

Ondes planes dans les solides

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`

Toile: `http://members.femto-st.fr/vincent-laude/`

1 Rappels sur les problèmes aux valeurs propres

Soit une matrice carrée M_{ij} de dimension $n \times n$, à valeurs réelles ou complexes. Une équation aux valeurs propres λ et aux vecteurs propres u_i est de la forme

$$M_{ij} u_j = \lambda u_i \quad (1)$$

Les valeurs propres sont racines du polynôme caractéristique : $|M_{ij} - \lambda \delta_{ij}| = 0$.

Il y a exactement n valeurs propres $\lambda^{(k)}$ et au plus n vecteurs propres $u_i^{(k)}$ (a priori complexes). Les vecteurs propres sont non nuls et normalisables ($u_i^{(k)} u_i^{(k)} = 1$) ; on les range dans une matrice $X_{ik} = u_i^{(k)}$ de sorte que (1) devient

$$M_{ij} X_{jk} = X_{ij} \Lambda_{jk} \text{ avec } \Lambda_{jk} = \lambda^{(k)} \delta_{jk} \quad (2)$$

Si X est inversible, alors $M = X \Lambda X^{-1}$.

Si M est réelle symétrique, les valeurs propres sont réelles et les vecteurs propres orthogonaux : $X^{-1} = X^T$.

En pratique, il existe des algorithmes très performants pour déterminer valeurs et vecteurs propres.

2 Solide anisotrope non piézoélectrique

2.1 Equation de Christoffel

On néglige la pesanteur dans la relation fondamentale de la dynamique, $\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j}$. Avec la loi de Hooke, $T_{ij} = c_{ijkl} \frac{\partial u_l}{\partial x_k}$, on a l'équation d'onde anisotrope :

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_j \partial x_k} \quad (3)$$

Pour les ondes planes harmoniques de la forme $u_i(t, \mathbf{r}) = \hat{u}_i \exp(i\omega(t - s\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}))$, on obtient l'équation de Christoffel

$$\rho \hat{u}_i = s^2 c_{ijkl} n_j n_k \hat{u}_l \quad (4)$$

La lenteur $s(\mathbf{n}) = k(\mathbf{n}) / \omega$ (en s/m) est une fonction de la direction repérée par le vecteur unitaire \mathbf{n} . Une quantité du type $\sqrt{c/\rho}$ est homogène à une vitesse.

En introduisant le tenseur symétrique de Christoffel, $\Gamma_{il} = c_{ijkl} n_j n_k$, on obtient le problème aux valeurs propres :

$$\rho \hat{u}_i = s^2 \Gamma_{il} \hat{u}_l \quad (5)$$

Attention : Γ_{il} dépend de la direction \mathbf{n} .

2.2 Cas isotrope

Dans le cas isotrope, les propriétés des ondes sont invariantes avec la direction de propagation. Prenons par exemple x_1 pour direction de propagation :

$$\Gamma = \begin{pmatrix} c_{11} & 0 & 0 \\ 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & c_{44} \end{pmatrix} \text{ avec } c_{44} = \frac{c_{11} - c_{12}}{2} \quad (6)$$

La matrice est diagonale ; elle possède une valeur propre simple et une valeur propre double.

- L'onde de vitesse $V_L = \sqrt{c_{11}/\rho}$ est une onde de **polarisation longitudinale**, puisque de vecteur propre $\hat{u} = (1, 0, 0)^T$.
- Les ondes de vitesse $V_S = \sqrt{c_{44}/\rho}$ sont de **polarisation transverse** : deux vecteurs propres sont $\hat{u} = (0, 1, 0)^T$ et $\hat{u} = (0, 0, 1)^T$.
- Puisque $c_{12} > 0$, $V_S < V_L / \sqrt{2}$. La vitesse longitudinale est toujours plus grande que la vitesse transverse.
- Les propriétés précédentes sont vraies pour toute solution de l'équation d'onde (pour le voir, considérer le spectre d'ondes planes).

2.3 Exemples pour un cristal cubique

En considérant la forme du tenseur élastique des cristaux cubiques :

$$\Gamma = \begin{pmatrix} c_{11} n_1^2 + c_{44}(n_2^2 + n_3^2) & (c_{12} + c_{44}) n_1 n_2 & (c_{12} + c_{44}) n_1 n_3 \\ \cdot & c_{11} n_2^2 + c_{44}(n_1^2 + n_3^2) & (c_{12} + c_{44}) n_2 n_3 \\ \cdot & \cdot & c_{11} n_3^2 + c_{44}(n_1^2 + n_2^2) \end{pmatrix}$$

Propagation suivant $[1,0,0]$ – Γ est diagonale, avec une valeur propre simple, c_{11} , et une valeur propre double, c_{44} . Il existe une onde longitudinale de vitesse $\sqrt{c_{11}/\rho}$ et deux ondes transversales (de cisaillement ou shear) de vitesse $\sqrt{c_{44}/\rho}$.

Propagation suivant $[1,1,0]$ – On obtient 3 valeurs propres distinctes : c_{44} , $\frac{1}{2}(c_{11} - c_{12})$ et $\frac{1}{2}(c_{11} + c_{12}) + c_{44}$. Il existe une onde purement transversale polarisée suivant x_3 , de vitesse $\sqrt{c_{44}/\rho}$; une onde quasi-transversale de vitesse $\sqrt{(c_{11} - c_{12})/2\rho}$; une onde quasi-longitudinale de vitesse $\sqrt{(2c_{44} + c_{11} + c_{12})/2\rho}$.

2.4 Lenteur, vitesse de phase et vitesse d'énergie

Pour les ondes planes harmoniques :

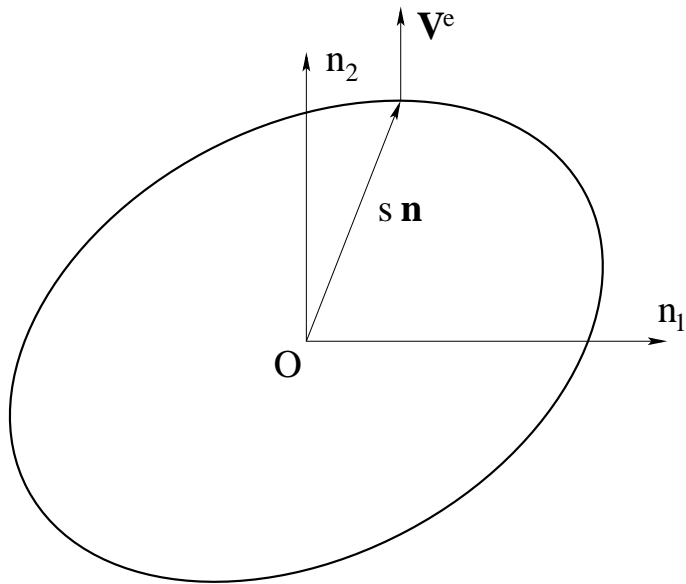
- La densité d'énergie cinétique est $e_c = \frac{1}{2} \rho \omega^2 \hat{u}_i \hat{u}_i$.
- La densité d'énergie potentielle est $e_p = \frac{1}{2} c_{ijkl} S_{ij} S_{kl} = \frac{1}{2} \omega^2 s^2 \Gamma_{il} \hat{u}_i \hat{u}_l$.
Avec l'équation de Cristoffel, on voit que $e_p = e_c$: les énergies cinétique et potentielle sont égales pour les ondes planes.
- La densité d'énergie totale est donc : $e = e_c + e_p = \rho \omega^2 \hat{u}_i \hat{u}_i$.
- Le vecteur de Poynting est
$$P_i = -T_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial t} = -c_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \frac{\partial u_j}{\partial t} = s \omega^2 c_{ijkl} \hat{u}_j \hat{u}_k n_l$$
- La vitesse d'énergie est par définition $V_i^e = P_i / e$
Une relation importante liant vitesse de phase et vitesse d'énergie est $V_i^e n_i = v$.
- On peut montrer l'égalité de la vitesse d'énergie et de la vitesse de groupe spatiale.

3 Surfaces caractéristiques

3.1 Surface des lenteurs

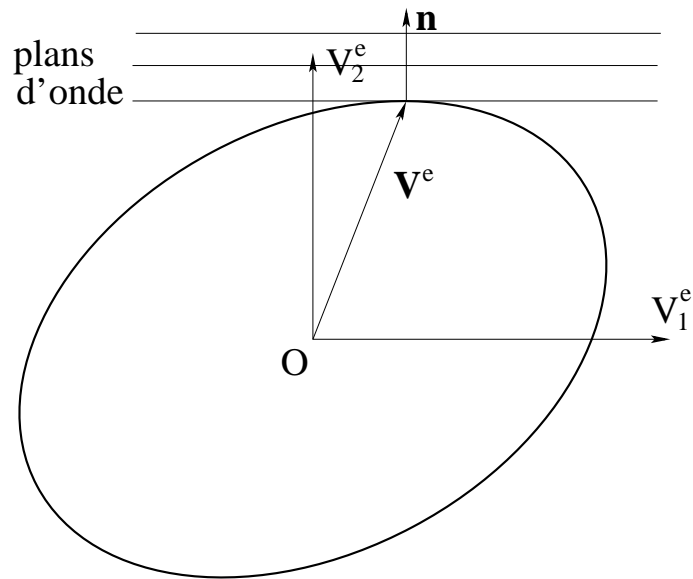
Par définition, la surface des lenteurs est le lieu du vecteur $\mathbf{s} = s\mathbf{n}$ en fonction de \mathbf{n} (c'est une représentation spatiale de la relation de dispersion $\mathbf{k}(\omega, \mathbf{n}) / \omega$). La vitesse d'énergie (ou vitesse de groupe spatiale) est normale à cette surface.

