



HAL
open science

Cristaux phononiques aléatoires

Rock Akiki

► **To cite this version:**

Rock Akiki. Cristaux phononiques aléatoires. Acoustique [physics.class-ph]. Université de Lille, 2022. Français. NNT : 2022ULILN027 . tel-04032849

HAL Id: tel-04032849

<https://theses.hal.science/tel-04032849>

Submitted on 16 Mar 2023

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Thèse

Présentée par

Rock AKIKI

Pour obtenir le grade de

Docteur de l'Université de Lille

Discipline : Physique Génie électrique, électronique, photonique et systèmes.

Spécialité : Acoustique

Cristaux Phononiques aléatoires

Soutenue le 30/11/ 2022
devant le jury composé de :

Rapporteurs :

Vincent Laude, Directeur de recherche au CNRS, FEMTO ST Besançon, France.

Driss Bria, Professeur, Université Mohamed 1er, Oujda, Maroc.

Examineurs :

Olga Boyko, Maitresse de conférences, Sorbonne Université Paris, France.

Bernard Bonello, Directeur de Recherche CNRS, INSP Université Pierre et Marie Curie, Paris, France. **Président du jury**.

Invités :

Bahram Djafari-Rouhani, Professeur Emérite, Université de Lille, France.

Directeurs de thèse :

Yan Pennec, Professeur, Université de Lille, France.

Eric Lheurette, Professeur, Université de Lille, France.

Remerciements

Cette thèse a été effectuée au sein de l'équipe EPHONI et de l'équipe DOME de l'institut d'électronique, Microélectronique et Nanotechnologie (IEMN) de Lille.

Je tiens à remercier la direction de l'université de Lille et la direction de l'école doctorale SPI (ancien) edengsys (nouveau) pour le financement de ce travail.

Je commence par remercier, mes directeurs de thèse M. Yan PENNEC Vice Doyen Recherche à l'université de Lille et M. Eric LHEURETTE Professeur à l'université de Lille, pour leur encadrement, leur suivi et leur temps. Je tiens aussi à les remercier pour leur patience et leur gentillesse.

De même je remercie professeur Bahram DJAFARI-ROUHANI, pour son soutien infini durant la thèse.

Je remercie les équipes EPHONI et DOME pour leur accueil chaleureux, pour les discussions intéressantes et leurs aides durant ma thèse.

Je remercie les membres de jury de ma thèse d'avoir accepté l'évaluation de ce travail, **Vincent Laude**, Directeur de recherche au CNRS, FEMTO ST Besancon, France, **Driss Bria**, Professeur, Université Mohamed 1er, Oujda, Maroc, **Olga Boyko**, Maitresse de conférences, Sorbonne Université Paris, France, **Bernard Bonello**, Directeur de Recherche CNRS, INSP Université Pierre et Marie Curie, Paris, France.

Un remerciement bien particulier s'adresse à M. Laurent CARPENTIER Maître de conférences à l'université de Lille, pour sa présence et son soutien, ses références et les discussions à propos des fractales. Je remercie en particulier Gaëtan LEVEQUE Professeur à l'université de Lille et Leonard DOBRZYNSKI Directeur de recherches CNRS à l'université de Lille pour leur support technique et leur encouragement.

De même je remercie particulièrement M. Bernard Bonello et M. Thibault Deletang pour les expériences et la précision de leur remarques et avis scientifiques.

A la fin je remercie Dieu, mes ami.e.s et ma famille pour leur support moral illimité et leur présence continue durant ma thèse.

Introduction générale

En 1987 une nouvelle discipline de la physique est apparue à travers l'étude des cristaux phononiques. Cette discipline, développée en parallèle des cristaux photoniques pour l'optique, repose sur les excitations des phonons. Le couplage des phonons et de photons a permis quelques années plus tard de conceptualiser les cristaux phononiques, qui présentent les propriétés physiques des deux types d'onde dans une même structure. Ce travail s'intéresse particulièrement aux cristaux phononiques, cristaux artificiels dont les propriétés physiques peuvent être modulées par la nature et/ou la géométrie de leurs composants. Les cristaux phononiques, comme les cristaux photoniques, sont utilisés pour manipuler la propagation des ondes, mécaniques pour les cristaux phononiques et électromagnétiques pour les cristaux photoniques. Plusieurs applications sont alors démontrées, basées pour la plupart sur la physique du solide, comme la présence de défauts pour le guidage ou le confinement des ondes. D'autres applications sont alors mises en évidence, telles les filtres audibles, les diodes acoustiques ou encore le contrôle des transferts thermiques et l'optomécanique pour ce qui est des interactions multiphysiques. Ces manipulations prennent naissance avec les bandes interdites dans les cristaux périodiques de dimension équivalente à la longueur d'onde, maintenant largement étudiés et maîtrisés en fonction des géométries et grandeurs physiques des inclusions répétitives insérées dans la matrice. Les débuts des années 2000, les métamatériaux acoustiques ouvrent de nouvelles perspectives, basées sur le concept physique de milieu effectif aux grandes longueurs d'onde. L'origine des métamatériaux acoustiques s'appuie alors sur le concept physique de la résonance propre des inclusions et offrent ainsi de nouvelles applications comme la réfraction négative, le cloaking ou l'hyperfocalisation.

Ce travail est une première approche sur l'effet du désordre dans des métamatériaux acoustiques constitués de cylindres déposés sur un substrat semi infini. Pour cela, ce rapport de thèse est organisé en quatre chapitres.

Le chapitre I présente une introduction sur les développements des cristaux phononiques et reprend les lois des milieux continus, les lois d'élasticité, la théorie des tenseurs de contraintes et déformations et les différents types d'ondes.

Dans le chapitre II, nous présentons la géométrie du métamatériau étudié tout au long de ce travail, formé de cylindres déposés sur un substrat semi infini. Les effets des matériaux et de la géométrie

constitutifs des cylindres et de la surface seront étudiés. Ce chapitre permet d'une part d'ouvrir vers les structures favorables aux excitations à la fois élastique et plasmonique, permettant de concevoir le principe du couplage plasmome mécanique. D'autre part, il met en évidence l'effet de couplage élastique entre piliers à partir du mode de compression.

Le chapitre III s'appuie sur le modèle du chapitre II dans lequel le pilier en Aluminium est déposé sur un substrat semi-infini de silicium. Cette géométrie présente l'avantage de sa simplicité et de la possibilité de réalisation expérimentale. Dans ce chapitre, on étudie en premier lieu l'interaction entre 2 piliers d'Al avant de l'étendre à la propagation le long d'une chaîne constituée de plusieurs piliers. Différentes situations sont envisagées, à la fois sur la forme des chaînes de pilier, la position de la source, la distribution périodique ou aléatoire des piliers.

Enfin, le chapitre IV développe une méthode analytique basée sur le formalisme des fonctions de Green. Les méthodes analytiques et numériques par éléments finis sont alors appliquées à des distributions périodiques, hyperuniformes et aléatoires de piliers déposées sur la surface.

Publications :

(1) Noual, A.; Akiki, R.; Pennec, Y.; El Boudouti, E. H.; Djafari-Rouhani, B. Surface Acoustic Waves-Localized Plasmon Interaction in Pillared Phononic Crystals. *Phys. Rev. Applied* 2020, 13 (2), 024077. <https://doi.org/10.1103/PhysRevApplied.13.024077>.

(2) Duma, V.-F.; Dimb, A.-L. Exact Scan Patterns of Rotational Risley Prisms Obtained with a Graphical Method: Multi-Parameter Analysis and Design. *Applied Sciences* 2021, 11 (18), 8451. <https://doi.org/10.3390/app11188451>.

(3) Akiki, R.; Pennec, Y.; Noual, A.; Lheurette, E.; Bonello, B.; Rouhani, D. EVANESCENT COUPLING BETWEEN ALUMINUM PILLARS.

Table de matière

Chapitre I

I.1. Etat de l'art et historique.....	1
I.2. Cristaux phononiques.....	4
I.2.1. Bandes interdites dans les cristaux phononiques	6
I.2.2. Applications des cristaux phononiques.....	7
I.3. Théorie d'élasticité	9
I.3.1. Hypothèses de l'élasticité linéaire.....	11
I.3.2. Tenseur des contraintes et déformations.....	12
I.4. Equation du mouvement et modèle masse ressort.....	14
I.4.1. Equation du mouvement.....	14
I.4.2. Modèle masses-ressorts pour les surfaces structurées.....	15
I.5. Propagation des ondes élastiques.....	16
I.5.1. Les ondes de volume.....	16
I.5.2. Les ondes guidées.....	17
I.5.2.1. Les ondes de Rayleigh.....	17
I.5.2.2. Les ondes de Sezawa.....	17
I.5.2.3. Les ondes de Lamb.....	18
I.6. Méthodes de calculs numériques et analytiques.....	19
I.6.1. La méthode des éléments finis ou FEM	19
I.6.2. La méthode analytique et les fonctions de Green.....	21
I.7. Conclusion.....	22

Chapitre II

II.1. Introduction.....	27
II.2. Contexte.....	27
II.3. Génération des ondes de surfaces ou bien SAW (Surface Acoustic Waves).....	28
II.4. Choix des matériaux et paramètres géométriques.....	29
II.4.1. Paramètres géométriques.....	29
II.4.2. Choix des matériaux.....	30
II.4.3. Structure étudiée.....	33
II.5. Equation d'onde élastique.....	33
II.5.1. Maillage.....	35
II.5.2. Analyse fréquentielle.....	36
II.5.3. PML.....	37
II.6. Etude des matériaux.....	38
II.6.1. Courbes de dispersion - Etude des valeurs propres.....	38
II.6.1.1. Couche diélectrique en silice (SiO_2).....	38
II.6.1.2. Couche diélectrique en polymère.....	40
II.6.2. Analyse fréquentielle en transmission.....	43
II.6.3 Effet du métal.....	48
II.6.4. Effet des paramètres géométriques.....	50
II.6.4.1. Couche diélectrique en PMMA.....	50
II.6.4.2. Couche diélectrique en SiO_2	52
II.7 Discussion-conclusion.....	53

CHAPITRE III. Modèle Al-Si

III.1. Introduction.....	58
III.2. Contexte.....	58
III.3. Structure théorique.....	59
III.4. Courbes de dispersion, de résonance et de transmission.....	60
III.5. Interaction entre deux piliers d'aluminium.....	61
III.5.1. Modèle numérique.....	62
III.5.2. $\alpha = 0^\circ$	62
III.5.3. Effet de α	65
III.5.4. Résumé sur l'interaction entre deux piliers.....	66
III.6. Propagation de l'onde acoustique dans une chaîne de piliers.....	67
III.6.1. Modèles numériques pour la recherche de valeur propre et la transmission.....	67
III.6.2. Résultats.....	69
III.7. Conclusion.....	88

Chapitre IV

IV.1. Introduction.....	92
IV.2. Distributions.....	93
IV.2.1. Distributions périodiques.....	93
IV.2.2. Distributions aléatoires et hyperuniformes.....	94

IV.3. Modèle analytique.....	95
IV.3.1. Description du modèle analytique.....	96
IV.3.2. Codes développés pour la méthode analytique.....	100
IV.3.3. Comparaison entre la méthode analytique et la méthode FEM.....	103
IV.4. Distributions aléatoire et hyperuniforme.....	107
IV.5. Distribution périodique.....	108
IV.6. Distributions aléatoire et hyperuniforme.....	112
IV.7. Effet de l'écart type σ	117
IV.8. Conclusion.....	118

CHAPITRE I. Introduction et objectif

I.1. Etat de l'art et historique

Les cristaux phoXoniques (où X représente l'inconnue n ou t) sont des cristaux qui présentent à la fois deux types de bandes interdites, à savoir une pour les excitations électromagnétiques et l'autre pour les excitations acoustiques. Dans cette thèse nous allons traiter l'aspect phononique de ces cristaux.

Le développement des cristaux phononiques est une conséquence des travaux réalisés pour le développement des cristaux photoniques. Après comparaison de certains résultats obtenus en 1990 par Ho et al., il a été trouvé une équivalence entre les cristaux photoniques et les cristaux phononiques, les permittivités et les perméabilités devenant les constantes d'élasticités et les contraintes.

En 1987, deux équipes de recherches américaines [1,2] ont développé de façon indépendante le concept de « cristal photonique » lorsqu'elles ont étudié la suppression de l'émission spontanée de l'onde électromagnétique et la localisation photonique dans les matériaux diélectriques désordonnés. En raison du changement périodique de la constante diélectrique des matériaux, la diffusion de Bragg est générée lorsque les ondes électromagnétiques se propagent dans le cristal photonique. La propagation des ondes est interdite dans certaines plages de fréquences appelées bandes interdites photoniques. En 1990, les chercheurs du laboratoire Ames de l'Université de Iowa aux États-Unis, Ho et al. [3], ont vérifié l'existence de la bande interdite photonique dans le diamant.

Les cristaux phononiques sont composés d'arrangements périodiques de matériaux aux propriétés élastiques différentes. En 1992, Sigalas et Economou [4] ont prouvé théoriquement, pour la première fois, qu'une structure de réseau périodique tridimensionnel formée par incorporation de diffuseurs sphériques dans un matériel matriciel peut générer une bande interdite d'onde élastique. En 1993, Kushwaha et Al. [5] ont proposé le concept des cristaux phononiques en comparant la propagation des ondes électromagnétiques dans les cristaux photoniques à la propagation des ondes élastiques dans des milieux périodiques élastiques. Ils ont également obtenu

la bande interdite des ondes élastiques dans un milieu composite périodique formé par des tiges de nickel dans une matrice d'alliage d'aluminium, comme le montre la figure 1.

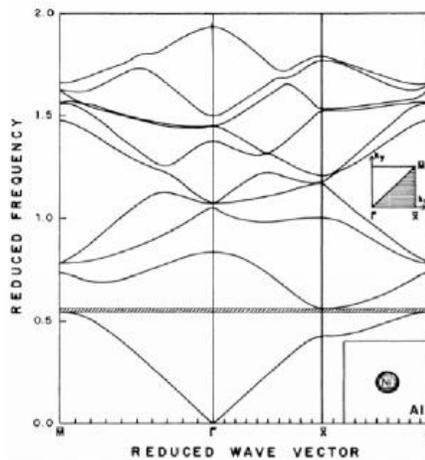
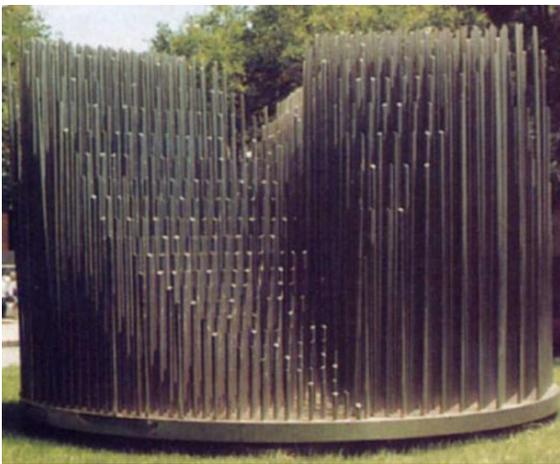
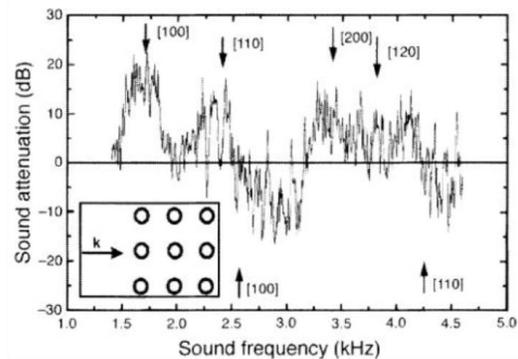


Figure 1 : Structures de bandes du composite périodique Ni/Al [5].

En 1995, Martinez-Sala et al. [6] ont mesuré les propriétés acoustiques d'une sculpture Madrilène constituée de tiges métalliques dans l'air, et ont démontré expérimentalement, pour la première fois, l'existence d'une bande phononique comme montré sur les figures 2 a et b.



(a)



(b)

Figure 2 : (a) Sculpture cinématique d'Eusebio Sempere. (b) Courbe d'atténuation en fonction de la fréquence de l'onde sonore. Le vecteur d'onde est dans la direction [100] comme indiqué dans l'encart.

En 2000, Liu et al. [7] ont travaillé sur des structures périodiques tridimensionnelles de billes de plomb recouvertes de caoutchouc. Ils ont montré que les gaps créés par cette structure se produisent

à la fréquence de résonance des sphères recouvertes par la couche de silicone (figure 3 a et b). Ce travail a prouvé que lorsque la longueur d'onde est largement plus grande que la constante de réseau du cristal phononique, une bande interdite peut être générée comme montré sur les figures 3 c et d. Ainsi de manière différente, ils ont pu dépasser les limitations du mécanisme de diffusion de Bragg, et montrer qu'on peut contrôler les larges longueurs d'onde par des petites structures.

Liu et al. [8] ont montré qu'on a deux types de bandes interdites : bande interdite de type résonance locale et bande interdite type Bragg. Le mécanisme de résonance locale proposé a ouvert de nouveaux horizons de recherches et d'études phononiques, connu sous le nom de métamatériaux acoustiques.

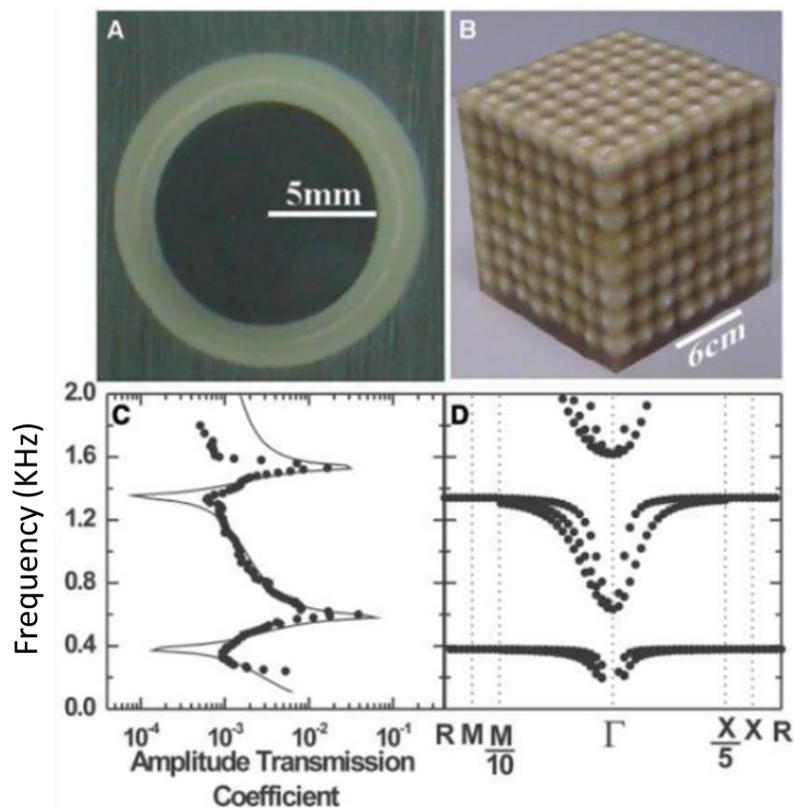


Figure 3 : (a) et (b) Sphères de plomb entourées d'une couche de caoutchouc arrangés selon un réseau cubique dans une matrice d'époxy. (c) Courbe représentant l'amplitude du coefficient de transmission. (d) Courbe de dispersion de la structure phononique.

Lorsqu'on désordonne une distribution de diffuseurs dans la structure périodique des cristaux phononiques, la périodicité d'origine sera détruite. Ces distributions randomisées peuvent changer les propriétés des cristaux phononiques en confinant ou en localisant des ondes dans des endroits bien spécifiques de la distribution, ces propriétés pouvant être utilisées pour créer de nouveaux guides d'ondes [9,10], de nouveaux filtres, des capteurs [11], des résonateurs à haute et basse fréquence [12, 13] et des multiplexeurs [14].

Cependant, les conceptions actuelles des guides d'ondes sont limitées aux guides d'ondes linéaires. Les recherches sur les guides d'ondes composés de chaînes de résonateurs couplés et dans des cristaux périodiques, hyper-uniformes et aléatoires sont bien limitées.

Dans cette thèse nous allons étudier les propriétés de propagation des ondes acoustiques /élastiques dans les cristaux phononiques, dans les guides d'ondes à résonateurs couplés en utilisant plusieurs méthodes de calculs et de simulations notamment la méthode FEM. L'objectif est d'étudier le couplage entre résonateurs et la transmission de l'énergie à travers les résonateurs dans des systèmes 1D et 2D, périodiques et désordonnés. L'annexe 1 décrit la motivation et le choix du mode de compression utilisé tout au long de cette thèse.

I.2. Cristaux phononiques

Le cristal phononique est une nouvelle classe de matériel artificiel composite. La période d'un cristal phononique est généralement mesurée par la constante de répétition de la structuration. En tant que cristal artificiel composite utilisé pour manipuler les ondes acoustiques et élastiques, il est généralement composé de deux ou plusieurs matériaux qui ont des modules de Young, des rapports de Poisson, des densités et des impédances acoustiques différents. Comme les cristaux phononiques sont des matériaux composites, ces cristaux peuvent être divisés en plusieurs classes et peuvent être formé d'une combinaison de plusieurs états de la matière par exemple solide/solide, solide/fluide ou fluide/fluide. La matrice est le substrat ou la surface qui relie les structurations qui jouent le rôle de diffuseurs ou de résonateurs comme on peut voir dans la figure 4.

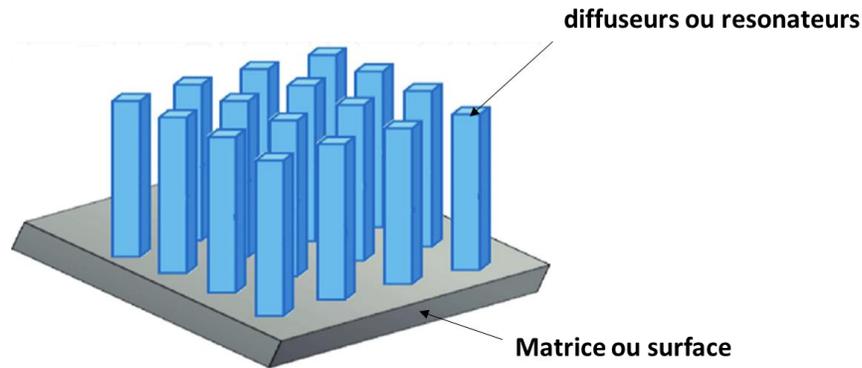


Figure 4 : Membrane matricielle surmontée par une structuration de piliers.

Le traitement des cristaux phononiques dépend de leur géométrie et on peut définir des structures périodiques unidimensionnelles (1D), bidimensionnelles (2D) et tridimensionnelles (3D). Les cristaux 1D et 2D, sont intéressants pour étudier les caractéristiques des modes d'onde peuvent être identifiées par des invariants topologiques comme la phase de Zak [15] ou la phase de Berry [16], par des modes de résonance ou encore des localisations d'énergie. La variation des propriétés topologiques et géométriques du cristal phononique entraîne une transition de bande et une dégénérescence accidentelle causée par le changement de géométrie de la structuration. De tels phénomènes ont été rapportés théoriquement et expérimentalement en milieu acoustique [17, 18, 19, 20] et en milieu élastique [21, 22]. Les cristaux phononiques 3D sont utilisés pour les trois directions de l'espace et présentent différentes formes périodiques telles que les formes cubiques simples, cubiques à faces centrées, cubiques à corps centré et compacts.

Selon les géométries, les cristaux phononiques peuvent être divisés en cristaux phononiques à ondes de volume, à ondes de surface, à onde de membrane... Lorsque le cristal phononique est infini dans la direction non périodique, ou la taille de la structure dans la direction non périodique est beaucoup plus grande que la longueur d'onde, les ondes vont se propager dans la structure périodique, appelée cristal phononique à onde de surface et on aura les ondes de Rayleigh. Lorsque le cristal phononique a une certaine épaisseur dans le sens non périodique, les ondes de Lamb se forment lors de la propagation des ondes élastiques entre les interfaces supérieure et inférieure, modulées par le plan périodique.

I.2.1. Bandes interdites dans les cristaux phononiques

Une bande interdite phononique est définie comme une gamme de fréquence où les ondes élastiques ne peuvent pas traverser le cristal phononique et se reflètent complètement. Selon le rapport de la constante de réseau et de la longueur d'onde, il existe deux mécanismes de génération de bandes interdites dans un cristal phononique, la diffusion de Bragg et la résonance locale, comme le montre la figure 5. D'une manière générale, la génération de ces bandes interdites est affectée à la fois par la périodicité et diffusion de Mie d'un seul diffuseur ou résonateur.

Pour les cristaux phononiques de Bragg et au cours de leur propagation dans le cristal phononique, les ondes élastiques subissent des réflexions partielles à chaque interface. Ainsi, les ondes réfléchies vont subir des interférences constructives et destructives. Si cette interférence est constructive, toute l'énergie de l'onde originale est réfléchie et l'onde ne peut pas se propager à travers le cristal phononique ce qui implique la présence d'une bande interdite. Et si cette interférence est destructive, toute l'énergie de l'onde incidente est transmise, on parle dans ce cas de bande passante.

Selon la loi de Bragg, une interférence est constructive si la différence de marche entre les ondes réfléchies sur les inclusions situées sur deux plans successifs est égale à un multiple entier de la longueur d'onde élastique. Cela veut dire que la différence de chemin dépend du paramètre de maille du cristal phononique. En conséquence, la taille de la structure est importante, ce qui limite ses applications.

Pour les cristaux phononiques à résonance locale, les caractéristiques de résonance d'un seul diffuseur/résonateur jouent un rôle déterminant et sont moins sensibles à la périodicité. Pour une périodicité donnée, le cristal phononique de plus petite taille peut générer des bandes interdites à plus faible fréquences, peut-être bien inférieures aux bandes interdites de Bragg.

Afin de permettre une propagation des ondes dans les bandes interdites, il faut introduire des défauts de périodicité ou des défauts de structurations comme les défauts géométriques. Les fortes localisations des ondes dans la bande interdite phononique peuvent être obtenues à travers des guides d'onde ou des cavités.

Les solutions complexes des relations de dispersion des cristaux phononiques permettent d'étudier l'existence des modes de propagation, des bandes interdites et des effets d'ondes évanescentes. Les

ondes évanescentes peuvent aussi décrire tous les phénomènes importants pour les caractéristiques du champ proche.

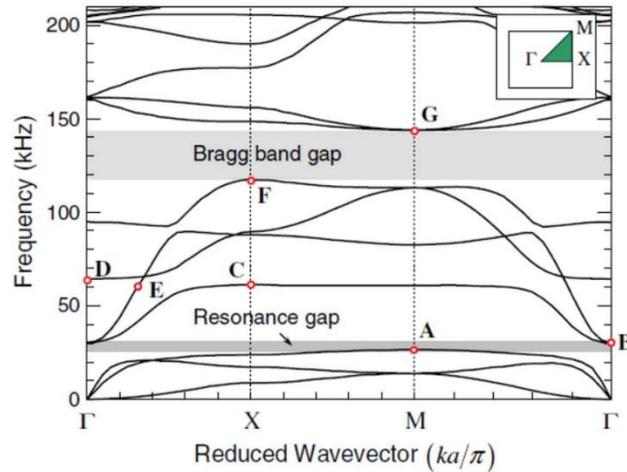


Figure 5 : Exemple de bande interdite de Bragg / bande interdite de résonance locale.

I.2.2. Applications des cristaux phononiques

La découverte des cristaux photoniques et phononiques a permis une ouverture des champs d'applications réalistes en ingénierie optique, électromagnétique, acoustique, mécanique, électrique et de communication comme ils ont permis des développements au sein de la physique appliquée. La mise en évidence de la bande interdite a permis de contrôler, de manipuler, de confiner ou de filtrer des ondes et aussi de créer des environnements sans vibrations pour des systèmes mécaniques de haute précision (comme les tables des laser et les montages de Michelson) [23], les structures antisismiques [24,25] et les systèmes d'isolation acoustique surtout dans les vitres et les murs [26].

Les applications telles que la localisation et les guides d'ondes [27,28] ont permis un développement assez important dans la théorie, la transmission et le stockage de l'information.

Le confinement ou la localisation de l'onde est réalisé en introduisant un défaut dans la structure périodique du cristal. Un défaut de la structure peut être ponctuel où linéaire, le premier se traduit par une addition ou une soustraction d'un élément de la structure initiale. Cela va servir à former une cavité qui va localiser le champ élastique alors que le deuxième se traduit par une introduction ou soustraction d'une ligne de diffuseurs ou résonateurs qui va nous permettre de guider l'onde

acoustique. Il a été montré qu'il était possible d'obtenir une transmission de l'onde acoustique avec des guides d'onde linéaires ou des guides d'onde coudés [29]. Le couplage entre les défauts ponctuels (cavités) et les défauts linéaires (guides d'onde) permet de créer des filtres de fréquences (passe bas ou passe haut) ou des démultiplexeurs d'onde [30]. En application, la présence d'une cavité dans le guide d'onde va permettre de modifier la bande passante. Cette modification se traduit par l'introduction d'un zéro de transmission à la fréquence propre (ou la fréquence de résonance) de la cavité. On utilise une réflexion inverse pour créer un filtre d'onde en considérant la même cavité dans le guide d'onde. Parmi toutes les fréquences de la bande passante du guide d'onde, la seule fréquence qui peut être transmise est celle du mode propre de la cavité [31,32].

Les cristaux phononiques peuvent aussi être utilisés pour la détection de la nature des fluides. Dans une telle structure, le liquide va être déposé dans des inclusions du cristal phononique [33,34] ou encore déposé dans les défauts de structure du cristal phononique (cavité ou guide d'onde) [35, 36, 37, 38]. Ainsi, un changement du fluide entraîne un changement de la courbe de dispersion de la structure et entraîne un changement des coefficients de transmissions. En général, dans ce type d'expérience, on montre que la fréquence du zéro ou du pic de transmission résonnante est sensible à certaines propriétés des fluides (densité, coefficient élastique, viscosité, etc...). Il a été montré que certaines structures phononiques réagissent différemment à la vitesse de propagation de l'onde dans le liquide [38]. Ainsi, la fréquence du pic (ou le zéro) va être utilisé pour définir la nature du liquide.

On peut définir de nombreuses applications pour des dispositifs à base du cristal phononique (comme des filtres passe bas et passe haut). Le développement des dispositifs acoustiques a permis la création de l'électro-acoustique. La diode est l'un des dispositifs basiques de l'électronique. Le développement des études des cristaux phononiques a permis de proposer un modèle de diode acoustique construite à partir d'un cristal phononique à 1D couplé à un milieu non-linéaire [39].

Un autre domaine d'application des cristaux phononiques concerne les ondes acoustiques et leurs interférences, ce qui a permis l'exploitation des bandes interdites partielles créant des bandes sourdes, qui imposent aux ondes acoustiques de se propager dans des polarisations bien déterminées [40].

L'étude de la réfraction et de la focalisation en optique a permis le développement équivalent en acoustique. Les ondes acoustiques ont fait l'objet de nombreuses études grâce à leurs intérêts

potentiels dans les domaines de l'imagerie et le contrôle non destructif. Par analogie avec les systèmes optiques, l'acoustique, on a démontré que les cristaux phononiques pouvaient aussi être utilisés pour construire des dispositifs et des éléments de réfraction acoustique [41].

Le couplage possible des ondes acoustiques ou élastiques avec d'autres types d'ondes telles que les ondes électromagnétiques, a donné naissance à un nouveau type de cristal et de nouvelles applications prometteuses des cristaux phononiques [42], les cristaux phoXoniques. Par exemple, un même cristal peut être utilisé pour présenter simultanément des bandes interdites phononiques et photoniques dans les mêmes gammes de longueur d'onde [43]. Ce type de structures est utilisé pour l'étude des interactions opto-mécanique à travers les localisations simultanées des deux types d'ondes dans une même cavité [44–46]. Le couplage opto-mécanique peut être utilisé afin de réaliser des capteurs, tels les capteurs extrêmement sensibles, les filtres optiques ou même des mécanismes et des dispositifs de ralentissement de la lumière [47,48].

I.3. Théorie d'élasticité

Si en appliquant des forces extérieures sur un corps en équilibre on produit des déformations ne dépassant pas une certaine limite et si ces déformations disparaissent avec la suppression des forces, on peut ainsi définir un corps élastique et définir la base de la théorie d'élasticité.

L'élasticité a été développée suite à la grande réussite de Newton en énonçant les lois du mouvement. La nécessité de comprendre et de maîtriser la fracture des solides semblait une première motivation. Léonard de Vinci a étudié lui-même les forces de traction dans les fils. Galileo a étudié les charges de rupture des tiges sous tension et a conclu que la charge était indépendante de la longueur et proportionnelle à la section transversale, ceci étant la première étape vers un concept de stress.

Chaque matériau d'ingénierie possède sa propre élasticité. Les matériaux de construction courants restent élastiques (par exemple le ciment qui est une matière bien élastique) seulement pour de très petites déformations avant de présenter des déformations plastiques ou des ruptures fragiles. Cependant, les polymères naturels et artificiels présentent une élasticité pour des déformations plus larges (généralement avec des effets de temps ou de vitesse ainsi ils seraient plus précisément caractérisés comme viscoélastiques), et l'utilisation généralisée du caoutchouc et les matériaux

similaires ont motivé le développement de la théorie de l'élasticité finie qui tend à parler des déformations importantes.

Alors que de nombreuses paradoxes et irrégularités sur le sujet ont été posés au sein dans la théorie classique, en particulier durant les travaux de Green, Gabrio Piola et Kirchhoff dans les années 1800, le développement d'une théorie viable et fiable avec des formes de relations mathématiques contrainte-déformation pour des matériaux élastiques caoutchouteux et des matériaux semi-élastiques, ainsi qu'une compréhension des effets physiques de la non-linéarité en simple problèmes tels que les modes de torsions et de flexions, était principalement la réalisation de l'ingénieur d'origine Anglaise et le prof. de mathématique appliquée Ronald S. Rivlin dans les années 40 et 50.

L'élasticité linéaire en tant que théorie tridimensionnelle générale a vu son développement au début des années 1820 grâce aux travaux du physicien Cauchy. Simultanément, Navier avait développé une théorie de l'élasticité basée sur un simple modèle, dans lequel les particules interagissaient avec leurs voisins-proches par une force d'attraction centrale entre les particules voisines. Plus tard suite aux travaux de Navier, Cauchy et Poisson dans les années 1820 et 1830, que le modèle particulier et simple commence à gagné certaines complexités et une grande importance dans les milieux scientifiques. La plupart des développements ultérieurs de ce sujet étaient en termes de théorie des milieux continus. George Green a souligné le nombre maximum possible de modules d'élasticité indépendants dans le solide anisotrope en 1837. Green a souligné que l'existence de l'énergie de déformation élastique requise est une matrice de 36 constantes élastiques reliant les 6 composantes de la contrainte aux 6 composantes de déformations et il a montré que on ne peut avoir plus que 21 constantes indépendantes parmi les 36. En 1855, Lord Kelvin montra qu'une énergie de déformation doit exister pour une réponse isotherme ou adiabatique réversible et a montré que les changements de la température sont associés à une déformation élastique adiabatique. Vers le milieu et la fin des années 1800 on avait recours à la théorie d'élasticité pour expliquer de nombreux problèmes et solutions pour des problèmes élastiques, ces solutions étaient base à plusieurs applications technologiques (cément etc....) et à l'explication de plusieurs phénomènes et dérivées de la nature (le caoutchouc naturel dans les arbres de *Hevea brasiliensis*). Adhémar-Jean-Claude Barré de Saint-Venant a dérivé dans les années 1850 des solutions pour la torsion des cylindres non circulaires, ce qui a expliqué la nécessité de déformer le déplacement de la section transversale dans la direction parallèle à l'axe de torsion, et pour la flexion des poutres

due au chargement transversal, et c'est cette dernière exploitation qui a permis de comprendre les approximations inhérentes à la théorie des faisceaux simples de Jakob Bernoulli, Euler et Coulomb. Heinrich Rudolf Hertz a développé des solutions pour la déformation des solides élastiques en simulant et modélisant des collisions d'impact des solides (il a considéré qu'un solide est une infinité de petits solides en collisions). Des solutions contre le stress et le déplacement dû aux forces concentrées agissant en un point intérieur d'un espace plein ont été dérivés par Kelvin et pour la surface d'un demi-espace de ces solutions ont été développés par Boussinesq et Cerruti. En 1863, Kelvin a dérivé la forme de base de la solution des équations d'élasticité statique pour un solide sphérique, et cela a été appliqué dans années suivantes pour calculer la déformation de la terre due à la rotation et à la force de marée et pour mesurer les effets de la déformabilité élastique sur les mouvements de l'axe de rotation de la terre.

I.3.1. Hypothèses de l'élasticité linéaire

Afin d'évaluer les contraintes, les déformations et les déplacements dans un problème d'élasticité, il faut dériver une série d'équations de base et de conditions aux limites. Au cours du processus de dérivation de telles équations, on peut considérer tous les facteurs influents, les résultats obtenus seront si compliqués et donc pratiquement aucun des solutions peuvent être trouvées. Par conséquent, certaines hypothèses de base doivent être faites sur les propriétés.

Voici les hypothèses de l'élasticité viable et fiable :

Le corps est continu

Tout le volume du corps est considéré comme rempli de matière continue, sans aucun vide.

Ce n'est que dans cette hypothèse que les grandeurs physiques du corps, telles que les contraintes, les déformations et les déplacements sont distribués en continu et ainsi exprimés par des fonctions continues de coordonnées dans l'espace. Cependant, ces hypothèses ne conduiront pas à des erreurs significatives tant que les dimensions du corps sont très grandes en comparaison avec ceux des particules et avec les distances entre voisins particules.

Le corps est parfaitement élastique

Le corps obéit entièrement à la loi d'élasticité de Hooke, qui montre que les relations sont linéaires entre les composantes de contraintes et les composantes de déformations. Dans cette hypothèse, les constantes élastiques sont entièrement indépendantes des amplitudes des composantes de contrainte et de déformation.

Le corps est homogène

Dans ce cas, les propriétés élastiques sont les mêmes dans tout le corps. Ainsi, les constantes élastiques seront indépendantes de l'emplacement du corps. Sous cette hypothèse, on peut analyser un volume élémentaire isolé, puis appliquer les résultats de l'analyse à l'ensemble du corps. Cette hypothèse peut être appliquée pour un corps isotrope ou anisotrope.

Les déplacements et les déformations sont petits

Les composantes de déplacement de tous les points du corps pendant la déformation sont très petites en comparaison avec ses dimensions d'origine et les composants de déformation et les rotations de tous les éléments de ligne sont beaucoup plus petites que l'unité. Par conséquent, lors de la formulation des équations d'équilibre relatives à l'état déformé, les longueurs et les angles du corps avant déformation sont utilisés. De plus, lorsque les équations géométriques impliquant des déformations et des déplacements sont formulées, les carrés et produits des petites quantités sont négligés (conséquence du développement mathématique de Taylor Lagrange où on considère les produits du carré nuls).

Ces approximations sont nécessaires pour linéariser les valeurs algébriques et différentielles des équations d'élasticité pour une résolution possible et plus simple pour les problèmes d'élasticité des solides.

I.3.2. Tenseur des contraintes et déformations

Lorsqu'un matériau est soumis à des forces externes, celles-ci entraînent sa déformation, provoquant des changements de taille et de forme. À la suite de cette déformation, des forces internes sont générées dans le milieu, appelées contraintes, qui tentent de ramener le système à son

état d'équilibre. Une contrainte dans un matériau cristallin est une quantité qui dépend de la direction dans laquelle la force est appliquée.

