Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université Mouloud Mammeri, Tizi-Ouzou
Faculté des Sciences
Département de Physique

MEMOIRE DE MAGISTER

Spécialité : Physique
Option : Science de la matière

Présenté par :
Sedik KHEFFACHE

Thème :

Propagation d'ondes élastiques dans les cristaux phononiques bidimensionnels

Devant la commission d'examen composée de :

Mr	**Omar Lamrous**	Professeur	UMMTO	Président
Mr	**Belhadi Mehand**	Professeur	UMMTO	Rapporteur
Mme	**Lalam Fadila**	Professeur	UMMTO	Examinateur
Mr	**Hellal Slimane**	Professeur	UMMTO	Examinateur
Mr	**Belkhir Abderrahmane**	Maître de Conférences (**A**)	UMMTO	Examinateur

Soutenu le : 28 / 09 / 2011

Remerciements

Je remercie en premier lieu mon Dieu l'impénétrable qui m'a donné le courage pour compléter la réalisation de mon travail.

Le travail présenté dans ce mémoire a été réalisé au laboratoire de physique et chimie des matériaux LPCM de l'Université Mouloud Mammeri de Tizi Ouzou sous la direction du professeur Belhadi Mehand, que je tiens à remercier infiniment et chaleureusement pour sa rigueur, sa simplicité, sa générosité et sa disponibilité durant toute la durée du travail. Ses conseils précieux m'ont permis de mener à bien mon travail de mémoire.

Je remercie également l'ensemble des enseignants qui ont contribués à ma formation. Que monsieur le président et les membres du jury trouvent ici l'expression de mon respect pour avoir fait l'honneur d'examiner ce travail de mémoire de magister.

Ma gratitude va au personnel de la bibliothèque et de la scolarité sans oublier et heureux de remercier mes cher parents, mes frères, mes proches, ainsi que tous mes amis pour leurs soutient, leurs aides, leurs encouragements et le temps qu'ils m'ont consacré pour la réalisation de ce mémoire de magister.

Kheffache Sedik

Dédicace

Je dédie ce travail :

À ma chère mère et à mon cher père;

À mes sœurs et mon frère ;

À mes oncles et mes tantes ;

À toute ma famille et la famille hachi ;

A mes amis : Docteur Bettache Hachimi, G Youcef et sa fiancée, Yefsah Ch, Hadjsaid A, B mouhend , D Nacer, L abdenour, younes C. H , S. Amirouche, Tahar……..

Eu fait je dédie ce travail à tous mes amis(es) que j'ai connus depuis mon enfance la où ils se trouvent, à mes amis (es) de l'école primaire frères Kasdi, ainsi que mes amis (es) de CEM et de lycée, sans doute mes amis (es) de l'université, encore à mes amis(es) que je connais sur le net, Ricardo, Pierre, Vamsi, Djaber, Toufik, Youcef, Mouhammed, Nesrine, wafa, Douaa, Zineb, Zina, Natali, Entesare, Rose, Birsen, et autres ;

A tous mes amis de MLE : Kaci et son neveu Mensour, G. youcef, L. Athmane, K. Mouloud, Lyes, Lahlou, Ali, Mourad, Abdelghani, Farid, Riad, Volta Giovanino, Gabriele Tonelli, G. Antonio, B. Oualid, Bahri, Z. Mouhamed, A. Lorenzo et autres.

À tous mes enseignants ;

A mes futurs amis(es) et aux chers lecteurs de ce mémoire.

KHEFFACHE SEDIK

Table des matières

Remerciements i

Dédicace ii

Table des matières iii

Table des figures v

Introduction 01

Chapitre. I Les cristaux phononiques

1 Structures périodiques 05

1.1 Réseau réciproque 06

1.2 Zone de Brillouin 07

2 Ondes acoustiques et élastiques 08

2.1 Propagation des ondes dans les milieux élastiques 09

3 Cristaux photoniques 13

3.1 Les cristaux photoniques bidimensionnels 13

3.2 Les cristaux photoniques tridimensionnels 14

3.3 Guides d'ondes à cristaux photoniques. 14

4 Les cristaux phononiques 15

4.1 Qu'est-ce qu'un cristal phononique ? 15

4.2 Émergence des cristaux phononiques 16

4.3 Expérience sur la sculpture de Sempere 19

4.4 Notion de bande interdite 21

4.5 Écartement du gap phononique 22

4.6 Guidage et filtre sélectif 24

4.7 Comparaison entre les cristaux phononiques et photoniques 26

Chapitre. II méthodes de résolution des équations de propagation des ondes

1 Introduction 28
2 Méthode des éléments finis 29
3 Méthodes de diffusion multiple 29
4 Méthode de développement en ondes planes 30
4.1. Brève introduction à la méthode 30
4.2 Description de la méthode 30
5 La méthode des différences finies dans le domaine temporel 34
5.1 Introduction à la méthode FDTD 34
5.2 Description de la méthode 34
5.3 Discrétisation du tenseur des contraintes 37
5.4 Critère de stabilité 39
6 Organigrammes de calcul 39

Chapitre. III Calcul de bandes interdites

1 Modele étudié 42
2 -Structure de bande 44
2.1 -Structure de bande calculée par la méthode FDTD 44
2.2 -Formules des différences finies 44
2.3 Fenêtre de calcul FDTD 46
2.4 -Conditions initiales 47
2.5 -Conditions aux limites périodiques 47
2.6 -Transformation en domaine de fréquences 48
2.7 Courbe de dispersion 48
2.8 Structure de bande calculée par la méthode PWE 49
3 Influence des paramètres du système sur le gap 53
3.1 Influence du paramètre de maille 53
3.2 Influence du rayon des cylindres 54
3.3 Influence de la fraction volumique 56
3.4 Influence de la densité des cylindres 56
Conclusion et perspectives 58
Références bibliographiques 60
Annexe 64

INTRODUCTION

Dans un solide cristallin constitué d'atomes placés aux nœuds d'un réseau périodique, le potentiel du réseau ionique crée des bandes d'énergies pour la propagation des électrons. Les électrons n'ont accès qu'à certains niveaux, séparés entre eux par des bandes interdites. Ce concept de bandes interdites a été développé initialement dans le cadre de la théorie électronique des solides; c'est le cas notamment des semi-conducteurs [1,2].

Les possibilités offertes par ces matériaux sur le contrôle des fonctions d'ondes électroniques se devaient immanquablement de susciter, à terme, quelques idées quant à l'application d'un principe similaire à des ondes progressives de différentes natures. Il a fallu attendre la fin des années 80 pour réellement voir émerger une extension de la notion de bandes interdites au moins aux ondes électromagnétiques et ainsi assister à la naissance des cristaux photoniques [3].

Le concept de matériaux à Bandes Interdites de Photons BIP (en anglais *Photonic Band Gap* PBG) ou cristaux photoniques est apparu il y a une vingtaine d'années sous l'impulsion de Yablonovitch [4]. Un cristal photonique est une structure dont l'indice diélectrique est modulé de façon périodique. Grâce à l'analogie formelle qui existe entre les équations de Maxwell régissant la propagation des ondes électromagnétiques dans un milieu diélectrique et l'équation de Schrödinger pour les électrons, on peut appréhender les cristaux photoniques avec les outils et les concepts développés en physique du solide [5].

La propagation des ondes électromagnétiques dans des milieux hétérogènes dotés d'une structure à indice diélectrique périodique, peut se décrire par des bandes, dont certaines peuvent être interdites. Une radiation lumineuse avec une énergie située dans la bande interdite ne pourra pas pénétrer dans le matériau périodique, quelle que soit son incidence ou sa polarisation car la densité de modes photoniques ayant été modifiée jusqu'à l'annulation par l'environnement diélectrique périodique, il n'existe pas de mode avec une énergie correspondante. Ces propriétés rendent les cristaux photoniques intéressants pour de nombreuses applications dans les systèmes optoélectroniques telles que l'optique intégrée et les fibres microstructurées [5].