Il existe toujours trois surfaces des lenteurs : une quasi-L et deux quasi-S. Elles sont symétriques par rapport à l'origine.

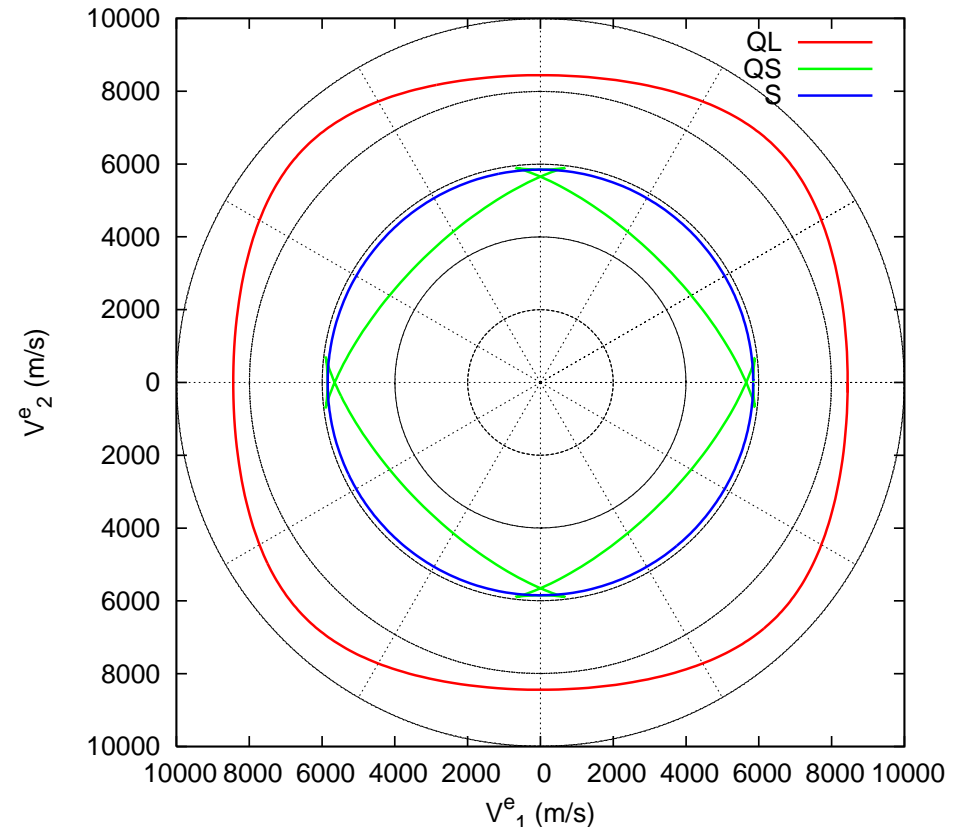
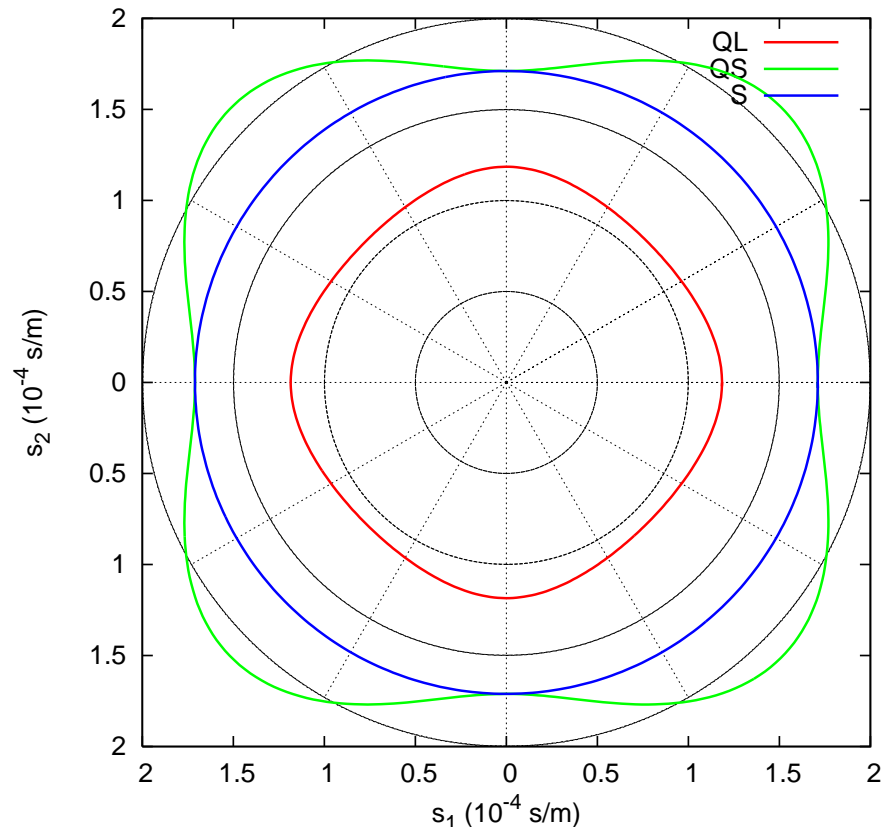


3.2 Surface d'onde

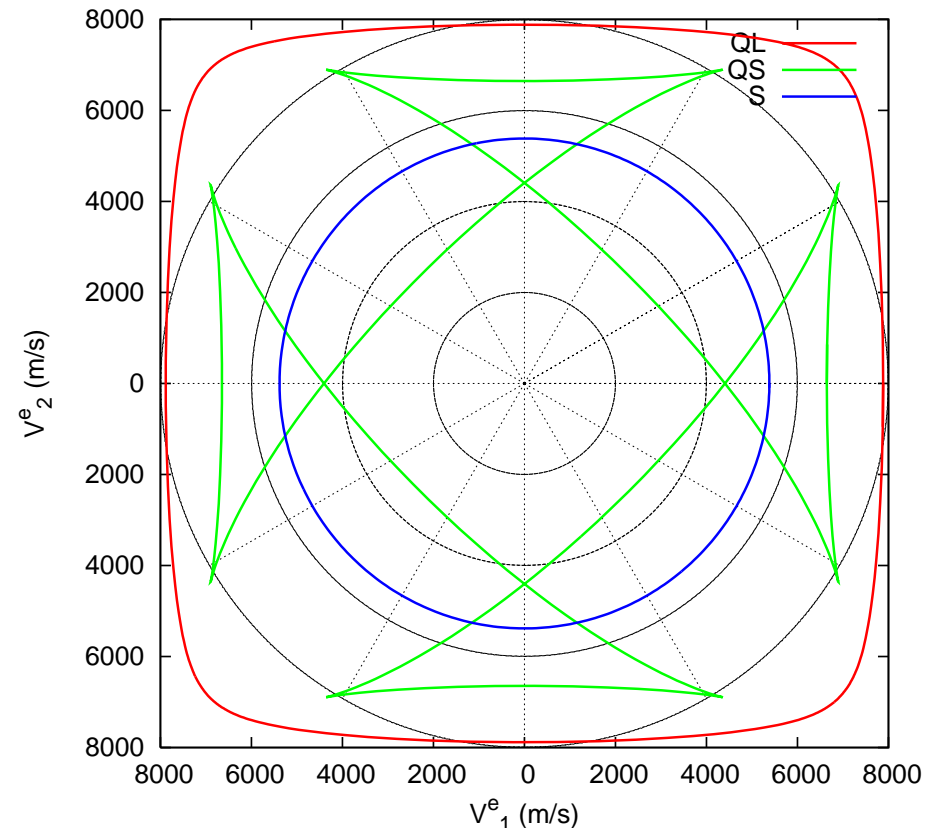
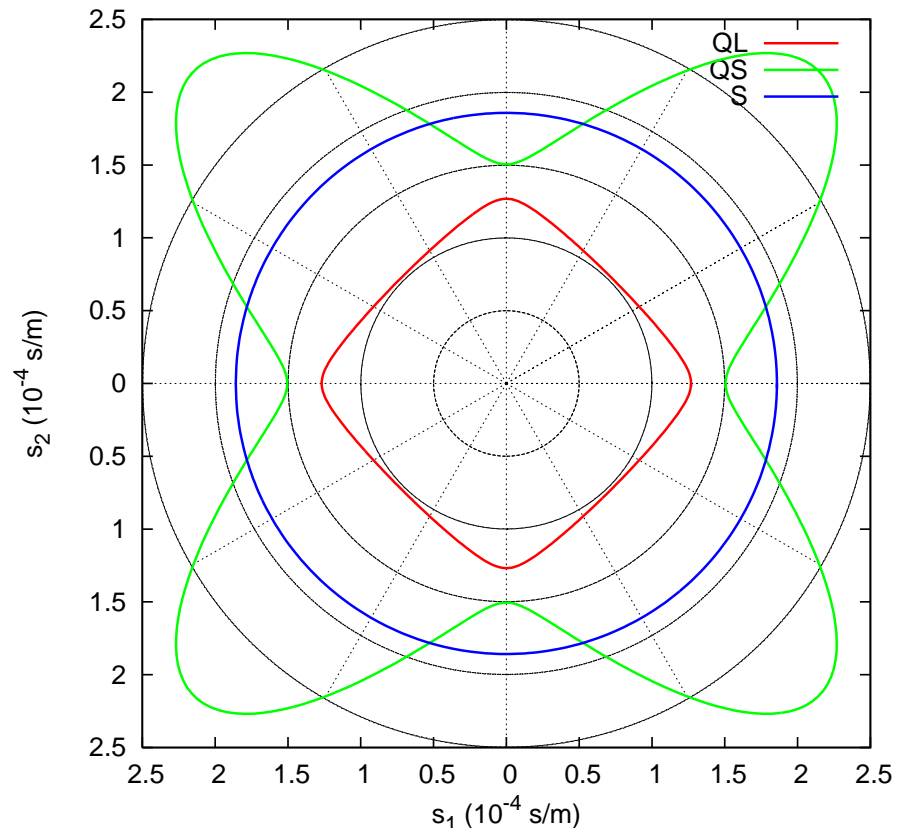
Par définition, la surface d'onde est le lieu du vecteur vitesse d'énergie \mathbf{V}^e en fonction de \mathbf{n} . C'est la surface atteinte au bout d'un temps unitaire par l'onde issue d'un point source à la fréquence ω (notion liée à la fonction de Green) ; c'est aussi une surface équi-phase. \mathbf{n} est normal à la surface d'onde ; les plans d'onde lui sont tangents.