Un tenseur d'un matériel de symétrie cristalline quelconque, est un tenseur de rang 2. D'où on peut écrire

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \quad (I.1)$$

où σ_{ij} sont les composantes du tenseur des contraintes.

La déformation créée dans un matériau est définie également par un tenseur de rang 2 appelé tenseur de déformation $\boldsymbol{\varepsilon}$. Les composantes de ce tenseur sont définies par le changement des composantes du champ de déplacement. Les composantes du tenseur de déformation sont données par la relation suivante :

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

Un matériau est dit élastique s'il retourne à sa position d'équilibre si les forces appliquées sur lui sont nulles. Le caractère élastique d'un matériau peut être traduit par la relation linéaire appelée la relation de Hooke

$$\boldsymbol{\sigma}_{ij} = C_{ijkl} \boldsymbol{\varepsilon}_{kl} \quad (I.3)$$

où C_{ijkl} est un tenseur de rang 4 appelé tenseur de rigidité.

Comme le tenseur de contrainte et le tenseur de déformation sont symétriques cela impose que le tenseur de rigidité soit symétrique d'où $C_{ijkl} = C_{jikl} = C_{ijlk} = C_{jilk}$.

D'où on peut écrire la loi de Hooke finale comme :

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{pmatrix} \quad (I.4)$$

I.4. Equation du mouvement et modèle masse ressort

I.4.1. Equation du mouvement

Une excitation d'un milieu en équilibre cause une perturbation qui se diffuse dans ce milieu, ce phénomène physique est appelé « onde ».

La description d'une onde implique plusieurs paramètres : vitesse de propagation, longueur d'onde et vecteur d'onde.

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \quad (I.5)$$

L'équation de propagation des ondes élastiques dans un milieu élastique est donnée par la relation suivante d'après l'équation I.3 :

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(c_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \right) \quad (I.6)$$

Où ρ représente la masse volumique et u_i représente les composantes du champ de déplacement. Tout calcul fait, la solution se présente sous la forme exponentielle.

Si on considère par exemple que la propagation de l'onde élastique est dans la direction x , le champ de déplacement créé par cette onde est donné par :

$$u_i(x, t) = u_0 e^{i(\omega t - k_x x)} \quad (I.7)$$

Appliquons maintenant l'équation du mouvement au cas d'une surface structurée de piliers. Cette structuration peut être simulée par le modèle masse-ressort ou encore le modèle particule ressort.

I.4.2. Modèle masses-ressorts pour les surfaces structurées.

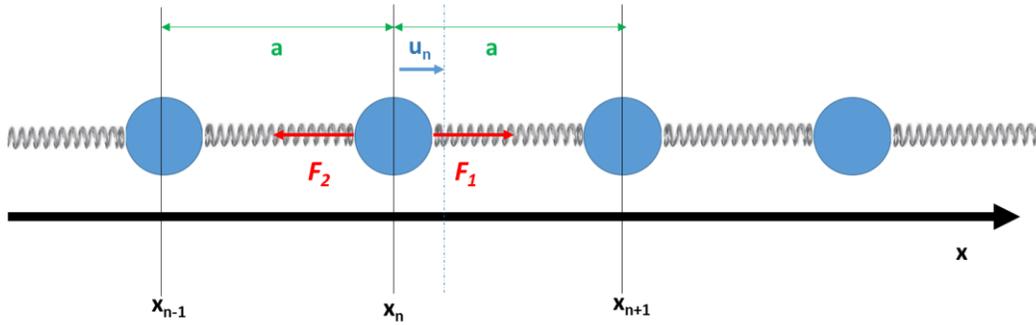


Figure 6 : Propagation de l'excitation dans une chaîne d'atomes de masses m . Les ressorts représentent les interactions entre les atomes.

On suppose que les atomes bougent faiblement autour de leur position d'équilibre. On considère la position d'équilibre pour $\mathbf{x}_{eq} = \mathbf{n}a$ et un déplacement donné par $\mathbf{x}_n = \mathbf{n}a + \mathbf{u}_n$ où $u_n \ll a$.

u_n représente le déplacement du $n^{\text{ième}}$ atome.

Les forces d'interaction correspondent à $\mathbf{F}_1 = K(\mathbf{u}_{n-1} - \mathbf{u}_n)$ et $\mathbf{F}_2 = K(\mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n)$

On applique la deuxième loi de Newton pour le $n^{\text{ième}}$ atome,

$m\ddot{\mathbf{x}} = K(\mathbf{u}_{n-1} - \mathbf{u}_n) + K(\mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n)$ où $\ddot{\mathbf{x}}$ est l'accélération dans le sens parallèle à $\vec{\mathbf{x}}$ (fig. 6).

$$= -K(2\mathbf{u}_n - \mathbf{u}_{n-1} - \mathbf{u}_{n+1}) \quad (I.8)$$

On suppose que le premier atome à $n=0$ a un mouvement sinusoïdal, d'où $\mathbf{u}_0 = \mathbf{A}e^{i\omega t}$

Le mouvement des atomes est identique avec un changement de phase d'où $\mathbf{u}_n = \mathbf{A}e^{i(\omega t + \varphi_n)}$.

En remplaçant \mathbf{u}_n dans l'équation (I.8), on obtient :

$$-m\omega^2 + 2K = K [e^{i(\varphi_{n+1} - \varphi_n)} + e^{i(\varphi_{n-1} - \varphi_n)}] \quad (I.9)$$

Afin d'équilibrer les 2 termes de l'équation (I.9), on a $\Delta\varphi = \varphi_{n+1} - \varphi_n = \varphi_{n-1} - \varphi_n$

Comme les distances sont égales à l'équilibre, la phase φ_n est proportionnelle à la distance x_n , alors $\varphi_n = -kx_n$ et $\Delta\varphi = -ka$ où k est le vecteur d'onde.

En remplaçant $\Delta\varphi$ par sa valeur dans l'équation (I.9) on a :

$$\omega = \sqrt{\frac{K}{m}} \left| \sin \frac{ka}{2} \right| \quad (\text{I.10})$$

$\omega = \omega(k)$ est la courbe de dispersion comme montrée figure 7. Le vecteur d'onde k varie dans la première zone de Brillouin.

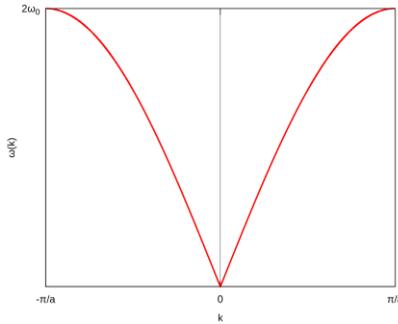


Figure 7 : Courbe de dispersion $\omega = f(k)$.

I.5. Propagation des ondes élastiques

I.5.1. Les ondes de volume

Dans le cas d'un milieu continu tridimensionnel et homogène où les dimensions tendent vers l'infini, on distingue deux types d'onde de volume qui dépendent de la polarisation, c'est-à-dire de la direction des déformations par rapport à la direction de propagation. Le mouvement des ondes mécaniques implique des oscillations des constituants du milieu continu. Si les constituants du milieu oscillent perpendiculairement à la direction de l'onde propagation, il s'agit d'une **onde transversale** (voir figure 8). Si les constituants oscillent parallèlement au sens de propagation, l'onde est dite **longitudinale** (voir figure 8).

Les ondes transversales et longitudinales se propagent à des vitesses différentes dans le même milieu.

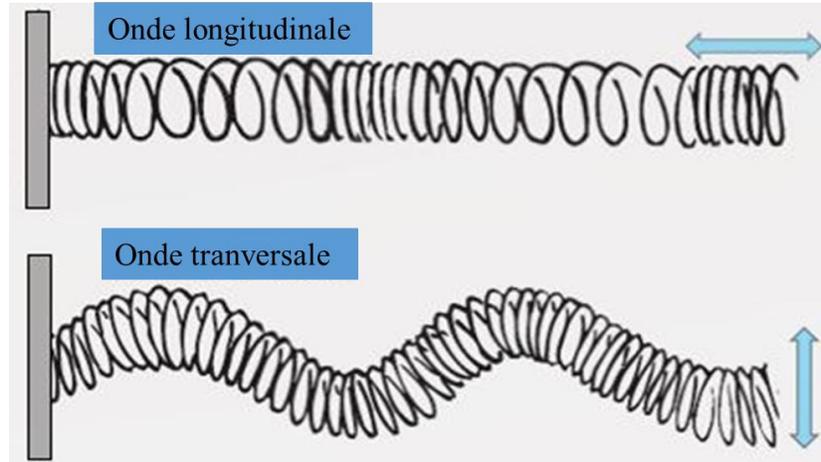


Figure 8 : Onde longitudinale (parallèle au sens du déplacement) et onde transversale (perpendiculaire au sens du déplacement).

Dans le cas des milieux continus tridimensionnels et homogènes de dimensions finies et bien déterminées, on travaillera avec des **ondes guidées**.

I.5.2. Les ondes guidées

Les ondes guidées sont de plusieurs types et de différentes natures. Dans ce travail, nous nous intéresserons aux matériaux qui présentent des surfaces (structurées et non structurées) avec un milieu libre. Nous allons par conséquent parler d'ondes de surface.

Les ondes de surfaces sont divisées, elles-mêmes en plusieurs types dépendant de la nature et du caractère du substrat (épaisseur du substrat, substrat multicouche, etc....).

Parmi ces ondes de surface nous pouvons citer les ondes de Rayleigh, de Lamb, de Sezawa, de Love, de Stoneley, ...

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés aux ondes de Rayleigh, Lamb et Sezawa.

I.5.2.1. Les ondes de Rayleigh

Les ondes de Rayleigh se déplacent à la surface des solides semi-infinis. Les ondes de Rayleigh comprennent à la fois des mouvements longitudinaux et transversaux dont l'amplitude diminue de façon exponentielle par rapport à la surface (figure 9 a).

I.5.2.2. Les ondes de Sezawa

Les ondes de Sezawa représentent le deuxième mode de Rayleigh dans des structures ou des surfaces multicouches. Les ondes de Sezawa se propagent à l'interface entre deux surfaces de nature différente.

I.5.2.3. Les ondes de Lamb

Lorsque l'épaisseur du solide diminue et devient comparable ou inférieure à la longueur d'onde, le milieu se comporte alors comme un guide d'ondes. Si les deux surfaces du substrat sont libres, le substrat ou le solide est considéré comme une plaque et les ondes se propagent sur chacune des deux faces. Dans le cas des épaisseurs faibles, ces ondes se couplent et donnent naissance aux ondes de Lamb. Pour de faibles épaisseurs de la plaque, les ondes de Lamb agissent sur la totalité du volume et donnent naissance à 3 modes de propagation : le mode symétrique (S), le mode antisymétrique (A) (voir figure 9 b) et le beaucoup moins fréquent le mode de cisaillement (shear horizontal, SH).

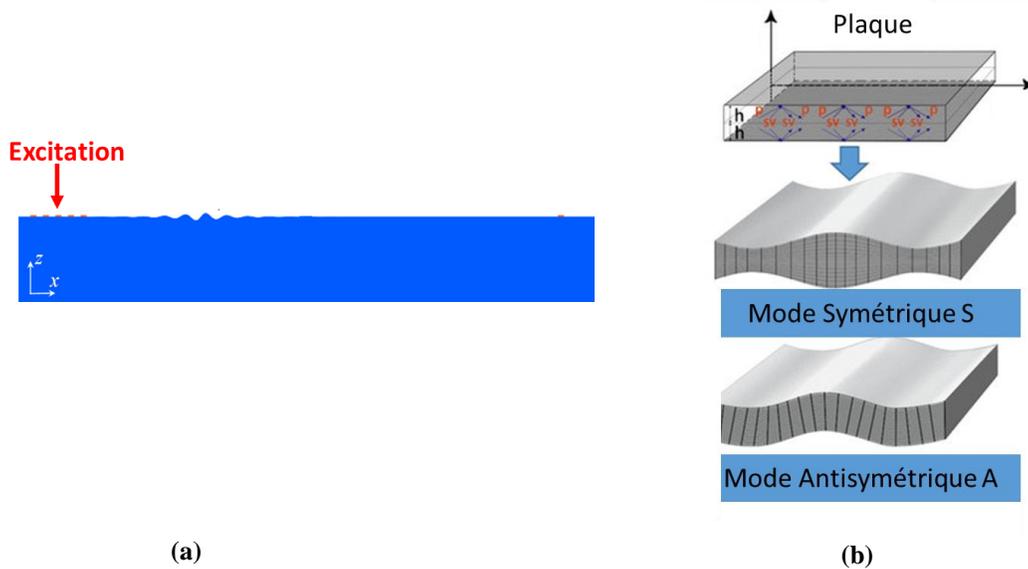


Figure 9 : a) Onde de Rayleigh qui se propage à la surface et diminue exponentiellement en surface b) ondes et modes de Lamb.

I.6. Méthodes de calculs numériques et analytiques

Plusieurs méthodes numériques et analytiques ont été développées pour simuler la propagation des ondes élastiques/acoustiques dans les cristaux phononiques.

Parmi les méthodes numériques les plus répandues on trouve la méthode de décomposition en ondes planes (PWE), la méthode des différences finies (FDTD) et la méthode des éléments finis (FEM). L'idée à la base des méthodes numériques repose sur la résolution d'une équation différentielle à travers la discrétisation d'un domaine donné en plusieurs sous domaines. La résolution revient à résoudre un problème discret, dans lequel le système d'équations se résout numériquement.

La méthode analytique ou pseudo analytique repose sur le développement d'un modèle mathématique qui donnera une équation principale. La résolution de l'équation principale va simuler la propagation de l'onde dans le cristal phononique. Afin de développer ces modèles mathématiques on a recours aux fonctions de Green, fonctions de Bessel, fonctions de Hankel-Bessel et les fonctions de corrélations. Ces fonctions seront développées tout au long du chapitre 4. Cette méthode, bien que contenant des approximations et l'application d'hypothèses de travail, va nous permettre de gagner du temps de computation. Cette méthode se base sur l'étude et le développement des fonctions de Green.

I.6.1. La méthode des éléments finis ou FEM

La description des lois physiques pour les problèmes dépendants de l'espace et du temps est généralement exprimée en termes d'équations aux dérivées partielles (EDP). La méthode des FEM procède par une résolution des équations différentielles par des méthodes approchées comme la méthode du résidu pondéré ou la méthode variationnelle. Cette approximation est appliquée sur différents types de discrétisations, définies sur un maillage spatial. La solution des équations du modèle numérique est une approximation de la solution réelle des EDP.

Afin d'obtenir les équations différentielles partielles (EDP), on doit commencer par écrire l'équation du mouvement, (d'après l'équation I.7) :

$$-\omega^2 \mathbf{u} = \nabla(C\nabla(\mathbf{u})) \quad (I.11)$$

Où \mathbf{u} est la solution de l'équation sur un domaine de résolution Ω .

Pour tout $\mathbf{u} \in \Omega$ on peut écrire \mathbf{u} sous sa forme discrétisé $\mathbf{u} = \sum_{i=1}^N \mathbf{u}_i \boldsymbol{\varphi}_i$ où N est le nombre de nœuds, $\boldsymbol{\varphi}_i$ sont des fonctions de forme connues et dépendent de l'ordre de l'élément considéré et

On considère que (I.12) est vraie :

$$\int_{\Omega} \nabla(C\nabla\mathbf{u})\mathbf{v} \, dr = \int_{\Omega} \omega^2 \mathbf{v}\mathbf{u} \, dr \quad (\text{I.12})$$

où \mathbf{v} est une fonction de test définie aussi sur Ω .

L'égalité (I.12) est calculable pour chaque problème. Des transformations équivalentes sont développées, comme une intégration par parties permettant une formulation faible de l'équation de propagation (I.12).

Les deux fonctions \mathbf{u} et \mathbf{v} appartiennent à un même espace fonctionnel Ω . Dans ce cas, la formulation faible stipule que \mathbf{u} est une projection de l'équation du mouvement dans cet espace. Ce type de de raisonnement est développé grâce au théorème de Lax-Milgram.

La relation (I.12) est traitée de deux façons différentes : une pour le volume interne de la structure ou le bulk (le domaine Ω) et une autre pour les conditions aux limites $\partial\Omega$. En appliquant le théorème de la divergence on obtient l'équation (I.13)

$$\int_{\Omega} (C\nabla\mathbf{u}) \nabla\mathbf{v} \, dr^3 + \int_{\partial\Omega} (C\nabla\mathbf{u}) \mathbf{n}\mathbf{v} \, dr^2 = \int_{\Omega} \rho\omega^2 \mathbf{u}\mathbf{v} \, dr^3 \quad (\text{I.13})$$

Remplaçons \mathbf{u} et $\mathbf{v} \in \Omega$ par leur forme discrétisée dans (I.13) pour avoir :

$$\sum_{i=1}^N \left[\int_{\Omega} (C\nabla\boldsymbol{\varphi}_i) \nabla\boldsymbol{\varphi}_j \, dr^3 + \int_{\partial\Omega} (C\nabla\boldsymbol{\varphi}_i) \mathbf{n}\boldsymbol{\varphi}_j \, dr^2 \right] \mathbf{u}_i = \omega^2 \sum_{i=1}^N \int_{\Omega} \rho \mathbf{u}_i \boldsymbol{\varphi}_i \boldsymbol{\varphi}_j \, dr^3 \quad (\text{I.14})$$

\mathbf{u}_i sont les valeurs à déterminer. Grace à la méthode des polynômes de Lagrange on peut écrire (I.14) sous sa forme matricielle.

$$K\mathbf{U} = \omega^2 M\mathbf{U} \quad (\text{I.15})$$

Les deux matrices K et M sont les matrices de rigidité et de masse respectivement. \mathbf{U} est le vecteur inconnu à calculer.

De cette façon, la méthode FEM (en anglais) ou MEF (en français) nous permet de transformer l'équation du mouvement à un problème aux vecteurs propres. Sa résolution permet d'obtenir les courbes de dispersion.

La méthode FEM est utilisée dans les chapitres 2 et 3. Cette méthode et le logiciel COMSOL Multiphysics va nous permettre d'étudier les courbes de dispersion et de transmissions.

I.6.2. La méthode analytique et les fonctions de Green

La méthode analytique est un processus combinant la méthode scientifique et le processus formel pour résoudre tout type de problème.

Afin de créer notre méthode analytique ou pseudo analytique on a recours aux équations d'interaction et aux fonctions de Green.

Les fonctions de Green constituent une méthode assez générale de résolution d'équations différentielles, ou de transformation d'équations différentielles en équations intégrales. Elles sont extrêmement utilisées en mécanique quantique, en théorie de l'onde et en théorie des processus stochastiques.

Les fonctions de Green ou les distributions de Green, ont été introduites par George Green en 1828 pour le développement des théories appliquées en électromagnétisme. La méthode de Green a été publiée en 1850. Les fonctions de Green, seront alors utilisées en 1862, 1877 et 1882. En 1862 Helmholtz utilise les fonctions de Green pour développer des théories en acoustique, en 1887 les fonctions de Green sont utilisées pour le développement de la théorie du potentiel Newtonien dans un espace à deux dimensions puis pour n dimensions, et enfin en 1882 Kirchhoff utilise les fonctions de Green pour résoudre l'équation de propagation d'une onde dans un espace à trois dimensions puis plus généralement pour un espace de n dimensions.

Les fonctions de Green vont mettre les paramètres en relation avec une fonction appelée « fonction source ».

On suppose $x \in R^n$ et \mathfrak{D} un opérateur différentiel pour la linéarisation.

On cherche à trouver la solution $\varphi(x)$.

Soit

$$\mathfrak{D} \varphi(x) = j(x) \text{ (I.16)}$$

Où $j(x)$ est la source de la fonction champ $\varphi(x)$.

On suppose que $\varphi(x)$ vérifie la condition fondamentale $\int \varphi(x) \delta(x - x_0) dx = \varphi(x_0)$. où $\delta(x)$ est la fonction de Dirac.

Afin on définit la fonction de Green telle que

$$\mathfrak{D} G(x) = \delta(x) \text{ (I.17)}$$

Pour une même équation (I.17) il existe plusieurs fonctions de Green. L'équation (I.17) nous permet de trouver $G(x)$, trouver $\varphi(x)$ devient un produit de convolution où

$$\varphi(x) = (G * j)(x) = \int G(x - y) j(y) dy \text{ (I.18)}$$

L'équation (I.18) exprime la superposition des solutions élémentaires, chaque terme sous l'intégrale représentant la contribution de la fonction source $j(x)$ entre x et $x + dx$, ce qui exprime l'interaction entre deux ou plusieurs corps.

Les équations de Green vont être utilisées au niveau des chapitres 3 et 4 afin de développer un modèle analytique qui va nous permettre de réaliser des cartes de champ acoustique et de trouver des courbes de transmission et de résonance.

I.7. Conclusion

Dans ce chapitre une introduction aux notions des cristaux phononiques, aux ondes acoustiques et aux modes guidés a été présentée. Ce chapitre reflète les premières études théoriques et expérimentales réalisées et met en contexte les méthodes numériques et analytiques utilisées.

Nous avons également défini les raisons et les mécanismes pour lesquels on a formation des bandes interdites phononiques puis on a présenté plusieurs applications aux cristaux phononiques. De manière plus détaillée, nous avons expliqué les modes de propagation d'une onde et on a discuté les études réalisées pour des différentes gammes de fréquences et différentes propriétés phononiques telles que la formation des bandes interdites. Dans ce chapitre, on a aussi discuté les notions d'élasticité, et on a présenté les méthodes numériques et analytiques qu'on va utiliser pour la simulation de la propagation des ondes élastiques dans les structures périodiques, hyperuniformes et aléatoires.

Références

- [1] S. John, Physical Review Letters 58, **23** (1987), 2486.
- [2] E. Yablonovitch, Physical Review Letters 58, **20** (1987), 2059.
- [3] Ho, K., Chan, C. T., And Soukoulis, C. M. Existence of A Photonic Gap In Periodic Dielectric Structures. Physical Review Letters 65, 25 (1990), 3152.
- [4] Sigalas, M. M., And Economou, E. N. Journal of Sound And Vibration 158, **2** (1992), 377–382.
- [5] Kushwaha, M. S., Halevi, P., Dobrzynski, L., And Djafari-Rouhani, B. Physical Review Letters 71, **13** (1993), 2022.
- [6] Martínez-Sala, R., Sancho, J., Sánchez, J. V., Gómez, V., Llinares, J., And Meseguer, F. Nature 378, **6554** (1995), 241–241.
- [7] Liu, Z., Chan, C. T., Sheng, P., Goertzen, A. L., And Page, J. H. Physical Review B 62, **4** (2000), 2446.
- [8] Liu, Z., Zhang, X., Mao, Y., Zhu, Y., Yang, Z., Chan, C. T., And Sheng, P. Science 289, **5485** (2000), 1734–1736.
- [9] Notomi, M., Yamada, K., Shinya, A., Takahashi, J., Takahashi, C., And Yokohama, I. Physical Review Letters 87, **25** (2001), 253902.
- [10] Khelif, A., Wilm, M., Laude, V., Ballandras, S., And Djafari-Rouhani, B. Physical Review E 69, **6** (2004), 067601.
- [11] Alivisatos, P. Nature Biotechnology 22, **1** (2004), 47–52.
- [12] Wu, T.-T., Wang, W.-S., Sun, J.-H., Hsu, J.-C., And Chen, Y.-Y. Applied Physics Letters 94, **10** (2009), 101913.
- [13] Mohammadi, S., Eftekhar, A. A., Hunt, W. D., And Adibi, A. Applied Physics Letters 94, **5** (2009), 051906.
- [14] Bringuier, S., Swintek, N., Vasseur, J., Robillard, J.-F., Runge, K., Muralidharan, K., And Deymier, P. The Journal Of The Acoustical Society Of America 130, **4** (2011), 1919–1925.
- [15] Atala, M., Aidelsburger, M., Barreiro, J. *Et Al.* Nature Phys 9, 795–800 (2013).
- [16] Falci, G., Fazio, R., Palma, G. *Et Al.* Nature 407, 355–358 (2000).
- [17] Jensen, J. S. Journal Of Sound And Vibration 266, **5** (2003), 1053–1078.

- [18] An, X., Fan, H., And Zhang, C. *Wave Motion* **80** (2018), 69–81.
- [19] Wang, Y.-F., Laude, V., And Wang, Y.-S. Coupling Of Evanescent And Propagating Guided Modes In Locally Resonant Phononic Crystals. *Journal Of Physics D: Applied Physics* **47**, 47 (2014), 475502.
- [20] Otsuka, P. H., Nanri, K., Matsuda, O., Tomoda, M., Profunser, D., Veres, I., Danworaphong, S., Khelif, A., Benchabane, S., Laude, V., And Others. Broadband Evolution Of Phononic-Crystal-Waveguide Eigenstates In Real-And K-Spaces. *Scientific Reports* **3** (2013), 3351.
- [21] Sainidou, R., Stefanou, N., And Modinos, A. Linear Chain Of Weakly Coupled Defects In A Three-Dimensional Phononic Crystal: A Model Acoustic Waveguide. *Physical Review B* **74**, 17 (2006), 172302.
- [22] Escalante, J. M., Mart Inez, A., And Laude, V. Dispersion Relation Of Coupled-Resonator Acoustic Waveguides Formed By Defect Cavities In A Phononic Crystal. *Journal Of Physics D: Applied Physics* **46**, 47 (2013), 475301.
- [23] K. Kokkonen, M. Kaivola, S. Benchabane, A. Khelif, And V. Laude. Scattering Of Surface Acoustic Waves By A Phononic Crystal Revealed By Heterodyne Interferometry. *Applied Physics Letters*, **91**, 2007.
- [24] E. Larose, L. Margerin, B. A. Van Tiggelen, And M. Campillo, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 048501 (2004).
- [25] F. Shahbazi, A. Bahraminasab, S. M. Vaez Allaei, M. Sahimi, And M. R. R. Tabar, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 165505 (2005).
- [26] G. Wehmeyer, T. Yabuki, C. Monachon, J. Wu, And C. Dames, “Thermal Diodes, Regulators, And Switches: Physical Mechanisms and Potential Applications,” *Appl. Phys. Rev.* **4**, 041304 (2017).
- [27] White, D.H., Haase, T.A., Brown, D.J. *Et Al.* Observation Of Two-Dimensional Anderson Localization Of Ultracold Atoms. *Nat Commun* **11**, 4942 (2020).
- [28] Sanchez-Palencia, L., Clément, D., Lujan, P., Bouyer, P. & Aspect. *N. J. Phys.* **10**, 045019 (2008).
- [29] A. Khelif, A. Choujaa, S. Benchabane, B. Djafari-Rouhani, And V. Laude, *Appl. Phys. Lett.* **84**, 4400 (2004).

- [30] Y. Pennec, B. Djafari-Rouhani, J. O. Vasseur, H. Larabi, A. Khelif, A. Choujaa, S. Benchabane, And V. Laude, *Appl. Phys. Lett.* 87, 261912 (2005).
- [31] Y. Pennec, B. Djafari-Rouhani, H. Larabi, J. Vasseur, And A.-C. Hladky-Hennion, *Phys. Status Solidi C* 6, 2080 (2009).
- [32] A. Khelif, B. Djafari-Rouhani, J. O. Vasseur, P. A. Deymier, P. Lambin, And L. Dobrzynski, *Phys. Rev. B* 65, 174308 (2002).
- [33] M. Zubtsov, R. Lucklum, M. Ke, A. Oseev, R. Grundmann, B. Henning, And U. Hempel, *Sens. Actuators Phys.* 186, 118 (2012).
- [34] R. Lucklum, M. Zubtsov, And M. Ke, *Ieee Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control* 59, 463 (2012).
- [35] R. Lucklum And J. Li, *Meas. Sci. Technol.* 20, 124014 (2009).
- [36] R. Lucklum, J. Li, And M. Zubtsov, *Procedia Eng.* 5, 436 (2010).
- [37] S. Amoudache, Y. Pennec, B. Djafari Rouhani, A. Khater, R. Lucklum, And R. Tigrine, *J. Appl. Phys.* 115, 134503 (2014).
- [38] A. Salman, O. A. Kaya, And A. Cicek, *Sens. Actuators Phys.* 208, 50 (2014).
- [39] X.-F. Li, X. Ni, L. Feng, M.-H. Lu, C. He, And Y.-F. Chen, *Phys. Rev. Lett.* 106, 084301 (2011).
- [40] L.-S. Chen, C.-H. Kuo, And Z. Ye, *Appl. Phys. Lett.* 85, 1072 (2004).
- [41] F. Cervera, L. Sanchis, J. V. Sánchez-Pérez, R. Martínez-Sala, C. Rubio, F. Meseguer, C. López, D. Caballero, And J. Sánchez-Dehesa, *Phys. Rev. Lett.* 88, 023902 (2002).
- [42] M. Metcalfe, *Appl. Phys. Rev.* 1, 031105 (2014).
- [43] M. Maldovan And E. L. Thomas, *Appl. Phys. B* 83, 595 (2006).
- [44] M. Maldovan And E. L. Thomas, *Appl. Phys. Lett.* 88, 251907 (2006).
- [45] Q. Rolland, M. Oudich, S. El-Jallal, S. Dupont, Y. Pennec, J. Gazalet, J. C. Kastelik, G. Lévêque, And B. Djafari-Rouhani, *Appl. Phys. Lett.* 101, 061109 (2012).
- [46] Y. Pennec, V. Laude, N. Papanikolaou, B. Djafari-Rouhani, M. Oudich, J. S. El, J. C. Beugnot, J. M. Escalante, And A. Martínez, *Nanophotonics* 3, 413 (2014).
- [47] E. Gavartin, R. Braive, I. Sagnes, O. Arcizet, A. Beveratos, T. J. Kippenberg, And I. Robert-Philip, *Phys. Rev. Lett.* 106, 203902 (2011).
- [48] V. Laude, J.-C. Beugnot, S. Benchabane, Y. Pennec, B. Djafari-Rouhani, N. Papanikolaou, J. M. Escalante, And A. Martinez, *Opt. Express* 19, 9690 (2011).

CHAPITRE II. Matériaux et Géométrie

II.1. Introduction

Le chapitre précédent a défini le principe général des cristaux phononiques. En étudiant les mécanismes de propagation d'une onde dans une structure on a pu constater l'intérêt des phénomènes de couplage entre résonateurs mécaniques, notamment dans le cadre du contrôle des propriétés de vibrations mécaniques.

Dans ce chapitre, on s'intéresse à l'étude de l'interaction des ondes de surface de type Rayleigh avec une structuration phononique de surface. Pour cela, nous allons étudier une cellule élémentaire faite d'un pilier de hauteur h et de diamètre d déposé sur un substrat multicouche semi infini. La multicouche est formée d'une couche diélectrique déposée sur une couche métallique, l'ensemble à son tour est déposé sur un substrat semi-infini de silicium. Nous allons considérer différentes géométries et matériaux à la base du cristal phononique afin d'étudier son interaction avec les ondes de surface. Les paramètres à considérer sont géométriques : tels la hauteur h et le diamètre d du pilier et physique en modifiant les matériaux : le métal et/ou le diélectrique. Le but est d'obtenir les conditions géométriques et physiques favorables pour exciter les modes phononiques de résonance des piliers à partir de l'onde de surface. Les conditions géométriques sont limitées par des contraintes expérimentales liées à la fabrication. La principale limitation étant le rapport d'aspect h/d , ce dernier doit être inférieur à 1.

II.2. Contexte

Dans ce chapitre on va étudier les courbes de dispersion, les spectres de transmission et les courbes de résonances pour les différentes structures réalisées. Les matériaux utilisés sont, au niveau du métal, l'aluminium (Al) et l'or (Au), au niveau du diélectrique la silice (SiO_2), et différents polymères comme le Polyméthylméthacrylate (PMMA), le SU-8 photoresistant (SU-8), le polyimide (PI) et le Cyttop (Cy).

Les calculs sont réalisés à l'aide de simulations numériques en utilisant la méthode FEM (paragraphe I.6.1) via le logiciel COMSOL multiphysics. Ces simulations vont permettre de caractériser les structures de bandes ou courbes de dispersion. L'excitation des modes de surfaces seront étudiées à travers les courbes de transmission et les courbes de résonances. Dans les

premières, le détecteur est situé après le cristal, en champ lointain. Les secondes sont obtenues en plaçant le détecteur sur les piliers permettant une caractérisation de la résonance. La problématique est double, à savoir connaître les modes de résonances des piliers et définir la polarisation de la source nécessaire à leur excitation pour les mettre en évidence. Enfin, nous devons rester dans le cadre des contraintes expérimentales pour à terme prévoir une fabrication des géométries envisagées.

II.3. Génération des ondes de surfaces ou bien SAW (Surface Acoustic Waves)

Dans le paragraphe I.5, on a présenté les ondes de volume (ondes transversales et ondes longitudinales) et les ondes de surfaces ou SAW (Rayleigh, Love...). Au niveau ce travail, nous allons nous intéresser aux ondes de surface à leur excitation, et à leur propagation. En fait, on va exciter le substrat multicouche semi infini par une force harmonique de polarisation verticale. Cette excitation va engendrer la propagation des ondes de surface de Rayleigh et des ondes Sezawa (figure II-1).

Les ondes de Rayleigh produisent un déplacement essentiellement en surface du substrat semi-infini plutôt qu'en volume. Les ondes de Rayleigh sont largement étudiées dans le cadre des excitations acoustiques dans différentes gammes de fréquences pour étudier par exemple les séismes ou encore développer des éléments électroniques telle que les filtres, les résonateurs, etc... Ces ondes se propagent dans le plan normal à la surface et parallèle à la direction de propagation avec une vitesse de phase plus lente que celles des ondes de volume. Les ondes de Rayleigh présentent une dispersion qui dépend du type de matériaux homogènes continus choisis. Les ondes de Sezawa sont des ondes de surface d'ordre supérieur. Pour qu'elles se propagent dans un film multicouche déposé en surface, il est nécessaire que la vitesse acoustique de la couche du substrat soit supérieure à celle du film mince déposé. Dans ce chapitre nous testerons plusieurs matériaux formant le film multicouche qui vont présenter des vitesses acoustiques différentes afin d'obtenir la propagation des modes de Sezawa.

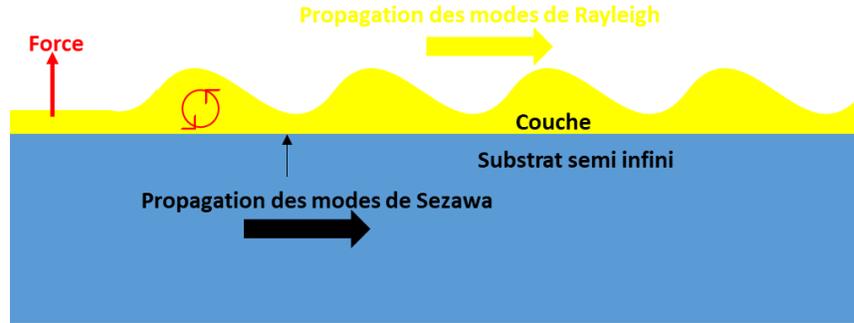


Figure II-1 : Schéma qui montre la polarisation de la force utilisée pour exciter le substrat semi-infini et multicouche. De même, ce schéma montre la propagation des modes de Rayleigh et Sezawa.

II.4. Choix des matériaux et paramètres géométriques

La géométrie est définie dans l'objectif d'exciter simultanément les résonances plasmoniques et mécaniques des piliers. La géométrie à définir doit donc répondre aux critères permettant l'excitation des plasmons localisés, à savoir des piliers métalliques, une couche diélectrique et un plan de masse métallique. Les modes de résonances mécaniques que nous cherchons à mettre en évidence dans ce chapitre viendront déformer le gap diélectrique et modifier le comportement du plasmon.

Au cours des deux dernières décennies, l'étude des ondes optiques et acoustiques dans les systèmes photoniques et phononiques complexes a été étudiée. Les supports phononiques ont considérablement progressé et l'intérêt récent s'est tourné vers une classe de matériaux qui, à des fréquences spécifiques pour lesquelles la longueur d'onde dans la matrice est supérieure de plusieurs ordres de grandeur à la distance entre les résonateurs, les ondes optiques et acoustiques ont des propriétés physiques inhabituelles. Ces matériaux sub-longueurs d'onde sont les structures plasmoniques et les métamatériaux acoustiques.

II.4.1. Paramètres géométriques

La structure utilisée pour étudier les structures de bande est : un substrat semi-infini sur lequel on dépose une bicouche métal/diélectrique, chaque couche étant caractérisée par sa épaisseur respective e . Cette structure est surmontée d'un pilier de hauteur h et de diamètre d . h , d et e ont la dimension de quelques centaines de nanomètres pour atteindre une longueur d'onde de $1.55\mu\text{m}$, cette longueur d'onde est intéressante pour le domaine des télécommunications.

II.4.2. Choix des matériaux

Au niveau de ce chapitre on va considérer un substrat semi-infini de silicium (Si) [1]. Dans le volume, la vitesse de propagation des ondes acoustiques du Si sont $c_t = 5843 \text{ m/s}$ et $c_l = 8433 \text{ m/s}$ pour une propagation dans la direction $[1\ 0\ 0]$, où c_t et c_l sont respectivement les vitesses de propagation transverse et longitudinale.

D'un point de vue optique, on va choisir un diélectrique d'indice optique de $n = 1,5$, cet indice va nous permettre d'envisager un confinement du plasmon dans le diélectrique, entre les deux surfaces métalliques, celles du pilier et du plan de masse. C'est le cas de la plupart des polymères, ainsi que du verre SiO_2 . Du point de vue élastique, les diélectriques ont des propriétés acoustiques assez proches avec un module de Young relativement faible. La silice, elle, a un module de Young important en comparaison.

Pour les métaux, l'aluminium (Al) et l'or (Au) vont être testés. L'or présente l'avantage d'être très étudié et donc très connu dans le domaine optique, et comme l'or et l'aluminium ont des propriétés optiques similaires (les deux présentent les mêmes pics d'absorption et réflexion dans le domaine visible et infrarouges [2, 3, 4, 5]), l'aluminium va être encore étudié.

D'un point de vue acoustique, l'aluminium présente un avantage par rapport à l'or, car la vitesse de propagation dans l'aluminium est deux fois plus grande à celle dans l'or. Un paquet d'onde excité à partir d'une source monochromatique d'un laser pulsé est également moins dispersif dans l'Al que dans l'Au.

La figure II-2 montre les courbes de dispersions $\omega(\mathbf{k})$ d'une couche d'aluminium ou une couche d'or sur un substrat semi infini de silicium qui permettent de calculer la vitesse de propagation des modes. C'est important de comprendre la différence d'un point de vue acoustique afin de comprendre les meilleurs matériaux pour l'expérience.

L'expérience consiste d'exciter la surface du métal par un laser monochromatique, d'où des paquets d'onde de type SAW vont se propager, la vitesse de propagation dans l'Al est deux fois plus grande que celle dans l'Or, comme c'est montré sur la courbe de dispersion de la courbe figure II-2.

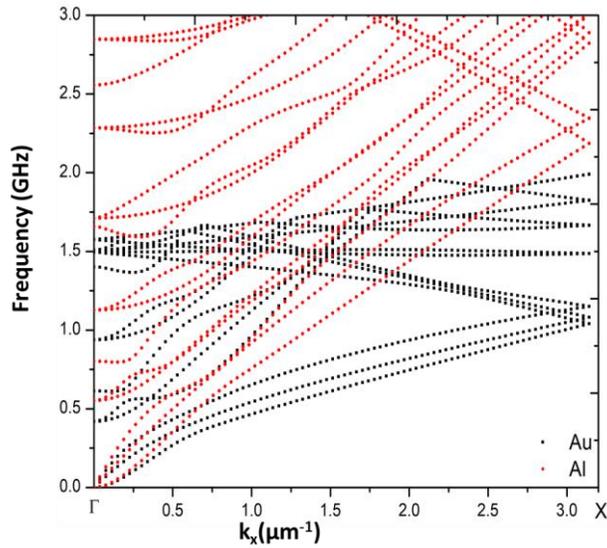


Figure II-2 : courbes de dispersion d'une couche d'Al ou d'Au sur une substrat semi infini de silicium, dans les mêmes conditions d'excitation on observe dans le cas d'une surface d'Au un étalement du signal lors de sa propagation. Au contraire, dans l'Al, le signal reste compact.

