

Cristaux, tenseurs, élasticité & piézoélectricité

PAR VINCENT LAUDE

Institut FEMTO-ST, département MN2S
équipe MINANO
« Micro-Instrumentation, NANosciences et Ondes »
32 avenue de l'Observatoire F-25044 Besançon

Email: `vincent.laude@femto-st.fr`

1 Description des cristaux

1.1 Propriétés

L'atténuation des ondes élastiques est d'autant plus petite que le milieu de propagation est ordonné :

- Dans l'air (les gaz), on est limité en pratique à qq 100 kHz ;
- Dans l'eau (les liquides), on est limité à 50 MHz environ ;
- Dans les cristaux on peut travailler jusqu'à qq GHz, voire plus. On utilise l'effet piézoélectrique pour générer les ondes élastiques à ces fréquences.

La structure des cristaux définit directement les propriétés d'anisotropie de propagation des ondes élastiques. On classe les cristaux suivant leur symétrie d'orientation. Cette symétrie microscopique se répercute sur les propriétés physiques macroscopiques.

Un cristal est homogène : le comportement d'échantillons de même orientation taillés dans un même cristal est identique.

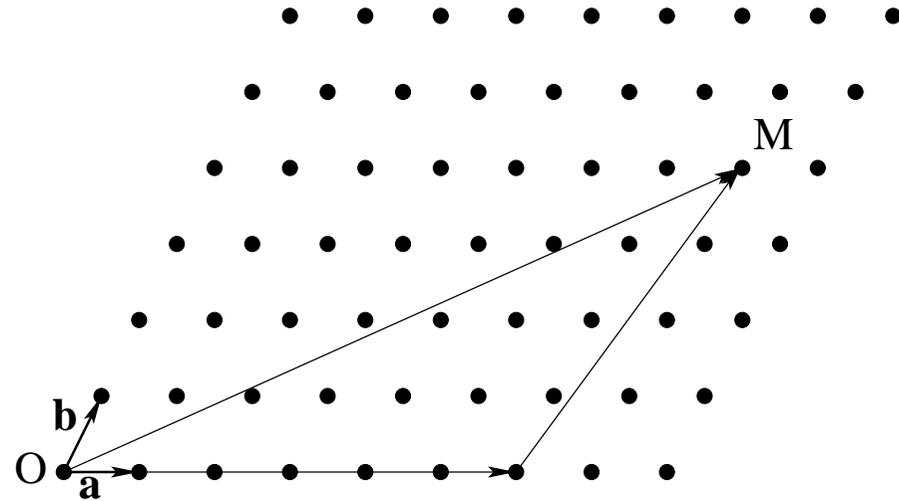
La notion de tenseur est le langage mathématique privilégié pour décrire les propriétés physiques et leurs relations avec les symétries.

1.2 Réseau cristallin

Il existe une infinité de **noeuds**, points homologues dans une translation élémentaire :

$\overrightarrow{OM} = m\mathbf{a} + n\mathbf{b} + p\mathbf{c}$ avec m, n, p entiers

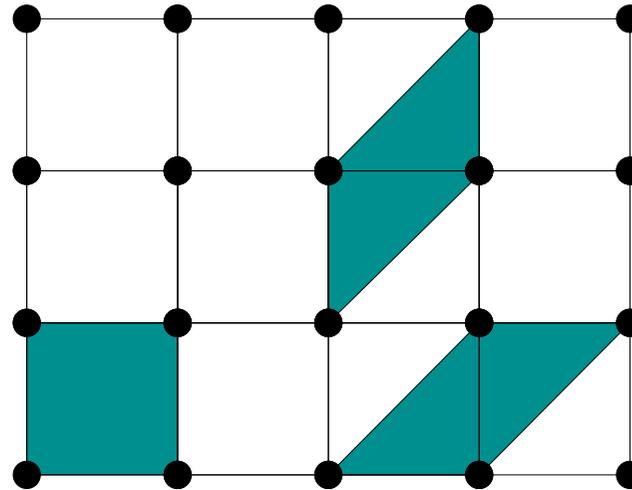
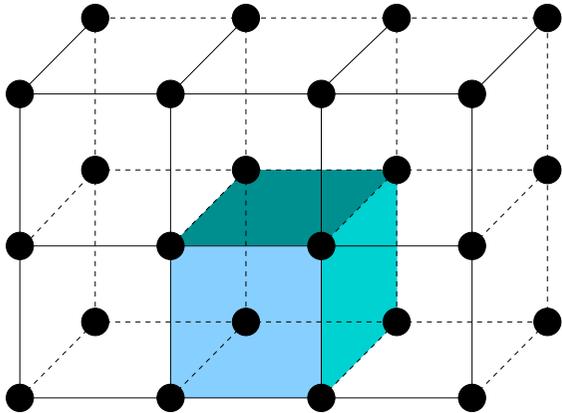
Tous les noeuds ont le même environnement atomique.



1.3 Mailles

Le réseau périodique peut être vu comme un empilement de **mailles**, des parallépipèdes dont les sommets sont des noeuds.

Une maille bâtie avec 3 vecteurs de base est simple (contient un seul noeud).