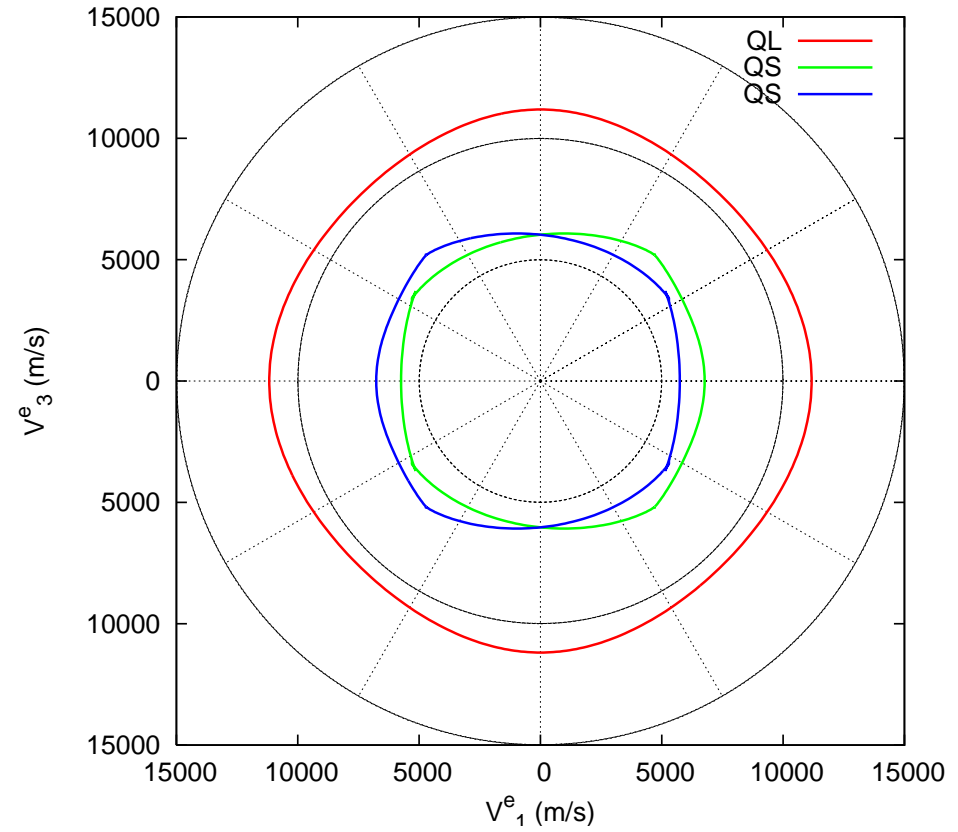
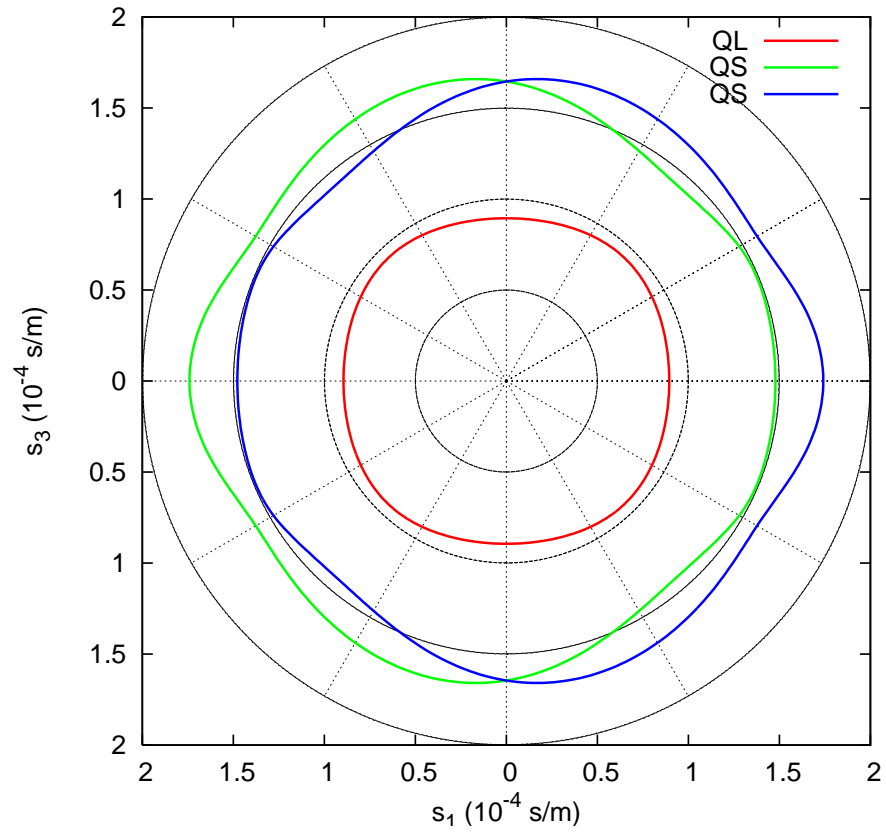
3.3 Exemple : silicium (Si, cubique m3m)



3.4 Exemple : rutile (TiO_2 , tétragonal $4/mmm$)

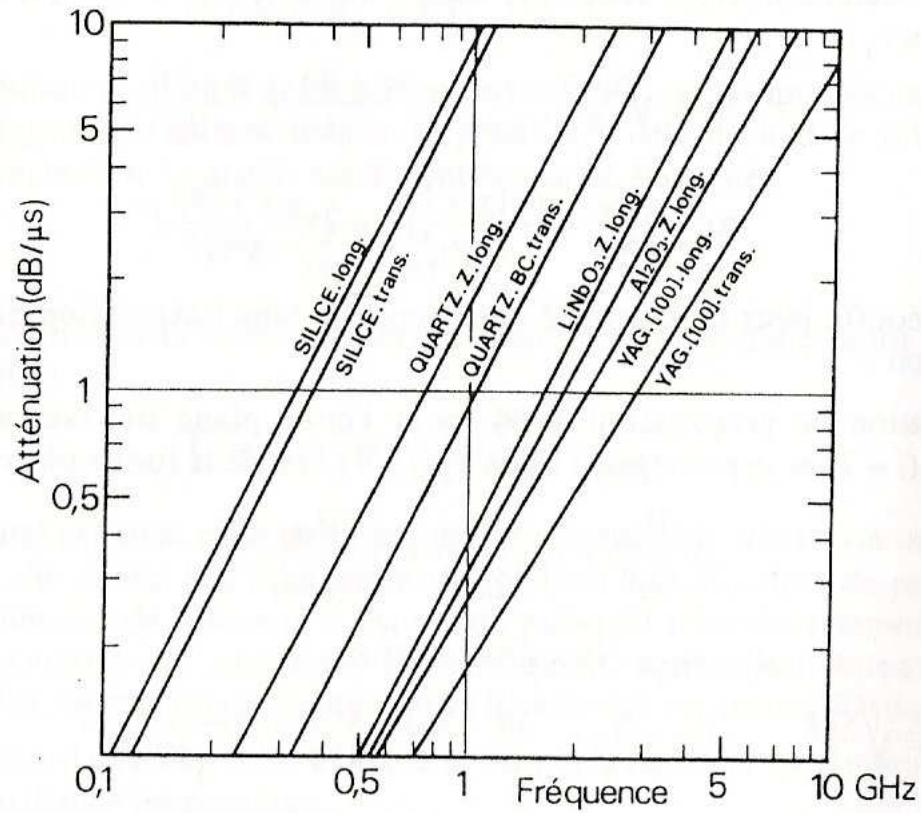


3.5 Exemple : corindon, saphir, rubis (Al_2O_3 , trigonal $\bar{3}m$)



3.6 Atténuation

- Les pertes acoustiques dans les solides sont dues à la conduction thermique, à l'interaction avec les phonons, aux diffusions sur les défauts, etc. Elles sont grossièrement proportionnelles à ω^2 .
- Les pertes sont plus grandes dans les métaux que dans les isolants ; dans les polycristaux que dans les monocristaux.