Afin de simuler toutes les conditions expérimentales possibles on va comparer les matériaux anisotropes et isotropes. Dans les matériaux anisotropes, la vitesse de l'onde dépend de la direction de propagation, tandis que dans les matériaux isotropes, elle est la même dans toutes les directions. La figure II-3 montre les matériaux isotropes (mêmes constantes d'élasticités dans toutes les directions) et les matériaux anisotropes (différentes élasticités suivant la direction). Aucune différence mesurable n'existe entre les deux choix. Les matériaux peuvent être isotropes ou anisotropes

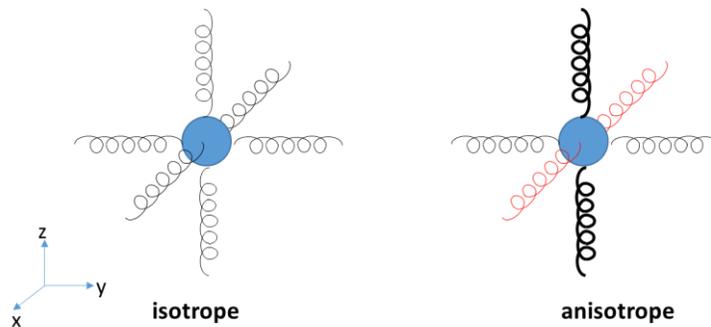


Figure II-3 : Les ressorts représentent les élasticités, pour un cas isotrope les ressorts sont les mêmes pour un cas anisotrope les ressorts sont différents.

Dans notre étude, l'aluminium, l'or et le silicium sont des matériaux anisotropes, les diélectriques sont des matériaux isotropes. Les paramètres utilisés pour simuler les matériaux sont présentés dans les tableaux I et tableau II.

Tableau I : Paramètres physiques des matériaux anisotropes [6,7].

Matériaux	Rigidité (10^{10}N/m^2)			Densité (kg/m^3)
Si	$c_{11} = 16.56$	$c_{12} = 1.61$	$c_{44} = 3.12$	2 203
Al	$c_{11} = 10.73$	$c_{12} = 6.08$	$c_{44} = 2.83$	2 702
Au	$c_{11} = 19.25$	$c_{12} = 16.3$	$c_{44} = 4.24$	19 300

Tableau II : Paramètres physiques des matériaux isotropes [6, 7, 8].

Matériaux	E : module de Young (GPa)	ν : coefficient de Poisson	ρ : densité (kg/m^3)
SiO ₂	72.2	0.16	2 300
PMMA	2.9	0.375	1 185
SU-8	4.02	0.22	1 190
PI	2.5	0.34	1 420
Cy	1.3	0.425	2 000

Afin de calculer les vitesses de propagation longitudinales et transversales dans les différentes polarisations de l'onde : [1 0 0], [1 1 0], [1 1 1] on a le tableau III.

Tableau III : Vitesses de propagations transversales et longitudinales pour les différentes polarisations [9].

Polarisation	c_l	c_t
[1 0 0]	$\sqrt{\frac{c_{11}}{\rho}}$	$\sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}}$
[1 1 0]	$\sqrt{\frac{c_{11} + c_{12} + 2c_{44}}{2\rho}}$	$\sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}}$
[1 1 1]	$\sqrt{\frac{c_{11} + 2c_{12} + 4c_{44}}{3\rho}}$	$\sqrt{\frac{c_{11} - c_{12} + c_{44}}{3\rho}}$

Les vitesses de polarisations sont utilisées pour les matériaux anisotropes où la vitesse de propagation dépend de la direction de propagation, pour les matériaux isotropes on a les mêmes vitesses de propagations dans toutes les directions et on a $c_l = \sqrt{\frac{E(1-\nu)}{\rho(1+\nu)(1-2\nu)}}$ et $c_t = \sqrt{\frac{E}{2\rho(1+\nu)}}$.

II.4.3. Structure étudiée

La figure II-4 représente la cellule élémentaire utilisée pour le calcul des courbes de dispersion.

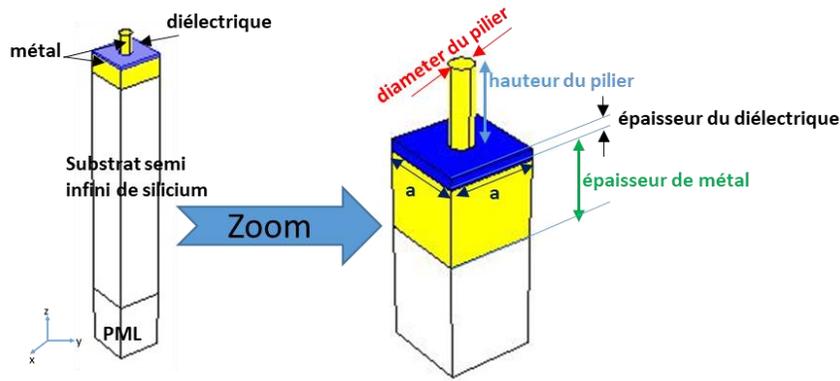


Figure II-4 : Cellule élémentaire utilisée dans le calcul de la courbe de dispersion.

La structure phononique étudiée dans ce chapitre est constituée d'un arrangement périodique de piliers déposés sur un substrat semi-infini. La figure II-4 montre la représentation 3D de la structure phononique de la cellule élémentaire utilisée pour le calcul numérique de la courbe de dispersion. Le paramètre a correspond à la période de la structure, h et d représentent respectivement la hauteur et le diamètre du pilier. La structure est périodique dans les directions x et y et est supposée semi-infini dans la direction z par implémentation d'une couche absorbante de type perfect matching layer (PML) au fond de la cellule. Les épaisseurs respectives de la couche de métal et de la couche du diélectrique seront notées $ep_m\acute{e}tal$ et $ep_di\acute{e}lectrique$.

II.5. Equation d'onde élastique

On reprend l'équation de propagation de l'onde élastique déjà établi (I.6) sous sa forme 3D, avec $\mathbf{u} = (u_x, u_y, u_z)$, $\mathbf{r} = (x, y, z)$ et $\nabla = [\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}]$. L'équation (I.6) devient :

$$\nabla[c(\mathbf{r})\nabla\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)] = \rho(\mathbf{r})\frac{\partial^2\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} \quad (II.1)$$

En considérant que l'onde se propage dans le plan (x, y) et que les vecteurs de déplacements sont des vecteurs indépendants dans le plan z, on peut découpler l'équation (II.1) en modes de propagations transversales (plan z) et modes de propagations longitudinales (plan (x, y)). L'équation (II.1) sera découplée suivant les deux équations (II.2) et (II.3).

$$\nabla_T \cdot [\mu(\mathbf{r}) \nabla_T \mathbf{u}_n] + \nabla_T \cdot \left[\mu(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial x_n} u_T \right] + \frac{\partial}{\partial x_n} [\lambda(\mathbf{r}) \nabla_T \cdot u_T] = -\rho(\mathbf{r}) \omega^2 \mathbf{u}_n \quad (\text{II.2}) \quad \text{où } n = x, y$$

et

$$\nabla_T \cdot [\mu(\mathbf{r}) \nabla_T \mathbf{u}_z] = -\rho(\mathbf{r}) \omega^2 \mathbf{u}_z \quad (\text{II.3})$$

où $\nabla_T = \left[\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right]$ $u_T = (u_x, u_y)$ et (λ, μ) sont les coefficients de Lamé. De même on peut considérer que $\rho(\mathbf{r}) = \rho$.

Nous allons utiliser la méthode des éléments finis (FEM) présentée dans le **paragraphe I.6.1** afin de calculer les courbes de dispersions du cristal phononique.

La base est de résoudre l'équation des ondes. En se basant sur le théorème de Bloch, on applique les conditions périodiques de Bloch-Floquet au domaine. En raison de la périodicité des cristaux phononiques, le calcul peut être mis en œuvre dans une maille unitaire représentative. On reprend l'équation (I.15)

$$(K - \omega^2 M) \mathbf{U} = 0 \quad (\text{II.4})$$

Dans laquelle K et M sont les matrices de rigidité et de masse, respectivement. On peut les écrire sous leurs formes intégrales à savoir : $K = \int \sigma^T c(r) \sigma dV_e$ et $M = \int \rho N^T N dV_e$ où σ est le tenseur des contraintes, N est la matrice nodale et V_e représente le volume total de la cellule élémentaire.

\mathbf{U} est la matrice définie telle que $\mathbf{U} = |\mathbf{U}_1 \mathbf{U}_2 \dots \dots \mathbf{U}_n|^T$ \mathbf{U}_i est le déplacement aux nœuds.

\mathbf{U}_i est définie tel que $\mathbf{U}_i = |\mathbf{u}_i \mathbf{v}_i \mathbf{w}_i|^T$.

Comme on l'a déjà supposé l'onde se propage dans le plan (x,y). Soit $\psi(r)$ le vecteur de déplacement. En appliquant le théorème de Bloch $\psi(r)$ peut être exprimé sous sa forme exponentielle.

$$\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})}\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r})_{\mathbf{k}} \quad (\text{II.5})$$

$\boldsymbol{\psi} = u_x, u_y$ $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ et $\boldsymbol{\psi}(\mathbf{r})_{\mathbf{k}}$ est le vecteur périodique de même période que la structure. Le théorème de Bloch est appliqué aux bords de la cellule élémentaire dans les directions x et y ce qui conduit à l'expression du déplacement $\mathbf{U}(\mathbf{r})$ en bord de cellule élémentaire comme :

$$\mathbf{U}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a})}\mathbf{U}(\mathbf{r}) \quad (\text{II.6})$$

où r est situé aux nœuds qui appartiennent aux bords de cellule et a est le vecteur du réseau. La résolution de l'équation (II.4) donne les valeurs propres pour le vecteur d'onde \mathbf{k} sous les conditions aux limites (II.6).

Nous pouvons ainsi obtenir les courbes de dispersions complètes lorsque le vecteur d'onde \mathbf{k} balaye la zone irréductible de Brillouin.

II.5.1. Maillage

Une des facteurs les plus importants de l'utilisation de la méthode FEM est le maillage. Le maillage, lui-même, peut être considéré comme un paramètre important ce dernier peut changer les valeurs des fréquences propres. En fait, c'est la résolution du maillage qui peut changer les valeurs des valeurs propres. En effet, comme c'était déjà évoqué dans l'introduction de la partie II.5, la structure étudiée de volume V_e est discrétisée en éléments finis de volume dV_e et un calcul est fait pour chaque élément. La pertinence de la simulation numérique réside sur le compromis le nombre des éléments discrétisés-temps de calcul : il est important que chaque élément du maillage soit suffisamment petit par rapport à la plus petite dimension de la structure afin qu'il soit observé par le maillage, et en plus la plus petite taille du maillage doit être plus petite à peu près cinq fois plus petite de la longueur d'onde. Généralement un temps de calcul de plusieurs jours ou même plusieurs semaines est typique pour des larges structures. Afin de trouver le maillage adapter et optimiser à la structure étudiée on commence par un maillage grossier puis on commence à le raffiner et le rendre plus dense, une fois les valeurs des valeurs propres ne changent plus ou changent à 10^{-5} près, on peut être sûr d'avoir trouvé un bon maillage (un maillage qui en accord avec le compromis), d'autres astuces peuvent être employé comme par exemple le type de maillage. Il existe deux types de maillages en volume, le maillage tétraédrique et le maillage rectangulaire. Afin de réduire le temps du calcul de simulation on peut utiliser un maillage

rectangulaire pour les matériaux isotropes. Une structure peut être maillée d'un mélange des deux types de maillages. Le maillage qu'on a utilisé est un mélange de maillage tétraédrique et maillage rectangulaire, la figure II-5 représente le maillage utilisé. Le cylindre est maillé d'un maillage tétraédrique concentré afin que la surface du cylindre soit circulaire et ne soit pas hexagonale ou octogonale. La couche diélectrique est maillée en maillage rectangulaire comme c'est une couche isotrope, le logiciel Comsol Multiphysics conseille de prendre cinq points en profondeur [10]. Les autres parties de la structure sont maillées par un maillage tétraédrique large optimisé.

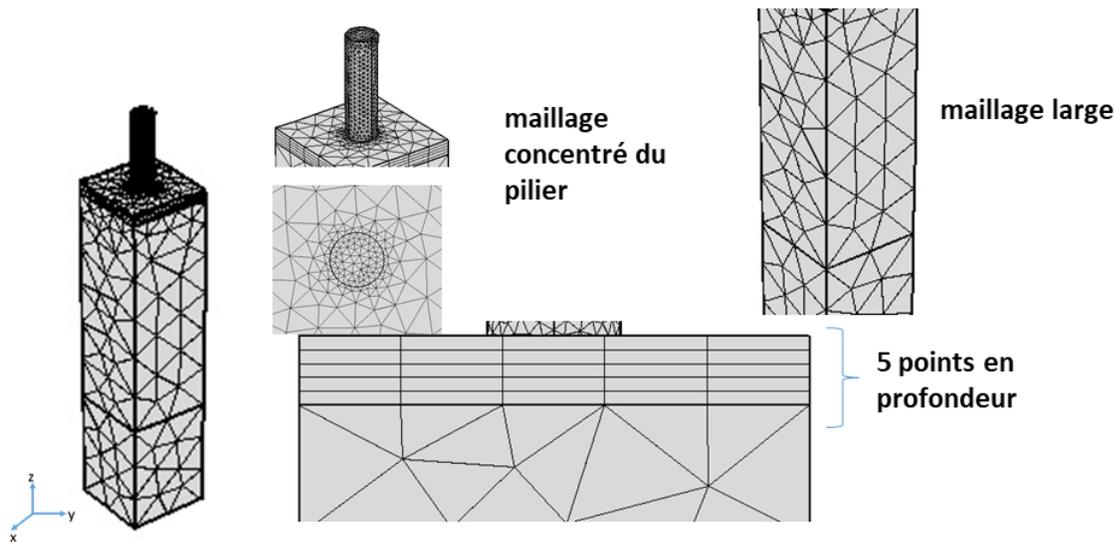


Figure II-5 : le maillage de la structure utilisée avec ses différents éléments.

Comme on a des conditions périodiques de Floquet dans les directions x et y , on va faire une copie de maillage afin de s'assurer d'un bon résultat de la simulation.

II.5.2. Analyse fréquentielle

Une fois on trouve et on étudie, numériquement, les valeurs propres on passe à un nouveau type d'étude, domaine d'étude de fréquence ou l'analyse fréquentielle.

Cette méthode de résolution ne permet pas de déterminer les valeurs propres du problème. Afin de réaliser l'étude de l'analyse fréquentielle on a recours à une source ou force monochromatique, harmonique ; polariser verticalement (paragraphe II.3). On balaye par un domaine de fréquence adapté aux résonances des piliers. Le balayage en fréquence permet également d'étudier les

différents comportements du résonateur en fonction de la fréquence par une extraction des trois composantes du champ de déplacement dans la structure pour chaque fréquence d'excitation.

La propagation des ondes est modélisée par des équations issues des ondes élastiques. Les équations complètes dépendent du temps, soit une excitation harmonique du champ \mathbf{F} à dépendance temporelle de la forme $\mathbf{F} = \mathbf{F}e^{i\omega t}$. Cette forme de \mathbf{F} engendre une réponse également harmonique pour chaque fréquence donnée. Le temps peut être entièrement enlevé de la force excitatrice et la variable d'entrée devient ω et par conséquent la fréquence f ($\omega = 2\pi f$). Cette procédure est ce qu'on appelle travailler dans un domaine fréquentiel ou domaine fréquentiel de Fourier. L'exploitation de ce calcul sera en termes d'amplitude de résonance des piliers et de coefficient de transmission. L'excitation de la force va imposer une certaine symétrie au système d'où on peut s'attendre à ne pas avoir une excitation de tous les modes observés à l'étude des valeurs propres.

II.5.3. PML

Les PMLs (Perfectly Matched Layers) ou les couches à absorptions parfaites sont des outils que Comsol Multiphysics offre, et sont utilisés tout au long du chapitre 2 et chapitre 3.

Les couches à absorption parfaites (PML) est un domaine ou une couche (parfois appelée couche spongieuse) qui est ajouté(e) à un modèle acoustique pour imiter un domaine infini ouvert et non réfléchissant. Elles mettent en place un domaine parfaitement absorbant comme alternative aux conditions limites périodiques ou continues, réfléchissantes ou non réfléchissantes.

Les PMLs fonctionnent avec tous les types d'ondes, pas seulement les ondes planes. Elles sont également efficaces sous des angles d'incidence très obliques. Dans les domaines fréquentiels, le PML impose une transformation de coordonnées à valeur complexe au domaine sélectionné qui le rend effectivement absorbant à une impédance d'onde maintenue, et éliminant ainsi les réflexions à l'interface. Dans le domaine temporel, des équations supplémentaires sont résolues dans le PML pour les équations transformées de Laplace inverses.

Les PMLs sont utilisés pour simuler un substrat semi infini et pour éviter les problèmes des réflexions de surface dans le cas des valeurs propres et pour (voir fig. 13) et de même on utilise les PMLs dans les analyses fréquentielles pour éviter des réflexions de surfaces qui peuvent cachés des résonances de piliers ou bien engendrer un bruit assez important.

II.6. Etude des matériaux

L'objectif de ce chapitre est de mettre en évidence les modes de résonances fondamentaux des piliers déposés sur une surface multicouche et d'étudier leurs comportements en fonction de la nature physique et géométrique des composants constitutifs à savoir le pilier, la couche diélectrique, la couche métallique et le substrat. Les éléments pertinents de l'étude sont les fréquences, les amplitudes, les facteurs de qualité et les coefficients de couplage des modes de résonance. Pour répondre à ces objectifs, nous disposons de deux outils numériques de calcul, à savoir les courbes de dispersion et la représentation des modes propres de résonance et les courbes de transmission en fréquence mettant en évidence l'interaction des modes avec une onde incidente.

II.6.1. Courbes de dispersion - Etude des valeurs propres

II.6.1.1. Couche diélectrique en silice (SiO_2)

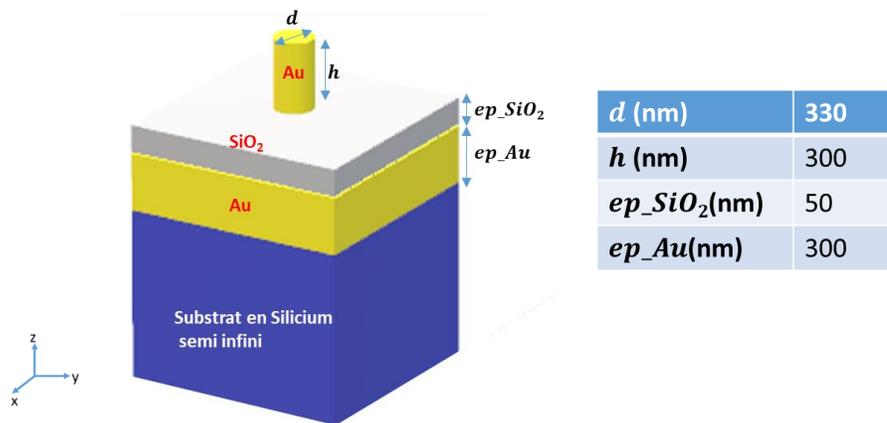


Figure II-6 : Modèle utilisé pour calculer les valeurs propres de la structure Au-SiO₂-Au-Si, avec des conditions périodiques de Floquet dans les directions x et y .

La Figure II-6 montre la structure étudiée avec les paramètres géométriques choisis. Dans cette première géométrie, le pilier et la couche métallique sont en Au, le diélectrique est en SiO₂. L'ensemble est déposé sur un substrat de Si. Les paramètres sont définis comme $h = 300$ nm, $d = 300$ nm, $ep_{\text{SiO}_2} = 50$ nm et $ep_{\text{Al}} = 300$ nm (figure II-6).

Nous nous intéressons tout d'abord à l'effet de hauteur des piliers, Pour cela, on commence par le rapport d'aspect $h/d \cong 1$. Avec ce ratio, la figure II-7 montre les courbes de dispersions de la structure Au-SiO₂-Au-Si, avec les champs de modes acoustiques et leurs fréquences respectives.

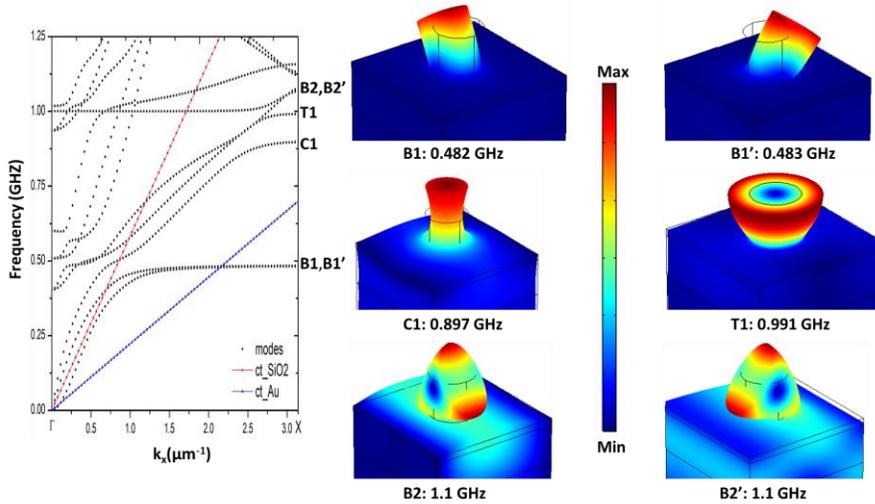


Figure II-7 : (gauche) Courbes de dispersions d'un pilier en or sur un substrat multicouche où le diélectrique est la silice. (droite) Champs de déplacement des 6 premiers modes de résonances du pilier.

La figure II-7 montre la courbe de dispersions dans la direction principale $[\Gamma X]$ de la zone de Brillouin réduite. Dans la gamme de fréquences inférieures à 1.1 GHz, on obtient trois types de modes de résonance du pilier : le mode de flexion ou *bending mode*, le mode de compression ou *compressional mode* et le mode de torsion ou *torsional mode*. On observe les modes dans l'état fondamental, puis d'ordres supérieurs pour certains d'entre eux. En termes de notation, nous utiliserons les conventions suivantes ; les modes de flexion sont notés par **B(ordre)** ; le mode de compression par **C(ordre)** ; le mode de torsion par **T(ordre)**. Dans le cas de la structure Au-SiO₂-Au-Si, le mode de flexion présente plusieurs ordres de vibration dans la gamme de fréquence considérée. Enfin, compte tenu de la symétrie, les modes sont parfois dégénérés selon les deux directions du plan (x, y).

Pour une fréquence inférieure à 1.1 GHz, on a obtenu six modes de vibration, deux modes de flexion du premier ordre B1 et B1' (0.482 GHz), un mode de compression C1 (0.897 GHz), un mode de torsion T1 (0.991 GHz) et deux modes de flexion du second ordre B2 et B2' (1.1 GHz) Les modes B1' et B2' sont respectivement orthogonaux aux modes B1 et B2.

II.6.1.2. Couche diélectrique en polymère

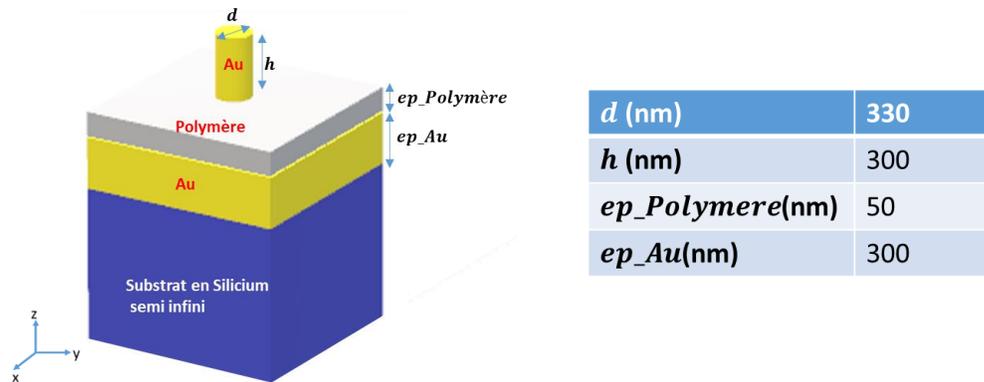


Figure II-8 : Le modèle utilisé pour calculer les valeurs propres de la structure Au-Polymère-Au-Si, avec des conditions périodiques de Floquet dans les directions x et y .

Nous avons remplacé le SiO_2 par un polymère qui présente des modules d'Young très inférieurs. Les polymères choisis sont des polymères usuels comme le polyimide (PI), le Polyméthylmethacrylate (PMMA), le SU-8 photorésistant (SU-8), et le Cytop (Cy). La structure représentée figure II-8 est la structure utilisée pour calculer les valeurs propres et les champs de déplacements de la structure Au-polymère-Au-Si. La seule modification porte sur la nature de la couche diélectrique. Les effets des 4 polymères cités au-dessus sont décrits ci-après.

La figure II-9 montre les courbes de dispersions de la structure Au-Polyimide-Au-Si, avec les champs des modes acoustiques et leur fréquence respectifs. On retrouve les 6 modes décrits précédemment avec cependant une diminution importante en fréquence : B1 et B1' à 0.237 GHz, B2 et B2' à 0.632 GHz, T1 à 0.387 GHz et C1 à 0.528 GHz.

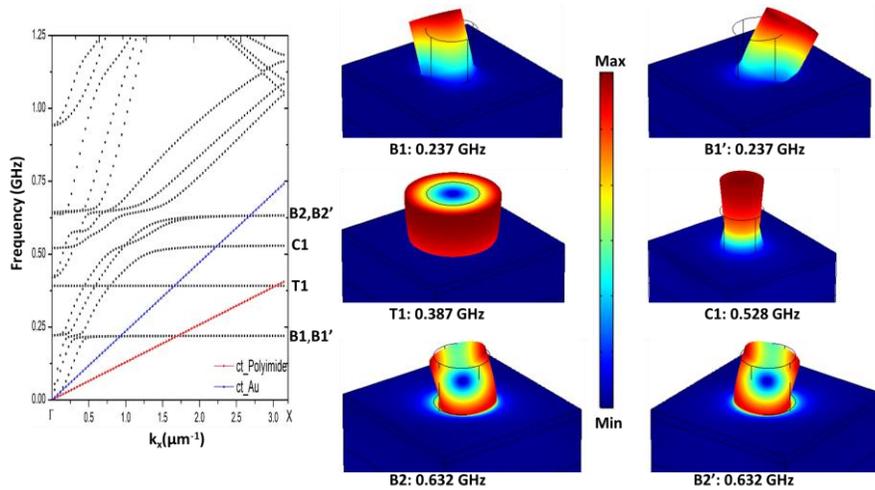


Figure II-9 : (gauche) Courbes de dispersion d'un pilier en or sur un substrat multicouche où le diélectrique est le polyimide. (droite) Champs de déplacement des 6 premiers modes de résonances du pilier.

On remarque une diminution importante des fréquences de résonances une fois lorsqu'on passe de la silice au polymère. Cette diminution est attribuée à la différence de module de Young entre le polymère et la silice (environ un facteur 10). Sur la base du modèle masse ressort (Chap. 1, paragraphe I.4.2), la fréquence ω est proportionnelle à la raideur du ressort K . La raideur étant elle-même proportionnelle au module de Young E , on retrouve une dépendance cohérente de ω qui décroît lorsque E diminue. La conclusion est la même pour les deux autres types de polymère, le PMMA et le SU8, dont les courbes de dispersion sont présentées sur les figures II-10 et II-11.

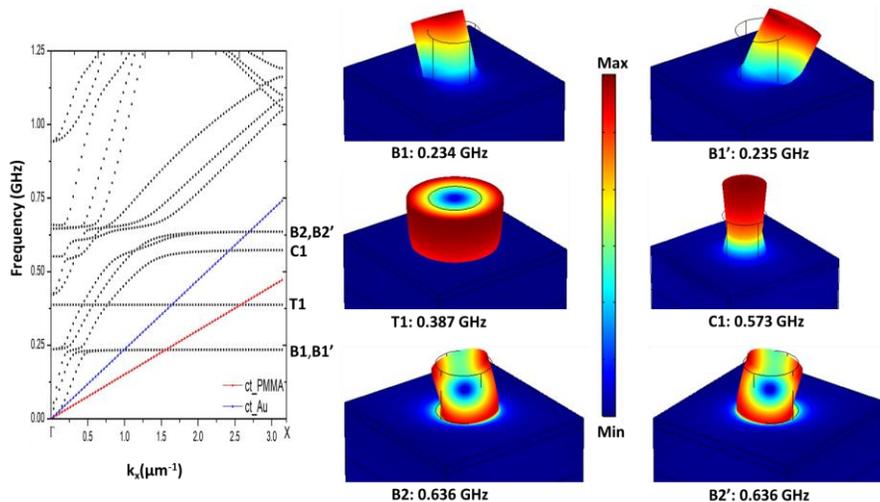


Figure II-10 : (gauche) Courbes de dispersion d'un pilier en or sur un substrat multicouche où le diélectrique est le Polyméthylmethacrylate (PMMA). (droite) Champs de déplacement des 6 premiers modes de résonances du pilier.

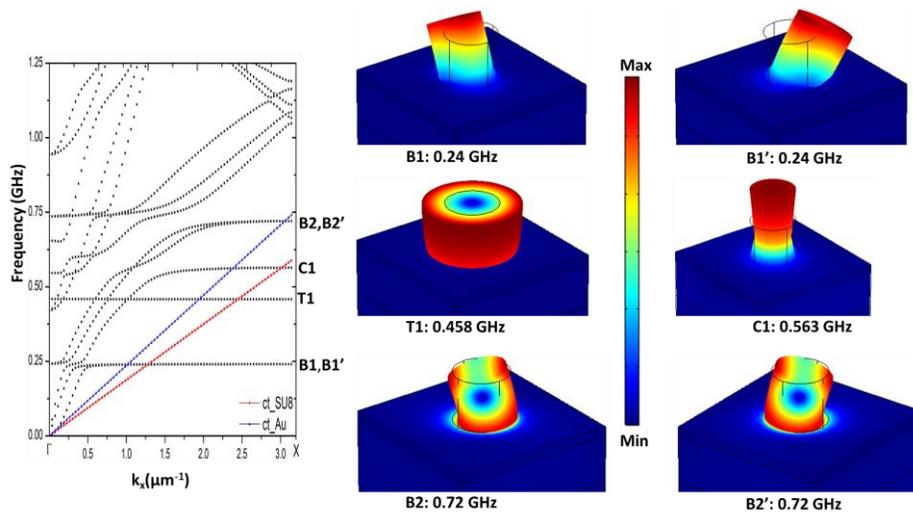


Figure II-11 : Courbes de dispersions d'un pilier en or sur un substrat multicouche où le diélectrique est le Photorésistant (SU8). (droite) Champs de déplacement des 6 premiers modes de résonances du pilier.

Le dernier polymère envisagé pour la couche diélectrique est le Cytop, un polymère à base de fluor. La figure II-12 montre les courbes de dispersions de la structure Au-Cytop-Au-Si, avec les champs des modes acoustiques et leur fréquence respectifs. Pour ce dernier polymère, les valeurs des fréquences propres des modes de résonances sont divisées par deux en comparaison avec les autres polymères, ce qui est attribué au faible module de Young E , et la densité de matière ρ qui est relativement élevé par rapport aux autres paramètres.

Ce résultat est à rapprocher des paramètres physiques.

Le Cytop, un polymère développé au Japon, est utilisé pour enrober en film mince des diverses structures, de même le Cytop peut être utilisé pour fabriquer des substrats ou des couches d'épaisseurs inférieures à $1 \mu\text{m}$ (cette spécialité est spécifique à l'existence du fluor), d'où la demande pour ce produit augmente dans les milieux électroniques.

Diverses méthodes de revêtement existent : le revêtement par centrifugation, le revêtement par immersion, le revêtement par pulvérisation. La distribution et le revêtement peuvent être choisis en fonction de la forme du substrat. Le Cytop représente une spécificité que son épaisseur est assez homogène sur les substrats indépendamment de la méthode de revêtement.

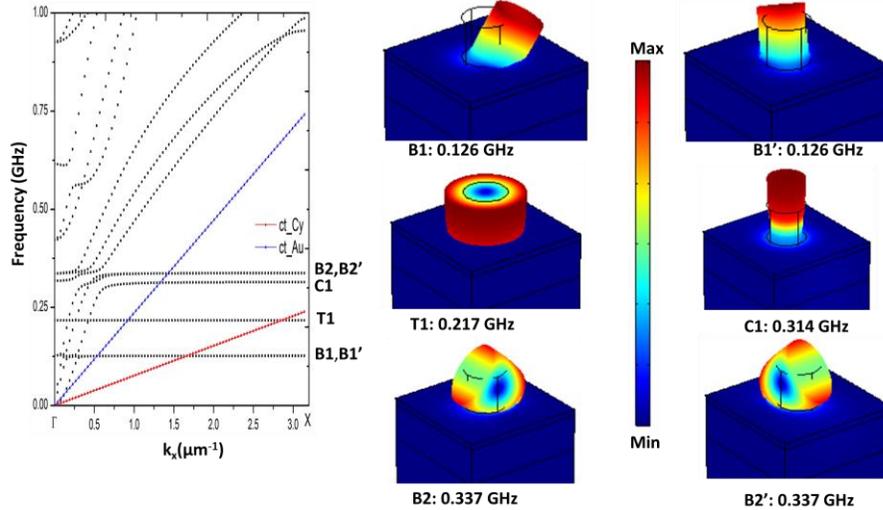


Figure II-12 : Courbes de dispersions d'un pilier en or sur un substrat multicouche où le diélectrique est le Cytop. (droite) Champs de déplacement des 6 premiers modes de résonances du pilier.

Les valeurs des fréquences des 6 premiers modes sont rassemblées dans le tableau 3 pour l'ensemble de matériaux constituant la couche diélectrique.

Couche diélectrique	B1, B1' (GHz)	B2, B2' (GHz)	C1 (GHz)	T1 (GHz)
SiO ₂	0.48	1.1	0.90	0.99
Polyimide	0.24	0.63	0.53	0.39
PMMA	0.24	0.72	0.56	0.46
SU8	0.23	0.64	0.57	0.39
Cytop	0.13	0.34	0.31	0.22

Tableau IV : Récapitulatif des fréquences des modes de résonances.

II.6.2. Analyse fréquentielle en transmission

Après avoir étudié les valeurs propres pour les différents matériaux on s'intéresse maintenant à l'étude fréquentielle de la transmission d'une onde générée en amont du pilier. Cette étude va nous permettre de comprendre et d'analyser l'excitation et le couplage des modes de résonance du pilier avec une onde incidente de surface. La discussion portera alors sur les amplitudes et facteurs de qualité des pics ou zéros de transmission liés aux modes de résonances. La figure II-14 montre le modèle utilisé pour cette étude.

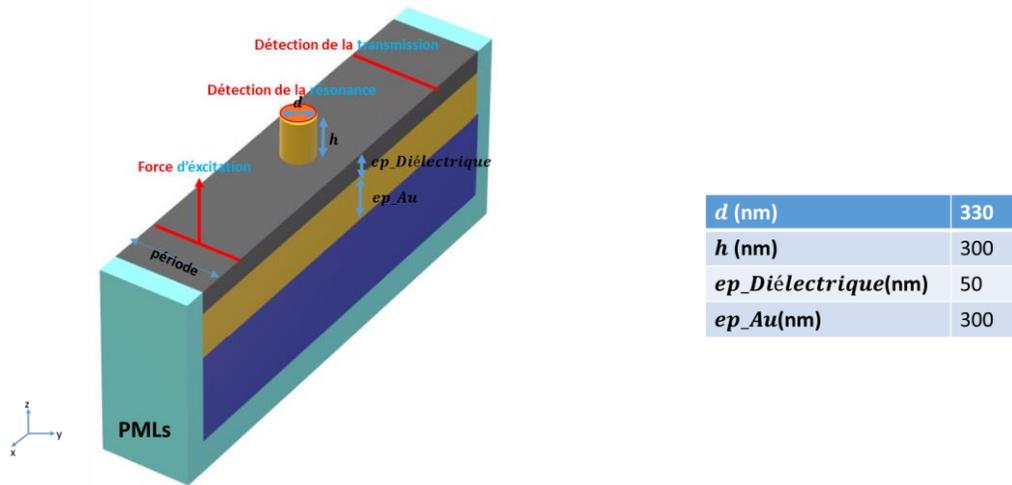


Figure II-13 : Le modèle numérique utilisé pour simuler l'excitation d'un pilier surmonté sur un substrat multicouche, semi infini. On prend des conditions périodiques de Floquet dans la direction y . On a des PMLs pour la direction de propagation de l'onde-direction de propagation parallèle à l'axe des x .

Pour l'analyse fréquentielle on suppose une force excitatrice monochromatique parallèle à la direction z comme discuté dans le paragraphe II.3. On choisit des conditions périodiques de Floquet dans la direction y avec une grande période $p = 5 \cdot h$ afin de réduire l'interaction entre les piliers.

On choisit de mettre des PMLs dans la direction de propagation de l'onde afin d'éviter une réflexion en bord de cellule. Les paramètres géométriques utilisés pour simuler ce modèle sont, comme précédemment, $h = 300$ nm $d = 300$ nm $ep_diélectrique = 50$ nm et $ep_Au = 300$ nm. Le calcul en transmission a été réalisé dans le cas où la couche diélectrique est la silice et un polymère.

II.6.2.1. Couche diélectrique en silice (SiO_2)

Dans le modèle de la figure II-13, on va choisir comme diélectrique la silice. La figure II-14 montre les courbes de résonances et de transmission de cette géométrie. Pour la courbe de transmission, la détection est faite en champ lointain c'est-à-dire à une distance de 2λ à 3λ après le pilier. Pour la courbe de résonance on calcule le module du champ de déplacement, $\sqrt{u^2 + v^2 + w^2}$ sur la surface supérieure du pilier. Les trois composantes u , v et w représentent les déplacements respectifs dans les directions x y et z . Pour les courbes de résonances, l'amplitude est représentée sur l'axe des y par une unité arbitraire. La transmission est obtenue en rapportant le signal détecté à l'onde incidente générée par la source. Sur la figure II-15, la courbe bleue représente la courbe

de transmission dans laquelle on voit deux zéros de transmission, associés à 2 pics dans la courbe de résonance (en noir). Les cartes de champ, calculées aux fréquences des deux zéros de transmission montrent que leur origine provient des résonances des modes du pilier B1 et C1. On note que le mode de torsion ne peut pas être excité compte tenu de la symétrie de l'onde incidente.

Pour le mode de compression C1 à la fréquence 0.897 GHz, le facteur de qualité Q défini par $Q = \frac{f_0}{\Delta f} = 8.97$, où f_0 est la fréquence maximale du pic et Δf représente la largeur à mi-hauteur, ce facteur est de $Q = 75$ pour le mode B1.