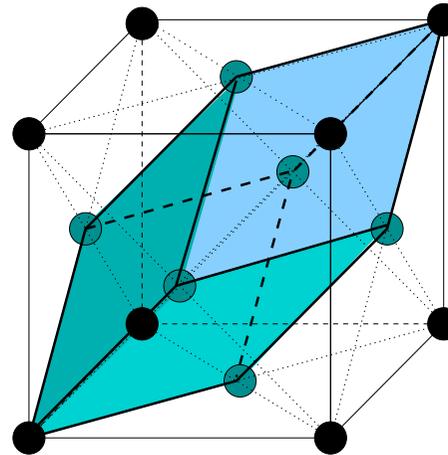


Réseau cubique à faces centrées :

un noeud additionnel au centre de chaque face du cube.

La maille cubique est quadruple.

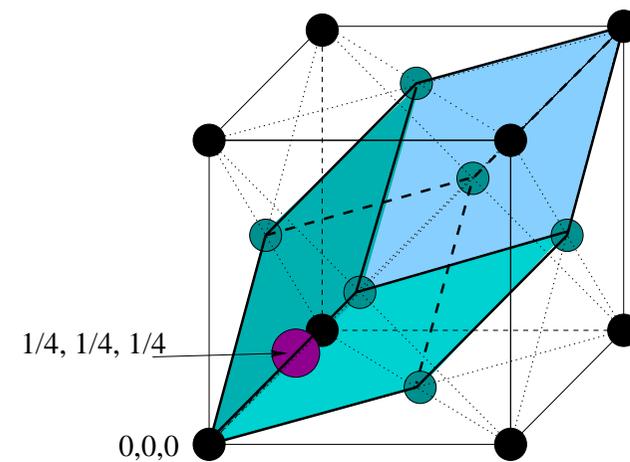
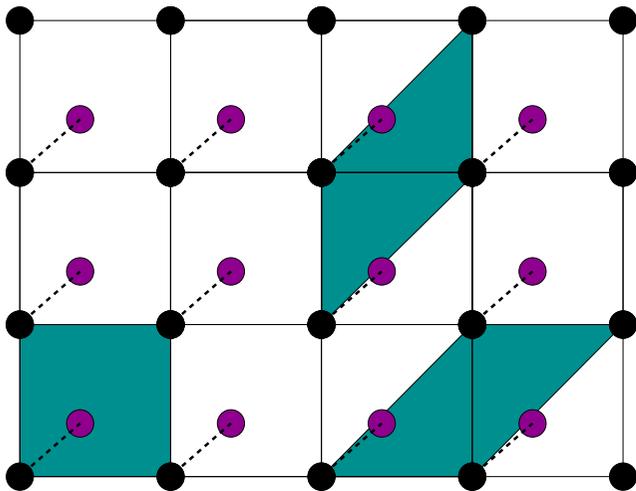
La maille simple est un rhomboèdre (polyèdre dont toutes les faces sont des losanges).



1.4 Motif

Un **motif** est une « grappe » d'atomes disposée aux noeuds du réseau périodique.

- Le motif peut être composé d'un seul atome
 - cubique à faces centrées : Cu, Ag, Al, Ni, Pt...
 - cubique centré : Li, Na, K, Cr...
- Le motif peut être composé d'atomes de même nature
 - structure diamant : réseau cfc + 1 atome en $1/4, 1/4, 1/4$ (Si, Ge...)
- Le motif peut être composé d'atomes différents (ZnS, AsGa)



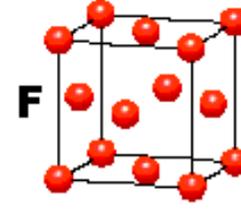
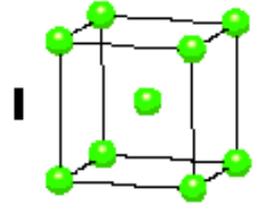
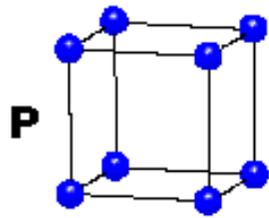
2 Symétrie d'orientation

2.1 Les 14 réseaux de Bravais

- Les 14 réseaux de Bravais sont les différentes manières de distribuer dans l'espace une infinité de noeuds ayant le même environnement.
- Il n'existe que 7 mailles simples, définissant 7 réseaux primitifs.
- Il est possible suivant le cas de définir en plus un réseau :
 - centré (I)
 - avec un noeud sur deux faces opposées (C)
 - à faces centrées (F)

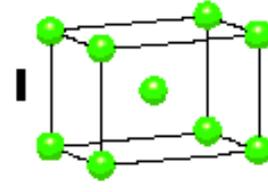
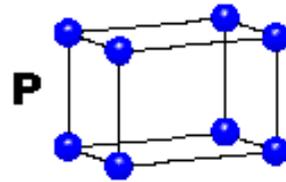
CUBIC

$$a = b = c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



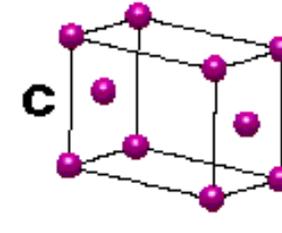
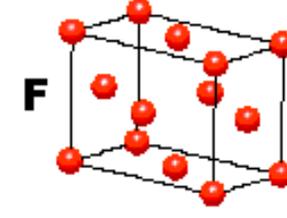
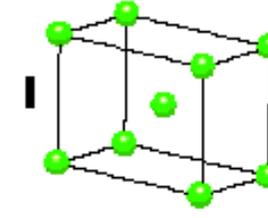
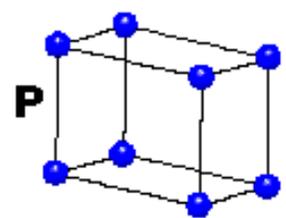
TETRAGONAL

