys. Lett. **90**, 201904 (2007)

[6] B. A. AULD, "Acoustic fields an waves in solids" Volume II, (1973)

[7] V. Laude, B. Aoubiza, Y. Achaoui, S. Benchabane, and A. Khelif, IEEE Ultrason. Symp. Proc. 249 (2008)

[8] V. Laude, Y. Achaoui, S. Benchabane, and A. Khelif, Phys. Rev. B **80**, 092301 (2009)

[9] V. Romero-García, J. V. Sánchez-Pérez, and L. M. Garcia-Raffi, J. App. Phys. **108**, 044907 (2010)

[10] Y-C Hsue, A. J. Freeman, and B-Y Gu, Phys. Rev. B **72**, 195118 (2005)

[11] Z. Hou, and B. M. Assouar, Phys. Lett. A **372** 2091 (2008)

[13] M.M. Sigalas, and E. N. Economou, J. Appl. Phys. **75** 2845 (1994)

[13] J. J. Chen, B. Qin, and J. C. Cheng, Chin. Phys. Lett. **22**, 1706 (2005)

[14] J-C. Hsu and, T-T. Wu, Phys. Rev. B **74** 144303 (2006).

[15] J. B. Pendry, Phys. Rev. Lett. **85**, 3966 (2000)

[16] X. D. Zhang, and Z. Y. Liu, Appl. Phys. Lett. **85**, 341 (2004).

[17] S. Zhang, C. Xia, and N. Fang, Phys. Rev. Lett. **106**, 024301 (2011)

[18] B. Manzanares-Martinez, and F. Ramos-Mendieta, Phys. Rev. B **68**, 134303 (2003)

[19] Y. Tanaka, Y. Tomoyasu, and S. I. Tamura, Phys. Rev. B **62**, 7387 (2000)

[20] B. Manzanares-Martınez, Phys Rev B **68** 134303 (2003)

[21] Y. Achaoui, A. Khelif, S. Benchabane, and V. Laude, J. Phys. D : Appl. Phys. **43** 185401 (2010)

Chapitre 4

Etudes théorique et expérimentale des Cristaux Phononiques à Résonance Locale (CPRL) en plaque

Introduction

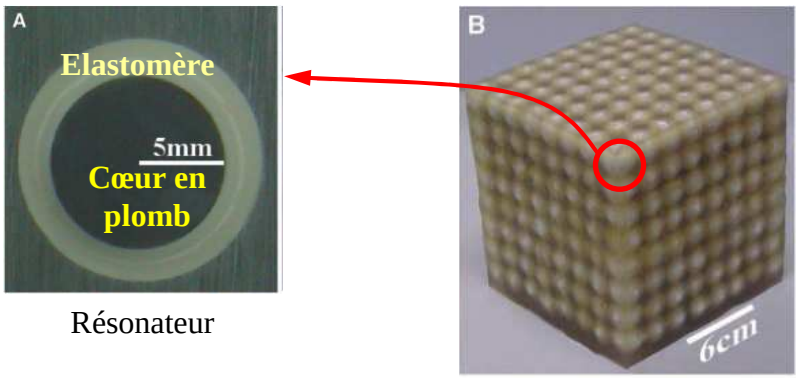
Depuis l'émergence des cristaux phononiques (CP), d'innombrables travaux s'y sont intéressés, en particulier au mécanisme de la diffusion de Bragg permettant l'ouverture de bandes interdites pour la propagation des ondes acoustiques/élastiques. Ces travaux ont montré que les longueurs d'ondes interdites par le CP sont de l'ordre de grandeur de sa périodicité. Ainsi, la fabrication d'une « barrière » phononique basée sur le mécanisme de Bragg impose un choix de périodicité de l'ordre des longueurs d'ondes que l'on souhaite arrêter. D'un point de vue pratique, ceci nécessite la réalisation de structures phononiques de dimensions très larges (périodicité de l'ordre du mètre) lorsqu'on vise des applications dans le régime basses fréquences, ou ce qu'on appelle le régime sonique (de quelques dizaines de Hertz jusqu'à plusieurs dizaines de kHz).

En effet, une onde acoustique se propage avec une vitesse définie par les propriétés élastiques de son milieu de propagation. Dans un milieu fluide comme l'air par exemple, les ondes acoustiques ont une vitesse de propagation d'environ 340m/s[1]. Pour les fréquences audibles qui vont de 10Hz à 20kHz, les longueurs d'ondes varient entre 1cm et 30m. Ceci implique la construction de structures phononiques exploitant le mécanisme de Bragg avec des périodicités de cet ordre pour interdire toute propagation. Un autre exemple est celui des ondes sismiques qui ont des fréquences encore plus basses (de 1 à 10Hz) et dont la vitesse[2] varie de 2 à 8 km/s, donnant lieu à des longueurs d'ondes allant de 200m à 8km, ce qui rend assez inenvisageable la fabrication et la mise en place de structures phononiques anti-sismiques, par exemple, dans un environnement urbain. En effet, la construction de telles structures phononiques basées sur le mécanisme de Bragg implique une périodicité très grande et ainsi des dimensions très larges, voire même gigantesques. Par conséquent, la création de bandes interdites en basses fréquences avec des structures ayant de petites dimensions par rapport aux longueurs d'onde mises en jeu s'impose. Cet objectif est devenu possible, comme nous allons le voir par la suite, grâce au mécanisme de la résonance locale (RL) introduit pour la première fois par Liu *et al*[3] en 2000.

Contrairement au mécanisme de Bragg, la création d'une bande interdite phononique par le mécanisme de la résonance locale ne dépend que très peu de la périodicité et de la symétrie de la structure du CP. Dans ce cas, la bande interdite peut être ouverte à une fréquence deux ordres de grandeur inférieure à celle permise par la diffusion de Bragg, sous réserve d'utiliser des matériaux et configurations appropriés. Liu *et al*[3] ont d'ailleurs mis en évidence l'existence d'une telle bande interdite en basses fréquences dans un CP périodique

tridimensionnel. Plusieurs travaux sur les CP à résonance locale (CPRL) ont depuis lors suivi[4-6] dans le même sens, avec des structures tridimensionnelles cubiques simples ou cubiques à faces centrées. Aussi, des systèmes bidimensionnels à base d'inclusions cylindriques infinies ont fait l'objet de plusieurs études sur la RL[7-12], ainsi que les CP bidimensionnels pour les ondes de Lamb[13,14]. La résonance locale a même été mise en évidence sur une structure unidimensionnelle simple par Wang *et al*[15]. Ces études ont montré qu'une bande interdite phononique peut être générée pour des ondes ayant des longueurs d'onde largement supérieures à la périodicité du cristal. Ceci, grâce à un choix judicieux des paramètres géométriques et physiques du CP et des matériaux le constituant.

Comme nous l'avons mentionné dans la section II du chapitre 1, dans les CP générant des bandes interdites par le mécanisme de RL, les matériaux sont choisis de manière à former des résonateurs qui s'activent localement à de très basses fréquences au sein d'une matrice. Ceci a pour but de permettre aux modes de résonance propres de se coupler avec les modes vibratoires de la matrice. Sous des conditions bien précises, ce couplage entre modes permet d'ouvrir des bandes interdites phononiques localisées aux fréquences propres de ces résonateurs. A titre d'exemple, nous rappelons les travaux de Liu *et al*[3] qui ont étudié un CPRL tridimensionnel dont les résonateurs sont constitués d'un cœur de plomb enrobé par une couche d'élastomère très mou, le tout organisé suivant une structure cubique simple dans une matrice d'époxy (voir figure 4.1 ci-dessous).



Résonateur

Cristal phononique

Figure 4.1 : (A) résonateur sphérique constitué d'un cœur en plomb enrobé par un élastomère très mou. (B) Cristal phononique tridimensionnel à résonance locale conçu par Liu *et al*[3].

Le résonateur se comporte ainsi comme une masse importante (le cœur en plomb), liée à un ressort de faible raideur (l'élastomère), qui va vibrer localement en basses fréquences et entrer en interaction avec les modes qui se propagent dans la matrice d'époxy. Dans ce cas

bien précis, les longueurs d'onde interdites sont très larges comparées à la périodicité de la structure, ce qui donne au cristal un comportement inhabituel. Ce dernier manifeste une densité effective négative, c'est-à-dire que l'onde perçoit la structure phononique comme étant un milieu de densité négative dans sa globalité. Ce type de CP entre ainsi dans la catégorie des métamatériaux acoustiques que nous avons introduits dans le chapitre 1.

Dans ce chapitre 4, nous présenterons une nouvelle structure phononique à RL permettant d'étudier et de comprendre l'ouverture et le comportement de la bande interdite pour les ondes de Lamb se propageant dans une plaque finie. Nous proposerons donc une structure bidimensionnelle en plaque, simple à fabriquer et permettant par ailleurs de comprendre les bases physiques de la RL pour les modes de Lamb. Pour y parvenir, nous montrerons que nous pouvons séparément agir sur la raideur équivalente du résonateur et sur sa masse totale. Il s'agira de mieux comprendre les comportements physiques d'une structure à RL concernant l'ouverture des bandes interdites et d'avoir la possibilité de contrôler aisément la position et la largeur des bandes interdites. La deuxième partie de ce chapitre sera consacrée à l'étude expérimentale que nous avons faite sur ces structures en plaque; tout d'abord en termes de caractérisation élastique des matériaux constituant la structure, puis surtout en termes de caractérisation acoustique de la bande interdite phononique en basses fréquences.

I. Structures à RL formées de cylindres arrangés sur une plaque

Afin de rendre compte des principaux résultats liés à la création des bandes interdites phononiques par le mécanisme de RL, nous avons décidé d'étudier une nouvelle structure que nous avons représentée sur la figure 4.2. Le CP est constitué d'une plaque d'époxy d'épaisseur *e* sur laquelle sont déposés périodiquement des cylindres simples (un matériau) ou composites (deux matériaux), et disposés suivant un arrangement carré. Ces cylindres constitueront donc les résonateurs de notre structure phononique.

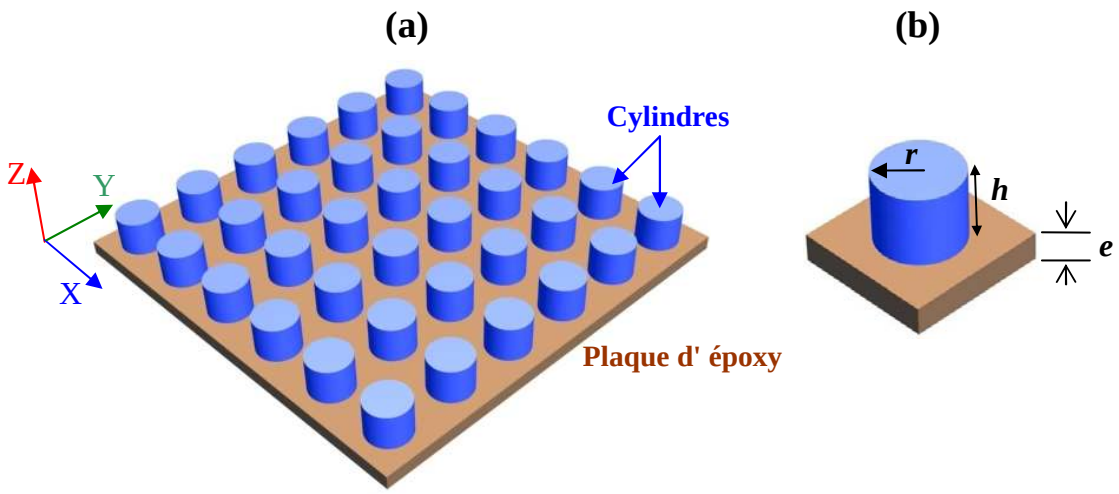


Figure 4.2: (a) Cristal phononique bidimensionnel à RL composé de cylindres arrangés périodiquement suivant une disposition carrée sur une plaque d'époxy. (b) Cellule élémentaire.

Le(s) matériau(x) composant les cylindres (résonateurs) est (sont) choisi(s) de telle sorte que leurs propriétés élastiques leur confèrent un caractère vibratoire permettant aux ondes de se propager à de très faibles vitesses comparées à celles de l'époxy. Le but est de pouvoir générer un couplage entre les modes RL (propres aux cylindres) qui se produisent à très basses fréquences, et les ondes de Lamb se propageant dans la plaque d'époxy. La figure 4.3 illustre schématiquement les modes en question ainsi que la conséquence théorique prévue quant au couplage qui permettra d'ouvrir une bande interdite phononique au niveau de la structure de bandes. Il est à noter aussi que les modes de RL apparaissent plats dans la structure de bande car ils sont bien localisés au niveau des résonateurs et leur vitesse de groupe est donc nulle.

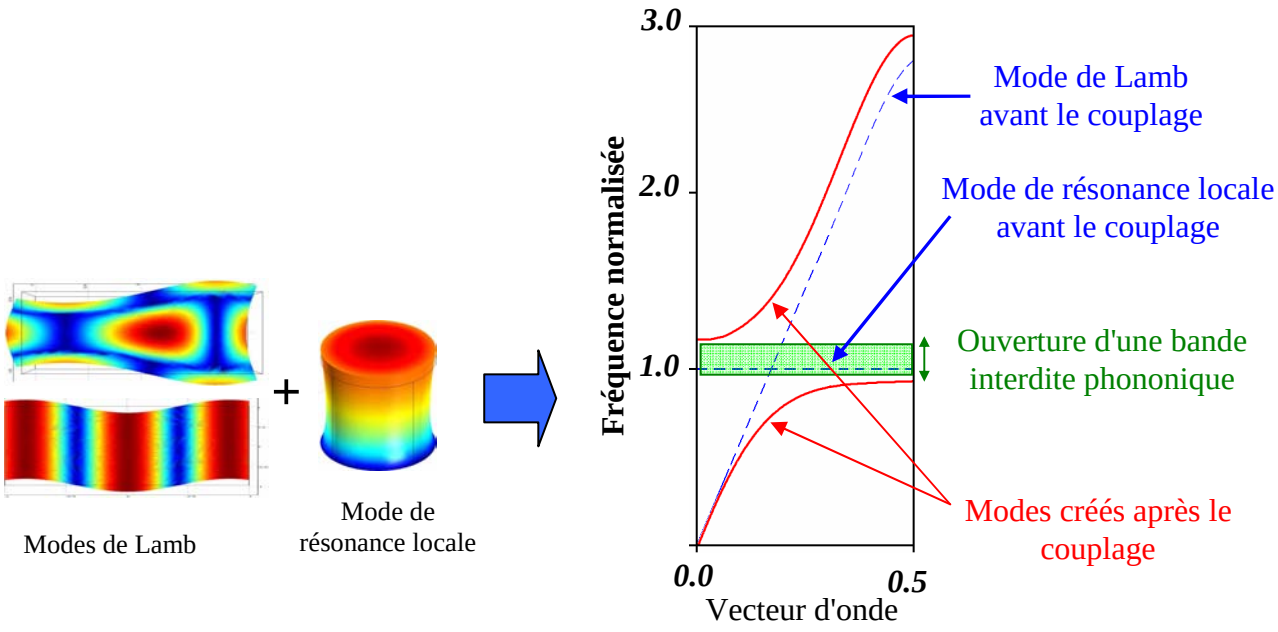


Figure 4.3 : Le couplage entre les modes de Lamb et ceux de la résonance locale des cylindres donne lieu à l'ouverture d'une bande interdite phononique.

Une structure similaire à base de cylindres sur plaque a été étudiée auparavant par Wu *et al*[16] et Pennec *et al*[17], mais l'ouverture de la bande interdite dans leur structure n'était pas due au mécanisme de la résonance locale. Nous aurons l'occasion de revenir sur les points de comparaison entre les mécanismes responsables de l'ouverture des bandes interdites dans les différentes structures.

I.1. Configurations des structures d'étude

Notre étude portera sur deux structures phononiques à RL, la première composée de **simples cylindres d'élastomère** (*silicone rubber*) disposés avec un arrangement carrée sur une **plaque d'époxy** (figure 4.2), et la deuxième de cylindriques "composites" constitués du même élastomère sur lequel est ajouté un matériau à densité élevée (plomb) comparée à celles des autres matériaux du CPRL; la figure 4.4 présente cette deuxième structure. Dans la partie (b) de cette figure, on a reporté les paramètres géométriques suivants des cylindres : r, h_1 et h_2 pour désigner le rayon, l'épaisseur de l'élastomère et celle du plomb respectivement. On définit aussi l'épaisseur totale du résonateur comme : $h=h_1+h_2$. De ce fait, lorsque $h_2=0$, on se ramène à la première structure dotée de cylindres simples, présentée dans la figure 4.2 où $h=h_1$. La périodicité de la structure est notée a et e désigne l'épaisseur de la plaque d'époxy qu'on va maintenir fixe dans toute cette étude : $e=0{,}05a$.

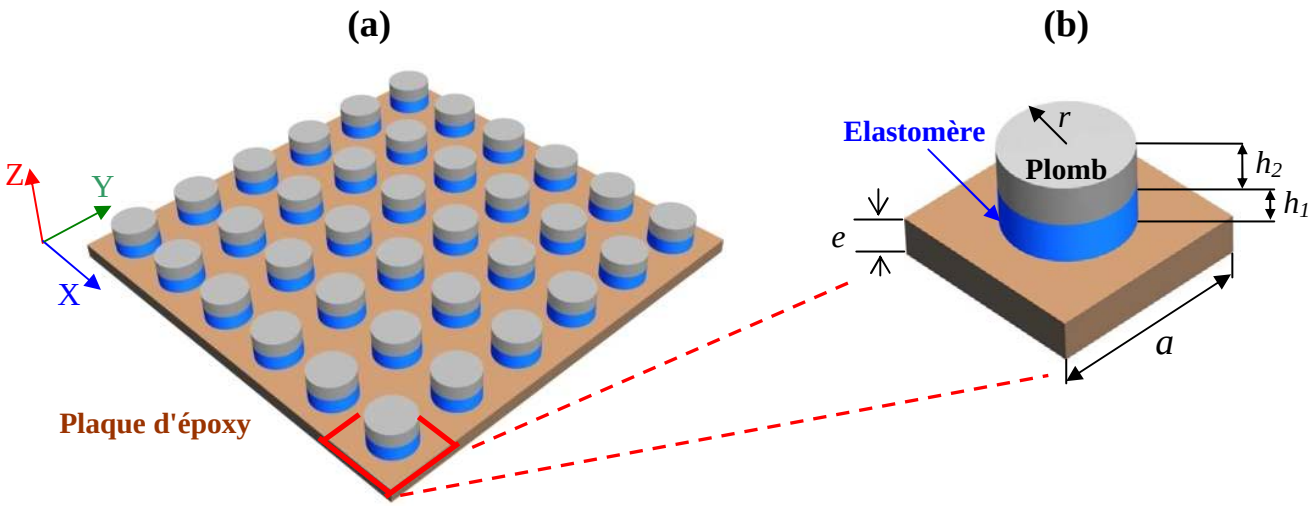


Figure 4.4: (a) CPRL bidimensionnel composé de cylindres « composites » formés de Plomb et de *Silicone rubber* et disposés suivant une configuration carrée sur une plaque d'époxy. (b) Cellule élémentaire.

I.2. Choix des matériaux

Dans les CPRL, les résonateurs contiennent un matériau élastiquement très mou, comparé aux autres matériaux constituant la structure, pouvant donner lieu à des modes vibratoires très confinés et donc localisés. Le critère de choix est la vitesse de propagation des ondes qui doit être plus faible dans les résonateurs. Dans l'étude menée par Liu *et al*[3], les structures sont constituées d'une sphère en plomb enrobée par un élastomère très mou, en l'occurrence le *Silicone rubber*. Dans ce cas précis, l'effet du cœur massif de plomb et de la couche d'élastomère (ressort), confèrent au résonateur un comportement de résonance bien localisée à très basses fréquences. Nous aurons l'occasion par la suite de mettre en évidence séparément l'effet de la masse et celui de la raideur des résonateurs sur leurs modes de résonance.

	C_l (m/s)	C_t (m/s)	ρ (kg/m^3)
Epoxy	2534	1157	1180
Elastomère	24	6	1300
Plomb	2160	860	11400

Tableau 4.1 : Vitesses de propagation dans les différents matériaux[9, 13, 18] utilisés.

Dans notre étude, tous les milieux choisis sont considérés comme isotropes et le caractère viscoélastique de l'élastomère n'est pas pris en compte. Les vitesses de propagation longitudinales (C_l) et transversales (C_t) pour chaque matériau sont présentées dans le tableau 4.1 [9, 13, 18]. De ce dernier, nous pouvons déduire les constantes élastiques :

	c_{11} (Pa)	c_{44} (Pa)
Epoxy	7.577×10^{9}	4.418×10^{9}
Elastomère	0.749×10^{6}	0.655×10^{6}
Plomb	5.3188×10^{10}	3.6325×10^{10}

Tableau 4.2 : Constantes élastiques des matériaux utilisés

I.3. Modélisations par éléments finis sous Comsol Multiphysics

La méthode des éléments finis (FEM) est adoptée pour le calcul des structures de bandes ainsi que les champs de déplacement en utilisant le modèle PDE (*Partial Differential Equations)* dans le logiciel Comsol Multiphysics 3.5a. Le domaine de résolution est d'abord déterminé en se limitant à une cellule élémentaire du CP par le théorème de Bloch. Les équations de mouvement sont ensuite transformées afin qu'elles puissent être implémentées dans le logiciel. Enfin, les structures de bandes sont calculées en utilisant l'analyse en fréquences propres (*Eigenfrequency analysis*) proposée dans le modèle utilisé.

I.3.1. Modèle numérique

Les domaines de résolution choisis pour le calcul des structures de bandes sont les cellules élémentaires représentées dans les figures 4.2(b) et 4.4(b), auxquelles sont ajoutées les conditions de Bloch. Ainsi, le CPRL est théoriquement supposé infini dans les deux directions X et Y de l'espace. Le domaine de calcul est divisé en sous domaines suivant la nature élastique des matériaux le constituant. La cellule élémentaire de la figure 4.2(b) est donc constituée de deux sous domaines : la plaque d'époxy et le cylindre d'élastomère, alors que la cellule représentée dans la figure 4.4(b) présente un sous-domaine de plus qui est le cylindre de plomb.

I.3.2. Implémentation des équations

Les équations du mouvement décrivant la propagation d'onde acoustique dans un milieu isotrope sont :

$$\begin{cases} -\rho\omega^2 u_x = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(c_{11}\dfrac{\partial u_x}{\partial x}+c_{12}\dfrac{\partial u_y}{\partial y}+c_{12}\dfrac{\partial u_z}{\partial z}\right)+\dfrac{\partial}{\partial y}\left(c_{44}\dfrac{\partial u_x}{\partial y}+c_{44}\dfrac{\partial u_y}{\partial x}\right)+\dfrac{\partial}{\partial z}\left(c_{44}\dfrac{\partial u_x}{\partial z}+c_{44}\dfrac{\partial u_z}{\partial x}\right) \\ -\rho\omega^2 u_y = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(c_{44}\dfrac{\partial u_x}{\partial y}+c_{44}\dfrac{\partial u_y}{\partial x}\right)+\dfrac{\partial}{\partial y}\left(c_{12}\dfrac{\partial u_x}{\partial x}+c_{11}\dfrac{\partial u_y}{\partial y}+c_{12}\dfrac{\partial u_z}{\partial z}\right)+\dfrac{\partial}{\partial z}\left(c_{44}\dfrac{\partial u_y}{\partial z}+c_{44}\dfrac{\partial u_z}{\partial y}\right) \\ -\rho\omega^2 u_z = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(c_{44}\dfrac{\partial u_x}{\partial z}+c_{44}\dfrac{\partial u_z}{\partial x}\right)+\dfrac{\partial}{\partial y}\left(c_{44}\dfrac{\partial u_y}{\partial z}+c_{44}\dfrac{\partial u_z}{\partial y}\right)+\dfrac{\partial}{\partial z}\left(c_{12}\dfrac{\partial u_x}{\partial x}+c_{12}\dfrac{\partial u_y}{\partial y}+c_{11}\dfrac{\partial u_z}{\partial z}\right) \end{cases} \quad (4.1)$$

On rappelle que les inconnues de notre problème sont les modes vibratoires ω et le champ de déplacement $\vec{u}=(u_x,u_y,u_z)$ défini sur toute la cellule élémentaire et associé à chaque mode ω. Les constantes élastiques c_{ij} sont bien évidemment dépendantes des coordonnées position de l'espace dans le CP. Ces équations sont implémentées dans le logiciel Comsol en précisant les valeurs des constantes élastiques dans chaque sous domaine de résolution. Les équations sont réécrites comme suit:

$$\begin{Bmatrix} \nabla.\left[\begin{pmatrix} c_{11} & 0 & 0 \\ 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & c_{44} \end{pmatrix}.\nabla u_x+\begin{pmatrix} 0 & c_{12} & 0 \\ c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.\nabla u_y+\begin{pmatrix} 0 & 0 & c_{12} \\ 0 & 0 & 0 \\ c_{44} & 0 & 0 \end{pmatrix}.\nabla u_z\right] \\ \nabla.\left[\begin{pmatrix} 0 & c_{44} & 0 \\ c_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.\nabla u_x+\begin{pmatrix} c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & c_{11} & 0 \\ 0 & 0 & c_{44} \end{pmatrix}.\nabla u_y+\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c_{12} \\ 0 & c_{44} & 0 \end{pmatrix}.\nabla u_z\right] \\ \nabla.\left[\begin{pmatrix} 0 & 0 & c_{44} \\ 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & 0 & 0 \end{pmatrix}.\nabla u_x+\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c_{44} \\ 0 & c_{12} & 0 \end{pmatrix}.\nabla u_y+\begin{pmatrix} c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & c_{11} \end{pmatrix}.\nabla u_z\right] \end{Bmatrix} = -\rho\omega^2\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_x \\ u_y \\ u_z \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

I.3.3. Conditions aux limites (CL)

Après avoir défini le domaine de résolution ainsi que les équations de mouvement, les conditions aux limites sont ajoutées afin de contraindre les solutions recherchées. Au niveau du domaine, les conditions de Bloch sont introduites sur les surfaces latérales de la plaque d'époxy, exprimant la périodicité de la structure phononique suivant les directions X et Y. Puisque notre intérêt se porte sur la propagation des ondes dont les directions sont dans le plan (O,X,Y) , c'est-à-dire $\vec{k}=(k_x,k_y,0)$, ces équations se développent comme suit :

$$\vec{u}_{Surface\ 1}(x,y,z)=\vec{u}_{Surface\ 2}(x,y,z)e^{-ik_x.a}$$

et

$$\vec{u}_{Surface\ 3}(x,y,z)=\vec{u}_{Surface\ 4}(x,y,z)e^{-ik_y.a}$$

en repérant les surfaces mentionnées sur la figure 4.5 :

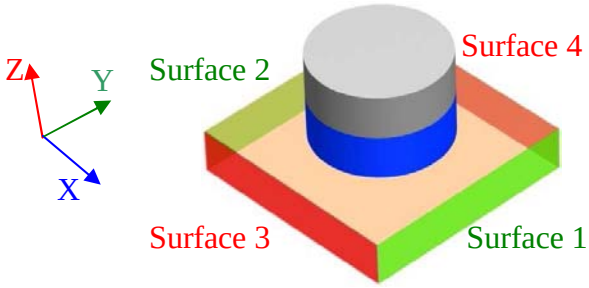


Figure 4.5 : Les conditions aux limites périodiques appliquées aux quatre surfaces latérales de la plaque

Les surfaces en contact libre restantes ne subissent aucune contrainte, et donc les conditions aux limites libres y sont définies comme suit :

$$T.\,\vec{n} = 0$$

où T est le tenseur des contraintes et $\vec{n} = (n_x, n_y, n_z)$ la normale à la surface en question, ce qui se traduit par :

$$\left\{\begin{bmatrix}\begin{pmatrix} c_{11} & 0 & 0 \\ 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & c_{44}\end{pmatrix}.\nabla u_x + \begin{pmatrix} 0 & c_{12} & 0 \\ c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}.\nabla u_y + \begin{pmatrix} 0 & 0 & c_{12} \\ 0 & 0 & 0 \\ c_{44} & 0 & 0\end{pmatrix}.\nabla u_z\end{bmatrix}.\begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z\end{pmatrix} \\ \begin{bmatrix}\begin{pmatrix} 0 & c_{44} & 0 \\ c_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}.\nabla u_x + \begin{pmatrix} c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & c_{11} & 0 \\ 0 & 0 & c_{44}\end{pmatrix}.\nabla u_y + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c_{12} \\ 0 & c_{44} & 0\end{pmatrix}.\nabla u_z\end{bmatrix}.\begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z\end{pmatrix} \\ \begin{bmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 0 & c_{44} \\ 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & 0 & 0\end{pmatrix}.\nabla u_x + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c_{44} \\ 0 & c_{12} & 0\end{pmatrix}.\nabla u_y + \begin{pmatrix} c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & c_{11}\end{pmatrix}.\nabla u_z\end{bmatrix}.\begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z\end{pmatrix}\end{bmatrix}\right\} = \vec{0} \quad (4.3)$$

Une fois que les équations ainsi que les conditions aux limites sont bien définies sur le domaine de calcul, l'étape du maillage en éléments finis est entreprise avant le calcul des structures de bandes.

I.3.4. Maillage et convergence

En éléments finis, le maillage, qui est une subdivision du domaine de résolution, permet de définir les domaines de définition des fonctions de formes essentielles à l'approximation des fonctions solutions recherchées (voir section II.2.1.2 du chapitre 2). Dans notre cas, les éléments du maillage sont de formes tétraédriques et l'approximation est quadratique. Ce sont, en effet, les valeurs par défaut proposées par Comsol. La figure 4.6 présente un exemple de maillage adopté pour notre type de structure.

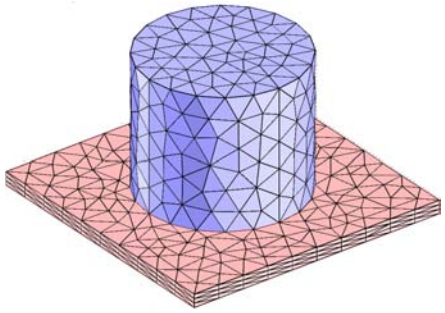
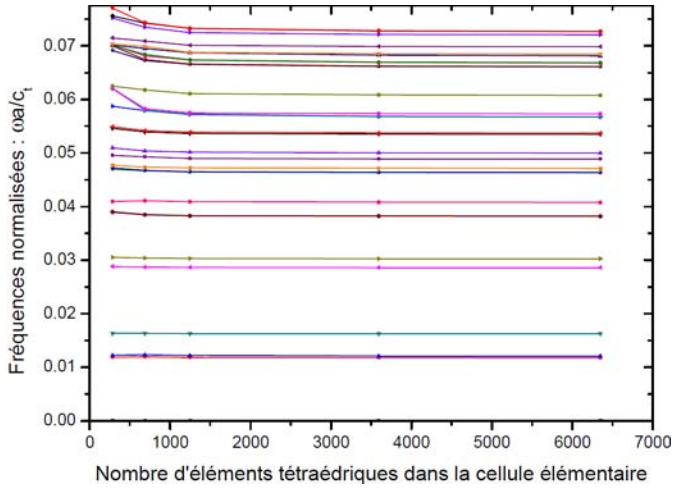


Figure 4.6 : Exemple de maillage de la cellule élémentaire avec 5813 éléments tétraédriques

La convergence des calculs en éléments finis dépend du maillage de la structure étudiée, notamment du nombre d'éléments tétraédriques ainsi que leur répartition dans le domaine. En effet, plus le maillage est fin, plus il y a de fonctions de formes définies, et donc meilleure est l'approximation de la fonction solution. Cependant, le temps de calcul augmente avec l'affinement du maillage et les limites de la machine de calcul peuvent rapidement être atteintes.

Dans notre cas d'étude, et afin de décrire au mieux le caractère vibratoire de notre structure, la taille des éléments du maillage doit être bien inférieure aux longueurs d'ondes dans le système. De ce fait, compte tenu du comportement élastique du cylindre d'élastomère qui est très mou par rapport à celui de l'époxy et du plomb, les variations du champ de déplacement sont plus importantes au niveau de l'élastomère, comparées à celles de l'époxy et/ou du plomb. Ainsi, un maillage plus fin doit être adopté au niveau de l'élastomère. Dans cette étude, un rapport d'environ 4 est choisi entre le nombre d'éléments tétraédriques dans l'élastomère et celui dans l'époxy et le plomb.

Afin de rendre compte du nombre d'éléments du maillage nécessaires pour atteindre une bonne convergence dans le calcul de structure de bandes, les modes de propagation ont été calculés en fonction du nombre d'éléments tétraédriques du maillage. La figure 4.7 présente un exemple de courbe de convergence. Il en ressort clairement que la convergence est atteinte rapidement pour les basses fréquences, alors que pour les hautes fréquences, il faut un nombre plus important d'éléments tétraédriques; pratiquement, 1246 éléments tétraédriques sont nécessaires pour assurer la convergence dans cet exemple. Ceci est bien compréhensible car les modes situés dans les hautes fréquences ont généralement des longueurs d'ondes plus courtes, et donc une variation du champ de déplacement plus importante sur une zone réduite du domaine de calcul. Cela nécessite donc un maillage plus fin afin de bien déterminer ces modes. Nous avons donc veillé à effectuer ce test de convergence afin de choisir le maillage le mieux adapté au calcul des modes souhaités pour les courbes de dispersion.



Figures 4.7 : Exemple de test de convergence. Chaque couleur correspond à un mode, C_t étant la vitesse transverse dans l'époxy.

I.3.5. Calcul de la structure de bandes et du champ de déplacement

Puisqu'on est en présence d'une structure phononique bidimensionnelle avec un arrangement périodique carré, le calcul de la courbe de dispersion s'est limité aux axes principaux de symétrie de la première zone irréductible de Brillouin. Pour chaque valeur du vecteur d'ondes, les modes sont calculés en utilisant le modèle d'analyse fréquentielle proposé par Comsol. La figure 4.8 ci-dessous précise les valeurs du vecteur d'ondes prises avec la nomenclature classique des axes de symétrie de la première zone de Brillouin.

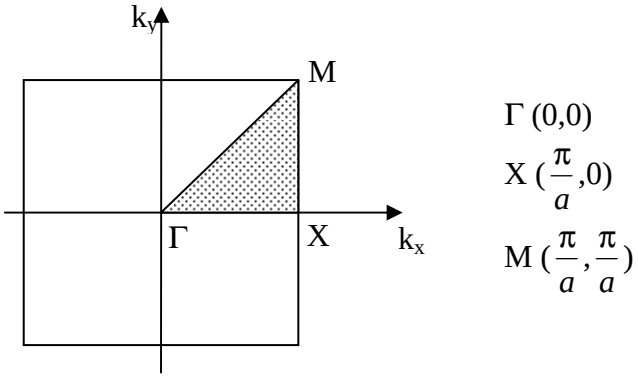


Figure 4.8 : Première zone de Brillouin irréductible pour une structure périodique carrée.

En plus des modes vibratoires, Comsol permet aussi de calculer directement le champ de déplacement associé à chaque mode et d'afficher aisément sa distribution dans la cellule unité, ainsi que les déformations qui l'accompagnent, ce qui permet de connaître facilement la nature des modes obtenus.

I.4. Structures de bandes CPLR : cylindre simple sur plaque

Cette première étude s'intéresse à la structure à RL représentée dans la figure 4.2. Comme nous l'avons expliqué au début de la section I.1, l'objectif est de créer des couplages entre les modes RL dans les cylindres et les modes de Lamb qui se propageant dans la plaque d'époxy. Afin de mettre en évidence ce couplage, la figure 4.9 présente la structure de bande de **la plaque seule**, d'épaisseur e = 0,05a, ainsi que les modes de résonance locale dans un cylindre d'élastomère isolé, c'est-à-dire sans la plaque d'époxy.

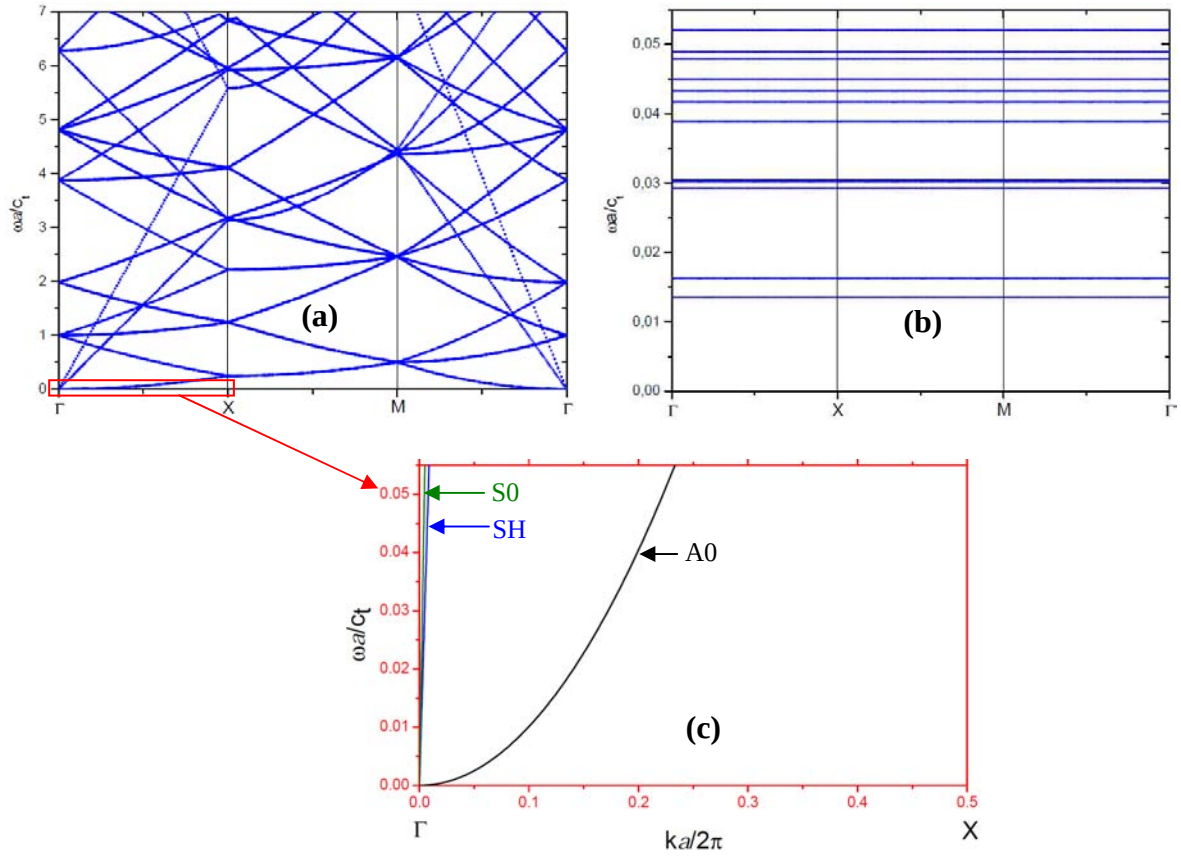


Figure 4.9 : (a) Structure de bandes pour la plaque homogène d'époxy d'épaisseur *e*=0.05*a*. (b) Modes de résonance locale d'un cylindre d'élastomère de rayon *r* = 0.3*a* et de hauteur *h*=0,5*a*. (c) Modes de Lamb dans la plaque d'époxy au voisinage des fréquences de résonance du cylindre d'élastomère.

Dans ce cas de figure, on s'intéresse au couplage entre les modes de résonance situés dans l'intervalle de fréquences [0 ; 0.055] normalisé en $\omega a/C_t$ (figure 4.9 (b)) et ceux de Lamb (figure 4.9 (a) et (c)). On distingue bien les modes A_0, S_0 et SH, antisymétrique, symétrique et transverse horizontale respectivement, auxquels nous nous intéresserons. Les modes de résonance sont plats et ne dépendent pas de la longueur d'onde puisqu'ils sont localisés et ont

donc une vitesse de groupe nulle. La figure 4.10 représente un exemple de structure de bandes obtenue pour le système de cylindres simples d'élastomère sur plaque d'époxy.

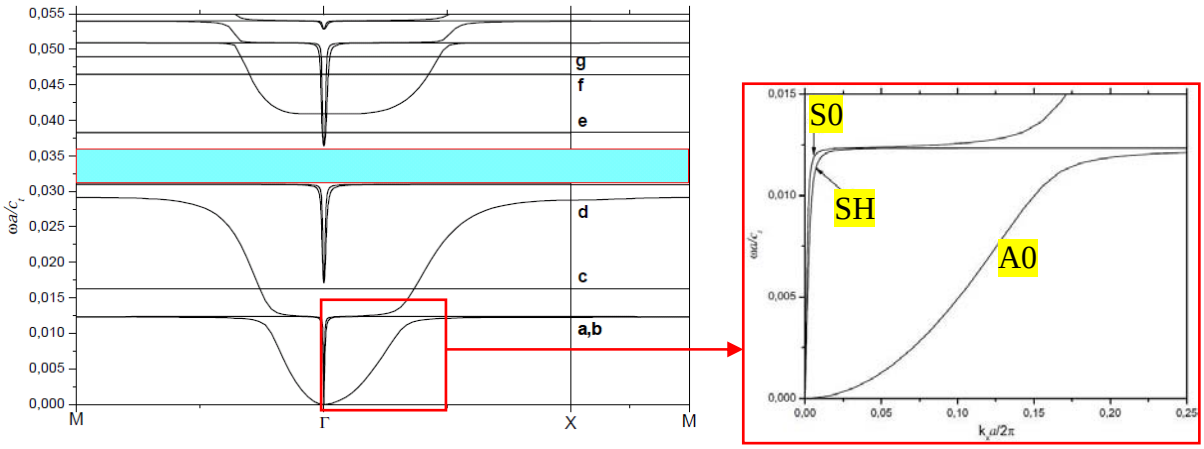


Figure 4.10 : Structure de bandes du système à résonateurs simples. La hauteur et le rayon des cylindres sont fixés à *h*=0.5*a* et *r*=0.3*a* respectivement. Les notations a-g des modes correspondent à des modes que nous aurons l'occasion d'étudier par la suite.

En plus des modes transverse, symétrique et antisymétrique, classiques de la plaque (modes de Lamb), de nombreux autres modes plats apparaissent dans la structure de bandes, correspondant à des modes de résonance locale. Ainsi, une bande interdite phononique apparaît, conséquence directe du couplage bien visible dans la structure de bandes entre les modes de Lamb et ces modes localisés. Cette bande interdite se situe à deux ordres de grandeurs inférieure à celle obtenue classiquement par le mécanisme de Bragg, montrant clairement que le mécanisme responsable dans ce cas est bien celui de la résonance locale. La figure 4.10 montre aussi que la position de la bande interdite se situe au niveau des fréquences de résonance. De ce fait, la possibilité d'obtenir cette bande sur une plage de fréquences bien déterminée repose sur la localisation des modes plats, qui dépend de la structure et de la nature des cylindres.

Dans ce qui suivra, nous allons étudier l'influence des paramètres géométriques des cylindres (résonateurs) sur les structures de bandes en expliquant les mécanismes physiques derrière les observations qui seront faites.

I.4.1. Effet du rayon du cylindre sur la bande interdite

Dans cette première étude systématique, l'épaisseur des cylindres de l'élastomère a été fixée à h = 0.5a et le calcul de structure de bandes a été fait pour différentes valeurs du rayon: r=0.3a, 0.36a, 0.4a, 0.48a. La figure 4.11 présente les résultats obtenus.