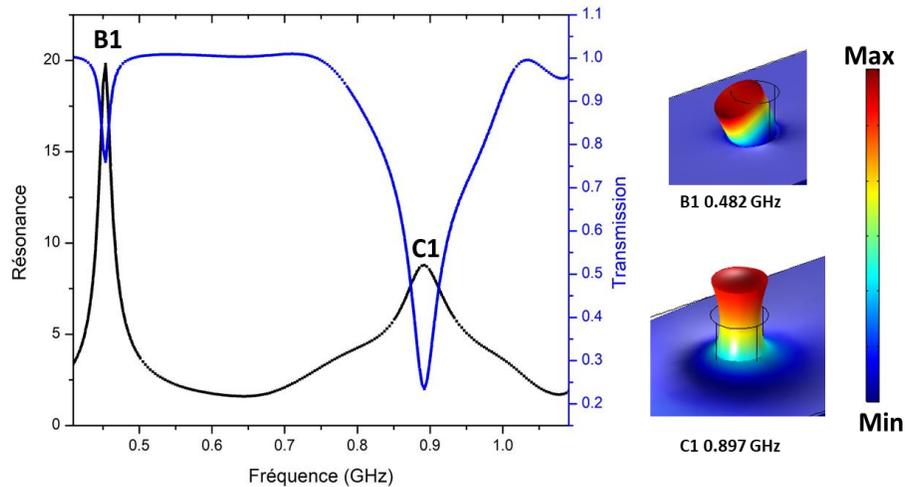


Figure II-14 : (gauche) Courbes de résonance (noir) et de transmission (bleue) d'un pilier en or sur un substrat multicouche semi infini de SiO₂ Au et Si. (droite) Champs de déplacements aux fréquences des zéros de transmission.

Dans le modèle de la figure II-13, le diélectrique est maintenant du polyimide (PI). La figure II-15 montre les courbes de résonances et de transmission dans la même gamme de fréquence. On remarque maintenant la présence de 3 zéros de transmission. En calculant les champs de déplacement aux fréquences des zéros de transmission, on peut identifier leur origine. Le mode de flexion de deuxième ordre, B2 vient s'ajouter aux modes de flexion B1 et de compression C1.

En termes de comparaison avec le diélectrique plus rigide comme la silice, les fréquences sont plus basses, ceci en cohérence avec ce qui a été constaté dans la courbe de dispersion. Par ailleurs, l'amplitude du mode de compression est deux fois plus grande pour le PI que pour la silice avec un meilleur facteur de qualité (facteur 4). Ceci indique un meilleur confinement de l'onde à

l'intérieur du pilier. Le mode de flexion B1, quant à lui, semble peu affecté par la nature de la couche diélectrique, en termes d'amplitude et de facteur de qualité.

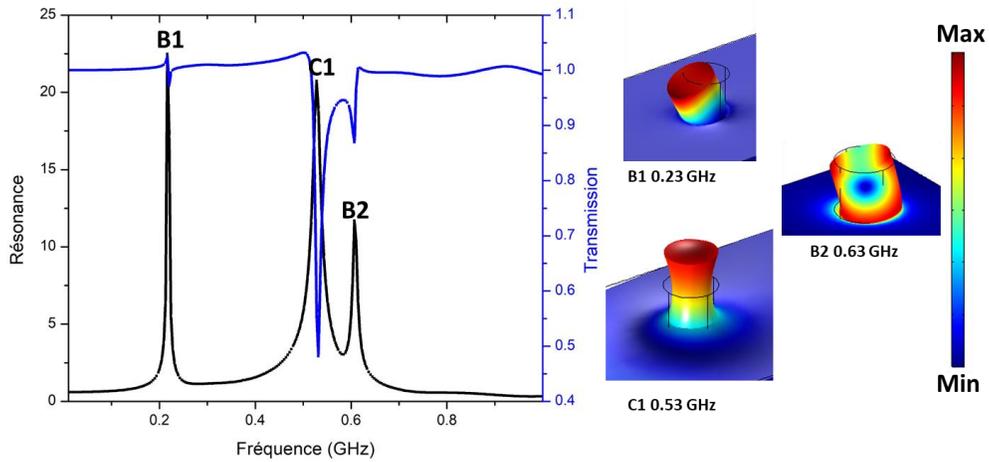


Figure II-15 : (gauche) Courbes de résonance (noir) et de transmission (bleue) d'un pilier en or sur un substrat multicouche semi infini de SiO_2 Au et PI. (droite) Champs de déplacement aux fréquences des zéros de transmission.

Les courbes de transmission pour les autres polymères, PMMA, SU8 et Cy sont données ci-après (figs II-16, II-17 et II-18).

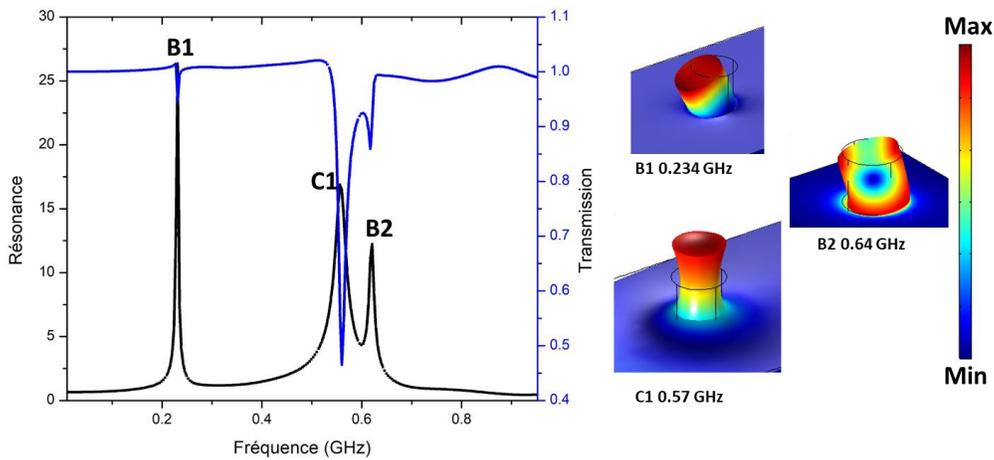


Figure II-16 : (gauche) Courbes de résonance (noir) et de transmission (bleue) d'un pilier en or sur un substrat multicouche semi infini de SiO_2 Au et PMMA. (droite) Champs de déplacement aux fréquences des zéros de transmission.

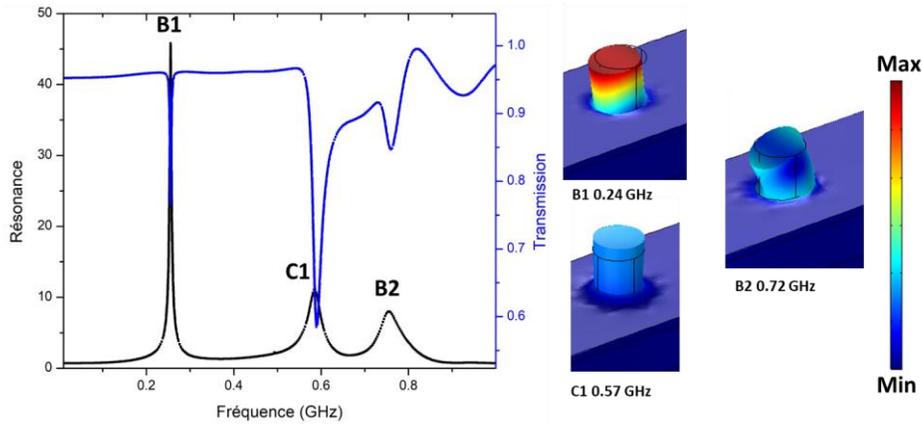


Figure II-17 : (gauche) Courbes de résonance (noir) et de transmission (bleue) d'un pilier en or sur un substrat multicouche semi infini de SiO_2 Au et SU8. (droite) Champs de déplacement aux fréquences des zéros de transmission.

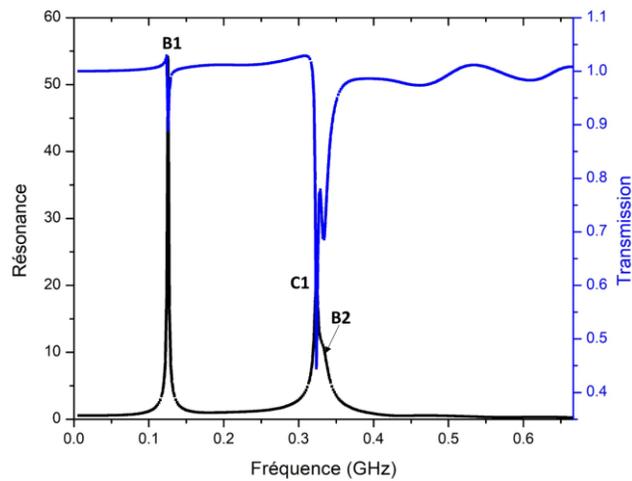


Figure II-18 : Courbes de résonance (noir) et de transmission (bleue) d'un pilier en or sur un substrat multicouche semi infini de SiO_2 Au et Cytop.

Les résultats des fréquences, amplitudes et facteurs de qualité des deux modes de flexion et de compression sont regroupés dans le tableau 4 pour l'ensemble des trois polymères étudiés.

	Fréquence (GHz)					Amplitude (arb. unit)					Facteur de qualité				
	SiO ₂	PI	PMMA	SU8	Cy	SiO ₂	PI	PMMA	SU8	Cy	SiO ₂	PI	PMA	SU8	Cy
B1	0.48	0.24	0.23	0.24	0.13	20	23	25	45	55	75	150	163	201	225
C1	0.89	0.53	0.57	0.56	0.31	10	20	17	10	20	8.9	32	26	15	25
B2	1.1	0.63	0.63	0.72	0.34	-	12	14	8	12	-	20	19	10	3

Tableau V : Récapitulatif des fréquences des modes de résonances en transmission.

Le tableau V montre la différence entre les modes de résonance du pilier en changeant le substrat. On peut diviser cette différence en 2 grandes familles : SiO₂ et polymères, puis dans les polymères on peut diviser entre : Cytop et les autres polymères.

La différence entre SiO₂ et polymères est claire. Au niveau des fréquences la fréquence de résonance du SiO₂ est 2 fois plus élevée que celle des polymères, de même le facteur de qualité du mode de compression est 3 à 4 fois plus petit.

Les polymères ont un module de Young 10 fois plus faible que le SiO₂ ce qui permet au mode de compression de sortir d'une façon plus intense.

Le Cytop ayant un module de Young deux fois plus petit que les autres modules de Young des autres polymères, on remarque une descente importante des fréquences de résonances.

Le tableau V montre les différences dues aux matériaux et nous permet de construire une idée plus pratique et plus idéale pour le choix des matériaux.

II.6.3 Effet du métal

Comme déjà évoqué dans le paragraphe II.4.2, l'aluminium est moins dispersif que l'or. On reprend la figure II-13 où l'Au est remplacé par l'aluminium à la fois pour le pilier et la couche métallique. L'étude est faite en considérant le Cytop comme diélectrique.

La figure II-19 montre les courbes de dispersions de la structure Al-Cytop-Al-Si, avec les champs des modes acoustiques et leur fréquence respectives.

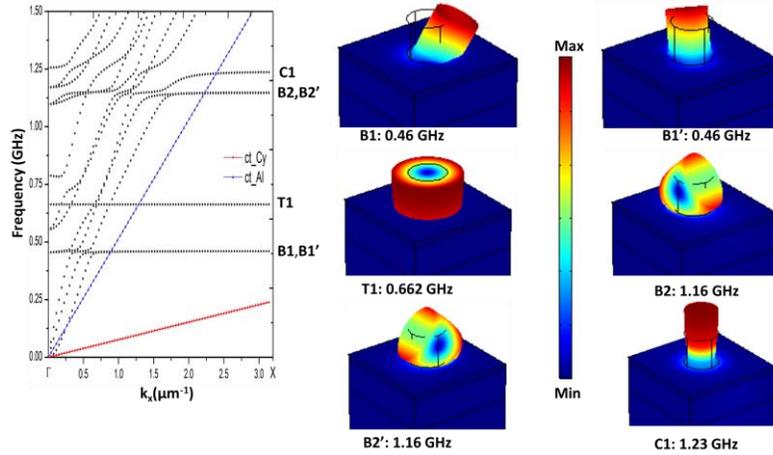


Figure II-19 : Courbes de dispersions d'un pilier en aluminium sur un substrat multicouche où le diélectrique est le Cytop et la couche métallique en aluminium. (droite) Champs de déplacement des 6 premiers modes de résonances du pilier.

Comparé au cas de l'Au, les fréquences des modes ont augmenté avec l'Al, ce qui est confirmé par la courbe de transmission présentée figure II-20.

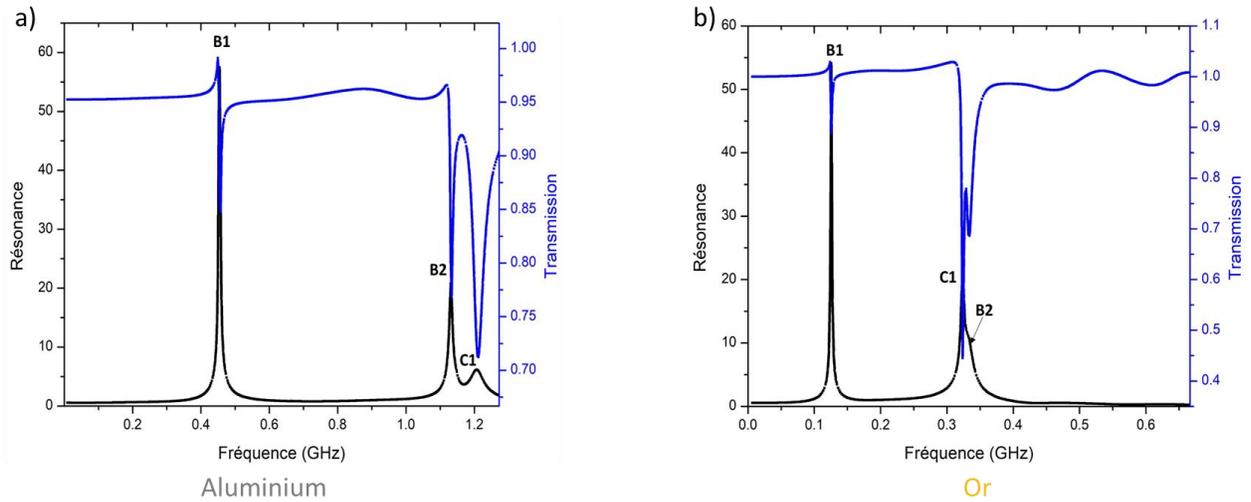


Figure II-20 : Courbes de résonance (noir) et de transmission (bleue) d'un pilier métallique sur un substrat multicouche semi infini de SiO₂ Métal et Cytop lorsque le métal est en a) Al et en b) Au.

II.6.4. Effet des paramètres géométriques

Plusieurs paramètres peuvent influencer les fréquences de résonance des piliers décrites ci-dessus. Parmi tous ces paramètres, les deux principaux identifiés sont la hauteur des plots et l'épaisseur de la couche diélectrique sur laquelle les piliers sont déposés. En conséquence, ce paragraphe va discuter une large gamme de variation de la hauteur du pilier h et d'épaisseur du diélectrique $ep_diélectrique$ en conservant le même diamètre d du pilier. Cette étude va être conduite pour deux types de diélectrique : la silice et le PMMA.

II.6.4.1. Couche diélectrique en PMMA

On commence par discuter l'effet de l'épaisseur du PMMA. La figure II-21 représente la variation des fréquences de résonances du pilier en fonction de l'épaisseur de la couche de PMMA. Cette étude se généralise aux autres polymères étudiés précédemment.

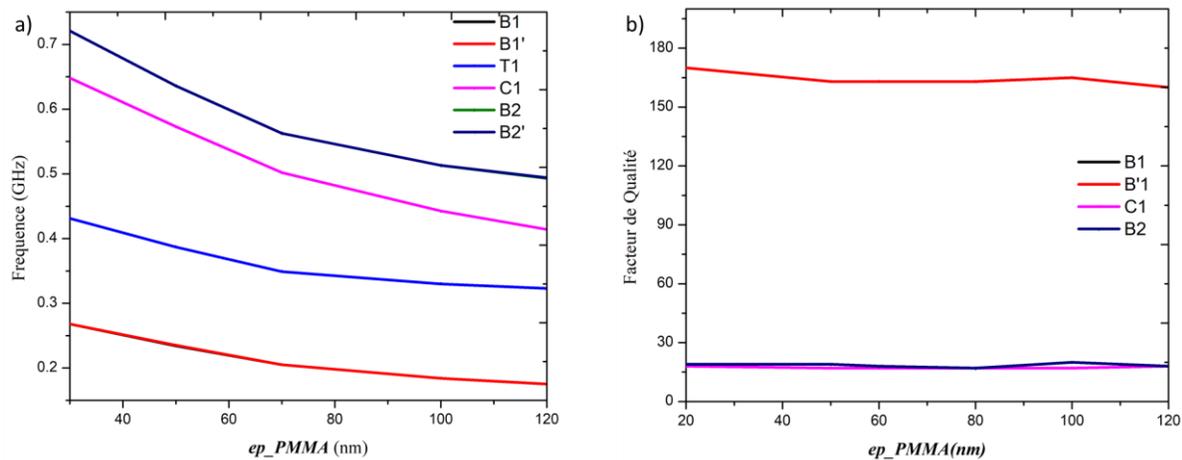


Figure II-21 : Evolution (a) des fréquences et (b) des facteurs de qualité des résonances : B1, B1', T1, C1, B2 et B2' en fonction de l'épaisseur de la couche de PMMA.

Le PMMA est considéré comme un matériau ductile possédant un module de Young relativement faible. Cette propriété peut être mesurée par le changement des fréquences des modes du pilier. A partir de la figure II-21, on observe que lorsque l'épaisseur augmente, l'ensemble des fréquences des modes diminue. Cependant, le taux de variation de la fréquence n'est pas le même pour tous les modes de résonances. Par exemple, le mode B2 présente une variation plus importante que B1 pour une même variation d'épaisseur.

Cette diminution va dépendre du mode et de la nature de l'interaction entre le pilier et la surface de PMMA.

Les facteurs de qualité ne changent pas visiblement en fonction de l'épaisseur du PMMA, c'est pour cela le paramètre épaisseur de PMMA ne va pas affecter les facteurs de Qualité.

Le second paramètre pertinent identifié est la hauteur h du pilier que l'on a fait varier jusqu'à 1.5 μm . La figure II-22 représente la variation des fréquences de résonances du pilier en fonction de la hauteur h du pilier, pour une couche de diélectrique de PMMA. Le diamètre, $d = 330$ nm, restant constant, c'est aussi le rapport d'aspect h/d qui varie alors de 0.6 à 4.5. Avec cette hauteur h qui augmente, on observe une diminution des fréquences de résonances.

En reprenant le modèle masse ressort expliqué au chapitre 1, l'augmentation de hauteur est cohérente avec l'augmentation de masse. Le mode de flexion du second ordre est celui qui présente la plus forte variation en fonction de la hauteur. De ce fait, on peut noter que les modes de compression C1 et de flexion de deuxième ordre B2 se croisent pour une hauteur de 1 μm . Cette géométrie a été utilisée précédemment pour mettre en évidence des propriétés de réfraction négative [11] et de focalisation dans les métasurfaces acoustiques [12, 13, 14].

En augmentant la hauteur du pilier le facteur de qualité du mode de compression augmente, le problème est la fabrication de ces piliers qui ont un facteur de $h/d > 1$.

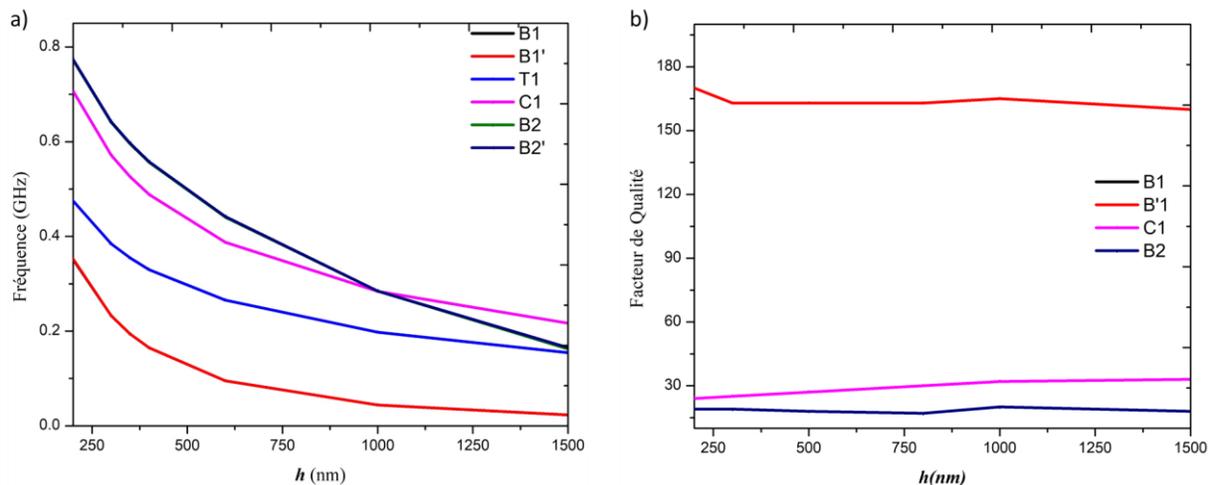


Figure II-22 : Evolution (a) des fréquences et (b) des facteurs de qualité des résonances B1, B1', T1, C1, B2 et B2' en fonction de la hauteur h du pilier (couche PMMA).

II.6.4.2. Couche diélectrique en SiO₂

On remplace maintenant le polymère par de la silice. La figure II-23 représente la variation des fréquences de résonances du pilier en fonction de l'épaisseur de la couche de silice. La silice est considérée un matériel rigide avec un module de Young relativement fort. On constate dans ce cas, un changement faible des fréquences des modes de résonances, qui restent quasiment constante pour une épaisseur variant de 20 à 100 nm. Les variations de la fréquence de résonance sont comprises entre 0.5% et 2%. Cette différence est presque négligeable en comparaison avec le polymère et des variations entre 25% et 45%.

Les facteurs de qualité sont indépendants de l'épaisseur de SiO₂.

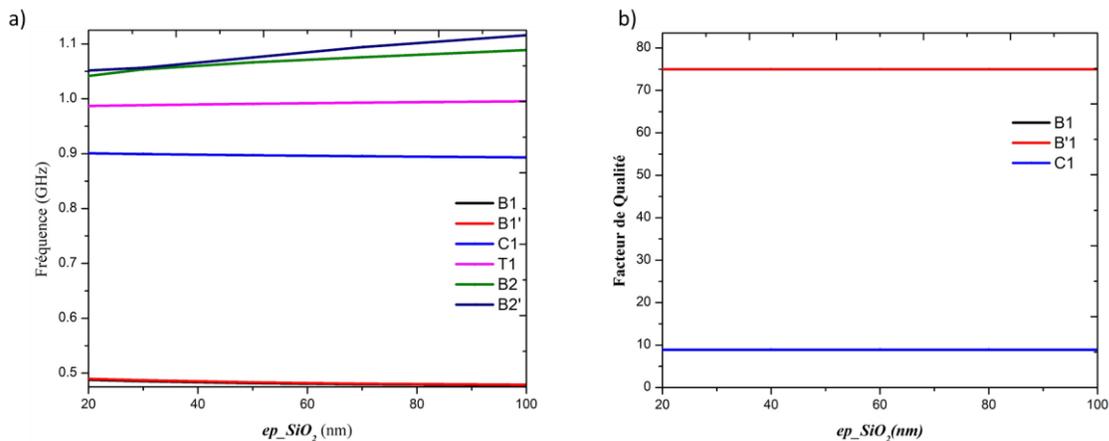


Figure II-23 : Evolution (a) des fréquences et (b) des facteurs de qualité des résonances : B1, B1', T1, C1, B2 et B2' en fonction de l'épaisseur de la couche de SiO₂.

La figure II-24 représente la variation des fréquences de résonances du pilier en fonction de sa hauteur h pour une couche de diélectrique en silice. Pour une épaisseur variant de 250nm à 1500 nm, la fréquence des modes de résonance du pilier diminue de manière importante avec l'augmentation de h . En comparaison avec le PMMA cette variation est même supérieure pour l'ensemble des modes.

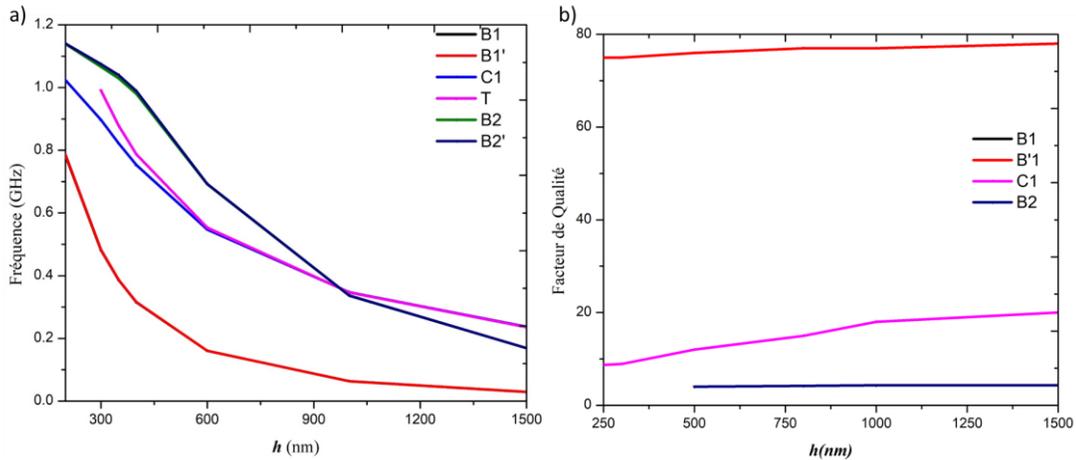


Figure II-24 : Evolution (a) des fréquences et (b) des facteurs de qualité des résonances : B1, B1', T1, C1, B2 et B2' en fonction de la hauteur h de la couche de PMMA.

En conclusion, pour le polymère, les deux paramètres, épaisseur de la couche et hauteur du pilier, jouent un rôle important dans la détermination des fréquences de résonances tandis que pour la silice, c'est uniquement la hauteur du pilier qui détermine les fréquences de résonance du pilier.

En augmentant la hauteur du pilier le facteur de qualité du mode de compression augmente, le problème est la fabrication de ces piliers qui ont un facteur de $h/d > 1$.

II.7 Discussion-conclusion

Dans le chapitre suivant, et tout au long de la thèse, nous allons nous intéresser à la possibilité d'une propagation d'une onde le long d'une chaîne de piliers. Pour atteindre cet objectif, nous allons étudier le couplage entre pilier. Pour cela, il est essentiel dans un premier temps, de disposer de modes de résonance bien identifiés, suffisamment distincts les uns des autres. Afin de comprendre leur rôle individuellement. Par ailleurs, il est envisagé deux perspectives à cette étude, non abordées dans ce travail de thèse. La première est une réponse optique des structures de piliers pour des problématiques optomécaniques et la seconde une caractérisation expérimentale des phénomènes de propagation acoustique dans les chaînes de piliers. Dans ce contexte, nous allons discuter la nature des matériaux et les paramètres géométriques utiles à la réalisation de ces deux objectifs.

D'un point de vue pratique, il faut respecter et combiner différentes de conditions et contraintes énumérées ci-après :

- Pour la fabrication, le rapport d'aspect, défini par le rapport entre la hauteur des piliers et leur diamètre (h/d), ne doit pas excéder 2 ou 3.
- Pour la caractérisation acoustique et optique, les matériaux devront supporter la puissance du laser utilisée pour l'excitation
- Pour l'exploitation des résultats physiques, nous allons chercher à avoir des modes de résonances individuels, et donc éviter leur superposition.
- Les résonances devront présenter des amplitudes et facteurs de qualité compatibles avec les mesures expérimentales.

Compte tenu de ces conditions, à la lecture des résultats présentés ci-dessus, nous proposons de considérer deux géométries selon l'objectif choisi :

La première pour le couplage des propriétés photonique et phononique : nous conservons la géométrie de la figure II-13 dans laquelle le Cy est choisie comme gap diélectrique. A terme, la géométrie suivante permettra une étude complète à partir de laquelle il sera possible d'exciter le plasmon et le phonon dans la même géométrie comme proposé dans l'article **Surface Acoustic Waves-Localized Plasmon Interaction in Pillared Phononic Crystals** [15] $h= 300$ nm, $d= 330$ nm, $ep_{\text{diélectrique}} = 50$ nm et $ep_{\text{métal}} = 300$ nm. Les structures les plus favorables sont les structures Au-SiO₂-Au-Si et Al-Cy-Al-Si.

- La seconde pour une étude purement acoustique du couplage et de la propagation élastiques dans les chaînes linéaires. Ce second objectif est celui développé dans la suite du travail. Dans ce cas, nous choisissons une géométrie plus simple, en considérant uniquement le pilier déposé sur un substrat semi-infini. L'ensemble, en Si, dont les paramètres géométriques sont précisés ci-dessous, permettra de mettre en évidence les modes de résonance de manière individuelle et d'étudier leur couplage et leur propagation le long de chaîne de piliers.

Dans ce chapitre on a présenté les différentes parties de la méthode numérique FEM, les conditions périodiques, les conditions limites et les PMLs (*perfectly matched layers*). Cette méthode a été utilisée pour les calculs théoriques des valeurs propres et l'étude des comportements fréquentiels de ces modes. Différents effets des paramètres physiques et géométriques ont été considérés

conduisant à une variation des facteurs de qualité, Q , entre 8 et 35. De même, nous avons pu comparer les 2 modes le mode B et le mode C. Le mode de flexion B présente une forte localisation à l'extrémité supérieure du pilier alors que le mode de compression C présente une interaction avec la surface du substrat conduisant à la présence d'un champ élastique à l'interface pilier / surface. En transmission, selon les paramètres géométriques choisis, il devient possible de recouvrir les champs élastiques entre deux piliers plus proches voisins. Ce recouvrement permet d'obtenir un couplage entre les piliers.

Nous avons discuté la faisabilité de ces structures, les avantages et les inconvénients, pour définir deux géométries, une pour le calcul couplé de l'optique et de l'acoustique, la seconde pour le calcul de la propagation et du couplage des modes comme nous allons le voir dans le chapitre suivant.

Références

- [1] M.L.Öveçoğlu, M.F.Doerner, W.D.Nix, Elastic interactions of screw dislocations in thin films on substrates, Vol 35, 12 (1987), 2947-2957.
- [2] N. Fang, et al., Science 308, 534 (2005). [12] D. O. S. Melville, et al., Opt. Exp. 13, 2127 (2005).
- [3] D. O. S. Melville, et al., Curr. Appl Phys. 6, 415 (2006). [14] J. T. Shen, et al., Appl. Phys. Lett. 80, 3286 (2002).
- [4] J. B. Pendry, Contemp. Phys 45, 191 (2004).
- [5] J. H. Weaver, et al., Optical properties of selected elements 82 ed. (CRC Press, Boca Raton, FL, 2001).
- [6] Sonelastic, advanced excitation technique, fundamentals, www.sonelastic.com/en/fundamentals/
- [7] Engineering ToolBox, (2003). *Young's Modulus, Tensile Strength and Yield Strength Values for some Materials*. www.engineeringtoolbox.com/young-modulus
- [8] Agc-chemicals, fluorine products detail, www.agc-chemicals.com/jp/en/fluorine/products/detail/index.html
- [9] E.Dieulesaint et Daniel Royer, ed. (1999) *Elastic waves in Solids I & II, 3rd ed*
- [10] Comsol, geometry in comsol, Multiphysics, www.comsol.fr/learning-center/building-the-mesh-for-a-model-geometry-in-comsol-multiphysics
- [11] Pendry, J. Negative Refraction. *null* **2004**, 45 (3), 191–202.
- [12] Y. Li, B. Liang, Z. M. Gu, X. Y. Zou, and J. C. Cheng, Appl. Phys. Lett. **103**, 053505 (2013).
- [13] Y. Xie, B. I. Popa, L. Zigoneanu, and S. A. Cummer, Phys. Rev. Lett. **110**, 175501 (2013).
- [14] S. H. Lee, C. M. Park, Y. M. Seo, Z. G. Wang, and C. K. Kim, Phys. Rev. Lett. **104**, 054301 (2010).
- [15] A. Noual, R. Akiki, Y. Pennec, E. H. El Boudouti, et B. Djafari-Rouhani. 2020. “Surface Acoustic Waves-Localized Plasmon Interaction in Pillared Phononic Crystals.” *Physical Review Applied* **13**(2), 024077.

CHAPITRE III. Modèle Al-Si

III.1. Introduction

Dans le chapitre précédent, l'étude a porté sur une structure constituée de cylindres métalliques déposés sur le multicouche diélectrique / métal, l'ensemble sur substrat de silicium. Nous avons pu établir les conditions de résonances mécaniques des structures de pilier, leurs fréquences de résonance et leurs évolutions en fonction des paramètres géométriques. Le choix de cette géométrie est lié à la possibilité duale de l'excitation mécanique et électromagnétique de la surface structurée. Ces résultats ont été utilisés dans le cadre du travail de couplage entre phonon et plasmon et ont donné lieu à une publication [1-2].

Cependant, dans le cas d'une étude purement mécanique, la géométrie proposée peut être simplifiée en fonction de l'objectif à atteindre. En effet, nous proposons ici d'étudier les propriétés élastiques des surfaces et de l'effet d'un désordre dans un métamatériau acoustique constitué de piliers. L'effet du désordre est donc ici l'objectif principal de l'étude et non plus d'aller vers les propriétés de couplage plasmome-mécaniques. Pour rendre plus accessible cet objectif, à la fois vis-à-vis de la compréhension physique des phénomènes de désordre mais aussi sur les aspects techniques de temps et de capacité mémoires dans les calculs numériques, nous allons partir de la géométrie de piliers d'Aluminium sur un substrat de silicium. L'avantage du choix de ces matériaux est qu'ils présentent une fabrication connue et maîtrisée et une des conditions expérimentales favorables pour leur caractérisation.

Nous allons étudier une cellule élémentaire faite d'un pilier de hauteur h et de diamètre d déposé un substrat semi-infini. Avant de nous intéresser aux effets du désordre, nous allons commencer par étudier l'interaction entre deux piliers d'aluminium par rapport à deux paramètres, la distance entre deux piliers et l'angle entre les deux piliers par rapport à la direction de propagation de l'onde incidente. L'étude est étendue à la propagation d'une onde dans une chaîne linéaire. Enfin, l'effet du désordre sera présenté dans le cas d'une chaîne aléatoire.

III.2. Contexte

Dans le chapitre précédent, nous avons identifié trois résonances fondamentales du pilier, à savoir la flexion, la compression et la torsion. La valeur des fréquences propres associées à ces trois

résonances dépendent des paramètres géométriques et physiques de la structure. En conséquence, selon les valeurs de ces paramètres, les fréquences peuvent être identiques conduisant à une superposition des deux modes. Cette propriété conduit à des propriétés intéressantes. Par exemple, la résonance des modes de compression et de flexion d'ordre deux positionnés à une même fréquence a permis de mettre en évidence des propriétés physiques originales comme la réfraction négative [3-12] ou encore les propriétés de contrôle des fronts d'onde par des métasurfaces formées de piliers autour des réflexions et des réfractions anormales [13-14].

Dans ce chapitre, nous cherchons à isoler les modes de résonance les uns des autres afin de comprendre individuellement les propriétés de couplage entre piliers selon la nature du mode parmi les modes de propagation B1, C1 et B2. Pour cela, nous allons varier le rapport h/d afin d'éviter le chevauchement entre les pics de résonance du mode C1 et B2.

III.3. Structure théorique

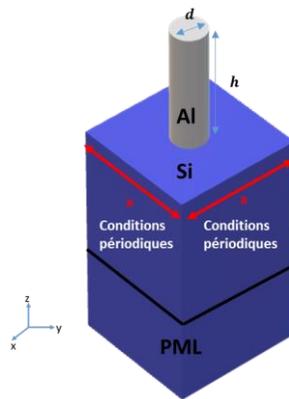


Figure III-1 : Cellule unitaire utilisée pour le calcul des valeurs propres de la structure Al-Si, avec des conditions périodiques de Floquet appliquées dans les directions x et y.

La structure phononique étudiée dans ce chapitre est constituée d'un arrangement périodique de piliers d'Al déposés sur un substrat semi-infini de Si. La figure III-1 montre la représentation 3D de la structure phononique de la cellule élémentaire utilisée pour le calcul numérique de la courbe de dispersion. Le paramètre a correspond à la période de la structure, h et d représentent respectivement la hauteur et le diamètre du pilier. La structure est périodique dans les directions x et y et est supposée semi-infinie dans la direction z par implémentation d'une couche absorbante de type Perfect Matching Layer (PML) au fond de la cellule.

III.4. Courbes de dispersion, de résonance et de transmission

La figure III-2 présente la courbe de dispersion et la représentation des valeurs propres en bord de zone de Brillouin (X) pour $h = 1000$ nm, $d = 200$ nm et $a = 800$ nm.

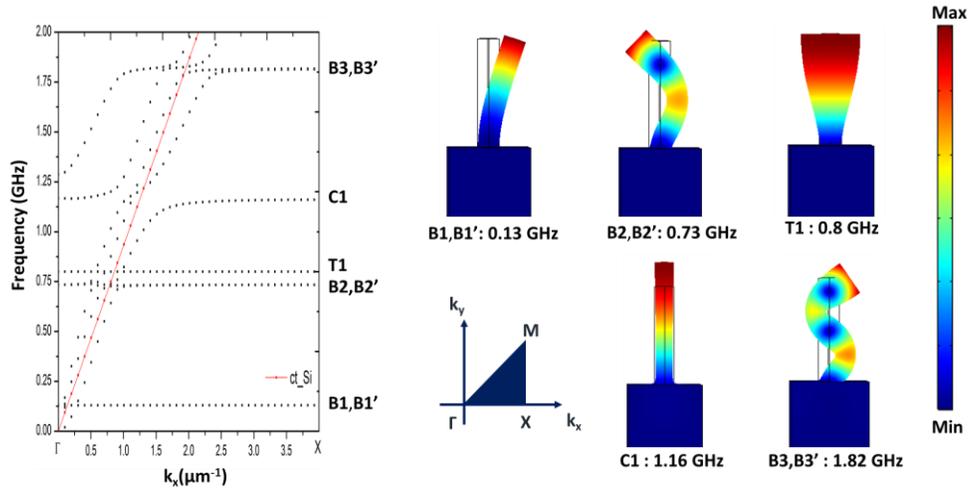


Figure III-2 : (gauche) Courbe de dispersion du pilier en Al sur un substrat semi infini de Si. (droite) Carte des champs de déplacement pour les cinq premiers modes de résonances du pilier au point de haute symétrie X.

Avec le rapport $h/d = 5$, on remarque que les modes de résonances sont bien espacés les uns des autres et donc bien identifiés sur les cartes de champs. La fréquence de résonance du mode de compression C1 est 1.16 GHz.

Courbes de transmission et de résonance

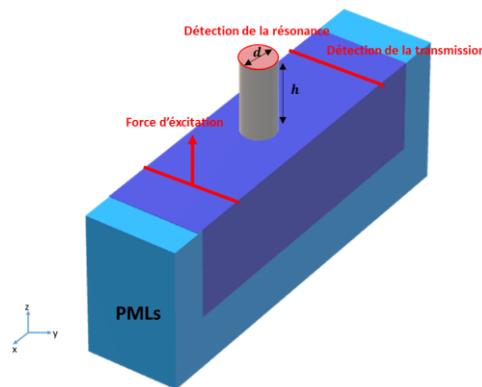


Figure III-3 : Modèle numérique utilisé pour simuler l'excitation d'un pilier d'Al surmonté sur un substrat semi infini de Si. On prend des conditions périodiques de Floquet dans la direction y. La surface supérieure est laissée libre et des conditions PML sont appliquées sur les autres faces.