$$a = b \neq c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



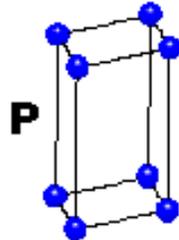
ORTHORHOMBIC

$$a \neq b \neq c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



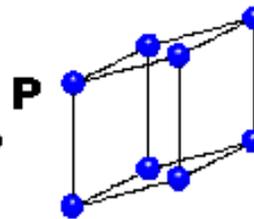
HEXAGONAL

$$a = b \neq c$$
$$\alpha = \beta = 90^\circ$$
$$\gamma = 120^\circ$$



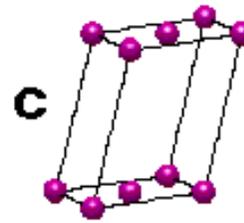
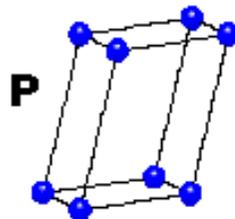
TRIGONAL

$$a = b = c$$
$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$



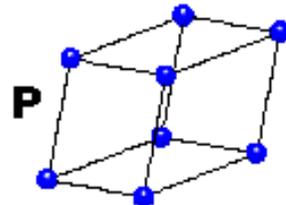
MONOCLINIC

$$a \neq b \neq c$$
$$\alpha = \gamma = 90^\circ$$
$$\beta \neq 120^\circ$$



TRICLINIC

$$a \neq b \neq c$$
$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



4 Types of Unit Cell

P = Primitive

I = Body-Centred

F = Face-Centred

C = Side-Centred

+

7 Crystal Classes

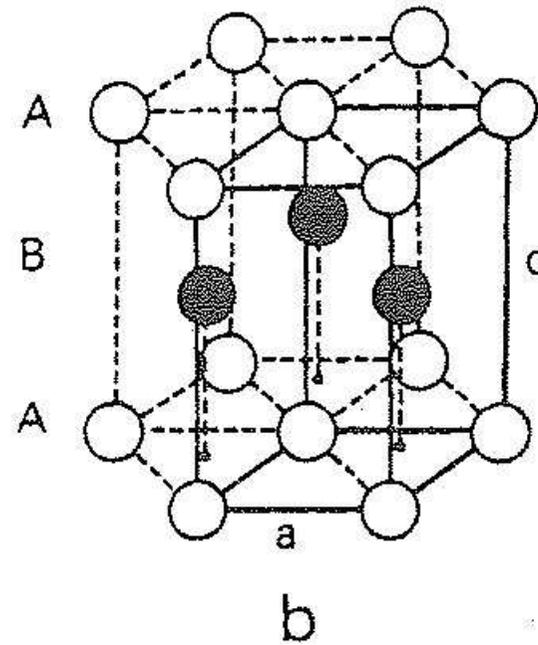
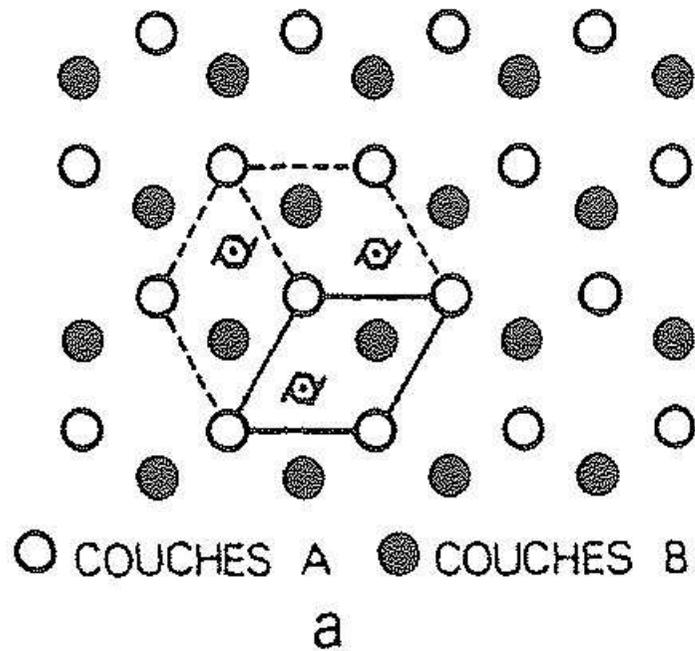
→ **14 Bravais Lattices**