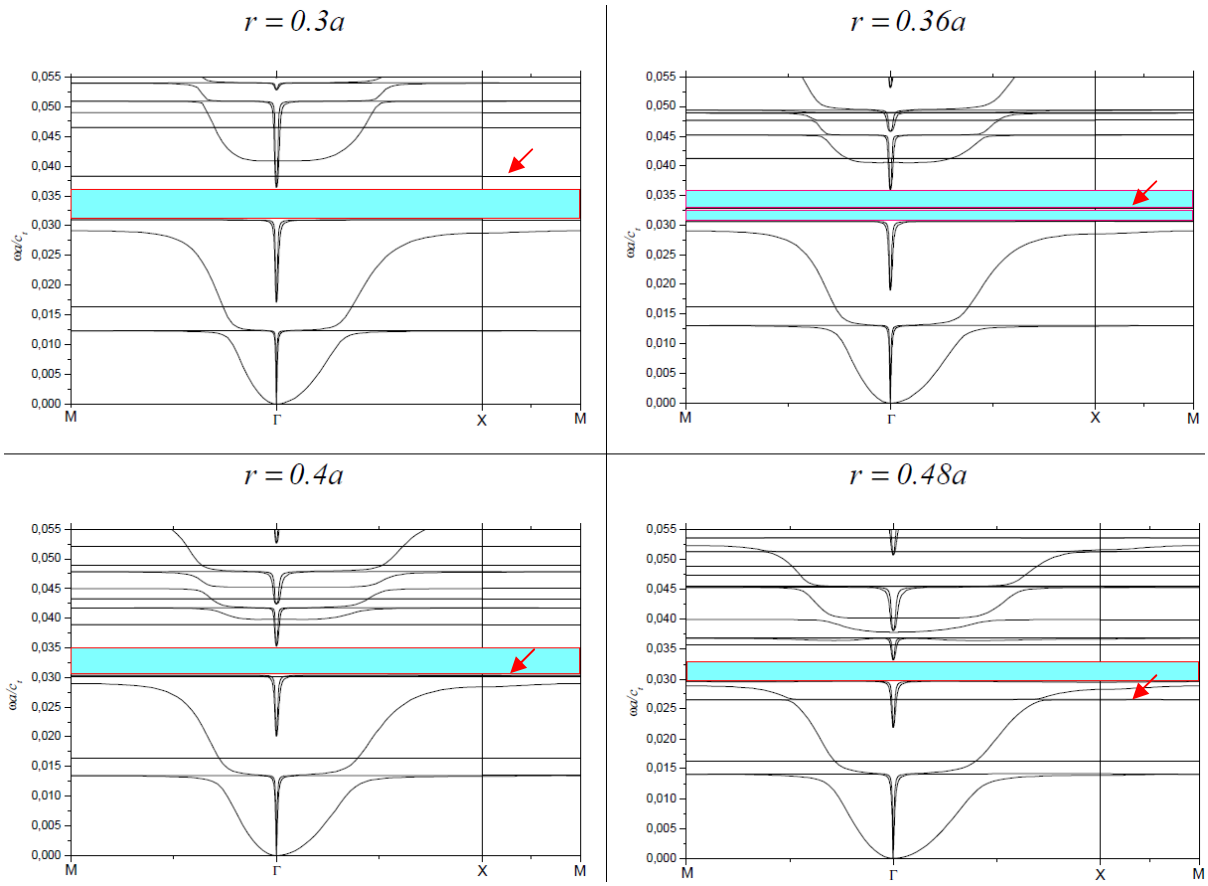


Figure 4.11: Structures de bandes du CPRL à résonateur cylindriques simples, pour différentes valeurs du rayon : *r* =0,3*a* ; 0,36*a*; 0.4*a* et 0,48*a*. La hauteur est fixée à *h*=0,5*a*. La flèche rouge indique un mode particulier qui sera un sujet de discussion dans la section 1.4.3 de ce chapitre.

La première observation importante que nous pouvons faire ici est le fait que les localisations de la plupart des bandes plates sont quasi indépendantes du rayon du cylindre d'élastomère. Par conséquent, la position de la bande interdite reste presque invariante et se situe aux environs de 0.0325 en fréquence normalisée $\omega a/C_t$. Nous aurons l'occasion d'expliquer ce comportement par la suite en se basant sur le modèle de l'oscillateur harmonique (*spring-mass model*). Un deuxième fait important relevé concerne la largeur de la bande interdite, qui dépend du rayon des cylindres définissant la force de contact et d'interaction entre ceux-ci et la plaque à la surface de contact. Une évolution de la largeur de la bande interdite est donc observée sur la figure 4.11. La plus large bande est obtenue pour un rayon modéré de 0.3*a*. Dans le cas où le rayon devient plus grand, le contact entre le cylindre et la plaque devient plus fort, si bien que l'énergie du mode résonant devient un peu moins localisée dans le cylindre et une interaction entre cylindres voisins devient possible. Par

conséquent, la "multidiffusion" (*multi-scattering*) due à la structure périodique apparaît, donnant lieu à un ajustement de la largeur de la bande interdite.

I.4.2. Effet de l'épaisseur du cylindre sur la bande interdite

Dans cette deuxième étude systématique, le rayon des cylindres en élastomère est fixé à r=0.48a, et le calcul des structures de bandes a été fait pour les valeurs d'épaisseur h suivantes : h=0.1a, 0.2a, 0.4a et 0.5a. La figure 4.12 illustre les résultats obtenus.

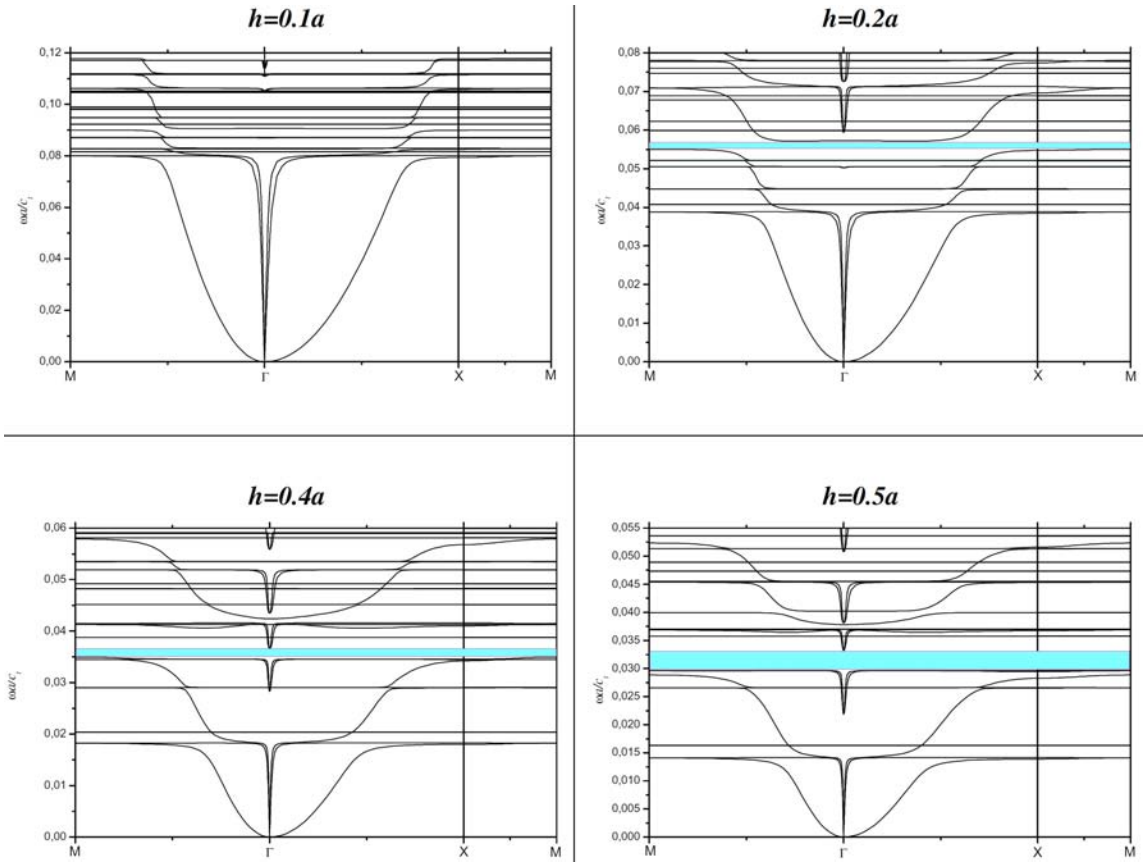


Figure 4.12 : Structures de bandes du CPRL à cylindres simples, pour différentes valeurs d'épaisseur de cylindres: h=0.1a, 0.2a, 0.4a et 0.5a; le rayon étant fixé à r=0.48a.

Contrairement à la première systématique qui concerne la variation du rayon des cylindres, l'épaisseur de ces derniers a quant à elle une influence significative sur la position des modes de résonance et donc sur la position de la bande interdite. En effet, on peut clairement observer que plus l'épaisseur est importante, plus ces modes se déplacent vers les plus basses fréquences. De plus, on observe également un élargissement de la bande interdite avec l'augmentation de l'épaisseur. Nous expliquerons dans la partie I.4.3 ces comportements de la bande interdite en fonction de ce paramètre h.

Comme expliqué ci-dessus, l'ouverture des bandes interdites est due au couplage entre les modes de Lamb et les différents modes de résonance locale générées dans les cylindres. Ce couplage n'est pas automatique et repose sur des mécanismes d'interaction liés notamment à la nature des modes et à leur polarisation. Concernant nos structures en plaque, nous avons calculé le champ de déplacement des principaux modes localisés responsables de la création des bandes interdites. La figure 4.13 montre la distribution des champs de déplacement dans une cellule unité pour les modes notés a, b, c et d, indiqués dans la structure de bandes de la figure 4.10.

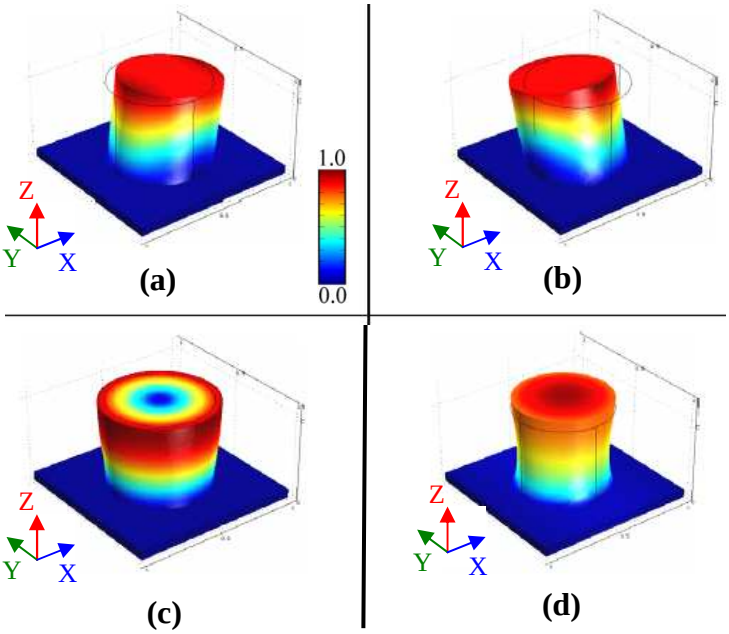


Figure 4.13 : Champs de déplacement des modes notés a, b, c et d dans la structure de bandes de la figure 4.10. Les modes sont de nature transverse pour (a) et (b), et élongation pour (d). Le (c) est un mode de "respiration" (*Breathing mode*).

Tout d'abord, cette figure illustre bien la nature extrêmement localisée des modes de résonance sur la plaque puisque presque aucun déplacement n'est enregistré au niveau de celle-ci, l'essentiel de l'énergie élastique étant confiné dans le résonateur. Ensuite, nous observons trois principaux modes localisés : un mode transverse (*shear*) indiqué par les figures 4.13.a et 4.13.b, un mode "d'élongation" (figure 4.13.d) et un mode qu'on va appeler "*Breathing*" ou mode de "respiration" (figure 4.13.c). Ces modes se couplent en effet avec les modes de Lamb suivant la polarisation de ces derniers. Tout d'abord, le mode "élongation" est un mode dont le déplacement est symétrique suivant les directions X et Y et possède une composante de déplacement dominante suivant l'axe Z. Le champ de déplacement du mode transverse, quant à lui, est selon soit X soit Y. Par contre, le mode "*Breathing*" est doublement

symétrique suivant X et Y et n'a aucun déplacement suivant Z. Par ailleurs, il est connu que dans le régime à très basses fréquences, les modes de Lamb S_0 et SH ont une composante dominante dans le plan (*in-plan*), ce qui signifie qu'ils pourront se coupler avec les modes localisés transverses. Pour le mode de Lamb A_0 (antisymétrique ou "*Flexural*"), il a une forte composante hors du plan (*out of plane*), mais aussi une petite composante dans le plan; il pourra donc se coupler fortement avec le mode localisé "élongation" et simultanément avec le mode localisé transverse. Pour le mode "*Breathing*", et au vu de sa polarisation transverse, il ne se couplera pas avec les ondes de Lamb.

S'agissant de la compréhension des comportements physiques des CPRL origine de l'influence des paramètres géométriques des cylindres sur la structure de bandes, nous nous baserons sur un modèle d'oscillateur harmonique appelé "*Spring mass model*"[7, 8] afin d'en approcher le mécanisme.[12, 19, 20].

I.4.3. Le modèle de l'oscillateur harmonique (" *Spring mass model* ")

Le modèle de l'oscillateur harmonique est adopté afin de comprendre le comportement vibratoire des cylindres en fonction de leurs paramètres géométriques. Une cellule élémentaire de notre système peut être modélisée par un ressort de masse et de raideur respectives *m* et *k*, lié à la plaque d'époxy. Ainsi, la raideur *k* définit la constante élastique effective de l'élastomère et *m* sa masse. (Voir figure 4.14 ci-dessous).

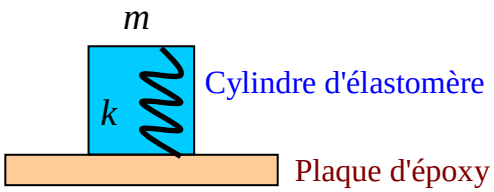


Figure 4.14 : Modèle d'oscillateur harmonique ("*Spring mass model*")

En se basant sur ce modèle, la fréquence de résonance du cylindre peut être estimée approximativement proportionnelle à $\sqrt{k/m}$, c'est-à-dire qu'on a :

$$f \propto \sqrt{k/m}$$

Supposons que l'élastomère a une raideur k_0 par unité de surface de contact s_0 pour une hauteur h_0. Pour un cylindre de hauteur *h* et de section *s*, la raideur effective est estimée à :

$$k = k_0 (s/s_0)/(h/h_0)$$

Sachant que la masse *m* du cylindre vaut :

$$m = \rho.sh$$

où ρ est la densité de l'élastomère.

Il est ainsi évident que l'augmentation du rayon du cylindre élastomère, et donc de sa surface de contact, a pour effet d'augmenter simultanément sa raideur (k) et sa masse (m), ce qui rend la fréquence de résonance quasi indépendante du rayon. Par contre, la variation de l'épaisseur des cylindres a plus d'effet sur les modes de résonances. En effet, en se basant sur le même raisonnement, il est clair que la raideur effective du cylindre diminue avec l'augmentation de l'épaisseur, alors que sa masse devient plus importante. Par conséquent, les fréquences de résonance se localisent de plus en plus en basses fréquences au fur et à mesure que l'on augmente l'épaisseur des cylindres. Ce comportement élastique qui change en fonction de la géométrie des cylindres peut être résumé en formulant la fréquence de résonance comme suit :

$$f \propto \sqrt{k/m} = \frac{1}{h}\sqrt{k_0 \frac{h_0}{\rho s_0}} \quad (4.4)$$

En général, le modèle de l'oscillateur harmonique permet de rendre compte assez facilement de l'influence des paramètres géométriques des cylindres (résonateurs) sur leur mode de résonance dans la structure de bandes. Toutefois, ce modèle ne peut pas expliquer l'évolution des fréquences de tous les modes localisés des cylindres, comme en témoigne l'exemple du mode désigné par une flèche rouge dans la figure 4.11. En effet, la fréquence de résonance de ce mode change significativement avec le rayon du cylindre, et ainsi, son comportement vibratoire ne peut pas être expliqué par notre modèle d'oscillateur harmonique. La figure 4.15 ci-dessous illustre le comportement oscillatoire de ce mode. Il en ressort effectivement que celui-ci présente des vibrations latérales planes dominantes, ce qui explique la dépendance de sa fréquence de résonance du rayon.

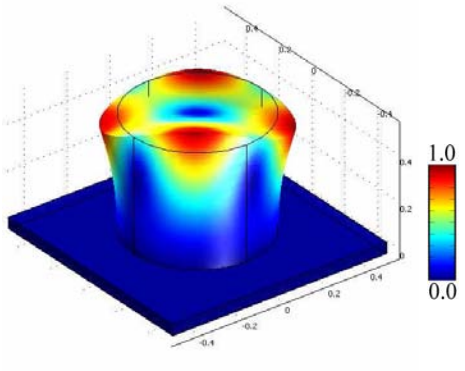


Figure 4.15: Distribution normalisée du champ de déplacement du mode indiqué par une flèche rouge dans la figure 4.11. La forme déformée est faite avec une échelle arbitraire

Partant du modèle de l'oscillateur harmonique, nous avons pu voir et comprendre comment on peut localiser les modes de résonance en très basses fréquences. Ceci peut être atteint en augmentant l'épaisseur des cylindres, réduisant ainsi leur raideur effective, et augmentant simultanément leur masse. De ce fait, il devient intéressant de pouvoir encore baisser plus les fréquences de résonance au moyen de l'effet de masse du cylindre. L'idée est d'y parvenir sans pour autant utiliser de grandes épaisseurs des cylindres, ni changer leur raideur effective (constantes élastiques). Nous verrons que ceci peut être possible grâce aux cylindres "composites".

I.5. Structures de bandes du système à cylindres "composites"

Comme évoqué ci-dessus, l'un des moyens pour lequel nous avons opté afin d'ouvrir des bandes interdites vers des fréquences de plus en plus basses (régime sonique), est l'ajout d'un matériau lourd au dessus du cylindre élastomère. La structure étudiée dans cette section est présentée dans la figure 4.16 ci-dessous qui rappelle celle représentée dans la figure 4.4.

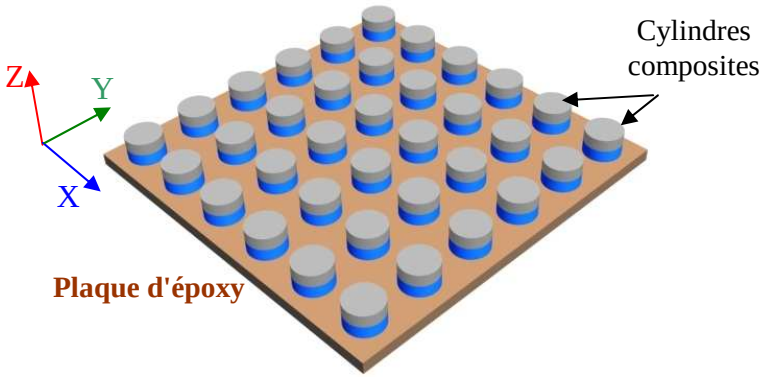


Figure 4.16 : CPRL 2D composé de cylindres « composites » formés de plomb et d'un élastomère (*Silicone rubber*) disposés en configuration carrée sur une plaque d'époxy.

La deuxième partie du cylindre de plomb ajoutée au dessus de l'élastomère a été choisie afin d'augmenter significativement la masse du cylindre (ρ_{Pb}=11400kg/m^3). De plus, vu que les constantes élastiques du plomb sont plus élevées comparées à celles de l'élastomère, nous pouvons considérer que la constante élastique effective du résonateur est équivalente à celle du matériau le plus mou, à savoir celle de l'élastomère. De ce fait, nous pouvons localiser les fréquences de résonances en très basses fréquences par deux approches :

- en augmentant l'épaisseur h_2 du plomb (figure 4.4), et donc accroître la masse totale du cylindre sans pour autant changer sa constante élastique effective;
- en augmentant l'épaisseur de l'élastomère h_1, ce qui diminue la constante élastique effective du cylindre et augmente sa masse.

Dans ce qui suivra, c'est la première approche concernant l'augmentation de l'épaisseur du plomb qui fera l'objet de notre intérêt.

Sur Comsol Multiphysics, un maillage adaptatif tétraédrique a d'abord été choisi en prenant en compte le caractère élastique de chaque matériau de la structure. Ensuite, des tests de convergence comme celui présenté à la figure 4.7 ont été faits avant chaque calcul de structure de bandes. Enfin, des études systématiques en fonction du rayon et de l'épaisseur des cylindres ont été effectuées afin d'étudier leurs effets sur les courbes de dispersion.

I.5.1.1. Effet des paramètres géométriques

Dans cette étude, l'épaisseur du cylindre est fixée à $h = h_1 + h_2 = 0.1a + 0.3a$ et le calcul des courbes de dispersion a été fait pour les différentes valeurs suivantes du rayon : $0.3a$, $0.36a$, $0.4a$ et $0.48a$. La figure 4.17 montre les résultats des simulations réalisées.

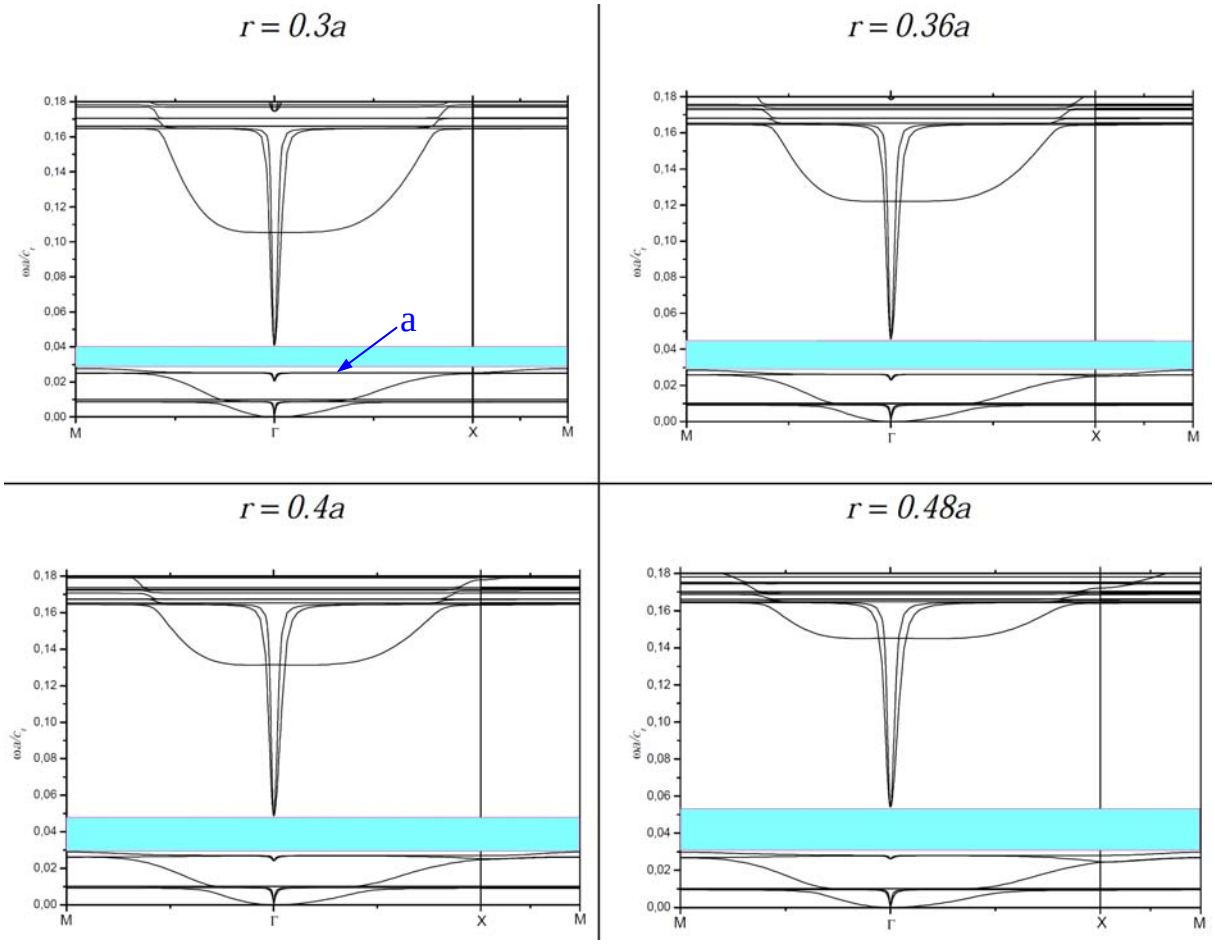


Figure 4.17 : Structures de bandes du CPRL à cylindres « composites » pour différents rayon *r* : 0.3*a*, 0.36*a*, 0.4*a* et 0.48*a*. L'épaisseur totale est fixée à $h = h_1 + h_2 = 0.1a + 0.3a$

Encore une fois, la position de la grande majorité des modes de RL ne dépend pas du rayon du cylindre, et celle de la bande interdite obtenue ne change pas. Inversement, on constate que la largeur de la bande interdite augmente significativement avec le rayon. Ceci est dû entre autres à la force de couplage entre les ondes de Lamb et les modes localisés, accentuée par l'augmentation de la masse totale du cylindre, d'une part, et à l'accroissement de la surface de contact entre la plaque et les cylindres d'autre part. La figure 4.18 ci-dessous illustre la distribution du champ de déplacement au niveau de la cellule unité pour le mode (a) indiqué dans la figure 4.17.

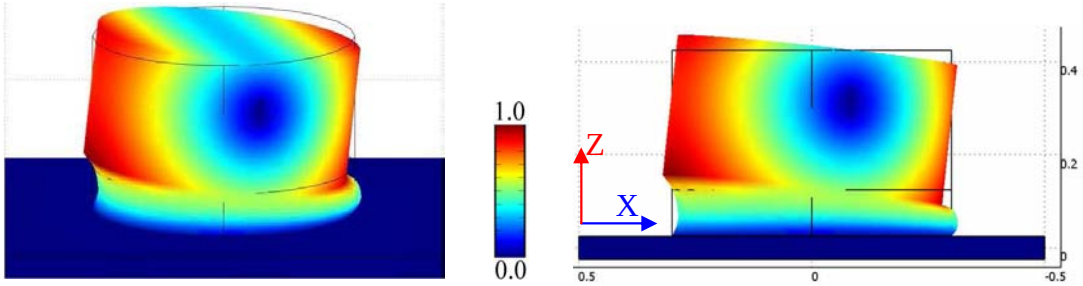


Figure 4.18 : Distribution du champ de déplacement pour le mode (a) indiqué dans la figure 4.17, l'épaisseur totale du résonateur étant $h = h_1 + h_2 = 0.1a + 0.3a$ et $r=0.3a$

Si on examine la distribution du champ de déplacement pour le mode (a), on distingue de nouveau sa nature transverse extrêmement localisée. L'énergie élastique est totalement confinée dans le cylindre et plus précisément au niveau de l'élastomère du fait de sa faible impédance acoustique, car aucune déformation n'est enregistrée dans le plomb et dans la plaque d'époxy. La "casquette" en plomb ne fait que bouger latéralement dans sa globalité sans déformation car elle joue le rôle de « corps lourd » ayant une raideur extrêmement élevée par rapport à celle de l'élastomère.

Dans une deuxième étude, des calculs de structures de bandes ont été faits pour différentes valeurs de l'épaisseur h_2 du plomb en fixant le rayon r du cylindre ainsi que l'épaisseur h_1 de l'élastomère à r=0.3a et h_1 = 0.1a. La figure 4.19 illustre les résultats des courbes de dispersion obtenus pour les épaisseurs h_2 suivantes : 0.1a, 0.2a, 0.3a, et 0.4a. Nous pouvons ainsi déduire de cette figure que les modes de résonance se localisent de plus en plus en basses fréquences avec l'augmentation de l'épaisseur de la partie en plomb, ceci concorde bien avec ce qui a été anticipé en utilisant le modèle de l'oscillateur harmonique.

L'effet de la "casquette" en plomb est essentiellement un effet de masse sur les cylindres et n'a presque pas d'influence au niveau de la raideur effective totale du résonateur. Nous

pouvons se rendre compte de cela avec un modèle très simple. Si l'on considère notre résonateur composé d'élastomère et de plomb comme étant un système de deux ressorts en série de raideurs effectives $k_{élastomère}$ et k_{plomb}, la constante élastique effective équivalente du résonateur complet est $k_{eq}^{-1} = k_{élastomère}^{-1} + k_{plomb}^{-1}$. Sachant que $k_{élastomère} << k_{plomb}$, nous pouvons conclure que $k_{eq} \approx k_{élastomère}$.

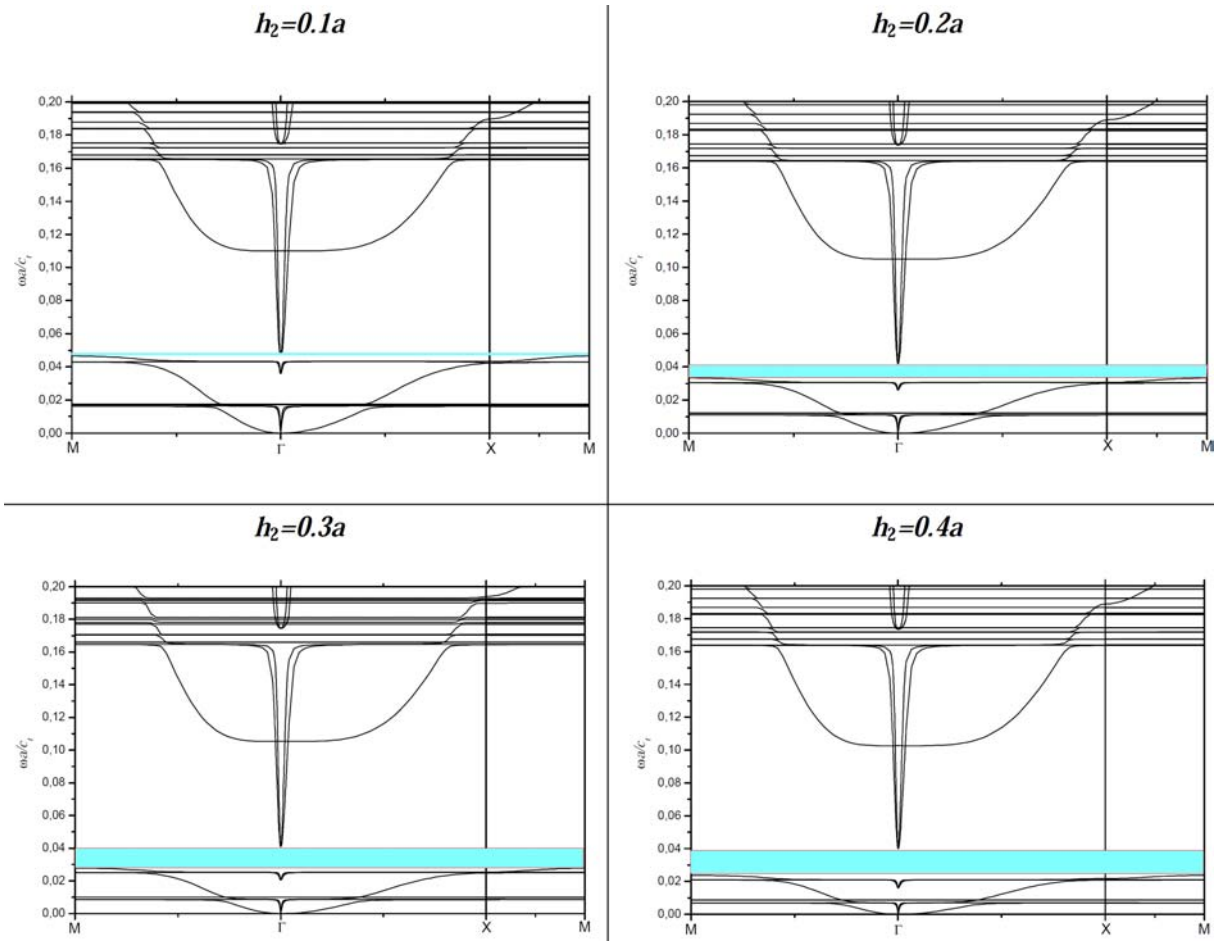


Figure 4.19 : Structures de bandes du CPRL à cylindres composites pour les différentes valeurs de l'épaisseur h_2 de plomb suivantes : 0.1*a*, 0.2*a*, 0.3*a* et 0.4*a* ; le rayon *r* du cylindre et l'épaisseur h_1 de l'élastomère sont fixés à *r*=0.3*a* et h_1=0.1*a*

Il existe un autre moyen convaincant qui permet de se rendre compte dudit effet de masse. Il suffit de considérer un autre système à cylindres composites semblable à celui que nous étudions, doté d'un autre matériau que le plomb mais ayant la même masse totale. Le but est de comparer les structures de bandes générées par les deux systèmes. On considère donc deux structures à cylindres composites, l'une avec une "casquette" en plomb et la deuxième

avec une en acier, à épaisseurs choisies telles que les deux cylindres aient la même masse totale. Les deux structures sont représentées dans la figure 4.20.

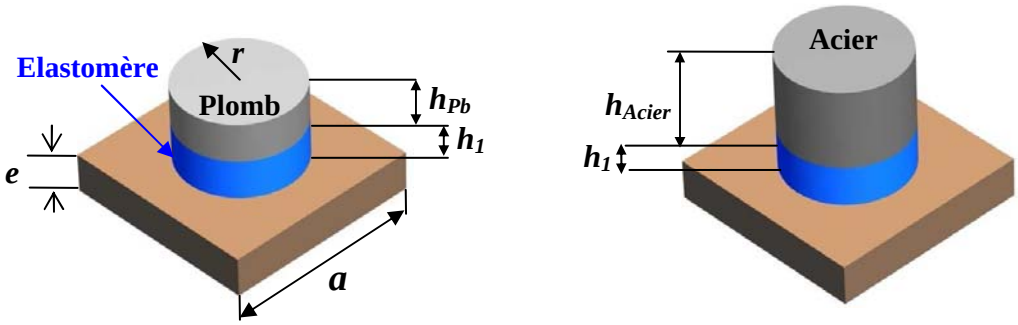


Figure 4.20 : Cellule unité du CP à résonateurs "composites" : (à gauche) avec la "casquette" en plomb, (à droite) avec celle en acier

Partant des paramètres géométriques suivants pour le premier système composé du plomb: h_1=0.1a, h_{Pb}=h_2=0.3a et r=0.3a, et en prenant la même hauteur h_1 d'élastomère ainsi que le rayon r pour le deuxième système renfermant l'acier, l'égalité des masses des deux "casquettes" en plomb et en acier impose une épaisseur d'acier valant :

$$h_{acier} = (\rho_{Pb} / \rho_{Acier}).h_{Pb}$$

La figure 4.21 montre les structures de bandes calculées pour les deux systèmes, tracées sur le même graphe avec deux couleurs différentes.

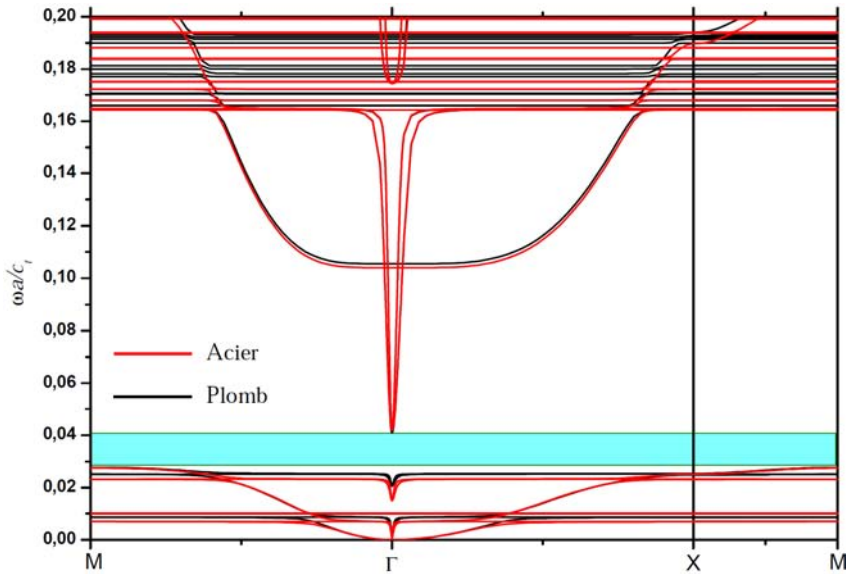


Figure 4.21 : Structures de bandes pour deux systèmes à résonateurs composites, l'un avec une "casquette" en plomb (courbes noires) et l'autre en acier (courbes rouges)

Les deux structures de bandes se superposent parfaitement pour les deux systèmes composites bien que les deux épaisseurs en plomb et en acier aient des constantes élastiques

et masses volumiques différentes. Ceci montre qu'indépendamment de la nature du matériau surmontant l'élastomère, l'effet sur la localisation des fréquences de résonance est quasi exclusivement un effet de masse, à condition que les constantes élastiques et la masse volumique de ce matériau soient très élevées comparées à celles de l'élastomère.

I.6. Discussion et conclusion

A la lumière de ce qui précède, il ressort que la variation de l'épaisseur des cylindres d'élastomère dans le cas des résonateurs simples permet de changer à la fois leur masse et leur constante élastique effective. Par contre, la variation de l'épaisseur de la "casquette" en plomb dans le cas des résonateurs "casquette" change la masse du cylindre sans pour autant affecter sa raideur effective. Ceci change la localisation des modes de résonance dans la structure de bandes et ainsi la position de la bande interdite. La variation du rayon du cylindre n'agit, quant à elle, que sur la largeur de la bande interdite. Sachant que cette dernière est créée grâce au couplage entre les modes de résonance et ceux de la plaque, ce couplage est d'autant plus important que la surface de contact entre le cylindre et la plaque est grande.

Par ailleurs, il est important de souligner les travaux réalisés par Wu *et al*[16] et Pennec *et al*[17] sur une structure géométriquement similaire à la notre. En effet les premiers se sont intéressés à une structure à cylindres sur plaque entièrement en aluminium, et ont montré numériquement et expérimentalement l'existence d'une bande interdite aux environs de 140 kHz. Les derniers, quant à eux, se sont penchés sur le calcul numérique de la structure de bandes d'une structure similaire en utilisant différents matériaux pour les cylindres et la plaque. Notre structure phononique est similaire géométriquement aux leurs, mais l'ouverture des bandes interdites dans leurs systèmes n'est pas due à la résonance locale. Dans leurs structures, vu que les propriétés élastiques entre les cylindres et la plaque sont très proches, voire identiques (pas ou peu de contraste élastique), un fort lien mécanique existe entre eux, ce qui ne permet pas d'avoir des modes localisés à fort couplage. L'énergie élastique est, dans ce cas, répartie d'une manière assez homogène dans toute la structure. Par contre, dans notre cas, le lien mécanique entre les cylindres (très mous) et la plaque est faible. Une onde élastique générée par une excitation dans la plaque d'époxy va donc pénétrer aisément l'élastomère très mou à cause de sa très faible impédance acoustique, et une localisation d'énergie va s'y opérer. L'onde se propageant dans le cylindre élastomère y sera confinée (localisée) du fait de l'impédance acoustique très importante de l'époxy. D'ailleurs, les champs de déplacement sur une cellule unité permettent de bien illustrer ce point (Figures 4.13 et 4.15). Par ailleurs, dans les modèles de structure de Wu *et al*[16] et de Pennec *et al*[17],

l’ensemble du système vibre en même temps et aucune localisation substantielle de l'énergie élastique n’est enregistrée au niveau des cylindres.

D'un autre côté, la faible/forte localisation de l’énergie acoustique dans les cylindres signifie un faible/fort facteur de qualité (Q) du mode localisé. De ce fait, le spectre de résonance des cylindres peut être soit étendu dans le cas de faible Q, ou étroit dans le cas d’un fort Q. Dans le cas d’un fort facteur de qualité comme dans notre cas, où nous avons affaire à une forte localisation de l’énergie élastique dans les cylindres, la périodicité n’intervient pas dans la création de bandes interdites. Dans le cas contraire, ces dernières sont ouvertes par l’effet de la périodicité, et donc par le mécanisme de Bragg.

De plus, la largeur de la bande interdite ouverte par le mécanisme de résonance locale est généralement très étroite comparée à celle créée par le mécanisme de Bragg. Ceci peut être expliqué par la discussion ci-dessus basée sur le facteur de qualité qui joue un rôle important dans le cas du mécanisme de résonance locale (spectre de résonance très étroit).

Le principal avantage qu’offre la structure que nous avons étudiée théoriquement dans cette première partie de ce chapitre, est le fait qu’elle puisse être facilement réalisable d’un point de vue expérimental. Elle permet, de surcroît, de comprendre assez facilement les mécanismes physiques à l'origine de l’ouverture des bandes interdites à résonance locale. Enfin, cette structure peut offrir un net avantage quant au contrôle de la position et la largeur de la bande interdite, et ce moyennant le système à résonateurs composites dont on peut agir sur la masse effective totale[26].

Dans la deuxième partie de ce chapitre, nous exploiterons l’avantage qu’offre notre structure en termes de facilité de conception et de fabrication pour mener des études expérimentales de mise en évidence de l’ouverture des bandes interdites en basses fréquences grâce au mécanisme de résonance locale.

II. Etude expérimentale

L’étude théorique que nous avons menée dans la première partie de ce chapitre a permis de démontrer la possibilité d’ouvrir des bandes interdites à de très basses fréquences (et donc pour des longueurs d’ondes très larges par rapport à la périodicité de la structure). Ceci grâce au mécanisme de résonance locale opérant dans un système composé de cylindres déposés sur une plaque d’époxy. Afin de mettre en évidence expérimentalement les résultats théoriques obtenus, nous avons procédé à la fabrication puis à la caractérisation de certaines structures.

L'objectif est de démonter le comportement de ces structures à très basses fréquences et ainsi mettre en évidence le mécanisme de résonance locale pour ce type de structure en plaque.

En se basant sur les résultats théoriques de la première partie, nous décrirons les étapes de fabrication des structures, faite avec un choix de matériaux, accompagnées de quelques caractérisations élastiques de ces derniers. Ensuite, nous présenterons les simulations numériques de structures de bandes faites en intégrant les propriétés élastiques effectives des matériaux. Enfin, nous terminerons ce chapitre avec les résultats de caractérisation expérimentale obtenus ainsi que leur confrontation avec les prédictions théoriques.

II.1. Fabrication des échantillons

Les structures phononiques à résonance locale que nous avons conçues sont composées d'une plaque mince d'aluminium d'épaisseur e=0.5mm sur laquelle nous avons déposé des cylindres d'élastomère très mou (*Silicone rubber*) suivant un arrangement périodique carré. Trois structures de ce type ont été fabriquées avec des cylindres d'épaisseurs différentes : 5mm, 3mm et 1.5mm, et ayant un rayon fixe de 3mm. Chaque structure est constituée d'une matrice carrée de 10x10 cylindres avec une périodicité de a=1cm. Les dimensions de la plaque d'aluminium sont de 25cm x 25cm; la figure 4.22 nous en montre un exemple et le tableau 4.3 résume les paramètres géométriques de chaque échantillon.

	Epaisseur des cylindres	Rayon des cylindres
Structure 1	5mm	3mm
Structure 2	3mm	3mm
Structure 3	1.5mm	3mm

Tableau 4.3 : Paramètres géométriques des structures à RL fabriquées



Figure 4.22 : CPRL constitué d'une plaque d'aluminium d'épaisseur e=0.5mm sur laquelle est déposée une matrice carrée de cylindres d'élastomère (Silicone)

II.1.1. Choix des matériaux

L'élastomère que nous avons utilisé dans cette étude est un Silicone (*Silicone VMQ*) commercialisé par la société TRELLEBORG. A partir de feuilles de ce Silicone d'épaisseurs 5, 3 et 1.5mm, nous avons usiné des cylindriques ayant les dimensions requises. Contrairement à l'étude théorique que nous avons entamée dans la première partie de ce chapitre, et pour des facilités d'usinage dans notre laboratoire, nous avons choisi de travailler plutôt avec une plaque d'aluminium au lieu de l'époxy; un contraste élastique important étant toujours respecté entre la plaque et l'élastomère afin d'être dans les conditions favorables au mécanisme de RL.

II.1.2. Fabrication des échantillons

Le principal problème qui s'est posé pour la réalisation de nos structures, bien qu'elles soient simples de concept, réside dans la découpe du Silicone en pièces parfaitement cylindriques. En effet, à cause de la nature très molle du Silicone, son usinage avec les outils de découpe classiques ne permet pas d'avoir une forme cylindrique parfaite. Ceci car l'effort employé lors de la découpe par un outil tranchant provoque la déformation du Silicone, et il s'ensuit une forme finale irrégulière. Nous avons donc opté pour une solution qui s'est révélée efficace et qui fait appel à la découpe par jet d'eau. En plus de sa grande précision, la découpe à jet d'eau présente l'avantage d'absence d'échauffement du Silicone et donc de sa déformation ou de modification de sa structure.