Pour l'analyse fréquentielle on suppose une force excitatrice monochromatique parallèle à la direction z (figure III-3). On choisit des conditions périodiques de Floquet dans la direction y avec une période $l = 1000$ nm suffisamment grande pour réduire l'interaction entre les piliers des deux cellules voisines.

On enregistre à la fois l'amplitude de résonance sur la surface supérieure du pilier en aluminium et la transmission en champ lointain, à une distance d'environ 3λ derrière le pilier. Les courbes (figure III-4) ainsi obtenues montrent les zéros de transmission associés aux résonances B1, B2, C1 et B3 du pilier. On note qu'avec les paramètres géométriques choisis, les résonances apparaissent individuellement et bien séparées les unes des autres. Par comparaison, le facteur de qualité de C1 ($Q = 48$) est plus faible que ceux des résonances de flexion de $Q = 125$.

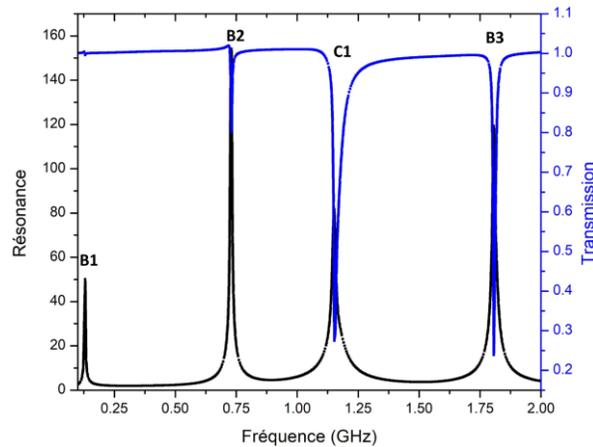


Figure III-4 : Courbes de résonance (noir) et de transmission (bleu).

III.5. Interaction entre deux piliers d'aluminium

Nous souhaitons ici étudier le couplage entre deux résonateurs mécaniques excités par une onde de surface. Afin d'analyser le couplage, on étudie l'influence de différents paramètres : l'orientation de la paire de piliers vis-à-vis de la direction de l'onde incidente et la distance séparant les deux piliers (distance l).

III.5.1. Modèle numérique

La figure III-5 représente le modèle utilisé pour l'étude du couplage entre deux piliers. On suppose une force excitatrice monochromatique parallèle à la direction z . Les deux piliers sont identiques, de hauteur $h = 1000$ nm et de diamètre $d = 200$ nm.

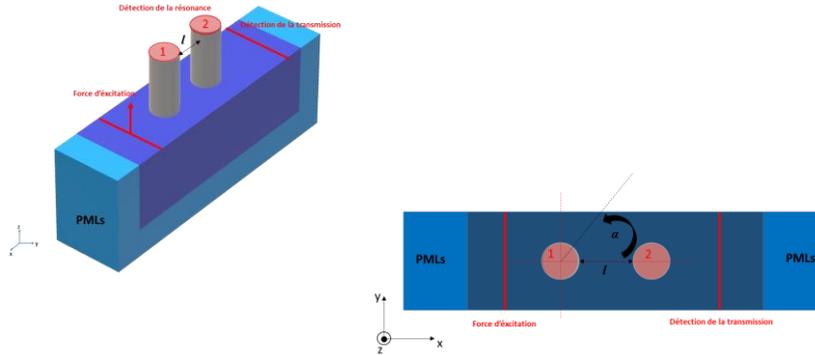


Figure III-5 : Modèle numérique utilisé pour simuler l'excitation d'une paire de piliers d'Al sur un substrat de silicium. Le paramètre l désigne la distance entre les piliers et l'angle α l'orientation de l'axe entre les deux piliers par rapport à la direction de l'onde incidente.

L'angle d'orientation α varie de 0° à 90° . Pour comprendre l'influence de l'orientation de la paire de piliers par rapport au front d'onde, nous avons considéré α dans les cas suivants :

- $\alpha = 0^\circ$, les ondes acoustiques de surface se propagent avec une direction de propagation parallèle à l'axe reliant les deux résonateurs.
- $\alpha = 90^\circ$, les ondes se propagent orthogonalement à l'axe reliant les deux piliers.
- $0^\circ < \alpha < 90^\circ$, position pour laquelle l'axe reliant les deux piliers est orienté de α par rapport à la direction de l'onde.

Dans chaque cas, la variation de l couvrira une distance de quelques dizaines à quelques centaines de nanomètres.

III.5.2. $\alpha = 0^\circ$.

La figure III-6 représente les courbes de transmission et de résonance pour trois valeurs de l , à savoir 50 nm, 100 nm et 200 nm, enregistrées pour l'orientation des piliers $\alpha = 0^\circ$. La transmission est obtenue en plaçant un détecteur en champ lointain en référence avec une surface sans pilier.

Les courbes de résonance sont obtenues en faisant la moyenne des modules des déplacements sur les faces supérieures des piliers.

Pour les distances l considérées, on observe sur les courbes de résonance que les modes de flexions B1, B2 et B3 restent uniques, contrairement au mode de compression C1 (autour de 1.16 GHz) qui présente un dédoublement. Le dédoublement se manifeste d'autant plus que la distance entre les deux piliers est faible. Le pic à basse fréquence est visible lorsque $l = 50$ nm et $l = 100$ nm. Pour $l = 200$ nm, le pic de compression présente un épaulement. Cette séparation en deux modes est caractéristique de l'interaction ou du couplage entre deux résonateurs. Pour avoir une confirmation de l'effet de levée de dégénérescence par couplage, la figure III-6 représente les cartes de champ des modes de résonances pour la distance $l = 50$ nm. On reconnaît les modes de flexion fondamental et d'ordre supérieur, soit B1, B2 et B3. Le mode C1 est dédoublé en une résonance symétrique (S) à 1.14 GHz et une résonance antisymétrique (AS) à 1.17 GHz par rapport au plan médian entre les piliers. On note que les facteurs de qualité des deux modes de compression sont différents avec $Q_S = 15$ et $Q_{AS} = 256$. Notons enfin qu'à partir des courbes de transmission (courbes bleues de la figure III-6) la distinction entre les deux pics n'est pas possible.

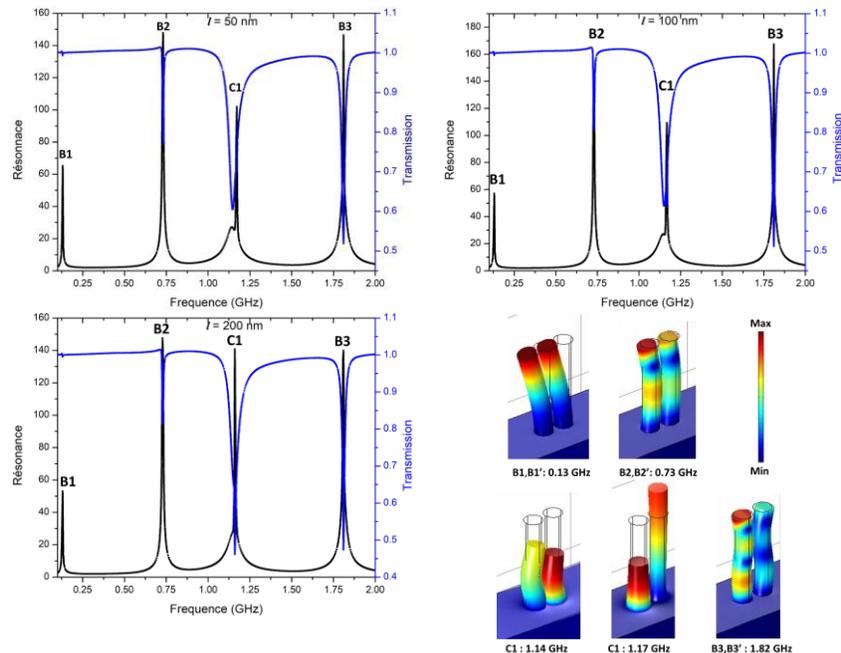


Figure III-6 : Courbes de transmission (bleu) et de résonances (noir) pour $l = 50$ nm, $l = 100$ nm et $l = 200$ nm ; cartes du champ de déplacement pour $l = 50$ nm des modes B1 = 0.13 GHz, B2 = 0.73 GHz, B3 = 1.82 GHz et des 2 modes C1 = 1.14 GHz et 1.17 GHz.

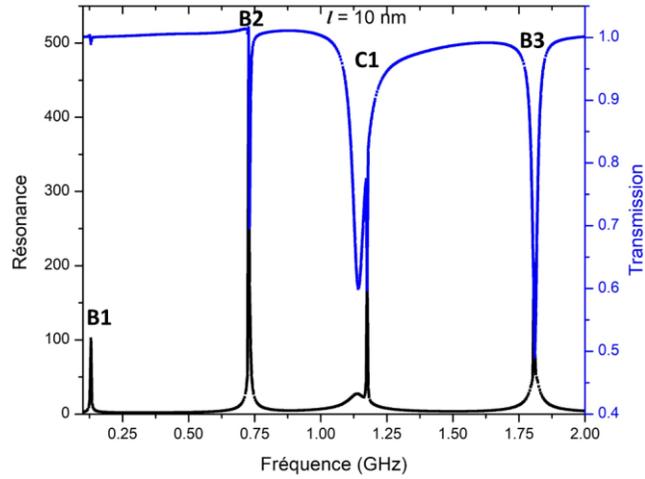


Figure III-7 : Courbes de transmission et de résonances pour une distance $l = 10$ nm entre les deux piliers.

Comme on peut le voir sur la figure III-7, lorsque $l = 10$ nm, la séparation du pic de compression est exaltée et les deux modes (AS) et (S) sont clairement visibles, à la fois sur la courbe de résonance et sur celle de transmission. Les facteurs de qualité relevés pour cette distance sont en légère augmentation, soit $Q_S = 25$ et $Q_{AS} = 360$.

A grande distance, comme on peut le voir sur la figure III-8 pour $l = 400$ nm, la résonance de compression est de nouveau unique, comparable à celle obtenue dans le cas d'un seul pilier (figure III-4).

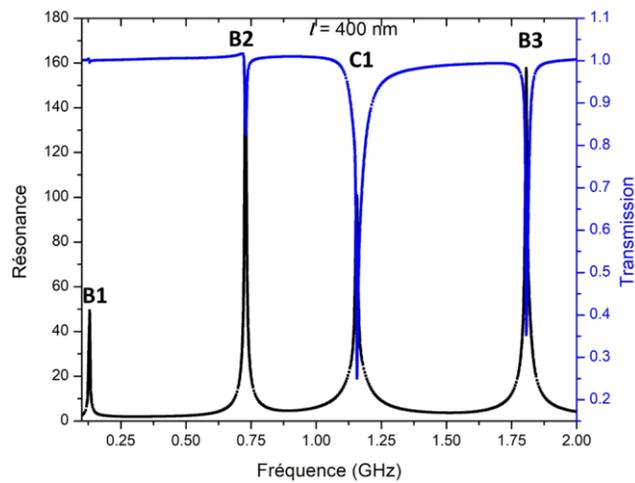


Figure III-8 : Courbes de transmission et de résonances pour $l = 400$ nm entre les deux piliers.

III.5.3. Effet de α

Dans ce paragraphe, on discute l'effet l'angle α entre la direction de l'onde incidente et l'axe entre les deux piliers. L'étude est réalisée avec une distance entre les deux piliers constante, $l = 50$ nm. La figure III-9 représente les courbes de transmission et de résonance pour $\alpha = 30^\circ$, 45° et 60° .

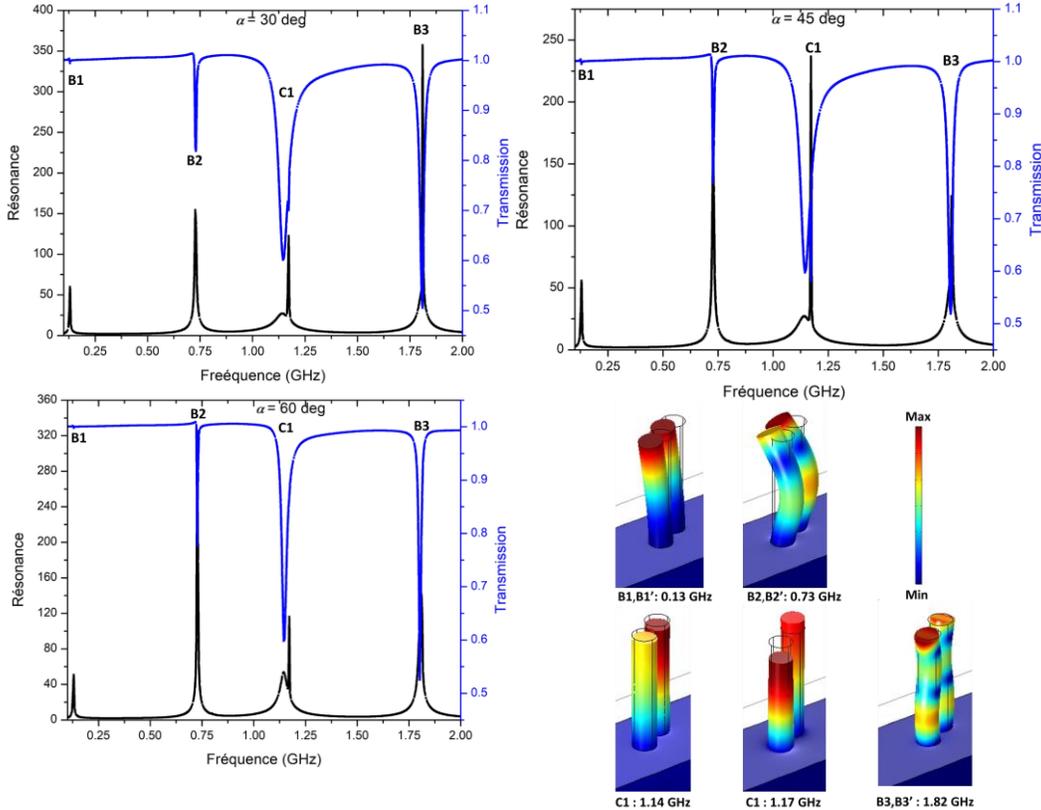


Figure III-9 : Courbes de transmission et de résonances pour des angles $\alpha = 30^\circ$, 45° et 60° , considérant pour $l = 50$ nm entre les deux piliers. Les cartes de champ de déplacement sont calculées pour $\alpha = 30^\circ$.

En excitant les deux piliers 1 et 2 avec les angles d'orientation $\alpha = 30^\circ$, 45° et 60° on arrive à exciter les modes B1 à 0.13 GHz, B2 à 0.73 GHz et B3 à 1.82 GHz. On excite également les deux modes de compression C1 à 1.14 GHz (S) et à 1.17 GHz (AS). Comme précédemment, les modes de flexion ne se couplent pas. Pour $\alpha = 30^\circ$, 45° et 60° , le mode de compression se couple avec des fréquences des modes excités indépendantes de l'orientation α , contrairement à leurs amplitudes et leurs facteurs de qualités. Le facteur de qualité du mode AS est maximum pour $\alpha = 45^\circ$ ($Q_{AS} = 450$), celui pour le mode S est maximum pour ($Q_S = 40$). Comme précédemment, la séparation entre les modes est visible principalement à partir de la courbe de résonance.

Enfin, la figure III-10 représente le cas où $\alpha = 90^\circ$.

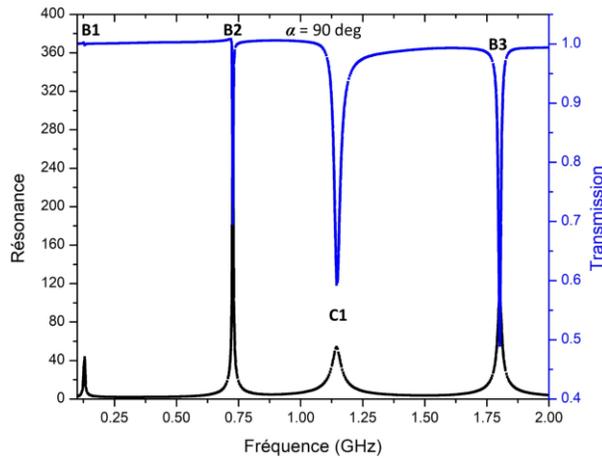


Figure III-10 : Courbes de transmission et de résonances pour $l = 50$ nm, et pour $\alpha = 90^\circ$. On obtient quatre résonances aux fréquences $B1 = 0.13$ GHz, $B2 = 0.73$ GHz, $C1 = 1.16$ GHz et $B3 = 1.82$ GHz.

A 90° , le seul mode de compression C1 qu'on excite est le mode symétrique avec un facteur de qualité $Q_s = 100$. Compte tenu de la polarisation de l'onde incidente, il est évident que le mode AS ne puisse être excité.

III.5.4. Résumé sur l'interaction entre deux piliers

Dans ce paragraphe on résume les résultats obtenus sur le mode de compression en variant la distance l et l'orientation des piliers (figure III-11). Les pointillés représentent les fréquences des maxima des pics de résonance en compression. Lorsque la distance varie, on remarque que le mode de compression présente une levée de dégénérescence tant que $l \leq 200$ nm. Lorsque l'angle α varie, les deux modes coexistent à des fréquences constantes. L'amplitude du mode AS est maximale pour $\alpha = 45^\circ$ avant de diminuer.

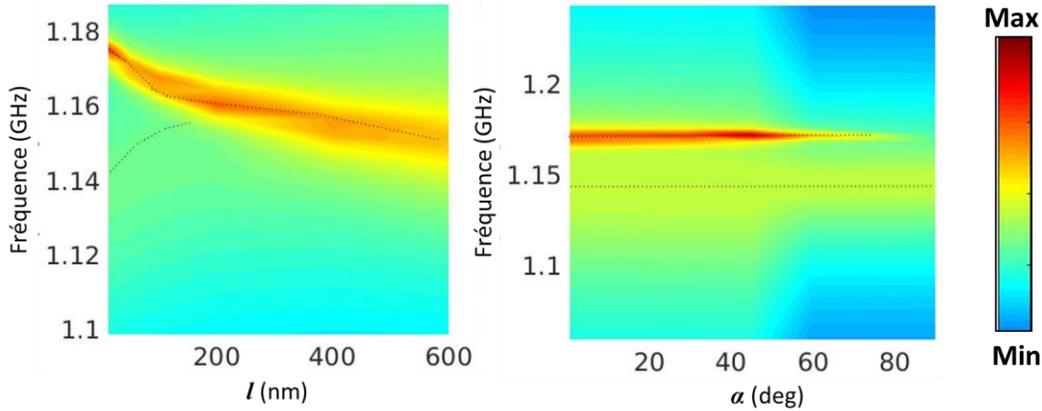


Figure III-11 : Interpolation du comportement du mode de compression en fonction de l (gauche) et de α (droite).

III.6. Propagation de l'onde acoustique dans une chaîne de piliers

L'étude de l'interaction entre deux piliers nous a permis d'établir les conditions pour obtenir un couplage. Seuls les modes de compression peuvent interagir, et ceci pour une distance l inférieure à 200 nm. De même, le couplage n'est possible que si l'axe entre deux piliers n'est pas aligné parallèlement au front d'onde. Nous allons nous intéresser au cas d'un nombre N de piliers, constituant ainsi une chaîne. Nous allons maintenant définir les conditions d'existence de modes dans une chaîne constituée de N piliers et démontrer les possibilités de propagation d'une onde à travers la chaîne en fonction de leur nombre, de leur distance de séparation, de leur orientation. Nous verrons enfin les conditions de robustesse de cette propagation en fonction des distances et orientations géométriques des piliers. Afin de réaliser cette étude, nous nous appuierons sur les calculs de valeurs propres de la chaîne de piliers déposés sur substrat et sur les spectres de transmission à travers celle-ci. Dans ce dernier cas, l'excitation sera portée sur le premier pilier de la chaîne, au niveau de sa surface supérieure pour une propagation du signal à travers la chaîne. L'accent est mis sur le mode de compression qui, seul, permet le couplage entre les piliers comme nous avons pu le voir dans le paragraphe précédent.

III.6.1. Modèles numériques pour la recherche de valeur propre et la transmission

Le modèle de la cellule unitaire utilisée pour calculer les modes propres d'une chaîne de N pilier est présenté figure III-12. Dans ce modèle, la chaîne de piliers est positionnée au centre d'un

substrat de Si de dimension finie. Des conditions aux limites périodiques sont appliquées dans les directions x et y . Du fait de cette mise en périodicité, une distance suffisante a été estimée afin d'éviter toute interactions entre les chaînes voisines. Au fond de la cellule, des conditions PML sont appliquées afin de simuler un substrat semi-infini de Si.

L'étude des valeurs propres va nous permettre d'étudier les modes propres en fonction du nombre de piliers N .

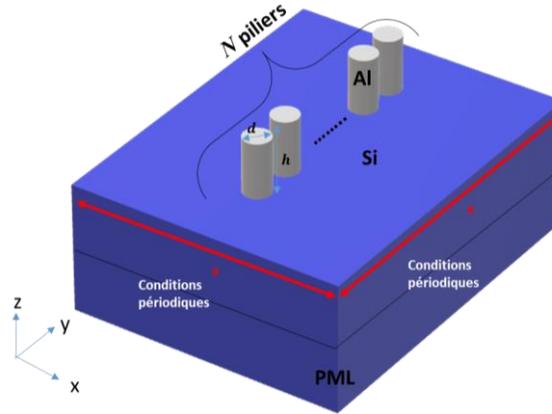


Figure III-12 : Modèle de la cellule élémentaire pour calculer les valeurs propres d'une chaîne de N piliers d'Al déposés sur un substrat fini de Si, avec l'application de conditions périodiques dans les directions x et y .

Le paramètre a correspond à la période de la cellule de Si, h et d représentent respectivement la hauteur et le diamètre des N piliers. La distance de référence entre deux piliers sera de $l = 50$ nm. On prendra $h = 1000$ nm et $d = 200$ nm et le nombre de piliers variera entre 2 et 20. Au niveau de la gamme de fréquence, nous resterons proche des valeurs du mode de compression.

Pour les calculs de transmission, des conditions PML sont appliquées dans la direction de propagation y . La direction x est alors traitée selon deux modèles. Dans le premier (figure III-13), des conditions aux limites périodiques sont appliquées selon x alors que dans le second (figure III-14), celles-ci sont remplacées par des conditions PML. Cette dernière cellule permet de connaître les conditions d'existence d'interactions entre chaînes voisines, potentiellement présentes dans le cas périodique.

Dans les deux cas, l'excitation est réalisée sur le premier pilier par une force verticale sur toute la surface supérieure. Elle permet d'exciter le mode de compression qui nous intéresse particulièrement. Deux courbes seront enregistrées. Dans la courbe de transmission, les données

sont collectées au niveau d'un détecteur placé en champ lointain. Dans la courbe de résonance, nous ferons une moyenne des modules des déplacements enregistrés aux sommets des piliers autre que celui qui a été excité.

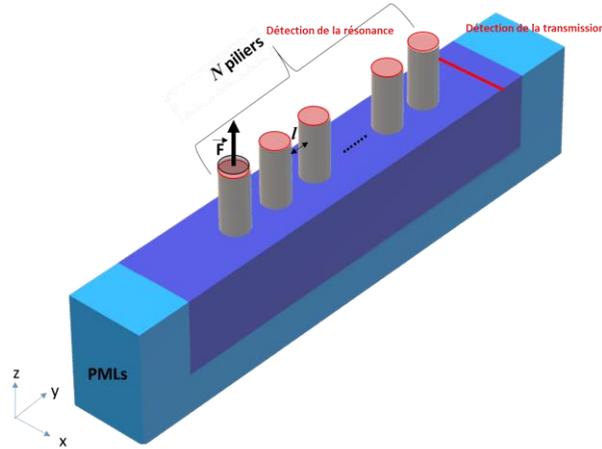


Figure III-13 : Modèle numérique utilisé pour simuler l'excitation de la chaîne de piliers d'Al sur substrat de Si. On définit des conditions PML dans la direction y et des conditions périodiques dans la direction x .

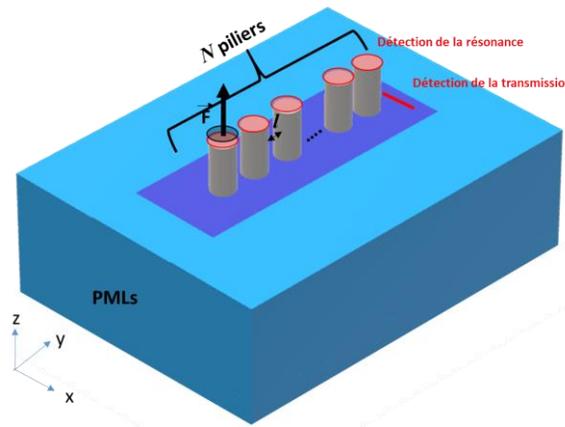


Figure III-14 : Modèle numérique utilisé pour simuler l'excitation de la chaîne de piliers d'Al sur substrat de Si. On définit des PMLs dans les directions x et y

III.6.2. Résultats

La figure III-15 présente l'évolution des modes propres d'une chaîne en fonction du nombre de piliers qui la constitue. Les calculs sont réalisés sur la base du modèle de la figure III-12. La gamme de fréquence de la courbe est choisie autour du mode de compression C1 d'un pilier unique, soit 1.16 GHz. On remarque que plus le nombre de piliers augmente et plus le nombre de mode propre

augmente. L'ensemble de ces modes constitue alors une bande passante qui s'élargit au fur et à mesure que le nombre de piliers augmente.

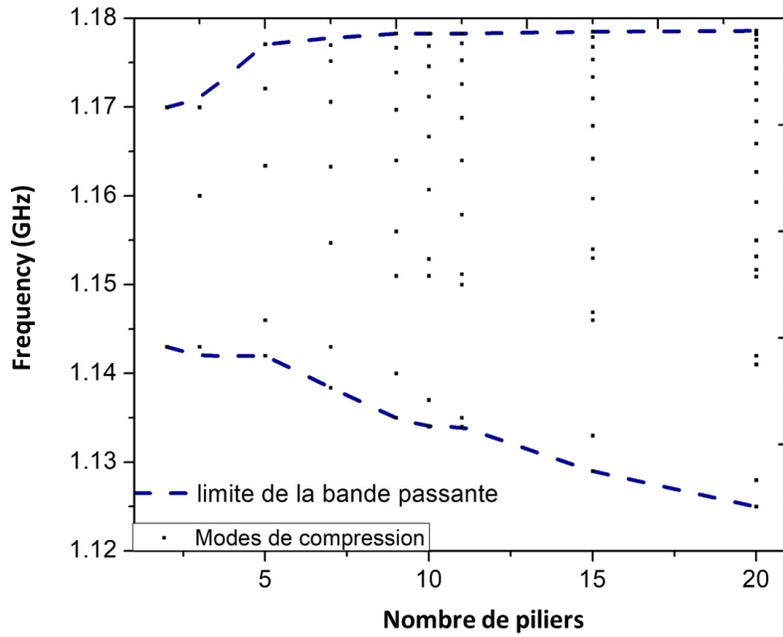


Figure III-15 : Nombre de modes dans la gamme de fréquences autour de la compression C1 en fonction du nombre de piliers constituant la chaîne.

La figure III-16 montre les modes de compression en fonctions du nombre de piliers $N = 2, 3, 5$ et 7. En augmentant le nombre de piliers on augmente en conséquence le nombre de combinaisons de modes : N piliers donnent naissance à N modes.

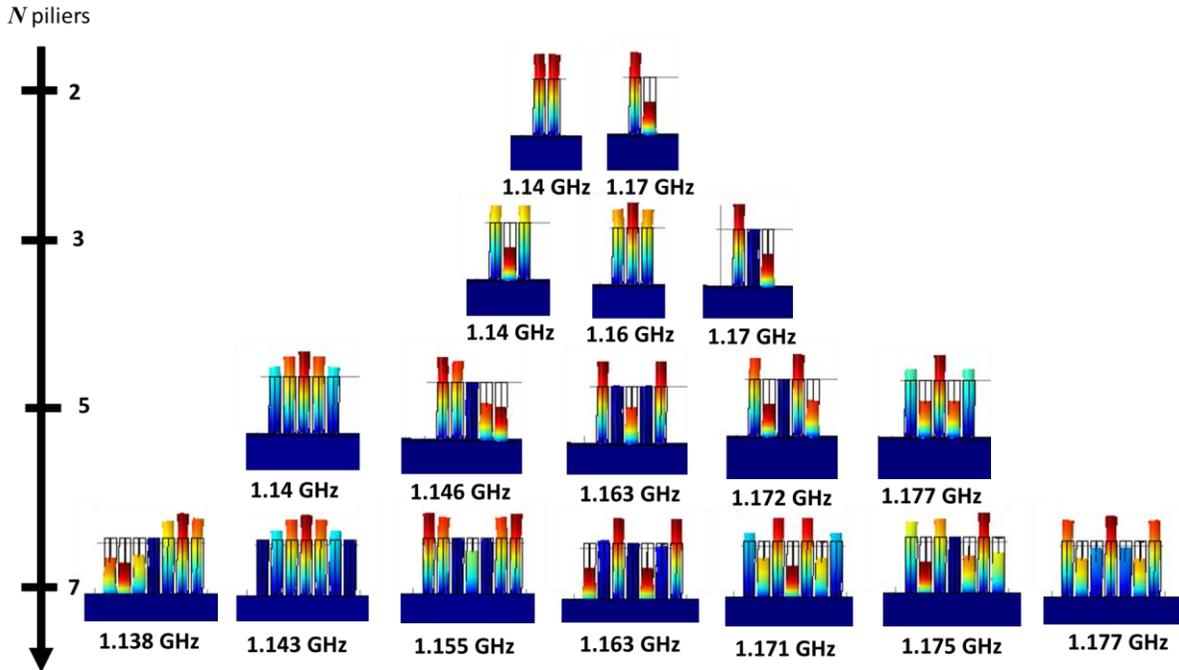


Figure III-16 : Modes propres d'une chaîne de N piliers.

La figure III-17 représente l'évolution des modes en fonction de la distance l entre les piliers pour une chaîne de 5 piliers. Comme attendu, la largeur de la bande augmente lorsque la distance entre les piliers diminue, ce qui est le signe d'une plus forte interaction entre les piliers.

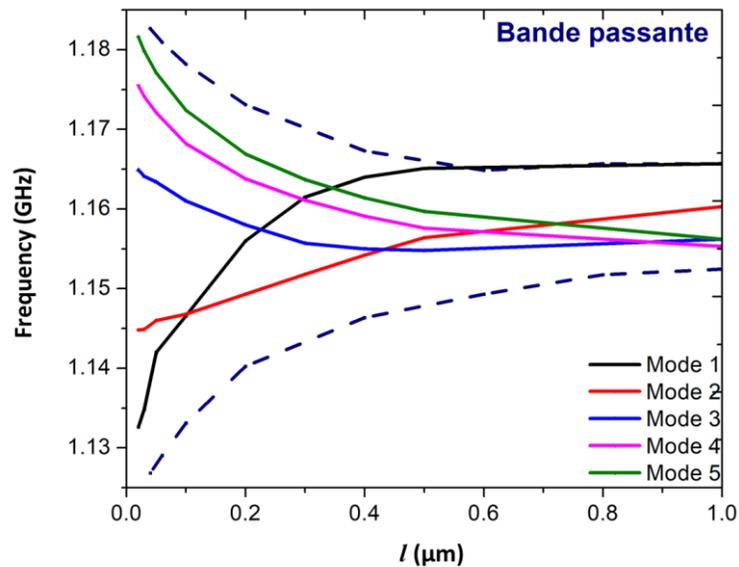


Figure III-17 : Evolution des fréquences des modes d'une chaîne de 5 piliers en fonction de la distance l entre les piliers, les courbes noire, rouge, bleue, rose et verte donne l'évolution des modes 1, 2, 3, 4 et 5 respectivement. La courbe en bleue pointillée représente la bande passante.

Ainsi, pour augmenter la largeur de la bande passante on peut augmenter le nombre des piliers N et diminuer l'inter distance l entre les piliers.

L'objectif est maintenant d'utiliser ces modes propres pour un guidage des ondes acoustiques. Pour cela, nous allons générer une onde à partir de l'excitation du premier pilier de la chaîne. Le modèle utilisé dans un premier temps est représenté sur la figure III-13. Les résultats obtenus sont comparés avec le modèle de la figure III-14 dans lequel nous remplaçons les conditions périodiques par des conditions PML dans la direction y . Le résultat de cette comparaison est présenté figure III-18 à partir d'une chaîne de cinq piliers et une distance de séparation entre les piliers de $l = 50$ nm. Dans chaque cas, la courbe de résonance est évaluée par une somme des modules du champ acoustique sur les surfaces supérieures des piliers, à l'exception de celui qui a été excité. La figure III-18 montre que les pics de résonances de la chaîne sont comparables en fréquence dans les deux modèles. L'amplitude, différentes dans les deux cas, mériterait d'être normalisée. La différence se situe au niveau du temps de calcul qui est supérieur lorsque les deux PML sont choisies. Cependant, tant que la situation ne devient pas critique en termes de temps de calcul ou de capacité de mémoire, nous travaillerons avec le modèle contenant les PML. Ceci nous assure une étude de la chaîne individuelle, sans risque d'interaction entre chaînes voisines.

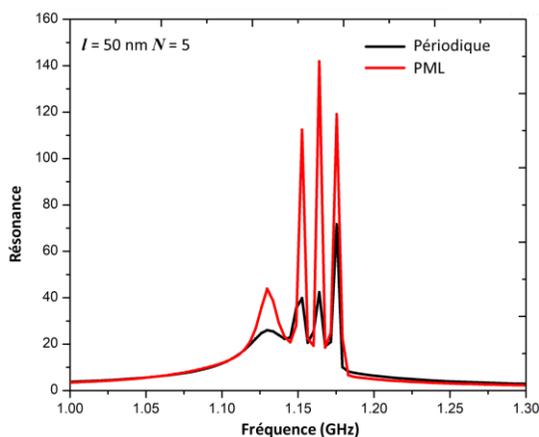


Figure III-18 : Comparaison du modèle avec conditions périodiques (noir) et avec PML (rouge) pour $l = 50$ nm.

La figure III-19 montre l'effet de la distance entre piliers, l , sur la courbe de résonance. Pour ces calculs, nous avons considéré la chaîne de cinq piliers dans laquelle nous excitions le premier pilier. On retrouve la courbe de résonance pour $l = 50$ nm décrite précédemment dans laquelle on a obtenu 4 résonances. Lorsque la distance augmente, le nombre de résonances diminue et passe à deux pour $l = 200$ nm et un pour $l = 400$ nm.

Pour connaître l'origine des résonances, nous avons calculé les champs de déplacement de la chaîne aux fréquences de pics.

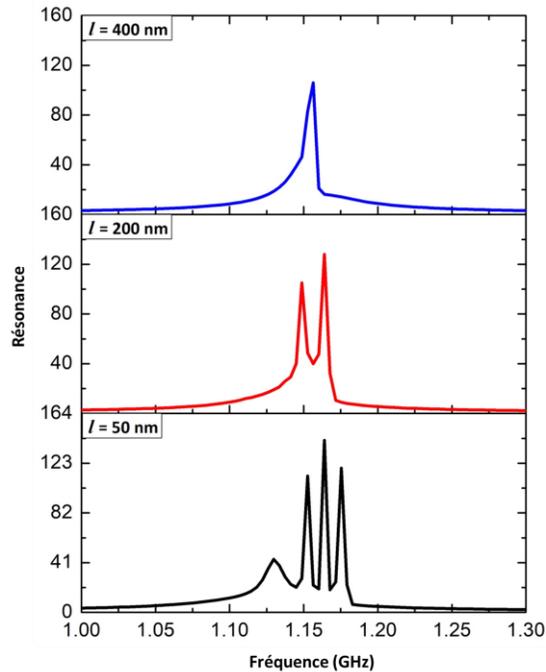


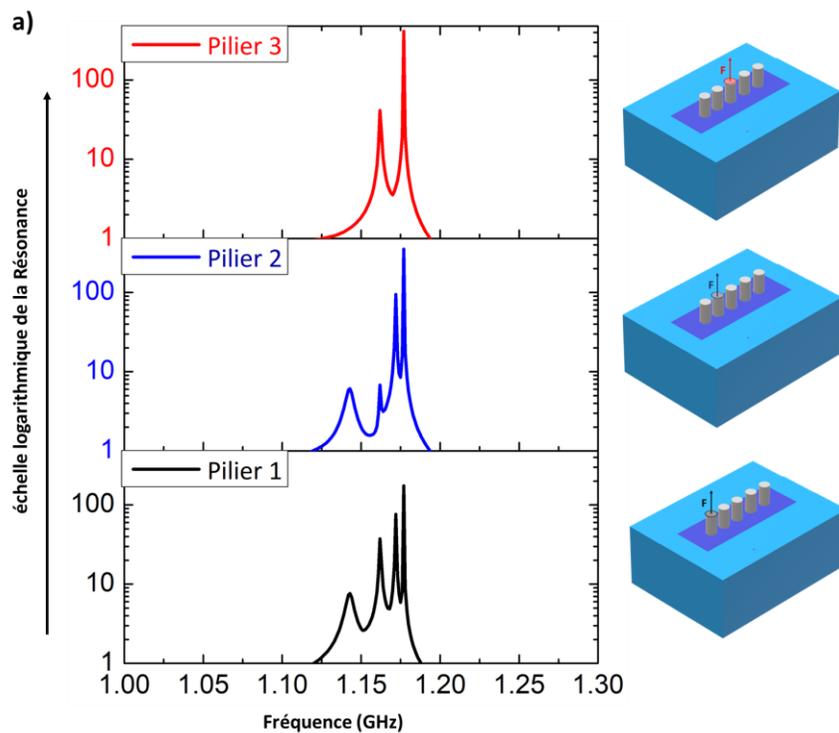
Figure III-19 : Courbes de résonances en fonction de la distance l entre piliers afin de trouver l'origine des modes résonnants.

Comme attendu, le modèle permettant de calculer les valeurs propres de la chaîne prévoit un nombre de modes égale au nombre de piliers. Cependant, dans les courbes de résonance, le nombre de pics va être modifié selon la nature de la source. Dans le cas d'une chaîne de cinq piliers, nous avons modifié la position de la source en excitant à tour de rôle les autres piliers de la chaîne. Compte tenu de la symétrie du problème, cela consiste à exciter le pilier 1, 2 et 3. La figure III-20 montre la réponse de résonance des piliers de la chaîne en fonction du pilier excité ainsi que les cartes de champ acoustique correspondantes.

Parmi les cinq modes propres de la chaîne de cinq piliers donnée figure III-16, trois sont symétriques (modes 1, 3 et 5) et deux sont antisymétriques (2 et 4) par rapport au milieu de la structure.

En excitant les piliers 1 et 2, il est possible d'exciter quatre modes, qu'ils soient symétriques ou antisymétriques. Cela est dû au fait que l'excitation des piliers 1 et 2 n'impose aucune symétrie particulière au système. Par contre, en excitant le pilier 3 on ne sollicite que les modes symétriques. L'excitation du pilier 3 impose une symétrie pour l'excitation, qui empêche d'exciter les modes antisymétriques 2 et 4.

Dans ce qui précède, seul le mode propre 1 n'a pu être excité. L'hypothèse la plus probable est que, pour générer le mode 1, il faut non seulement une excitation symétrique mais en plus provoquer le mode par une excitation collective, en phase, des 5 piliers. Par ailleurs, la détection de ce mode peut s'avérer difficile compte tenu d'une faible amplitude de résonance.