2.2 Les 32 classes de symétrie ponctuelle des cristaux

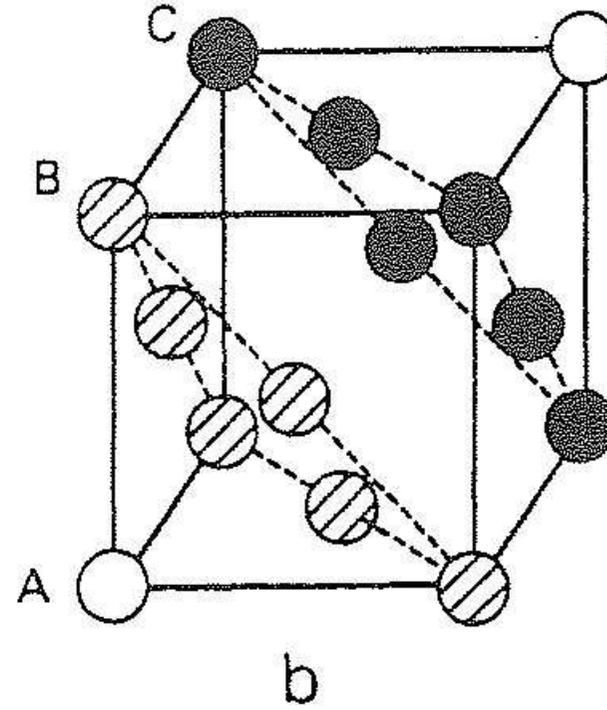
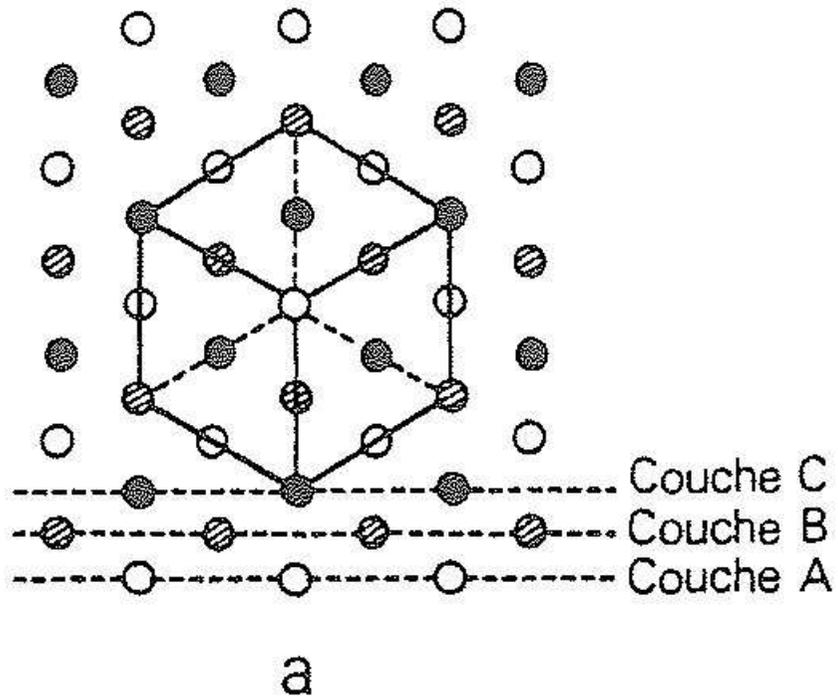
- L'adjonction du motif à chaque noeud du réseau diminue la symétrie du cristal.
- Un cristal ne présente pas nécessairement de centre de symétrie (cristaux piézoélectriques par exemple).
- Les 32 **classes de symétrie ponctuelle** des cristaux conditionnent l'anisotropie des constantes des matériaux (et donc l'anisotropie de la vitesse de propagation)