À l'image des cristaux photoniques un matériau composite dont la densité et les constantes élastiques sont des fonctions périodiques de la position, peut présenter sous certaines conditions des bandes interdites pour les ondes acoustiques ou élastiques. Ce sont des matériaux à bandes interdites phononiques, encore appelés *cristaux phononiques*.

Il a fallu au moins une décennie pour assister à une transposition de la plupart de ces mêmes phénomènes à l'acoustique. Les cristaux phononiques, mentionnés pour la première fois en 1993, sont des matériaux composites constitués de réseaux périodiques d'inclusions à une, deux ou trois dimensions insérées dans une matrice, [2, 6, 7]. Dans le domaine de fréquence d'une bande interdite, un cristal phononique se comporte comme un miroir acoustique parfaitement réfléchissant. Ils consistent également à mettre à profit les phénomènes de diffusion se produisant dans un matériau composite périodique pour empêcher la propagation des ondes acoustiques et/ou élastiques dans toutes les directions de l'espace.

La mise en évidence des propriétés liées à la périodicité des cristaux phononiques présente un intérêt certain d'un point de vue purement fondamental. S'ils existent naturellement ou s'ils sont fabriqués artificiellement ils présentent une riche variété de propriétés physiques et un grand intérêt pour la recherche fondamentale et appliquée ; ce qui est intéressant pour des applications telles que : dispositifs d'ondes acoustiques [8], systèmes d'isolation phonique [9,10], filtres fréquentiels [11,12] et absorption de vibrations [13]. D'autres applications évidentes sont rapidement envisagées telles que les structures antisismiques [14]. Récemment, pour réduire l'impact des tremblements de terre sur les structures, Shi et ses collaborateurs, [11] fabriquent une base périodique avec des écarts de fréquence à faible bande, ce qui est tout à fait différent de l'approche traditionnelle utilisée en génie civil.

En revanche, les dimensions mises en œuvre dans les cristaux phononiques, structures artificielles crées par la main de l'homme, sont beaucoup plus importantes. Elles vont de quelques mètres pour les plus imposantes à cent nanomètres. A cette échelle, la matière apparaît comme continue et les lois de la mécanique classique peuvent être employées avec une bonne confiance. C'est à l'échelle microscopique que les cristaux phononiques ont le plus de potentiel.

Les principes des cristaux phononiques s'expriment de la même façon quelle que soit l'échelle choisie pour leur réalisation, seules les fréquences de fonctionnement changent. Cependant leurs concepts peuvent être démontrés à l'échelle, c'est-à-dire avec des structures dont les dimensions sont relativement grandes, donc facilement accessibles. En raison des avancées récentes dans les techniques de fabrication, le développement des micros et des nanotechnologies, des cristaux phononiques de plus en plus petits peuvent être réalisés par des procédés qui ressemblent à ceux de la microélectronique, employés par exemple pour la réalisation des microprocesseurs de nos ordinateurs. La microélectronique a débuté il y a cinquante ans, la photonique suit depuis une vingtaine d'année et arrive à maturité ; l'avenir dira si la nanophononique pourra suivre ces exemples prestigieux [7].

Plus récemment, l'attention s'est tournée vers la propagation des ondes dans des bandes passantes à la fois au dessus et au dessous de la bande interdite, le cas inhabituel «la réfraction négative» [15,16]. Les études théoriques et expérimentales de la propagation des ondes élastiques et/ou acoustiques dans des matériaux composites constitués de réseaux périodiques d'inclusions à une, deux ou trois dimensions insérées dans une matrice ont été concernées principalement en termes de leur relation de dispersion. Aujourd'hui, la communauté scientifique dispose de nombreuses méthodes numériques efficaces pour simuler la propagation des ondes élastiques ou acoustiques au sein des cristaux phononiques.

Le travail présenté dans ce mémoire de magister s'inscrit dans le cadre d'une contribution à l'étude théorique liée à la propagation d'ondes élastiques dans les cristaux phononiques bidimensionnels (2D). Ces derniers sont constitués d'un réseau périodique de cylindres infinis dans une matrice avec application à des cylindres en Duralumin insérés dans une matrice d'époxy. Ce travail, porte sur le développement et l'application de méthodes analytiques et de simulations numériques utilisées pour la résolution des équations de propagation d'ondes élastiques dans les cristaux phononiques bidimensionnels (2D), en l'occurrence la méthode de développement en ondes planes (PWE) et la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD). Et ce pour le calcul de bande interdite phononique dans le cas d'une polarisation transversale ; ceci constitue le sujet principal de notre travail.

Le premier chapitre du présent travail est consacré aux rappels de quelques notions de la physique du solide et quelques notions de base des ondes élastiques et acoustiques, ainsi que leur propagation. Un aperçu sur les cristaux photoniques et les cristaux phononiques qui font l'objet de notre étude ont été rigoureusement détaillés.

Le deuxième chapitre, est consacré à la présentation des différentes méthodes théoriques utilisées pour l'étude des cristaux phononiques. La méthode de développement en ondes planes et la méthode de discrétisation des équations de propagation dans le domaine temporel et dans l'espace, FDTD (Finite Différence Time Domaine) y sont introduites. Il existe, bien entendu, d'autres méthodes théoriques disponibles dans la littérature scientifique pour traiter les sujets d'étude et nous mentionnons de certaines de ces méthodes dans cette partie.

Dans le troisième chapitre, nous présentons les résultats numériques liés à la propagation d'ondes élastiques dans les cristaux phononiques bidimensionnels (2D), dont nous avons appliqué les deux méthodes sur lesquelles s'appuie notre travail de calcul de la structure de bande phononique ; les différents diagrammes de bandes obtenues par ces dernières sont présentés et commentés ainsi que l'effet de certains paramètres du système sur les caractéristiques du gap phononique à savoir l'effet du réseau dans lequel les cylindres sont insérés, l'effet du paramètre de maille, du rayon des cylindres, de la fraction volumique et de la nature et de la densité des cylindres.

Le travail présente une conclusion générale et certaines perspectives offertes par notre approche dans ce domaine. Le lecteur trouvera également en annexe certains points discutés en détails.

Chapitre 1
Les cristaux phononiques

La propagation d'ondes acoustiques dans les milieux hétérogènes dotés d'une structure périodique fait l'objet d'un grand intérêt depuis quelques décennies. Un grand nombre de structures périodiques a été étudié et des approches théoriques variées ont été employées. Toutes ces méthodes ont mis en évidence l'existence de propriétés physiques telles que la présence de bandes interdites (*Gap*) correspondant à une forte atténuation et des bandes passantes d'atténuation moindre des ondes électromagnétiques.

À l'image des cristaux photoniques qui ont la propriété d'empêcher la lumière de se propager dans certaines gammes de fréquence, on peut concevoir des matériaux composites qui réfléchissent totalement les ondes ultrasonores ou le son. Ces matériaux permettent d'élaborer des isolants phoniques bien plus efficaces que les isolants usuels.

Cet état de l'art revient sur les concepts nécessaires à la compréhension des matériaux à bandes interdites phononiques. A ce titre, il s'évertue dans un premier temps à fournir quelques notions fondamentales sur les structures périodiques, les ondes élastiques et les cristaux phononiques.

I.1 Structures périodiques

Un cristal est un matériau solide constitué d'un arrangement périodique d'atomes ou de molécules reparties dans les trois directions de l'espace. La physique de l'état condensé est alors largement consacrée à les étudier. La périodicité de la structure d'un cristal, est représentée par un ensemble de points géométriques régulièrement disposés dans l'espace. Cet ensemble est appelé réseau cristallin ou réseau de *Bravais* et les points le constituant sont appelés nœuds du réseau, qui peuvent être imaginés comme les sommets des mailles.