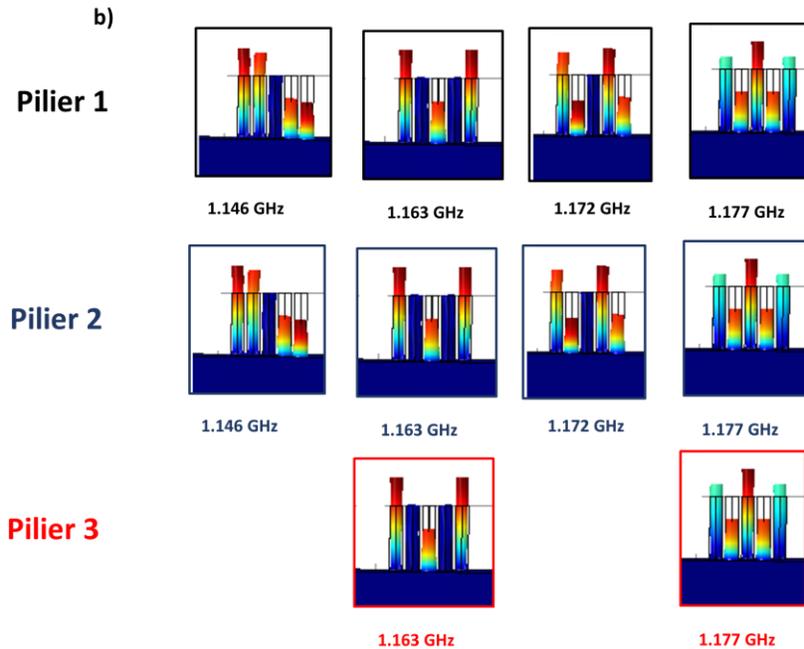


Figure III-20 : a) Courbes de résonance des piliers pour une excitation des piliers 1, 2 et 3. b) Carte de champs acoustiques aux fréquences des pics de résonance.

La chaîne de cinq piliers nous a permis de comprendre la propagation de l'onde dans une chaîne et de caractériser cette propagation par rapport aux paramètres de distance entre piliers, l , d'excitation du pilier. Pour aller plus loin dans le guidage acoustique par une chaîne de piliers, nous proposons d'élargir l'étude dans la section suivante à une longue chaîne constituée de 19 piliers et soumise à l'excitation du premier pilier.

La figure III-21 (a) montre la courbe de résonance de la chaîne constituée de 19 piliers, séparés de $l = 50$ nm, obtenue en excitant le pilier 1, ainsi que les champs acoustiques des pics de résonance associés. L'excitation du premier pilier de la chaîne permet de générer une bande passante.

La figure III-21 (b) montre les cartes de champs calculés sur les pics des neuf premières résonances. Nous obtenons pour les cinq premières résonances une propagation le long de la chaîne pour laquelle les vibrations des piliers agissent de manière cohérente. En effet, il est possible de comprendre l'oscillation de l'onde par le déplacement des piliers. Pour les quatre suivantes reportées figure III-21 (c), il paraît difficile de les interpréter sur la base des modes propres de la chaîne de manière aussi directe. L'hypothèse la plus probable est que l'onde créée arrive à se propager le long de la chaîne par une superposition de modes propres. Enfin, il est possible de

générer une excitation des premiers piliers qui conduisent à une non transmission de l'onde sur le reste de la chaîne. C'est l'équivalent d'une bande interdite de propagation. Cette situation est présentée à partir des résonances 10 et 11 de la figure III-21 (d).

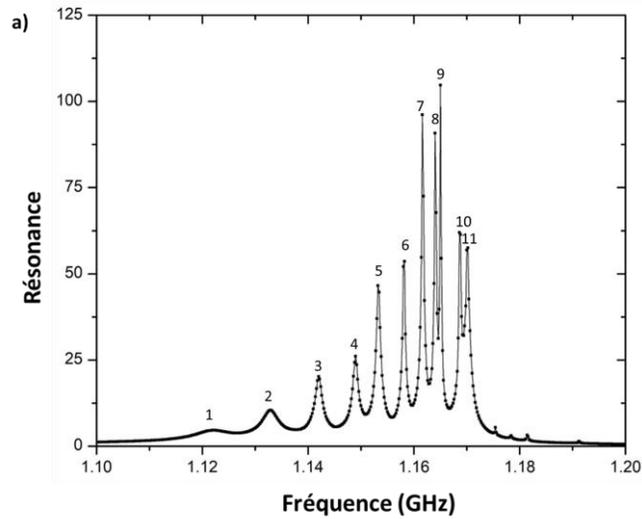


Figure III-21 (a) : Courbe de résonance d'une chaîne de dix-neuf piliers distants de $l = 50$ nm, obtenue en excitant le pilier 1.

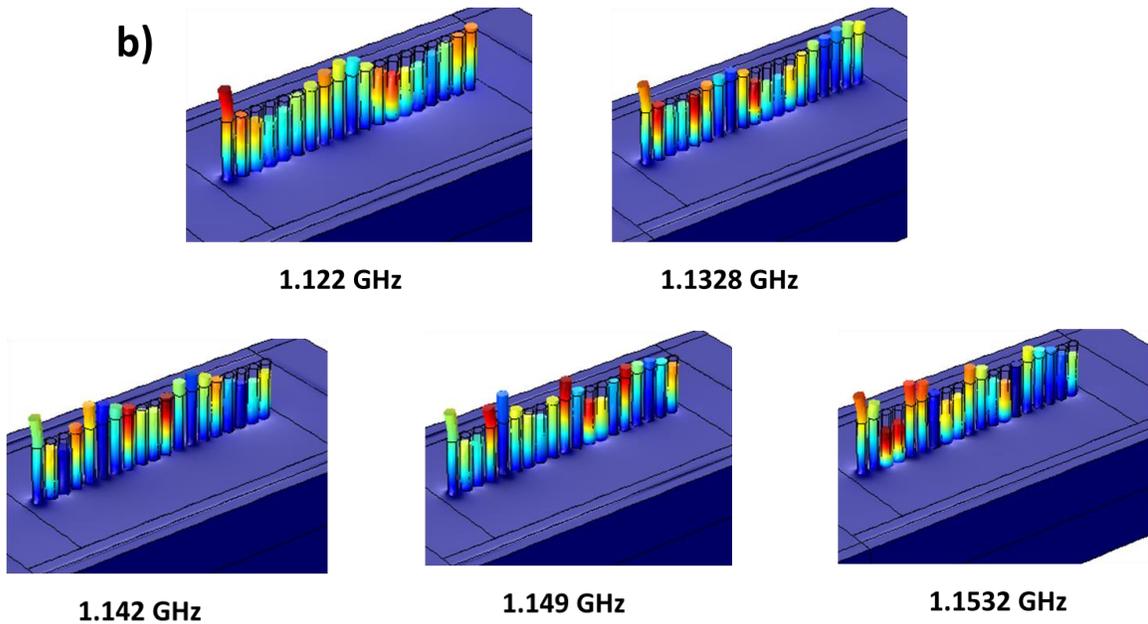


Figure III-22 (b) Champs acoustiques aux fréquences des cinq premiers pics de résonance.

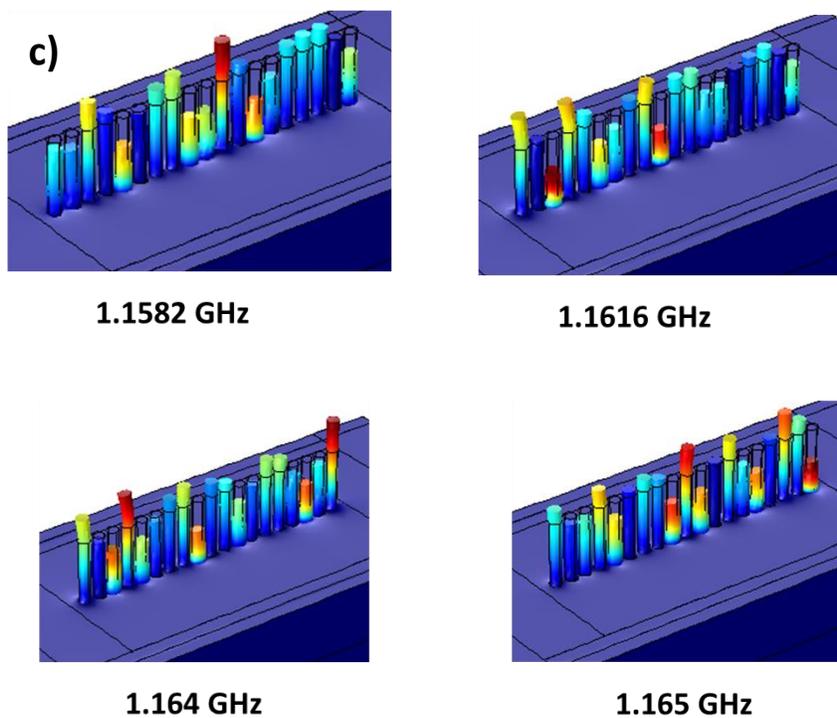


Figure III-22 (c) : Champs acoustiques aux fréquences des pics de résonance 6, 7, 8 et 9.

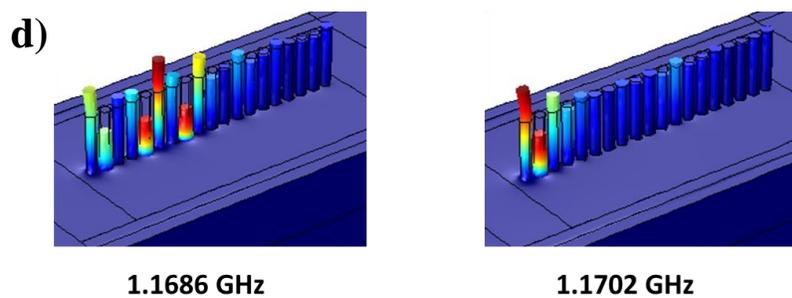


Figure III-22 (d) : Champs acoustiques aux fréquences des pics de résonance 10 et 11.

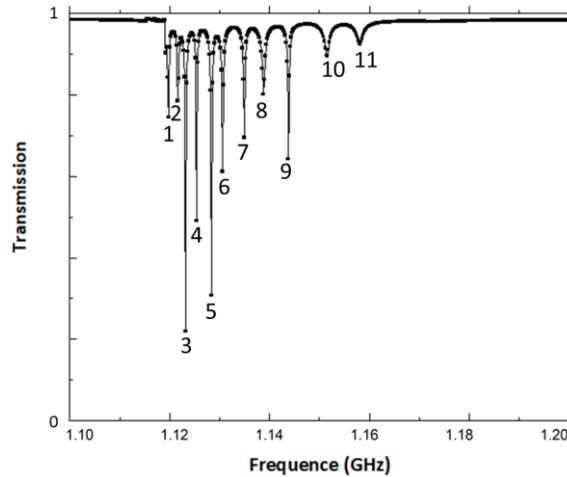


Figure III-21 (e) : Courbe de résonance d'une chaîne de dix-neuf piliers distants de $l = 50$ nm, obtenue en excitant le pilier 1.

La Figure III-21 (e) montre que les modes de compression qui se propagent le long de la chaîne interagissent avec le mode de surface en créant des zéros de propagation.

Nous avons ensuite discuté différentes conformations possibles de la chaîne de piliers afin d'estimer la robustesse de la propagation et les possibilités de manipuler l'onde dans différentes directions. Pour cela, nous proposons l'introduction d'angles droits dans la chaîne linéaire. On va considérer des chaînes avec plusieurs angles de 90° , puis considérer une propagation dans une chaîne en forme de S. Cette étude met en évidence la possibilité de transmettre l'information à travers des chaînes de différentes formes.

La figure III-22 propose l'introduction d'un angle droit séparant la chaîne linéaire en une chaîne de 8 piliers, et une autre de 11 piliers. La courbe de résonance est calculée en faisant la moyenne des déplacements sur l'ensemble des piliers, après excitation du premier pilier. La courbe est reportée et comparée à celle de la chaîne linéaire.

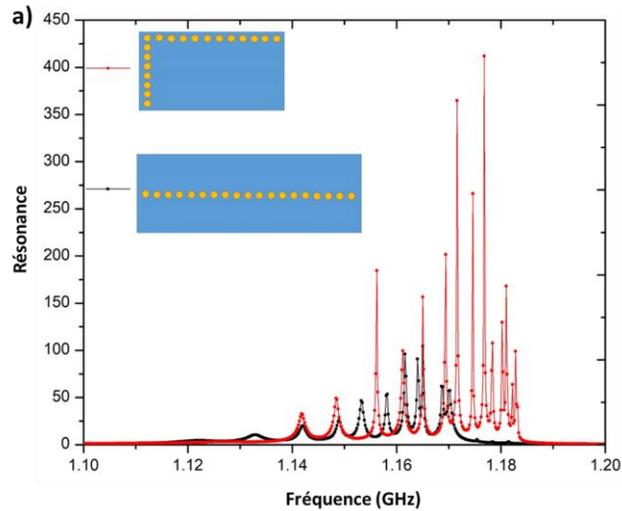
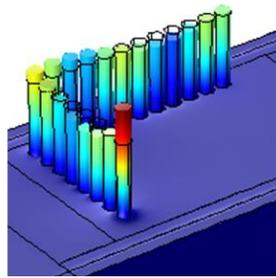
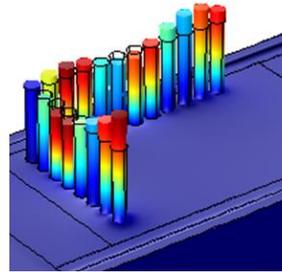


Figure III-22 : Courbes de résonance de la chaîne de piliers linéaire (noir) et présentant un angle droit (rouge).

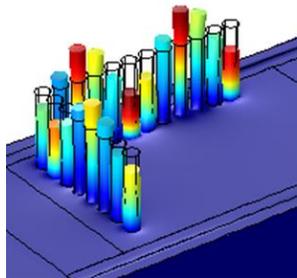
En comparant avec la chaîne linéaire, on note que l'excitation reste possible aux basses fréquences mais que la présence de l'angle droit a permis de générer de nouvelles résonances aux fréquences supérieures à 1.17 GHz. Les champs de déplacements associés ont été calculés pour quelques pics de résonance. On remarque que les piliers peuvent vibrer de manière cohérente aux basses fréquences et qu'il est possible de suivre la corrugation de l'onde (figure III-22). Celle-ci passe l'angle droit en continuant sa propagation.



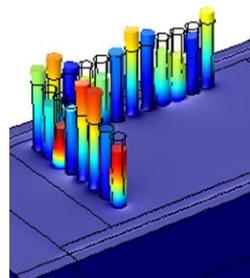
1.127 GHz



1.1418 GHz



1.1562 GHz



1.1612 GHz

Figure III-23 : Exemples de champs acoustiques pour des résonances à basses fréquences.

A hautes fréquences (figure III-23), au-dessus de 1.17 GHz, on génère de nouveaux modes de propagation. Contrairement au cas précédent, il est plus difficile de comprendre la cohérence de la propagation de l'onde, et de retrouver une séquence périodique dans la propagation du signal. C'est le cas des fréquences 1.1802 GHz (figure III-23 (a)) et 1.181 GHz (figure III-23 (b)) donnés à titre d'exemple. L'hypothèse la plus probable est que cette propagation est issue de la superposition de modes propres provenant des deux parties de la chaîne brisée.

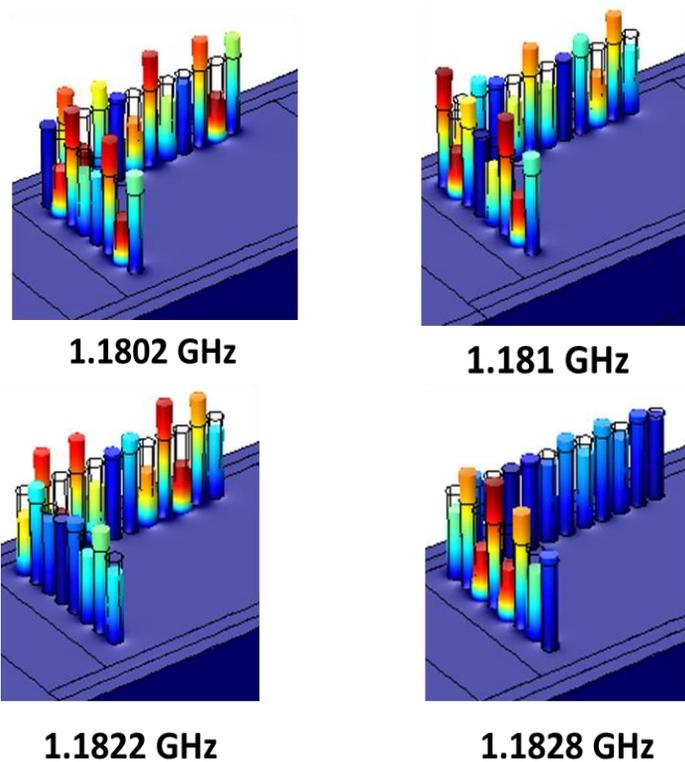


Figure III-24 : Champs acoustiques des modes excités pour quelques fréquences supérieures à 1.17 GHz.

Enfin, notons que l'amplitude du signal peut également être affectée par l'introduction de l'angle droit. A titre d'exemple, la figure III-24 (c) et III-24 (d) représente deux exemples de cartes de champ. Dans le premier cas (1.1822 GHz), l'onde se propageant dans la première chaîne présente une amplitude inférieure à celle qui se propage après l'angle droit où on assiste à une exaltation d'amplitude de l'onde. Dans le second cas (1.1828 GHz) l'onde dans la deuxième chaîne est fortement atténuée après le passage de l'angle droit.

Nous avons ensuite considéré des situations plus complexes dans lesquelles la chaîne a été brisée à plusieurs reprises. Le résultat est présenté figure III-25. De façon générale, la propagation reste possible, quelle que soit la configuration adoptée et le nombre d'angle droits introduits. Les fréquences des pics de résonances varient d'une situation à l'autre.

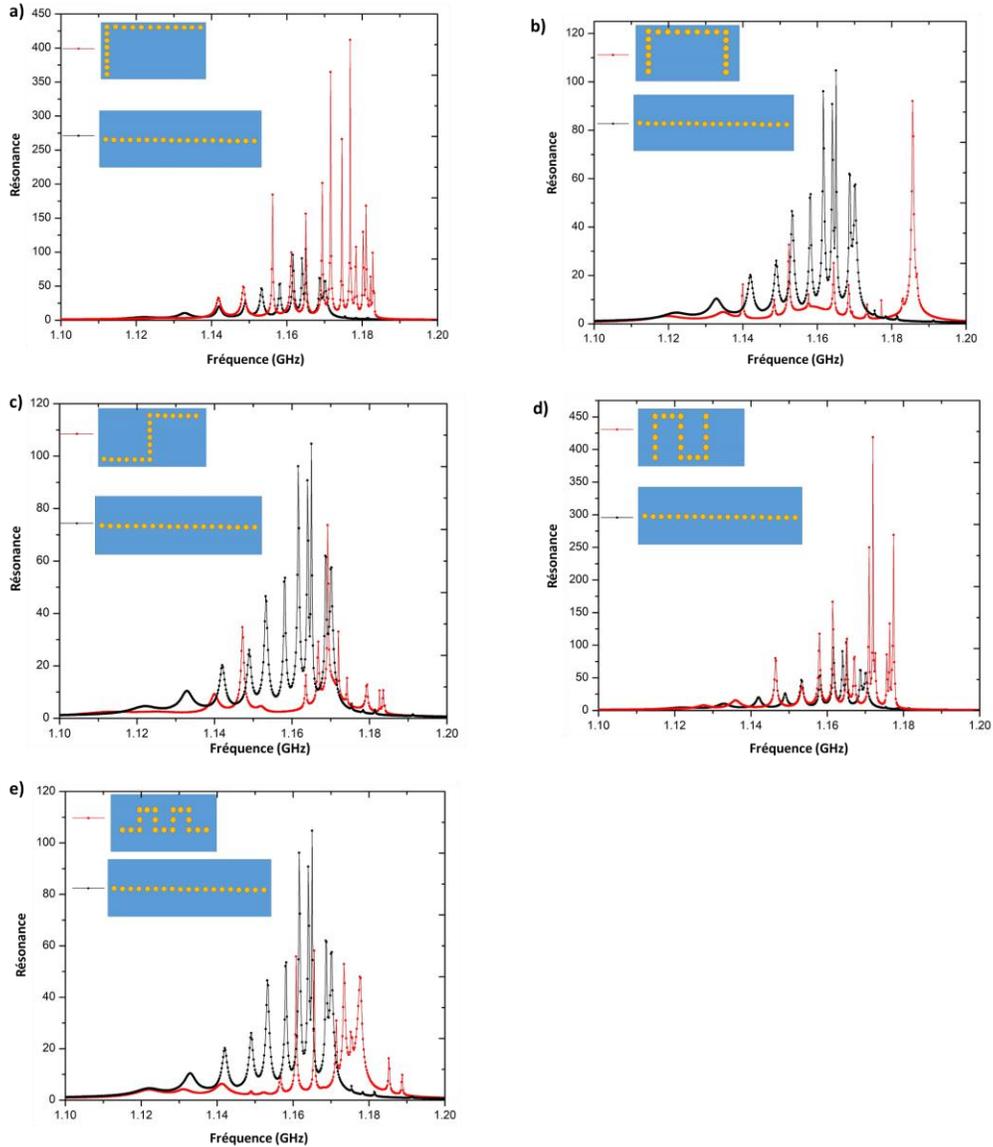


Figure III-25 : Courbes de résonance de la chaîne, brisée par l'introduction d'angles droits multiples (rouge).
 Comparaison avec la chaîne linéaire (noir).

Comme discuté précédemment pour l'angle droit, quelques cas spécifiques, sont présentés figure III-26 à titre d'exemple dans le cas de deux angles droits. On observe la propagation continue et cohérente de l'onde par exemple à 1.198 GHz ou encore justifiable par des superpositions de modes (1.1524 GHz) où l'oscillation de l'onde n'apparaît pas aussi visible. Il est possible également d'obtenir une amplification de l'onde initiale dans la dernière partie de la chaîne (1.14GHz). Enfin, d'autres situations conduisent à propager uniquement dans les deux premières chaînes (1.1734 GHz), la troisième restant au repos. A partir de la courbe de résonance

(figure III-25 (b)) on remarque un pic élevé à 1.1869 GHz. Ce pic correspond à une résonance localisée au niveau des deux premiers piliers qui n'entraîne aucune propagation dans le reste de la chaîne.

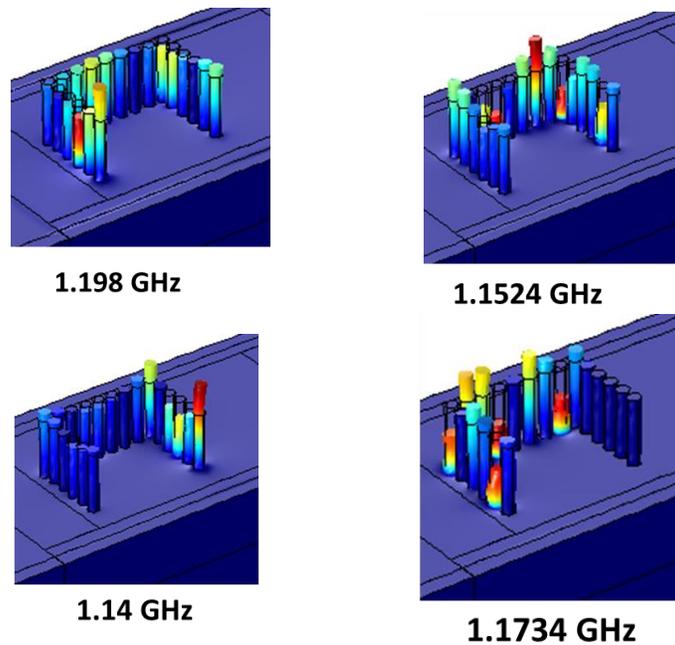


Figure III-26 : Courbes de résonance de la chaîne, brisée par l'introduction d'angles droits. Exemple de carte de champ de déplacement pour quelques fréquences de résonance particulières.

De même, il est possible de trouver des situations semblables dans des cas plus complexes comme avec 4 angles droits. La figure III-27 présente le cas d'une propagation cohérente des piliers (1.1276 GHz et 1.1652 GHz) et lié à la superposition de modes propres des segments de chaîne (1.1756 GHz et 1.1764 GHz).

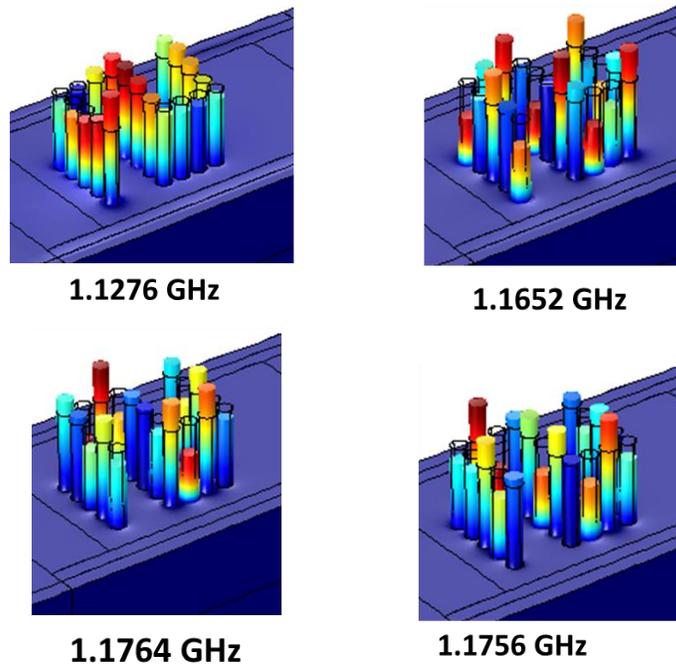


Figure III-27 : Courbes de résonance. Exemple de carte de champ de déplacement pour quelques fréquences de résonance particulières dans le cas de la chaîne brisée par l'introduction de deux angles droits.

Nous abordons maintenant le cas d'une chaîne en forme de 'S'. La figure III-28 montre la comparaison entre une chaîne linéaire de 19 piliers et une chaîne de forme 'S', la distance de 50 nm étant conservée entre les piliers. La transition, moins brutale que dans le cas d'introduction de d'angle droit, permet de retrouver les modes de la chaîne linéaire. En effet, comme on peut le voir sur la figure III-28, les pics de la chaîne linéaire subsistent, mais se décalent en fréquence. La raison est lié au variation de distance entre second voisins lorsque la chaîne se courbe. Les cartes de champ confirment ce résultat. La figure III-29 reprend à titre d'exemple une comparaison des cartes de champ de la chaîne en 'S' et leur équivalent de la chaîne linéaire.

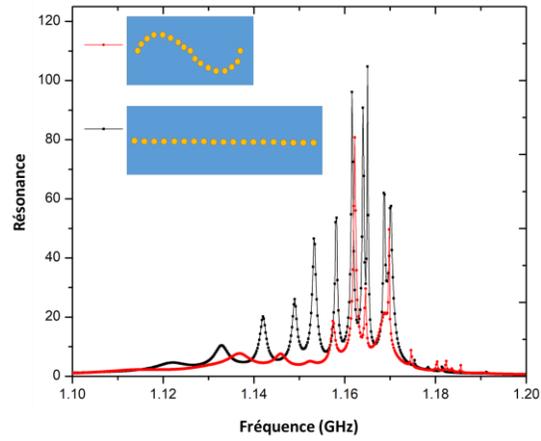


Figure III-28 : Courbe de résonance d'une chaîne de piliers en forme de 'S' (rouge) comparée à celle de la chaîne linéaire (noir).

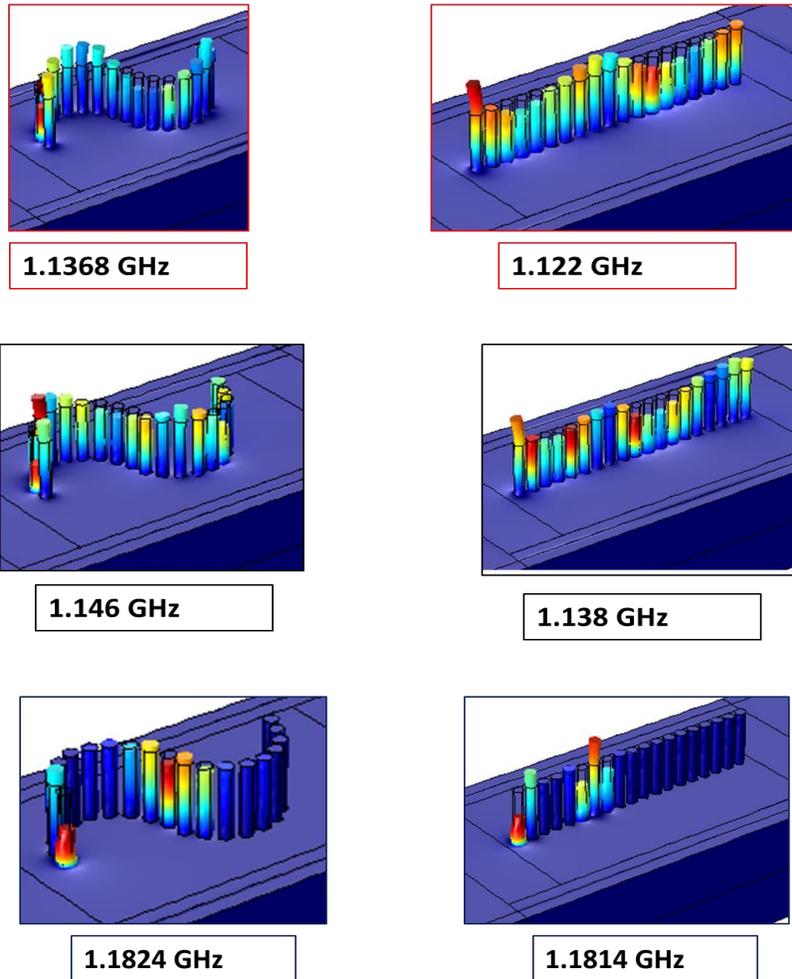


Figure III-29 : Comparaison de cartes de champ de la chaîne en 'S' (colonne de gauche) et de la chaîne linéaire (colonne de droite).

Enfin, nous terminons ce chapitre en introduisant un désordre de positions des piliers dans la chaîne. Celui-ci est introduit en autorisant à la position de chaque pilier un écart type de 5% par rapport à sa position initiale. Par cette faible variation de position, nous restons dans un régime de distribution de type hyperuniforme. Malgré ce faible écart de position, les conséquences sont importantes sur la courbe de résonance de la chaîne. En effet, comme on peut le voir sur la figure III-30, on observe, à basse fréquence, une simple distorsion fréquentielle des résonances. Par contre, à plus hautes fréquences, supérieures à 1.17 GHz, il apparaît de nouveaux pics de résonances, non visible dans le cas de la chaîne périodique. L'origine des pics de résonance est discutée à partir des cartes de champ de déplacement de la figure III-31. Les modes situés à

1.1386 GHz, 1.149 GHz et 1.1542 GHz sont l'équivalent des modes situés à 1.122 GHz, 1.142 GHz et 1.149 GHz de la chaîne linéaire périodique (figure III-31(a)). A plus haute fréquence, les nouveaux pics de résonance donnent lieu à des propagations le long de la chaîne désordonnée ou en encore à une localisation de l'onde par la création de cavités à 1.1806 GHz (figure III-31(b)).

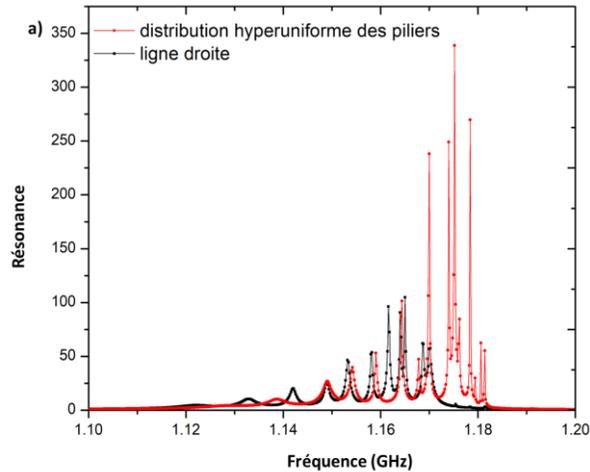


Figure III-30 : Courbe de résonance d'une chaîne de 19 piliers désordonnés (rouge) comparée à celle de la chaîne périodique (noir).

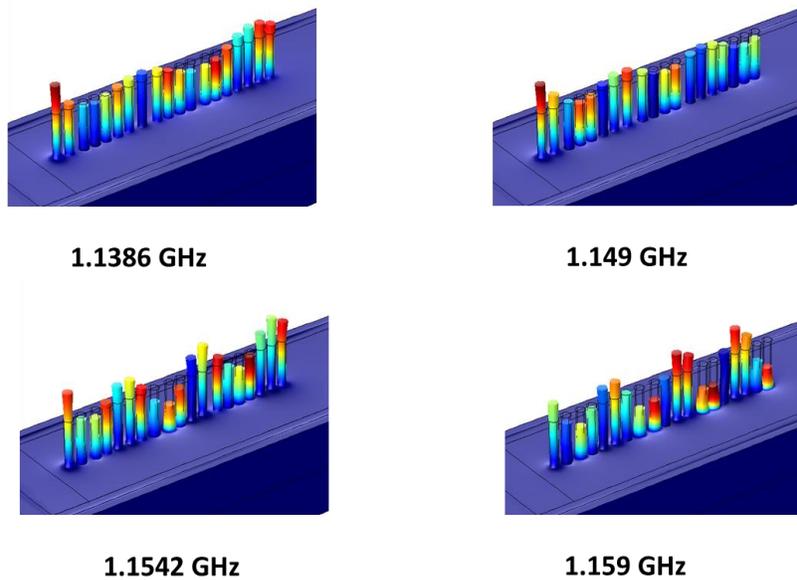


Figure III-31 : (a) Champ de déplacement pour une chaîne de 19 piliers désordonnées aux basses fréquences (inférieures à 1.17GHz).

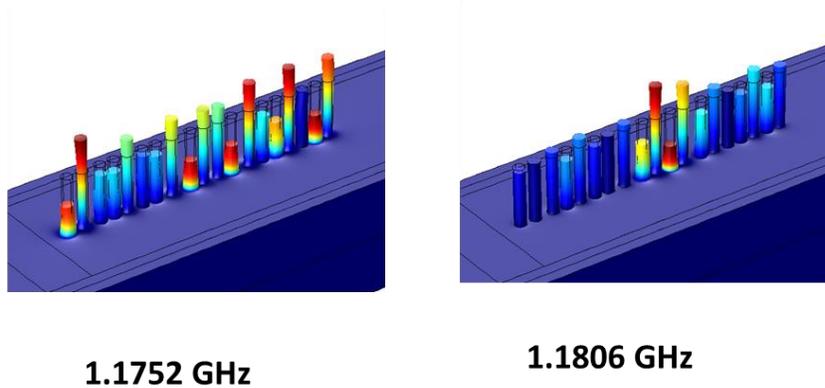


Figure III-31 : (b) illustration d'une propagation (gauche) et d'une localisation (droite) dans la chaîne désordonnée.

III.7. Conclusion

Dans ce chapitre nous nous sommes intéressés aux propriétés d'interaction entre piliers. Dans le cas d'un pilier unique, nous avons montré l'existence de modes de résonances de flexion et de compression pouvant être excités par une onde incidente. Dans le cas d'une paire de piliers, nous avons montré que seuls les modes de compression pouvaient se coupler en donnant naissance à un mode symétrique et un mode antisymétrique. Les conditions d'existence et le comportement des deux modes a été étudié en fonction de la distance entre les piliers ou encore de l'angle d'orientation par rapport à l'onde incidente.

Nous avons ensuite étudié la formation d'une chaîne de pilier et les conditions de propagation d'une onde dans la chaîne à partir de l'excitation du premier pilier. Les modes propres de la chaîne permettent de propager et de transmettre le signal par les propriétés de résonance. De manière plus complexe, nous avons étendu l'étude à une chaîne de 19 piliers. De même que dans le cas précédent, nous avons montré la possibilité de transmettre un signal à partir du pilier 1 par utilisation des modes propres de la chaîne. Enfin, nous avons cherché à connaître les limites de la robustesse de la propagation en introduisant des perturbations. Différentes conformations ont été proposées à partir d'angles droits et de forme en 'S'. Ces exemples ont permis de montrer la diversité des applications potentielles sur le guidage à travers une suite de piliers. Il est possible, à terme d'imaginer différents types de circuits formés par des piliers. Une étape prochaine à étudier pourrait être le cas d'un démultiplexeur d'onde, en forme de Y, comme déjà largement étudié dans la littérature pour les cristaux phononiques. L'avantage de la chaîne de pilier est qu'elle permet de

guider tout en s'affranchissant de la partie environnement du cristal phononique. Elle permet une flexibilité dans les formes. Enfin, la chaîne propage à des fréquences de résonance, celle de la compression des piliers, ce qui permet d'entretenir le signal en conservant une forte amplitude. Enfin, nous avons introduit la problématique du désordre qui a permis de montrer qu'il était possible de propager et de confiner dans des structures désordonnées à des fréquences différentes de celles obtenues dans le cas de la chaîne périodique.

Références

- [1] A. Noual, R. Akiki, Y. Pennec, E. H. El Boudouti, et B. Djafari-Rouhani. 2020. “Surface Acoustic Waves-Localized Plasmon Interaction in Pillared Phononic Crystals.” *Physical Review Applied* **13**(2):024077.
- [2] A. Noual, R. Akiki, Y. Pennec, E. H. El Boudouti, et B. Djafari-Rouhani, E. Lheurette, et B. Bonello, 2021, Evanescent Coupling between Aluminum Pillars, *The fifteenth International Congress on Artificial Materials for Novel Wave Phenomena, New York, 20-25 September*.
- [3] V. G. Veselago, *Sov. Phys. Usp.* **10**, 509 (1968).
- [4] J. B. Pendry, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3966 (2000).
- [5] C. Luo, S. G. Johnson, J. D. Joannopoulos, and J. B. Pendry, *Phys. Rev. B* **65**, 201104(R) (2002); *Phys. Rev. B* **68**, 045115 (2003).
- [6] E. Cubukcu, K. Aydin, E. Ozbay, S. Foteinopoulou, and C. M. Soukoulis, *Nature* **423**, 604 (2003).
- [7] D. R. Smith, W. J. Padilla, D. C. Vier, S. C. Nemat-Nasser, and S. Schultz, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4184 (2000).
- [8] R. A. Shelby, D. R. Smith, and S. Schultz, *Science* **292**, 77 (2001).
- [9] P. V. Parime, W. T. Lu, P. Vodo, and S. Sridhar, *Nature* **426**, 404 (2003).
- [10] A. Martinez, H. Miguez, A. Griol, and J. Marti, *Phys. Rev. B* **69**, 165119 (2004).
- [11] J. O. Vasseur, P. A. Deymier, B. Chenni, B. Djafari-Rouhani, L. Dobrzynski, and D. Prevost, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 3012 (2001).
- [12] Z. Liu, C. T. Chan, P. Sheng, A. L. Goertzen, and J. H. Page, *Phys. Rev. B* **62**, 2446 (2000).
- [13] J. Li, P. Yu, S. Zhang et N. Liu, Electrically-Controlled Digital Metasurface Device for Light Projection Displays. *Nature Communications* **2020**, *11* (1), 3574.
- [14] Y. Jin, Y. Pennec, B. Bonello, H. Honarvar, L. Dobrzynski, B. Djafari-Rouhani et M. I Hussein, Physics of surface vibrational resonances: pillared phononic crystals, metamaterials, and metasurfaces, *Reports on progress in physics*, Vol. **84**, 8 (2021).