3 Exemples de structures

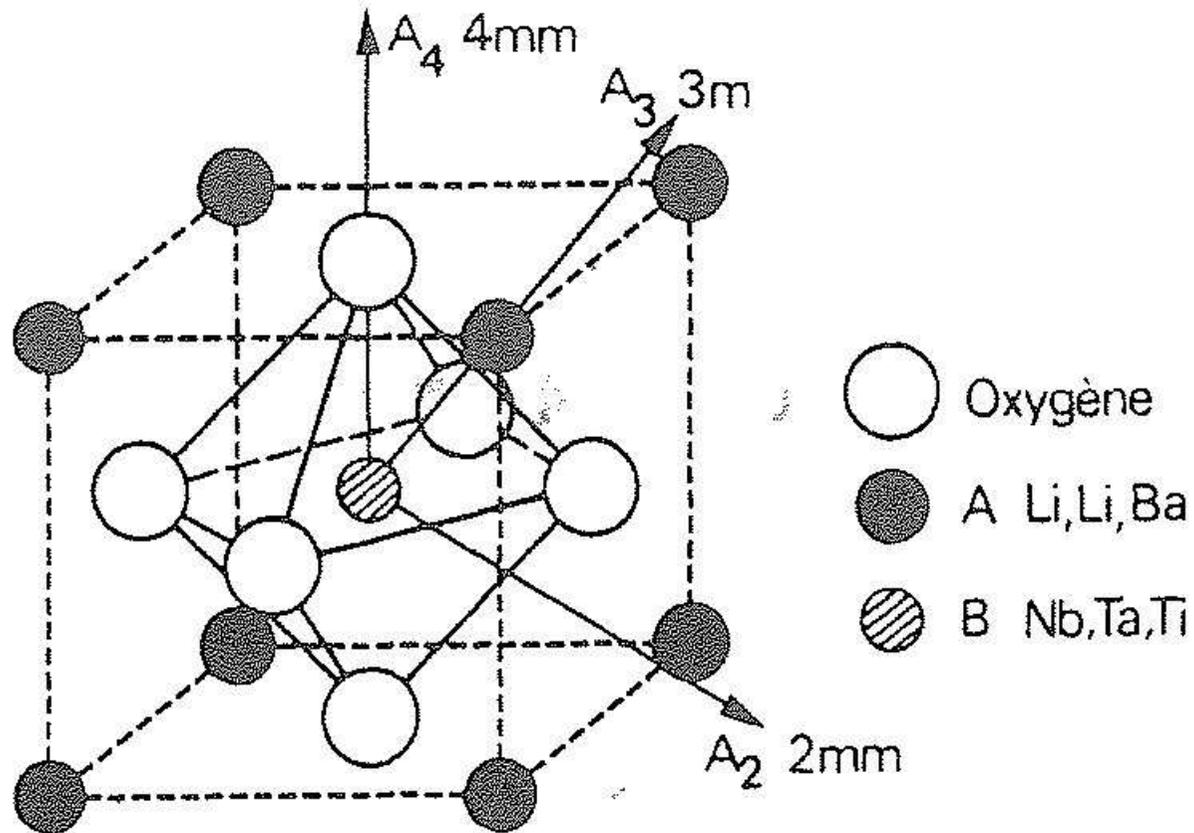
3.1 Structure hexagonale compacte



3.2 Structure cubique compacte (cfc)



3.4 LiNbO_3 et LiTaO_3 : système trigonal de symétrie $3m$



4 Introduction aux tenseurs

4.1 Relations linéaires dans un milieu anisotrope

Dans un cristal, une cause appliquée suivant une direction donne en général naissance à un effet orienté dans une autre direction. Par exemple, la relation entre induction et champ électrique est

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E} \text{ ou } \begin{pmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \end{pmatrix} \text{ ou } D_i = \varepsilon_{ij} E_j \quad (1)$$

Les deux premières notations utilisent les vecteurs et matrices. La dernière expression est typiquement tensorielle et utilise la convention de la sommation sur les indices répétés (ou convention d'Einstein).

D_i et E_j sont des tenseurs de rang 1 ; ε_{ij} est un tenseur de rang 2.

La donnée des composantes du tenseur ne suffit pas à le déterminer, il faut de plus imposer sa transformation dans un changement d'axes de référence : on ne change pas la signification physique en faisant tourner les axes, seulement la représentation du tenseur.

4.2 Matrice de changement d'axes de référence

Soient $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ et $\mathbf{e}'_1, \mathbf{e}'_2, \mathbf{e}'_3$ deux systèmes d'axes de référence. Les composantes du nouveau système d'axes dans l'ancien sont contenues dans une matrice α telle que (une matrice, pas un tenseur !)

$$\mathbf{e}'_i = \alpha_i^k \mathbf{e}_k \text{ avec } \alpha = \begin{pmatrix} \alpha_1^1 & \alpha_1^2 & \alpha_1^3 \\ \alpha_2^1 & \alpha_2^2 & \alpha_2^3 \\ \alpha_3^1 & \alpha_3^2 & \alpha_3^3 \end{pmatrix} \quad (2)$$

Inversement $\mathbf{e}_k = \beta_k^j \mathbf{e}'_j$ avec $\alpha_i^k \beta_k^j = \delta_{ij}$ avec δ_{ij} le symbole de Kronecker. Si les repères sont orthonormés alors $\beta = \alpha^T$ (T : transposition).

Les coordonnées d'un vecteur obéissent à la loi de transformation :

$$x'_i = \beta_k^i x_k \text{ avec } \mathbf{x} = x_k \mathbf{e}_k = x'_i \mathbf{e}'_i \quad (3)$$

Dans le cas où les repères sont orthonormés, les coordonnées d'un vecteur obéissent à la même équation de transformation que les vecteurs de base : $x'_i = \alpha_i^k x_k$.

4.3 Définition d'un tenseur

- Une grandeur physique scalaire (température, énergie, etc.) est invariante du repère choisi : $f(x_1, x_2, x_3) = f(x'_1, x'_2, x'_3)$; c'est un tenseur d'ordre 0.
- Un tenseur de rang 1 (ou vecteur) se transforme dans un changement d'axes comme les vecteurs de base, soit

$$A'_i = \alpha_i^k A_k \quad (4)$$

- Un tenseur de rang 2, ensemble de 9 grandeurs A_{ij} se transforme suivant la loi

$$A'_{ij} = \alpha_i^k \alpha_j^l A_{kl} \quad (5)$$

- La définition s'étend sans problème à un rang quelconque, par exemple 3 :

$$A'_{ijk} = \alpha_i^l \alpha_j^p \alpha_k^q A_{lpq} \quad (6)$$

- Le gradient d'un vecteur, $\partial A_i / \partial x_k$, est un tenseur d'ordre 2.
- La trace A_{ii} d'un tenseur d'ordre 2 A_{ij} est un tenseur d'ordre 0.
- La relation linéaire entre deux tenseurs est un tenseur. Par exemple $D_i = \varepsilon_{ij} E_j$ implique que ε_{ij} est un tenseur de rang 2.

5 Elasticité

5.1 Déformations

Soit un point \boldsymbol{x} de coordonnées x_1, x_2, x_3 . Les déplacements \boldsymbol{u} sont fonction de \boldsymbol{x} , donc $u_i(x_j + dx_j) = u_i(x_j) + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} dx_j$ au premier ordre. $\frac{\partial u_i}{\partial x_j}$, le gradient des déplacements, est un tenseur d'ordre 2.

On sépare ce gradient en partie symétrique (**tenseur des déformations** S_{ij}) et antisymétrique selon

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_j} = S_{ij} + \Omega_{ij} \text{ avec } S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \text{ et } \Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (7)$$

Seule la partie symétrique du gradient des déplacement mesure une déformation locale du réseau. La partie antisymétrique mesure les rotations locales.