4 Solide anisotrope piézoélectrique

4.1 Constantes durcies pour les ondes planes harmoniques

L'équation fondamentale de la dynamique et l'équation de poisson

$$-i\omega s \hat{T}_{ij} n_j = -\rho\omega^2 \hat{u}_i \text{ et } \hat{D}_j n_j = 0 \quad (7)$$

avec les équation constitutives

$$\hat{T}_{ij} = -i\omega s (c_{ijkl} n_k \hat{u}_l + e_{kij} n_k \hat{\phi}) \text{ et } \hat{D}_j = -i\omega s (e_{jkl} n_k \hat{u}_l - \varepsilon_{jk} n_k \hat{\phi}) \quad (8)$$

mènent à

$$\rho \hat{u}_i = s^2 (\Gamma_{il} \hat{u}_l + \gamma_i \hat{\phi}) \text{ et } \gamma_l \hat{u}_l = \varepsilon \hat{\phi} \text{ avec } \gamma_i = e_{kij} n_j n_k \text{ et } \varepsilon = \varepsilon_{jk} n_j n_k \quad (9)$$

d'où en éliminant le potentiel **l'équation de Christoffel avec constantes durcies**

$$\rho \hat{u}_i = s^2 \bar{\Gamma}_{il} \hat{u}_l \text{ avec } \bar{\Gamma}_{il} = \Gamma_{il} + \frac{\gamma_i \gamma_l}{\varepsilon} \quad (10)$$

ce qui fournit un moyen commode d'obtenir la partie acoustique des ondes planes harmoniques dans un milieu piézoélectrique.

4.2 Couplage électromécanique

Considérons par exemple la propagation selon $[010]$ (axe x_2) dans le niobate de lithium (LiNbO_3 , trigonal $3m$)

$$\Gamma = \begin{pmatrix} c_{66} & 0 & 0 \\ \cdot & c_{11} & -c_{14} \\ \cdot & \cdot & c_{44} \end{pmatrix} \text{ avec } c_{66} = \frac{c_{11} - c_{12}}{2}$$

Il y a une onde transverse de vitesse $\sqrt{c_{66}/\rho}$ et une onde QS et une onde QL de vitesses données par $2\rho v^2 = \Gamma_{22} + \Gamma_{33} \pm \sqrt{(\Gamma_{22} - \Gamma_{33})^2 + 4\Gamma_{23}^2}$.

D'autre part, on trouve

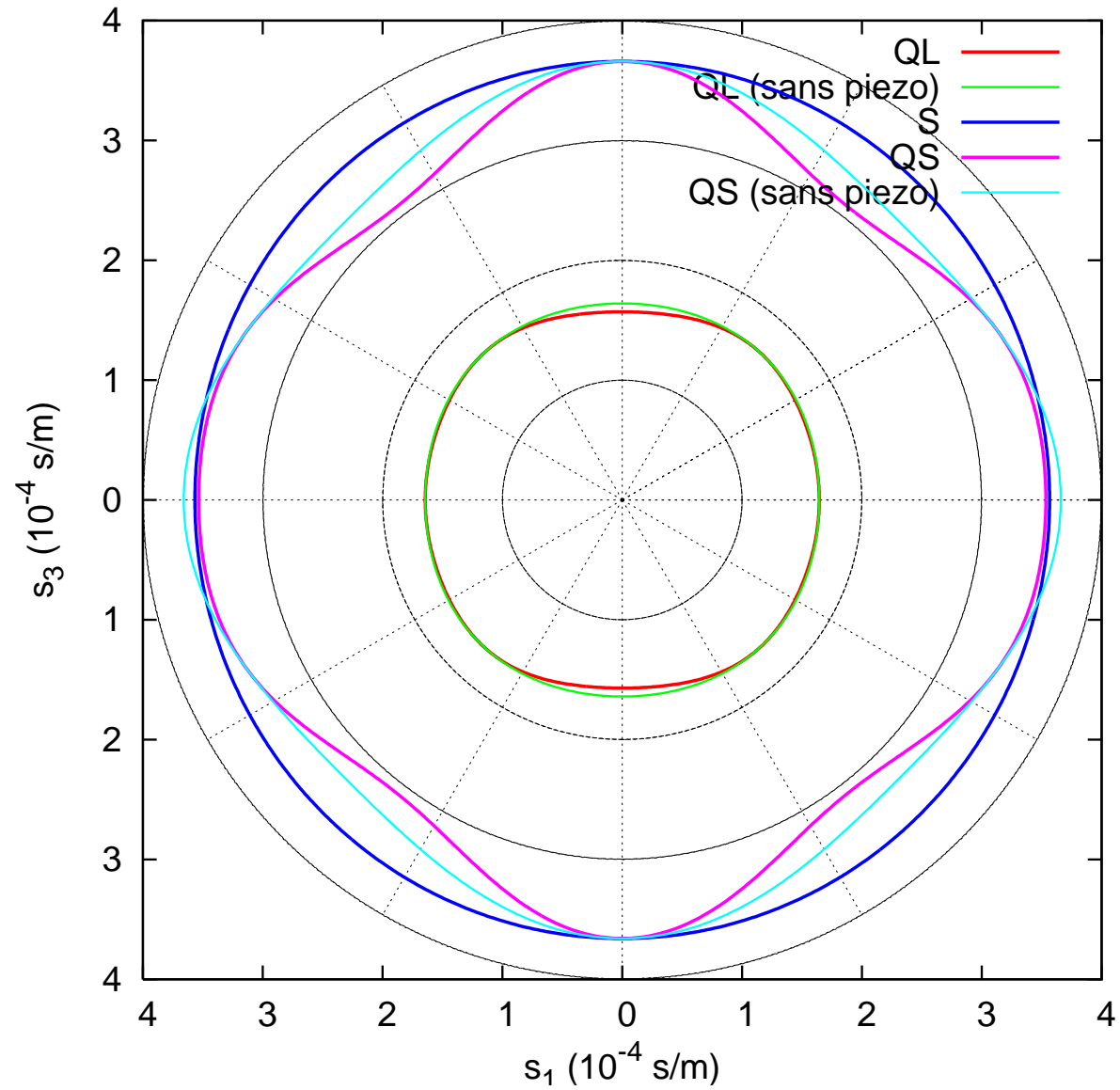
$$\gamma_1 = 0; \gamma_2 = e_{22}; \gamma_3 = e_{15}; \varepsilon = \varepsilon_{11}$$

donc $\bar{\Gamma}_{11} = \Gamma_{11}; \bar{\Gamma}_{22} = \Gamma_{22} + \gamma_2^2 / \varepsilon; \bar{\Gamma}_{23} = \Gamma_{23} + \gamma_2 \gamma_3 / \varepsilon; \bar{\Gamma}_{33} = \Gamma_{33} + \gamma_3^2 / \varepsilon$.