La structure est alors reconstruite par simple translation de la maille, dans l'espace à trois dimensions, le réseau est défini par les trois vecteurs de translation fondamentaux appelés vecteurs de base $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$. Pour une translation quelconque $\vec{r}$ à partir d'un point, on obtient [1]:

$$\overrightarrow{r'} = \vec{r} + u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}\,. \qquad \text{(I.1)}$$

Où *u, v, w* sont des entiers et l'ensemble des points $\overrightarrow{r'}$ définis par l'équation (I.1) pour toutes les valeurs des entiers *u, v, w* définit un réseau. Un réseau est un arrangement périodique régulier de points dans l'espace, ainsi donc la structure cristalline n'est formée que lorsque l'on attache la même base d'atomes à chaque nœud du réseau, alors :

Structure cristalline = réseau + base

Le réseau et les vecteurs de translation sont dits primitifs si un couple quelconque de points définis par $\vec{r}, \overrightarrow{r'}$ autour desquels l'arrangement atomique est identique, satisfait la relation (I.1) pour un choix convenable des entiers *u, v, w*.

I.1.1 Réseau réciproque

A toute structure cristalline est associée deux réseaux : le réseau direct et le réseau réciproque. Une figure de diffraction d'un cristal est une carte du réseau réciproque du cristal, quand nous faisons subir une rotation, nous faisons subir la même rotation au réseau direct et au réseau réciproque [17]. Si $\vec{a}$, $\vec{b}$ et $\vec{c}$ sont les vecteurs primitifs du réseau cristallin, un nœud de ce réseau est repéré par un vecteur $\vec{r}$ tel que :

$$\vec{r} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}\,. \qquad \text{(I.2)}$$

Et si $\vec{A}$, $\vec{B}$, $\vec{C}$ sont les vecteurs primitifs du réseau réciproque, un nœud de ce réseau est repéré par un vecteur $\vec{G}$ tel que :

$$\vec{G} = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C}. \qquad \text{(I.3)}$$

Ou *u, v, w* sont les coordonnées d'un nœud du réseau direct et *h, k, l* les indices de Miller définissants un nœud du réseau réciproque. Les deux réseaux sont reliés par les définitions suivantes :

$\vec{a}.\vec{A} = 2\pi$, $\vec{b}.\vec{B} = 2\pi$ et $\vec{c}.\vec{C} = 2\pi$ avec:

$\vec{A} = \frac{2\pi}{V}(\vec{b} \times \vec{c})$, $\vec{B} = \frac{2\pi}{V}(\vec{c} \times \vec{a})$ et $\vec{C} = \frac{2\pi}{V}(\vec{a} \times \vec{b})$ avec $V = (\vec{a}.\vec{b}) \times \vec{c}$.

Le facteur 2π n'est pas utilisé par les cristallographes mais il est pratique en physique du solide. Les vecteurs du réseau cristallin (direct) ont les dimensions d'une [longueur] ; les vecteurs du réseau réciproque ont les dimensions d'une [longueur]$^{-1}$.

I.1.2 Zone de Brillouin

L'énoncé le plus important de la condition de diffraction pour la physique de l'état solide fut donné par Brillouin. C'est la seule construction utilisée dans la théorie des bandes d'énergie pour les électrons d'un cristal et dans l'expression des excitations élémentaires des cristaux. Par raison de symétrie, la zone de Brillouin est par définition la maille de Wigner-Seitz du réseau réciproque; nous représentons les vecteurs joignant un site du réseau réciproque à tous les sites voisins, puis on dessine les plans bissecteurs perpendiculaires à ces vecteurs. Le volume le plus petit autour du site choisi limité par ces plans est appelé zone de Brillouin.

Nous pouvons construire les zones supérieures de Brillouin de la même manière, la ième zone de Brillouin est l'espace limité d'une part par les plans bissecteurs perpendiculaires aux vecteurs joignant le site à l'origine aux $i^{ème}$ sites voisins et d'autre part les plans bissecteurs des zones de Brillouin inferieures. La figure I.1 montre les zones de Brillouin du réseau réciproque de structure carrée [17].

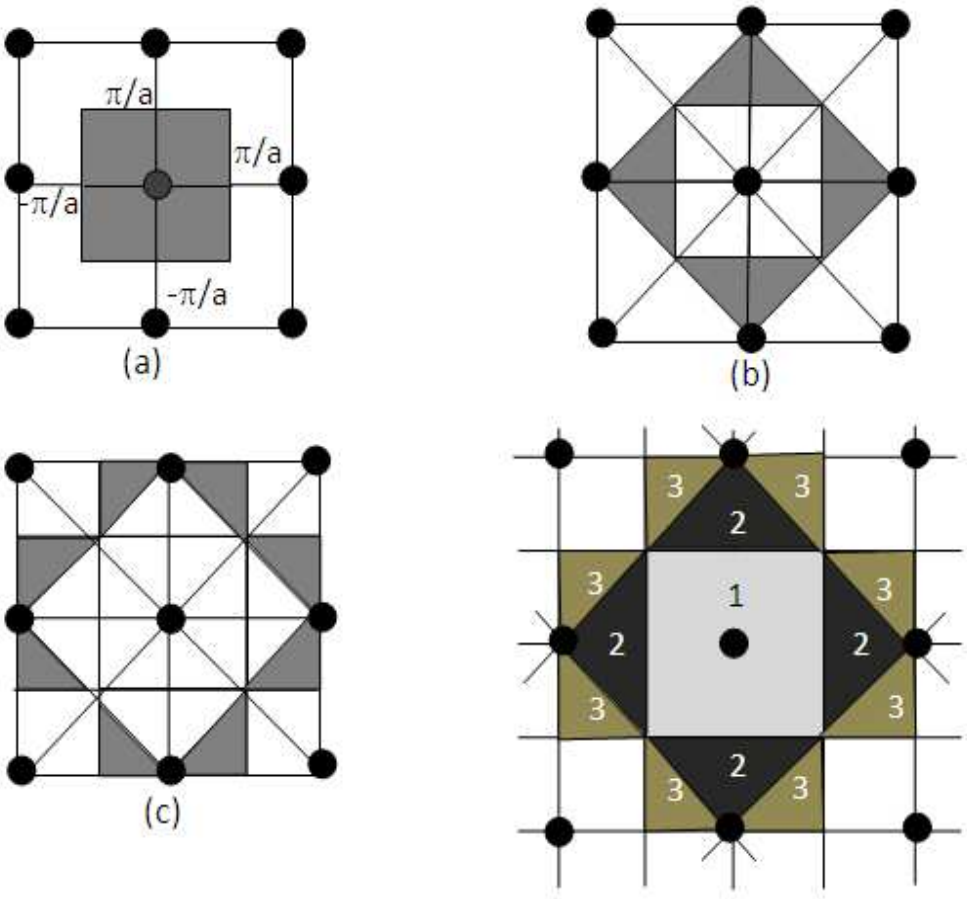


Figure I.1 (a) 1ere, (b) 2ieme, (c) 3ieme zone de Brillouin d'un réseau carré.

I.2 Ondes acoustiques et élastiques

Les ondes acoustiques et élastiques font partie de notre expérience quotidienne et de notre environnement le plus immédiat. Les ondes sonores se propagent dans l'atmosphère. Elles véhiculent la parole humaine et nous informent sur ce qui nous entoure. Les ondes acoustiques sont utilisées dans des domaines aussi bien diversifiés tels que l'imagerie échographique du corps humain, la détection et la localisation d'objets sous-marins (le sonar), l'étude des séismes…etc.

Nos téléphones portables et nos télévisions comportent des filtres électroniques exploitant des ondes acoustiques à haute fréquence dans des cristaux synthétiques exotiques. Toutes les ondes acoustiques sont composées de vibrations progressives des atomes composant le milieu de propagation; donc elles ne se propagent que dans des milieux matériels: gaz, liquide, ou solide. Notons que dans ce dernier cas, les atomes sont contraints de rester en moyenne autour de leur position d'équilibre, et l'onde se propage en mettant en mouvement une succession de plans cristallins; on parle alors d'ondes élastiques.

Dans le cas des ondes sonores dans l'air, ou des ondes acoustiques dans l'eau, les atomes du fluide ne sont pas assujettis à rester en une position donnée de l'espace, mais l'onde représente toujours un mouvement collectif communiquant d'atome en atome dans une direction donnée.