Une fois que les cylindres ont été fabriqués, nous les avons collés sur une plaque d'aluminium d'épaisseur 0.5mm à l'aide d'une colle très fine et suffisamment résistante pour assurer la fixation de l'élastomère.

II.2. Mesure des propriétés élastiques

Avant d'entamer les mesures expérimentales, il est nécessaire de connaître les constantes élastiques des matériaux utilisés afin d'aborder des études théoriques permettant de prédire les comportements vibratoires de nos structures. Les propriétés élastiques de aluminium utilisé pour la plaque sont connues dans la littérature[21], contrairement à celles de l'élastomère vu leur très large éventail de types existants. Pour déterminer donc les propriétés élastiques effectives du *Silicone rubber* utilisé, nous avons d'abord admis l'hypothèse de son isotropie et négligé ses propriétés viscoélastiques.

Nous avons choisi un *Silicone rubber* de densité ρ=1300kg/m^3, similaire à la valeur théorique relevée dans la littérature. La documentation technique fournie par la société TRELLEBORG nous donne une partie des informations dont nous avions besoin, entre autres la dureté du *Silicone rubber* qui est de D = 60 Shore A. Cette valeur nous permet de remonter au module de Young de l'élastomère noté E, et ceci grâce à la relation suivante[22] :

$$E = \exp(0.0235 \times D - 0.6403) = \exp(0.0235 \times 60 - 0.6403) = 2.1591 MPa.$$

Certes, cette information est utile, mais elle demeure insuffisante pour déterminer les vitesses longitudinale et transverse de propagation de l'onde élastique dans le *Silicone rubber*. Il est devenu donc nécessaire de faire des mesures de vitesses de propagation. Pour ce faire, nous avons utilisé la spectrométrie Brillouin.

II.2.1. Mesure de la vitesse longitudinale par spectroscopie Brillouin

La spectrométrie Brillouin est une technique optique de caractérisation mécanique qui se base sur la diffusion inélastique de la lumière issue de l'interaction entre les phonons du matériau et les photons de la lumière incidente. La figure 4.23 suivante montre le banc de mesure du spectromètre Brillouin utilisé dans notre laboratoire.

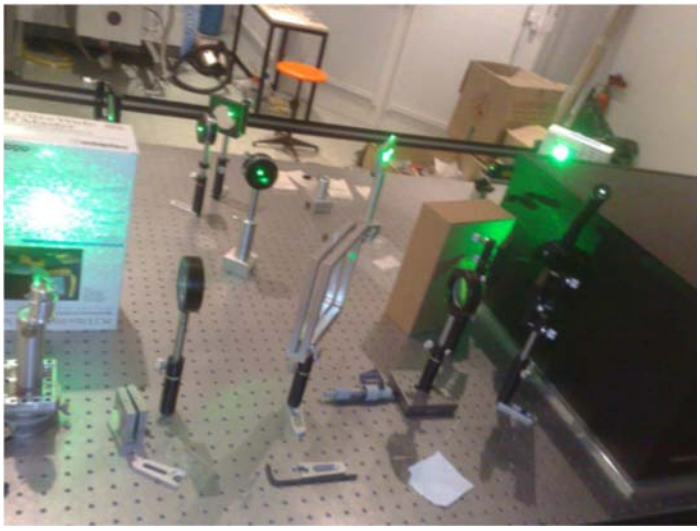


Figure 4.23 : Banc de mesure par spectroscopie Brillouin du laboratoire

Le principe de la spectroscopie Brillouin peut se résumer ainsi :

Les photons issus d'une source de lumière monochromatique, portés par le vecteur d'onde $\vec{k}_i$, interagissent avec les phonons du matériau de vecteur d'onde $\vec{q}$, ce qui génère des photons

diffusés portés par le vecteur d'onde $\vec{k}_d$ qui sont détectés. La figure 4.24 ci-dessous résume la situation[23].

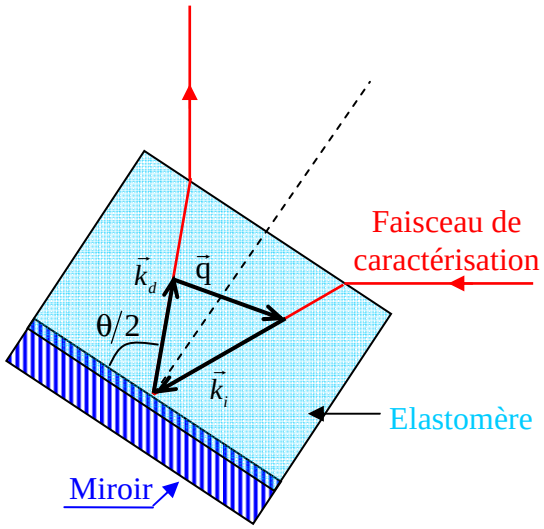


Figure 4.24 : Schéma de la géométrie de la configuration utilisée pour nos mesures par spectrométrie Brillouin[23]

La conservation de la quantité de mouvement dans le processus de diffusion nous donne :

$$\hbar\vec{q} = \hbar\vec{k}_d - \hbar\vec{k}_i$$

$\vec{q}$ est appelé le vecteur d'onde de l'onde acoustique thermique, dont le module est :

$$|\vec{q}| = q = \sqrt{k_d^2 + k_i^2 - 2k_i k_d \cos(\theta)}$$

Comme l'énergie du phonon est très faible devant celle du photon incident, on peut considérer que : $k_d \approx k_i$, et en déduire que :

$$q = 2k_i \sin(\theta/2) = 4\pi \frac{n}{\lambda_0} \sin(\theta/2)$$

où n et λ_0 sont respectivement l'indice optique de l'élastomère et la longueur d'onde du photon émis par la source.

Dans nos expériences de mesure, nous avons utilisé une géométrie particulière de façon à avoir $\theta = 180°$. La vitesse de l'onde acoustique peut ainsi être calculée en écrivant :

$$C_l = \frac{2\pi f}{q} = \frac{f\,\lambda_0}{2n}$$

avec f la fréquence du photon diffusé inélastiquement par diffusion de Brillouin, qui est déterminée par le spectre de la lumière diffusée.

Pour notre *Silicone rubber*, la figure 4.25 représente le spectre Brillouin obtenu, qui nous donne un pic principal situé à une fréquence égale à *f*=5.5GHz, correspondant au mode longitudinal. Sachant que l'indice de réfraction de l'élastomère est n=1.45 et la longueur d'onde utilisée vaut λ_0 = 514.5nm, nous pouvons déduire la vitesse de l'onde acoustique longitudinale :

$$\mathbf{C_l = 975m/s}$$

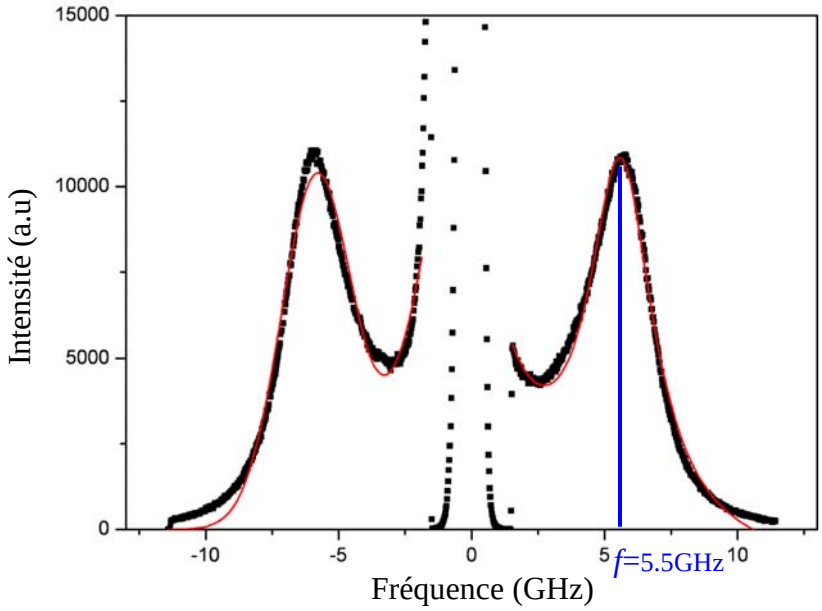


Figure 4.25 : Spectre Brillouin issu de la mesure à $\theta = 180°$ sur l'élastomère

La mesure de la vitesse transverse est extrêmement délicate à cause d'abord des pertes élevées de ce mode dans le *Silicone Rubber*, mais surtout à cause de la très faible valeur de cette vitesse. Nous avons même ajusté les paramètres du spectromètre Brillouin à leur limite (distance entre les miroirs Fabry-Perrot de 27mm) afin de détecter les pics les plus bas en fréquence, jusqu'à 400MHz. Cette valeur permet de mesurer des faibles vitesses allant jusqu'à 73m/s. Malgré cela, nous n'avons pas pu distinguer de mode à ces fréquences, ce qui nous amène à conclure que la vitesse transverse de propagation des ondes se situe en dessous de 73m/s.

Ces mesures impliquent, premièrement, que le mode transverse dans *le Silicone rubber* est très peu couplé pour voir émerger un pic important, et deuxièmement que, même s'il y a un pic transverse, il sera "englouti" par le pic de la diffusion Rayleigh. Par ailleurs, la qualité optique de notre élastomère est relativement mauvaise en termes de transmission de l'onde

optique, ce qui donne des pics Brillouin très larges, et donc une perte de précision au niveau de la détermination de la fréquence mesurée.

II.2.2. Autre mesure de la vitesse longitudinale

D'autres mesures ont été faites sur ce *Silicone rubber* pour s'assurer du résultat obtenu pour la vitesse longitudinale. En effet, nous avons travaillé en collaboration avec Dr. Jia-Hong Sun du groupe du Prof. T-T. Wu de l'Université NTU à Taïwan, afin de réaliser des mesures de vitesse des ondes élastiques. Les mesures ont été faites par l'approche suivante :
A l'aide d'un transducteur, une onde longitudinale est générée et détectée suivant l'épaisseur d'un morceau de *Silicone rubber* en forme cylindrique. La vitesse de l'onde est ensuite calculée en mesurant le temps nécessaire à l'onde pour effectuer un nombre d'allers-retours suivant l'épaisseur du *Silicone rubber*. La mesure nous donne une valeur de vitesse longitudinale de **C_l=943.7m/s**. La figure 4.26 montre schématiquement le dispositif expérimental utilisé.

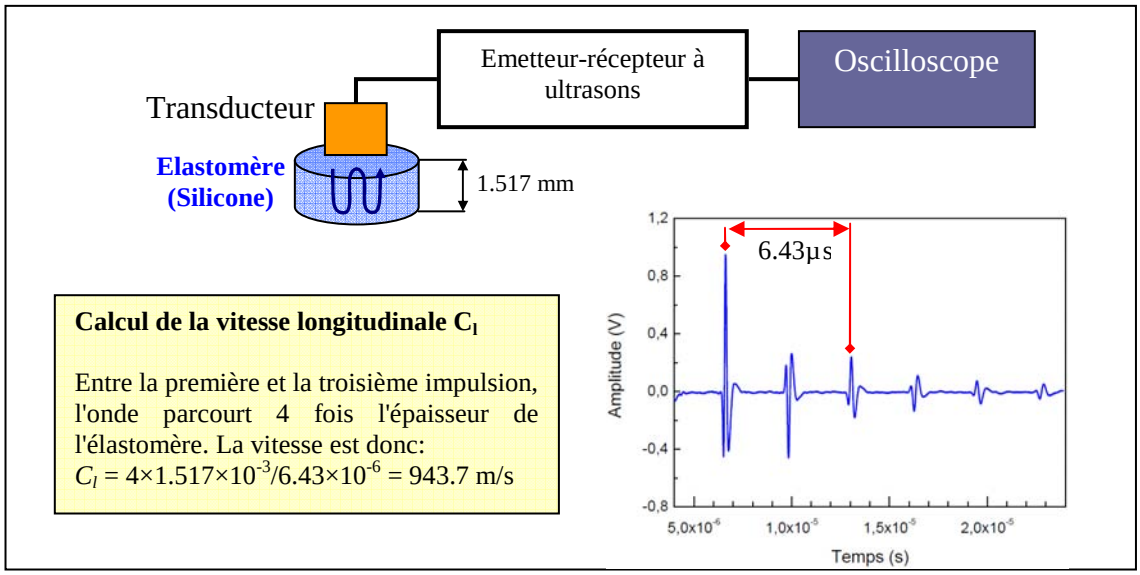


Figure 4.26 : Mesure de la vitesse longitudinale dans le *Silicone rubber* par un émetteur-récepteur à ultrasons

Le résultat des mesures de la vitesse longitudinale par le spectromètre de Brillouin (C_l=975m/s) et celui donné par le dispositif ultrasons à transducteur (C_l=943.7m/s) sont très proches. Nous avons donc choisi de travailler avec la première valeur de vitesse, à savoir C_l=975m/s car cette différence n'influence pas beaucoup les calculs théoriques, notamment celui de la structure de bandes.

En ce qui concerne la vitesse transverse de propagation de l'onde dans le *Silicone rubber*, nous n'avons pas pu la mesurer expérimentalement à cause de sa faible valeur, mais nous avons pu la déterminer en adoptant une autre approche.

En effet, la valeur C_l = 975m/s de la vitesse longitudinale de l'onde acoustique dans le *Silicone rubber* nous permet de calculer sa constante élastique c_{11}=1.23GPa. A partir de cette donnée, et en considérant le *Silicone rubber* isotrope, nous pouvons calculer son coefficient de Poisson par la formule :

$$\upsilon = 0.25 \times \left(\sqrt{\left(1 - \frac{E}{c_{11}}\right)\left(9 + \frac{E}{c_{11}}\right)} - \left(1 - \frac{E}{c_{11}}\right) \right)$$

Avec ***E*=2.16MPa** calculé auparavant en utilisant la dureté du *Silicone rubber*, nous obtenons $\upsilon = 0.4998$. Cette valeur correspond bien à ce qu'on trouve dans la littérature pour les élastomères qui sont généralement quasi incompressibles[24].

En utilisant le coefficient de Poisson et le module de Young, nous pouvons déterminer la constante élastique de l'élastomère :

$$c_{44} = \frac{E}{2(1+\upsilon)} = 0.72 \text{ MPa}$$

et de là la vitesse transverse de propagation de l'onde élastique dans ce matériau :

$$C_t = \sqrt{c_{44}/\rho} = 23 \text{ m/s}$$

Le tableau 4.4 regroupe les valeurs expérimentales mesurées des paramètres physiques du *Silicone rubber* que nous avons utilisé pour la fabrication. Ces paramètres seront donc implémentés dans les nouvelles simulations numériques pour déterminer l'ouverture de bandes interdites dans nos trois structures.

matériau	ρ(kg/m^3)	c_{11} (GPa)	c_{44} (MPa)	c_{12} (MPa)	C_l (m/s)	C_t (m/s)	E (GPa)	υ
Silicone rubber	1300	1.23	0.72	$c_{11} - 2c_{44}$	975	23	2.16	0.4998

Tableau 4.4 : Constantes élastiques, densité et vitesses longitudinal et transverse pour le *Silicone rubber* considéré isotrope

Dans les simulations que nous entamerons, la structure de l'aluminium est considérée cubique et les constantes élastiques du matériau prises sont[21] :

Matériau	ρ(kg/m^3)	c_{11} (GPa)	c_{12} (GPa)	c_{44} (GPa)
Aluminium	2702	107.3	60.8	28.3

Tableau 4.5 : Constantes élastiques et densité de l'aluminium[21]

II.3. Implémentation des paramètres physiques mesurés dans le modèle numérique

A partir des constantes élastiques mesurées pour le *Silicone rubber* ainsi que celles de l'aluminium relevées dans la littérature, nous avons réalisé des simulations numériques de structures de bandes pour les trois structures présentées dans la figure 4.22 et le tableau 4.3. Nous nous sommes particulièrement intéressés aux modes hors du plan, puisque la caractérisation expérimentale à laquelle nous allons procéder ne peut analyser que ce type de modes. Nous avons également calculé leur coefficient de transmission en considérant une rangée de dix cylindres de *Silicone rubber*. L'excitation des modes hors du plan se fait en appliquant une force perpendiculaire à la plaque d'aluminium (suivant la direction Z) d'un côté de la rangée des cylindres, puis le calcul de la transmission se fait en enregistrant la composante Uz du champ de déplacement sur une ligne de détection située de l'autre côté de la rangée des cylindres. Nous avons aussi utilisé des conditions absorbantes au moyen de la PML (*Perfectly Matched Layer*) afin d'éviter des réflexions de l'onde élastique au niveau des frontières de la plaque. Les conditions de Bloch ont été ajoutées afin d'introduire la propriété de périodicité dans la direction perpendiculaire à la rangée de cylindres. La figure 4.27 résume le schéma du calcul théorique du coefficient de transmission.

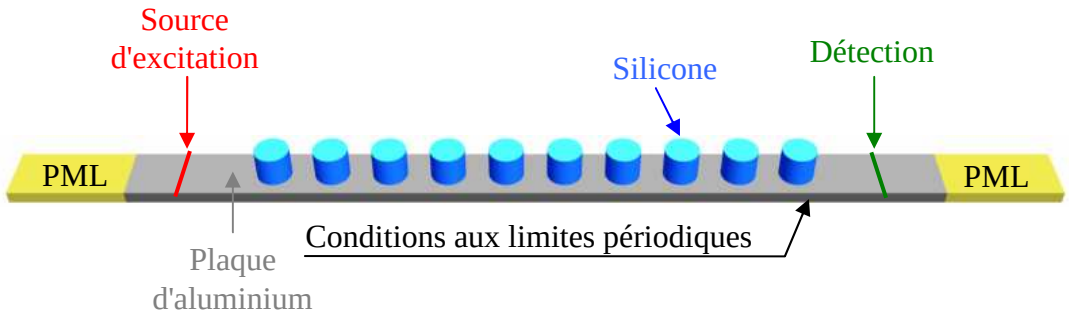
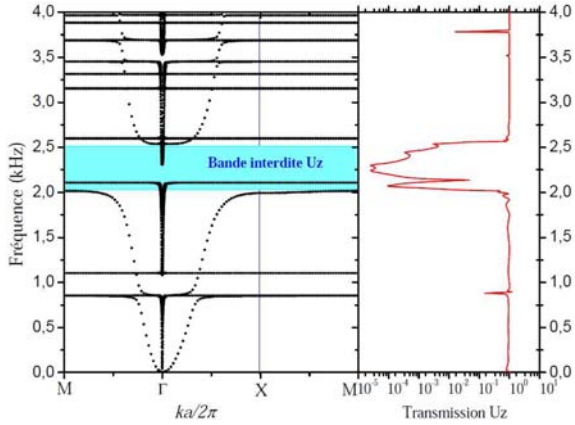


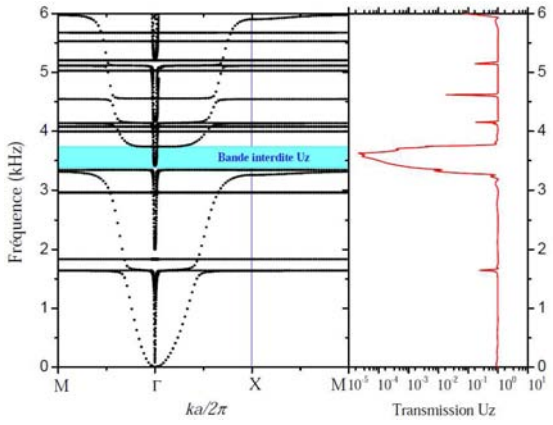
Figure 4.27 : Schéma de calcul du coefficient de transmission dans le CPRL

La figure 4.28 présente les différents résultats de simulations numériques des structures de bandes pour les trois "échantillons" ainsi que leur coefficient de transmission pour une source d'excitation des modes hors du plan de la plaque.

(a) Structure 1 : *h*=5mm



(b) Structure 2 : *h*=3mm



(c) Structure 3 : *h*=1.5mm

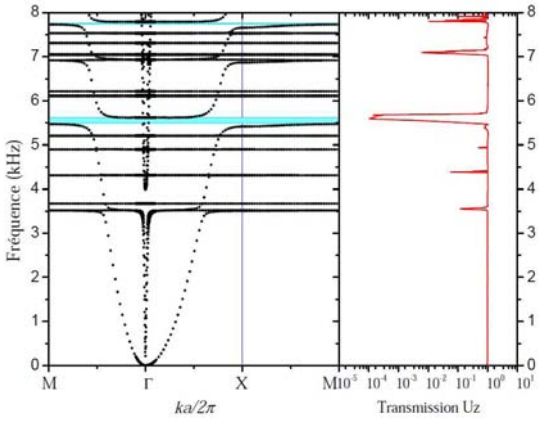


Figure 4.28 : Simulation numérique des structures de bandes ainsi que du coefficient de transmission pour une excitation hors plan (Uz étant la composante du champ de déplacement suivant la direction Z), pour les trois "échantillons".

A partir de la figure ci-dessus, nous pouvons conclure que les trois CPRL présentent au moins une bande interdite pour les modes hors du plan, représentées en bleu cyan dans les structures de bandes. De plus, au niveau du coefficient de transmission, nous pouvons remarquer une atténuation complète de l'onde dans l'intervalle correspondant exactement aux ouvertures des bandes interdites pour les modes hors du plan. Pour la structure 1, où l'épaisseur des cylindres est la plus élevée (*h*=5mm), le centre de la bande interdite se situe à environ 2.27kHz avec une largeur de 500Hz. La structure 2 ayant des cylindres d'épaisseur *h*=3mm présente une bande interdite de largeur plus faible, située à 3.5kHz. Finalement, La structure 3 montre l'ouverture de deux bandes interdites de largeurs très fines, situées à environ 5.6 et 7.7 kHz.

Ces résultats nous donnent donc une estimation assez précise des localisations des bandes interdites, essentielle pour notre caractérisation expérimentale.

II.4. Caractérisation expérimentale

La caractérisation des trois structures s'est faite au moyen d'un Vibromètre Laser à effet Doppler appelé SLDV (*Scanning Laser Doppler Vibrometer)*. Ce dernier est un instrument de mesure sans contact des vibrations de surface. En envoyant un Laser sur une surface oscillante, le SLDV mesure l'amplitude et la fréquence des vibrations de la surface hors du plan, en se basant sur le "shift" introduit à la fréquence du signal issu du faisceau réfléchi grâce à l'effet Doppler.

Les caractérisations auxquelles nous avons procédé par SLDV ont été réalisées dans le cadre d'une collaboration avec le département « *Aerospace Engineering* » de *Georgia Institute of Technlogy* à Atlanta (GT-Atlanta), avec le groupe du Prof. M. Ruzzene. J'ai, en effet, passé un séjour scientifique de trois semaines sur le site de GT-Atlanta afin de participer en partie à la caractérisation de nos structures. Avant de décrire les résultats obtenus sur celles-ci, nous allons présenter en détail le principe du SLDV.

II.4.1. Principe des mesures par SLDV

La figure 4.29 présente schématiquement le principe de mesure par SLDV[25]. Un faisceau Laser Hélium-Néon est divisé par le séparateur de faisceau BS1 en un faisceau de référence et un autre de mesure. Ce dernier traverse ensuite un deuxième séparateur BS2 puis diffuse au contact avec la surface de "l'échantillon" en vibration. Une portion du faisceau diffusé est réfléchie puis déviée par le séparateur BS2, traverse ensuite le séparateur BS3. Elle est finalement combinée avec le faisceau de référence au niveau du détecteur. Les oscillations de la surface de l'échantillon provoquent un changement du chemin optique du faisceau de mesure au cours du temps, introduisant ainsi un "shift" en fréquence au faisceau par effet Doppler. Cela se traduit par la création de franges d'interférences au niveau du détecteur. En ce qui concerne le faisceau de référence, il traverse une cellule de Bragg qui lui introduit un « shift » en fréquence bien déterminé, avant d'être redirigé vers le détecteur. Le rôle de la cellule de Bragg est de pouvoir distinguer entre les vibrations en direction de l'interféromètre et celles s'éloignant du dispositif. Le signal de sortie récupéré au niveau du détecteur est un signal modulé en fréquence (FM) avec la fréquence porteuse due au « shift » introduit par la cellule de Bragg, et la fréquence modulée due au "shift" Doppler. Ce signal FM peut être démodulé pour avoir le signal souhaité qui est directement proportionnel à la vitesse des

vibrations. L'accès aux champs de déplacement se fait par comptage des franges d'interférences sur le détecteur.

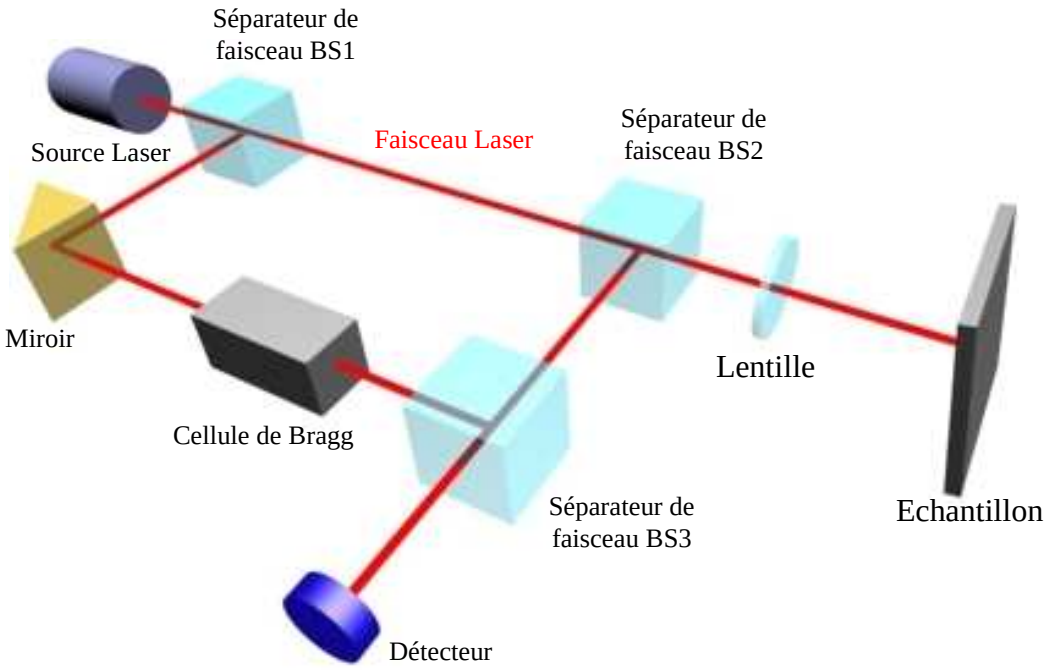


Figure 4.29 : Dispositif de mesure par SLDV[25]

II.4.2. Banc de mesure SLDV

Comme nous l'avons mentionné ci avant, nous avons utilisé l'équipement SLDV de l'Institut Georgia Tech pour caractériser nos trois échantillons. La figure 4.30 présente le banc de mesure ainsi que le montage d'une des structures à caractériser.

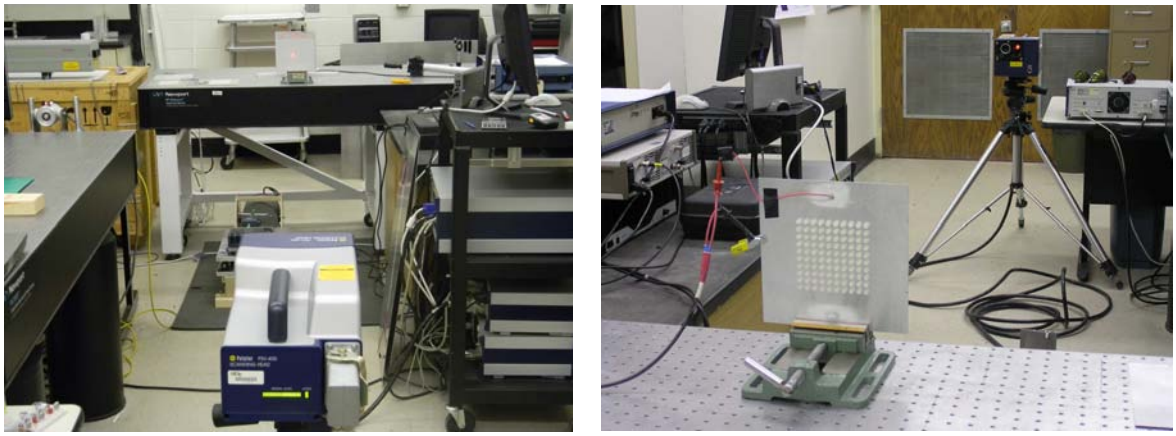


Figure 4.30 : Banc de mesure par SLDV sur une de nos structures.

Sur nos trois échantillons, un transducteur piézoélectrique (PZT) a été fixé afin de générer des ondes élastiques. Pour chaque structure, les mesures en analyse fréquentielle ont été faites en scannant trois lignes correspondant à trois directions différentes; aussi le transducteur a été repositionné chaque fois sur la plaque suivant la mesure à effectuer. Pour chacune des trois lignes, plusieurs mesures ont été effectuées sur plusieurs points. Ainsi, une moyenne des transformées de Fourier rapides (FFT) enregistrées sur chaque point a été calculée. La figure 4.31 présente schématiquement la disposition de ces lignes de balayage par rapport à la source d'excitation. Notons ici que la fréquence d'excitation de ces transducteurs s'étale sur la gamme [0.4 – 6KHz].

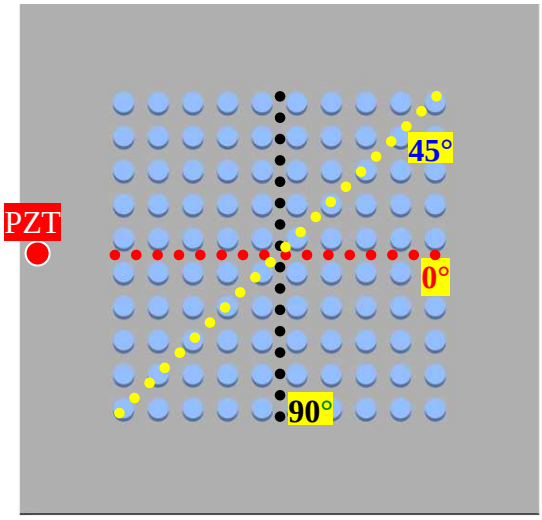


Figure 4.31 : Lignes de balayage adoptées pour les mesures du signal proportionnel au champ de déplacement de la plaque

Cette méthode de mesure a été adoptée afin d'avoir une moyenne générale sur le comportement élastique de la structure et de minimiser les erreurs. Par ailleurs, il est important de souligner le fait que les mesures des modes "propagatifs" dans les structures concernent ceux ayant une composante hors du plan de la plaque, car le SLDV ne peut détecter que ceux-là.

II.4.3. Résultats et discussion

La figure 4.32 présente la transformée de Fourier du signal mesuré en fonction de la fréquence suivant les trois directions 0°, 45° et 90°, pour la structure 1 ayant des cylindres d'épaisseur h=5mm.

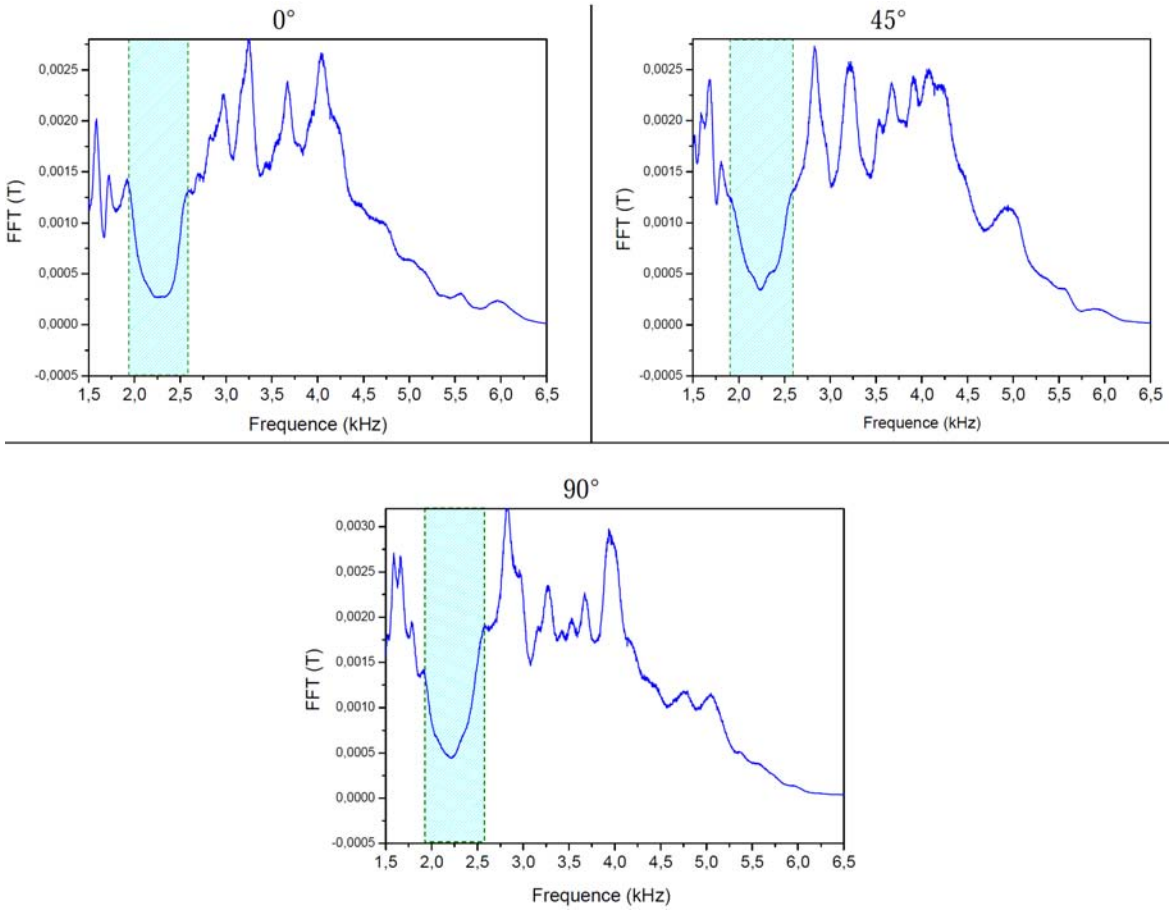


Figure 4.32 : Transformée de fourrier rapide (FFT) du signal mesuré par SLDV suivant les trois directions mentionnées dans la figure 4.31 pour la structure 1

A partir de ces résultats, nous pouvons constater que la structure 1 présente une bande interdite sur la gamme fréquentielle [1.92kHz - 2.59kHz] centrée à 2.26kHz (zone hachurée en bleu dans la figure 4.32), quel que soit l'endroit de mesure du champ de déplacement. Ce résultat concorde parfaitement avec celui de la simulation numérique que nous avons réalisée et mentionnée dans la figure 4.28(a). Sur cette dernière, nous avons une bande interdite centrée à 2.27kHz sur un intervalle de [2.01kHz - 2.54kHz]. Ceci est donc une mise en évidence expérimentale de l'existence d'une bande interdite pour les modes ayant une composante hors du plan et une longueur d'onde très large comparée à la périodicité de la structure. En effet, pour le mode antisymétrique se propageant dans la plaque d'aluminium d'épaisseur 0.5mm par exemple, un calcul théorique montre que la longueur d'onde de ce mode est estimée à 4.67cm à la fréquence 2.2kHz, ce qui est 4.67 fois la période du CP, de périodicité 1cm. Ainsi, la diffusion de Bragg ne peut pas être à l'origine de cette bande interdite observée dans la structure 1. Il ne peut donc s'agir que de la résonance des cylindres de *Silicone rubber* qui se manifeste localement à ces basses fréquences.

Afin de compléter ce résultat, nous avons fait d'autres mesures par *SLDV* sur les deux autres structures 2 et 3 ayant respectivement des épaisseurs de cylindres de 3 et 1,5mm. La figure 4.33 présente les résultats obtenus pour la structure 2.

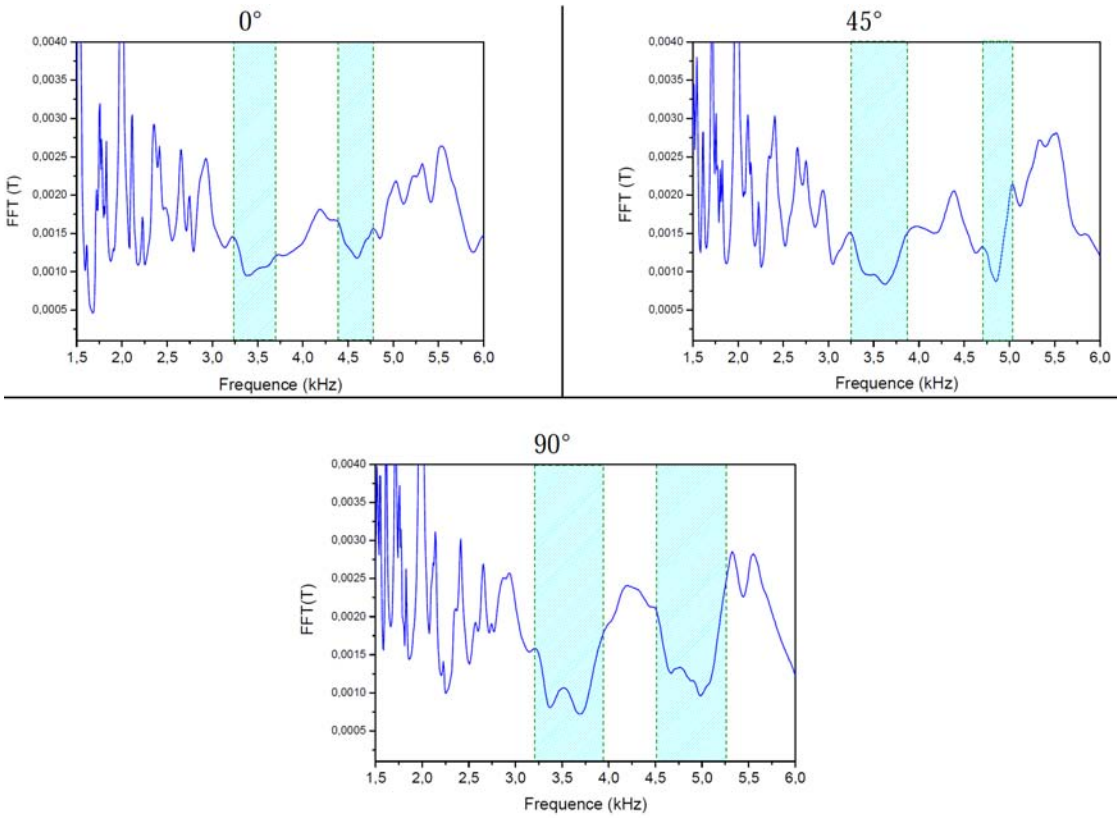


Figure 4.33 : Transformée de Fourier du signal mesuré suivant les trois directions mentionnées dans la figure 4.31 pour l'échantillon 2

Les résultats des mesures sur la structure 2 laissent conclure l'existence de deux domaines de bandes interdites. Le premier est centré à environ 3.5kHz et s'étend de 3.25 à 3.75kHz. Ceci correspond bien à ce qu'on avait obtenu théoriquement dans le calcul de structure de bandes et du coefficient de transmission mentionné dans la figure 4.28(b). Cependant, la mise évidence de la deuxième atténuation enregistrée au-delà de 4.5kHz n'a pas pu être anticipée théoriquement. Ceci est peut être dû au fait que les transducteurs PZT utilisés n'ont une uniformité d'excitation qu'entre 0.4 et 4kHz, et qu'au-delà, c'est-à-dire dans le domaine de la deuxième bande interdite, la qualité de l'excitation est justement affectée. Concernant la structure 3, la figure 4.34 illustre les résultats des mesures obtenues.

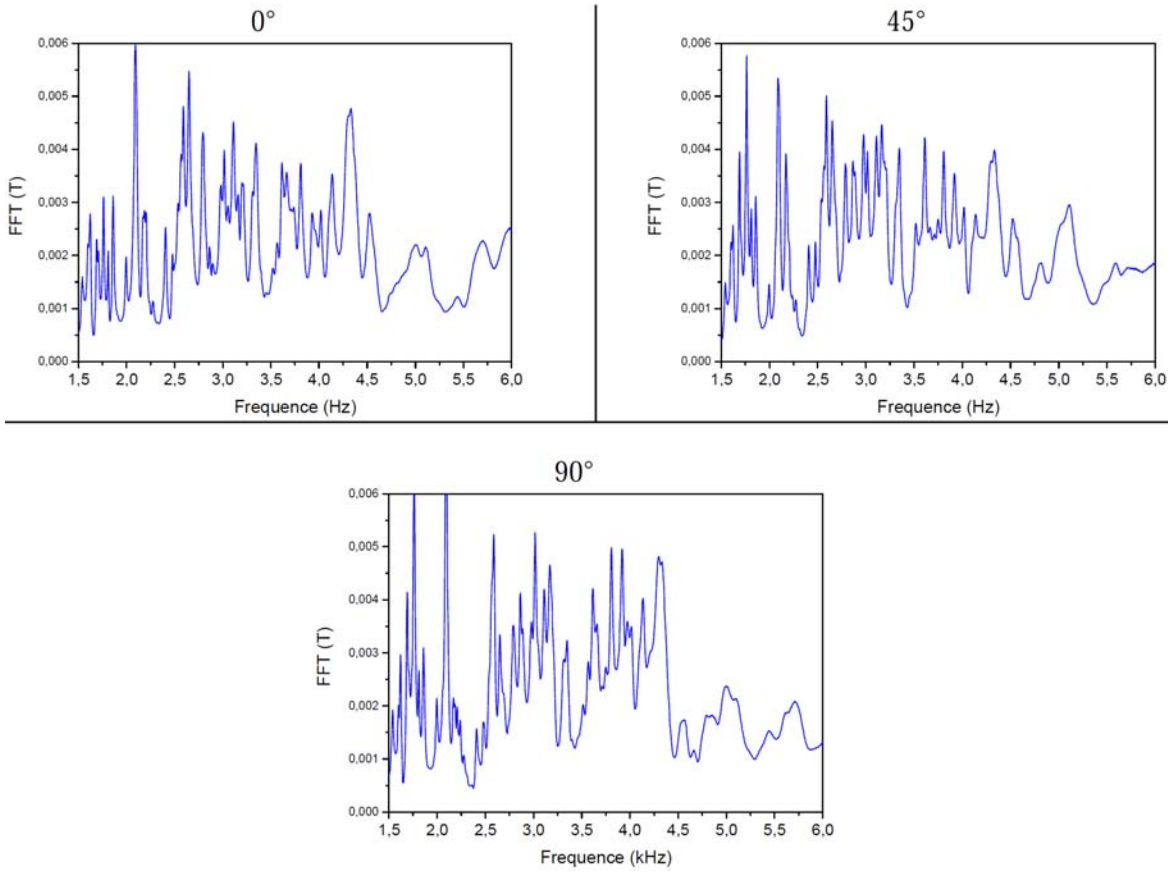


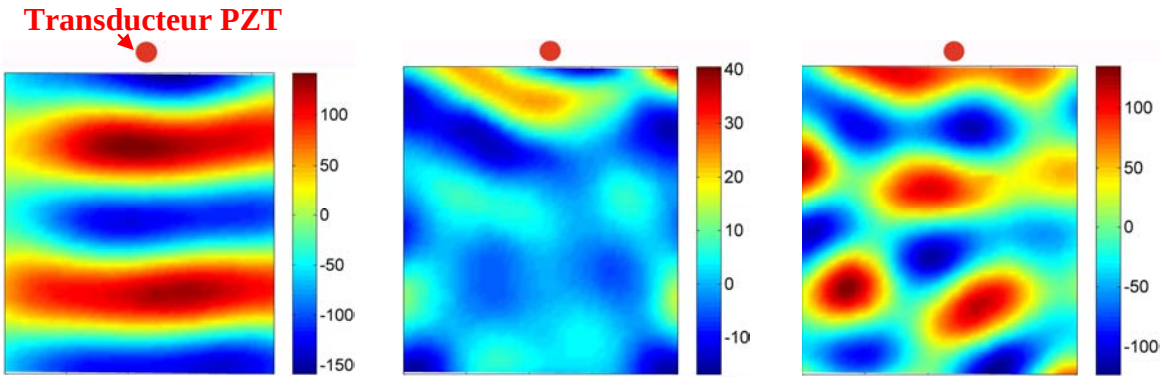
Figure 4.34 : Transformée de Fourier du signal mesuré suivant les trois directions mentionnées dans la figure 4.31 pour la structure 3

Les mesures par SLDV effectuées sur cette structure ne permettent pas de conclure quant à l'existence d'une bande interdite prédite théoriquement dans les calculs mentionnés dans la figure 4.28(c). Ceci est parfaitement compréhensible car la bande interdite observée à 5.6KHz a une largeur très faible pour être détectée par la technique de mesure. De plus, et comme nous venons de le mentionner, l'excitation au-delà de 4kHz est de qualité relativement limitée. La technique de caractérisation que nous avons utilisée touche à ses limites dans de telles situations. Quant à la deuxième bande interdite observée à 7.75kHz, le spectre d'excitation généré par le transducteur est limité à 6kHz, si bien qu'on ne pouvait pas sonder des fréquences supérieures.