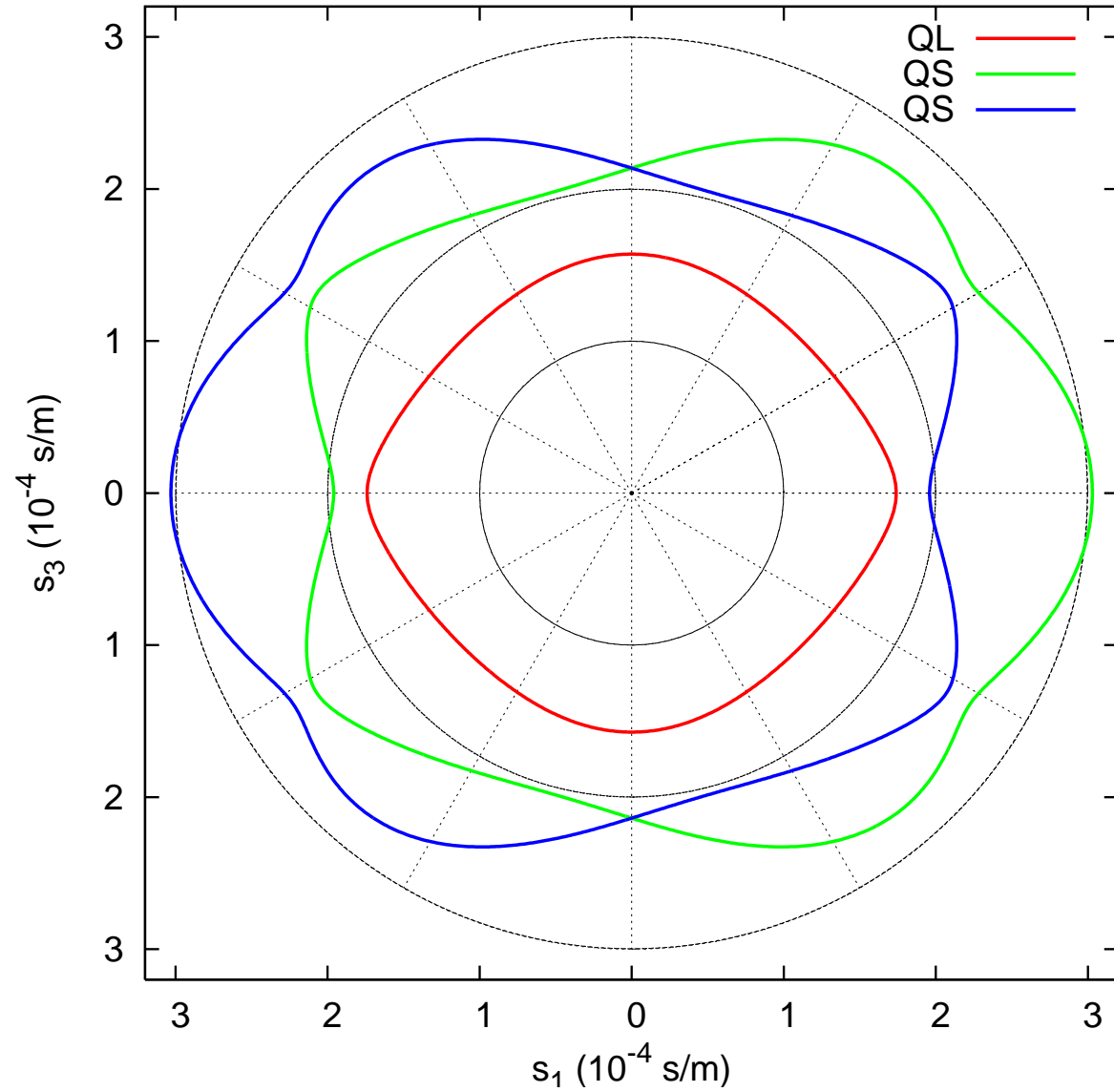
La piézoélectricité conduit à une variation des vitesses QS et QL. On prend pour définition du couplage électromécanique le quotient sans dimension

$$K^2 = 2 \frac{\Delta v}{v} \tag{11}$$

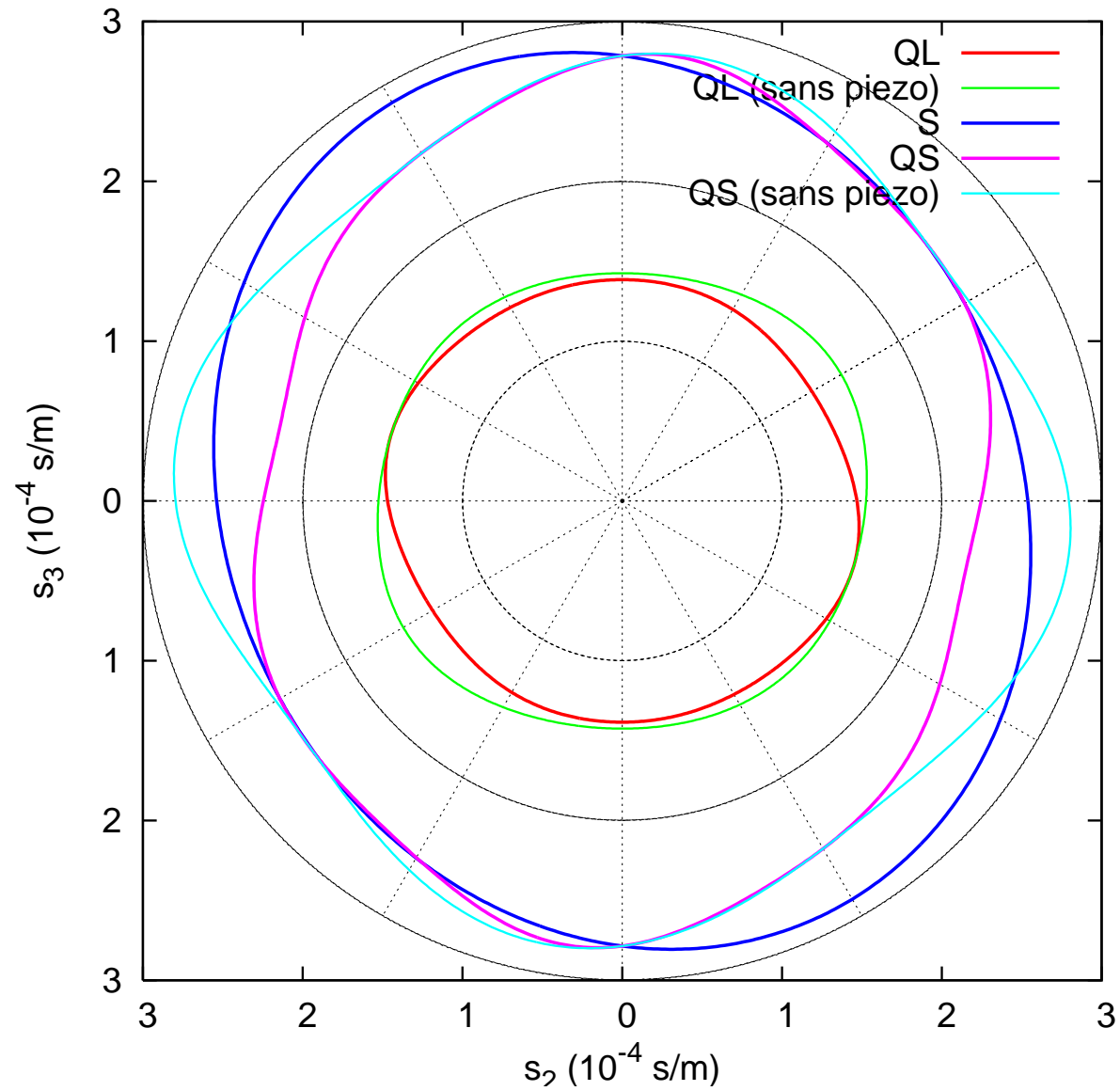
4.3 ZnO (hexagonal 6mm)