Le schéma ci-dessous indique les principales applications des ondes sonores, acoustiques et élastiques en fonction de la fréquence des signaux employés.

Figure I.2 Domaines fréquentiels des ondes acoustiques

I.2.1 Propagation des ondes dans des milieux élastiques

La théorie de l'élasticité a pour objectif d'étudier les phénomènes mécaniques mis en jeu lors de l'application d'une force à un corps donné, cette dernière affectant la forme comme le volume du corps étudié. Chaque point du corps subit donc un changement de position mesuré par un vecteur déplacement **u**. Notamment la cristallographie permet de classer les matériaux selon leurs types de symétries, chaque symétrie est directement associée à un tenseur de quatrième ordre appelé tenseur de rigidité noté C_{ijkl} et reliant les déformations S_{kl} aux contraintes T_{ij}, c'est la loi de Hooke donnée par [18] :

$$T_{ij} = C_{ijkl}.S_{kl} \ , \tag{I.4}$$

avec

$$S_{kl} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_k}{\partial x_l} + \frac{\partial u_l}{\partial x_k}\right). \tag{I.5}$$

Ce tenseur est symétrique. Ses termes non diagonaux sont reliés aux déformations par cisaillement alors que les éléments diagonaux correspondant aux allongements sont indépendants. Notons que les tenseurs de contraintes et de déformations étant symétriques $T_{ij} = T_{ji}\ et\ S_{kl} = S_{lk}$ par conséquent, la permutation des deux premiers indices ou des deux derniers indices des constantes élastiques C_{ijkl} caractérisant le matériau est telle que :

$$C_{ijkl} = C_{ijlk} = C_{ijkl} = C_{jikl}\,. \tag{I.6}$$

En termes de déplacements, la loi de Hooke, devient :

$$T_{ij} = \frac{1}{2}\, C_{ijkl}\frac{\partial u_k}{\partial x_l} + \frac{1}{2}\, C_{ijkl}\frac{\partial u_l}{\partial x_k}\,. \tag{I.7}$$

Comme $C_{ijkl} = C_{jikl}$, les deux sommations du côté droit de l'équation (I.7) sont égales, alors :

$$T_{ij} = C_{ijkl}\frac{\partial u_l}{\partial x_k}\,. \tag{I.8}$$

La relation ci-dessus réduit le nombre de constantes élastiques. En effet il est alors possible d'utiliser des notations contractées et la loi de Hooke devient :

$$T_\alpha = C_{\alpha\beta}.S_\beta \ , \tag{I.9}$$

avec $$C_{\alpha\beta} = \begin{vmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{14} & C_{25} & C_{35} & C_{45} & C_{55} & C_{56} \\ C_{16} & C_{26} & C_{36} & C_{46} & C_{56} & C_{66} \end{vmatrix}.$$

A partir de la relation fondamentale de la dynamique ; en tenant compte de la loi de Hooke et la loi de la conservation de la quantité de mouvement, l'équation du mouvement s'écrit [3] :

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} + F_i \ . \qquad \text{(I.10)}$$

ρ désigne la densité du corps (matériau) et F_i les forces extérieures mises en jeu. Une reformulation de cette dernière équation en utilisant la relation (I.8) permet d'obtenir l'équation de propagation, qui en absence de forces extérieures (F_i) se ramène à :

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = C_{ijkl} \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_j \partial x_k}. \qquad \text{(I.11)}$$

Pour un solide isotrope le tenseur des rigidités élastiques présente une invariance vis-à-vis des axes de référence du système. Cependant, les propriétés du solide sont les mêmes quelle que soit la direction de l'espace considéré. Dans ce cas, deux paramètres suffisent à caractériser la relation liant les contraintes aux déformations, il s'agit des coefficients de Lamé tel que :

$$\begin{gathered} C_{11} = C_{22} = C_{33} = \lambda + 2\mu, \\ C_{12} = C_{23} = C_{13} = \lambda, \\ C_{44} = C_{55} = C_{66} = \mu = (C_{11} - C_{12})/2. \end{gathered} \qquad \text{(I.12)}$$

Ainsi donc le tenseur des rigidités élastiques est de la forme :

$$C_{\alpha\beta} = \begin{vmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{vmatrix}$$

Les constantes élastiques sont exprimées comme suite :

$$C_{ijkl} = \lambda\delta_{ij}\delta_{kl} + \mu\left(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}\right). \quad (I.13)$$

Pour les contraintes normales :

$$T_{ii} = C_{ijkl}S_{kl} = (\lambda\delta_{kl} + 2\mu\delta_{ik}\delta_{il})S_{kl}\ . \quad (I.14)$$

Pour les contraintes tangentielles ($i \neq j$) :

$$T_{ij} = C_{ijkl}S_{kl} = \mu\left(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}\right)S_{kl}, \quad (I.15)$$

d'où $T_{ij} = 2\mu S_{ij} \quad , i \neq j.$

La combinaison des équations (I.14) et (I.15) permet de reformuler l'équation (I.4) et d'obtenir :

$$T_{ij} = \lambda S\delta_{ij} + 2\mu S_{ij}\ , \quad (I.16)$$

avec δ est le symbole de Kronecker.

En remplaçant les expressions (I.5) et les coefficients de Lamé dans l'équation (I.16), la loi de Hooke, peut s'exprimer comme suit [3] :

$$T_{ij} = C_{12}S\delta_{ij} + 2C_{44}S_{ij} = (C_{11} - 2C_{44})S\delta_{ij} + C_{44}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right), \quad (I.17)$$

d'où, l'équation de propagation s'écrit :

$$\rho\frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left[(C_{11} - C_{44})\ \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right] + C_{44}\frac{\partial^2 u_i}{\partial {x_j}^2}\ . \quad (I.18)$$

Les cristaux se répartissent dans sept systèmes qui se subdivisent en trente-deux classes. Un cristal appartenant à un système possède obligatoirement certains éléments de symétrie. Le fait que le comportement d'un cristal est le même dans toute position symétrique d'une position de référence, il diminue le nombre de constantes nécessaires à la description de ce comportement. Ainsi, le nombre de constantes de rigidité qui interviennent dans la loi de Hooke n'atteint heureusement pas le chiffre. Les fluides peuvent être traités comme des solides isotropes, moyennant une adaptation du tenseur des rigidités élastiques (injection, par exemple, des coefficients de compressibilité).

I.2.2 Différents types d'ondes

Nous avons vu que la propagation des ondes élastiques résultait d'un équilibre entre les forces appliquées au solide faisant office de milieu de propagation et les forces élastiques internes de « rappel ». Dans un volume, ces forces peuvent être des forces de compression ou de cisaillement, impliquant ainsi la propagation d'ondes du même type. Ces ondes peuvent se propager de façon découplée (milieu isotrope) ou non (solide anisotrope). Mais les milieux élastiques peuvent aussi, dans le cas où le substrat de propagation est de dimension finie, supporter d'autres types d'ondes, dont les propriétés de propagation sont liées aux conditions aux limites imposées. Nous donnons ici quelques notions générales sur la propagation des ondes élastiques dans différentes configurations.

I.2.2.1 Les ondes de Lamb

Les ondes de Lamb, (appelées aussi ondes de plaque), sont des ondes acoustiques qui se propagent dans des milieux de faible épaisseur, (de l'ordre d'une fraction de longueur d'onde). Elles peuvent être aussi la superposition de deux ondes de surface qui se propagent sans interaction, sur chacune des interfaces libres de la plaque tant que l'épaisseur de cette dernière est grande devant la longueur d'onde λ. Lorsque l'épaisseur de la plaque devient comparable à la longueur d'onde, les deux ondes de surfaces se couplent pour former une onde de Lamb qui a été mise en évidence par le géophysicien anglais Lamb en 1917 [19]. Ces ondes de plaques, sont dispersives et ont la particularité de mettre en mouvement la totalité de l'épaisseur de la plaque, et peuvent se propager sur une grande distance. Elles sont utilisées généralement pour étudier les structures de bande des cristaux phononiques d'épaisseur finie [20-22].