CHAPITRE IV- Distributions bi-dimensionnelle Analyse numérique et analytique

I. Introduction

Dans le chapitre précédent nous avons étudié la structure de piliers en aluminium déposés sur un substrat semi-infini de silicium. Nous avons étudié les propriétés vibrationnelles par le calcul des courbes de dispersion et de transmission d'un pilier d'aluminium, puis celles de l'interaction entre deux piliers en fonction de la distance et de l'orientation de l'angle entre les piliers. La situation a ensuite été élargi à la propagation de l'onde le long d'une chaîne de piliers et différentes formes de chaînes ont été proposées.

Dans le cas de la chaîne linéaire, nous avons considéré la propagation le long d'une chaîne désordonnée de piliers. Ce concept est généralisé à ici deux dimensions, dans le plan x et y . Les distributions étudiées sont les distributions périodique, hyperuniforme et aléatoire (ou random).

Les cristaux phononiques, analogues mécaniques des cristaux photoniques, ont été introduits il y a plus de deux décennies [1,2]. Ces matériaux sont capables de présenter des bandes de fréquence interdites permettant de définir des propriétés physiques spécifiques. Pour exemple, les cristaux phononiques ont été utilisés dans plusieurs applications comme les filtres audibles [3], les diodes acoustiques [4], le cloaking [5], l'échographie [6], l'optomécanique [7] et la conduction de chaleur [8, 9].

Contrairement à la photonique, la recherche sur les systèmes phononiques désordonnés est peu présente dans la littérature. Certaines études ont porté sur des modèles phononiques désordonnés à 2D [10,11] et 3D [12,13]. L'étude du désordre pour les ondes élastiques a été développée dans le cas d'applications macroscopiques, telles que le contrôle des ondes sismiques [14] ou la modélisation des roches [15]. Pour qu'une étude sur le désordre soit significative d'un point de vue numérique, il est nécessaire de définir un nombre d'objet désordonné suffisant et de pouvoir répéter les calculs de manière conséquente, ceci afin d'obtenir une statistique satisfaisante pour être représentatif de la notion de désordre. Ces deux points font que les études nécessitent généralement une capacité mémoire et un temps de calcul important lorsqu'il s'agit d'utiliser les méthodes numériques telles que les éléments finis.

Afin de contourner cette contrainte et réaliser une structure désordonnée, nous allons développer un modèle analytique basé sur le formalisme de Green. Une comparaison entre la méthode FEM

et la méthode analytique sera présentée montrant ainsi les avantages et les limites de chaque modèle.

II. Distributions

Nous définissons ci-dessous les distributions périodiques, hyperuniformes et aléatoires qui seront étudiées dans ce chapitre.

II.1. Distributions périodiques

Une distribution périodique est une distribution de points (dans notre cas 2D) (x_n, y_n) où on peut prédire le placement des points (x, y) en appliquant la formule $x_n = x_{n-1} + dx$ et $y_n = y_{n-1} + dy$ avec $dx = dy$. La figure IV-1 montre une distribution périodique.

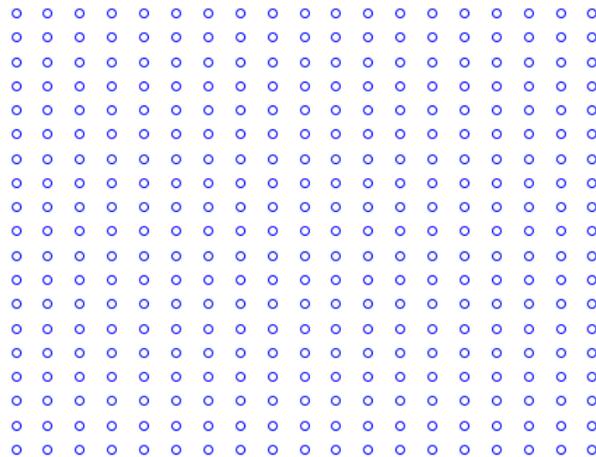


Figure IV-1 : Distribution périodique de 400 points.

Dans notre cas, les points (x, y) représentent les coordonnées des piliers d'aluminium.

Les structures périodiques pour les ondes acoustiques présentent plusieurs applications non seulement pour la dispersion temporelle et spatiale associée mais aussi pour les nombreuses possibilités pour contrôler la propagation des ondes telles que la formation de bandes interdites, la réfraction négative, les applications sub-longueur d'onde, la localisation, le guidage des ondes. Beaucoup de ces phénomènes sont liés aux effets de diffusion de Bragg qui deviennent pertinents à des longueurs d'onde comparables à la périodicité du système.

II.2. Distributions aléatoires et hyperuniformes

Une distribution de type random présente des positions aléatoires des éléments. Pour ces distributions on ne peut pas prédire les positions, générées par des processus stochastiques. La plupart des effets dans la nature sont stochastiques, la distribution des molécules d'air dans une pièce présente une distribution aléatoire, tout comme les gouttes de pluie à la surface de l'eau. Ces distributions peuvent être générées par différents processus de probabilité et fonctions mathématiques. La figure IV-2 montre un exemple de distribution aléatoire.

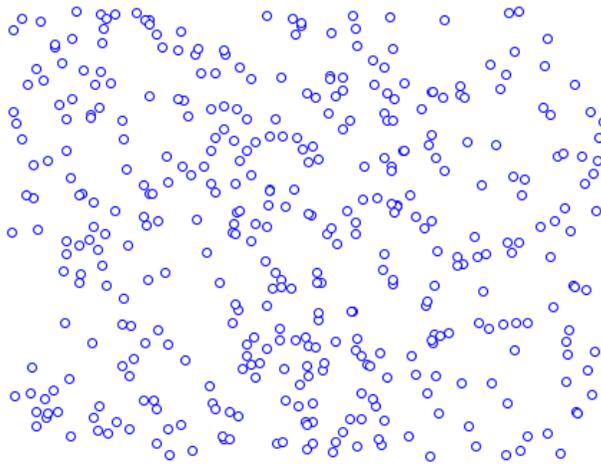


Figure IV-2 : Distribution aléatoire de 400 points.

Le concept d'hyperuniformité a d'abord été introduit comme métrique d'ordre ou un régime intermédiaire entre les structures aléatoires et les structures périodiques. Ce régime présente des propriétés généralement associées avec ces deux limites extrêmes [16].

Les structures photoniques désordonnées présentent des propriétés autour de la propagation interdites et de la polarisation des ondes E.M. [17–19]. La figure IV-3 montre un exemple de distribution hyperuniforme.

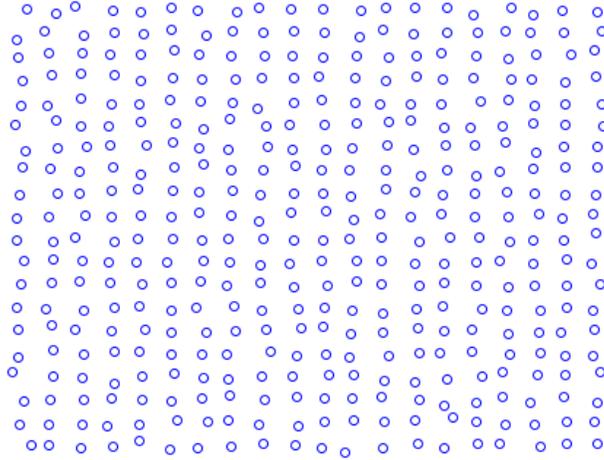


Figure IV-3 : Distribution hyperuniforme de 400 points

III. Modèle analytique

Afin d'étudier des structures désordonnées de grandes tailles, il a été nécessaire de développer un modèle analytique approché. La méthode FEM, bien qu'avantageuse car permettant de simuler les conditions expérimentales au plus près, pose plusieurs inconvénients au niveau des temps de calcul et de mémoire CPU. C'est pourquoi il a été nécessaire de créer un modèle analytique permettant de réaliser ces calculs.

Le modèle analytique sera limité au cas d'une membrane fine de dimension finie et non plus à un substrat semi-infini. La propagation sera alors initiée par une onde antisymétrique de Lamb au lieu d'être générée par une onde de Rayleigh. Dans le modèle nous supposerons que seul le mode antisymétrique A_0 se propage dans la plaque et non pas les modes symétrique (S_0) et de cisaillement (SH_0). Cette hypothèse sera valide tant que nous resterons dans la limite des grandes longueurs d'onde. Cette étude va nous permettre de comprendre les effets du désordre et de considérer les effets de l'hyper-uniformité et des distributions aléatoires.

III.1. Description du modèle analytique

Soit une membrane dans le plan (x, y) présentant une distribution de résonateurs attachés à la surface (figure IV-4). Chaque résonateur est défini par un ressort de constante de raideur k_R et une masse m_R . La fréquence de résonance des résonateurs ou piliers est $f_R = (1/2\pi) \sqrt{k_R/m_R}$, où R définit le résonateur et sa position.

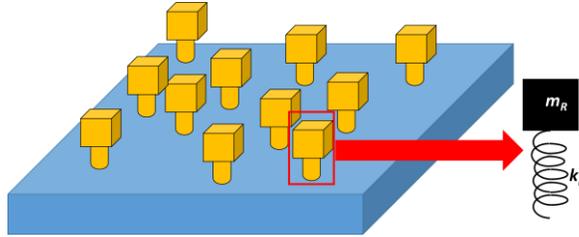


Figure IV-4 : Résonateurs, attachés sur une fine membrane, définis par un ressort de constante de raideur k_R et de masse m_R .

D'après la théorie des plaques fines [20], les équations harmoniques de vibration d'une plaque couplée aux résonateurs est donnée par :

$$D \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right)^2 w_1(\mathbf{r}) - \omega^2 \rho h w_1(\mathbf{r}) = \sum_R [f_1(\mathbf{R}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R})] \quad (IV - 1)$$

$$- \omega^2 m_R w_2(\mathbf{R}) = f_2(\mathbf{R}) \quad (IV - 2)$$

Avec

$$f_1(\mathbf{R}) = - k_R [w_1(\mathbf{R}) - w_2(\mathbf{R})] \quad (IV - 3)$$

Et

$$f_2(\mathbf{R}) = k_R [w_1(\mathbf{R}) - w_2(\mathbf{R})] \quad (IV - 4)$$

dans lesquelles :

$$D = \frac{E h^3}{12(1-\nu^2)} : \text{est la raideur de flexion de la plaque où } E \text{ est le module d'Young, } h \text{ l'épaisseur}$$

de la plaque et ν est le coefficient de Poisson.

ρ est la densité volumique de la plaque.

$\mathbf{r} = (x, y)$ est la position des points de la surface.

$w_1(\mathbf{r})$ est le déplacement vertical dans la plaque

$w_2(\mathbf{R})$ est le déplacement du résonateur masse-ressort pour la position \mathbf{R} .

$f_1(\mathbf{R})$ est la force appliquée par le ressort sur la plaque au point \mathbf{R} .

$f_2(\mathbf{R})$ est la force la force appliquée à la masse par le ressort.

$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ est une fonction delta bidimensionnelle définie par $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = \delta(x - R_x)\delta(y - R_y)$

On note que les équations (IV-1) et (IV-2) ne sont valides que dans la limite des membranes fines, soit pour $h < \lambda_p/10$ selon la référence [21].

λ_p correspond à la longueur d'onde de propagation dans la plaque et est définie par

$$\lambda_p = \frac{2\pi}{k_p} = \frac{2\pi}{\left(\frac{\rho h \omega^2}{D}\right)^{1/4}}$$

A partir des équations (IV-2) et ((IV-3) ou (IV-4)) on peut résoudre $w_2(\mathbf{R})$ en fonction de $f_1(\mathbf{R})$ et de $w_1(\mathbf{R})$. L'équation (IV-1) devient :

$$\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right)^2 - \frac{\rho h \omega^2}{D} \right] w_1(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} t w_1(\mathbf{R}) [\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R})] \quad (IV - 5)$$

Où

$$t = \frac{m_{\mathbf{R}}}{D} \frac{\omega_{\mathbf{R}} \omega^2}{\omega_{\mathbf{R}} - \omega^2} \text{ avec } \omega_{\mathbf{R}} = f_{\mathbf{R}}$$

Afin de résoudre l'équation (IV-5) il faut résoudre l'équation de Green qui vérifie l'équation :

$$\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right)^2 - \frac{\rho h \omega^2}{D} \right] G_0(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}) \quad (IV - 6)$$

$$k^4 = \frac{\rho h \omega^2}{D}$$

Où k présente 4 solutions, $k = \pm \left(\frac{\rho h \omega^2}{D}\right)^{1/4}$ ou $k = \pm i \left(\frac{\rho h \omega^2}{D}\right)^{1/4}$ correspondant aux ondes propagatives ou évanescentes selon le sens de propagation. En général, on décrit les ondes qui se propagent par des fonctions de Hankel et des fonctions de Bessel. Ces fonctions contiennent le module du vecteur d'onde $|k| = \left(\frac{\rho h \omega^2}{D}\right)^{1/4}$.

La solution de la fonction de Green représentée à l'équation (IV-6) est de la forme :

$$G_0(\mathbf{r}) = \frac{i}{8k^2} \left[H_0(kr) + \frac{2i}{\pi} K_0(kr) \right] \quad (\text{IV} - 7)$$

Où H_0 est la fonction d'ordre 0 et K_0 représente la fonction modifiée d'ordre 0 du deuxième type des équations de Hankel et de Bessel.

$$H_m^2(kr) = J_m(kr) + j Y_m(kr)$$

$$\text{Où } J_m(kr) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n! \Gamma(n+m+1)} \left(\frac{Kr}{2}\right)^{2n+m} \text{ et } Y_m(kr) = \frac{J_m(kr) \cos(m\pi) - J_{-m}(kr)}{\sin(m\pi)}$$

Le comportement asymptotique pour $m = 0$, $H_0^2(kr) \sim i \sqrt{\frac{2}{\pi k}} \frac{1}{r}$

$$I_m(kr) = i^{-m} J_m$$

alors

$$K_0(kr) \sim i \sqrt{\frac{2}{\pi k}} \frac{1}{r} \exp(kr)$$

On suppose que $\psi_0(r)$ est l'excitation introduite au système et $\psi_e(R)$ est l'excitation de chaque pilier attaché à la surface.

$w_1(r)$ peut-être écrit sous la forme :

$$w_1(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) + \sum T \psi_e(\mathbf{R}) G_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \quad (\text{IV} - 8)$$

$$\psi_e(\mathbf{R}) = \psi_0(\mathbf{R}) + \sum_{\alpha \neq \beta} T_{\beta} \psi_e(\mathbf{R}_{\beta}) G_0(\mathbf{R}_{\alpha} - \mathbf{R}_{\beta}) \quad (\text{IV} - 9)$$

Afin de calculer T on peut appliquer la formule (IV-8) pour un pilier, d'où $\psi_e = \psi_0$

$$w_1(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) + T \psi_0(\mathbf{R}) G_0(\mathbf{r} - \mathbf{R})$$

On remplace $w_1(\mathbf{r})$ dans l'équation (IV-5) ; on obtient alors :

$$\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right)^2 - \frac{\rho h \omega^2}{D} \right] \psi_0(\mathbf{r}) + T \psi_0(\mathbf{R}) G_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = T \psi_0(\mathbf{R}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \quad (i)$$

et

$$t w_1(\mathbf{R}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = t [\psi_0(\mathbf{R}) + T \psi_0(\mathbf{R}) G_0(\mathbf{0}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R})] \quad (ii)$$

Les équations (i) et (ii) nous permettent de calculer T

$$T = \frac{t}{1 - \frac{it}{8k^2}} \quad (IV - 10)$$

$$\text{Où } G_0(\mathbf{0}) = \frac{i}{8k^2}$$

Il nous reste à exprimer $\psi_e(\mathbf{R})$ afin de calculer $w_1(\mathbf{r})$ dans l'équation (IV-8)

$$\sum_{\beta} [\delta_{\beta\alpha} - (1 - \delta_{\beta\alpha}) T G_0(\mathbf{R}_\alpha - \mathbf{R}_\beta)] \psi_e(\mathbf{R}_\beta) = \psi_0(\mathbf{R}_\alpha) \quad (IV - 11)$$

On suppose l'existence de 3 résonateurs $i = 1, 2, 3$.

Afin de calculer les $\psi_0(\mathbf{R})$ on calcule les solutions de la matrice (IV-II)

$$\begin{pmatrix} 1 & -T G_0(\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1) & -T G_0(\mathbf{R}_3 - \mathbf{R}_1) \\ -T G_0(\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1) & 1 & -T G_0(\mathbf{R}_3 - \mathbf{R}_2) \\ -T G_0(\mathbf{R}_3 - \mathbf{R}_1) & -T G_0(\mathbf{R}_3 - \mathbf{R}_2) & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_e(\mathbf{R}_1) \\ \psi_e(\mathbf{R}_2) \\ \psi_e(\mathbf{R}_3) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Le vecteur $[1 \ 0 \ 0]$ représente l'excitation du premier pilier ou résonateur \mathbf{R}_1 . La résolution de la matrice permet d'obtenir les $\psi_e(\mathbf{R}_i)$ pour chaque fréquence ω .

II.2. Codes développés pour la méthode analytique

Deux codes ont été développés. Le premier donne accès à la courbe de résonances des piliers, le second à la représentation du champ de déplacement à la surface. Les deux codes sont reportés ci-dessous :

Résonance des piliers

```
rhoAl %densite aluminium
rhoSi %densite silicium
hSi %epaisseur plaque
hAl %hauteur aluminium
ESi% module de YOUNG
nuSi % rapport de poisson Silicium
hAl %hauteur des piliers d'Al
rAl %rayon des piliers d'Al
mAl=rhoAl*pi*rAl^2*hAl;
Omega0_Al=1.14155*10^9; %resonance du pilier unique
D = (ESi*hSi^3)/(12*(1-nuSi^2));
n= 100; %number of pillars
n1 = 100;
x=zeros(1,n); %x axis
y=zeros(1,n1); %y axis
delta_R = zeros(n,n);
G0_Rr = zeros(n,n);
omega = linspace(1.1*10^9,1.2*10^9,2000)
W1_rr = zeros(1,length(omega));
det_M = zeros(1,length(omega));
psi = cell(1,n);
for i_psi=1:1:n
psi{i_psi} = zeros(1,length(omega));
end
for i_omega=1:1:length(omega)
k = sqrt(omega(i_omega)) * ((rhoSi*hSi)/D)^0.25;
t_alpha = (mAl/D) * ((Omega0_Al^2*omega(i_omega)^2)/(Omega0_Al^2-omega(i_omega)^2));
T = t_alpha/(1-(sqrt(-1)/(8*k^2))*t_alpha);
for i_deltaR = 1:1:n
for j_deltaR = 1:1:n
```

```

delta_R(i_deltaR,j_deltaR) =sqrt((x(1,i_deltaR)-x(1,j_deltaR))^2+(y(1,i_deltaR)-y(1,j_deltaR))^2);
H = besselh(0,k*delta_R);
B = besselj(0,k*delta_R);
GO_R = (sqrt(-1)/(8*k^2))*(H+(2/pi)*sqrt(-1)*B);
end
end
GO_Rr = reshape(GO_R,n,n);
M = zeros(n,n);
for i_M=1:n
for j_M=1:n
if (i_M==j_M) M(i_M,j_M) = 1;
else M(i_M,j_M) = -T*GO_Rr(i_M,j_M);
end
end
end
det_M(i_omega) = det(M);
b=zeros(n,1);
for i_b=1:1:n
b(i_b,1) = 0;
b(1,1) = 1;
end
e = zeros(n,1);
e = linsolve(M,b)
for i_psi=1:1:n
psi{i_psi}(1,i_omega) = e(i_psi,1);
end
end

```

La courbe de résonance totale du système est obtenue par la somme des déplacements sur les piliers, divisé par le nombre de piliers.

Carte de champ de déplacement

```

rhoAl %densite aluminium
rhoSi %densite silicium
hSi %epaisseur plaque
hAl %hauteur aluminium
ESi% module de Young
nuSi % rapport de poisson Silicium
hAl %hauteur des piliers d'Al

```

```

rAl %rayon des piliers d'Al
mAl=rhoAl*pi*rAl^2*hAl;
Omega0_Al=1.14155*10^9; %resonance du pilier unique
D = (ESi*hSi^3)/(12*(1-nuSi^2));
n= 100; %number of pillars
n1 = 100;
x=zeros(1,n); %x axis
y=zeros(1,n1); %y axis
R=zeros(1,n);
x = [];
y = [];
omega = 1.14*10^9;
W1_rr = zeros(1,length(omega));
det_M = zeros(1,length(omega));
k = sqrt(omega) * ((rhoSi*hSi)/D)^0.25;
t_alpha = (mAl/D) * ((Omega0_Al^2*omega^2)/(Omega0_Al^2-omega^2));
T = t_alpha/(1-(sqrt(-1)/(8*k^2))*t_alpha);
for i_deltaR = 1:1:n
for j_deltaR = 1:1:n
delta_R(i_deltaR,j_deltaR) =sqrt((x(1,i_deltaR)-x(1,j_deltaR))^2+(y(1,i_deltaR)-y(1,j_deltaR))^2);
H = besselh(0,k*delta_R);
B = besselj(0,k*delta_R);
G0_R = (sqrt(-1)/(8*k^2))*(H+(2/pi)*sqrt(-1)*B);
end
end

G0_Rr = reshape(G0_R,n,n);
M = zeros(n,n);
for i_M=1:n
for j_M=1:n
if (i_M==j_M) M(i_M,j_M) = 1;
else M(i_M,j_M) = -T*G0_Rr(i_M,j_M);
end
end
end
disp(M);
b=zeros(n,1);
for i_b=1:1:n

```

```

b(i_b,1) = 0;
b(1,1) = 1;
end
e = zeros(n,1);
e = linsolve(M,b)
//Définir le nombre des points dans une surface
X=[] ;
Y=[] ;
delta_Rr = zeros(n,length(X));
G0_Rr = zeros(n,length(X));
for i_pp=1:1:n
for j_pp=1:1:length(X)
delta_Rr(i_pp,j_pp)= sqrt((X(1,j_pp)-x(1,i_pp))^2+(Y(1,j_pp)-y(1,i_pp))^2);
H_pp = besselh(0,k*delta_Rr);
B_pp = besselj(0,k*delta_Rr);
if (delta_Rr(i_pp,j_pp)==0) G0_R_pp = (sqrt(-1)/(8*k^2));
else
G0_R_pp = (sqrt(-1)/(8*k^2))*(H_pp+(2/pi)*sqrt(-1)*B_pp);
end
end
end
end
//Puis on calcule w1 et on le plot.

```

II.3. Comparaison entre la méthode analytique et la méthode FEM

Afin de vérifier la validité de la méthode analytique, les courbes de résonances obtenues par la méthode analytique est comparée à celle calculée par la méthode FEM. La comparaison des courbes est réalisée avec les conditions et contraintes suivantes :

- Pour la méthode numérique FEM, nous avons utilisé COMSOL Multiphysics. La méthode analytique est programmée sous Matlab ou octave.
- La méthode analytique ne permet pas de simuler un substrat semi-infini car les fonctions de Green pour ce problème ne peuvent pas être résolues de manière simple.
- La méthode analytique tient compte de la propagation des modes A_0 et non des modes S_0 et SH_0 .

- La méthode analytique assimile les piliers à des points sur lesquels on applique les forces représentées par le système masse-ressort, tandis que la méthode FEM définit les piliers par la géométrie et les matériaux.
- Le calcul analytique permet un temps de calcul faible. A titre d'exemple il est possible d'obtenir une courbe de résonance pour 5 piliers en moins de 5 sec. pour 1000 fréquences entre 1.1 et 1.2 GHz, tandis que pour la méthode FEM le temps estimé est de 4 heures et demi.

La figure IV-5 présente les courbes de résonance obtenues par la méthode FEM et la méthode analytique. On considère les piliers d'Al de hauteur $h = 1000$ nm et de diamètre $d = 200$ nm déposés sur substrat de silicium. Les piliers sont distants de 50 nm, soit 250 nm centre à centre.

- Pour la figure IV-5(a), le calcul est réalisé pour 3 piliers alignés. Dans les calculs par FEM, le substrat est une membrane d'épaisseur $e = 1$ μm .
- Pour la figure IV-5(b), le calcul est réalisé pour 5 piliers alignés. Dans les calculs par FEM, le substrat est semi-infini.

Dans chaque cas, l'excitation est exercée sur le pilier 1.

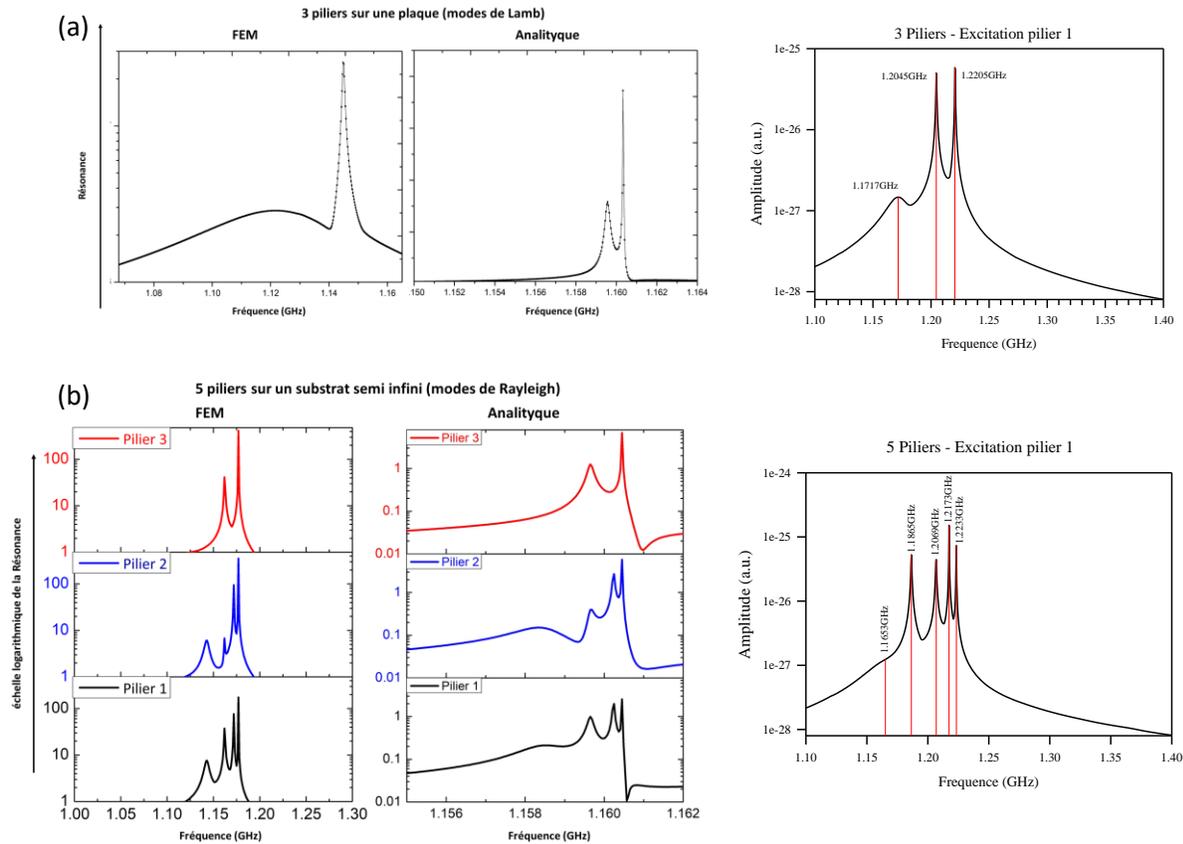


Figure IV-5 : Courbes de résonance calculées par FEM (colonne de gauche) et par la méthode analytique (colonne de droite) pour (a) trois piliers sur membrane fine d'épaisseur $1 \mu\text{m}$ et (b) cinq piliers sur substrat semi-infini.

Notons que les fréquences de résonances du mode de compression d'un pilier unique déposé sur un substrat semi-infini (modes de Rayleigh) est la même que dans le cas d'une membrane fine d'épaisseur $1 \mu\text{m}$ (mode de Lamb), soit autour de 1.16 GHz .

En comparant les résultats obtenus par les deux méthodes, on remarque l'existence du même nombre de pics de résonances pour la géométrie à 5 piliers, si ce n'est que le mode large à basse fréquence est difficilement visible. Pour la chaîne de 3 piliers il faudrait continuer le calcul par FEM à plus haute fréquence pour s'assurer de la présence d'un troisième pic de résonance. Ces remarques qualitatives ne sont pas affectées par la différence de substrat.

Enfin, nous avons considéré le cas d'une chaîne de 19 piliers (figure IV-6) déposés sur un substrat semi-infini. De nouveau, nous constatons un bon accord entre les deux méthodes, avec un léger décalage vers les hautes fréquences pour le calcul analytique.

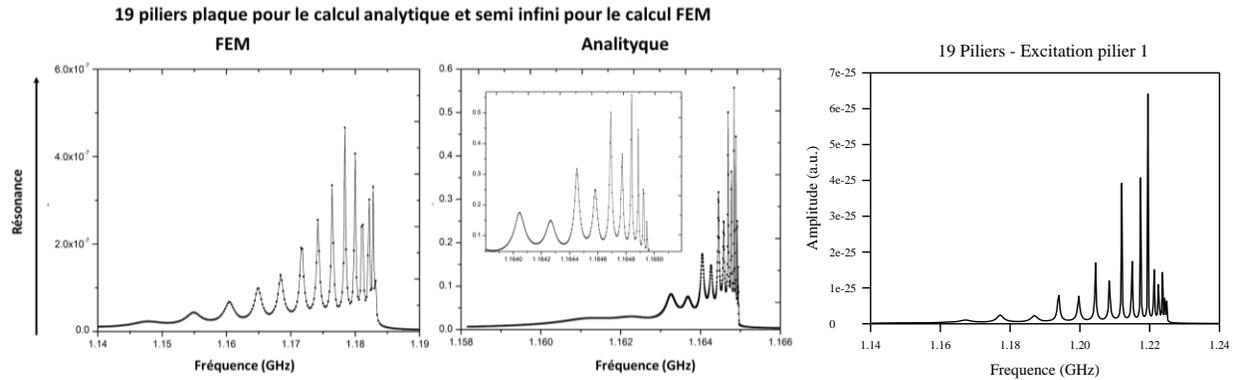


Figure IV-6 : Courbes de résonance calculées par FEM (gauche) et par la méthode analytique (droite) pour 19 piliers sur substrat semi-infini.

La figure IV-7 montre un exemple de cartes de champ pour deux fréquences de résonances de la figure IV-6. A la première fréquence, on observe une excitation du premier pilier qui conduit à la propagation de l'onde le long de la chaîne. A la seconde fréquence, l'excitation correspond à la résonance du premier pilier, sans propagation le long de la chaîne. Ce résultat est commun aux deux modes de calcul.

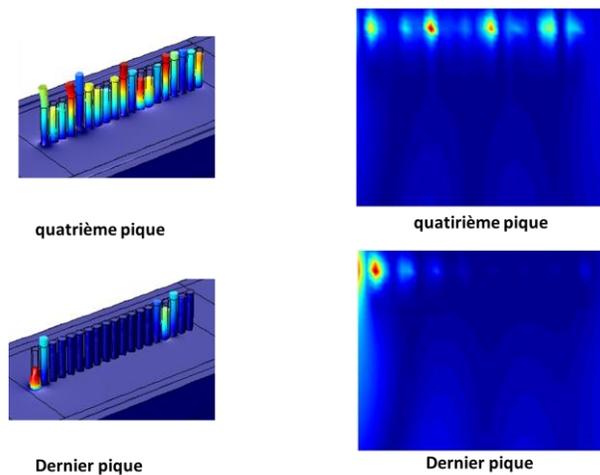


Figure IV-7 : Cartes de champs de déplacement pour une chaîne de 19 piliers par la méthode FEM (gauche) pour les fréquences 1.164 GHz et 1.182 GHz et analytique (droite) pour les fréquences 1.162 GHz et 1.165 GHz.

IV- Distributions aléatoire et hyperuniforme

Afin de générer des distributions aléatoires et hyperuniformes, nous avons recours à une méthode développée par *David Dereudre et al.* du département de Mathématiques en SciLab.

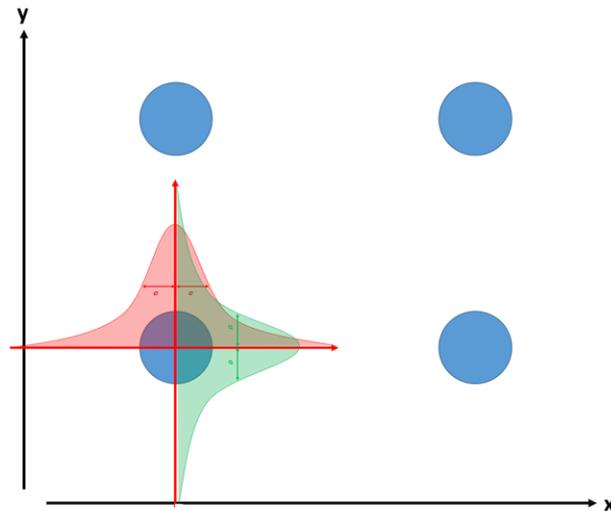


Figure IV-8 : Schéma du déplacement de la position des piliers par rapport à leur position périodique.

La méthode de génération de distributions des positions des piliers consiste à choisir la densité de pilier. Nous définissons un réseau périodique de maille carrée. Une fois la distribution périodique est créée on applique une variation de position périodique suivant une courbe gaussienne, définie par son écart type σ , c'est-à-dire la probabilité de la position du pilier est déterminée par une gaussienne. Cette procédure est répétée suivant un algorithme de type Monte-Carlo. La figure IV-8 schématise la méthode de variation suivant les écarts-types x et y . Le déplacement aléatoire suivant cette loi de Gauss est appliqué en introduisant une condition de non-chevauchement entre piliers, basée sur un **volume d'exclusion**. Lorsqu'il y a chevauchement, la position est rejetée et un nouveau tirage est réalisé.

Pour $\sigma \neq 0$ la distribution résultante peut être hyperuniforme ou aléatoire. Afin de déterminer le type de la distribution on recourt généralement à deux facteurs par le calculant de la fonction de distribution radiale d'ordre supérieur i , $g_i(\mathbf{r})$ ou du facteur de structure $S(k)$.

Dans notre cas nous allons utiliser $S(\mathbf{k})$ afin de définir l'ordre et la nature de la distribution. La distribution hyperuniforme peut avoir plusieurs classes : classe I, classe II et classe III. Le programme développé sur SciLab va générer des distributions hyperuniformes de classe I.

Le facteur de structure $S(\mathbf{k})$ est défini par :

$$S(\mathbf{k}) = 1 + \rho \mathfrak{F}(g - 1)(\mathbf{k})$$

où g est la distribution radiale et ρ la densité de points.

Pour une structure hyperuniforme $S(\mathbf{k}) \rightarrow 0$ si $k \rightarrow 0$.

Pour l'approximer par des méthodes numériques, on considère que $S(\mathbf{k})$ est sous la forme :

$$S(\mathbf{k}) = \frac{1}{N} \left| \sum_{j=1}^N e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j)} \right|^2$$

$$\text{Avec } \mathbf{k} \in \left\{ \frac{2\pi}{L} \mathbf{n}, \mathbf{n} \in \mathbb{Z}^d \right\}$$

L est le côté du carré de la surface considérée et N le nombre de points de la distribution équivalent au nombre de piliers.

Une fois les coordonnées des points générés, on utilise une librairie implémentée sur python afin de vérifier si la structure est hyperuniforme. Ce programme va approximer et calculer $S(\mathbf{k})$ pour $k = 0$ afin de connaître la nature de la structure.

Librairie python:

In [1]: !pip install structure-factor.

V- Distribution périodique

On suppose une distribution périodique de 100 piliers (10×10), distants de $l = 50$ nm. Dans le calcul analytique, la distance entre deux points sera prise de 50 nm, en assimilant les piliers à des points. On excite le premier pilier comme indiqué figure IV-9 et on étudie la propagation dans la structure.

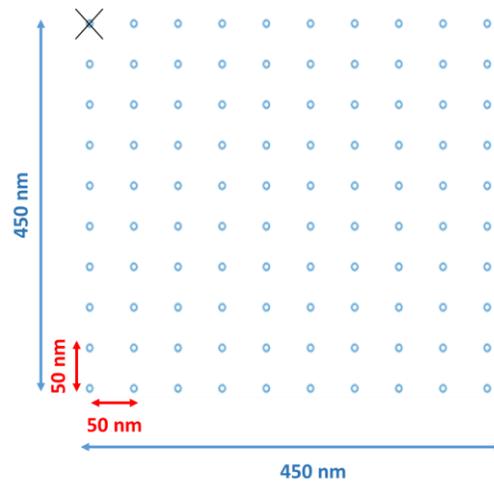


Figure IV-9 : Distribution périodique de $N = 100$ résonateurs. La croix indique la position de la source.

L'excitation du pilier du pilier 1 est équivalente à exercer une force $[1\ 0\ \dots\dots\dots 0]$. Dans le modèle analytique la norme de la force excitatrice sera égale à l'unité. La courbe de résonance, présentée figure IV-10 est obtenue en faisant la somme des déplacements sur les 100 piliers, divisée par le nombre de piliers.

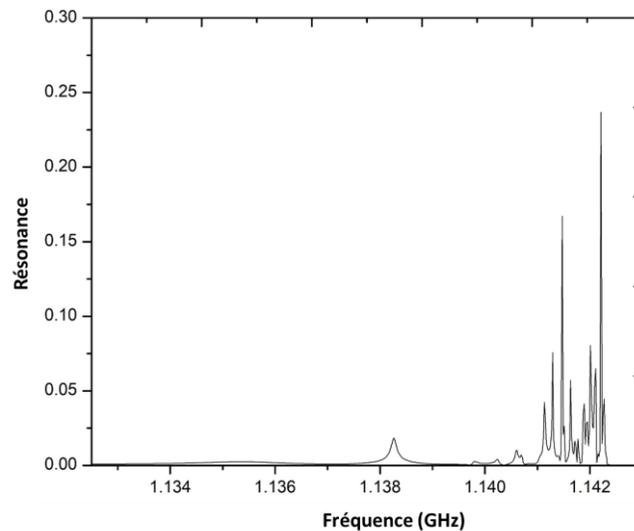


Figure IV-10 : Courbe de résonance pour une distribution périodique de 100 piliers.

En excitant le pilier 1, nous obtenons la courbe de résonance présentée figure IV-10. On peut remarquer la présence d'un premier pic au-dessus de 1.138 GHz puis une bande passante entre 1.140 GHz et 1.1425 GHz. Les figures IV-11 et IV-12 montrent les cartes des champs de déplacement aux fréquences 1.1 GHz, 1.144 GHz et 1.18 GHz qui correspondent à des fréquences

en dehors des résonances. Les points noirs correspondent à la position des piliers. Lorsque la fréquence choisie est hors des fréquences de résonance, le champ est concentré au niveau du pilier excité et on n'a pas de propagation dans la structure périodique. La figure IV-12 représente les cartes de champ de déplacement à quelques fréquences de résonances : 1.13825 GHz, 1.14147 GHz, 1.142 GHz et 1.1422 GHz. Différents modes du réseau périodique sont présentés à titre d'exemple. La figure IV-14 montre que la réponse du champ acoustique (cadres vert, rouge) dépend de la position de la source, définie sur la figure IV-13.