4.4 Quartz (trigonal 32)



4.5 LiNbO₃ (trigonal 3m)

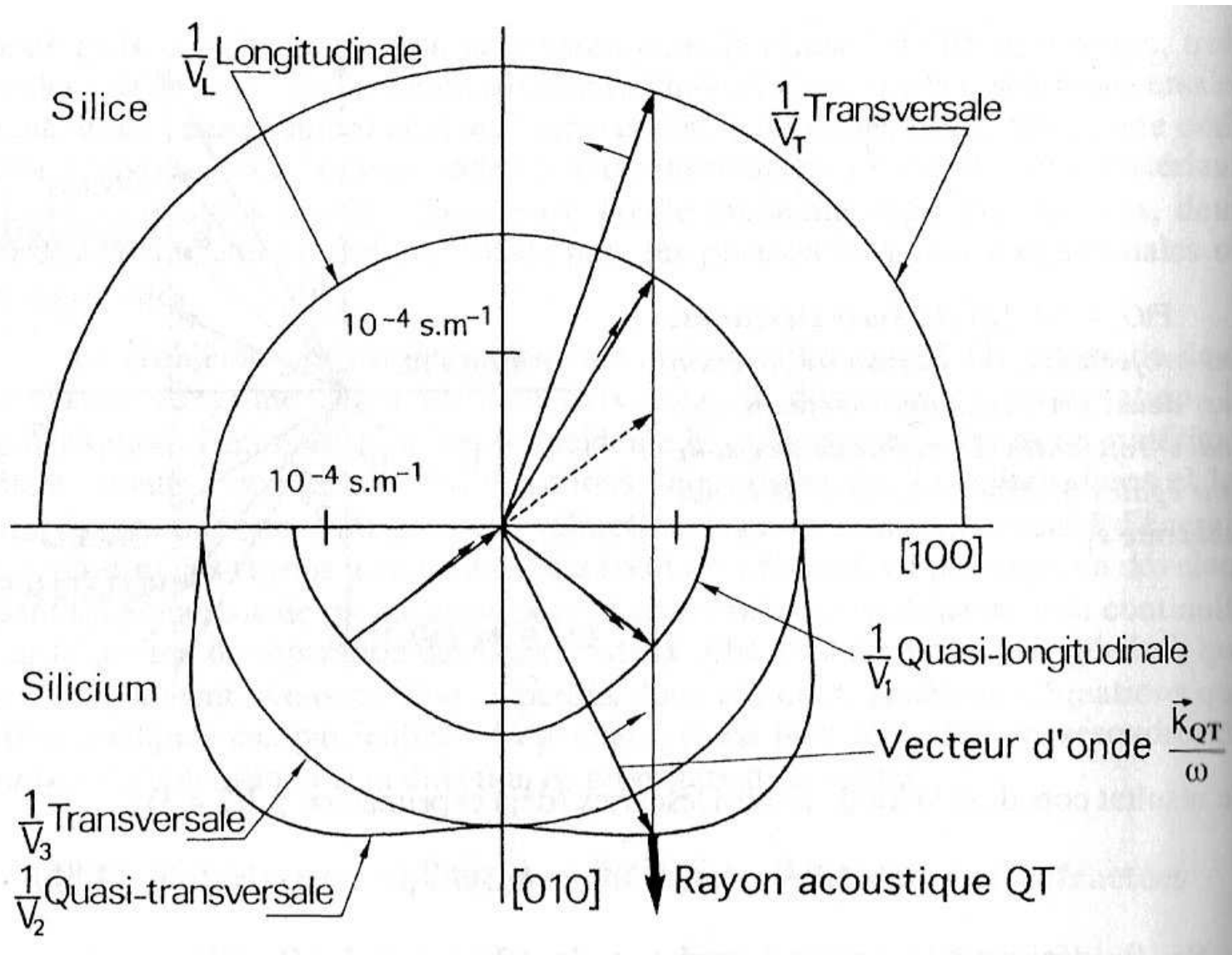


5 Réflexion et réfraction

5.1 Propriétés générales

- La polarisation des ondes dans un milieu fluide idéal n'a qu'une composante longitudinale acoustique.
- La polarisation des ondes dans un solide élastique comporte 3 composantes acoustiques, 1 majoritairement longitudinale et 2 majoritairement transversales (shear).
- La polarisation des ondes dans les milieux piézoélectriques comporte 4 composantes, provenant des 3 degrés de liberté acoustiques (u_i) et du degré de liberté électrique (ϕ). Il y a 1 polarisation majoritairement longitudinale, 2 majoritairement transversales et 1 majoritairement électrostatique.
- Une polarisation pure incidente donne naissance à 4 ondes réfléchies et à 4 ondes transmises dans un milieu piézoélectrique (1 et 1 dans un fluide ; 3 et 3 dans un solide élastique).
- La fréquence et la projection du vecteur d'onde sur l'interface se conservent.

5.2 Exemple : interface silicium - silice



5.3 Déplacements et contraintes généralisés

On définit les **contraintes généralisées** par $\bar{T}_{ij} = T_{ij}$ pour $i = 1, 2, 3$ et $\bar{T}_{4j} = D_j$ pour $i = 4$. De même, on définit les **déplacements généralisés** par $\bar{u}_i = u_i$ pour $i = 1, 2, 3$ et $\bar{u}_4 = \phi$.

On peut ainsi écrire les relations constitutives sous la forme

$$\bar{T}_{ij} = \bar{c}_{ijkl} \frac{\partial \bar{u}_l}{\partial x_k} \text{ avec } \bar{c}_{ijkl} = c_{ijkl}, \bar{c}_{ijk4} = +e_{kij}, \bar{c}_{4jkl} = e_{jkl}, \bar{c}_{4j k4} = -\varepsilon_{jk} \quad (12)$$

et l'équation fondamentale de la dynamique et l'équation de Poisson

$$\frac{\partial \bar{T}_{ij}}{\partial x_j} = \bar{\rho}_{ij} \frac{\partial^2 \bar{u}_j}{\partial t^2} \text{ avec } \bar{\rho} = \rho \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (13)$$

On est ainsi ramené à des équations pseudo-mécaniques semblables à celles des milieux élastiques. En particulier, l'équation de Christoffel piézoélectrique peut être écrite $\bar{\rho}_{ij} \bar{u}_j = s^2 (\bar{c}_{ijkl} n_j n_k) \bar{u}_l$, qui se présente sous la forme d'un problème aux valeurs propres généralisé (du type $A\mathbf{x} = \lambda B\mathbf{x}$).

5.4 Equation aux valeurs propres

Soit un problème de réflexion-transmission sur une interface plane normale à x_1 . Les lenteurs s_2 et s_3 se conservent. **Mais quelles sont les valeurs possibles de s_1 ?** On peut mettre les équations (12) et (13) sous la forme

$$\begin{pmatrix} -\bar{c}_{i12l}s_2 - \bar{c}_{i13l}s_3 & \delta_{il} \\ \sum_{j,k=2}^3 \bar{c}_{ijkl}s_j s_k + \bar{\rho}_{il} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{u}_l \\ \tau_{l1} \end{pmatrix} = s_1 \begin{pmatrix} c_{i11l} & 0 \\ \bar{c}_{i21l}s_2 + \bar{c}_{i31l}s_3 & \delta_{il} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{u}_l \\ \tau_{l1} \end{pmatrix} \quad (14)$$

avec $\tau_{ij} = T_{ij} / (-i\omega)$.

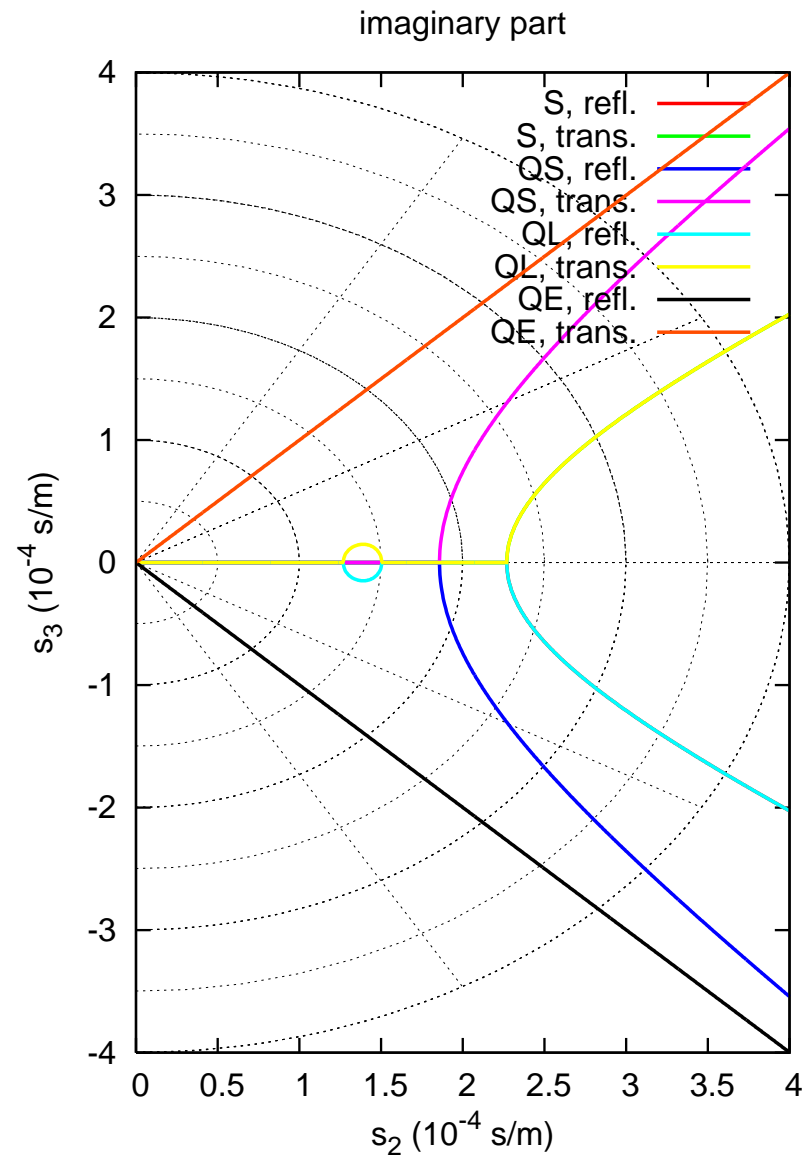
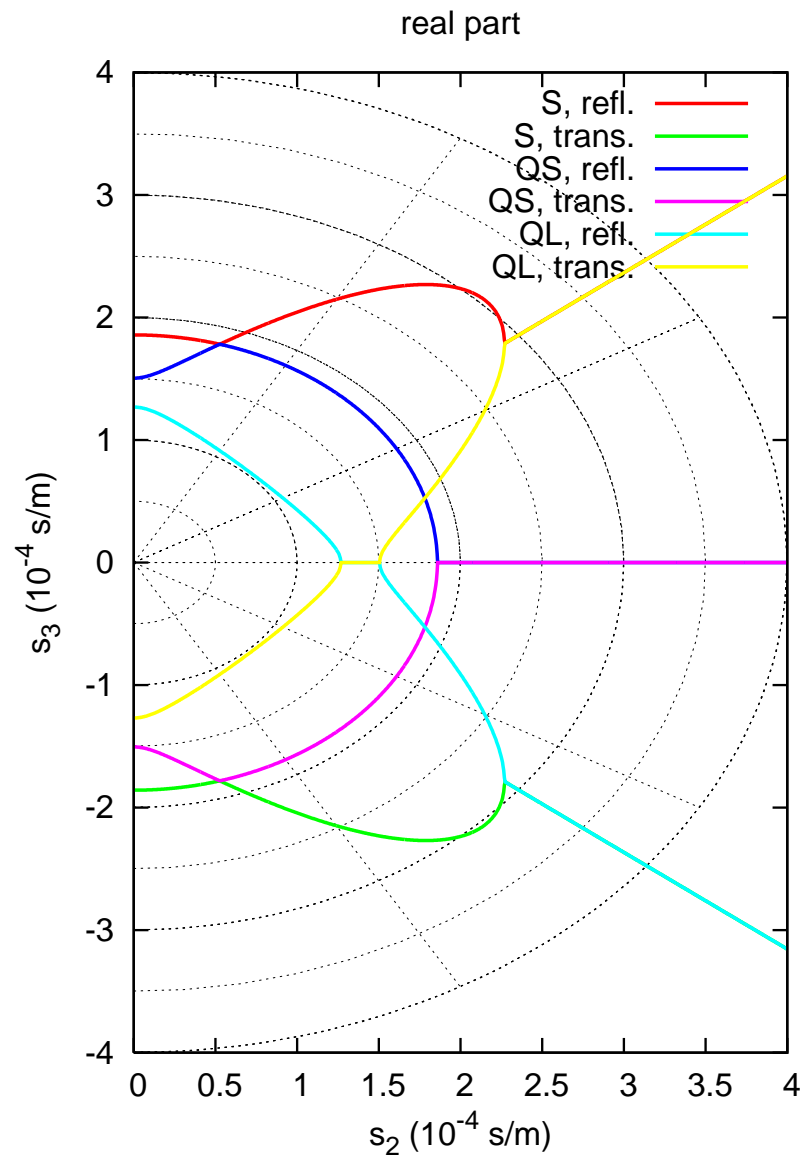
Il s'agit d'un problème aux valeurs propres généralisé, de la forme