La dilatation (variation locale du volume) est $S_{ii} = S_{11} + S_{22} + S_{33} = \nabla \cdot \boldsymbol{u}$, soit la trace du tenseur des déformations.

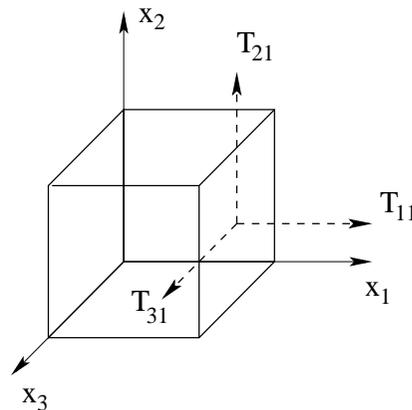
Les termes diagonaux S_{11}, S_{22}, S_{33} correspondent à des mouvements longitudinaux, les termes $S_{ij}, i \neq j$ à des mouvements de cisaillement.

5.2 Contraintes

A la différence d'un fluide, les efforts de cisaillement se transmettent à travers une surface. Trois forces indépendantes peuvent d'exercer sur une surface : une contrainte de traction-compression et deux contraintes de cisaillement.

Sur la face orthogonale à x_1 d'un cube élémentaire, la force par unité de surface ou tension mécanique est $T_{11} + T_{21} + T_{31}$ (et des formules similaires pour les faces orthogonales à x_2 et x_3).

T_{ij} est un tenseur de rang 2 symétrique, le tenseur des contraintes. Pour une surface élémentaire de vecteur normal \mathbf{l} , la tension mécanique est $T_{ik} l_k$.



L'équation de la dynamique s'écrit (avec f_i les forces internes)

$$\frac{\partial T_{ik}}{\partial x_k} + f_i = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} \quad (8)$$

5.3 Loi de Hooke

L'expérience montre que le comportement élastique de la plupart des solides dans le cas de petites déformations obéit à la [loi de Hooke](#) :

$$T_{ij} = c_{ijkl} S_{kl} \quad (9)$$

c'est-à-dire que les contraintes sont une fonction linéaire des déformations.

c_{ijkl} est le tenseur des rigidités, de rang 4. Il a donc a priori $3^4 = 81$ composantes. Mais la symétrie de T_{ij} et S_{kl} impose que

$$c_{jikl} = c_{ijkl} \text{ et } c_{ijlk} = c_{ijkl} \quad (10)$$

Il n'y a donc que 36 composantes indépendantes au plus.

En définitive, le nombre de composantes indépendantes est fonction du système de symétrie du réseau du cristal considéré.

5.4 Notation contractée (ou matricielle)

Du fait des relations de symétries (10) on note

$$(11) \longleftrightarrow 1 ; (22) \longleftrightarrow 2 ; (33) \longleftrightarrow 3$$

$$(23) = (32) \longleftrightarrow 4 ; (31) = (13) \longleftrightarrow 5 ; (12) = (21) \longleftrightarrow 6 \quad (11)$$

$$T_{ij} = T_I ; c_{ijkl} = c_{IJ} ; T_I = c_{IJ} S_J$$

$$S_1 = S_{11} ; S_2 = S_{22} ; S_3 = S_{33} ; S_4 = 2S_{23} ; S_5 = 2S_{31} ; S_6 = 2S_{12} \quad (12)$$

Matériaux	Classe	Rigidités (10^{10} N/m ²)					ρ (10^3 kg/m ³)	
cub. ou isotrope		c_{11}	c_{12}	c_{44}				
AsGa	$\bar{4}3m$	11.88	5.38	2.83			5.307	
SiO ₂	isotrope	7.85	1.61	3.12			2.203	
Si	$m\bar{3}m$	16.56	6.39	7.95			2.329	
hexagonal		c_{11}	c_{12}	c_{13}	c_{33}	c_{44}		
PZT-4	trans. iso.	13.9	7.8	7.4	11.5	2.6	7.5	
ZnO	$6mm$	21.0	12.1	10.5	21.1	4.2	5.676	
trigonal		c_{11}	c_{12}	c_{13}	c_{33}	c_{44}	c_{14}	
Al ₂ O ₃	$\bar{3}m$	49.7	16.3	11.1	49.8	14.7	-2.3	3.986
LiNbO ₃	$3m$	20.3	5.3	7.5	24.5	6.0	0.9	4.7
quartz α (SiO ₂)	32	8.7	0.7	1.2	10.7	5.8	-1.8	2.648