I.2.2.2 Ondes de Rayleigh

Si l'on impose maintenant une limite physique au milieu de propagation, comme par exemple une surface libre homogène, les conditions aux limites mécaniques comme électriques induites vont affecter les propriétés des ondes se propageant dans le milieu. Dans ce cas précis, il existe un type particulier d'ondes dont l'amplitude décroît exponentiellement avec la profondeur et n'affecte donc le substrat que sur une épaisseur de l'ordre de la longueur d'onde du mode. Ces ondes de surface présentent en effet un vecteur de déplacement dont la composante normale est évanescente. Cette famille de modes est bien connue des géophysiciens; elles sont dites ondes de Rayleigh, elles ne sont pas dispersives et présentent une atténuation quasi-nulle lors de leur propagation dans un substrat. Les ondes de Rayleigh peuvent en effet être aisément générées à la surface d'un cristal phononique [23,24].

I.3 Cristaux photoniques

C'est en 1987 que 'E. Yablonovitch, [25] et S.John, [26] introduisent pour la première fois l'idée de bandes interdites photoniques (BIP) dans les cristaux photoniques. Ces cristaux qui présentent une variation périodique d'indice de réfraction de l'ordre de la longueur d'onde, interdisent la propagation des ondes lumineuses dans certaines gammes de longueur d'onde situées à l'intérieur de la bande interdite, et ceci quel que soit l'angle d'incidence.

Il existe différents types de cristaux photoniques, à classer selon leur dimensionnalité. A une dimension, on trouve les biens connus miroirs de Bragg (*figure I.3*) formés d'une alternance de couches de bas et haut indice. Le principe des miroirs de Bragg peut être généralisé à deux ou trois dimensions, constituant des cristaux photoniques 2D ou 3D.

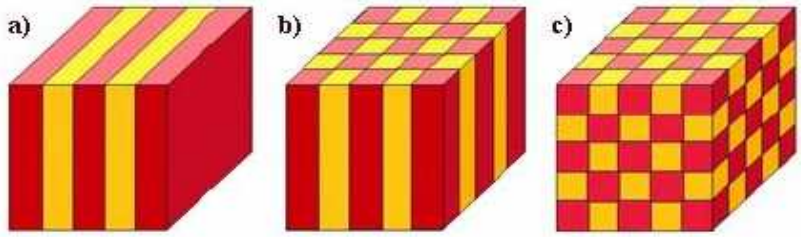


Figure I.3 représentation Schématique des cristaux photoniques 1D, 2D ou 3D Les différentes couleurs représentent des matériaux de constantes diélectriques différentes [27].

I.3.1 Les cristaux photoniques bidimensionnels

A deux dimensions, les cristaux photoniques sont composés d'un réseau périodique de piliers de diélectrique dans l'air ou de trous d'air percés dans un diélectrique. Les deux réseaux les plus courants pour l'organisation des piliers (ou des trous) sont le réseau carré et le réseau triangulaire (ou hexagonal). La figure I.4, présente ces deux réseaux avec leurs zones de Brillouin respectives [27].

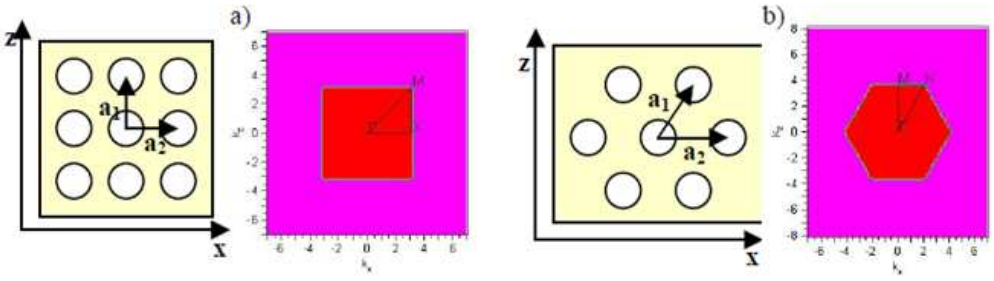


Figure I.4 a) Réseau carré et sa zone de Brillouin associée, b) Réseau triangulaire et sa zone de Brillouin associée [27].

I.3.2 Les cristaux photoniques tridimensionnels

Les cristaux photoniques tridimensionnels permettent d'obtenir une bande interdite omnidirectionnelle. Le premier cristal photonique tridimensionnels, *appelé Yablonovite*, fut fabriqué en 1991 par E. Yablonovitch [4] en perçant mécaniquement des trous selon des angles bien choisis dans un bloc de plexiglas, de façon à trouver la structure cristalline du diamant (cubique à face centrée).

Comme exemples de cristaux photoniques tridimensionnels, citons la structure «*tas de bois*» et les «*Yablonovite*», représentées sur la figure I.5 [27,28].

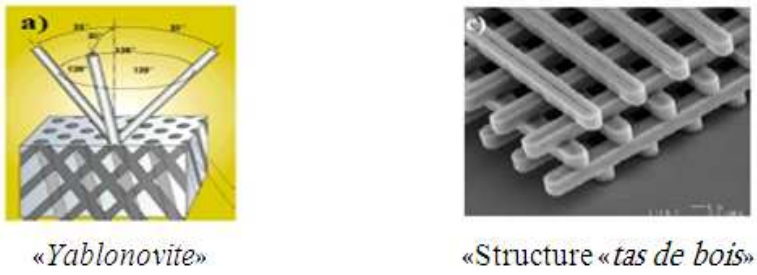


Figure I.5 Représentation des structures de la Yablonovite et de tas de bois [28].

I.3.3 Guides d'ondes à cristaux photoniques

En introduisant un défaut linéaire (omission d'une ou plusieurs rangées de trous) dans le cristal photonique, il est possible de guider la lumière selon une direction choisie. Un photon restera confiné dans le guide d'ondes si son énergie reste à l'intérieur de la bande interdite.

Des composants divers sont réalisables à partir de défauts linéaires (*figure I.6*). La transmission au travers de ces dispositifs peut être optimisée en modifiant la taille ou la forme des trous au niveau du virage ou de la jonction, afin de minimiser le couplage entre le mode guidé et les modes rayonnés au niveau des courbures [27].

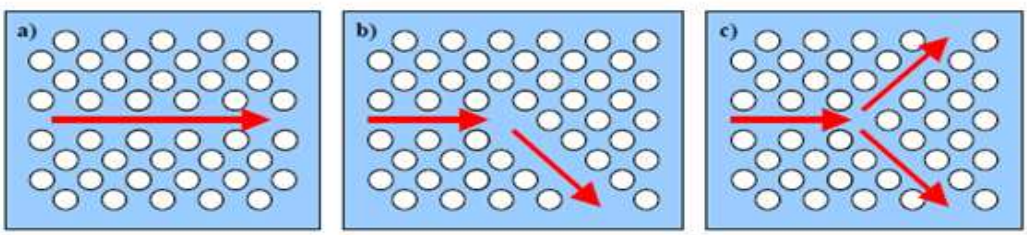


Figure I.6 Différents composants à base de défauts linéaires a)guide droit, b) virage à 120^0 et c) jonction Y

I.4 Les cristaux phononiques

Imaginez une forêt dans laquelle des arbres seraient plantés suivant un plan régulier parfaitement périodique. Dans cette forêt, le diamètre des troncs varie fort peu d'un arbre à ses voisins et la distance qui les sépare est partout rigoureusement la même. La structure périodique bidimensionnelle que forment les arbres est intuitivement similaire à un arrangement parfaitement ordonné des atomes dans un cristal, pour peu que l'on fasse abstraction de la différence d'échelle. Un promeneur suivant un chemin tracé dans cette forêt aurait la surprise de constater que les sons lui parviennent déformés. Plus précisément, d'un orchestre jouant à proximité, il entendrait distinctement les sons graves des contrebasses ou les sons aigus des violons, mais s'apercevrait que toute une partie du spectre sonore entre ces deux extrêmes manque à l'appel ! Cette atténuation d'une certaine bande de fréquence est la signature de l'existence d'une bande interdite pour le son, elle-même conséquence de l'arrangement périodique des arbres. Une telle forêt est un exemple de ce que les physiciens nomment un *cristal phononique* [6,29].