Ces résultats très encourageants suivent les interprétations faites dans la première partie de ce chapitre puisque, plus l'épaisseur des cylindres est importante plus la localisation de la bande interdite est "repoussée" vers de plus basses fréquences.

Par ailleurs, l'effet viscoélastique du *Silicone rubber* n'a pas été pris en compte dans notre étude. En effet, nous n'avons pas pu explorer cet aspect faute de temps pour réaliser un modèle permettant de tenir compte des propriétés viscoélastiques du *Silicone rubber*.

Finalement, le SLDV nous a permis de visualiser la distribution du champ de déplacement hors du plan au niveau de la plaque pour différentes fréquences de mesure. Cet avantage a été exploité afin de mener une petite étude au voisinage de la bande interdite située à 2.27kHz pour l'échantillon 1 (ayant une épaisseur des cylindres de 5mm). Ainsi, la figure 4.35 présente la distribution de champ de déplacement hors du plan au niveau de la plaque de l'échantillon 1 pour les valeurs de fréquences 1.359kHz, 2.234kHz et 2.828kHz situées respectivement au-dessous, au milieu et au-dessus de la bande interdite.



1.359 kHz
Au-dessous de la bande interdite

2.234 kHz
Au milieu de la bande interdite

2.828 kHz
Au-dessus de la bande interdite

Figure 4.35 : Distribution du champ de déplacement dans la zone de la plaque occupée par les cylindres d'élastomère, de la structure 1 pour les valeurs de fréquences 1.359kHz, 2.234kHz et 2.828kHz. Le point rouge indique l'emplacement du transducteur PZT.

Nous pouvons ainsi constater une forte atténuation de l'onde élastique pour la fréquence 2.234kHz située au milieu de la bande interdite, les ondes ayant des fréquences hors de cette dernière se propagent dans toute la structure phononique sans atténuation significative.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons eu l'occasion d'étudier la possibilité d'ouverture de bandes interdites phononiques grâce au mécanisme de la résonance locale pour une structure en plaque sur laquelle est arrangé un réseau de cylindres. Nous nous sommes intéressés particulièrement aux interactions élastiques entre les modes de Lamb et les modes localisés dans deux types de cylindres : un cylindre simple constitué d'un élastomère très mou, et un autre composé d'élastomère surmonté d'une "casquette" en plomb. Nous sommes ainsi arrivés

à démontrer que pour obtenir une bande interdite à de très basses fréquences, là où les longueurs d'ondes sont largement plus grandes que la périodicité de la structure, nous avons besoin non seulement d'avoir des modes de résonance bien localisés, mais aussi de contrôler le couplage entre les modes de Lamb et ceux de la résonance locale, ceci au moyen d'un choix judicieux de leur nature et des paramètres géométriques des cylindres.

Afin d'y mettre en évidence la possibilité d'ouverture de bandes interdites, nous avons fabriqué et caractérisé nos structures. Par spectrométrie Brillouin et des mesures à ultrasons, nous avons pu déterminer les constantes élastiques effectives du *Silicone rubber* utilisé dans nos structures et ainsi parfaire la précision de nos simulations numériques. Par vibromètrie Laser, nous avons démontré l'ouverture de bandes interdites par le mécanisme de résonance locale et son comportement à des fréquences soniques (de l'ordre du kHz)[27].

Finalement, ces résultats nous ont incités à faire d'autres études relatives aux possibilités de confinement et de guidage des ondes élastiques dans ce type de structures à résonance locale. Ces études sont présentées au chapitre 5.

Références

[1] F. Everest, “The Master Handbook of Acoustics” (2001).

[2] W. H. Kung Lee, “International Handbook of Earthquake and Engineering Seismology”, Volume 1.

[3] Z. Liu, X. Zhang, Y Mao, Y.Y. Zhu, Z. Yang, C.T Chan, and P. Sheng, Science **289**, 1734 (2000)

[4] Z. Liu, C.T Chan, and P. Sheng, Phy. Rev. B **65**, 165116 (2002)

[5] X. Zhang, Z. Liu, and Y. Liu, Eur. Phys. J. B **42,** 477 (2004)

[6] Z. Liu, C.T Chan, and P. Sheng, Phys. Rev. B **71**, 014103 (2005)

[7] C. Goffaux, J. Sanchez-Dehesa, and A. L. Yeyati, Phys. Rev. Lett. **88**, 225502 (2002)

[8] C. Goffaux, and J. Sanchez-Dehesa, Phys. Rev. B **67**, 144301 (2003)

[9] H. Larabi, Y. Pennec, B. Djafari-Rouhani, and J. O. Vasseur, Phys. Rev. E **75**, 066601 (2007)

[10] G. Wang, X. Wen, J. Wen, L. Shao, and Y. Liu, Phys. Rev. Lett. **93**, 154302 (2004)

[11] M. Hirsekorn, P. P. Selsanto, N. K. Betra, and P. Matic, Ultrasonics **42**, 231 (2004)

[12] M. Hirsekorn, Appl. Phys. Lett. **84,** 17 (2004)

[13] J.C. Hsu, and T.T Wu, Appl. Phys. Lett. **90**, 201904 (2007)

[14] W. Xiao, G. W. Zeng, and Y. S. Chen, Appl. Acoust. **69**, 255-261 (2008)

[15] G. Wang, D. Yu, J. Wen, Y. Liu, and X Wen, Phys. Lett. A **327**, 512–521 (2004)

[16] T-T. Wu, Z-G. Huang, T-C. Tsai, and T-C. Wu, Appl. Phys. Lett. **93**, 111902 (2008)

[17] Y. Pennec, B. Djafari-Rouhani, H. Larabi, J.O. Vasseur, and A. C. Hladky-Hennion, Phys. Rev. B **78**, 104105 (2008)

[18] Z. Hou, W. Kuang, and Y. Liu, Phys. Lett. A **333**, 171 (2004)

[19] S.Yao, X. Zhou, and G Hu, N. J. Phys. **10,** 043020 (2008)

[20] P. Sheng, X. X. Zhang, Z. Liu, and C.T. Chan, Physica B **338**, 201 (2003)

[21] D. Royer, and E. Dieulesaint, "Ondes élastiques dans les solides" Tome 1 (1996)

[22] H. J. Qi, K. Joyce and M. C. Boyce, Rubber Chem. Technol. **76**, 419 (2003)

[23] Julien Eschbach, Thèse, "Étude de nanocomposites hybrides en vue d'application dans les microsystèmes: de la synthèse des nanoparticules à l'élaboration de films minces piézoélectriques." (2009)

[24] H. P. Kugler, R. G. Stacer, and C. Steimle, Rubber Chem. Technol. **63**, 473 (1990)

[25] http://www.polytec.com/us/solutions/vibration-measurement/basic-principles-of-vibrometry/

[26] M. Oudich, Y. Li, M. B. Assouar, and Z. Hou, New J. Phys. **12**, 083049 (2010)

[27] M. Oudich, M. Senesi, M. B. Assouar, M. Ruzzene, J-H. Sun, B. Vincent, Z. Hou, and T-T. Wu, Phys. Rev. B **84**, 165136 (2011)

Chapitre 5

Guidage des ondes de Lamb dans les CPRL : régimes sonique et hypersonique

Introduction

Dans le chapitre précédent, nous avons eu l'occasion de nous intéresser à un cristal phononique à résonance locale, permettant l'ouverture de bandes interdites à de basses fréquences dans les systèmes finis (plaques). La structure que nous avons étudiée offre plusieurs avantages dont la relative simplicité de fabrication que nous avons pu exploiter pour mener nos études expérimentales. Ces dernières ont été concluantes quant à la mise en évidence d'une bande interdite en basses fréquences sous forme d'une atténuation significative des modes antisymétriques de Lamb pour des longueurs d'onde supérieures à la périodicité de la structure. Cette étude s'inscrit ainsi parmi d'autres travaux de recherche[1-9] impliquant le mécanisme de résonance locale. Néanmoins, ces derniers se sont plus focalisés sur l'étude de ce mécanisme en lui-même sans qu'il y ait une extension aux phénomènes de confinement ou de guidage des ondes élastiques comme dans le cas du mécanisme de Bragg. En effet, pour ce dernier, plusieurs études se sont intéressées aux CP présentant des défauts[10-13] de structure et des guides d'ondes[14-20] de différents types. Nous pouvons citer par exemple les travaux théoriques et expérimentaux de Khelif *et al*[14] qui ont montré la possibilité de confinement et de guidage des ondes élastiques dans un CP à inclusions cylindriques présentant un défaut, linéaire ou coudé; de même que les fréquences des ondes transmises dans les guides se situent dans la gamme de fréquences de la bande interdite définie par le CP sans défaut. Pour des structures phononiques à base de résonateurs cylindriques sur une plaque, similaires géométriquement à la notre présentée dans le chapitre 4, Pennec *et al*[20] ont étudié le guidage des ondes de Lamb dans le régime de diffusion de Bragg ainsi que l'effet de la forme du guide d'ondes sur les modes guidés. Des études expérimentales menées par Wu *et al*[19] ont permis de mettre en évidence la transmission de l'onde acoustique dans un guide d'onde linéaire et coudé dans la gamme de fréquences de la bande interdite crée par leur CP.

Pour réaliser une étude de guidage en phononique, la première étape incontournable est la présence d'une bande interdite. Les travaux de guidage et de confinement d'ondes menés jusqu'ici se sont focalisés sur des bandes interdites phononiques créées par le mécanisme de Bragg. Or, puisque celles-ci apparaissent pour des ondes ayant des longueurs d'onde de l'ordre de la périodicité de la structure, les guides d'ondes ont généralement des largeurs du même ordre. Les CPRL présentent, quant à eux, des ouvertures de bandes interdites qui se situent cependant en basses fréquences. Les longueurs d'onde qui y sont associées sont très larges par rapport à la périodicité de la structure. Ainsi, il serait intéressant de mener une étude sur le

guidage dans ces structures et d'y étudier la possibilité de confinement et de transmission des ondes élastiques. Ceci fera en grande partie l'objet de ce chapitre.

S'inspirant de nombreux travaux sur le guidage et sur le confinement d'ondes cités ci-dessus[14-20], notre intérêt s'est porté sur le comportement d'un CPRL présentant un défaut de type guide d'ondes linéaire. L'objectif de ce chapitre est d'y étudier cette question. La première partie sera donc consacrée à la possibilité de confinement, de guidage et de transmission des ondes élastiques en régime sonique en utilisant notre système à résonateurs cylindriques présenté dans le chapitre 4. Les résultats théoriques issus de cette première étude, nous ont permis d'explorer la possibilité et l'intérêt des CPRL en hautes fréquences, et de voir si le mécanisme de résonance locale peut amener une "valeur ajoutée", notamment au niveau des applications, dans le régime hypersonique. Ainsi, la deuxième partie du chapitre s'intéressera à la possibilité de conception d'un CPRL opérant au-delà du GHz en adoptant une nouvelle structure périodique en plaque.

I. Transport et guidage dans le régime sonique

I.1. Confinement des ondes de Lamb dans une plaque phononique à RL (cas du cylindre simple)

Dans cette partie, nous nous intéressons au confinement et au guidage des ondes de Lamb dans le régime sonique. Nous considérons donc notre système déjà présenté dans le chapitre 4, à savoir, un CPRL constitué d'une plaque d'époxy sur laquelle sont arrangés périodiquement des cylindres d'élastomère suivant une symétrie carrée. La figure 5.1 suivante rappelle pour ce système à RL.

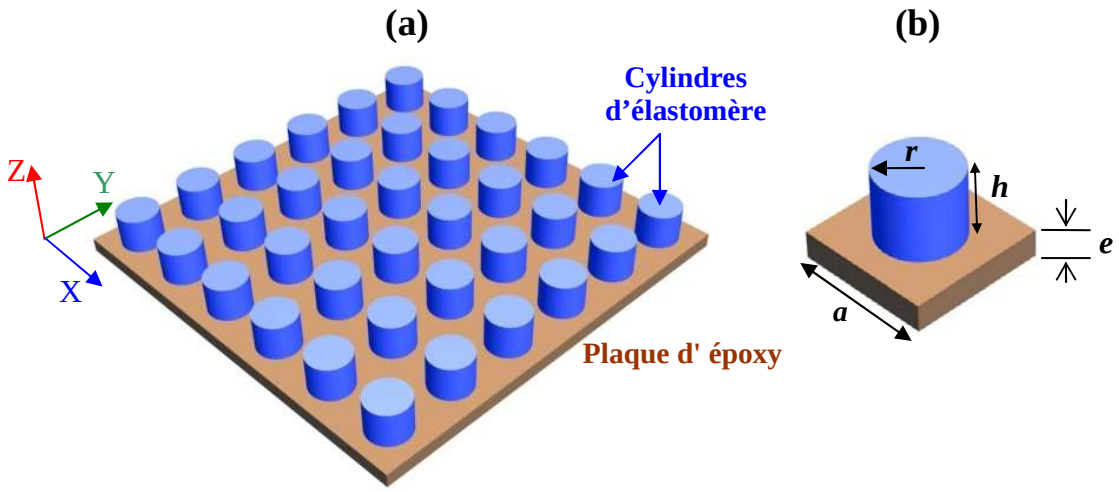


Figure 5.1 : (a) 2D CPRL composé de cylindres d'élastomère arrangés suivant une disposition carrée sur une plaque d'époxy. (b) Cellule élémentaire du CPRL

Dans toute cette étude, l'épaisseur de la plaque est fixée à e=0.05a. Nous nous intéresserons plus particulièrement à une structure ayant une hauteur des cylindres d'élastomère valant h=0.5a et un rayon de r=0.3a, a étant la périodicité de la structure. Les paramètres physiques (théoriques) adoptés sont les mêmes que ceux pris dans le chapitre précédent, à savoir :

	C_l (m/s)	C_t (m/s)	ρ (Kg/m^3)
Epoxy	2534	1157	1180
Elastomère	24	6	1300

Tableau 4.1 : Paramètres physiques pour les différents matériaux utilisés dans nos systèmes phononiques[5,8]

I.1.1. Présentation de la structure à défaut linéaire

La création d'un défaut linéaire (guide d'onde) dans les CP se fait généralement en enlevant une ou plusieurs rangées d'éléments de périodicité. Dans notre étude, nous allons étudier un guide d'onde linéaire construit en créant un espacement noté *Wg* entre deux rangées voisines de résonateurs à un endroit du CPRL. Notre intérêt se focalisera donc sur la propagation des ondes de Lamb dans la direction définie par ce guide (figure 5.2).

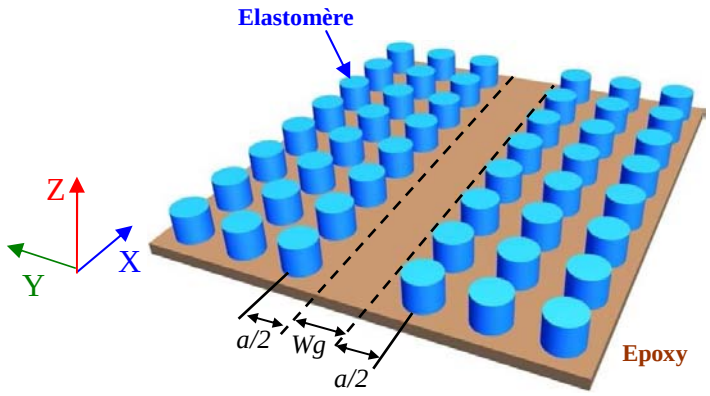


Figure 5.2 : Structure de guide linéaire étudié. La largeur du guide est notée *Wg* et est suivant la direction X du repère cartésien

L'étude que nous entamerons par la suite portera sur les modes guidés et leur nature, sur l'effet de la largeur du guide sur la structure de bandes, ainsi que sur le confinement de l'onde élastique. Mais avant cela, nous nous arrêterons sur le modèle théorique adopté pour simuler le comportement élastique de notre guide d'onde. Ce modèle permet d'accéder aux structures de bandes ainsi qu'à la distribution des champs de déplacement dans la structure.

I.1.2. Modèle théorique : technique de la "super cellule"

L'introduction du défaut linaire dans la direction X du CPRL **(**figure 5.2**)** supprime la périodicité de la structure. En effet, pour le modèle théorique, la structure garde sa périodicité dans la direction X alors qu'elle devient non périodique dans la direction Y. De ce fait, les conditions périodiques de Bloch ne peuvent plus être introduites suivant cette direction. Pour modéliser au mieux notre structure de guide d'onde, une nouvelle cellule unité appelée "super cellule" est définie. Cette dernière est constituée d'un élément du CP contenant le défaut avec plusieurs cellules élémentaires de part et d'autre de celui-ci **(**figure 5.3**)**. La technique de la "super cellule" a été utilisée auparavant pour l'étude des systèmes périodiques contenant des

défauts de structures, comme des cavités[10-13] ou des guides d'ondes[14-20]. La figure 5.3 décrit la manière avec laquelle est construite la "super cellule" à partir du CP à guide d'onde linéaire.

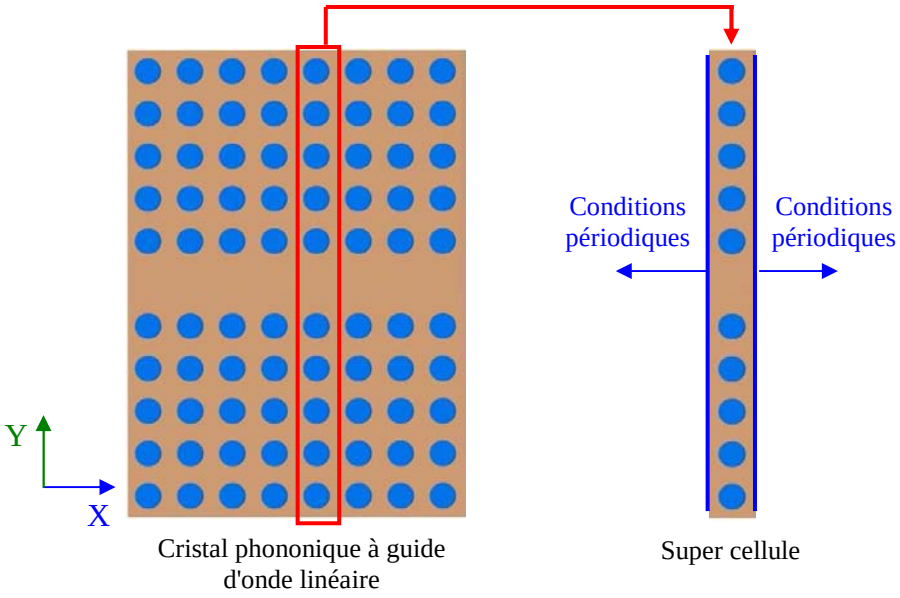


Figure 5.3: Technique de construction de la "super cellule"

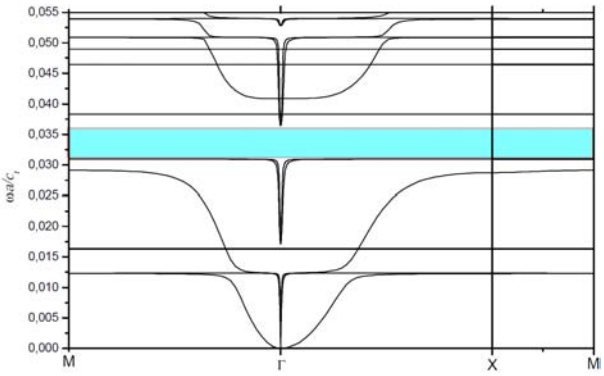
La super cellule est construite d'abord en respectant la périodicité du CP suivant la direction du guide (direction X), puis en introduisant les conditions périodiques de Bloch suivant la direction Y même si le CP n'est pas réellement périodique suivant celle-ci. Le guide d'onde phononique est ainsi considéré théoriquement périodique dans les deux directions de l'espace X et Y. Il faudra cependant un nombre suffisamment élevé de cellules unités du CP de part et d'autre du défaut afin que les guides d'ondes voisins ne puissent pas interagir entre eux. Dans l'exemple de notre CPRL, nous avons choisi de mettre cinq résonateurs (cellule unité) de chaque coté du défaut suivant la direction Y comme le montre la figure 5.3**.**

Notre nouveau domaine de calcul étant ainsi défini, nous pouvons donc procéder à la résolution des équations de mouvement sans oublier évidemment les conditions aux limites libres sur les surfaces en contact libre dans le CP.

I.1.3. Résultats et discussion

La première étape consiste à rechercher la bande interdite en faisant un calcul de structure de bandes dans la première zone irréductible de Brillouin pour le CPRL sans défaut. La figure 5.4 rappelle le calcul de structure de bandes pour une cellule unité ayant une hauteur du cylindre d'élastomère h=0.5a et un rayon r=0.3a, que nous avons réalisé et présenté dans

le chapitre 4. Nous pouvons ainsi remarquer l'existence d'une bande interdite complète située entre 0.0315 et 0.365 en fréquence normalisée $\omega a/C_t$, C_t étant la vitesse de propagation transverse de l'onde dans l'époxy.



La figure 5.4 : Structure de bandes pour une cellule unité de la figure 5.1 ayant pour paramètres géométriques *h*=0.5*a*, *r*=0.3 et *e*=0.05*a*.

Comme mentionné auparavant, nous nous intéressons à la propagation des ondes de Lamb dans la direction du guide. De ce fait, nous nous focaliserons uniquement sur la direction ΓX de la première zone irréductible de Brillouin dans les simulations des structures de bandes.

La première simulation numérique de la structure de bande dans cette direction concerne la "super cellule" sans défaut, c'est-à-dire avec 10 résonateurs cylindriques et donc avec une largeur de guide nulle *Wg*=0. La figure 5.5 représente une comparaison entre la structure de bandes d'une cellule unité et celle de la "super cellule" sans défaut dans la direction ΓX.

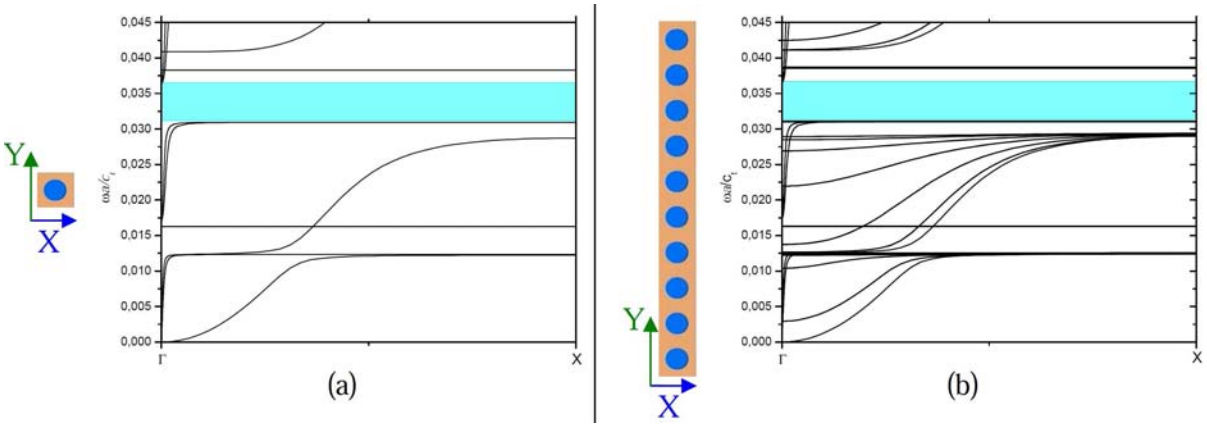


Figure 5.5 : Structures de bandes dans la direction ΓX du CPRL présenté dans la figure 5.1 : (a) pour une cellule unité, (b) pour une "super cellule".

Nous pouvons ainsi remarquer que dans le cas de la "super cellule", la bande interdite existe toujours dans la même gamme de fréquences, ce qui est attendu. Par ailleurs, d'autres modes apparaissent dans la structure de bande associée à la "super cellule" à cause du phénomène de repliement (*Folding*) des courbes de dispersion à la limite de la première zone de Brillouin.

I.1.3.1. Structures de bandes et modes guidés

Au niveau de la gamme de fréquences de la bande interdite créée par le mécanisme de résonance locale, nous savons que les longueurs d'ondes sont très larges par rapport à la périodicité du CP. Compte tenu de ce fait, nous avons commencé avec un premier calcul de structure de bandes pour une largeur *Wg* valant trois fois la périodicité de la structure, ce qui revient à supprimer trois rangées linéaires de cylindres d'élastomère suivant la direction X. La figure 5.6 montre une comparaison entre la structure de bandes du guide ayant la largeur *Wg*=3*a* et celle d'une "super cellule" sans défaut.

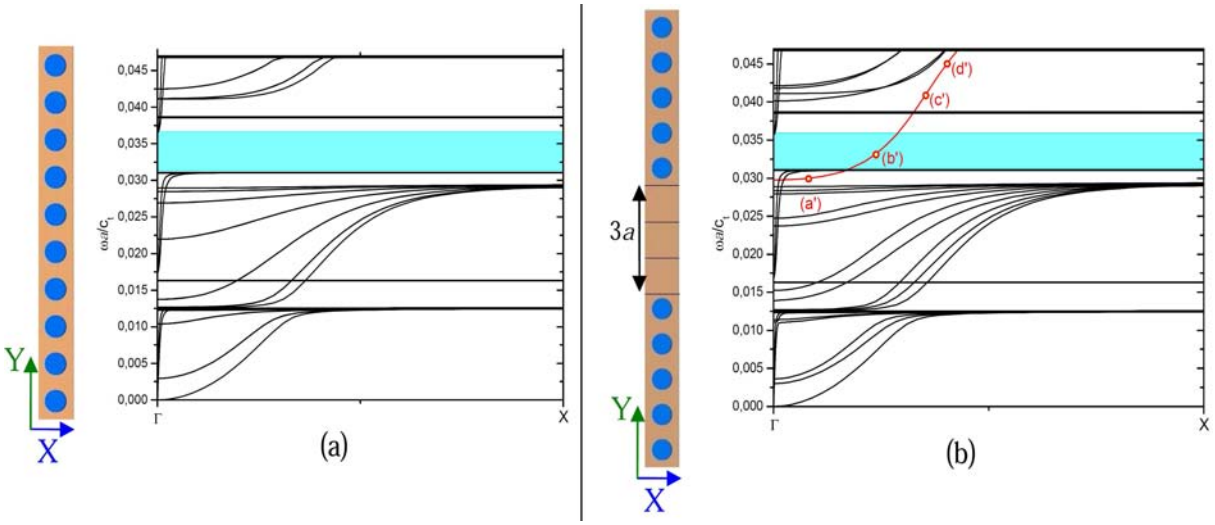


Figure 5.6: (a) Structure de bandes d'une "super cellule" sans défaut. (b) Structure de bande d'une "super cellule" avec un guide de largeur *Wg*=3*a*.

La première constatation faite, partant de la structure de bandes du guide d'onde de cette figure, concerne la présence d'un seul mode guidé (tracé en couleur rouge) qui ferme complètement la bande interdite et qui est donc causé par le défaut linéaire introduit dans le CP. Ce résultat est intéressant car il est différent de ce qui a pu être observé dans les études s'intéressant aux guides d'ondes exploitant les bandes interdites créées par le mécanisme de diffusion de Bragg. En effet, dans ce dernier cas, le défaut linéaire introduit dans le CP

provoque l'apparition de plusieurs modes dans la bande interdite[17, 18]. Par contre, dans notre cas, uniquement un seul mode guidé apparaît dans la bande interdite, ce qui nous conduit directement à une éventuelle adaptation de ce système à des fins de filtrage et ou de démultiplexage.

Afin d'étudier plus en détail la nature du mode guidé de la figure 5.6(b), nous avons effectué une analyse de la distribution des champs de déplacement au niveau de la super cellule.

I.1.3.2. Champs de déplacement

La figure 5.7 illustre la norme du vecteur champ de déplacement $u = \sqrt{U_x^2 + U_y^2 + U_z^2}$ calculée aux points (a'), (b'), (c') et (d') du mode guidé présenté dans la figure 5.6 (b), qui correspondent à différentes valeurs du vecteur d'onde.

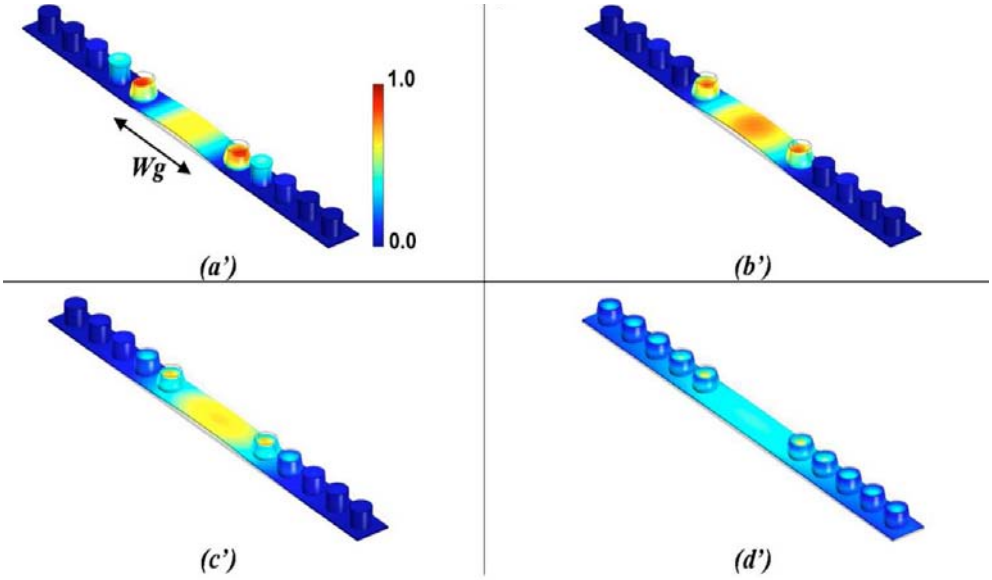


Figure 5.7: Distribution du champ de déplacement aux quatre points (a'), (b'), (c') et (d')

En analysant la distribution du champ de déplacement du mode qui ferme la bande interdite (figure 5.6 (b)), nous constatons que celui-ci correspond bien à un mode guidé dû à l'espacement linéaire introduit dans le CPRL. En effet, au point (a') (figure 5.6 (b)), qui est proche de la bande interdite, nous pouvons observer dans la figure 5.7(a') que l'énergie élastique est confinée au niveau du défaut, mais avec une propagation de l'onde dans les deux premiers résonateurs contigus au guide. Ceci est dû au fait que ce point se situe hors de la bande interdite mais aussi suffisamment proche de celle-ci pour avoir un confinement

significatif. En revanche, et concernant le point (b'), situé au milieu de la bande interdite (figure 5.6 (b)), nous constatons un confinement beaucoup plus prononcé de l'onde dans le guide avec une propagation uniquement au niveau des premiers cylindres d'élastomère (Figure 5.7 (b')). Finalement, la figure 5.7 nous montre aussi la distribution du champ de déplacement relative aux deux points (c') et (d'). Ces deux derniers nous montrent clairement que le mode guidé devient moins confiné dans le guide lorsque l'on s'éloigne de la bande interdite. Ainsi, au niveau du point (d') qui se situe bien loin de cette dernière, le confinement de l'énergie élastique disparaît presque totalement, et l'onde se propage complètement dans toute la "super cellule".

Afin de mettre en évidence la nature vibratoire du mode guidé, nous présentons dans la figure 5.8 les trois composantes du champ de déplacement *Ux*, *Uy* et *Uz* pour les quatre points (a'), (b'), (c') et (d') présentés dans la figures 5.6 (b).

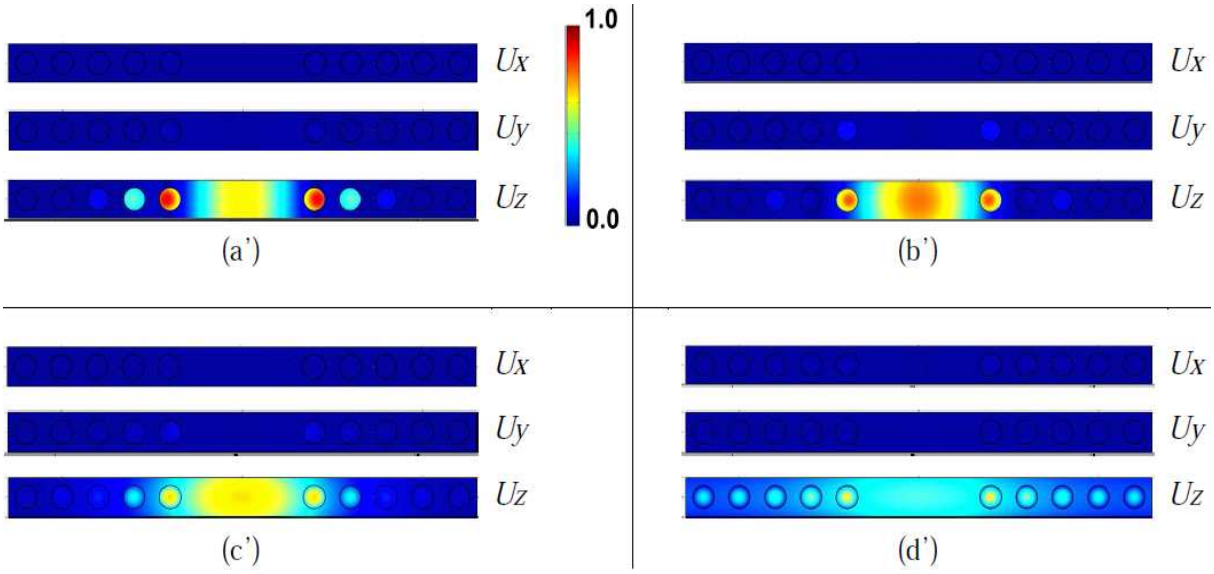


Figure 5.8: Composantes du champ de déplacement *Ux*, *Uy* et *Uz* pour les quatre points (a'), (b'), (c') et (d') mentionnés dans la figure 5.6(b).

Il ressort de cette dernière figure que le mode guidé a une composante de champ *Uz* dominante alors qu'aucune distribution du champ de déplacement élastique n'est enregistrée pour les composantes *Ux* et *Uy*; ceci montre que nous sommes en présence d'un mode hors du plan "*out of plane*" qui correspond bien au mode antisymétrique A_0 des ondes de Lamb. En effet, à ces basses fréquences, le mode A_0 a une longueur d'onde plus faible par rapport à ceux des modes transverse horizontal SH et symétrique S_0. A partir d'un calcul de la structure de bandes de la plaque d'époxy seule (d'épaisseur e=0.05a) pour la détermination des modes de

Lamb, nous avons pu estimer qu'à la fréquence normalisée 0.033 $\omega a/C_t$ dans la bande interdite, les longueurs d'ondes pour les modes A_0, SH et S_0 valent respectivement 5.56*a*, 190*a* et 340*a*. Ainsi, le mode antisymétrique qui a une longueur d'onde faible, a pu être confiné sur un peu plus de la moitié de sa longueur d'onde au niveau de la largeur du guide qui vaut *Wg*=3*a* dans notre cas. Par contre, les deux autres modes SH et S_0, qui ont des longueurs d'ondes largement grandes par rapport à la largeur du guide, n'ont pas pu être confinés.

I.1.4. Effet de la largeur du guide d'ondes

La possibilité de confinement des ondes de Lamb a aussi été étudiée en fonction de la largeur du guide. Ainsi, des calculs de structures de bandes ont été effectuées pour les valeurs de *Wg* suivantes : 0.5*a*, 1*a*, 1.5*a*, 2*a* et 2.5*a*. De plus, nous avons représenté la distribution du champ de déplacement du mode de défaut pour une valeur fixe du vecteur d'onde. L'objectif est d'explorer le comportement élastique du mode guidé, et surtout le niveau de confinement de celui-ci en fonction de la largeur du guide. La figure 5.9 présente les résultats des simulations effectuées. Cette figure nous amène à constater qu'un confinement significatif de l'onde de Lamb est atteint à partir d'une largeur de guide *Wg*=2.5*a*. Le mode de défaut s'introduit ainsi progressivement dans la bande interdite et en réduit la largeur pour *Wg*=2*a* jusqu'à la fermer quasiment pour *Wg*=2.5*a*.

Cette étude prouve la possibilité de confinement et de guidage des ondes élastiques dans un CPRL en plaque, et plus précisément du mode antisymétrique A_0 qui a une longueur d'onde plus faible par rapport aux modes SH et S_0. Pour compléter l'étude, il serait intéressant de pouvoir déterminer la transmission de ce mode A_0 à travers ce type de guide d'onde dans notre structure.

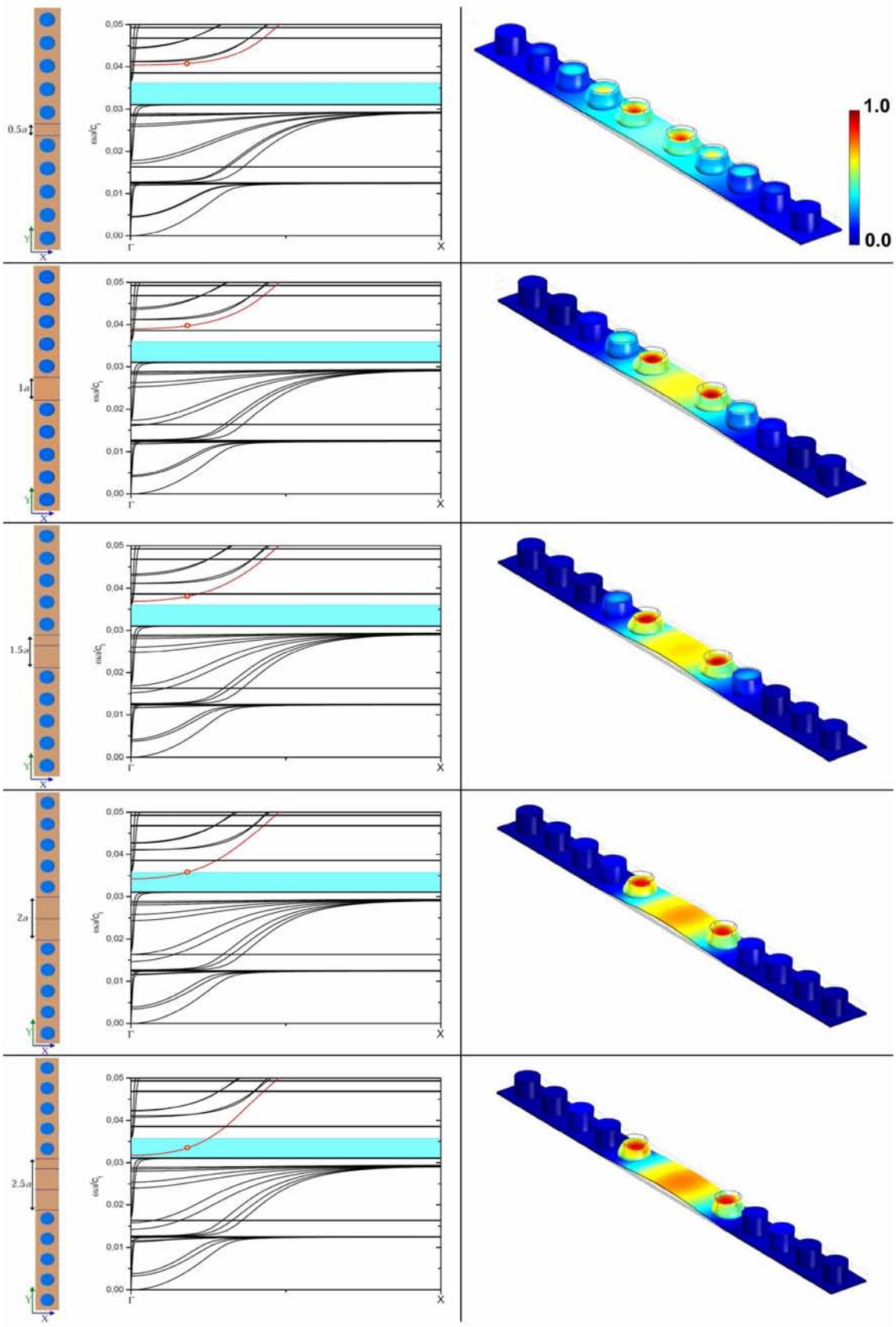


Figure 5.9: Structures de bandes en fonction de la largeur du guide *Wg*. La distribution du champ de déplacement du mode guidé dans la super cellule a été présentée pour la valeur $k_x a/2\pi$=0.0909 repérée par un cercle dans ce mode.

I.2. Transmission

I.2.1. Modèle de calcul

Nous avons donc opté pour une étude de la transmission de l'onde à travers le guide d'onde du CPRL. Pour ce faire, nous avons considéré le schéma représenté dans la figure suivante pour le calcul du coefficient de transmission.

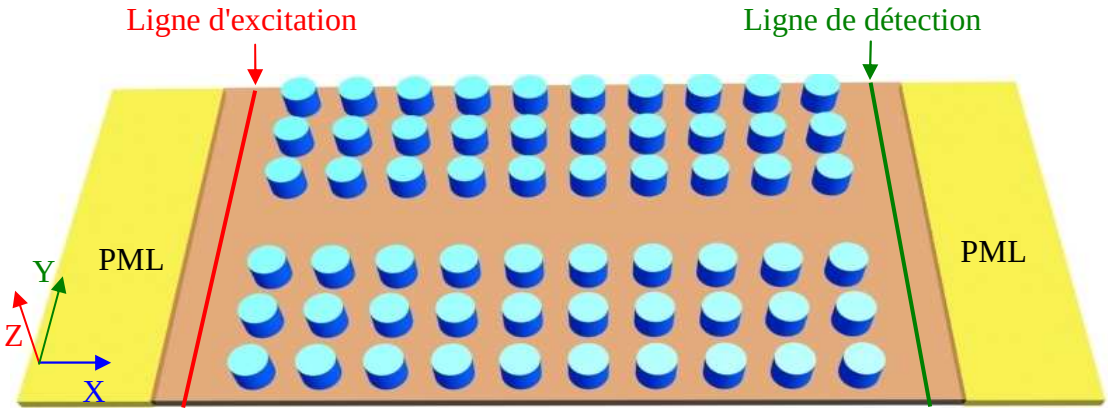


Figure 5.10: Modèle de calcul du coefficient de transmission pour le guide d'onde

Comme l'illustre la figure 5.10, nous avons considéré une structure avec dix rangées de cylindres d'élastomère contenant un guide de largeur $Wg=3a$. Nous avons ensuite ajouté des domaines d'absorption (PML dans notre cas) de l'onde élastique de part et d'autre de la structure afin d'empêcher l'onde de se réfléchir sur les frontières de la plaque d'époxy (Voir section II.3.3.1 du chapitre 2 sur la PML). Les conditions périodiques ont été ajoutées aux surfaces latérales perpendiculaires à la direction Y. Puisque nous nous intéressons à la propagation d'ondes dans la direction du guide (direction X), une source d'excitation est mise en place à l'entrée du guide d'onde sous forme d'une force appliquée suivant une ligne perpendiculaire au guide (ligne rouge dans la figure 5.10). A partir de cette source, l'onde peut être générée et ainsi se propager dans le CP avant d'être complètement absorbée par le domaine PML. Le coefficient de transmission est obtenu en enregistrant les valeurs du champ de déplacement au niveau de la ligne de détection (figure 5.10).