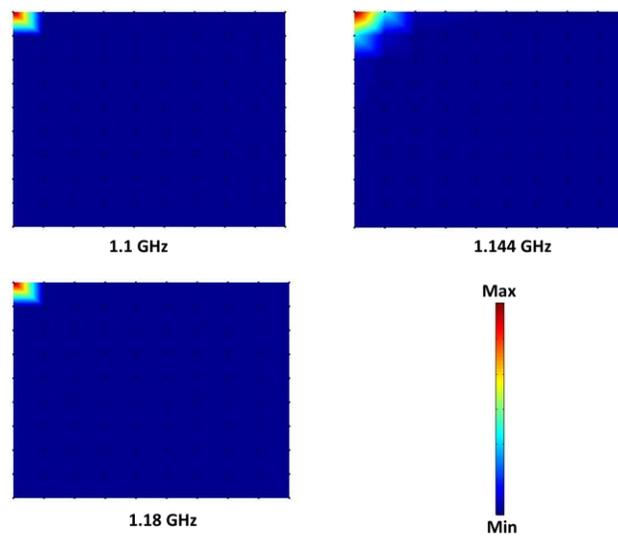


Figure IV-11 : Carte de champ de déplacement pour des fréquences hors résonance, 1.1 GHz, 1.144 GHz et 1.18 GHz.

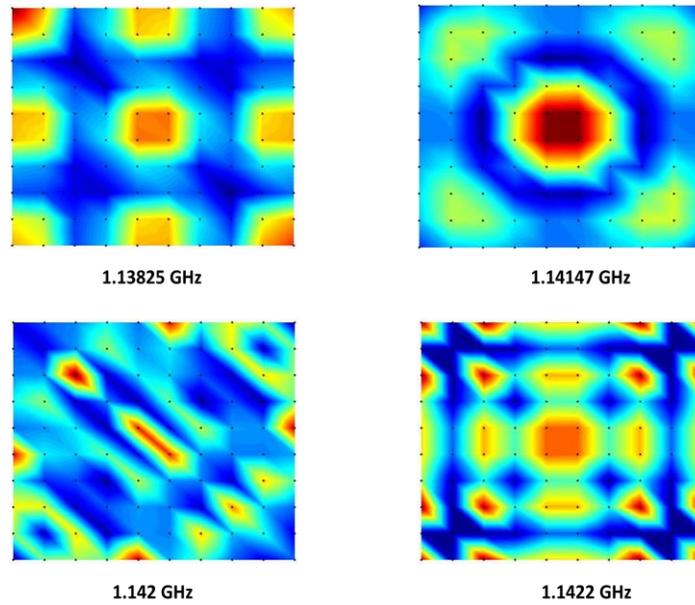


Figure IV-12 : Exemple de cartes de champ de déplacement aux fréquences de résonance 1.13825 GHz, 1.14147 GHz, 1.142 GHz et 1.1422 GHz.

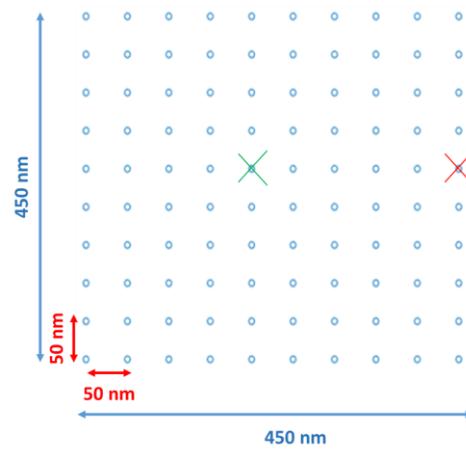


Figure IV-13 : Choix de la position de la source.

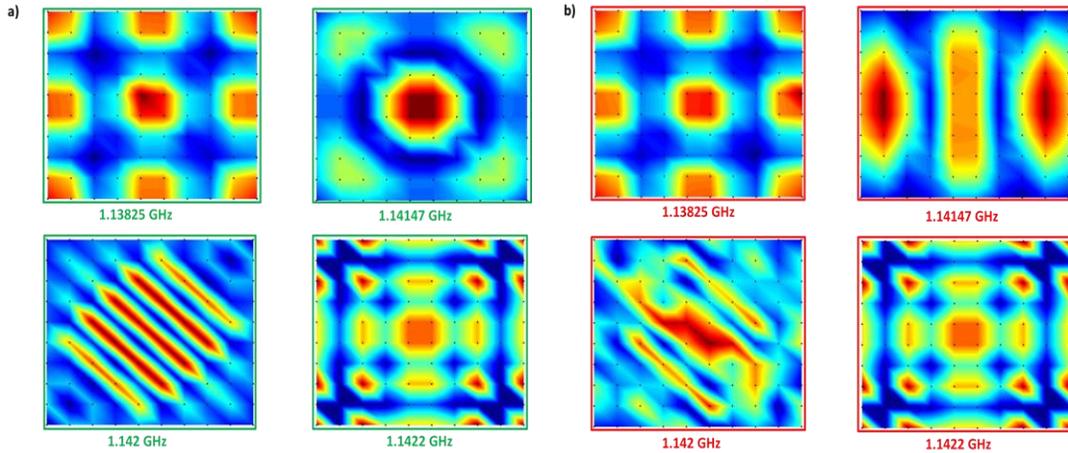


Figure IV-14 : (a) Cartes de champ de déplacement lorsque le pilier (a) vert puis (b) rouge est excité.

VI- Distributions aléatoire et hyperuniforme

L'étude du désordre à 2D commence par une surface de (450×450) nm² présentant une distribution aléatoire de $N = 100$ points, pour un écart type $\sigma = 5$ et un volume d'exclusion de $0.3 \times$ rayon du pilier (100 nm) (figure IV-15). Un tel écart type correspond à une distribution aléatoire, au-delà d'une distribution hyperuniforme. La distribution périodique n'est plus apparente et il se forme des amas de résonateurs ainsi que des espaces libres de résonateurs. La position de la source est indiquée par une croix noire. La densité des points est la même que pour la structure périodique. La figure IV-16 représente le facteur de structure de la distribution aléatoire (figure IV-15).

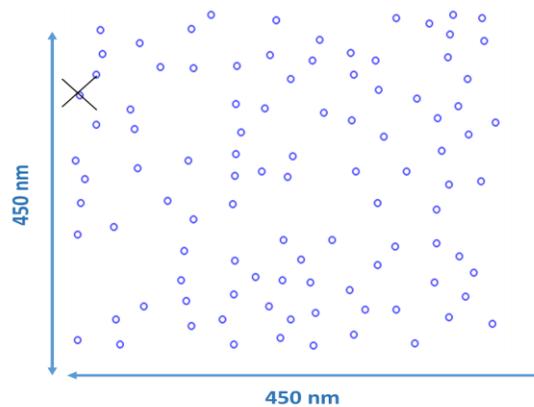


Figure IV-15 : Distribution aléatoire de piliers pour $\sigma = 5$ et $N = 100$.

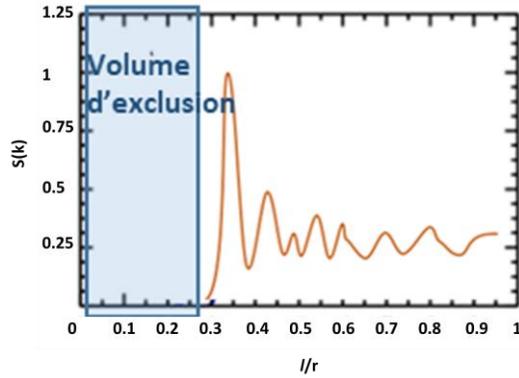


Figure IV-16 : Facteur de structure $S(k)$ de la distribution aléatoire, pour un écart type de 5 et un nombre de pilier de 100.

La figure IV-16 montre le volume d'exclusion ($0.3 \times$ rayon) (bleu clair) qui correspond à l'espace interdit autour des piliers. Cette contrainte permet d'éviter un chevauchement des piliers.

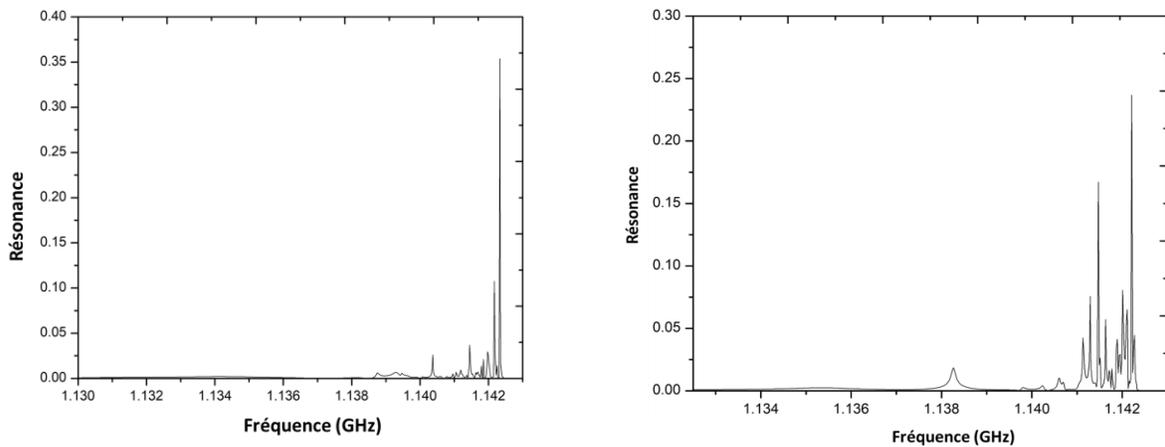


Figure IV-17 : Courbe de résonance pour une distribution (gauche) aléatoire avec $\sigma = 5$ et (droite) périodique de 100 piliers

La distribution aléatoire permet une localisation assez importante à la fréquence 1.1428 GHz, avec un facteur de qualité $Q = 400$.

En comparant la courbe de résonance aléatoire à la résonance périodique on remarque une localisation plus importante de la distribution aléatoire avec seulement un seul pic important de résonance. On remarque que la bande passante pour la distribution périodique est plus large que celle de la distribution aléatoire (figure IV-17). Cette largeur de bande dépend de la distribution aléatoire.

La figure IV-18 représente la carte de champ lorsque l'excitation du pilier est à une fréquence hors résonance. Dans ce cas, le champ élastique est localisé dans l'environnement proche du pilier source.

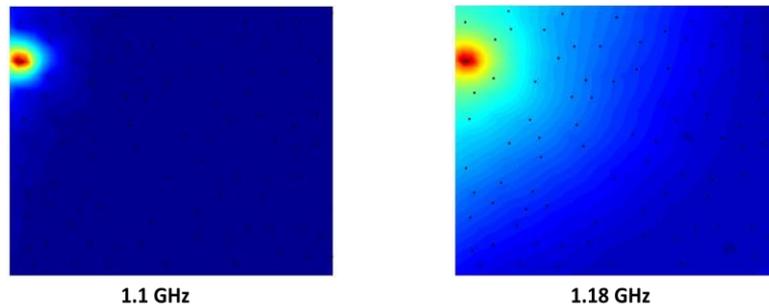


Figure IV-18 : Cartes de champ de déplacement pour des fréquences hors résonances.

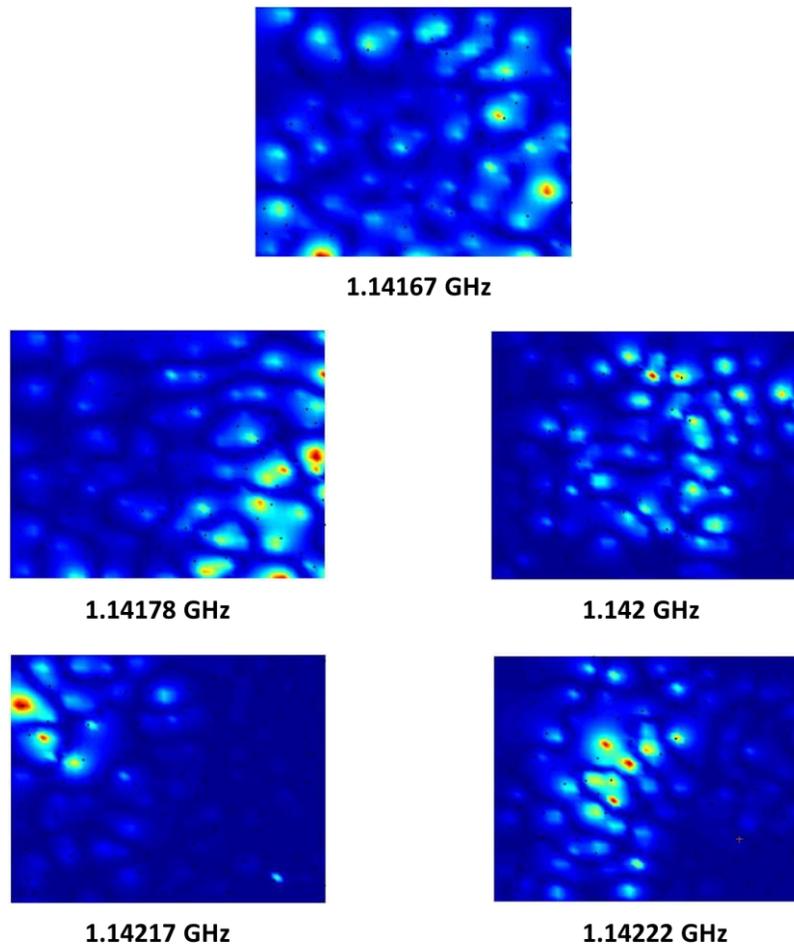


Figure IV-19 : Cartes de champ de déplacement pour des fréquences de résonance.

La figure IV-19 représente quelques exemples de cartes de champ pour des fréquences choisies dans la bande de résonance. Il n'existe plus de modes propres comme dans la structure périodique mais une hyper-localisation du champ qui peut se faire sur la surface, dans les espaces ne contenant pas de piliers.

En diminuant la valeur de l'écart type, on peut avoir accès à une distribution hyperuniforme, qui se définit comme une métrique qui se positionne entre la distribution périodique et la distribution aléatoire. On considère une surface de (450×450) nm², dans lequel une distribution aléatoire de $N = 100$ points, a été défini avec un écart type de $\sigma = 0.1$ (figure IV-20) et un volume d'exclusion de $0.3 \times$ rayon du pilier (100 nm). La croix noire représente la position de la source. La densité des points est la même que pour la structure périodique et la structure aléatoire. Dans cette distribution, il est encore possible de distinguer la position du réseau périodique. La figure IV-21 représente le facteur de structure $S(k)$ dans lequel il n'existe plus d'oscillation comme dans le cas fortement désordonné. Le premier pic principal correspond à la distance entre premiers voisins.

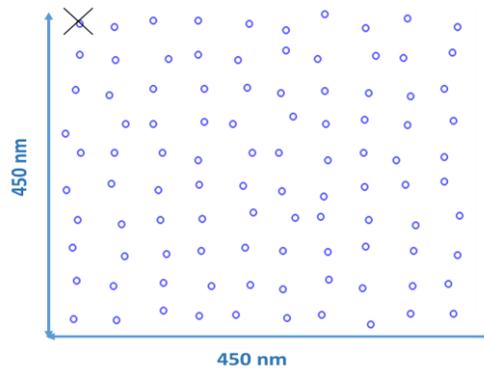


Figure IV-20 : Distribution hyperuniforme de piliers pour $\sigma = 0.1$ et $N = 100$.

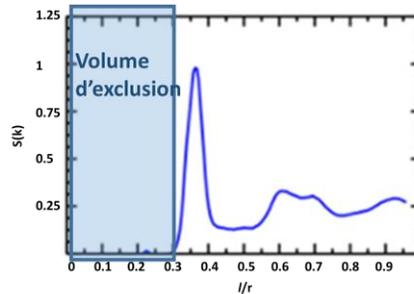


Figure IV-21 : Facteur de structure $S(k)$ de la distribution hyperuniforme, pour un écart type de 0.1 et un nombre de piliers de 100.

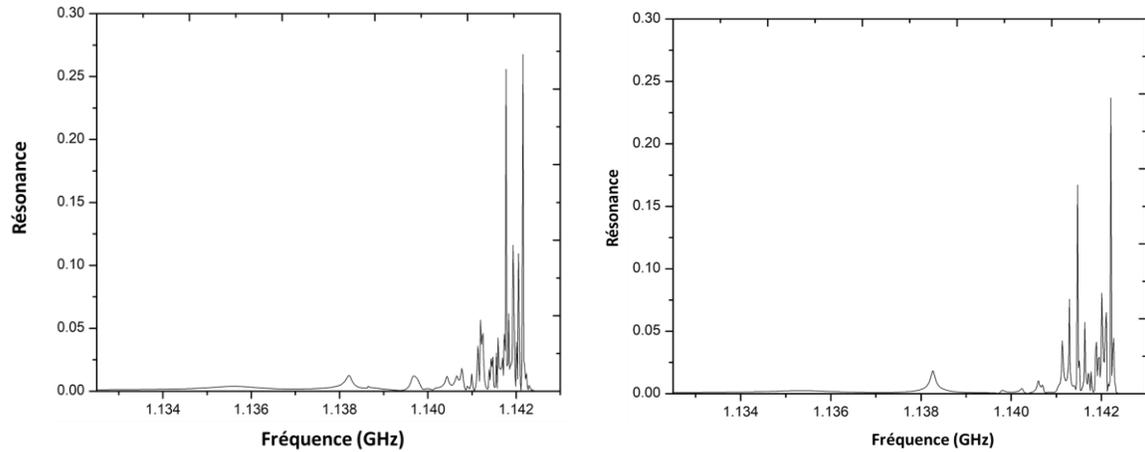


Figure IV-22 : Courbe de résonance d'une distribution (gauche) hyperuniforme avec $\sigma = 0.1$ et (droite) périodique de 100 piliers.

La figure IV-22 montre que la courbe de résonance de la structure hyperuniforme est très comparable à celle du réseau périodique. Nous retrouvons plusieurs modes de résonances à haute fréquences. Les cartes de champ de déplacement sont représentées figure IV-23. Il est qualitativement possible de voir que le système hyperuniforme est à la limite entre le système périodique pour lequel les modes respectent la symétrie du réseau cristallin (1.13825 GHz et 1.14147 GHz) et le système fortement aléatoire ou il est possible de localiser des champs à a surface, entre les piliers (1.1422 GHz).

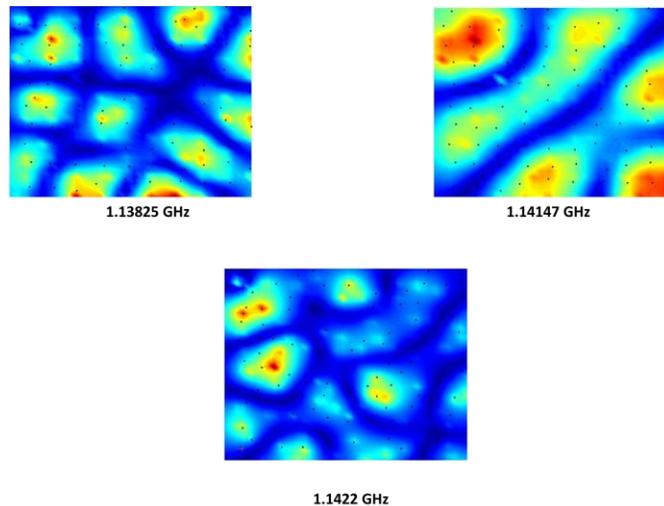


Figure IV-23 : Cartes de champ de déplacement aux fréquences de résonance 1.13825 GHz, 1.14147 GHz et 1.1422 GHz dans le régime hyperuniforme.

Enfin, la distribution hyperuniforme étudiée a permis d'observer à plus haute fréquence, une hyper-localisation du champ comme dans le cas aléatoire. Deux exemples sont présentés sur la figure IV-24.

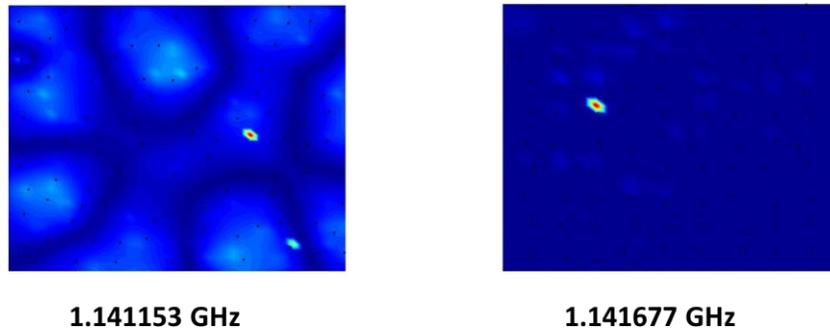


Figure IV-24 : Cartes de champ de déplacement aux fréquences 1.141153 GHz et 1.141677 GHz dans le régime hyperuniforme.

VII- Effet de l'écart type σ

L'écart type σ est le paramètre qui définit la nature de la distribution et l'évolution de la distribution entre les trois régimes. Dans ce paragraphe nous allons étudier l'effet de l'écart type en le faisant varier graduellement de 0 à 5 (figure IV-25). En augmentant l'écart type l'étalement de la bande de résonance diminue, pour la distribution périodique l'épaisseur de la bande résonance est de 4.2 MHz, pour les distributions hyperuniformes la bande passante est de 4 MHz pour les distributions aléatoires cette épaisseur diminue à 3.8 MHz. Le nombre de pics de résonance diminue progressivement avec l'augmentation de σ .

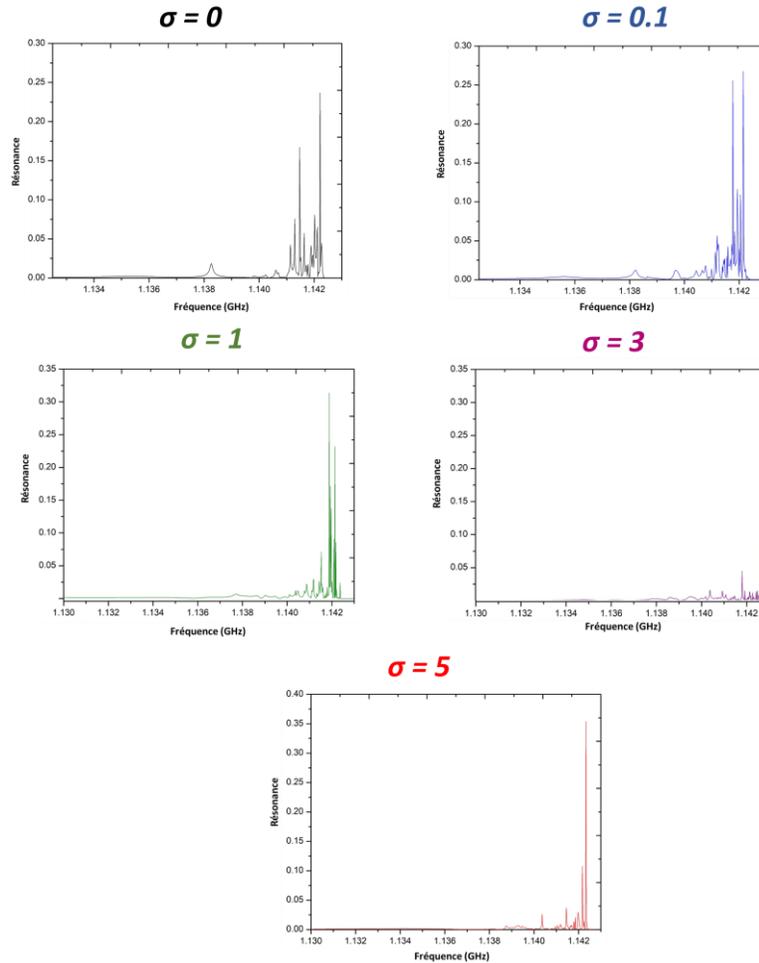


Figure IV-25 : Courbes de résonances pour différentes valeurs croissantes de σ .

VIII- Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons développé une méthode de calcul analytique permettant de calculer les courbes de résonances de piliers en s'affranchissant des temps de calcul et des capacités en mémoires. Nous avons montré que la perturbation en position d'un système périodique va donner lieu à deux régimes, celui de distributions hyperuniformes et de distributions aléatoires. Nous avons montré que le régime hyperuniforme conduisait à des localisations proches du régime périodique mais pouvait également présenter des hyper-focalisations proches de celles observées dans le cas d'un fort désordre.

Le développement du modèle analytique va nous permettre de faire de nombreux calculs et de générer une statistique sur les distributions aléatoires de piliers. Par la suite, l'objectif sera de

relier les propriétés des comportements physiques de localisation des ondes dans les milieux désordonnés avec la statistique aléatoire de position des piliers.

Références

- [1] M. Sigalas et E. N. Economou, *Solid State Commun.* **86**, 141 (1993).
- [2] M. S. Kushwaha et P. Halevi, *Appl. Phys. Lett.* **64**, 1085 (1994).
- [3] J. O. Vasseur, P. A. Deymier, A. Khelif, P. Lambin, B. Djafari-Rouhani, A. Akjouj, L. Dobrzynski, N. Fettouhi, and J. Zemmouri, *Phys. Rev. E* **65**, 056608 (2002).
- [4] X.-F. Li, X. Ni, L. Feng, M.-H. Lu, C. He, et Y.-F. Chen, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 084301 (2011).
- [5] H. Chen and C. T. Chan, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **43**, 113001 (2010).
- [6] A. Sukhovich, L. Jing, et J. H. Page, *Phys. Rev. B* **77**, 014301 (2008).
- [7] M. Aspelmeyer, T. J. Kippenberg, et F. Marquardt, *Rev. Mod. Phys.* **86**, 1391 (2014).
- [8] M. Maldovan, *Nature (London)* **503**, 209 (2013).
- [9] B. L. Davis et M. I. Hussein, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 055505 (2014).
- [10] Y. Zuo-Dong et C. Jian-Chun, *Chin. Phys. Lett.* **22**, 889 (2005).
- [11] M. R. Wagner, B. Graczykowski, J. S. Reparaz, A. E. Sachat, M. Sledzinska, F. Alzina, et C. M. S. Torres, *Nano Lett.* **16**, 5661 (2016).
- [12] M. F. Limonov et R. M. D. L. Rue, *Optical Properties of Photonic Structures: Interplay of Order and Disorder* (CRC Press, Boca Raton, 2012).
- [13] T. Still, W. Cheng, M. Retsch, R. Sainidou, J. Wang, U. Jonas, N. Stefanou, et G. Fytas, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 194301 (2008).
- [14] E. Larose, L. Margerin, B. A. van Tiggelen, et M. Campillo, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 048501 (2004).
- [15] F. Shahbazi, A. Bahraminasab, S. M. Vaez Allaei, M. Sahimi, et M. R. R. Tabar, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 165505 (2005).
- [16] N. Muller, J. Haberko, C. Marichy, and F. Scheffold, *Adv. Opt. Mater.* **2**, 104 (2014).
- [17] W. Man, M. Florescu, K. Matsuyama, P. Yadak, G. Nahal, S. Hashemizad, E. Williamson, P. Steinhardt, S. Torquato, and P. Chaikin, *Opt. Express* **21**, 19972 (2013).
- [18] T. Amoah and M. Florescu, *Phys. Rev. B* **91**, 020201 (2015).
- [19] M. Florescu, S. Torquato, and P. J. Steinhardt, *Appl. Phys. Lett.* **97**, 201103 (2010).
- [20] Y. Xiao, J. Wen, and X. Wen, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **45**, 195401 (2012).
- [21] E. Dieulesaint et Daniel Royer, ed. (1999) *Elastic waves in Solids I & II*, 3rd ed.

Conclusion générale

Le travail présenté dans ce rapport de thèse traite de la propagation des ondes élastiques dans les cristaux phononiques. Ce travail est conduit afin de réaliser des expériences qui permettent de vérifier des effets de localisation d'énergie, de résonances locales et de propagation des ondes élastiques à travers des cylindres déposés sur un substrat semi infini dans le domaine des basses fréquences.

Dans le chapitre II nous avons discuté les géométries et la nature physique de la structure à la fois au niveau du substrat et des cylindres. L'introduction d'une couche de métal sur la couche diélectrique, sur laquelle on dépose un pilier en métal permet d'ouvrir le système vers les excitations plasmoniques. Une telle géométrie a permis d'étudier le couplage plasmomécanique. Après plusieurs comparaisons et discussion de faisabilité expérimentale le choix s'est porté sur deux structures dont les matériaux constitutifs sont Au-SiO₂-Au-Si et Al-Cy-Al-Si. Généralement, les facteurs de qualité Q des structures varient entre 8 et 35.

Dans le chapitre III, nous avons étudié l'interaction entre deux piliers, de dimension sub-longueur d'onde, par rapport à l'angle et la distance. Nous nous sommes ensuite intéressés à l'étude de la propagation de l'onde par rapport au mode de compression dans des chaînes linéaires de différentes formes et en excitant différents modes de résonance des piliers. Le chapitre III a ainsi montré la possibilité de propagation dans une structure métamatériau acoustique le long d'une chaîne de pilier et la robustesse de la transmission de l'onde. Cette étude permet d'imaginer d'autres applications et d'autres formes de chaîne plus complexe sur la base des modèles masses ressort déjà développés dans la littérature.

Dans le chapitre IV, nous avons repris une méthode de calcul analytique sur la base du formalisme de Green. La méthode analytique permet de calculer les courbes de résonances des piliers en excitant un pilier, sous réserve d'approximation. Cette méthode permet une description des phénomènes de désordres tout en économisant les temps et mémoires de calcul. L'effet du désordre est approché à travers des comparaisons entre les structures périodiques, les distributions hyperuniformes et aléatoires. Les effets de la propagation et de la localisation des champs élastiques sur la surface sont discutés. En perspective, la méthode développée dans le chapitre IV va nous permettre d'investiguer plus de paramètres statistiques liés à la distribution des piliers et sortir une loi générale sur les effets statistiques sur la localisation du champ.

Annexe 1

Tout au long de la thèse, le choix s'est porté sur le mode de compression, car celui génère un champ évanescent au pied du pilier, à la surface du substrat. Celui-ci permet de coupler deux piliers lorsque ceux-ci sont proches et de générer une bande passante lorsque le système est composé d'une chaîne de piliers. Notons que le couplage entre deux piliers a également été étudié pour le mode de flexion en 2019 par Laetitia Raguin et al. [1] qui publie dans *nature communications* 2019, une étude expérimentale et théorique sur l'interaction entre deux piliers (figure 1). Cet article a étudié les modes de résonances en flexion d'un pilier, puis l'interaction entre 2 piliers par rapport aux modes de flexion, en prenant en compte les positions et les dimensions géométriques différenciées des deux piliers.

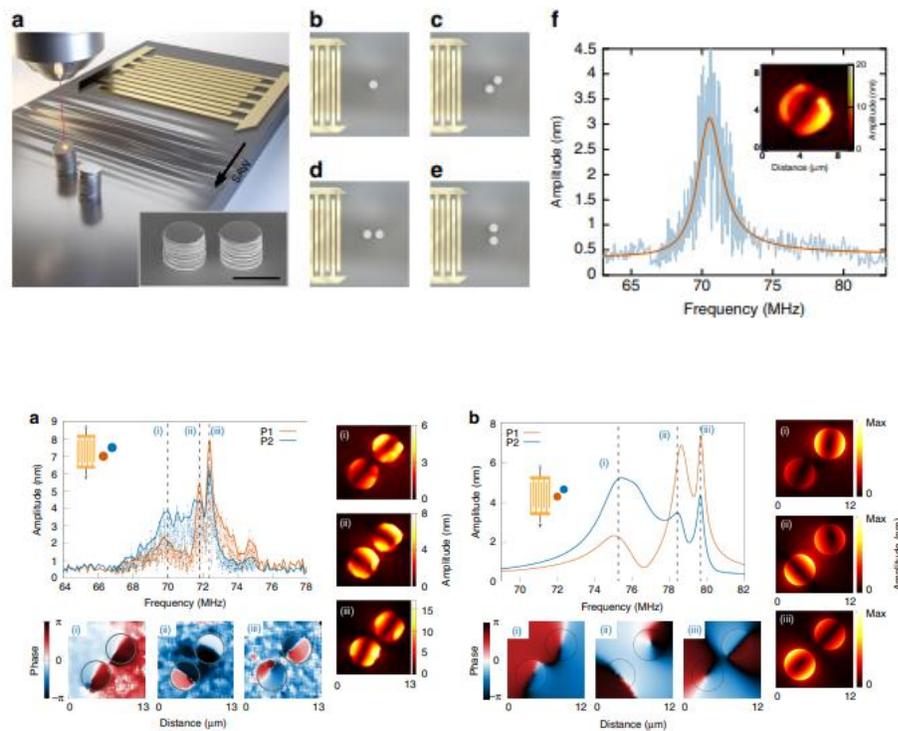


Figure 1 : a) Les résonateurs sont excités par des ondes acoustiques de surface à l'aide d'un transducteur interdigital. Le mouvement du résonateur est caractérisé par une interférométrie laser. La barre d'échelle est de $5 \mu\text{m}$. La réponse d'un seul pilier est d'abord étudiée comme référence b) Trois directions du vecteur SAW incidents sont considérées pour l'excitation de la paire de piliers c) longitudinal et d) transversal e) la distance d'écart est fixée à $1,5 \mu\text{m}$ ou $6 \mu\text{m}$. f) courbe de résonance expérimentale d'un seul pilier. Le trait plein bleu clair correspond aux données acquises tous les 10 kHz entre 67 et 73 MHz et tous les 100 kHz en dehors de cette plage. La ligne pleine

rouge correspond à un ajustement des données expérimentales avec une forme de ligne Fano. Champ de déplacement hors plan à l'amplitude maximale ($f = 70,54$ MHz). La zone de balayage est de $9\ \mu\text{m} \times 9\ \mu\text{m}$, avec une taille de pas de $200\ \text{nm}$.

a) Gauche : réponses en fréquence expérimentales des piliers espacés de $1,5\ \mu\text{m}$ de la paire dans la configuration à 45° . À droite : cartes de champ de déplacement hors plan sur la surface du pilier pour des fréquences d'excitation : $69,99$ MHz (i), $71,81$ MHz (ii) et $72,37$ MHz (iii). cartes de phase correspondantes sur le dessus des piliers. La zone de balayage est de $13\ \mu\text{m} \times 13\ \mu\text{m}$, avec une taille de pas de $200\ \text{nm}$. b Gauche : réponses en fréquence simulées de piliers espacés de $1,5\ \mu\text{m}$ de la paire dans la configuration à 45° , obtenues en pour l'amplitude maximale hors plan au sommet de chaque pilier. Cartes de déplacement correspondantes ($|uz|$ et $\arg(uz)$, respectivement) pour des fréquences de résonance: $75,25$ MHz (i), $78,40$ MHz (ii) et $79,65$ MHz (iii). Les dimensions des cartes sont $12\ \mu\text{m} \times 12\ \mu\text{m}$

D'autres études récentes rapportent des résonances des modes de piliers sur des substrats ou des membranes comme celles de Yabin Jin qui présentent les interactions entre les modes de flexion et de compression avec les ondes de surface d'un substrat semi infini [2] ou de Lamb d'une membrane de hauteur finie [3] (voir figure 2).

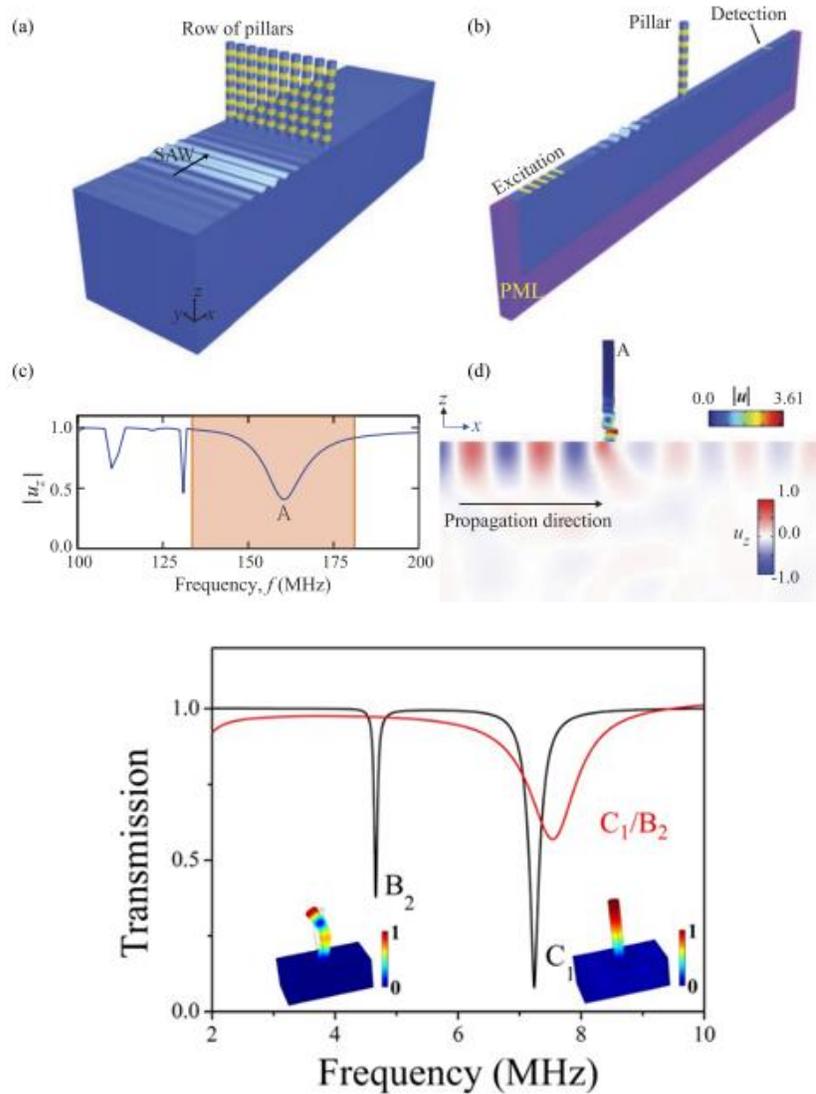


Figure 2 : (a) Transmission à travers une rangée de piliers phononiques. (b) Cellule unitaire utilisée pour la simulation. (c) Résultats de transmission : amplitude normalisée du déplacement hors plan u_z . La région colorée correspond à la bande interdite du pilier PMMA/Si. (d) Champ de déplacement total dans le pilier ainsi que le u_z composant dans le substrat de silicium pour SAW.

La transmission montre le premier ordre de compression C_1 et le second mode de flexion B_2 à différentes fréquences ($d = 50 \mu\text{m}$ – trait noir) ou à la même fréquence ($d = 112 \mu\text{m}$ – ligne rouge).

Références

- [1] Raguin, L.; Gaiffe, O.; Salut, R.; Cote, J.-M.; Soumann, V.; Laude, V.; Khelif, A.; Benchabane, S. Dipole States and Coherent Interaction in Surface-Acoustic-Wave Coupled Phononic Resonators. *Nature Communications* **2019**, *10* (1), 4583. <https://doi.org/10.1038/s41467-019-12492-z>.
- [2] Jin, Y.; Pennec, Y.; Bonello, B.; Honarvar, H.; Dobrzynski, L.; Djafari-Rouhani, B.; Hussein, M. I. Physics of Surface Vibrational Resonances: Pillared Phononic Crystals, Metamaterials, and Metasurfaces. *Rep. Prog. Phys.* **2021**, *84* (8), 086502. <https://doi.org/10.1088/1361-6633/abdab8>.
- [3] Wang, W.; Bonello, B.; Djafari-Rouhani, B.; Fang, X.; Pennec, Y.; Zhao, J.; Jin, Y. Active Control of the Transmission of Lamb Waves through an Elastic Metamaterial. *Journal of Applied Physics* **2020**, *128* (6), 065107. <https://doi.org/10.1063/5.0017526>.