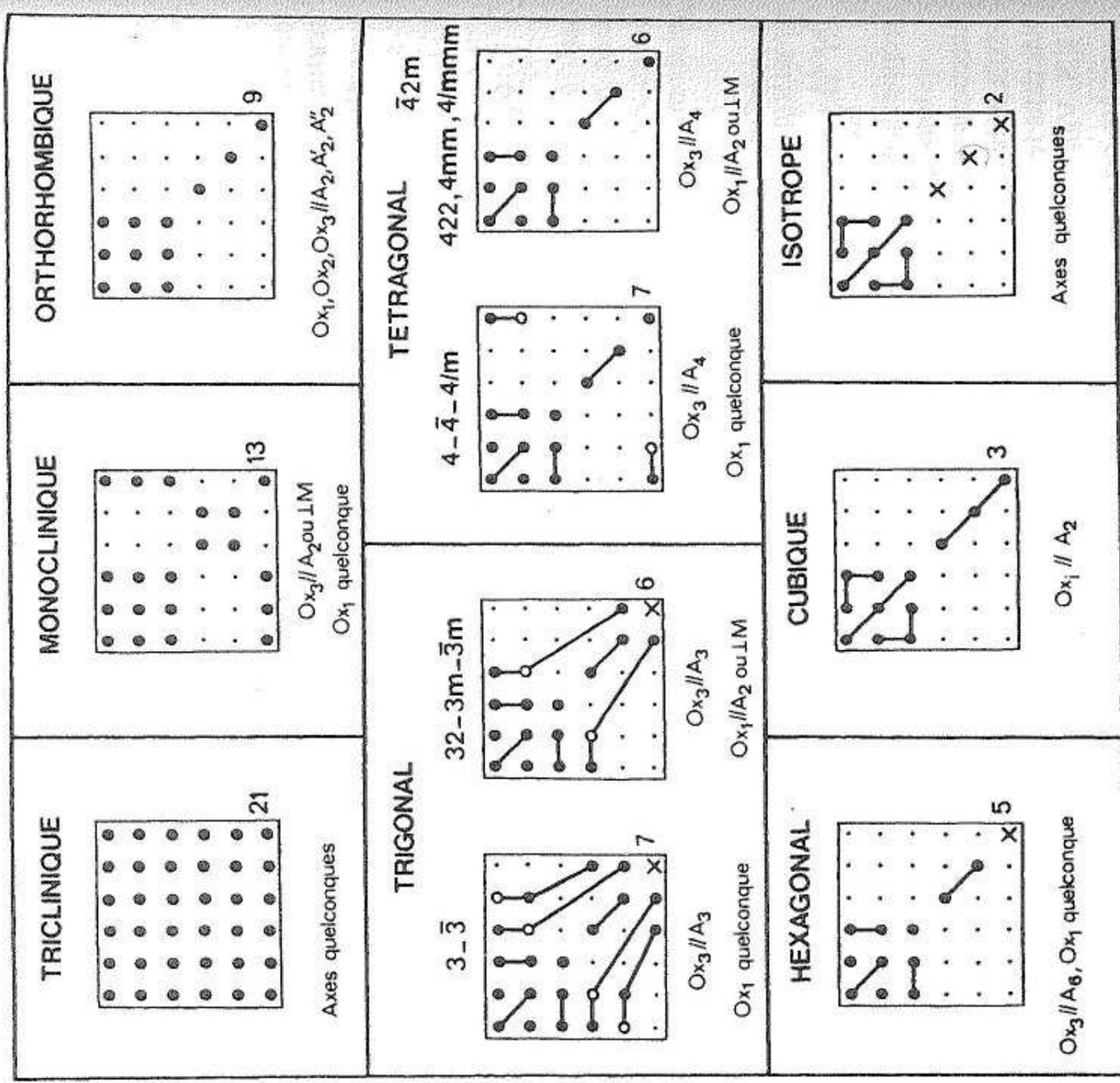


FIG. 3. 9. Composantes $c_{\alpha\beta}$ du tenseurs des rigidités élastiques suivant les systèmes de symétrie avec les axes de référence de la figure 2. 22.

- composante - non nulle: ● ○ - nulle: •
- composantes - égales: ●—● - opposées: ●—○
- égales à $(c_{11} - c_{12})/2$: X

La symétrie par rapport à la diagonale principale n'est pas mentionnée. Le nombre de composantes indépendantes est indiqué, en bas, à droite de chaque ensemble.

6 Piézoélectricité

6.1 Origine physique de la piézoélectricité

Effet piézoélectrique direct : sous l'action d'une contrainte ou d'une déformation, une polarisation électrique apparaît (c'est-à-dire une déformation non symétrique de la maille cristalline et/ou du nuage électronique).

Effet piézoélectrique inverse (ou effet Lippman) : un champ électrique appliqué provoque une déformation de la maille cristalline ou une contrainte.

L'effet piézoélectrique n'apparaît que pour les structures cristallines non centrosymétriques.

6.2 Relations constitutives

On considérant uniquement le régime linéaire, on peut poser

$$T_{ij} = c_{ijkl} S_{kl} - e_{kij} E_k \quad (13)$$

$$D_i = e_{ikl} S_{kl} + \varepsilon_{ij} E_j \quad (14)$$

ou en notation contractée pour la partie mécanique

$$T_I = c_{IJ} S_J - e_{kI} E_k \quad (15)$$

$$D_i = e_{iJ} S_J + \varepsilon_{ij} E_j \quad (16)$$

Le tenseur $\varepsilon_{ikl} = \varepsilon_{iJ}$ est symétrique par rapport à ses deux derniers indices.

6.3 Approximation quasi-statique

Du fait du couplage piézoélectrique, une onde électromagnétique accompagne l'onde élastique. Les équations de Maxwell dans un milieu diélectrique (isolant) sont :

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} ; \nabla \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} ; \nabla \cdot \mathbf{D} = 0 ; \nabla \cdot \mathbf{H} = 0 ; \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} \quad (17)$$

Les fréquences mises en jeu sont très petites devant celles des ondes optiques, de sorte que les dérivées temporelles sont très petites :

$$\nabla \times \mathbf{E} = -i\omega \mathbf{B} \simeq 0 \text{ et } \nabla \times \mathbf{H} = i\omega \mathbf{D} \simeq 0$$