$$A\mathbf{h} = s_1 B\mathbf{h} \quad (15)$$

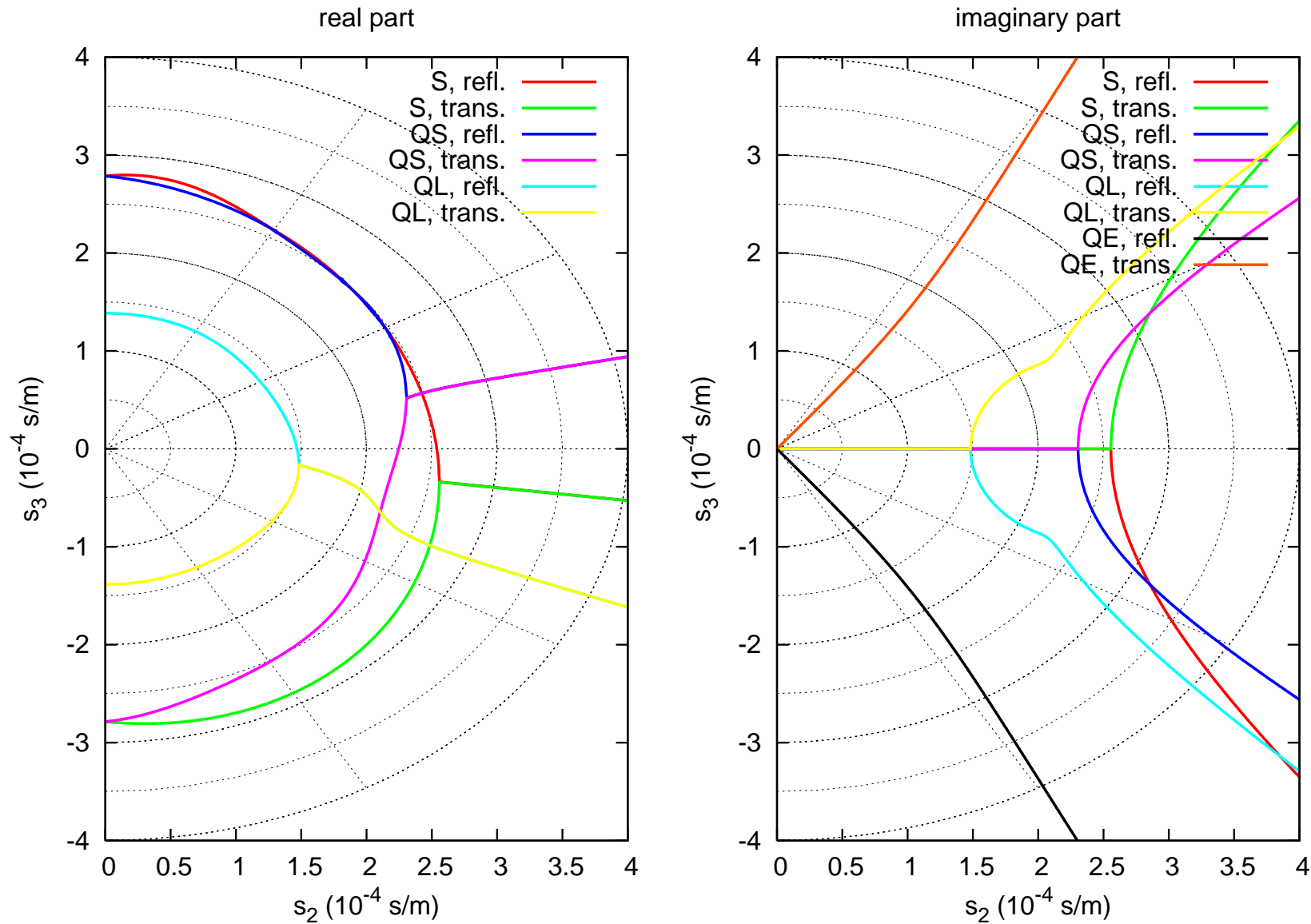
dans lequel les matrices A et B dépendent de s_2 et s_3 (et des constantes du milieu). Le vecteur \mathbf{h} a 8 composantes, les 4 \bar{u}_l et les 4 τ_{l1} .

- Il y a 8 valeurs propres, correspondant aux 8 valeurs possibles pour s_1 . **Ces valeurs propres appartiennent par paires à chacune des 4 surfaces des lenteurs** (le cas échéant à leurs branches imaginaires). Ces paires sont soit réelles de signes opposés, soit complexes conjuguées.
- Les 8 vecteurs propres sont appelés **modes partiels**. Il y a 4 modes partiels **réfléchis** et 4 modes partiels **transmis**.