I.4.1 Qu'est-ce qu'un cristal phononique?

Les cristaux phononiques sont les analogues élastiques des matériaux à bandes interdites photoniques et ont été proposé en 1993 par Kushwaha et ses collègues de l'Université de Lille en France [30]. Ce sont des matériaux composites constitués de réseaux périodiques d'inclusions à une, deux ou trois dimensions insérées dans une matrice. Dans le domaine de fréquence d'une bande interdite, un cristal phononique se comporte comme un miroir acoustique parfaitement réfléchissant. Un excellent isolant phonique est alors obtenu si la bande interdite apparaît pour les plus basses des fréquences audibles (de 2Hz à 20 kHz).

Un cristal phononique unidimensionnel est un composite stratifié obtenu en empilant en alternance des couches de matériaux de caractéristiques physiques différentes (*propriétés élastiques différentes*). Dans ces structures unidimensionnelles, les domaines de fréquence où les bandes interdites apparaissent dépendent de la direction de propagation de l'onde incidente [2]. Ces cristaux phononiques unidimensionnels conduisent à de nombreuses applications dans l'isolation acoustique à basse fréquence. En raison de leurs structures, il est facile d'obtenir de grandes bandes interdites. La figure I.7 montre un cristal phononique unidimensionnel composé de deux matériaux différents A et B [31].

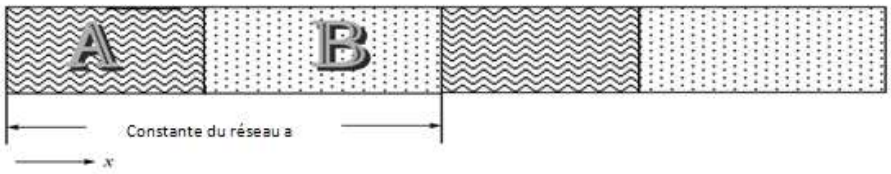


Figure I.7 Représentation schématique d'un cristal phononique unidimensionnel.

Dans le cas d'un cristal phononique bidimensionnel, les inclusions sont des cylindres de section quelconque que l'ont peut disposer par exemple suivant un réseau carré ou triangulaire (*figure I.8*). Les inclusions peuvent aussi être composées d'un matériau différent de celui de la matrice qui peut être de simples trous. L'essentiel est que la diffusion (*l'interférence*) des ondes acoustiques et/ou élastiques sur ces inclusions soit très efficace, [2].

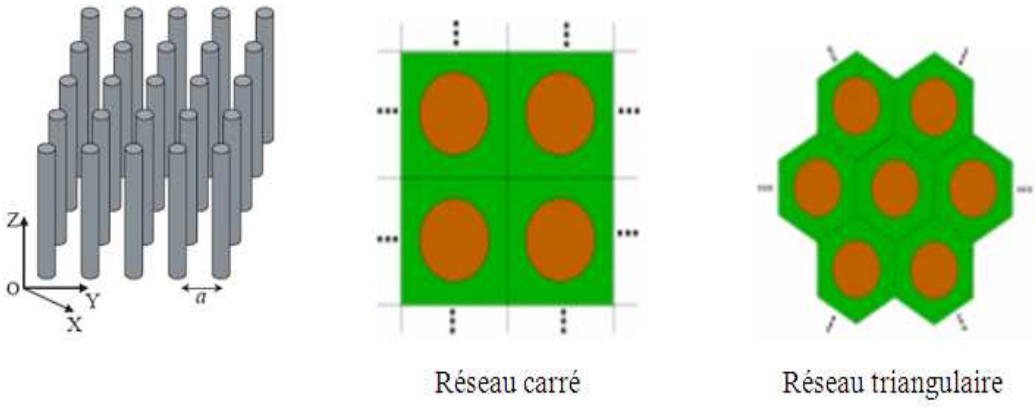


Figure I.8 Représentation schématique d'un cristal phononique à deux dimensions.

On distingue plusieurs classes de cristaux phononiques selon la nature physique des constituants, tels que les composites solide/solide (respectivement fluide/fluide) dont tous les constituants sont des solides (respectivement fluides) et les composites mixtes formés à la fois de solides et de fluides.

I.4.2 Émergence des cristaux phononiques

Depuis les travaux pionniers de 'E. Yablonovitch [25] et S. John [26] qui reposent sur l'étude des phénomènes physiques des structures périodiques de diffuseurs diélectriques (matériaux composites), autrement appelés cristaux photoniques ouvrent la voie aux premières réalisations expérimentales et la conception de composants optiques très efficaces.

Les prédictions théoriques et expérimentales ont montré que ces types de matériaux empêchent la propagation des ondes lumineuses dans une plage de fréquences ou de longueur d'ondes, qualifiée de bande interdite (*band gap*) [25,26]. Par ailleurs, une analogie a été promptement formulée afin que ces essences soient étendues à l'étude de la propagation des ondes élastiques et acoustiques dans des structures périodiques, avec des propriétés élastiques différentes; cette nouvelle classe de matériaux est qualifiée de *cristaux phononiques*.

Le point de départ de ces cristaux phononiques, postérieur à l'apparition des cristaux photoniques synthétiques, peut être fixé vers 1993. A cette date M. S. Kushwaha [30] publie un article présentant le calcul de la structure de bandes d'un matériau composite périodique bidimensionnel, dont le diagramme de bande est reproduit sur la figure I.9. Ce matériau est constitué par des cylindres d'aluminium insérés dans une matrice de nickel. Il présente une bande interdite absolue, c'est-à-dire capable de bloquer la propagation des ondes incidentes quelque soit leur direction.

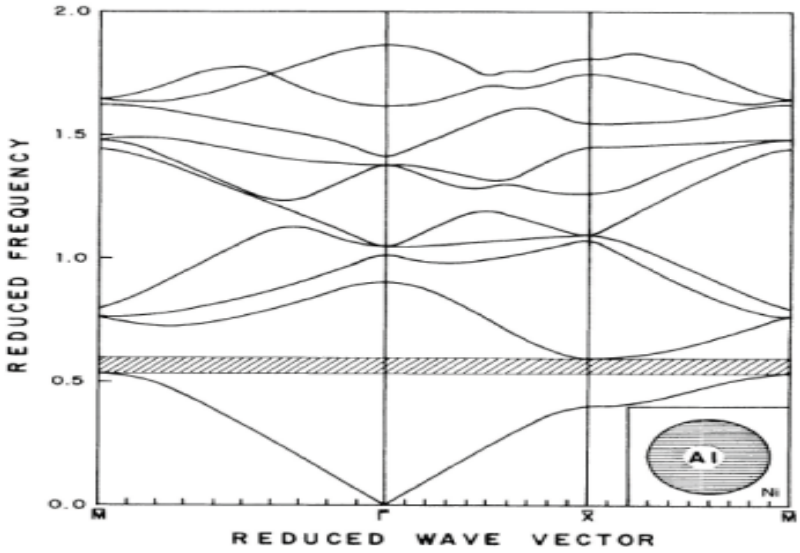


Figure I.9 Structure de bandes pour un cristal phononique parfait consistant en un arrangement de tiges d'aluminium dans une matrice de nickel

Bien après, l'étude des structures périodiques à bandes interdites phononiques fait l'objet d'un domaine de recherche d'actualité en plein développement. Les propriétés des ces bandes interdites ont été étudiées théoriquement et expérimentalement. En effet, la première démonstration expérimentale d'une bande interdite dans le domaine de l'acoustique audible a été effectuée sur une structure objectivement non prévue pour cela, puisqu'il s'agit d'une sculpture minimaliste de l'artiste Eusebio Sempere [7] (*la description de l'expérience sera décrite dans le paragraphe imminent*).