Une des conditions nécessaires pour l'absorption de l'onde par le domaine PML réside dans le fait que les dimensions de ce dernier doivent être plus grandes que les longueurs d'ondes mises en jeu. Or, aux fréquences auxquelles nous travaillons, les longueurs d'onde des modes SH et S_0 sont très grandes (plus d'une centaine de fois la périodicité du CP) alors que le mode A_0 présente des longueurs d'onde bien plus faibles. A titre d'exemple, et comme nous

l'avions mentionné auparavant, à la fréquence normalisée de la bande interdite 0.033ωa/c_t, les longueurs d'ondes des modes A_0, SH et S_0 valent respectivement 5.56*a*, 190*a* et 340*a*. Par conséquent, le domaine PML doit avoir des dimensions au moins égales à 340*a* si nous voulons observer la bande interdite complète au niveau du calcul du coefficient de transmission pour tous les modes de Lamb! Ceci n'est pas envisageable pour le modèle numérique. En revanche, le mode guidé observé auparavant dans notre structure à guide linéaire est de nature antisymétrique A_0. De ce fait, notre étude s'est focalisée uniquement sur la transmission de ces modes A_0 en adoptant un domaine PML de longueur 10*a* avec une excitation de modes antisymétriques en appliquant une force perpendiculaire à la surface de la plaque au niveau de la ligne d'excitation (figure 5.10). Dans ce qui suivra, nous nous intéresserons plus particulièrement à ces modes qui ont une composante du champ de déplacement prédominante suivant la direction perpendiculaire à la plaque (*Uz*).

I.2.2. Transmission dans le guide d'onde

La figure 5.11 illustre les résultats de calcul du coefficient de transmission pour une structure sans défaut et une autre ayant un guide de largeur *Wg*=3*a*. Les structures de bandes correspondantes, déjà présentées dans la figure 5.6**,** sont aussi représentées.

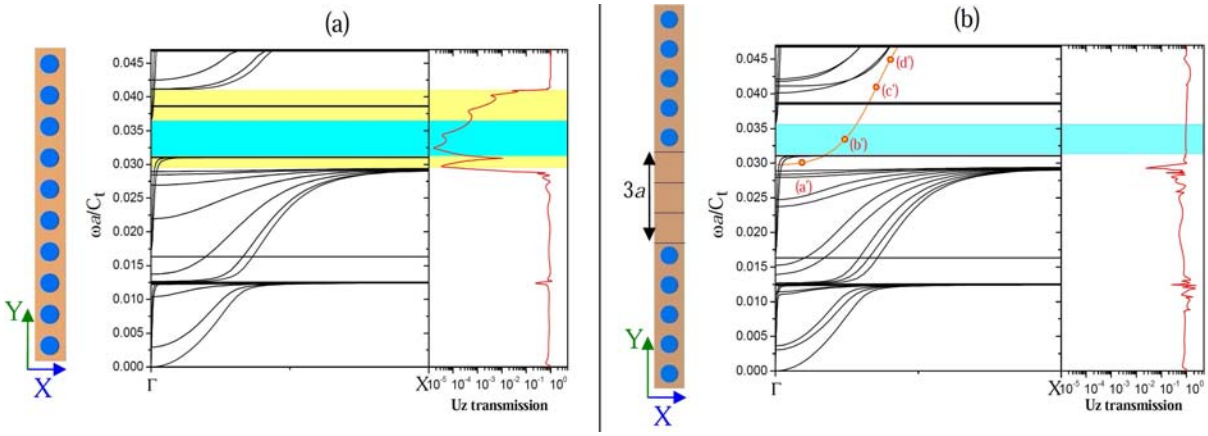


Figure 5.11: Structures de bandes et coefficient de transmission du système sans défaut (a) et avec défaut (b). La bande interdite complète est marquée en cyan, alors que la bande interdite en jaune concerne les modes ayant une composante *Uz* dominante.

Nous pouvons aisément constater la concordance entre le résultat du coefficient de transmission et la structure de bandes dans la direction ΓX pour le CPRL sans défaut (Figure 5.11(a)). En effet, aucune transmission de l'onde acoustique n'est enregistrée au niveau de la bande interdite. De plus, la bande interdite correspondant aux modes ayant une composante *Uz* dominante (marquée en jaune), est bien repérable au niveau de la courbe de transmission.

En revanche, le mode de défaut qui ferme la bande interdite pour la structure du guide induit la non-atténuation de l'onde élastique comme le montre le coefficient de transmission (Figure 5.11(b)). Une transmission de l'onde élastique a pu ainsi avoir lieu grâce au guide. La figure 5.12 montre la distribution du champ de déplacement pour le mode guidé. Elle permet de se rendre compte du comportement élastique du guide d'onde au niveau de la bande interdite.

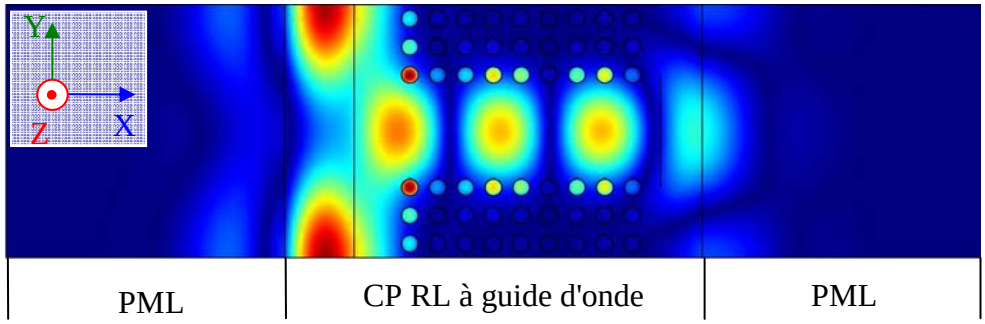


Figure 5.12: Confinement et guidage du mode guidé à travers le guide d'onde de largeur *Wg*=3*a* pour la fréquence normalisée 0.035ω*a*/C_t.

Nous pouvons ainsi constater que le mode défaut antisymétrique est confiné et transmis depuis la source à travers le guide linéaire de largeur *Wg*=3*a* avec une propagation restreinte uniquement aux premiers résonateurs voisins. Il est à noter que dans la figure 5.12**,** nous avons enregistré le module du champ de déplacement $u = \sqrt{U_x^2 + U_y^2 + U_z^2}$.

I.3. Confinement et guidage dans un guide coudé

Nous nous sommes intéressés aussi à un système de guide d'ondes coudé constitué de cinq guides linéaires connectés en formant quatre coudes à 90°. La figure 5.13 présente le schéma du guide ainsi que le champ de déplacement illustrant la propagation et la transmission du mode antisymétrique à travers ce guide dans la gamme de fréquences de la bande interdite. Pour cette simulation, la fréquence normalisée $\omega a/C_t$ est égale à 0.035.

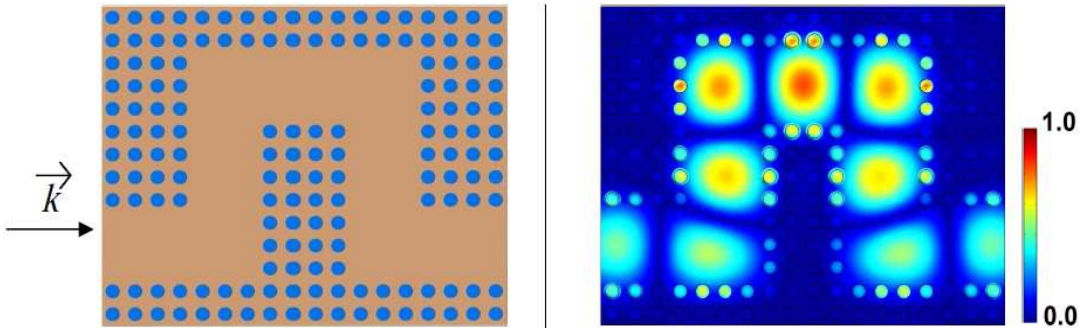


Figure 5.13: Guidage du mode défaut à travers un guide d'onde coudé de largeur *Wg*=3*a* pour une fréquence normalisée de 0.035ω*a*/C_t située à l'intérieur de la bande interdite

Une fois de plus, l'onde élastique est confinée et guidée le long du guide en changeant de direction de propagation au niveau des coudes. Nous pouvons aussi remarquer que la longueur d'onde de ce mode confiné est supérieure à la périodicité du CPRL et que ledit mode ne peut pas se propager au-delà de la première rangée des cylindres voisinant l'ensemble du guide.

I.4. Conclusion

Dans cette étude, nous avons pu examiner le guidage des ondes de Lamb, et plus particulièrement du mode antisymétrique dans un CPRL en plaque. Cette étude a permis de mettre en évidence un résultat original pour le guidage des ondes élastiques concernant la possibilité de confinement, de guidage et de transmission d'un seul mode de défaut[24], ce qui n'est pas le cas des systèmes exploitant les bandes interdites créées par le mécanisme de Bragg, où plusieurs modes de défaut apparaissent dans la bande interdite[15-20]. Ainsi, le guidage utilisant les bandes interdites basées sur la résonance locale peuvent ouvrir des possibilités d'application pour la fabrication de dispositifs pour le filtrage ou le démultiplexage, par exemple, si nous sommes dans le régime fréquentiel adéquat. Vu ces résultats particuliers qu'offre cette structure phononique à RL dans la gamme des fréquences soniques, nous nous sommes demandés si de telles propriétés peuvaient être reproduites en régime hypersonique. L'objet de la deuxième partie de ce chapitre tentera donc de répondre à cette question.

II. Transport et guidage dans le régime hypersonique

L'étude que nous avons entamée dans la section I montre qu'une structure phononique à ouverture de bande interdites par résonance locale peut offrir la possibilité de créer des guides d'ondes sélectifs pour les modes qui s'y propagent. Cette propriété très particulière permet d'ouvrir encore le champ d'applications des CPRL vers la conception de démultiplexeurs par exemple. Cependant, l'exemple que nous avons étudié concerne le régime sonique, ce qui n'est pas très adapté aux applications liées aux dispositifs miniaturisés de filtrage et de démultiplexage qui fonctionnent généralement en hautes fréquences (centaines de MHz jusqu'à quelques GHz). Il serait donc plus intéressant de pouvoir étudier cette question dans le régime hypersonique, autrement dit, étudier la "valeur ajoutée" du mécanisme de résonance locale dans ce régime, notamment pour les guides d'ondes. Pour ce faire, de nouvelles structures phononiques en plaque doivent être conçues et étudiées.

II.1. Modèle de la structure étudiée

Afin qu'un CP puisse donner lieu à la création de bandes interdites par le mécanisme de résonance locale dans le régime hypersonique, il doit tout d'abord être conçu à partir de matériaux à contraste élastique très important, c'est-à-dire d'un support largement plus dur que les résonateurs. Ensuite, il faudra que ce matériau support ait une vitesse d'ondes élastiques très élevée pour pouvoir atteindre le régime fréquentiel ciblé. Nous avons donc choisi d'étudier un CP constitué d'un support (plaque) en diamant sur lequel sont déposés périodiquement des cylindres en aluminium constituant les résonateurs de notre structure. De ce fait, grâce au contraste élastique important entre l'aluminium et le diamant, nous devrions a priori constater la manifestation du phénomène de résonance locale dans notre cristal. La structure que nous allons étudier est représentée dans la figure 5.14.

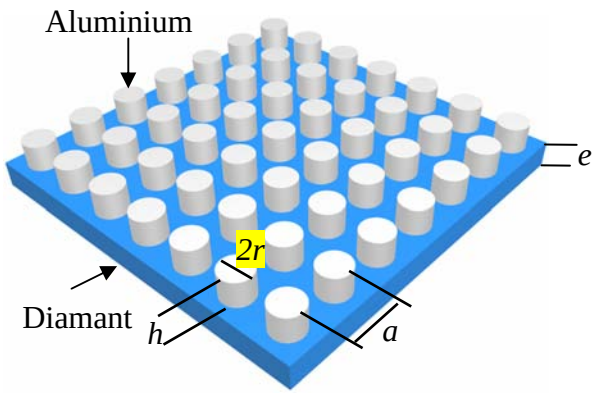


Figure 5.14 : CP constitué d'une plaque en diamant sur laquelle sont déposés des cylindres en aluminium.

Le tableau 5.2 ci-dessous indique les propriétés élastiques des deux matériaux en question[27-28], adoptés pour le calcul de la structure de bandes de notre PC.

	$C_{11}(N/m^2)$	$C_{12}(N/m^2)$	$C_{44}(N/m^2)$	$\rho(kg/m^3)$
Aluminium	10.73×10^{10}	6.08×10^{10}	2.83×10^{10}	2702
Diamant	107.59×10^{10}	12.49×10^{10}	57.58×10^{10}	3512

Tableau 5.2: Constantes élastiques du diamant et de l'aluminium considérés cubiques et utilisés dans les simulations numériques

II.2. Résultats et discussion

II.2.1. Préambule

Le calcul de la structure de bandes a été effectué pour différentes valeurs du rayon et de la hauteur des cylindres. L'épaisseur de la plaque en diamant sera fixée à e=0.1a tout au long de cette étude. La figure 5.15 présente la structure de bandes calculée avec les paramètres géométriques suivants : r=h=0.4a.

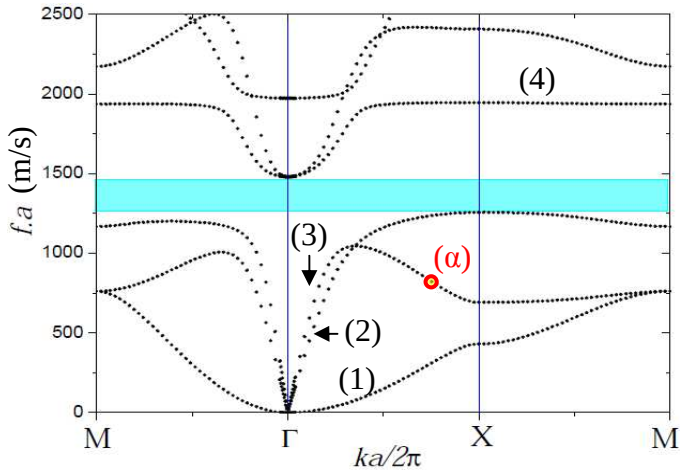


Figure 5.15: Structure de bandes associée au CP de la figure 5.14, avec les paramètres géométriques suivants : r=0.4a, h=0.4a et e=0.1a.

La bande interdite complète s'étend de 1250 à 1500 en fréquence normalisée $f.a$. Si l'on considère les vitesses de propagation des ondes dans le diamant, à savoir C_t=5963m/s et C_l=17503m/s, nous constatons que la bande interdite s'ouvre pour des longueurs d'onde qui valent au moins 4 fois la périodicité du PC pour les ondes transverses, et 10 fois cette périodicité pour les ondes longitudinales. Ceci montre que le mécanisme responsable de l'existence de la bande interdite n'est pas lié à la diffusion de Bragg.

Par ailleurs, cette structure de bandes n'est pas totalement semblable à celles obtenues dans les études menées en littérature[1-9] sur les CPRL. En effet, dans ce dernier cas, le mécanisme du couplage entre les modes au moyen de la résonance locale se traduit par la présence de modes plats, et donc l'annulation de leur vitesse de groupe lorsque l'on s'éloigne du centre de la première zone de Brillouin, ce qui traduit le caractère vibratoire très localisé des modes en question. Ce comportement n'est observé que pour le mode (4) dans la structure de bande de la figure 5.15. La distribution de son champ de déplacement illustre bien son comportement extrêmement localisé pour des valeurs du vecteur d'onde loin du centre Γ de la première zone de Brillouin (figure 5.16).

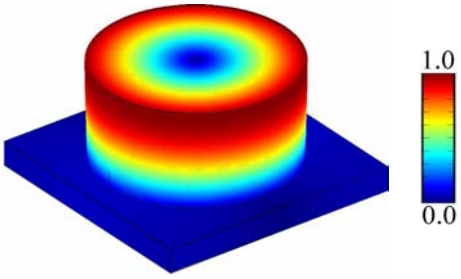


Figure 5.16 : Distribution du champ de déplacement du mode (4) de la figure 5.15 pour les valeurs $k_x a/2\pi = 0{,}5$ et $k_y=0$ des composantes du vecteur d'onde.

Hormis le mode (4), les autres modes de la structure de bandes ne sont pas de nature localisée. D'un autre côté, nous pouvons facilement identifier les modes (1), (2) et (3) dans la figure 5.15, qui correspondent respectivement aux modes antisymétrique (A_0), transverse horizontal (SH) et symétrique (S_0) au voisinage de du centre Γ de la zone de Brillouin. Nous constatons que certains de ces modes subissent une courbure (*bending*) loin du point Γ, jusqu'à même avoir une pente négative pour le mode (3) au niveau de la direction ΓX. Cette courbure des modes à permis l'ouverture de la bande interdite observée.

Afin de mieux comprendre l'origine de l'ouverture de cette bande interdite, nous avons étudié le comportement des courbes de dispersion en fonction des paramètres géométriques des résonateurs cylindriques.

II.2.2. Effet des paramètres géométriques sur la bande interdite

La figure 5.17 présente les structures de bandes de notre CP pour différentes valeurs de hauteur des cylindres d'aluminium. Nous pouvons constater que l'augmentation de cette hauteur de h=0.2a à h=0.4a, permet l'ouverture d'une bande interdite entre les troisième et quatrième branches; ceci est dû à l'aplatissement de la branche notée (c) dans la structure de bandes correspondant à h=0.2a, dont la pente s'affaiblit avec la hauteur h des cylindres. En même temps, l'ensemble des courbes de dispersions se déplace vers les basses fréquences avec l'augmentation de la hauteur h, ce qui réduit la largeur de la bande interdite pour h=0.5a, jusqu'à sa fermeture à h=0.6a. Pour ce dernier cas, nous pouvons observer l'apparition d'une nouvelle bande interdite, entre les septième et huitième branches.

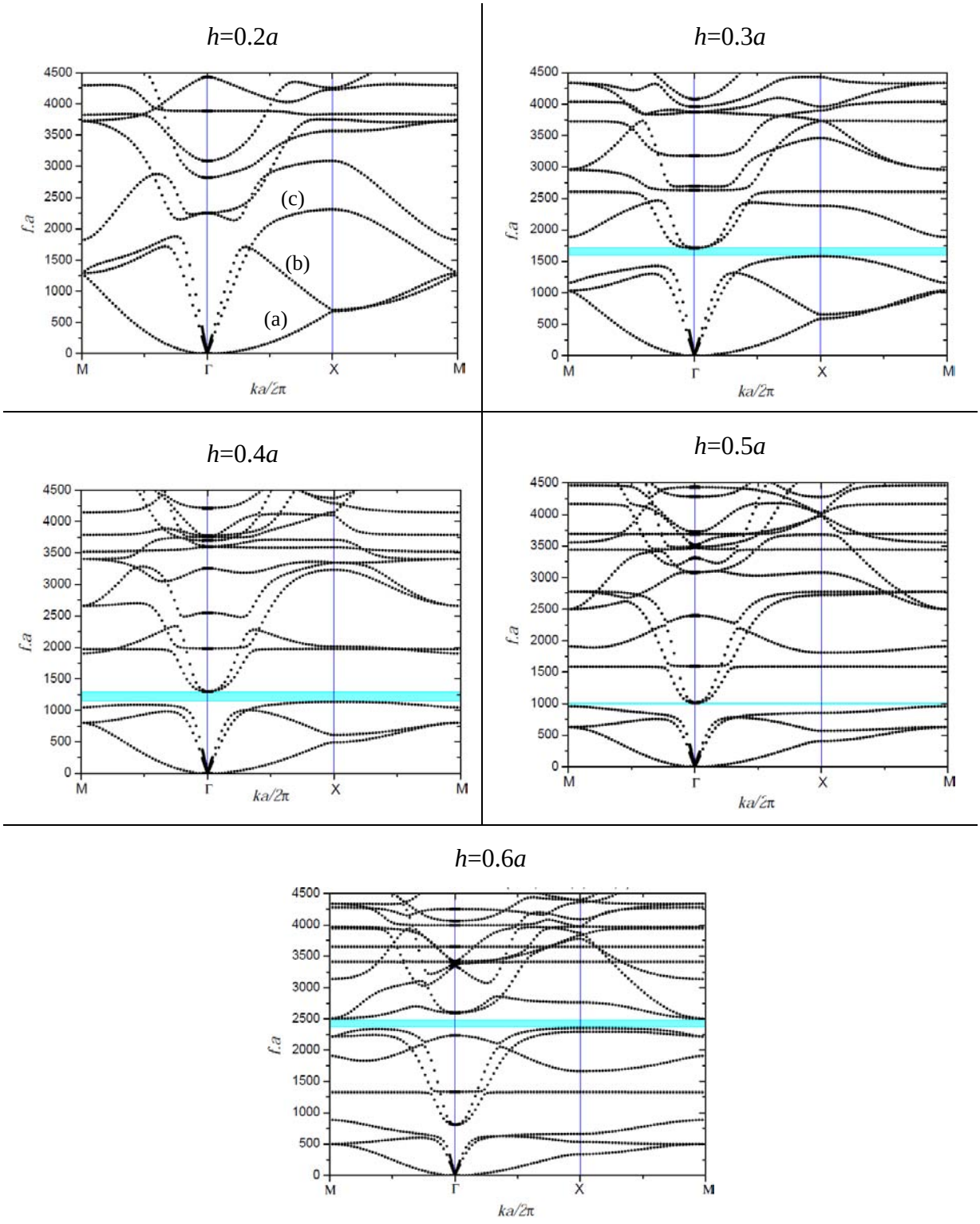


Figure 5.17 : Structures de bandes du CP présenté à la figure 5.14, pour différentes valeurs de la hauteur des cylindres *h*=0.2*a*, 0.3*a*, 0.4*a* 0.5*a* et 0.6*a*. Le rayon des cylindres ainsi que l'épaisseur de la plaque sont respectivement fixés à 0.3*a* et 0.1*a*.

La figure 5.18 présente l'évolution de la structure de bandes en fonction du rayon des cylindres.

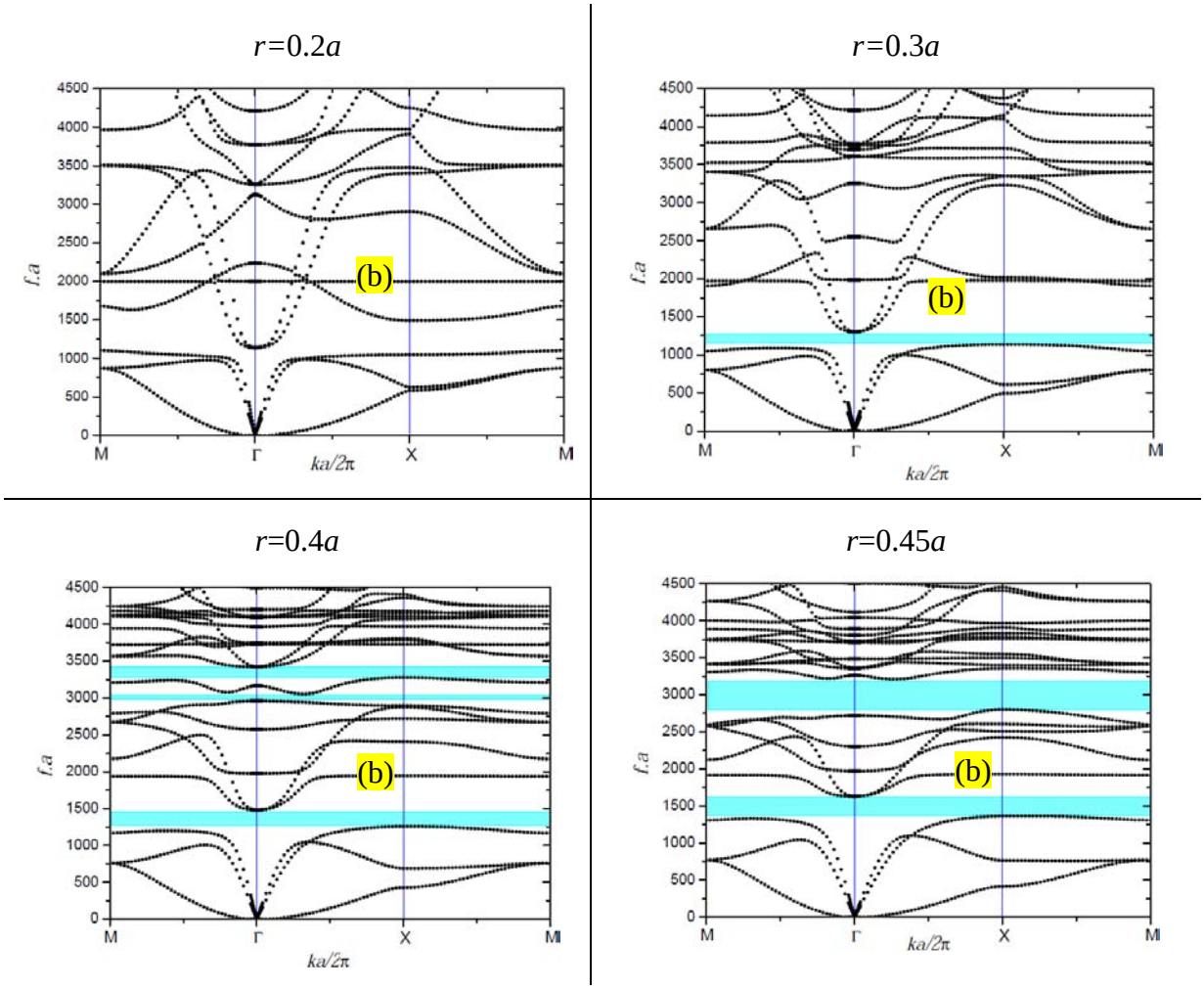


Figure 5.18 : Evolution des bandes interdites en fonction du rayon des cylindres. La hauteur de ces derniers est fixée à *h*=0.4*a* et l'épaisseur de la plaque à *e*=0.1*a*.

En augmentant le rayon des cylindres, l'interaction entre ces derniers et la plaque devient plus importante, et par conséquent les bandes interdites s'ouvrent. A partir de la figure 5.18, nous pouvons remarquer que la première bande interdite apparaît pour r=0.3a entre la 3ème branche et la 4ème notée (b). La création de cette bande interdite est due au déplacement de la branche (b) au voisinage de Γ vers les hautes fréquences, causé par l'aplatissement du mode avec le rayon des cylindres, ce qui a eu pour effet d'élargir la bande interdite. Ce comportement est une conséquence directe de l'augmentation du couplage entre les cylindres et la plaque à cause de l'élargissement de leur surface de contact.

A propos du comportement des courbes de dispersion en fonction des paramètres géométriques des cylindres, nous constatons qu'il est semblable à celui des structures de bandes du CPRL à base de cylindres d'élastomère sur la plaque d'époxy que nous avons

étudiées dans le chapitre précédent. En effet, dans notre structure en aluminium et diamant, les modes se déplacent vers les basses fréquences avec la hauteur des cylindres. De plus, l'augmentation de la surface de contact entre les cylindres et la plaque n'a d'effet que sur l'élargissement de la bande interdite à cause du couplage plus intense entre les résonateurs et la plaque. Ainsi, la bande interdite se situant à des fréquences où les longueurs d'onde sont grandes par rapport à la périodicité du CP, son ouverture est donc due à un couplage entre la résonance des cylindres et les modes de Lamb, et ceci à un détail près. En effet, cette résonance n'est pas complètement localisée comme dans le cas de notre premier système élastomère/époxy, et le contraste élastique n'y est pas aussi important que dans ce dernier. L'interaction entre les modes de Lamb et ceux partiellement localisés dans les cylindres d'aluminium génère le ralentissement des premiers, qui se manifeste par la courbure (*bending*) de leurs branches.

Ce type de bande interdite due à la résonance peut ainsi exister en régime hypersonique grâce aux matériaux constituant le CP, à savoir l'aluminium et le diamant. En effet, si la périodicité du cristal est de a=10µm, la bande interdite se situera vers 135MHz pour r=4µm, h=4µm et e=1µm. Ou alors, avec a=1µm, elle se localisera à 1.35GHz pour r=0.4µm, h=0.4µm et e=0.1µm.

II.2.3. Autre propriété physique potentielle

Les courbures accentuées constatées sur les courbes de dispersion obtenues grâce à la structure en plaque aluminium/diamant laissent penser à une ouverture vers la conception d'un milieu à indice de réfraction négatif pour les ondes de Lamb. En effet, si nous nous focalisons par exemple sur la branche (3) de la structure de bande de la figure 5.15, nous pouvons tracer la surface de dispersion associée à cette branche et en déduire ses contours d'isofréquences dans la première zone de Brillouin. La figure 5.19 présente l'exemple en question.

Nous pouvons ainsi remarquer que les contours d'isofréquences sont convexes autour du point X pour le mode (3) correspondant au mode S_0, ce qui peut donner lieu à une réfraction négative de l'onde traversant le CP dans la direction ΓX comme le montre schématiquement la figure 5.20.

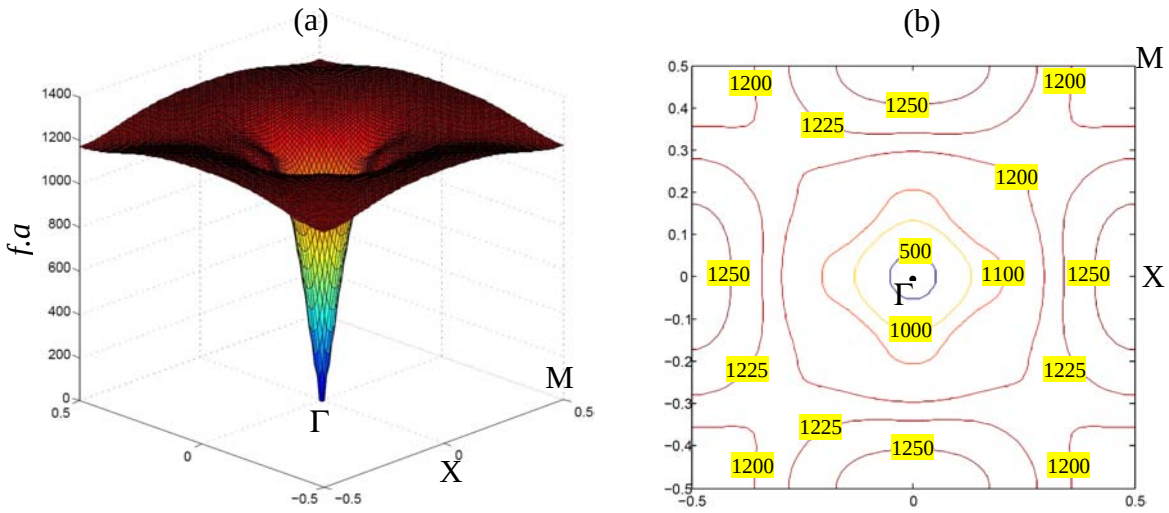


Figure 5.19 : (a) Surface de dispersion associée au mode (3) mentionné dans la structure de bandes de la figure 5.15. (b) Contours d'isofréquences associés à la surface de dispersion. Les fréquences sont en *f.a*.

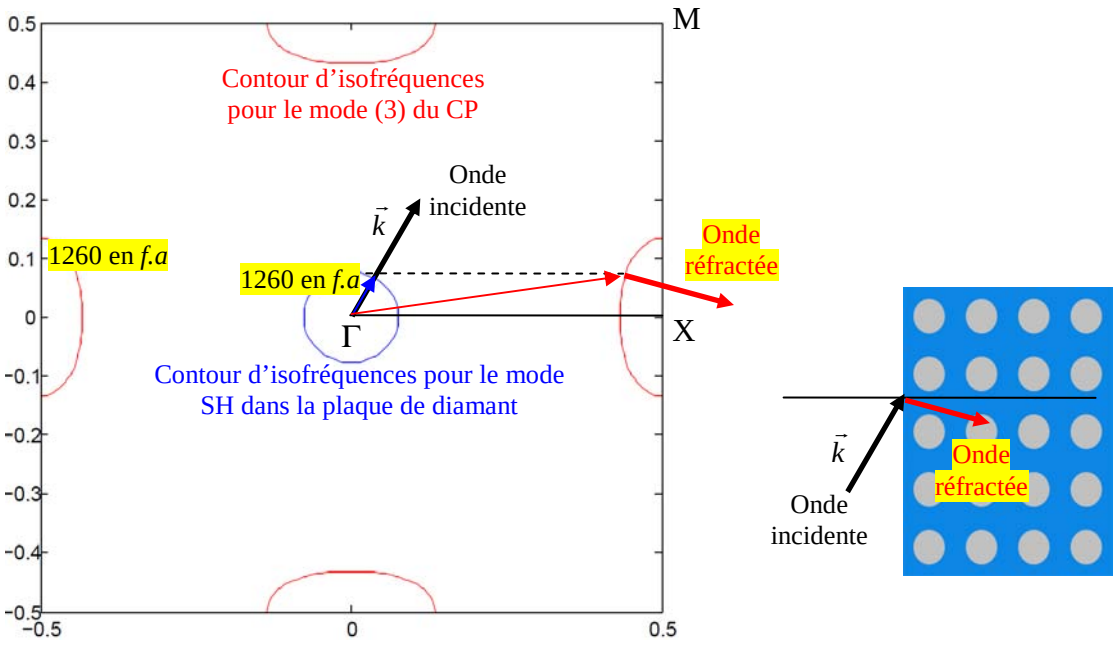


Figure 5.20 : Onde réfractée par le CP construit à partir des contours d'isofréquences et la conservation de la composante tangentielle du vecteur d'onde en traversant le CP. Les vecteurs en gras représentent les vitesses du groupe (gradient de la surface de dispersion), alors que les vecteurs non gras présentent la vitesse de phase.

La figure 5.20 présente un exemple sur la manière avec laquelle le CPRL peut présenter un comportement de réfraction négative pour un type de mode à une certaine fréquence. Néanmoins, notre CPRL ne présente pas d'intervalle de fréquences où quelle que soit la

direction d'incidence de l'onde, seule une direction de réfraction négative est obtenue. Cet intervalle est appelé AANR (*All-Angle Negative Refraction*)[22, 23]. Il serait donc intéressant d'étudier des structures semblables à notre CPRL, mais présentant des courbures de courbes de dispersion pouvant être exploitées pour explorer la possibilité de conception d'un système à réfraction négative qui présente un AANR.

II.2.4. Guidage des ondes de Lamb en régime hypersonique

Compte tenu des résultats obtenus pour le guidage dans le CPRL élastomère/époxy, notamment au niveau de la possibilité de confinement et transmission d'un seul mode à travers le guide d'ondes, nous avons étudié la possibilité de les reproduire en régime hypersonique dans le cas du CP aluminium/diamant. En adoptant la démarche précédente qui repose sur la technique de la super cellule, nous avons étudié trois guides d'ondes linéaires avec des largeurs *Wg* différentes, à savoir 0.5*a*, 1*a* et 2*a*. La figure 5.21 présente les résultats obtenus.

La première observation que nous pouvons faire concerne l'apparition d'un seul mode de défaut pour une largeur du guide d'ondes de 0.5*a*. Ce mode se situe un peu plus haut en fréquence que l'intervalle de la bande interdite. En augmentant la largeur du guide d'ondes, de plus en plus de modes défaut apparaissent dans la bande interdite et dans son voisinage. Ainsi, deux modes défaut apparaissent pour une largeur *Wg* =1*a*, et 4 modes pour *Wg* =2*a*. Chaque mode défaut correspond à un confinement d'un mode ayant sa propre polarisation au niveau du guide. La figure 5.22 présente la distribution du champ de déplacement pour les différents modes défaut observés aux points A, B, C, D1, D2, E1 et E2 mentionnés dans la figure 5.21.
Il est clair que les modes en question sont dus au défaut linéaire introduit dans le CPRL. De plus, le guidage est possible même à partir d'un espacement de 0.5*a*. Ces modes sont de nature différente en termes de polarisation, avec même des possibilités de couplage entre eux, comme dans le cas du guide d'ondes à largeur 2*a*. En effet, dans la structure de bandes de la figure 5.21(d), les modes D et E se couplent en échangeant leur polarisation comme le montrent les distributions du champ de déplacement D1, D2, E1 et E2 dans la figure 5.22.

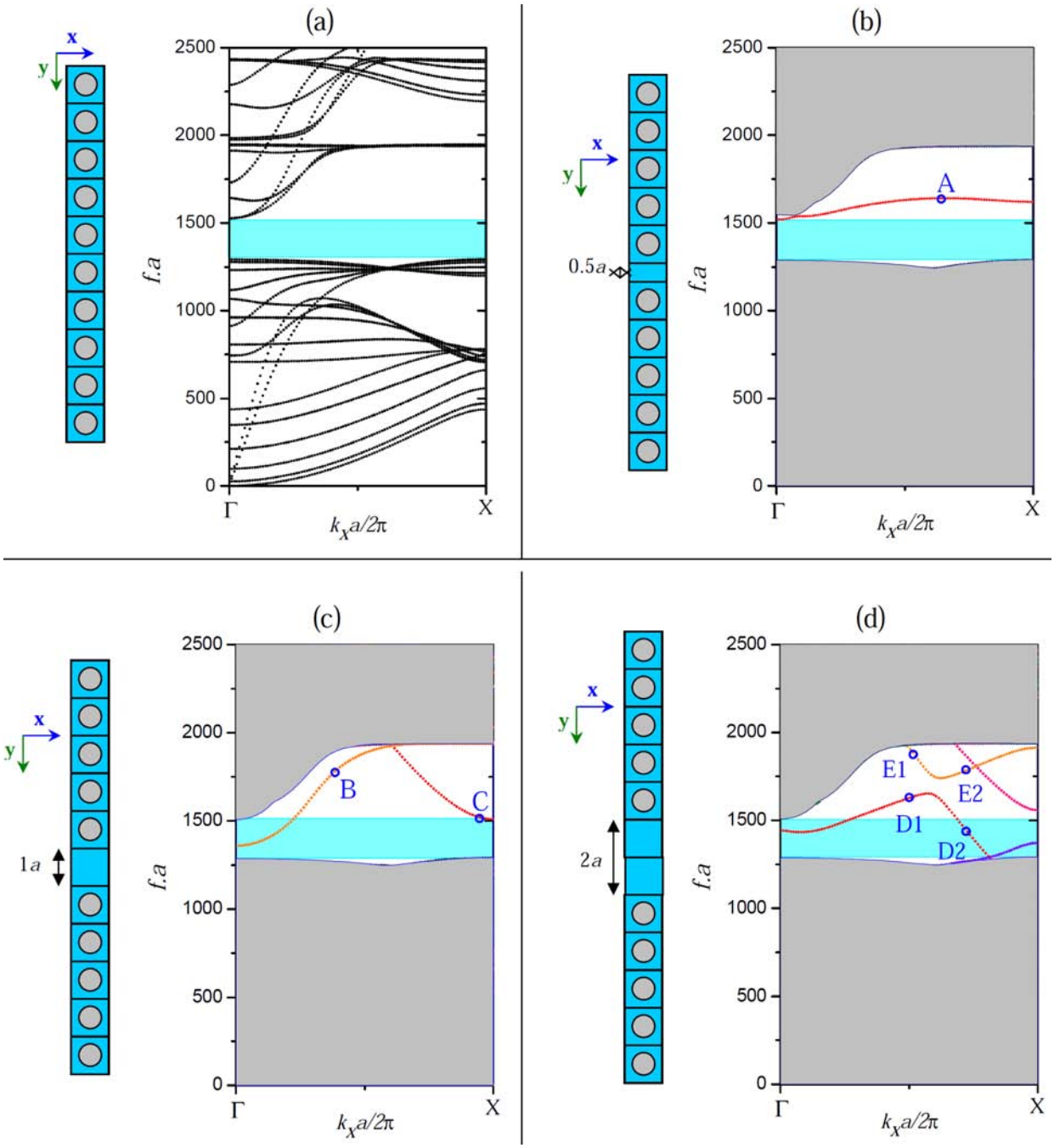


Figure 5.21 : Structures de bandes dans la direction ΓX de la structure aluminium/diamant. Les zones en cyan correspondent à la bande interdite alors que celles grisées délimitent les régions des modes en dehors de bande interdite. (a) : structure sans défaut. (b)-(d) : guides d'ondes ayant respectivement les largeurs *Wg* : 0.5*a*, 1*a* et 2*a*.

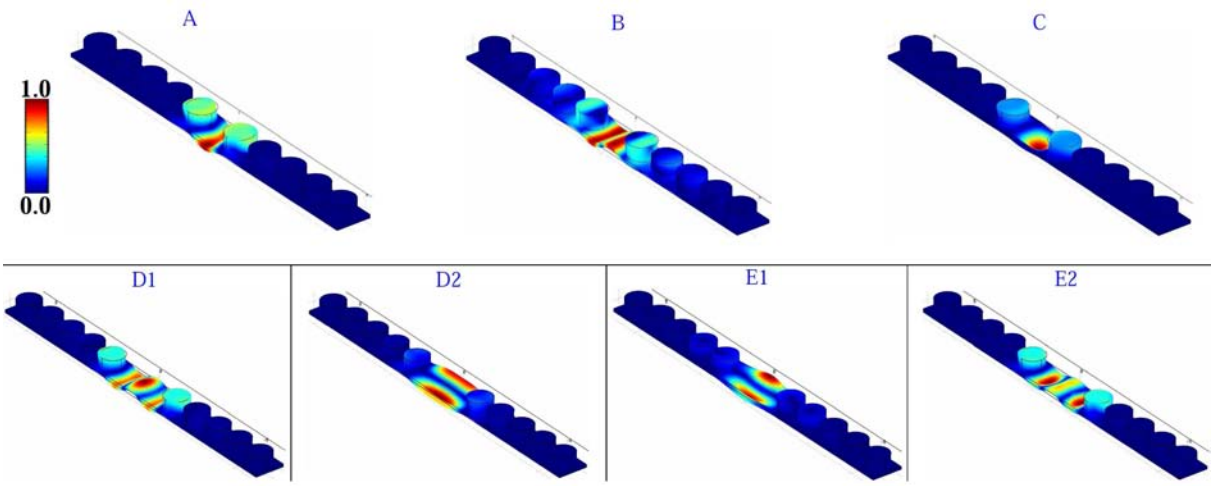


Figure 5.22 : Distribution du champ de déplacement aux points A, B, C, D1, D2, E1 et E2 mentionnés dans les structures de bandes de la figure 5.21.

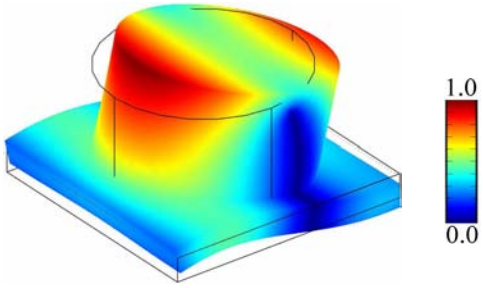


Figure 5.23 : Distribution du champ de déplacement au point (α) dans la structure de bandes de la figure 5.15.

Conclusion

Cette dernière étude qui concerne le système à ondes de Lamb aluminium/diamant est semblable à celle de Pennec *et al*[21] dans la mesure où notre système présente aussi des bandes interdites qui sont générées par la courbure de branches, notamment la branche correspondant au mode symétrique (S_0). Par ailleurs, la configuration géométrique et la nature de la structure ne permettent pas d'avoir des états de résonance complètement localisée dans les cylindres comme dans le cas de notre premier système élastomère/époxy. En effet, malgré le contraste élastique important entre l'aluminium et le diamant, la faible épaisseur de la plaque de diamant rend celle-ci très dispersive pour les ondes de Lamb. De ce fait, l'énergie élastique peut se propager entre résonateurs voisins (figure 5.23), ce qui inhibe la manifestation du

phénomène de résonance locale. Il n’en demeure pas moins que le comportement de la bande interdite en fonction des paramètres géométriques des résonateurs est similaire au cas du système à résonance locale étudié dans le chapitre précédent. Nous pouvons ainsi conclure en disant que dans la structure CPRL Al/diamant, les bandes interdites sont bien dues au phénomène de la résonance et non à la diffusion de Bragg, sauf que l’énergie élastique des modes de résonance dans les cylindres d’aluminium n'est pas intégralement confinée.