5.5 Exemple : modes du rutile



5.6 Exemple : modes du LiNbO₃



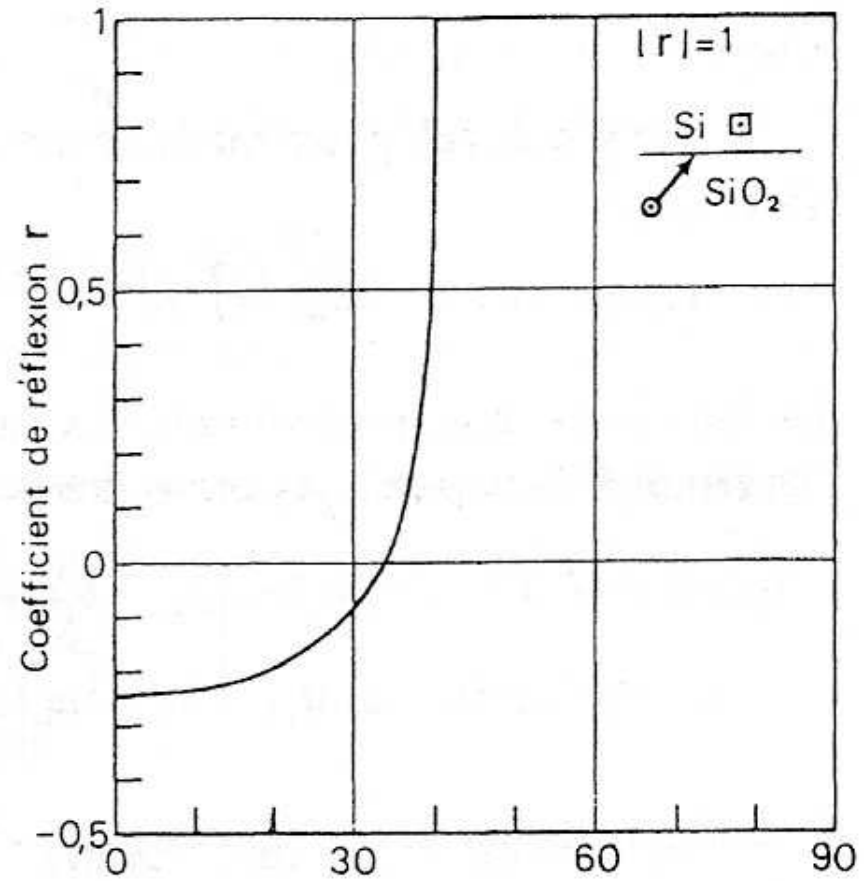
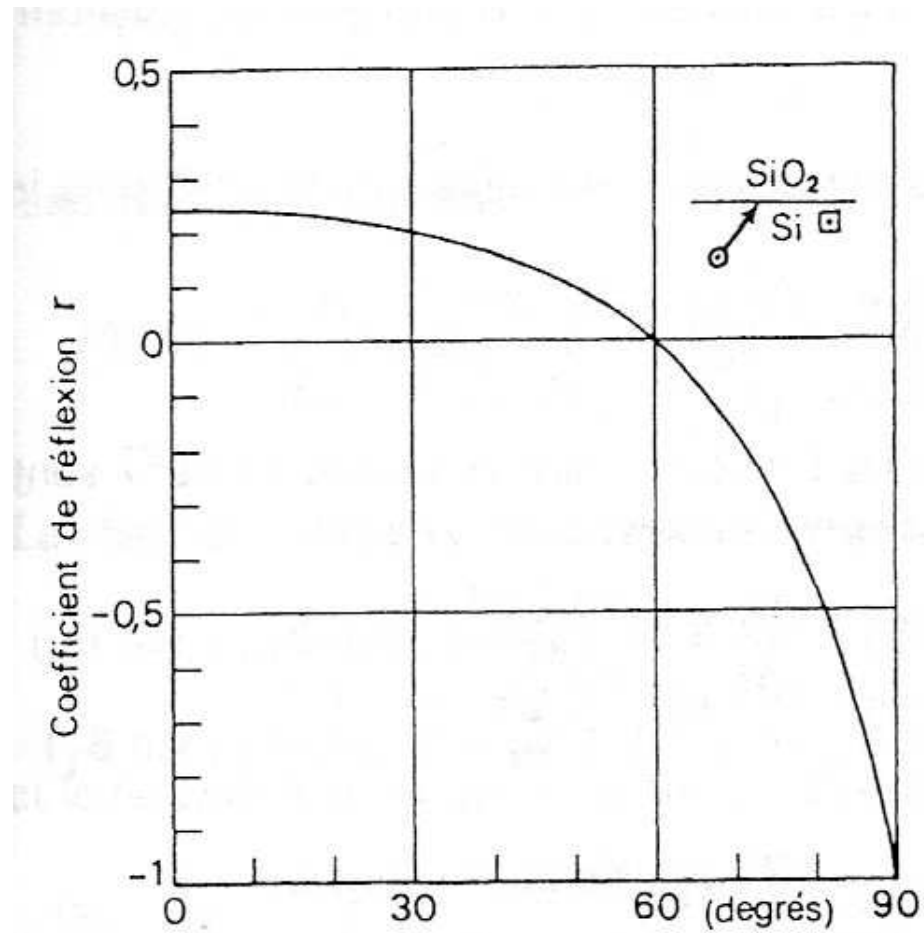
5.7 Méthode de solution numérique

1. On résout le problème aux valeurs propres (15) dans chacun des milieux 1 et 2, ce qui donne pour chacun les 8 valeurs propres ($s_{1r}^{(1)}$ et $s_{1r}^{(2)}$) et 8 vecteurs propres ou polarisations ($\mathbf{h}_r^{(1)}$ et $\mathbf{h}_r^{(2)}$).
2. La solution générale dans chaque milieu est une superposition des 8 modes partiels, soit

$$\mathbf{h}(t, \mathbf{x}) = \sum_{r=1}^8 a_r \mathbf{h}_r^{(1 \text{ ou } 2)} \exp(i\omega (t - s_{1r}^{(1 \text{ ou } 2)} x_1 - s_2 x_2 - s_3 x_3)) \quad (16)$$

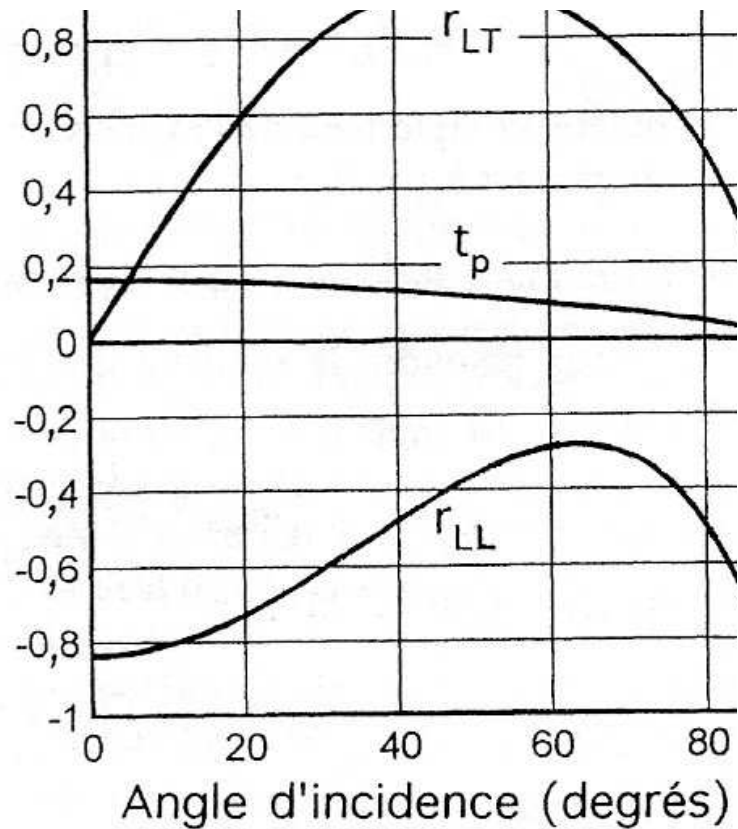
3. On partage les modes partiels dans le milieu 1 en 4 MP incidents (leurs amplitudes sont connues) et 4 MP réfléchis. On partage les modes partiels dans le milieu 2 en 4 MP transmis et 4 MP incidents (leurs amplitudes sont nulles).
4. Les 8 composantes de \mathbf{h} sont continues à l'interface, ce qui donne 8 équations linéaires pour 8 inconnues (les MP réfléchis et transmis). Le problème est donc entièrement déterminé.

5.8 Exemple : interface silicium - silice, et réciproquement

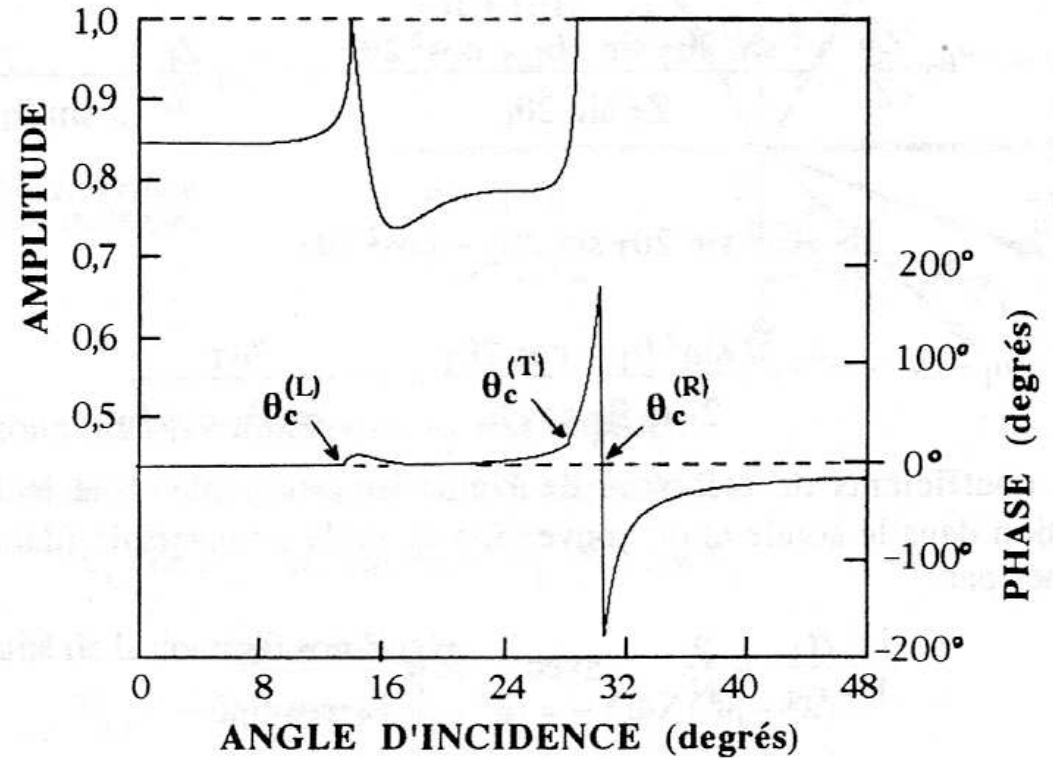


Onde incidente purement transverse (S)

5.9 Exemple : interface duralumin - eau, et réciproquement



Onde incidente L dans le duralumin



Coefficient de réflexion r_{LL} dans l'eau