La mise en évidence des propriétés liées à la périodicité du matériau présente un intérêt certain d'un point de vue purement fondamental, les possibilités d'applications des cristaux phononiques justifient plus encore leur étude: structures antivibratoires ou encore transducteurs figurent parmi les premiers systèmes évoqués. D'autres applications évidentes sont rapidement envisagées: systèmes d'isolation phonique [8,9], structures antisismiques [32], filtrage et traitement du signal acoustique, etc.

D'un point de vue expérimental, les cristaux phononiques bénéficient en revanche d'un avantage considérable par rapport à leurs homologues optiques. Cet avantage apparaît tout d'abord à la fabrication : la structuration a lieu à des échelles macroscopiques, en rapport avec la longueur d'onde atténuée (*les ondes élastiques existent en effet sur une très large gamme de fréquence s'étendant du Hertz, dans le cas des ondes sismiques, au giga Hertz, comme dans les réseaux de télécommunication sans fil* [7]), donc aisément contrôlable. Ensuite, du point de vue de la mesure, les acousticiens ont à leur disposition l'amplitude et la phase grâce aux transducteurs piézoélectriques, tandis que les détecteurs optiques sont intrinsèquement limités à la mesure de l'intensité du champ. Enfin, les paramètres mis en jeu dans l'apparition des bandes interdites sont beaucoup plus riches en acoustique qu'en optique [33].

Une nouvelle forme des cristaux phononiques, structures périodiques constituées de matériaux piézoélectriques ou piézomagnétiques vient de se réaliser. Il convient de noter que la propagation des ondes élastiques/acoustiques, et électromagnétiques dans ces systèmes a été étudiée récemment. En outre, les cristaux phononiques composés de matériaux intelligents (par exemple, piézoélectrique, piézomagnétique, ferroélectrique, pyroélectrique,,,) ont été étudiés en profondeur, toutefois, la pluparts des études sont principalement axées sur les structures unidimensionnelles et bidimensionnelles, les cristaux phononiques tridimensionnelles reçoivent moins d'attention [34].

Ces types de cristaux phononiques sont largement utilisés en imagerie médicale, transducteurs ultrason, et dans les capteurs navals. Combinant par exemple une céramique et un polymère passif afin de concevoir des capteurs ultrasons, ce procédé offre des avantages substantiels, la nouveauté résultante ne réside pas dans les constituants mais dans la façon dont ils sont assemblés (*structure périodique*) pour produire des matériaux avec des propriétés adaptées à chaque demande spécifique [35].

Depuis, de nombreux composites pertinents ont été proposés. Dans le domaine acoustique les cristaux phononiques sont qualifiés comme cristaux soniques, ultrasoniques et hypersoniques, selon la fréquence de fonctionnement. Chaque classe mène à différentes applications et comporte différentes approches technologiques. L'objectif étant dans un premier temps de concevoir des cristaux soniques capables d'atténuer les ondes acoustiques dans les fréquences audibles [38]. Ces dernières s'étendent de 20 Hz à 20 kHz. Les cristaux phononiques se doivent de présenter des dimensions au-delà du mètre, ce qui limite grandement les possibilités de mise en place d'un tel système antibruit. Par ailleurs, dans le régime ultrasonique (*20 kHz - 1GHz*) dont les longueurs d'onde beaucoup plus courte que dans le régime sonique et puis les cristaux phononiques sont également beaucoup plus faibles(*de quelques centimètres à des fractions de millimètres*).

Dans la gamme hypersonique (*> 1 GHz*) les longueurs d'ondes sont plus courtes que celles du régime ultrasonique. Le comportement des phonons hypersonique est crucial pour de nombreux phénomènes physiques dans les matériaux, à titre d'exemple, l'interaction entre les électrons et les phonons à haute fréquence et l'interaction acousto-optique.

D'autres structures susceptibles d'atténuer largement les ondes élastiques ont été rapportées par l'équipe de Zhengyou Liu à l'université de Hong Kong [7,39]. L'idée est d'introduire localement des diffuseurs résonants qui permettent au matériau de présenter des constantes élastiques négatives dans une gamme de fréquences bien définie. Une rotation de 45 degrés de tous les diffuseurs d'un cristal de maille carrée permet d'ouvrir une large bande interdite. Avec une telle technique, il devient possible de commander à distance le filtrage d'un faisceau sonore.

Les cristaux à bande interdite totale sont également de bons candidats pour la réalisation de guides d'ondes : il est désormais possible de modifier la direction d'un faisceau sonore grâce à des guides en forme de «L» [33, 40, 41]. D'autres types d'arrangements des cristaux ont également été conçus, ils permettent de modifier la direction de propagation sans requérir de bande interdite totale [33,42].

L'intégralité de ces démonstrations théoriques et expérimentales a conduit à une croissance considérable et incontestable de beaucoup de travaux dédiés aux cristaux phononiques, engouement qui n'a cessé de croître à l'heure actuelle comme l'illustre la figure I.10 [36].

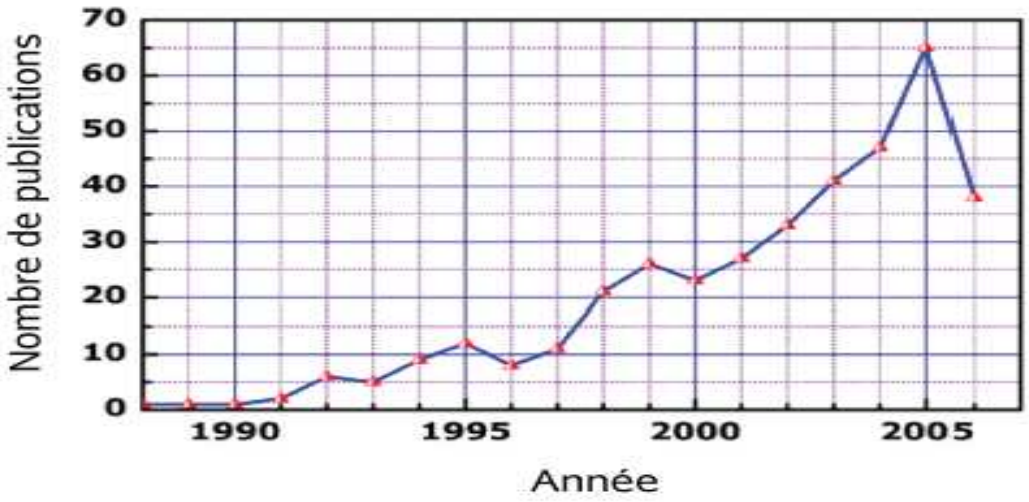


Figure I.10 Évolution du nombre de publications ayant trait aux matériaux à bandes interdites élastiques de 1988 à août 2006 [36].

I.4.3 Expérience sur la sculpture de Sempere

En 1995, Rosa Martinez-Sala, et ses collègues (J. Sancho, J. Sanchez, V. V. Gomez, J. J. Llinares, F. Meseguer) de l'université de Valence ont en effet employé comme objet de travail une sculpture minimaliste de l'artiste espagnol Eusebio Sempere exposée dans les jardins de la Juan March Fundation à Madrid [7] (*figure I.11*) ont déterminé expérimentalement les propriétés de filtrage sonore, en disposant des microphones autour de la sculpture constituée de cylindres en acier de 2,9 cm de diamètre disposés selon un réseau carré de 10 cm de paramètre de maille.