Par ailleurs, et afin d'exploiter au mieux le contraste élastique important qui existe entre le diamant et l'aluminium pour générer des bandes interdites par le mécanisme de résonance locale, le raisonnement doit se faire en termes de vitesses de phase propres au type d'ondes qui se propage dans le CP. En effet, pour que le mécanisme de résonance locale ait lieu, une grande différence doit exister entre la vitesse de l'onde qui se propage dans le support en diamant et le "milieu cylindrique" en aluminium; le cas d'un support en plaque fine est très dispersif pour l'onde. L'idée est donc d’utiliser un support semi-infini en diamant pour la propagation des ondes acoustiques de surface, qui ont des vitesses très élevées, afin qu'elles puissent interagir avec les modes propres des cylindres d'aluminium où les vitesses sont plus faibles, ce qui permettra au mécanisme de résonance locale de mieux se manifester.

Nous avons aussi choisi d'étudier ce système à ondes acoustiques de surface pour sa facilité de réalisation avec les techniques de micro et nanotechnologie actuelles. Les membranes (auto-supportées) en diamant sont en effet très fragiles pour qu’elles puissent supporter les étapes de fabrication technologique. Le choix de s’atteler aux structures semi-infinies, et donc aux SAW, vient aussi d’une volonté de pouvoir au moins essayer d’obtenir une validation expérimentale de ces structures en diamant, ce qui s’annonce extrêmement difficile pour les membranes en diamant.

Références

[1] Z. Liu, X. Zhang, Y Mao, Y.Y. Zhu, Z. Yang, C.T Chan and P. Sheng, Science **289**, 1734 (2000)

[2] X. Zhang, Z. Liu and Y. Liu, Eur. Phys. J. B **42,** 477 (2004)

[3] Z. Liu, C.T Chan and P. Sheng, Phys. Rev. B **71**, 014103 (2005)

[4] C. Goffaux and J. Sanchez-Dehesa, Phys. Rev. B **67**, 144301 (2003)

[5] H. Larabi, Y. Pennec, B. Djafari-Rouhani, and J. O. Vasseur, Phys. Rev. E **75**, 066601 (2007)

[6] G. Wang, X. Wen, J. Wen, L. Shao and Y. Liu, Phys. Rev. Lett. **93**, 154302 (2004)

[7] M. Hirsekorn, Appl. Phys. Lett. **84,** 17 (2004)

[8] J.C. Hsu and T.T Wu, Appl. Phys. Lett. **90**, 201904 (2007)

[9] W. Xiao, G. W. Zeng and Y. S. Chen, Applied Acoustics **69**, 255-261 (2008)

[10] M. M. Sigalas, J. Appl. Phys. **84** 3026 (1998)

[11] Z. G. Huang and T-T. Wu, IEEE Ultrason Symp 77–80 (2005)

[12] L-Y. Wu, L-W. Chen and C-M. Liu, Phys. Lett. A **373** 1189 (2009)

[13] A. khelif, M. Wilm, V. Laude and S. Ballandras, Phys. Rev. E **69**, 067601 (2004)

[14] Khelif, A. Choujaa, S. Benchabane, B. Djafari-Rouhani, and V. Laude, Appl. Phys. Lett. **84**, 4400 (2004).

[15] J-H. Sun and T-T. Wu, Phys. Rev. B **74**, 174305 (2006)

[16] T. Miyashita, and C. Inoue, Jpn. J. Appl. Phys. **40**, 3488 (2001)

[17] J. O. Vasseur, P. A. Deymier, B. Djafari-Rouhani, Y. Pennec and A-C. Hladky-Hennion. Phys. Rev. B **77**, 085415 (2008)

[18] B. Djafari-Rouhani, J. O. Vasseur, A. C. Hladky-Hennion, P. Deymier, F. Duval, B. Dubus, and Y. Pennec, Photonics and Nanostructures – Fundamentals and Applications **6**, 32 (2008)

[19] T-C. Wu, T-T. Wu, and J-C Hsu, Phys. Rev. B **79**, 104306 (2009)

[20] Y. Pennec, B. Djafari-Rouhani, H. Larabi, A. Akjouj, J. N. Gillet, J. O. Vasseur, and G. Thabet, Phys. Rev. B **80**, 144302 (2009)

[21] Y. Pennec,1, B. Djafari Rouhani, H. Larabi, A. Akjouj, J. N. Gillet, J. O. Vasseur, and G. Thabet, Phys. Rev. B, **80**, 144302 (2008)

[22] C. Luo, S. G. Johnson, J. D. Joannopoulos, and J. B. Pendry, Phys. Rev. B, **65**, 201104(R) (2002)

[23] X. Zhang, and Z Liu, Appl. Phys Lett. **85,** 341 (2004)

[24] M. Oudich, M. B. Assouar, and Z. Hou, Appl. Phys. Lett. **97**, 193503 (2010)

Chapitre 6

Transport et guidage des ondes acoustiques de surface (SAW) dans les CPRL

Introduction

Jusqu'ici, nous nous sommes intéressés aux CPRL à ondes de Lamb, et plus particulièrement à leur comportement dispersif permettant l'ouverture des bandes interdites au moyen du mécanisme de résonance locale. Les résultats encourageants obtenus nous ont permis d'envisager la possibilité d'entreprendre une approche expérimentale. Cependant, compte tenu du fait que les systèmes à ondes de Lamb sont à base de plaques fines, ils posent des difficultés au niveau de la mise en œuvre technologique. Nous avons donc tourné notre attention vers les structures à ondes acoustiques de surface (SAW) comme expliqué à la fin du chapitre précédent. En effet, les dispositifs SAW offrent une plus grande facilité de fabrication et sont largement utilisés par exemple dans les capteurs[1] et le filtrage en télécommunications[2]. De plus, les ondes de surface ont l'avantage d'être facilement générées et détectées en utilisant des matériaux piézoélectriques. Ainsi, la réalisation d'un CPRL à ondes de surface permettra d'élargir encore plus leur champ d'applications, mais aussi d'appréhender la physique relative à la propagation de ces ondes dans les structures phononiques.

Par ailleurs, les études réalisées jusqu'ici sur les CP à ondes de surface[3-6, 19, 20] sont moins nombreuses comparées à celles s'intéressant aux ondes de volume ou de Lamb. Nous pouvons citer, à titre d'exemple, les travaux théoriques de Sun *et al*[5] qui ont étudié par la méthode FDTD les structures de bandes des SAW. D'un autre côté, Benchabane *et al*[6] ont mis en évidence expérimentalement l'existence d'une bande interdite pour les ondes de surface dans un CP à base de niobate de lithium pour le régime ultrasonique. Très récemment, une étude expérimentale a été entreprise sur une structure phononique semi-infinie composée de piliers cylindriques en nickel sur un substrat de niobate de lithium. Cette étude a montré la possibilité d'ouverture de bande interdite dans le régime ultrasonique par le mécanisme de résonance locale[21].

Nous allons donc entreprendre dans un premier temps une étude théorique visant à développer un modèle de calcul de structures de bandes pour les ondes de surface dans les CP. Dans un second temps, nous nous focaliserons sur l'étude théorique d'un système à ondes de surface constitué d'un substrat de diamant sur lequel sont déposés des cylindres d'aluminium ou d'or suivant une périodicité carrée. L'idée est d'étudier la possibilité d'ouverture de bandes interdites pour les ondes de surface grâce au mécanisme de résonance locale. Nous nous intéresserons par la suite à la possibilité de réalisation de guide d'ondes, et à l'intérêt de la

résonance locale en hautes fréquences. Finalement, nous tenterons d’avoir une validation expérimentale de nos études théoriques.

I. Propagation des ondes acoustiques de surface dans les CPRL

I.1. Modèle théorique

I.1.1. Modèle de la structure étudiée

Comme mentionné brièvement auparavant, la structure que nous souhaitons modéliser consiste en un substrat semi-infini en diamant sur lequel est déposé un arrangement périodique carré de cylindres d'aluminium (ou Or comme on le verra par la suite). La figure 6.1 présente la structure en question dans l'espace tridimensionnel où la direction Z est parallèle aux axes des cylindres. On notera par *a*, *h* et *r* la périodicité du CP, la hauteur et le rayon des cylindres d'aluminium respectivement. On prendra dans toute cette étude *a*=1µm.

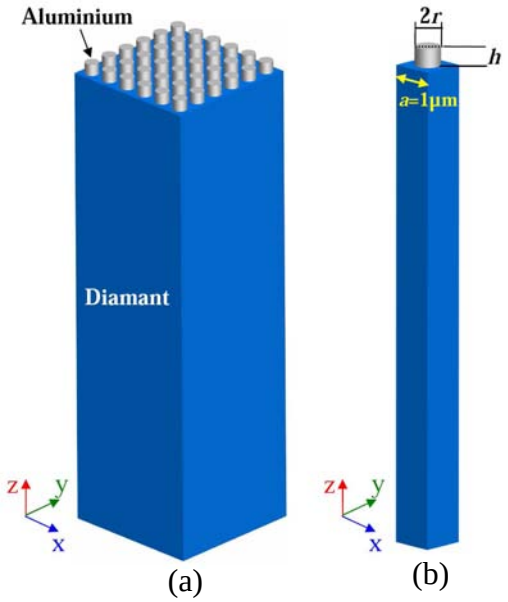


Figure 6.1 : (a) CPRL constitué d'un arrangement périodique de cylindres d'aluminium déposés sur un substrat semi-infini de diamant. (b) Cellule unité.

Dans la pratique, l'épaisseur du substrat dans les microsystèmes à base de celui-ci est très grande devant les dimensions des structures micro ou nano métriques disposées en sa surface. Ainsi, si l'on veut réaliser notre structure expérimentalement, et si l'on suppose que nous partons d'un substrat de diamant d'épaisseur *e*=0.5mm par exemple, on a e/*a*=5.10^5, ce qui est très grand et justifie bien la dimension semi infinie du substrat devant la hauteur des cylindres en aluminium qui ne dépassera pas 1µm dans cette étude. Ce fait rend ainsi notre système presque impossible à modéliser numériquement car, la nécessité de prendre une

épaisseur de substrat d'au moins 10^5 fois la périodicité de la structure requérra un temps de calcul extrêmement long, voire irréalisable sur des machines de calcul ordinaires.

Afin de surmonter cette difficulté, nous nous sommes basés sur un modèle que nous avons développé afin d'étudier notre structure phononique à ondes de surface[22]. L'idée principale consiste à considérer le substrat comme une plaque suffisamment épaisse permettant ainsi de découpler les modes de Lamb des ondes de surface se propageant de chaque coté de celle-ci. Ainsi, puisque nous nous intéressons uniquement aux interactions des ondes de surface avec les piliers cylindriques, nous nous sommes donc limités, dans notre modèle théorique, à une épaisseur qui vaut 20 fois la périodicité du CP, c'est-à-dire en prenant e=20µm. Il est bien entendu que nous nous intéresserons uniquement aux modes se propageant à la surface supérieure contenant les résonateurs. Afin d'éliminer les modes de surface de la surface inférieure du substrat, nous avons appliqué des conditions aux limites fixes sur celle-ci :

$$Ux = Uy = Uz = 0$$

Il est clair que le fait de considérer une plaque épaisse ne permettra pas de calculer les modes de surface qui ont de larges longueurs d'onde (basses fréquences) à cause de leur profondeur de pénétration. Cependant, en hautes fréquences et d'une manière générale, notamment dans le régime hypersonique qui nous intéresse ici, les longueurs d'ondes des SAW mises en jeu sont faibles. Par conséquent, considérer une épaisseur modérée de la plaque (plusieurs périodes) est suffisant pour simuler les structures de bandes des ondes de surface. Ce modèle atteint évidemment ses limites en basses fréquences.

Par ailleurs, puisqu'un système semi-infini présente un milieu de propagation à la fois pour les modes de surface et les modes de volume, nous avons utilisé le "cône du son" pour séparer les modes de surface (modes non-radiatifs) et les modes qui se propagent dans toute l'épaisseur du substrat (modes radiatifs). Nous aurons l'occasion par la suite de présenter ce cône du son ainsi que la procédure de sa mise en place au niveau de la structure de bandes.

Compte tenu de la périodicité de la structure dans les directions X et Y de l'espace, nous avons limité notre domaine de calcul à la cellule unité à laquelle on ajoute les conditions périodiques de Bloch suivant ces deux directions (figure 6.1(b)). Nous rappelons que les calculs ont été faits par la méthode des éléments finis sur Comsol Multiphysics. Un maillage adaptatif a été choisi afin d'assurer une bonne convergence du calcul des modes de surfaces. Les courbes de dispersion ont été calculées en cherchant les modes solution de propagation pour chaque paramètre vecteur d'ondes suivant les axes principaux de symétrie de la première zone de Brillouin. Enfin, les matériaux constituant le cristal sont considérés cubiques et leurs

constantes élastiques[7, 8] sont consignées dans le tableau 5.2 de la section II.1 du chapitre précédent.

I.1.2. Cône du son

Dans le cas de notre CP semi infini, les ondes de surface et celles de volume se manifestent dans le système. Les premières sont localisées au niveau de la surface et se propagent sur le plan défini par cette dernière. Leur profondeur de pénétration dans le volume (suivant la direction Z) est déterminée uniquement par leur longueur d'onde. Les ondes de volume se propagent, comme leur nom l'indique, dans le volume et ont des vitesses de propagation supérieures à celles des ondes de surface. Cette propriété a été exploitée pour séparer les deux types d'ondes en calculant le cône du son, inspiré du cône de lumière utilisé en photonique[9]. Comme pour ce dernier, le cône du son permet d'isoler les modes qui se propagent dans le volume d'un milieu, qui sera dans notre cas le diamant. Les limites de ce cône, suivant les différentes directions de propagation, sont déterminées en calculant les plus faibles vitesses des modes de volume. Ainsi, tous les modes de volume ayant une vitesse dépassant ces limites tombent dans le cône. Ce dernier constitue ainsi une zone radiative associée aux ondes de volume qui se propagent dans le substrat.

Dans notre cas, le calcul des limites du cône du son a été fait en déterminant les modes de volume ayant la plus faible vitesse dans le diamant. Ceci a été fait en calculant la structure de bandes du diamant, homogène et infini, suivant les différentes directions principales de symétrie de la première zone de Brillouin. La figure 6.2 montre le cône du son (en bleu) calculé et utilisé dans la suite de nos travaux pour la détermination des modes de surface.

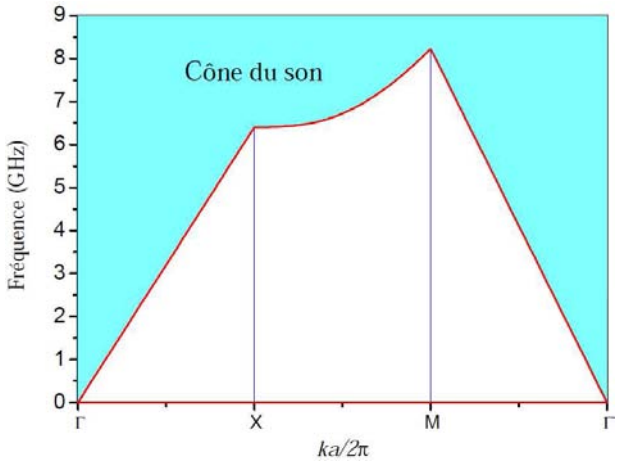


Figure 6.2: Cône du son du substrat en diamant.

Les modes calculés qui se situent hors du cône du son, et donc ayant des fréquences inférieures à la limite du cône (ligne du son en rouge), ne peuvent être que des modes non radiatifs, et sont donc localisés au niveau de la surface. Ils constituent ainsi le centre de notre intérêt.

Avant d'entamer la présentation des résultats des calculs des structures de bandes pour notre structure à ondes de surface, nous mettons l'accent sur un problème qui se pose lors du calcul des courbes de dispersion. Comme nous l'avons mentionné auparavant, les ondes de surface se propagent et se localisent juste au niveau de la surface du substrat. Leur profondeur de pénétration dans le volume est déterminée par leurs longueurs d'onde. Pour notre modèle considéré pour le calcul des courbes de dispersion, nous nous sommes limités à une épaisseur du substrat diamant valant 20µm. Ainsi, en basses fréquences, il existe une limite où la longueur d'onde de l'onde de surface dépassera cette épaisseur du substrat. A cette limite donc, l'onde de surface entrera en interaction avec la surface inférieure du substrat. Dans le calcul de nos structures de bandes, ces effets vont être visibles au voisinage du centre Γ de la première zone de Brillouin, où les fréquences des ondes de surface sont très basses. Une étude des champs de déplacement nous a permis de conclure qu'on ne doit pas tenir compte du comportement dispersif de notre CP pour des fréquences inférieures à 500MHz dans les structures de bandes calculées. En dessous de cette fréquence en effet, les ondes de surface ont des profondeurs de pénétration dans le volume qui atteignent et dépassent l'épaisseur de notre substrat modélisé, à savoir 20µm. Dans notre cas de figure, le problème ne se pose pas, car nos bandes interdites se situent bien au-delà de cette fréquence des 500MHz.

I.1.3. Convergence des modes de surface

Comme nous l'avons mentionné auparavant, un maillage adaptatif en éléments tétraédriques a été adopté afin d'assurer la convergence des calculs des modes de surface de la surface supérieure du substrat contenant les cylindres d'aluminium. En fait, seuls les modes de surface situés dans la zone non radiative par rapport à la limite du cône du son nous intéressent dans ce cas. La convergence des modes de volume situés dans la zone radiative n'a pas été prise en compte. La figure 6.3 présente un exemple de convergence des modes de surface pour une structure ayant les paramètres géométriques suivant: h=0.2µm et r=0.3µm.

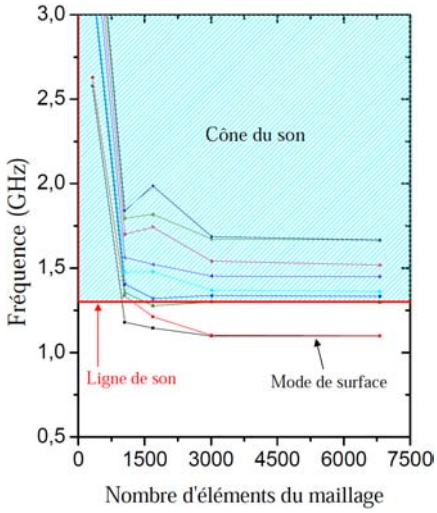


Figure 6.3: Exemple de convergence des modes de surface au point (0.1 , 0) en *ka*/2π

I.2. Structures de bandes et bandes interdites

Le calcul de la structure de bandes des ondes de surface pour notre CP aluminium/diamant a été réalisé pour différentes valeurs des paramètres géométriques des cylindres. La première étude concerne la variation de la hauteur *h* de ces derniers pour une valeur de rayon fixée à *r*=0.3µm. La figure 6.4 illustre les résultats des calculs obtenus pour les valeurs de *h*=0.1µm, 0.2µm, 0.3µm, 0.4µm, 0.5µm et 0.6µm.

La première observation faite sur les structures de bandes de cette figure concerne la présence de bandes plates spécifiques aux modes de résonance locale. Nous pouvons aussi remarquer que des ouvertures de bandes interdites apparaissent avec l'augmentation de la hauteur des cylindres d'aluminium. En effet, aucune bande interdite n'apparaît pour *h*=0.1µm. A partir de *h*=0.2µm, nous pouvons distinguer 2 jusqu'à 4 bandes interdites pour le cas des hauteurs *h* valant 0.5 et 0.6µm. Dans ce qui suivra, nous allons noter par BG1 la première bande interdite créée entre les 2ème et 3ème modes, BG2 celle entre les 4ème et 5ème modes, BG3 entre les 6ème et 7ème modes, et finalement la quatrième bande interdite BG4 qui peut se distinguer entre les 16ème et 17ème modes. Ces bandes interdites sont notées dans la figure 6.4 pour *h*=0.5µm. Les deux premières apparaissent pour *h*=0.2µm et s'étalent respectivement sur [3.368-3.491]GHz et [5.455-5.486]GHz. Ces deux bandes descendent et se localisent à des fréquences moins élevées au fur et à mesure que l'on augmente la hauteur *h*, jusqu'à atteindre finalement les intervalles fréquentiels de [0.819-0.842]GHz et [2.018-2.118]GHz respectivement pour *h*=0.6µm. La troisième bande interdite BG3 apparaît, quant à elle, à partir de *h*=0.3µm alors que la quatrième surgit à *h*=0.5µm.

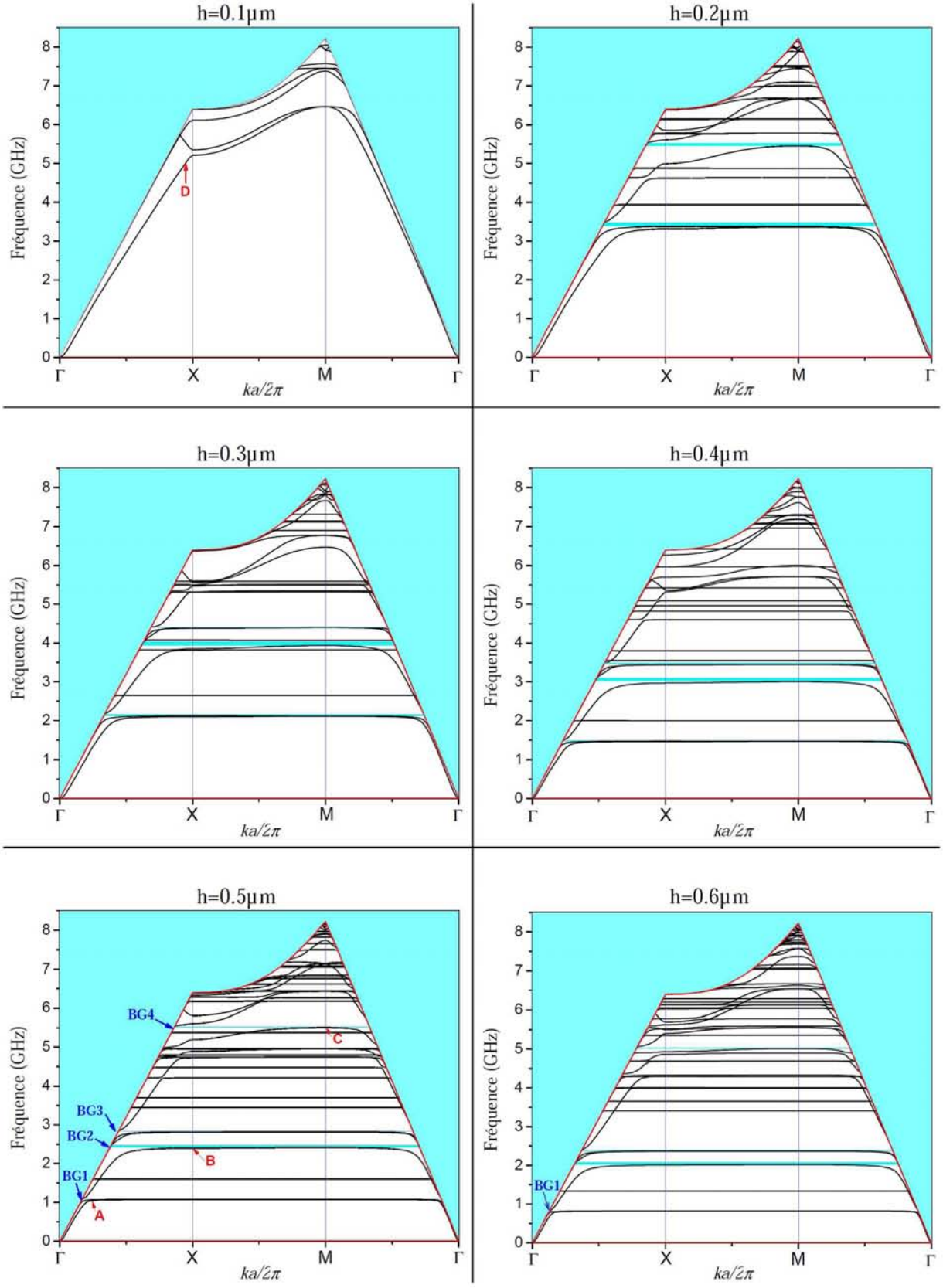


Figure 6.4: Structures de bandes pour les différentes valeurs de *h*: 0.1µm, 0.2µm, 0.3µm, 0.4µm, 0.5µm et 0.6µm. Le rayon des cylindres d'aluminium étant fixé à *r*=0.3µm.

Afin de visualiser le comportement des ces bandes interdites, nous avons illustré dans la figure 6.5 l'évolution de la position et de la largeur des bandes BG1 et BG2 en fonction de *h*.

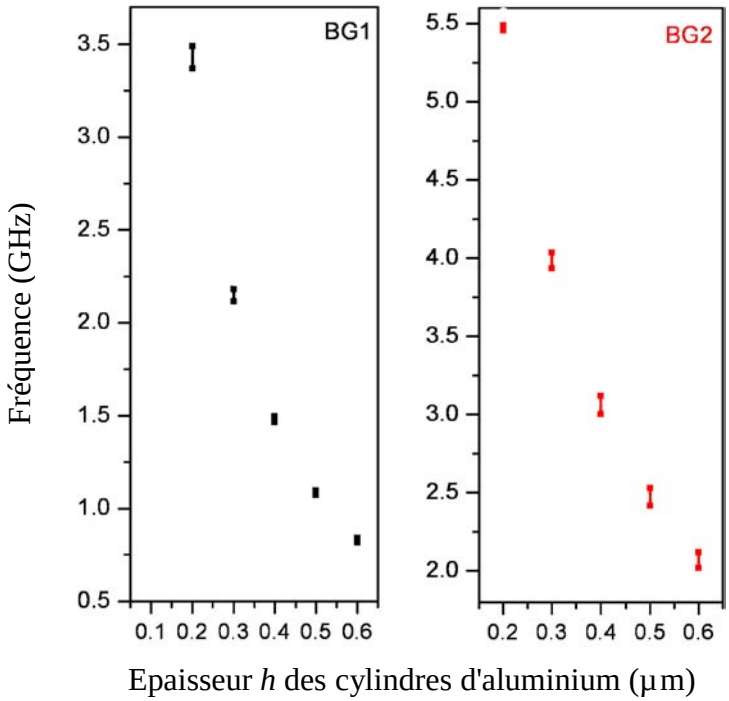


Figure 6.5 : Evolution de la largeur des bande interdites BG1 et BG2 en fonction de l'épaisseurs *h* des cylindres d'aluminium

Les largeurs des bandes interdites repérées dans les structures de bandes sont faibles comparées à ce qu'on peut avoir dans le cas des structures basées sur le mécanisme de Bragg. Ceci est l'une des caractéristiques d'une bande interdite créée par le mécanisme de résonance locale. Toutes les bandes interdites relevées dans la figure 6.4 sont dues au mécanisme de résonance locale qu'on peut facilement reconnaître grâce à l'existence de nombreux modes plats dont certains délimitent celles-ci. De plus, le fait que ces modes plats se déplacent vers des fréquences moins élevées quand on augmente la hauteur des résonateurs est un comportement particulièrement connu. En effet, nous avons déjà pu remarquer et expliquer ce comportement grâce au modèle de l'oscillateur harmonique dans le chapitre 4 pour la structure élastomère/époxy.

S'agissant de la structure de bandes relative à h=0.1µm, le fait qu'on n'observe pas de bande plate est normal puisque à cette faible hauteur des cylindres, les modes de résonance se situent plus haut en fréquences que les limites définies par le cône du son (ligne du son). Plus on augmente la hauteur *h* des résonateurs, plus les modes de résonance descendent en fréquence et apparaissent ainsi en dehors du cône du son. Ces modes se couplent avec les

modes de surface créant ainsi les bandes interdites BG1 et BG2 qui apparaissent en premier lieu pour h=0.2µm. Au fur et à mesure que l'on augmente la hauteur h, les modes de résonance descendent vers des fréquences moins élevées et entrent dans la zone non radiative définie par les limites du cône du son. Ainsi, d'autres possibilités de couplage s'ouvrent produisant l'apparition de la bande interdite BG3 pour h=0.3µm et la BG4 à partir de h=0.5µm.

Afin de mettre plus en évidence ces observations, nous présentons dans la figure 6.6 les distributions du champ de déplacement des différents modes délimitant les bandes interdites, désignés par A, B et C dans la structure de bandes pour la hauteur h=0.5µm (figure 6.4).

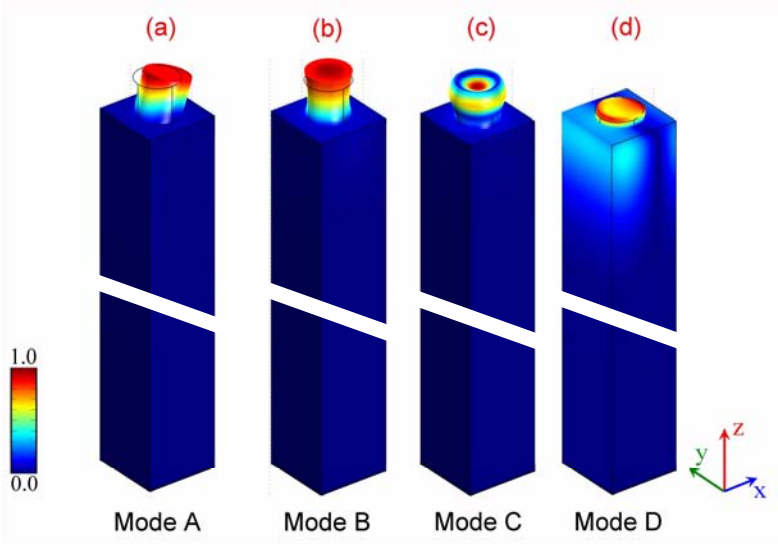


Figure 6.6 : Distribution du champ de déplacement des modes A, B, C et D désignés dans la structure de bandes correspondant à *h*=0.1µm et *h*=0.5µm dans la figure 6.4.

A partir de cette figure, nous pouvons facilement distinguer la nature de chacun des modes de résonance. Ces derniers sont directement responsables de la création des bandes interdites observées. En effet, la bande interdite BG1 est créée par le couplage entre les modes de surface et le mode transverse (mode A de la figure 6.6**)**. Les bandes BG2 et BG3 sont dues au couplage entre les ondes de surface et le mode d'élongation (mode de type B). Finalement, la bande interdite BG4 est due au couplage des modes de surface avec ceux de "respiration" (*Breathing mode*) de type C. Par ailleurs, le mode D représenté dans la figure 6.6 et indiqué dans la structure de bande de la figure 6.4 pour h=0.1µm, ne correspond pas à un mode de résonance certes, mais il met en évidence la nature de l'onde de surface guidée dans le CPRL.

Aussi nous avons étudié l'influence du rayon des cylindres d'aluminium sur la structure de bandes en fixant leur hauteur à h=0.2µm. Les valeurs concernées sont r=0.2, 0.25, 0.3, 0.4 et 0.45µm. La figure 6.7 présente les résultats obtenus.

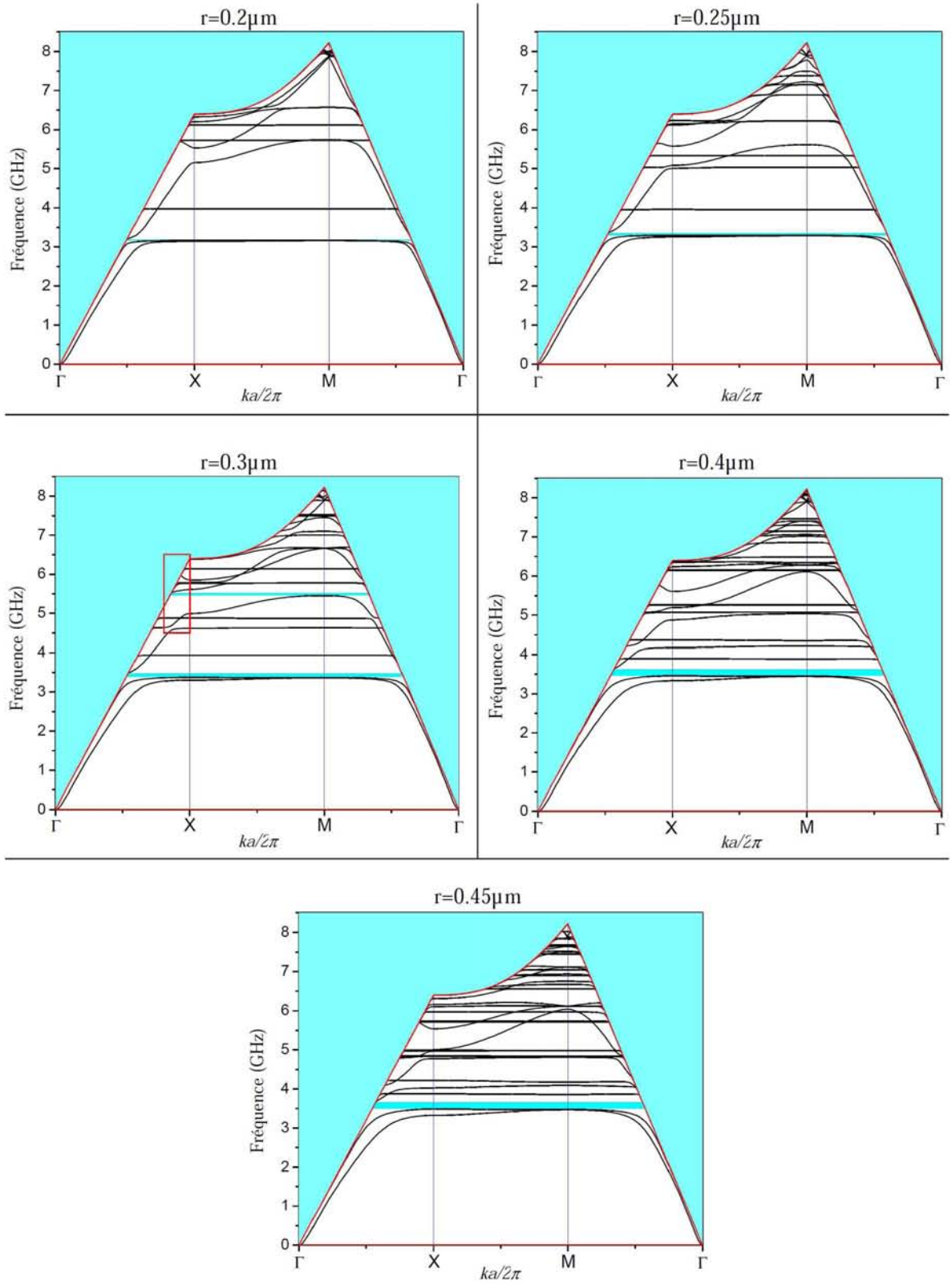


Figure 6.7: Evolution de la structure de bandes en fonction du rayon *r* des cylindres d'aluminium, la hauteur de ces derniers étant fixée à *h*=0.2µm.

Dans la figure ci-dessus, nous nous intéressons surtout à la bande interdite BG1 créée entre les 2ème et le 3ème modes. Nous pouvons ainsi remarquer que l'augmentation du rayon *r* des cylindres élargit cette bande interdite en changeant légèrement sa position. Pour bien mettre en évidence ces observations, nous avons tracé dans la figure 6.8 l'évolution de la largeur et de la position de la bande interdite BG1 en fonction du rayon *r*.

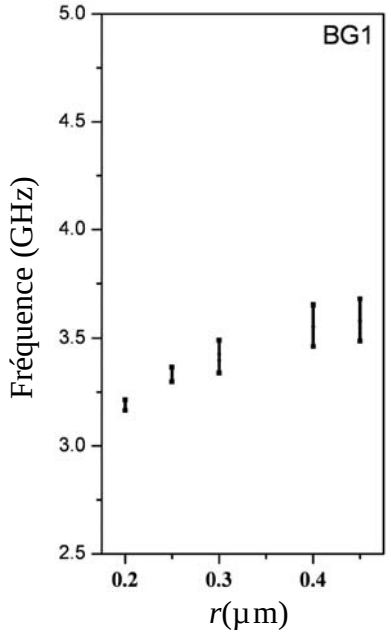


Figure 6.8: Evolution de la largeur et de la position de la bande interdite BG1 en fonction du rayon des cylindres d'aluminium

L'élargissement de la bande interdite en fonction du rayon des cylindres d'aluminium peut se comprendre par l'augmentation de l'interaction entre leurs modes de résonance et ceux de surface. Ainsi le couplage devient plus accentué à cause de la surface de contact qui devient plus grande. Par ailleurs, nous notons aussi l'apparition d'une deuxième bande interdite située entre les 6ème et 7ème modes pour r=0.3µm (Figure 6.7).

La structure à base de résonateurs d'aluminium cylindriques déposés sur un support semi infini en diamant constitue un milieu dispersif présentant des bandes interdites pour les ondes de surface. Ces bandes sont créées par le mécanisme de résonance locale qui est dû au contraste élastique très important existant entre le diamant et l'aluminium. Cette structure phononique présente l'avantage d'offrir des possibilités de fabrication avec les techniques de micro et nano technologie actuelles, contrairement au système à ondes de Lamb présenté précédemment, car il est très difficile de fabriquer des plaques en diamant très fines autosupportées, sans parler des problèmes de fragilité qui peuvent se poser.

Par ailleurs, l'originalité de la résonance locale résidant dans le fait qu'elle donne lieu à des ouvertures de bandes interdites à de très basses fréquences par rapport à celles imposées par le mécanisme de Bragg, nous avons décidé d'entamer une étude pour voir l'intérêt de ce mécanisme pour les applications plutôt en régime hypersonique. Ainsi, à la lumière des résultats obtenus pour le guidage en régime sonique, nous avons estimé qu'il serait intéressant d'étudier ce phénomène en régime hypersonique, d'autant plus qu'à ce régime là, le champ d'applications est large, englobant, entre autres, le filtrage, le démultiplexage et les télécommunications. Ceci fera donc l'objet de l'étude que nous entamerons dans la suite de cette première partie de ce chapitre.

I.3. Guidage des ondes de surface dans les CPRL

Puisque notre étude concerne le guidage des ondes de surface, nous allons considérer la propagation des ondes dans la direction ΓX. Nous prendrons le cas des résonateurs cylindriques ayant un rayon r=0.3µm et une épaisseur h=0.2µm. La figure 6.9 présente la partie ΓX de la structure de bandes concernée par notre étude pour un CPRL sans défaut.

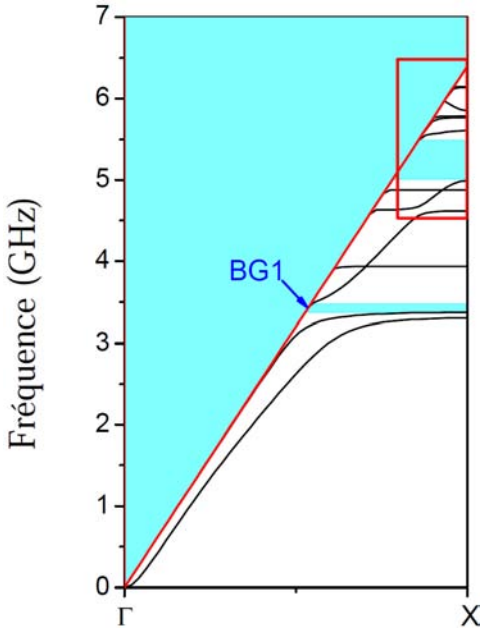


Figure 6.9 : Structure de bandes de notre système dans la direction ΓX de la première zone de Brillouin. Le rayon et la hauteur des cylindres étant fixés respectivement à r=0.3µm et h=0.2µm.

Comme nous pouvons le constater sur la figure 6.9, nous avons deux bandes interdites dans la direction ΓX. La première est issue de la bande interdite complète BG1 alors que la deuxième est plus large et se situe entre 5 et 5.52GHz mais elle n'est pas complète (dans les différentes directions de la zone de Brillouin). L'étude du guidage que nous entamerons dans

cette partie concernera donc cette deuxième bande interdite vu sa largeur importante et sa localisation en plus hautes fréquences. Ceci nous permettra de nous focaliser sur les ondes de surface à faible profondeur de pénétration par rapport à l'épaisseur du substrat de diamant que nous avons considéré dans les calculs numériques. Pour ce faire, il fallait adopter la technique de la "super cellule".

I.3.1. Modèle théorique (super cellule)

La "super cellule" adoptée pour le calcul des structures de bandes est constituée de dix cylindres d'aluminium déposés sur une plaque épaisse de diamant. Comme dans les cas étudiés précédemment pour les systèmes à ondes de Lamb dans le chapitre 5, les conditions aux limites périodiques sont prises en compte pour introduire la propriété de périodicité de la "super cellule" dans les deux directions X et Y de l'espace. Puisque nous nous intéressons au guidage en introduisant un défaut linéaire dans la direction ΓX du cristal, nous nous sommes limités à 5 cylindres d'aluminium de part et d'autre du guide comme dans les études précédentes, ce qui est suffisant pour limiter les interactions entre guides voisins.

I.3.2. Résultats : structures de bandes et modes de défaut

La première simulation que nous avons faite concerne la structure de bandes du système sans défaut, pour une super cellule avec dix cylindres d'aluminium. La figure 6.10 présente le résultat de cette simulation au voisinage de la bande interdite étudiée. Ce voisinage est mentionné par un cadre en rouge dans la structure de bandes de la figure 6.9. La figure 6.10 montre nettement l'existence de la bande interdite mais avec plusieurs multiplications de modes qui sont dues au phénomène de repliement (*folding*).

Dans notre structure, la création de la bande interdite est due à la résonance locale. Nous savons donc que les longueurs d'ondes des modes de surface aux fréquences de cette bande interdite sont larges par rapport à la périodicité de la structure. Ainsi, en plus du système sans défaut, nous avons donc réalisé quatre simulations pour quatre guides d’ondes ayant différentes largeurs *Wg* : 2, 4, 6 et 8µm. La figure 6.11 montre les résultats relatifs à ces guides. La partie en bleu cyan représente la zone radiative du cône du son, alors les zones grisées couvrent les modes de surfaces hors de la bande interdite.