Cette hypothèse découple les champ électriques et magnétiques. Enfin, le champ électrique étant irrotationnel il dérive d'un potentiel scalaire ϕ selon $\mathbf{E} = -\nabla \phi$. Les équations constitutives deviennent

$$T_I = c_{IJ} S_J + e_{kI} \phi_{,k} \quad (18)$$

$$D_i = e_{iJ} S_J - \varepsilon_{ij} \phi_{,j} \quad (19)$$

6.4 Représentation matricielle des relations constitutives

On regroupe les tenseurs des équations (15-16) en un tableau de constantes :

c_{11}	c_{12}	e_{11}	e_{21}	e_{31}
c_{12}	c_{22}	e_{12}	.	.
.
.
c_{16}	c_{66}	e_{16}	.	e_{36}
e_{11}	e_{12}	.	.	.	e_{16}	ε_{11}	ε_{12}	ε_{13}
e_{21}	ε_{12}	.	.
e_{31}	e_{36}	ε_{13}	.	ε_{33}

Cette représentation est commode pour repérer les couplages possibles suivant la symétrie cristalline, mais également pour représenter les données « constantes des matériaux » dans un programme de simulation numérique.

MATÉRIAUX	CLASSE	CONSTANTES PIÉZOÉLECTRIQUES (C/m ²)						PERMITTIVITÉS (10 ⁻¹¹ F/m)				
		e_{14}						ϵ^S				
<i>Système cubique</i>												
Arséniure de gallium (AsGa)	43m	-0,16						9,73				
Oxyde de bismuth et de germanium (Bi ₁₂ GeO ₂₀)	23	0,99						34,2				
<i>Système hexagonal</i>		e_{15}	e_{31}	e_{33}				ϵ_{11}^S	ϵ_{33}^S			
Céramique PZT-4	trans.	12,7	-5,2	15,1				650	560			
Oxyde de zinc (ZnO)	isotrope 6mm	-0,59	-0,61	1,14				7,38	7,83			
Sulfure de cadmium (CdS)	6mm	-0,21	-0,24	0,44				7,99	8,44			
<i>Système tétragonal</i>		e_{14}	e_{15}	e_{31}	e_{33}				ϵ_{11}^S	ϵ_{33}^S		
Paratellurite (TeO ₂)	422	0,22	0	0	0				20	22		
Titanate de baryum (BaTiO ₃)	4mm	0	21,3	-2,65	3,64				1 744	97		
<i>Système trigonal</i>		e_{11}	e_{14}	e_{15}	e_{22}	e_{31}	e_{33}	ϵ_{11}^S	ϵ_{33}^S			
Niobate de lithium (LiNbO ₃)	3m	0	0	3,7	2,5	0,2	1,3	38,9	25,7			
Tantalate de lithium (LiTaO ₃)	3m	0	0	2,6	1,6	≈0	1,9	36,3	38,1			
Quartz (SiO ₂)	32	0,171	-0,0406	0	0	0	0	3,92	4,10			
<i>Système orthorhombique</i>		e_{15}	e_{24}	e_{31}	e_{32}	e_{33}				ϵ_{11}^S	ϵ_{22}^S	ϵ_{33}^S
Niobate de baryum et de sodium (Ba ₂ NaNb ₅ O ₁₅) ...	2mm	2,8	3,4	-0,4	-0,3	4,3				196	201	28

6.5 Conditions aux limites

Conditions aux limites mécaniques

- Pour deux solides rigidement liés, le déplacement est continu en tout point de la frontière Σ entre deux milieux M et M' : $u_i = u'_i$. De même, la tension mécanique est continue : $T_{ij}l_j = T'_{ij}l_j$ avec l_j la normale à Σ .
- Sur une **surface libre**, les déplacements sont non spécifiés et $T_{ij}l_j = 0$.
- Sur une **surface bloquée**, les contraintes sont non spécifiées et $u_i = 0$.

Conditions aux limites électriques

Dans l'approximation quasi-statique, elles relèvent de l'électrostatique.

- A une interface Σ , $\phi = \phi'$ et $E_t = E'_t$ (le potentiel et la partie tangentielle de \mathbf{E} sont continus).
- Si la surface est chargée (interface diélectrique-métal par exemple) alors $(D'_i - D_i)l_i = \sigma$ (σ : densité superficielle de charge). Entre deux diélectriques, la composante normale de \mathbf{D} est continue.
- Si la surface est en court-circuit (par l'intermédiaire d'un film métallique mis à la masse par exemple) alors $\phi = 0$.

6.6 Théorème de Poynting et bilan énergétique

En exprimant le travail des forces mécaniques et des forces électriques on obtient le théorème de Poynting pour les milieux piézoélectriques sous la forme :

$$\frac{dW}{dt} = \frac{d}{dt}(E_c + E_p) + \int_{\Sigma} P_j l_j ds \quad (20)$$

avec

- l'énergie cinétique $E_c = \int e_c dV$ et $e_c = \frac{1}{2} \rho v_i^2$
- l'énergie potentielle $E_p = \int e_p dV$ et $e_p = \frac{1}{2} (S_{ij} T_{ij} + E_k D_k)$
- le vecteur de Poynting $P_j = -T_{ij} v_i + (\mathbf{E} \times \mathbf{H})_j$

Comme dans le cas des fluides, le théorème de Poynting exprime que le travail fourni par les sources internes au volume V est partiellement emmagasiné sous forme d'énergie cinétique et potentielle et partiellement rayonnée à travers la frontière Σ . Le flux du vecteur de Poynting représente cette puissance rayonnée.