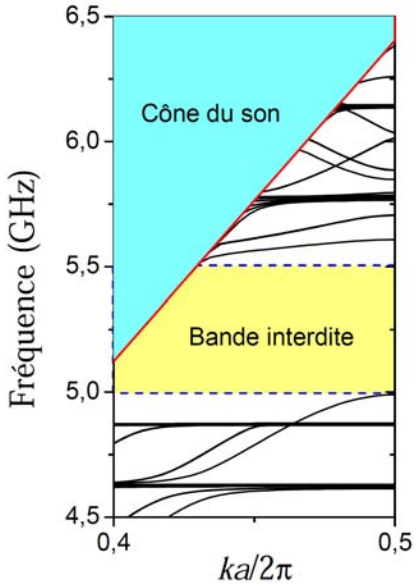


Figure 6.10 : Structure de bandes de la super cellule sans défaut, constituée de 10 résonateurs, au voisinage de la bande interdite

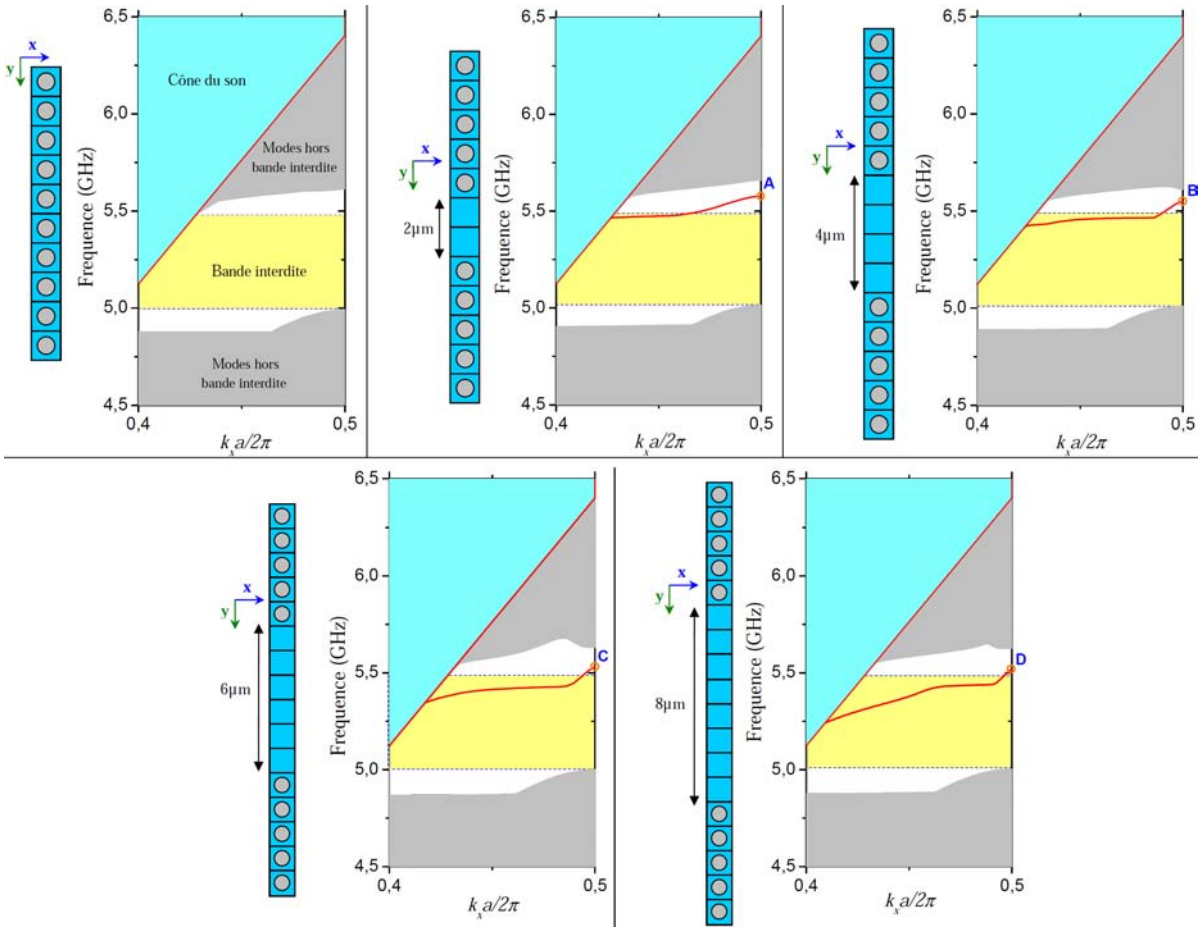


Figure 6.11: Structures de bandes dans la direction X d'un guide d'onde linéaire avec différentes largeurs. (a) : structure sans défaut. (b)-(e) : guides d'ondes ayant respectivement les largeurs 2, 4, 6 et 8µm.

Dans les structures de bandes associées aux différents guides, nous pouvons distinguer l'existence d'un mode défaut au niveau de la bande interdite. Au fur et à mesure que l'épaisseur du guide augmente, ce mode s'introduit de plus en plus dans la bande interdite. La raison de ce comportement devient compréhensible si nous prenons en compte le fait que les longueurs d'onde mises en jeu sont larges par rapport à la périodicité de la structure, et donc la nécessité d'un guide plus large afin de pouvoir mieux les confiner. Plus le guide est large plus le confinement de l'onde de surface est accentué. Afin de mettre en évidence ces causes à effet, nous avons présenté dans la figure 6.12 la distribution du champ de déplacement pour les modes défaut aux points A, B, C et D indiqués dans la figure 6.11.

Nous pouvons constater la nature confinée des modes de surface au niveau du guide d'onde. Le confinement de l'onde de surface est de plus en plus prononcé avec l'augmentation de la largeur du guide. Ce comportement est de ce fait semblable à celui observé dans le cas de notre structure élastomère/époxy dans le régime sonique. Finalement, une bref examen des composante *Ux*, *Uy* et *Uz* du champ de déplacement des ces modes de défaut révèle que l'onde guidée a une polarisation dominante suivant les deux directions X et Z de l'espace cartésien, ce qui correspond à la caractéristique principale des modes de surface qui sont elliptiquement polarisés suivant le plan (OXZ).

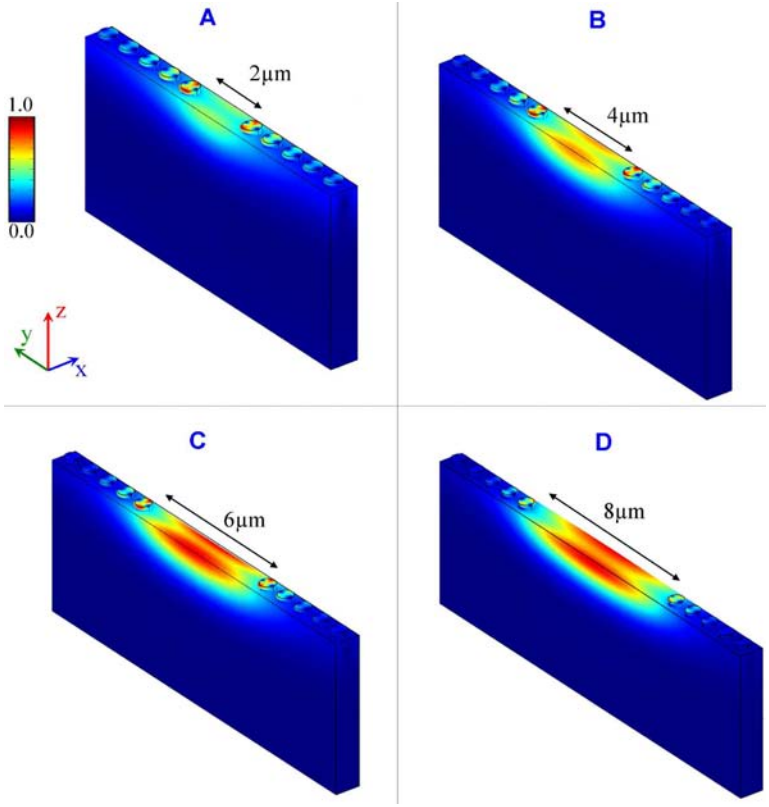


Figure 6.12 : Distribution du champ de déplacement dans les guides d'ondes pour les modes défaut notés A, B, C et D dans les structures de bandes de la figure 6.11

I.4. Conclusion

L'étude de cette dernière structure à ondes acoustiques de surface nous a montré que les bandes interdites créées par le mécanisme de résonance locale peuvent être réalisées en régime hypersonique. Ceci élargit le champ d'application des CPRL qui étaient jusqu'ici destinés uniquement à des applications dans le régime des basses fréquences. En effet, dans les études traitant ce sujet, le contraste élastique entre les matériaux utilisés était basé sur le choix d'un élastomère très mou[10-14]. Ceci fait que le mécanisme de résonance locale s'opère à des fréquences de résonance imposées par les propriétés élastiques de l'élastomère où les vitesses de propagation de l'onde sont très faibles comparées à celles dans les autres milieux constituant le CPRL. Dans notre structure aluminium/diamant, la résonance est déterminée par le comportement élastique des résonateurs en aluminium, ce qui nous permet de reproduire les effets de la résonance locale dans le régime hypersonique grâce au substrat très dur qu'est le diamant. De plus, notre structure offre la possibilité de conception de guides d'ondes ayant un seul mode de surface guidé. Cette propriété rend ce genre de CPRL potentiellement intéressant pour les applications liées, par exemple, au démultiplexage en hautes fréquences. De ce fait, il serait très intéressant de pouvoir mener des études expérimentales sur ce type de système. Cette tentative expérimentale fera donc l'objet de la partie qui suit.

II. Approche expérimentale : CPRL pour les ondes de surface en régime hypersonique

Dans le cadre de cette thèse, nous avons essayé de mettre en évidence expérimentalement les résultats que nous avons présentés dans ce chapitre, en fabriquant un CPRL à ondes de surface constitué d'un substrat en diamant sur lequel nous avons fixé un arrangement périodique de cylindres en aluminium ou en or. Dans cette partie, nous parlerons essentiellement de la réalisation des échantillons avec les difficultés rencontrées, à la fois liées à la fabrication mais aussi à la caractérisation expérimentale.

II.1. Elaboration des structures

II.1.1. Matériaux utilisés

Afin de réaliser nos structures à base de résonateurs cylindriques sur le substrat de diamant, nous avons utilisé deux types de substrat : des substrats de diamant autosupportés

d’une épaisseur d’une centaine de micromètres, et des couches de diamant de 4µm déposées sur un substrat de silicium. Ce type de substrat a été réalisé par la technique MPACVD (*Microwave Plasma Assisted Chemical Vapor Deposition*)[15, 16], et sa fabrication ne rentre pas dans le cadre de cette thèse. La figure 6.13 ci-dessous présente schématiquement les deux types de substrats que nous avons utilisés.

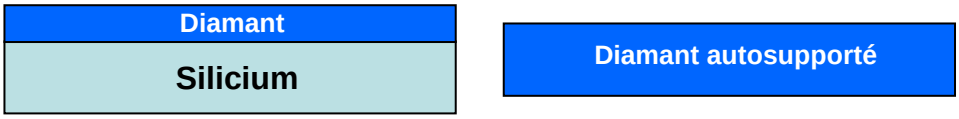


Figure 6.13 : Présentation schématique des substrats utilisés

Sur ces substrats, deux types de cylindres métalliques ont été mis en place. Ces derniers sont fabriqués en aluminium et en or pour des raisons technologiques que nous verrons par la suite. Nous avons alors effectué des simulations numériques pour les deux types de cylindres métalliques. Au vu des résultats de ces simulations, nous avons décidé de fabriquer deux types d'échantillons :

- Le premier est constitué d'un arrangement carré de cylindres en **aluminium** avec les paramètres géométriques suivants : a=1µm, r=0.3µm et h=0.2µm. Le calcul de la structure de bandes pour ce système a été illustré dans la figure 6.7. Le PCRL présente théoriquement deux bandes interdites situées dans les intervalles de fréquences [3.368-3.491]GHz et [5.455-5.486]GHz;
- le deuxième est constitué d’un arrangement carré de cylindres en **or** avec les mêmes paramètres géométriques que le premier échantillon (a=1µm, r=0.3µm et h=0.2µm) et présente aussi trois bandes interdites sur les intervalles [1.418-1.449]GHz, [1.869-1.892]GHz et [3.320-3.412]GHz. Le calcul théorique de la structure de bandes relatif à ce système est présenté dans la figure 6.14.

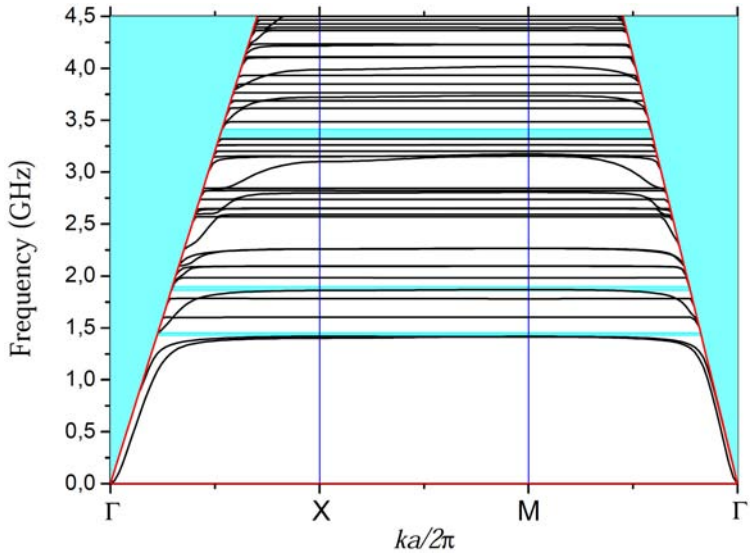


Figure 6.14 : Structure de bandes d'un CP semblable à celui de la figure 6.1 constitué d'un arrangement carré de cylindres en or sur la surface d'un substrat de diamant. Le rayon et la hauteur des cylindres d'or valent respectivement 0.3 et 0.2µm.

II.1.2. Procédé de fabrication des échantillons

Afin de réaliser les structures périodiques de cylindres d'aluminium/or sur le substrat de diamant, nous avons développé un procédé de lithographie électronique basé sur des procédés déjà existants dans notre salle blanche. Ce procédé repose sur un étalement de couches de résines[17], qui vont être irradiées avec un faisceau d'électrons grâce à la lithographie électronique. L'objectif est de réaliser des trous dans les couches de résines pour ensuite les "remplir" grâce à un dépôt d'aluminium ou d'or par évaporation thermique. La figure 6.15 présente une image par microscopie électronique des trous obtenus dans la résine.

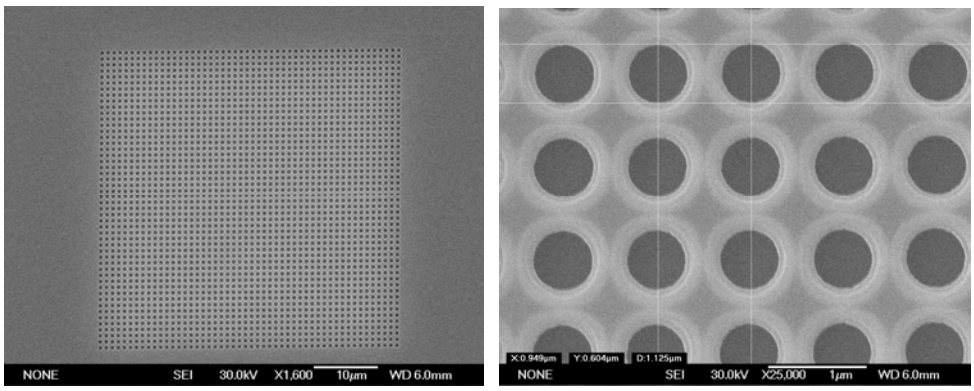


Figure 6.15 : Trous dans la bi-couches de résines utilisée

La résine est ensuite enlevée par un solvant approprié pour obtenir enfin des motifs cylindriques. La figure 6.16 résume ces étapes du procédé de fabrication de notre CPRL. Le détail complet de celui-ci est reporté en annexe D.

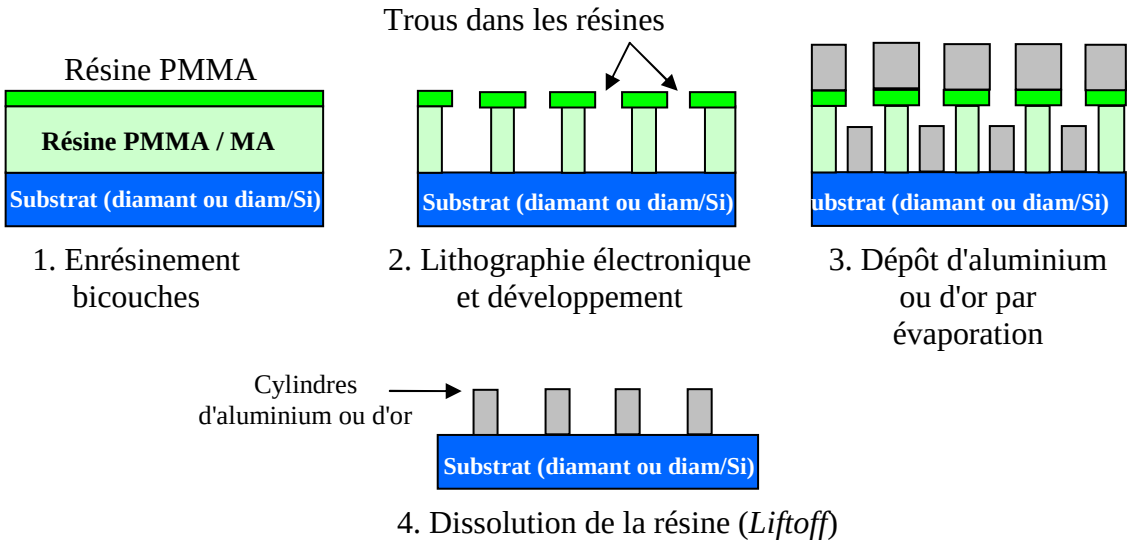
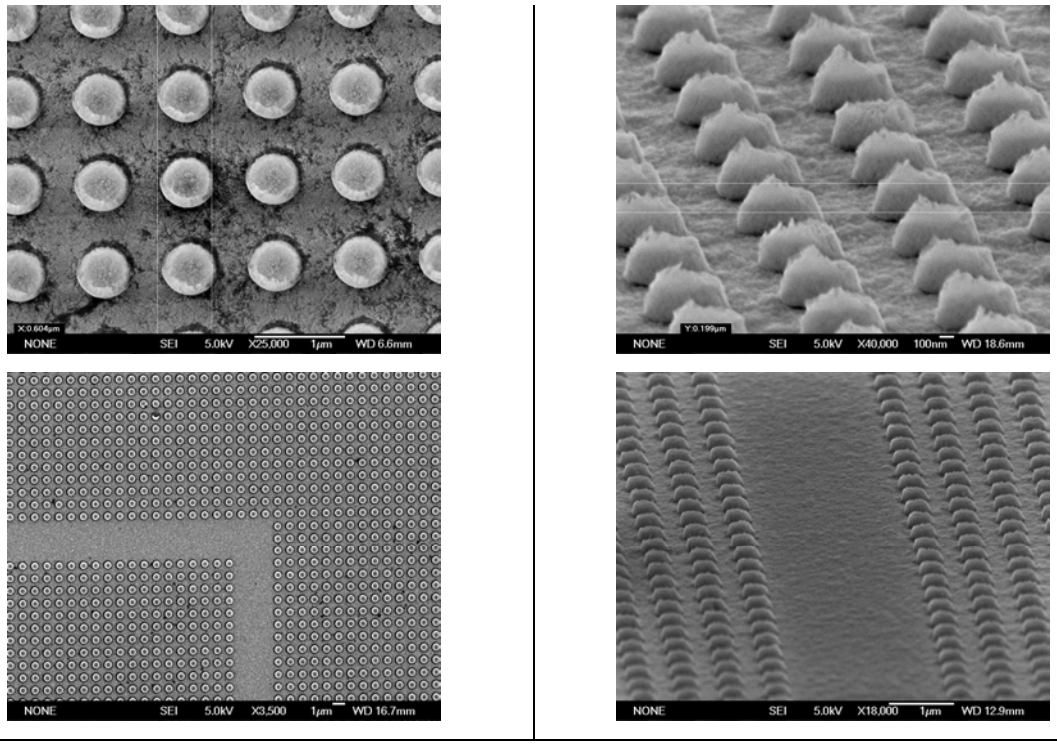


Figure 6.16 : Procédé de fabrication des cylindres métalliques.

II.1.3. Résultats

Dans un premiers temps, et vu que l'on vise des hauteurs de cylindres de 200nm par le procédé d'évaporation thermique, nous avons travaillé sur le développement du procédé d'enduction bicouche de résines qui permet d'avoir une épaisseur totale des résines équivalente à trois fois l'épaisseur du dépôt souhaité, c'est-à-dire 600nm de résine. Ceci facilite par la suite la dissolution des résines (*Lift-off*) dans l'étape finale. Nous avons ainsi travaillé sur des substrats de silicium jusqu'à mettre au point toutes les étapes du procédé. Nous avons finalement œuvré sur nos substrats en diamant/silicium et diamant autoporté à partir desquels nous avons réalisé des échantillons de CPRL constitués de cylindres en or ou en aluminium. La figure 6.17 présente des images par microscopie électronique à balayage (MEB) des structures cylindriques en aluminium et en or réalisées sur nos substrats.

(a)



(b)

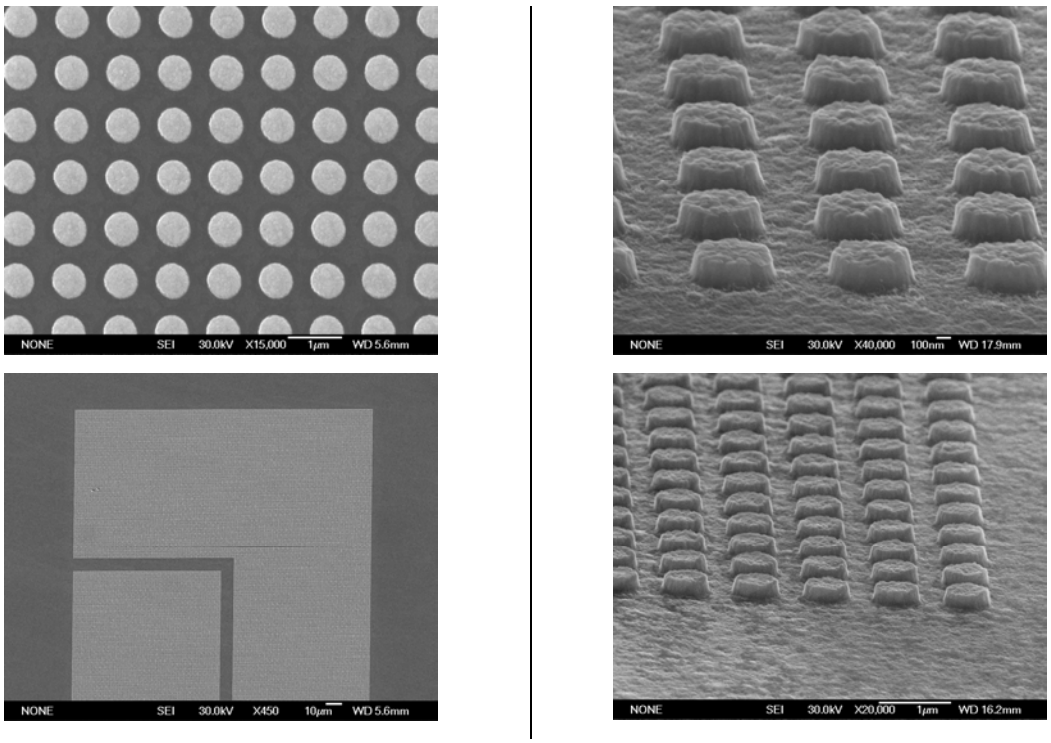


Figure 6.17 : Images MEB des cylindres (a) en aluminium, et (b) en or, déposés sur le substrat diamant/silicium

A partir des images MEB ci-dessus, nous avons constaté que les cylindres en aluminium présentaient des défauts de forme (figure 6.17(a)) alors que ceux en or sont mieux structurés. Ce défaut vient fort probablement du procédé d'évaporation. Malgré cela, nous avons réalisé quelques échantillons sur les deux types de substrats de diamant et avec les deux types de métal, l'aluminium et l'or. Ces échantillons contiennent plusieurs types de structures phononiques avec des cylindres en aluminium ou en or : des CP sans défaut avec un arrangement périodique carré de 100x100 cylindres, des guides d'onde linéaire et des guides d'onde coudés de largeurs 2, 3, 6 et 8µm.

II.2. Caractérisation des échantillons

II.2.1. Technique de caractérisation

Une fois l'élaboration des échantillons achevée, leur caractérisation a été faite dans le cadre d'une collaboration que nous avons avec l'Université de Hokkaido au Japon, et plus précisément avec le Professeur Oliver Wright. Son groupe a en effet développé une technique qui permet de suivre en temps réel la propagation des ondes de surface, en utilisant une excitation et une détection optiques au moyen d'impulsions à très courtes durées. Profunser *et al*[18] ont utilisé cette technique afin d'imager les interactions des ondes de surface avec un CP, et d'accéder à la relation de dispersion qui leur a permis de détecter une bande interdite suivant des directions de propagation bien déterminées.

Grâce à des impulsions de très courtes durées (inférieures à la picoseconde) d'un faisceau optique incident, avec des caractéristiques bien déterminées, l'onde de surface est générée par effet thermoélastique à des fréquences supérieures à 1 GHz. Un deuxième faisceau optique qui sert de sonde balaye la surface du PC en enregistrant le champ de déplacements perpendiculaires. Ce procédé permet non seulement d'imager le déplacement spatial de l'onde au cours du temps, mais aussi de déterminer expérimentalement la relation de dispersion par transformée de Fourier spatiotemporelle. La figure 6.18 présente le principe de détection utilisé par Profunser *et al*[18] dans la caractérisation de leur CP constitué de trous dans un substrat de silicium.

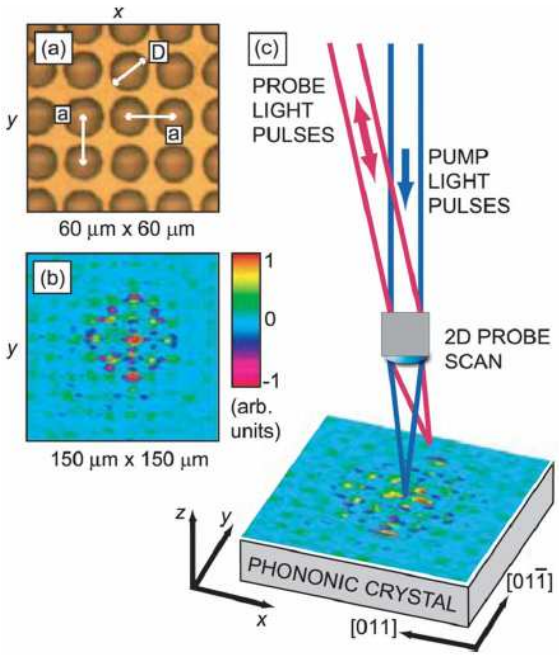


Figure 6.18 : Schéma de la caractérisation "picoseconde" proposé par Profunser *et al*[18]. (a) : Image optique du CP. (b) : Image de déplacement de l'onde de surface à partir d'une excitation ponctuelle après une durée de 7.4ns. (c) : Description schématique du dispositif d'excitation et de sonde optiques[18].

II.2.2. Résultats et discussion

Les toutes premières mesures sont reportées dans la figure 6.19. Cette dernière présente quelques analyses préliminaires réalisées relatives à la propagation des ondes de surface dans un CPRL Al/diamant. Ce dernier contient un guide d'onde linéaire d'une largeur de 2µm. La figure 6.19 (a) montre le point d'excitation de l'onde de surface par le faisceau laser à la surface du substrat de diamant. Un faible champ de déplacements est enregistré au voisinage de ce point sans pour autant noter de génération de train sphérique des ondes de surface autour de celui-ci. Pour la caractérisation de l'échantillon présenté ici, le point d'excitation est placé au niveau de l'entrée du guide d'onde créé dans l'arrangement périodique des cylindres d'aluminium comme le montre la figure 6.19(b). Malgré une excitation faite avec le maximum de puissance fournie par la technique optique picoseconde (7.10mW), nous n'avons pas pu générer d'onde de surface. Par ailleurs, nous pouvons constater que le faisceau de détection remplit bien son rôle de visualisation. En effet, nous obtenons bien une image claire des résonateurs au niveau du CPRL (figure6.19(b)). Les résultats de la figure 6.19 restent toutefois peu exploitables. Ceci vient tout d'abord du faible couplage entre nos structures et le faisceau laser responsable de la génération des ondes de surface. En effet, la longueur d'onde

du faisceau d'excitation se trouve hors de la gamme des longueurs d'onde que peut absorber le diamant. Ce dernier est donc transparent pour le faisceau laser et l'onde de surface ne peut être excitée par effet thermo-élastique. Une solution envisageable consiste à déposer une couche de matériau absorbant (tungstène par exemple) à la surface du diamant, qui peut transmettre l'excitation des ondes de surface dans le diamant. Ensuite, les fréquences mises en jeu ici sont de l'ordre de quelques GHz, ce qui est très difficile à caractériser en l'absence de toute optimisation de la procédure de mesure et de la qualité des échantillons analysés.

Ces premières mesures expérimentales concernant la caractérisation de bandes interdites ouvertes par résonance locale dans le régime hypersonique, sont le fruit des premiers essais que nous avons entrepris sur différents échantillons Al/diamant et Au/diamant. Des améliorations du dispositif de caractérisation sont en cours afin de l'adapter au mieux aux mesures souhaitées sur nos structures. Ceci fera l'objet en partie des perspectives de ces travaux de thèse.

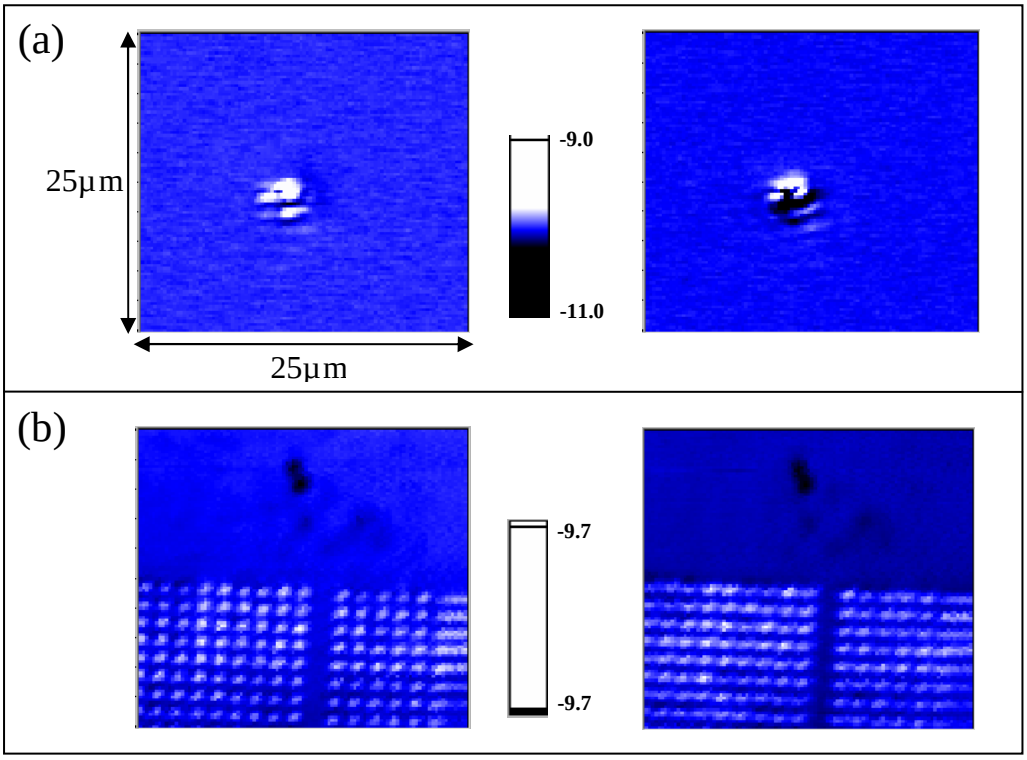


Figure 6.19 : Caractérisation d'un échantillon Al/Diamant présentant un guide d'onde. (a) : point d'excitation. (b) : visualisation de la structure Al/diamant.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons montré qu'il était possible de mettre en place théoriquement un CP pouvant ouvrir des bandes interdites pour les ondes de surface dans le régime hypersonique grâce au mécanisme de résonance locale. Nous avons aussi exploité ce résultat afin d'ouvrir une possibilité de guidage d'un seul mode de surface à travers un guide d'onde linéaire construit en supprimant plusieurs rangées de résonateurs. Ce résultat singulier ouvre une nouvelle voie d'application des CPRL à ondes de surface vers la conception, par exemple, de capteurs et démultiplexeurs dans le régime hypersonique. Nous avons essayé ainsi dans la deuxième partie de ce chapitre de réaliser un premier dispositif CPRL à ondes de surface afin de mettre en évidence les différents résultats observés en théorie. Nous avons pu avoir quelques résultats préliminaires qui ne sont pas concluants pour l'instant. Faute de temps, le procédé de caractérisation n'a pas pu être amélioré et adapté par nos collaborateurs pour qu'on puisse analyser finement nos structures et de vérifier les prédictions théoriques. Dans le cadre de cette thèse, cette étude expérimentale constitue une première tentative de mise en évidence de bande interdite par résonance locale dans le régime hypersonique.

.

Références

[1] T. Aubert, O. Elmazria, M. B. Assouar, L. Bouvot, M. Hehn, S. Weber, M. Oudich, D. Genève, IEEE Trans. UFFC, **58**, 603 (2011)

[2] P. Kirsch, M. B. Assouar, O. Elmazria, V. Mortet, and P. Alnot, Appl. Phys. Lett. **88**, 223504 (2006)

[3] Y. Tanaka, and S-I. Tamura, Phys. Rev. B **58**, 9758 (1998)

[4] T.-T. Wu, L-C. Wu, and Z.-G. Huang, J. Appl. Phys. **97**, 094916 (2005)

[5] J.-H. Sun and T-T. Wu, Phys. Rev. B **74**, 174305 (2006)

[6] S. Benchabane, A. Khelif, J-Y. Rauch, L. Robert, and V. Laude, Phys. Rev. E **73**, 065601(R) (2006)

[7] H. J. McSkimin and W. L. Bond, Phys. Rev. 105, 116 (1957)

[8] "*Ondes élastiques dans les solides*", Tome 1, D. Royer, and E. Dieulesaint

[9] S. G. Johnson, S. Fan, P. R. Villeneuve, and J. D. Joannopoulos, Phys. Rev. B **60**, 5751 (1999)

[10] Z. Liu, X. Zhang, Y. Mao, Y. Y. Zhu, Z. Yang, C. T. Chan, and P. Sheng, Science **289**, 1734 (2000)

[11] P. Sheng, X.X. Zhang, Z. Liu, and C.T. Chan, Physica B **338**, 201 (2003)

[12] Z. Liu, C.T Chan, and P. Sheng, Phy. Rev. B **65**, 165116 (2002)

[13] X. Zhang, Z. Liu, and Y. Liu, Eur. Phys. J. B **42,** 477 (2004)

[14] Z. Liu, C.T Chan, and P. Sheng, Phys. Rev. B **71**, 014103 (2005)

[15] M. B. Assouar, M. El Hakiki, O. Elmazria, P. Alnot, and C. Tiusan, Diamond and Related Materials, **13**, 1111 (2004)

[16] P. Kirsch, M. B. Assouar, O. Elmazria, V. Mortet, and P. Alnot, Appl. Phys. Lett. **88**, 223504 (2006)

[17] http://www.allresist.de/wEnglish/index.php

[18] D. M. Profunser, E. Muramoto, O. Matsuda, and O. B. Wright, Phys. Rev. B **80**, 014301 (2009)

[19] J. F. Robillard, A. Devos, and I. Roch-Jeune, Phys. Rev. B **76**, 092301 (2007)

[20] A. Khelif, Y. Achaoui, S. Benchabane, V. Laude, and B Aoubiza, Phys. Rev. B **81**, 214303 (2010)

[21] Y. Achaoui, A. Khelif, S. Benchabane, L. Robert, and V. Laude, Phys. Rev. B **83**, 104201 (2011)

[22] M. B. Assouar, and M. Oudich, Appl. Phys. Lett. **99** 123505 (2011)

Conclusion et perspectives

Depuis plus de vingt ans, les scientifiques étudient et fabriquent les cristaux phononiques pour leur capacité à prohiber la propagation des ondes acoustiques/élastiques dans des gammes de fréquences dites bandes interdites phononiques. Dans notre présentation générale sur les CP, décrite dans le chapitre 1, nous avons passé en revue quelques travaux majeurs concernant la découverte et la mise en évidence théorique et expérimentale de plusieurs comportements remarquables manifestés par ces cristaux. A cette fin, les chercheurs ont eu recours dans un premier temps à des modèles théoriques basés sur des méthodes numériques dont nous avons présenté quelques unes dans le chapitre 2 de ce manuscrit. Les progrès technologiques en matière de fabrication ont permis par la suite d'avancer davantage dans le domaine et de mettre en évidence expérimentalement les propriétés des cristaux en question. Il a été ainsi prouvé que ces derniers pourraient servir aussi bien dans des applications en basses fréquences (isolation sonore, autoroutes, aéroport etc.), qu'en hautes fréquences (filtrage, démultiplexage dans le domaine de télécommunication). Dans le cadre de cette thèse, nous nous sommes intéressés aux deux volets d'applications qui concernent donc les régimes sonique et hypersonique.

Après les deux premiers chapitres relatant tout d'abord une synthèse de l'état de l'art sur les cristaux phononiques puis les principales méthodes numériques utilisées pour les étudier, nous avons présenté, dans le chapitre 3, une nouvelle approche de la méthode PWE permettant de calculer les structures de bandes complexes. Il s'agit d'une méthode de calcul numérique basée sur une transformation de la méthode de décomposition en ondes planes (EPWE). Celle-ci nous a permis de calculer les modes évanescents dans un cristal phononique bidimensionnel en plaque, et donc d'analyser le mécanisme d'atténuation des ondes de Lamb. Bien que nous n'ayons présenté dans ce chapitre que des exemples relatifs aux cristaux phononiques basés sur le mécanisme de Bragg, cette méthode peut bien modéliser les structures de bandes complexes des cristaux phononiques à résonance locale, sous réserve d'y procéder en utilisant des moyens de calcul numérique assez puissants.

Dans le chapitre 4, nous avons pu concevoir et étudier un nouveau CPRL en plaque. Dans un premiers temps, nous avons montré théoriquement que ce cristal permet l'ouverture de bandes interdites dans le régime sonique par le mécanisme de résonance locale pour les ondes de Lamb. Nous avons pu cerner et comprendre le comportement physique de notre structure au niveau du mode opératoire du mécanisme de résonance locale, et ce grâce au

modèle de l'oscillateur harmonique "*Spring mass model*". Nous sommes parvenus ainsi à contrôler l'ouverture et la localisation des bandes interdites au moyen des paramètres géométriques et physiques des résonateurs constituant le CPRL. Dans un deuxième temps, nous avons étudié les propriétés de l'élastomère composant nos structures et qui joue un rôle clé dans leurs comportements. Nous avons donc mesuré les constantes élastiques du "silicone rubber" par deux différentes méthodes dont la spectrométrie Brillouin. Ces caractérisations "matériaux" nous ont permis de déterminer avec une bonne précision les propriétés élastiques de l'élastomère, si bien que nous avons pu les introduire dans notre approche numérique. Finalement, nous avons procédé à la fabrication de plusieurs CPRL ayant différents paramètres géométriques et pu mettre en évidence expérimentalement l'existence de bandes interdites. Ceci a été réalisé en utilisant la technique de caractérisation par SLDV. De ces caractérisations expérimentales, nous avons montré notamment l'ouverture d'une bande interdite complète située à 2.2kHz avec une périodicité qui vaut uniquement 1cm. La confrontation des résultats expérimentaux et théoriques a permis de montrer leur très bonne convergence, et donc de confirmer la concordance entre les deux approches.

En ce qui concerne le chapitre 5, nous y avons étudié le guidage des ondes de Lamb dans les CPRL pour les deux régimes sonique et hypersonique. Pour le premier, nous avons montré qu'un défaut linéaire introduit dans le cristal permet le confinement et le guidage d'un seul mode de Lamb, contrairement au guidage dans les CP basés sur le mécanisme de Bragg, où une multitude de modes de défaut sont présents simultanément dans la bande interdite. Cette possibilité de guidage d'un seul mode dans le régime sonique nous a amenés à penser à la reproduire dans le régime hypersonique pour des applications potentielles telles que le filtrage ou le démultiplexage par exemple. Ainsi, dans la deuxième partie de ce chapitre, nous avons étudié un nouveau CPRL à ondes de Lamb constitué d'un arrangement périodique de piliers métalliques sur une plaque en diamant. L'utilisation de ce dernier a permis, théoriquement, de se situer dans le régime hypersonique grâce à la très grande vitesse des ondes élastiques qui s'y propagent. Concernant le guidage, nous avons relevé un comportement proche de celui enregistré pour le régime sonique, et ainsi montré la possibilité de confinement et de guidage de peu de modes dans des guides d'ondes linéaires.

Dans le dernier chapitre de ce manuscrit, nous avons adopté une nouvelle approche consistant à étudier un nouveau CPRL à ondes acoustiques de surface à base d'un substrat semi infini de diamant "muni" d'un arrangement périodique de piliers métalliques. Grâce au grand contraste élastique présenté par cette structure, nous avons montré, tout d'abord théoriquement, la possibilité d'ouverture de bandes interdites par le mécanisme de résonance

locale pour les ondes de surface. Ceci n'a été possible que par le développement d'un nouveau modèle théorique permettant de calculer les structures de bandes des ondes de surface dans les cristaux phononiques. Par ailleurs, nous avons, à l'instar des chapitres précédents concernant les ondes de Lamb, étudié les phénomènes de guidage dans ces structures semi-infinies, et pu montrer la propagation d'un seul mode de surface dans un guide d'ondes linéaire. Ce résultat théorique constitue une réelle ouverture vers l'utilisation des CPRL à ondes acoustiques de surface dans la conception de dispositifs de filtrage et de démultiplexage, par exemple, dans le régime hypersonique. Ainsi, dans la deuxième partie de ce chapitre, nous avons procédé à la fabrication des structures CPRL à base de diamant en utilisant les techniques classiques de micro et nano fabrication. Nous avons par la suite entrepris quelques tentatives expérimentales afin de les caractériser en utilisant la technique d'acoustique picoseconde. Les premiers résultats rapportés dans ce chapitre nécessitent encore une étude approfondie au niveau, d'une part, de l'optimisation de la technique de caractérisation, et d'autre part de l'optimisation des structures CPRL afin de garantir un meilleur couplage entre celles-ci et la source d'excitation. Ceci est d'autant plus nécessaire que les gammes fréquentielles mises en jeu sont de l'ordre de quelques GHz.

Il est important de souligner que ces tentatives expérimentales constituent un premier pas de la mise en évidence de la présence d'une bande interdite pour les ondes de surface dans un CPRL en régime hypersonique. Cette voie de recherche pourrait déboucher sur des résultats pouvant initier le recours aux dispositifs SAW-CPRL dans les applications de télécommunications. L'objectif serait donc d'élaborer des premiers dispositifs à base de CPRL, dotés de systèmes de génération et de détection d'ondes de surface (IDTs et matériaux piézoélectriques) fonctionnant au-delà du GHz. L'étude, la réalisation et l'optimisation de ce genre de dispositifs pourrait présenter un intérêt majeur d'un point de vue théorique et expérimental. L'approche théorique de la propagation des SAW dans les CP intégrant des sources et des détecteurs doit être plus approfondie, comme les approches expérimentales de caractérisation dans ce régime fréquentiel doivent être bien appréhendées.

Pour ce qui est des applications en basses fréquences, il serait intéressant d'entreprendre des études de nouvelles structures à périodicité tridimensionnelle, en se basant par exemple sur la structure CPRL présentée dans le chapitre 4. L'objectif dans un premier lieu serait de concevoir des CPRL permettant l'ouverture de très larges bandes interdites complètes, c'est-à-dire pour toutes les directions de propagation. Par ailleurs, vu l'utilisation systématique des élastomères dans les CPRL, l'aspect viscoélastique doit être obligatoirement introduit pour avoir une approche plus rigoureuse de leurs différents comportements. Dans un second lieu, il

serait intéressant d’étudier les propriétés "négatives" potentielles se rapportant aux métamatériaux. Pour y parvenir, un développement d’une méthode semi-analytique, par exemple, serait intéressant pour pouvoir déterminer les nouvelles propriétés physiques de ce genre de structure, en termes de constantes élastiques et densité effectives, vitesse de groupe effective …

Finalement, le calcul des structures de bandes complexes d'un CPRL pourrait nous fournir plus d'informations sur le mécanisme d'atténuation de l'onde acoustique au niveau des bandes interdites créées par le mécanisme de résonance locale. Un nouvel outil de calcul des modes évanescents basé plutôt sur les éléments finis serait un meilleur moyen de calculer ces modes.

Glossaire

AANR	...	All-Angle Negative Refraction
CP	...	Cristal phononique
CPRL	...	Cristal phononique à résonance locale
EDP	...	Equations aux Dérivées Partielles
EPWE	...	Extended Plane Wave Expansion
FDTD	...	Finite difference Time Domain
FEM	...	Finite Element Method
FFT	...	Fast Fourier Transform
IDT	...	Interdigital Transducer
KKR	...	Kohn-Korringa-Rostocker
MEB	...	Microscope Electronique à Balayage
MPACVD	...	Microwave Plasma Assisted Chemical Vapor Deposition
MST	...	Multiple Scattering Theory
PML	...	Perfectly Matched Layer
PWE	...	Plane Wave Expansion
PZT	...	Titano-Zirconate de Plomb (*Lead zirconate titanate*)
RL	...	Résonance Locale
SAW	...	Surface Acoustic Wave
SLDV	...	Scanning Laser Doppler Vibrometer
TMM	...	Transfer Matrix Method

Annexe A

Principe de décomposition en ondes planes (PWE)

Nous partons du système 2.8 présenté dans le chapitre 2, où on se ramène à résoudre le système suivant dans $U_{\vec{a}} = [0, a_x] \times [0, a_y] \times [0, a_z]$ qui constitue la cellule de périodicité du cristal phononique de la figure 2.1 :

$$\begin{cases} -\rho\omega^2\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{x,\vec{k}}(\vec{r})\right) = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(c_{11}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{x,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial x} + c_{12}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{y,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial y} + c_{12}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{z,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial z}\right) + \dfrac{\partial}{\partial y}\left(c_{44}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{x,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial y} + c_{44}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{y,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial x}\right) + \dfrac{\partial}{\partial z}\left(c_{44}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{x,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial z} + c_{44}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{z,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial x}\right) \\ -\rho\omega^2\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{y,\vec{k}}(\vec{r})\right) = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(c_{44}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{x,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial y} + c_{44}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{y,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial x}\right) + \dfrac{\partial}{\partial y}\left(c_{12}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{x,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial x} + c_{11}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{y,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial y} + c_{12}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{z,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial z}\right) + \dfrac{\partial}{\partial z}\left(c_{44}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{y,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial z} + c_{44}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{z,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial y}\right) \\ -\rho\omega^2\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{z,\vec{k}}(\vec{r})\right) = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(c_{44}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{x,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial z} + c_{44}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{z,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial x}\right) + \dfrac{\partial}{\partial y}\left(c_{44}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{y,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial z} + c_{44}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{z,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial y}\right) + \dfrac{\partial}{\partial z}\left(c_{12}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{x,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial x} + c_{12}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{y,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial y} + c_{11}\dfrac{\partial\left(e^{i\vec{k}\vec{r}}u_{z,\vec{k}}(\vec{r})\right)}{\partial z}\right) \end{cases} \quad \text{(A.1)}$$

On note $\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_p = \left(\vec{k}+\vec{G}\right)\vec{e}_p$ la composante du vecteur $\left(\vec{k}+\vec{G}\right)$ dans la $p^{\text{ème}}$ direction de l'espace, avec $p \in \{x; y; z\}$; par exemple :

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(u_{i,\vec{k}}e^{i\left(\vec{k}+\vec{G}\right)\vec{r}}\right) = \left(k_x + G_x\right)u_{i,\vec{k}}e^{i\left(\vec{k}+\vec{G}\right)\vec{r}} = \left(\vec{k}+\vec{G}\right)_x u_{i,\vec{k}}e^{i\left(\vec{k}+\vec{G}\right)\vec{r}}$$

$\underline{i}$ étant le nombre complexe vérifiant $\underline{i}^2 = -1$

Du fait de leur périodicité suivant les trois directions de l'espace, les fonctions constantes élastiques, densité du cristal et champ de déplacement $u_{i,\vec{k}}$ peuvent être décomposées dans la base exponentielle de Fourier, exprimée dans l'espace réciproque, comme suit :

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} \rho_{\vec{G}}\, e^{i\vec{G}\vec{r}}\ ,\ \ c_{ij}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} c_{ij,\vec{G}}\, e^{i\vec{G}\vec{r}} \ \text{ pour } (i,j) \in \{1;2;3;4;5;6\}^2 \qquad \text{(A.2)}$$

$$u_{i,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} u_{i,\vec{k},\vec{G}}\, e^{i\vec{G}\vec{r}} \ \text{ pour } i \in \{x; y; z\} \text{ et donc } V_{i,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} u_{i,\vec{k},\vec{G}}\, e^{i\left(\vec{G}+\vec{k}\right)\vec{r}} \qquad \text{(A.3)}$$

On commence par introduire la décomposition (A.3) du champs $V_{i,\vec{k}}$ dans les équations du système (A.1). Ainsi, pour la première équation de ce même système, on a :

$$-\rho\omega^2\sum_{\vec{G}}u_{x,\vec{k},\vec{G}}e^{i\left(\vec{G}+\vec{k}\right)\vec{r}}=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial}{\partial x}\left(c_{11}\dfrac{\partial}{\partial x}\left(\sum_{\vec{G}}u_{x,\vec{k},\vec{G}}e^{i\left(\vec{G}+\vec{k}\right)\vec{r}}\right)+c_{12}\dfrac{\partial}{\partial y}\left(\sum_{\vec{G}}u_{y,\vec{k},\vec{G}}e^{i\left(\vec{G}+\vec{k}\right)\vec{r}}\right)+c_{12}\dfrac{\partial}{\partial z}\left(\sum_{\vec{G}}u_{z,\vec{k},\vec{G}}e^{i\left(\vec{G}+\vec{k}\right)\vec{r}}\right)\right)\\+\dfrac{\partial}{\partial y}\left(c_{44}\dfrac{\partial}{\partial y}\left(\sum_{\vec{G}}u_{x,\vec{k},\vec{G}}e^{i\left(\vec{G}+\vec{k}\right)\vec{r}}\right)+c_{44}\dfrac{\partial}{\partial x}\left(\sum_{\vec{G}}u_{y,\vec{k},\vec{G}}e^{i\left(\vec{G}+\vec{k}\right)\vec{r}}\right)\right)\\+\dfrac{\partial}{\partial z}\left(c_{44}\dfrac{\partial}{\partial z}\left(\sum_{\vec{G}}u_{x,\vec{k},\vec{G}}e^{i\left(\vec{G}+\vec{k}\right)\vec{r}}\right)+c_{44}\dfrac{\partial}{\partial x}\left(\sum_{\vec{G}}u_{z,\vec{k},\vec{G}}e^{i\left(\vec{G}+\vec{k}\right)\vec{r}}\right)\right)\end{bmatrix}$$

d'où

$$-\rho\omega^2\sum_{\vec{G}}u_{x,\vec{k},\vec{G}}e^{i\left(\vec{G}+\vec{k}\right)\vec{r}}=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial}{\partial x}\left(c_{11}\sum_{\vec{G}}\underline{i}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_x u_{x,\vec{k},\vec{G}}e^{\underline{i}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)\vec{r}}+c_{12}\sum_{\vec{G}}\underline{i}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_y u_{y,\vec{k},\vec{G}}e^{\underline{i}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)\vec{r}}+c_{12}\sum_{\vec{G}}\underline{i}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_z u_{z,\vec{k},\vec{G}}e^{\underline{i}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)\vec{r}}\right)\\+\dfrac{\partial}{\partial y}\left(c_{44}\sum_{\vec{G}}\underline{i}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_y u_{x,\vec{k},\vec{G}}e^{\underline{i}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)\vec{r}}+c_{44}\sum_{\vec{G}}\underline{i}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_x u_{y,\vec{k},\vec{G}}e^{\underline{i}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)\vec{r}}\right)\\+\dfrac{\partial}{\partial z}\left(c_{44}\sum_{\vec{G}}\underline{i}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_z u_{x,\vec{k},\vec{G}}e^{\underline{i}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)\vec{r}}+c_{44}\sum_{\vec{G}}\underline{i}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_x u_{z,\vec{k},\vec{G}}e^{\underline{i}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)\vec{r}}\right)\end{bmatrix}$$

Puis, en introduisant les développements en ondes planes (A.2) des constantes élastiques et de la densité :

$$-\rho\omega^2\sum_{\vec{G},\vec{G}'}\rho_{\vec{G}'}u_{x,\vec{k},\vec{G}}e^{i\left(\vec{k}+\vec{G}+\vec{G}'\right)\vec{r}}=\sum_{\vec{G},\vec{G}'}\begin{bmatrix}\dfrac{\partial}{\partial x}\left(\underline{i}c_{11,\vec{G}'}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_x u_{x,\vec{k},\vec{G}}e^{\underline{i}\left(\vec{k}+\vec{G}+\vec{G}'\right)\vec{r}}+\underline{i}c_{12,\vec{G}'}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_y u_{y,\vec{k},\vec{G}}e^{\underline{i}\left(\vec{k}+\vec{G}+\vec{G}'\right)\vec{r}}+\underline{i}c_{12,\vec{G}'}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_z u_{z,\vec{k},\vec{G}}e^{\underline{i}\left(\vec{k}+\vec{G}+\vec{G}'\right)\vec{r}}\right)\\+\dfrac{\partial}{\partial y}\left(\underline{i}c_{44,\vec{G}'}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_y u_{x,\vec{k},\vec{G}}e^{\underline{i}\left(\vec{k}+\vec{G}+\vec{G}'\right)\vec{r}}+\underline{i}c_{44,\vec{G}'}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_x u_{y,\vec{k},\vec{G}}e^{\underline{i}\left(\vec{k}+\vec{G}+\vec{G}'\right)\vec{r}}\right)\\+\dfrac{\partial}{\partial z}\left(\underline{i}c_{44,\vec{G}'}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_z u_{x,\vec{k},\vec{G}}e^{\underline{i}\left(\vec{k}+\vec{G}+\vec{G}'\right)\vec{r}}+\underline{i}c_{44,\vec{G}'}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_x u_{z,\vec{k},\vec{G}}e^{\underline{i}\left(\vec{k}+\vec{G}+\vec{G}'\right)\vec{r}}\right)\end{bmatrix}$$

En dérivant l'exponentielle, avec élimination de $e^{j\vec{k}\vec{r}}$ qui est indépendant de la somme, on a :

$$\rho\omega^2\sum_{\vec{G},\vec{G}'}\rho_{\vec{G}'}u_{x,\vec{k},\vec{G}}e^{j\left(\vec{G}+\vec{G}'\right)\vec{r}}=\sum_{\vec{G},\vec{G}'}\begin{bmatrix}\left(\vec{k}+\vec{G}+\vec{G}'\right)_x\left(c_{11,\vec{G}'}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_x u_{x,\vec{k},\vec{G}}+c_{12,\vec{G}'}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_y u_{y,\vec{k},\vec{G}}+c_{12,\vec{G}'}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_z u_{z,\vec{k},\vec{G}}\right)\\+\left(\vec{k}+\vec{G}+\vec{G}'\right)_y\left(c_{44,\vec{G}'}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_y u_{x,\vec{k},\vec{G}}+c_{44,\vec{G}'}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_x u_{y,\vec{k},\vec{G}}\right)\\+\left(\vec{k}+\vec{G}+\vec{G}'\right)_z\left(c_{44,\vec{G}'}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_z u_{x,\vec{k},\vec{G}}+c_{44,\vec{G}'}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_x u_{z,\vec{k},\vec{G}}\right)\end{bmatrix}e^{j\left(\vec{G}+\vec{G}'\right)\vec{r}}$$

Enfin, on multiplie cette équation par $e^{-\underline{i}\vec{G}''\vec{r}}$ avec $\vec{G}''$ un vecteur du réseau réciproque, et on intègre sur le volume de la cellule :

$$\rho\omega^2\sum_{\vec{G},\vec{G}'}\rho_{\vec{G}'}u_{x,\vec{k},\vec{G}}\int e^{i\left(\vec{G}+\vec{G}'-\vec{G}''\right)\vec{r}}dr=\sum_{\vec{G},\vec{G}'}\left\{\begin{bmatrix}\left(\vec{k}+\vec{G}+\vec{G}'\right)_x\left(c_{11,\vec{G}'}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_x u_{x,\vec{k},\vec{G}}+c_{12,\vec{G}'}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_y u_{y,\vec{k},\vec{G}}+c_{12,\vec{G}'}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_z u_{z,\vec{k},\vec{G}}\right)\\+\left(\vec{k}+\vec{G}+\vec{G}'\right)_y\left(c_{44,\vec{G}'}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_y u_{x,\vec{k},\vec{G}}+c_{44,\vec{G}'}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_x u_{y,\vec{k},\vec{G}}\right)\\+\left(\vec{k}+\vec{G}+\vec{G}'\right)_z\left(c_{44,\vec{G}'}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_z u_{x,\vec{k},\vec{G}}+c_{44,\vec{G}'}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_x u_{z,\vec{k},\vec{G}}\right)\end{bmatrix}\int e^{\underline{i}\left(\vec{G}+\vec{G}'-\vec{G}''\right)\vec{r}}dr\right\}$$

Sachant que la valeur de $\int e^{i\left(\vec{G}+\vec{G}'-\vec{G}''\right)\vec{r}}\,dr$ vaut 0 si $\vec{G}''\neq\vec{G}+\vec{G}'$, la première équation du système (A.1) se ramène à :

$$\rho\omega^2\sum_{\vec{G}}\rho_{\vec{G}''-\vec{G}}u_{x,\vec{k},\vec{G}}=\sum_{\vec{G}}\begin{bmatrix}\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)_x\left(c_{11,\vec{G}''-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_x u_{x,\vec{k},\vec{G}}+c_{12,\vec{G}''-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_y u_{y,\vec{k},\vec{G}}+c_{12,\vec{G}''-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_z u_{z,\vec{k},\vec{G}}\right)\\+\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)_y\left(c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_y u_{x,\vec{k},\vec{G}}+c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_x u_{y,\vec{k},\vec{G}}\right)\\+\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)_z\left(c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_z u_{x,\vec{k},\vec{G}}+c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_x u_{z,\vec{k},\vec{G}}\right)\end{bmatrix} \quad (A.4)$$

De même pour les deux autres équations du système A.1, on aboutit à :

$$\rho\omega^2\sum_{\vec{G}}\rho_{\vec{G}''-\vec{G}}u_{y,\vec{k},\vec{G}}=\sum_{\vec{G}}\begin{bmatrix}\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)_x\left(c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_y u_{x,\vec{k},\vec{G}}+c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_x u_{y,\vec{k},\vec{G}}\right)\\+\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)_y\left(c_{12,\vec{G}''-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_x u_{x,\vec{k},\vec{G}}+c_{11,\vec{G}''-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_y u_{y,\vec{k},\vec{G}}+c_{12,\vec{G}''-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_z u_{z,\vec{k},\vec{G}}\right)\\+\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)_z\left(c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_z u_{y,\vec{k},\vec{G}}+c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_y u_{z,\vec{k},\vec{G}}\right)\end{bmatrix} \quad (A.5)$$

$$\rho\omega^2\sum_{\vec{G}}\rho_{\vec{G}''-\vec{G}}u_{z,\vec{k},\vec{G}}=\sum_{\vec{G}}\begin{bmatrix}+\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)_x\left(c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_z u_{x,\vec{k},\vec{G}}+c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_x u_{z,\vec{k},\vec{G}}\right)\\+\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)_y\left(c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_y u_{z,\vec{k},\vec{G}}+c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_z u_{y,\vec{k},\vec{G}}\right)\\+\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)_z\left(c_{12,\vec{G}''-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_x u_{x,\vec{k},\vec{G}}+c_{12,\vec{G}''-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_y u_{y,\vec{k},\vec{G}}+c_{11,\vec{G}''-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_z u_{z,\vec{k},\vec{G}}\right)\end{bmatrix} \quad (A.6)$$

Ces trois dernière équations (A.4), (A.5) et (A.6) sont valables quelle que soit la valeur de $\vec{G}$ dans l'espace réciproque. Finalement, celles-ci peuvent être regroupées sous forme d'un problème en valeurs propres *(eigenvalue problem)* comme suit :

$$\omega^2\begin{pmatrix}\rho_{\vec{G}''-\vec{G}} & 0 & 0\\ 0 & \rho_{\vec{G}''-\vec{G}} & 0\\ 0 & 0 & \rho_{\vec{G}''-\vec{G}}\end{pmatrix}\vec{U}_{\vec{G}}=\begin{pmatrix}B^{11}_{\vec{G},\vec{G}''} & B^{12}_{\vec{G},\vec{G}''} & B^{13}_{\vec{G},\vec{G}''}\\ B^{21}_{\vec{G},\vec{G}''} & B^{22}_{\vec{G},\vec{G}''} & B^{23}_{\vec{G},\vec{G}''}\\ B^{31}_{\vec{G},\vec{G}''} & B^{32}_{\vec{G},\vec{G}''} & B^{33}_{\vec{G},\vec{G}''}\end{pmatrix}\vec{U}_{\vec{G}} \qquad (A.7)$$

où :

$$B^{11}_{\vec{G},\vec{G}''}=c_{11,\vec{G}-\vec{G}'}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_x\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)_x+c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_y\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)_y+c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_z\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)_z$$

$$B^{12}_{\vec{G},\vec{G}''}=c_{12,\vec{G}''-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_y\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)_x+c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_x\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)_y$$

$$B^{13}_{\vec{G},\vec{G}''}=c_{12,\vec{G}''-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_z\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)_x+c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_x\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)_z$$

$$B^{21}_{\vec{G},\vec{G}''}=c_{44,\vec{G}''-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_y\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)_x+c_{12,\vec{G}''-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_x\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)_y$$

$$B^{22}_{\vec{G},\vec{G}"} = c_{44,\vec{G}"-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_x\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)_x + c_{11,\vec{G}"-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_y\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)_y + c_{44,\vec{G}"-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_z\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)_z$$

$$B^{23}_{\vec{G},\vec{G}"} = c_{12,\vec{G}"-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_z\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)_y + c_{44,\vec{G}"-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_y\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)_z$$

$$B^{31}_{\vec{G},\vec{G}"} = c_{44,\vec{G}"-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_z\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)_x + c_{12,\vec{G}"-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_x\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)_z$$

$$B^{32}_{\vec{G},\vec{G}"} = c_{44,\vec{G}"-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_z\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)_y + c_{12,\vec{G}"-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_y\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)_z$$

$$B^{33}_{\vec{G},\vec{G}"} = \left[c_{44,\vec{G}"-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_x\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)_x + c_{44,\vec{G}"-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_y\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)_y + c_{11,\vec{G}"-\vec{G}}\left(\vec{k}+\vec{G}\right)_z\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)_z\right]$$

$B^{ij}_{\vec{G},\vec{G}"}$ sont des matrices fonctions de $\vec{G}$ et $\vec{G}'$ et $\vec{k}$

$\vec{U}_{\vec{G}} = \begin{pmatrix} u_{x,\vec{k},\vec{G}} \\ u_{y,\vec{k},\vec{G}} \\ u_{z,\vec{k},\vec{G}} \end{pmatrix}$ est le vecteur propre associé à la valeur propre recherchée ω^2

Annexe B

Principe de la méthode FDTD

Nous partons du système d'équations régissant la propagation des ondes élastiques dans un milieu anisotrope par exemple :

$$\begin{cases} \rho \dfrac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = \dfrac{\partial T_1}{\partial x} + \dfrac{\partial T_6}{\partial y} + \dfrac{\partial T_5}{\partial z} \\ \rho \dfrac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} = \dfrac{\partial T_6}{\partial x} + \dfrac{\partial T_2}{\partial y} + \dfrac{\partial T_4}{\partial z} \\ \rho \dfrac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} = \dfrac{\partial T_5}{\partial x} + \dfrac{\partial T_4}{\partial y} + \dfrac{\partial T_3}{\partial z} \end{cases} \quad \text{(B.1)}$$

$$\text{avec} \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \\ T_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{22} & c_{23} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{23} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \partial u_x / \partial x \\ \partial u_y / \partial y \\ \partial u_z / \partial z \\ \partial u_y / \partial z + \partial u_z / \partial y \\ \partial u_x / \partial z + \partial u_z / \partial x \\ \partial u_y / \partial x + \partial u_x / \partial y \end{bmatrix} \quad \text{(B.2)}$$

La FDTD se base sur la décomposition de Taylor des dérivées partielles. Les systèmes d'équations (B.1) et (B.2) sous cette forme nous donnent 9 équations avec 9 fonctions inconnues, écrites sous forme de dérivées partielles spatiales premières. Si l'on introduit les équations des contraintes (B.2) dans celles du système (B.1), obtiendra certes un système de trois équations avec les trois fonctions inconnues composantes du champ de déplacement, mais écrites sous forme de dérivées partielles spatiales secondes. Il est donc avantageux de garder nos systèmes d'équations sous la forme de dérivées spatiales premières, à savoir celle composée des deux systèmes (B.1) et (B.2).

Avant de développer ces équations, on commence d'abord par construire deux discrétisations, l'une spatiale et l'autre temporelle, avec des espacements Δx , Δy et Δz (souvent pris égaux $\Delta S = \Delta x = \Delta y = \Delta z$) dans les trois directions de l'espace, et Δt pour la discrétisation temporelle. On exprime ensuite les dérivées partielles par des différences finies selon la décomposition de Taylor suivant cette discrétisation.

Pour une fonction champ de déplacement $u(x,y,z)$, le développement de Taylor entre les deux points (x_i, y_j, z_k) et $(x_i + \Delta x, y_j, z_k)$ à un instant t_n donné, stipule qu'il existe un réel $\theta_i \in]x_i, x_i + \Delta x[$ tel que :

$$u(x_i + \Delta x, y_j, z_k)\big|_{t_n} = u\big|_{x_i, y_j, z_k, t_n} + \Delta x \frac{\partial u}{\partial x}\Big|_{x_i, y_j, z_k, t_n} + \frac{(\Delta x)^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\Big|_{x_i, y_j, z_k, t_n} + \frac{(\Delta x)^3}{6}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\Big|_{\theta_i, y_j, z_k, t_n} \quad \text{(B.3)}$$

Les indices *i, j, k,* et *n* marquent la position spatiale et temporelle avec $x_i = i\Delta x$, $y_j = j\Delta y$, $z_k = k\Delta z$ et $t_n = n\Delta t$

De même pour le développement entre les deux points $(x_i - \Delta x, y_j, z_k)$ et (x_i, y_j, z_k), il existe $\theta'_i \in]x_i - \Delta x, x_i[$ tel que :

$$u(x_i - \Delta x, y_j, z_k)\big|_{t_n} = u\big|_{x_i, y_j, z_k, t_n} - \Delta x \frac{\partial u}{\partial x}\Big|_{x_i, y_j, z_k, t_n} + \frac{(\Delta x)^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\Big|_{x_i, y_j, z_k, t_n} - \frac{(\Delta x)^3}{6}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\Big|_{\theta'_i, y_j, z_k, t_n} \quad \text{(B.4)}$$

En soustrayant les deux équations (B.3) et (B.4), on montre que :

$u(x_i + \Delta x, y_j, z_k)\big|_{t_n} - u(x_i - \Delta x, y_j, z_k)\big|_{t_n} = 2\Delta x \frac{\partial u}{\partial x}\Big|_{x_i, y_j, z_k, t_n} + O\left[(\Delta x)^3\right]$, avec le terme d'erreur restant $O\left[(\Delta x)^3\right]$ regroupant les constantes θ_i et θ'_i.

On a ainsi :

$$\frac{\partial u}{\partial x}\Big|_{x_i, y_j, z_k, t_n} = \frac{u(x_i + \Delta x, y_j, z_k)\big|_{t_n} - u(x_i - \Delta x, y_j, z_k)\big|_{t_n}}{2\Delta x} + O\left[(\Delta x)^2\right] \quad \text{(B.5)}$$

Dans ce qui suivra, et pour des raisons de simplification, on notera $u^n_{i,j,k} = u(x_i, y_j, z_k)\big|_{t_n}$.

La relation (B.5) peut alors être écrite avec la nouvelle notation :

$$\frac{\partial u^n_{i,j,k}}{\partial x} = \frac{u^n_{i+1,j,k} - u^n_{i-1,j,k}}{2\Delta x} + O\left[(\Delta x)^2\right] \quad \text{(B.6)}$$

De même, le développement de Taylor dans les deux autres directions Y et Z de l'espace sont

$$\frac{\partial u^n_{i,j,k}}{\partial y} = \frac{u^n_{i,j+1,k} - u^n_{i,j-1,k}}{2\Delta y} + O\left[(\Delta y)^2\right] \quad \text{(B.7)}$$

$$\frac{\partial u^n_{i,j,k}}{\partial z} = \frac{u^n_{i,j,k+1} - u^n_{i,j,k-1}}{2\Delta z} + O\left[(\Delta z)^2\right] \quad \text{(B.8)}$$

En ce qui concerne la dérivée seconde temporelle du champ de déplacement, on procède comme dans le cas du développement spatial mais en faisant une sommation au lieu d'une soustraction entre les deux points $(t_n + \Delta t, x_i, y_j, z_k)$ et $(t_n - \Delta t, x_i, y_j, z_k)$

On a donc l'existence de $\tau \in]t, t+\Delta t[$ $\tau' \in]t-\Delta t, t[$ tel que :

$$u(t_n+\Delta t)\Big|_{x_i,y_j,z_k} = u\Big|_{x_i,y_j,z_k,t_n} + \Delta t \frac{\partial u}{\partial x}\Big|_{x_i,y_j,z_k,t_n} + \frac{(\Delta t)^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\Big|_{x_i,y_j,z_k,t_n} + \frac{(\Delta t)^3}{6}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\Big|_{x_i,y_j,z_k,t_n} + \frac{(\Delta t)^4}{24}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\Big|_{x_i,y_j,z_k,\tau}$$

et

$$u(t_n-\Delta t)\Big|_{x_i,y_j,z_k} = u\Big|_{x_i,y_j,z_k,t_n} - \Delta t \frac{\partial u}{\partial x}\Big|_{x_i,y_j,z_k,t_n} + \frac{(\Delta t)^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\Big|_{x_i,y_j,z_k,t_n} - \frac{(\Delta t)^3}{6}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\Big|_{x_i,y_j,z_k,t_n} + \frac{(\Delta t)^4}{24}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\Big|_{x_i,y_j,z_k,\tau'}$$

En sommant ces deux dernières relations on obtient :

$$u(t_n+\Delta t)\Big|_{x_i,y_j,z_k} + u(t_n-\Delta t)\Big|_{x_i,y_j,z_k} = 2u\Big|_{x_i,y_j,z_k,t_n} + (\Delta t)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\Big|_{x_i,y_j,z_k,t_n} + O\left[(\Delta t)^4\right]$$

$O\left[(\Delta t)^4\right]$ étant le terme d'erreur regroupant les deux constantes τ et τ'. D'où :

$$\frac{\partial^2 u^n_{i,j,k}}{\partial t^2} = \frac{u^{n+1}_{i,j,k} - 2u^n_{i,j,k} + u^{n-1}_{i,j,k}}{(\Delta t)^2} + O\left[(\Delta t)^2\right] \qquad \text{(B.9)}$$

L'étape suivante consiste à appliquer les développements spatiotemporels (B.6), (B.7), (B.8) et (B.9) aux équations élastiques (B.1) et (B.2). Nous adopterons pour cela le développement proposé par Hsieh *et al*[1] qui se fait suivant un schéma de discrétisation spatiale bien précis, et dont les unités de discrétisation adoptées sont $\Delta x/2$, $\Delta y/2$ et $\Delta z/2$ pour le calcul des champs de déplacement et des contraintes, chacune en fonction des autres. Les indices *i*, *j* et *k* deviennent ainsi des demi entiers.

Le système d'équations (B.1) peut être écrit sous la forme suivante en négligeant les termes d'erreur :

$$\rho \frac{u_x\Big|^{n+1}_{i+1/2,j,k} - 2u_x\Big|^{n}_{i+1/2,j,k} + u_x\Big|^{n-1}_{i+1/2,j,k}}{(\Delta t)^2} = \frac{T_1\Big|^{n}_{i+1,j,k} - T_1\Big|^{n}_{i,j,k}}{\Delta x} + \frac{T_6\Big|^{n}_{i+1/2,j+1/2,k} - T_6\Big|^{n}_{i+1/2,j-1/2,k}}{\Delta y} + \frac{T_5\Big|^{n}_{i+1/2,j,k+1/2} - T_5\Big|^{n}_{i+1/2,j,k-1/2}}{\Delta z}$$

ce qui donne :

$$u_x\Big|^{n+1}_{i+1/2,j,k} = 2u_x\Big|^{n}_{i+1/2,j,k} - u_x\Big|^{n-1}_{i+1/2,j,k} + \frac{(\Delta t)^2}{\rho}\left(\begin{array}{c} \dfrac{T_1\Big|^{n}_{i+1,j,k} - T_1\Big|^{n}_{i,j,k}}{\Delta x} + \dfrac{T_6\Big|^{n}_{i+1/2,j+1/2,k} - T_6\Big|^{n}_{i+1/2,j-1/2,k}}{\Delta y} \\ + \dfrac{T_5\Big|^{n}_{i+1/2,j,k+1/2} - T_5\Big|^{n}_{i+1/2,j,k-1/2}}{\Delta z} \end{array}\right) \qquad \text{(B.10.a)}$$

[1] P-F. Heisch, T-T. Wu, and J-H Sun, Trans. Ultrason. Ferro- electr. Freq. Control **53**, 148 (2006)

De même, on a :

$$u_y\Big|_{i,j+1/2,k}^{n+1} = 2u_y\Big|_{i,j+1/2,k}^{n} - u_y\Big|_{i,j+1/2,k}^{n-1} + \frac{(\Delta t)^2}{\rho}\left(\begin{array}{c}\dfrac{T_6\Big|_{i+1/2,j+1/2,k}^{n} - T_6\Big|_{i-1/2,j+1/2,k}^{n}}{\Delta x} + \dfrac{T_2\Big|_{i,j+1,k}^{n} - T_2\Big|_{i,j,k}^{n}}{\Delta y} \\ + \dfrac{T_4\Big|_{i,j+1/2,k+1/2}^{n} - T_4\Big|_{i,j+1/2,k-1/2}^{n}}{\Delta z}\end{array}\right) \quad \text{(B.10.b)}$$

$$u_z\Big|_{i,j,k+1/2}^{n+1} = 2u_z\Big|_{i,j,k+1/2}^{n} - u_z\Big|_{i,j,k+1/2}^{n-1} + \frac{(\Delta t)^2}{\rho}\left(\begin{array}{c}\dfrac{T_5\Big|_{i+1/2,j,k+1/2}^{n} - T_5\Big|_{i-1/2,j,k+1/2}^{n}}{\Delta x} + \dfrac{T_4\Big|_{i,j+1/2,k+1/2}^{n} - T_4\Big|_{i,j-1/2,k+1/2}^{n}}{\Delta y} \\ + \dfrac{T_3\Big|_{i,j,k+1}^{n} - T_3\Big|_{i,j,k}^{n}}{\Delta z}\end{array}\right) \quad \text{(B.10.c)}$$

avec

$$T_1\Big|_{i,j,k}^{n} = C_{11}\frac{u_x\Big|_{i+1/2,j,k}^{n} - u_x\Big|_{i-1/2,j,k}^{n}}{\Delta x} + C_{12}\frac{u_y\Big|_{i,j+1/2,k}^{n} - u_y\Big|_{i,j-1/2,k}^{n}}{\Delta y} + C_{13}\frac{u_z\Big|_{i+1/2,j,k}^{n} - u_z\Big|_{i-1/2,j,k}^{n}}{\Delta z} \quad \text{(B.11.a)}$$

$$T_2\Big|_{i,j,k}^{n} = C_{12}\frac{u_x\Big|_{i+1/2,j,k}^{n} - u_x\Big|_{i-1/2,j,k}^{n}}{\Delta x} + C_{22}\frac{u_y\Big|_{i,j+1/2,k}^{n} - u_y\Big|_{i,j-1/2,k}^{n}}{\Delta y} + C_{23}\frac{u_z\Big|_{i,j,k+1/2}^{n} - u_z\Big|_{i,j,k-1/2}^{n}}{\Delta z} \quad \text{(B.11.b)}$$

$$T_3\Big|_{i,j,k}^{n} = C_{13}\frac{u_x\Big|_{i+1/2,j,k}^{n} - u_x\Big|_{i-1/2,j,k}^{n}}{\Delta x} + C_{23}\frac{u_y\Big|_{i,j+1/2,k}^{n} - u_y\Big|_{i,j-1/2,k}^{n}}{\Delta y} + C_{33}\frac{u_x\Big|_{i+1/2,j,k}^{n} - u_x\Big|_{i-1/2,j,k}^{n}}{\Delta z} \quad \text{(B.11.c)}$$

$$T_4\Big|_{i,j+1/2,k+1/2}^{n} = C_{44}\left(\frac{u_z\Big|_{i,j+1,k+1/2}^{n} - u_y\Big|_{i,j,k+1/2}^{n}}{\Delta y} + \frac{u_y\Big|_{i,j+1/2,k+1}^{n} - u_y\Big|_{i,j+1/2,k}^{n}}{\Delta z}\right) \quad \text{(B.11.d)}$$

$$T_5\Big|_{i+1/2,j,k+1/2}^{n} = C_{55}\left(\frac{u_z\Big|_{i+1,j,k+1/2}^{n} - u_y\Big|_{i,j,k+1/2}^{n}}{\Delta x} + \frac{u_x\Big|_{i+1/2,j,k+1}^{n} - u_x\Big|_{i+1/2,j,k}^{n}}{\Delta z}\right) \quad \text{(B.11.e)}$$

$$T_6\Big|_{i+1/2,j+1/2,k}^{n} = C_{66}\left(\frac{u_y\Big|_{i+1,j+1/2,k}^{n} - u_y\Big|_{i,j+1/2,k}^{n}}{\Delta x} + \frac{u_x\Big|_{i+1/2,j+1,k}^{n} - u_x\Big|_{i+1/2,j,k}^{n}}{\Delta y}\right) \quad \text{(B.11.f)}$$

En examinant les équations (B.10), on remarque que le calcul du champ de déplacement à l'instant t_{n+1} nécessite la connaissance du champ de déplacement des deux instants précédents t_n et t_{n-1}, ainsi que des contraintes à l'instants t_n. De même pour les équations (B.11), les contraintes à l'instant t_n sont calculées à partir des valeurs du champ de déplacement déterminées précédemment au même instant t_n. De ce fait, et suivant cet ordre de calcul, en chaque instant, les champs de déplacement et les contraintes sont calculés dans tout le domaine d'étude, et plus précisément au niveau des nœuds de la subdivision spatiale du cristal phononique.

Dans l'étude de propagation d'ondes dans les milieux non homogènes, la densité et les constantes élastiques dépendent de la position spatiale. Elles sont ainsi bien définies en chaque point de la subdivision spatiale, ce qui rend la FDTD très utilisée pour traiter presque

n’importe quel type de cristal phononique solide/solide ou solide/fluide sans avoir de problème d'interface. Il est à noter aussi que les forces extérieures appliquées sur la structures ne sont pas mentionnées dans les équations (B.10) puisque ces dernières sont exprimées pour tout le domaine étudié. Dans le suivi d’une propagation d’onde, l’excitation de cette dernière se fait au moyen de forces extérieures appliquées sur un ou plusieurs endroits précis dans le domaine d'étude subdivisé, ce qui nécessite l’ajout de terme de force extérieure au niveau des équations (B.10) aux points de la subdivision spatiale concernés.

La discrétisation spatiotemporelle joue un rôle important dans la FDTD pour un meilleur calcul des propriétés des cristaux phononiques. Plus les éléments de subdivision sont petits, meilleure est la convergence de la méthode. Le cas idéal est d’avoir des éléments de subdivision infiniment petits. Le choix de ces éléments s'opère en prenant en compte les propriétés élastiques du milieu étudié, notamment la vitesse de propagation de l'onde. Par exemple, pour une onde longitudinale se propageant avec une fréquence donnée, sa longueur d'onde λ est fixée par la vitesse longitudinale. La taille des éléments spatiaux de décomposition ΔS doit être bien inférieure à λ. Ainsi, la valeur du rapport $\frac{\lambda}{\Delta S}$ est souvent prise entre 10 et 20. En ce qui concerne la décomposition temporelle Δt, elle est choisie en fonction de la vitesse de l'onde étudiée et la discrétisation spatiale ΔS. Pour assurer la stabilité de la FDTD, Δt doit être inférieure au temps nécessaire à l'onde pour parcourir la distance ΔS. Dans le cas contraire, on ne peut pas suivre l'évolution de l'onde dans le cristal phononique, et les calculs se dispersent au cours des itérations temporelles. La condition de stabilité de la FDTD est alors $\Delta t \leq \frac{\Delta S}{C}$ où C est la vitesse de l'onde.

Sachant que ces éléments spatiotemporels sont fixés dès le début, il est connu que plus les fréquences étudiées sont élevées, petites sont les longueurs d'ondes, ce qui peut poser des problèmes de convergence dans ce cas. Une décomposition spatiotemporelle plus fine est donc nécessaire pour l'étude en régime hautes fréquences. De plus, les vitesses de propagation varient selon le mode qui se propage dans le milieu, ce qui peut induire des instabilités dans le calcul. Tous ces paramètres doivent être pris en compte lors de la discrétisation spatiotemporelle. Cette dernière doit prendre en considération les attentes de l'étude souhaitée en termes de modes vibratoires recherchés.

Annexe C

Domaine absorbant PML (*Perfectly mached layer*)

En FDTD, la PML s'exprime en équations impliquant le champ de déplacement ainsi que les contraintes associées. Partant des équations de mouvement (B.1) et (B.2) mentionnées dans l'annexe B, on commence d'abord par reformuler celles-ci en écrivant :

$$u_i = u_i(x, y, z)e^{i\omega t}$$

Ensuite, des coordonnés étendues, appelées *"Stretch coordinats"*, sont définies afin de mettre en place la condition numérique de décroissance vers zéro de l'amplitude du champ élastique. Ces coordonnés étendues sont définies suivant les trois directions de l'espace cartésien par :

$$e_j = a_j + \underline{i}\frac{\Omega_j}{\omega}$$

avec $j \in \{x, y, z\}$ et $\underline{i}$ étant le nombre complexe tel que $\underline{i}^2 = -1$

La partie réelle a_j est choisie égale à 1 afin de définir une condition de non réflexion de l'onde à l'interface, alors que la partie imaginaire $\frac{\Omega_j}{\omega}$ est reliée à la fréquence de l'onde avec un coefficient d'atténuation Ω_j.

Les équations (B.1) et (B.2) deviennent ainsi :

$$\begin{cases} -\rho\omega^2 u_x = \frac{1}{e_x}\frac{\partial T_1}{\partial x} + \frac{1}{e_y}\frac{\partial T_6}{\partial y} + \frac{1}{e_z}\frac{\partial T_5}{\partial z} \\ -\rho\omega^2 u_y = \frac{1}{e_x}\frac{\partial T_6}{\partial x} + \frac{1}{e_y}\frac{\partial T_2}{\partial y} + \frac{1}{e_z}\frac{\partial T_4}{\partial z} \\ -\rho\omega^2 u_z = \frac{1}{e_x}\frac{\partial T_5}{\partial x} + \frac{1}{e_y}\frac{\partial T_4}{\partial y} + \frac{1}{e_z}\frac{\partial T_3}{\partial z} \end{cases}$$

$$T_1 = c_{11}\frac{1}{e_x}\frac{\partial u_x}{\partial x} + c_{12}\frac{1}{e_y}\frac{\partial u_y}{\partial y} + c_{13}\frac{1}{e_z}\frac{\partial u_z}{\partial z}, \qquad T_4 = c_{44}\left(\frac{1}{e_y}\frac{\partial u_z}{\partial y} + \frac{1}{e_z}\frac{\partial u_y}{\partial z}\right)$$

$$T_2 = c_{12}\frac{1}{e_x}\frac{\partial u_x}{\partial x} + c_{22}\frac{1}{e_y}\frac{\partial u_y}{\partial y} + c_{23}\frac{1}{e_z}\frac{\partial u_z}{\partial z}, \qquad T_5 = c_{55}\left(\frac{1}{e_x}\frac{\partial u_z}{\partial x} + \frac{1}{e_z}\frac{\partial u_x}{\partial z}\right)$$

$$T_3 = c_{13}\frac{1}{e_x}\frac{\partial u_x}{\partial x} + c_{23}\frac{1}{e_y}\frac{\partial u_y}{\partial y} + c_{33}\frac{1}{e_z}\frac{\partial u_z}{\partial z}, \qquad T_6 = c_{66}\left(\frac{1}{e_x}\frac{\partial u_y}{\partial x} + \frac{1}{e_y}\frac{\partial u_x}{\partial y}\right)$$

Ce système, composé de 9 équations à 9 inconnues, est enfin ramené sous forme temporelle en décomposant chacune des inconnues en trois composantes :

$$u_J = u_{j,x} + u_{j,y} + u_{j,z}$$

et

$$T_k = T_{k,x} + T_{k,y} + T_{k,z},$$

avec $j \in \{x, y, z\}$ et $k \in \{1,...,6\}$.

Le nouveau système d'équations contient finalement 27 équations différentielles à 27 inconnues :

$$\rho \frac{\partial^2 u_{j,m}}{\partial t^2} + \rho \Omega_m \frac{\partial u_{j,m}}{\partial t} = \sum_k \frac{\partial T_{jk}}{\partial x_k}$$

et

$$\rho \frac{\partial T_{jk,m}}{\partial t} + \rho \Omega_m T_{jk,m} = \sum_{p,l} C_{jkpl} \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_{p,l}}{\partial t} \delta_{ml} + \frac{\partial u_{l,p}}{\partial t} \delta_{mp} \right)$$

où δ_{ml} est la fonction Dirac valant 1 si $m = l$ et 0 sinon.

Annexe D

Procédé de fabrication des échantillons CPRL

I. Enrésinement

Après une étape de nettoyage du substrat, deux couches de résines de natures différentes sont étalées sur la surface du diamant :

- Première couche : constituée d'un copolymère nommé PMMA/MA composé de méthyle méthacrylate et d'acide méthacrylique dissout dans un mélange de 1-methoxy-2-propanol.
- Deuxième couche : constituée d'un polymère appelé PMMA qui se compose de méthyle méthacrylate dissout dans du lactate d'éthyle.

Ces deux types de résines sont positivement sensibles aux faisceaux d'électrons, et sont industriellement fournis par la société Allresist pour des applications de lithographie électronique[2]. La première couche PMMA/MA est étalée en premier lieu sur le substrat par *"spin coating"*. Un recuit de résine est effectué à 180°C pendant 5 minutes. La deuxième résine PMMA est ensuite étalée sur la première résine en subissant le même type de recuit par la suite. L'étalement des deux résines est réalisé au moyen de la tournette "Spin150" avec une accélération de 1000tours/minutes/seconde et une vitesse de 1000tours/minute pendant 90 secondes. Avec ces derniers paramètres, l'épaisseur atteinte pour la première couche est de l'ordre de 450nm alors que celle de la deuxième couche est de 100nm. Cette dernière couche a un rôle de "casquette" qui permet de faciliter la dissolution de l'ensemble des deux résines dans l'étape finale de ce procédé que nous verrons par la suite.

II. Lithographie électronique

Après l'enrésinement du substrat, et grâce au faisceau d'électrons issu de la lithographie électronique, le système des deux résines est irradié en dessinant des motifs circulaires de diamètre 0.6µm suivant une périodicité de 1µm dans les deux directions de l'espaces. Les motifs circulaires irradiés sur la résine constituent les endroits où se situeront les cylindres d'aluminium sur le substrat. Une fois la cartographie du cristal phononique réalisée par lithographie électronique, la résine subit ensuite une étape de développement.

[2] http://www.allresist.de/wEnglish/index.php

III. Développement des couches de résines

L'irradiation des résines par lithographie électronique permet de casser les chaînes moléculaires des polymères constituant ces résines au niveau des cercles remplis dessinés par le faisceau d'électrons. Après cette étape, l'échantillon est ensuite attaqué par un développeur préparé en mélangeant 20ml de méthylisobutylcétone (MIBK : *Methyl isobutyl ketone*) et 30ml de l'isopropanol (IPA). Cette solution attaque les zones irradiées sur toute l'épaisseur des résines, ce qui permet d'y avoir des trous cylindriques.

IV. Evaporation de l'aluminium ou l'or

Une fois que les trous sont réalisés sur toute la profondeur des résines, nous procédons à un dépôt de 200nm d'aluminium ou d'or par évaporation sous vide sur la surface enrésinée de l'échantillon. Ceci permet de remplir ces trous par le métal jusqu'à une hauteur de 200nm. Puisque l'épaisseur totale des deux couches de résines est de l'ordre de 600nm, le remplissage des trous ne peut atteindre leur bord au niveau de la surface supérieure de la résine, ce qui facilitera ultérieurement la dissolution de la résine.

V. Dissolution de la résine (Liftoff)

Cette étape finale consiste à dissoudre les résines en mettant l'échantillon dans de l'acétone pendant quelques heures (au moins trois heures). Cette opération permet d'enlever tout le dépôt d'aluminium ou d'or réalisé sur la résine supérieure sauf au niveau des trous. Avec l'achèvement de cette étape, le cristal phononique est bien construit.