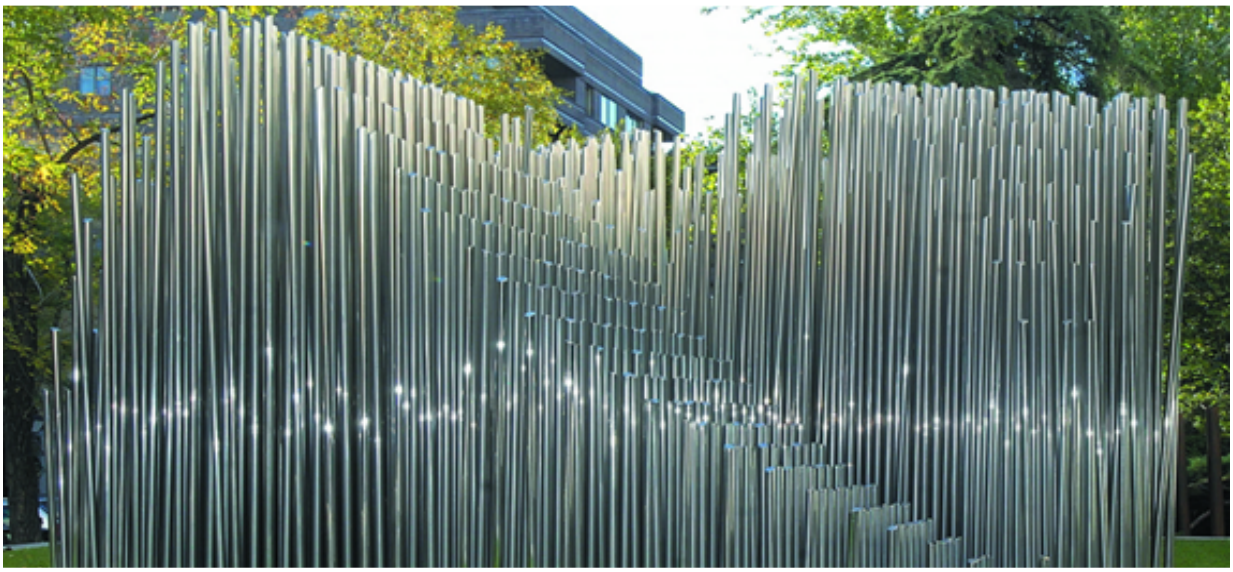


Figure I.11 Sculpture minimaliste de l'artiste Eusebio Semper [7].

Leurs mesures ont montré l'atténuation du signal transmis dans une fine gamme de fréquence autour de 2 kHz. L'atténuation réside dans les interférences entre les multiples ondes diffusées par les tubes d'acier. Du fait de la disposition périodique de ces tubes, ces interférences peuvent être constructives ou destructives suivant la fréquence des ondes. Dans le cas où les interférences sont destructives, on parle de bande interdite car les ondes acoustiques sont rapidement atténuées à la traversée du cristal phononique. Des études théoriques postérieure [7, 33, 37] montrent qu'il ne s'agit pas de bandes interdites totales, mais plutôt de pseudo-gaps (*bande interdite directionnelles*) car l'atténuation introduite par la structure dépend de la direction du vecteur d'onde incident.

I.4.4 Notion de bande interdite

La propagation des ondes mécaniques dans un milieu est généralement décrite par une relation de dispersion entre fréquence ω et vecteur d'onde k. Le mécanisme régissant la constitution de bande interdite est basé sur les réflexions de Bragg en raison de la périodicité du cristal.

En général, la régularité de l'agencement des éléments de dispersion des cristaux phononiques donne lieu à des réflexions de Bragg à l'intérieur du cristal. La notion de bande interdite peut être comprise en représentant les interférences des ondes multiplement diffusées dans le cristal phononique. L'interférence constructive ou destructive des ondes crée des gammes de fréquences pour lesquelles les ondes peuvent se propager à travers le cristal ou sont bloquées par le cristal.

Un cristal phononique unidimensionnel est un composite stratifié obtenu en empilant en alternance des couches de matériaux de caractéristiques physiques différentes. Dans ces structures unidimensionnelles, l'ensemble des diffuseurs est réparti de façon périodique, les ondes sont très fortement diffusées d'un obstacle à l'autre. Elles interfèrent de façon constructive ou destructive suivant la fréquence de l'onde incidente. Une bande interdite apparaît quand les ondes diffusées interfèrent destructivement dans une direction de propagation de l'onde incidente donnée de sorte que leur résultante décroisse lors de la traversée du cristal phononique.

Un cristal unidimensionnel n'a pas de bande interdite complète parce que ses propriétés élastiques sont périodiques dans une direction. Lorsque le vecteur d'onde se forme

perpendiculairement à la direction de propagation, il ne sera pas traduit, alors il n'y aura pas de bande interdite dans cette direction.

Dans une structure bidimensionnelle et tridimensionnelle, en revanche, il est possible d'obtenir des bandes interdites absolues ou omnidirectionnelles, c'est-à dire qu'une onde de fréquence appartenant à une telle bande interdite ne peut pas se propager, quelque soit son angle d'incidence. On peut ainsi montrer qu'un réseau cubique à faces centrées (c.f.c.) de bulles d'air dans de l'eau présente une ou plusieurs bandes interdites absolues, à condition que les sphères occupent au moins 10 % du volume total du composite. De même, en plaçant dans l'air des cubes d'acier de taille adéquate aux différents nœuds d'un réseau (c.f.c.), on peut aussi obtenir une bande interdite dans les trois directions [2].

I.4.5 Écartement du gap phononique

Comme nous l'avons indiqué dans les sections antécédentes, les ondes élastiques ou acoustiques se propagent dans les structures périodiques souvent appelés cristaux phononiques [6]. Ces derniers sont composés d'un milieu élastique, par exemple, réseau périodique de cylindres dans un système bidimensionnel insérés dans une matrice de propriété élastique différente [43]. Bien que, ces structures n'interdisent la propagation des ondes acoustiques / élastiques que dans le plan du réseau et non dans l'espace, elles sont des structures à bandes interdites phononiques. Elles se prêtent plus aisément à la réalisation de guides d'ondes et de filtres acoustiques [44].

Cependant, l'écartement de la bande interdite phononique dépend fortement de la symétrie et de la forme du diffuseur ainsi que de son orientation. Cette dépendance est une caractéristique commune aux cristaux phononiques et photoniques. L'effet de la forme et de la symétrie des diffuseurs sur le gap phononique d'un cristal phononique bidimensionnel a été étudié récemment par Kuang [43]. Par ailleurs, les cristaux phononiques peuvent être façonnés dans plusieurs réseaux principalement, hexagonaux, triangulaires et carrés ; les diffuseurs prennent des formes multiples notamment hexagones, cercles, triangles et carrés, telle que le montre la figure I.12.

Néanmoins**,** pour une symétrie donnée du réseau, l'écart de la bande interdite phononique apparait et même plus large lorsque la forme et l'orientation des diffuseurs correspondaient à celles du réseau, c'est-à-dire des diffuseurs de forme hexagonale insérés dans un réseau

hexagonal, des diffuseurs de forme carrée incérés dans uns réseau carré, des diffuseurs de forme rectangulaire incérés dans un réseau rectangulaire…etc [43].

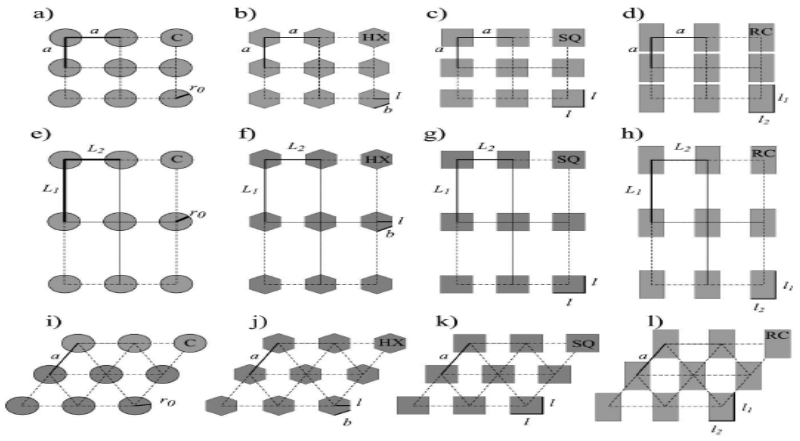


Figure I.12 Modèles des cristaux phononiques basés sur les différents types de réseaux couplant les différentes formes de diffuseurs : (a, b, c et d) réseaux carrés de paramètre a ;(e, f, g et h) réseaux rectangulaire de paramètres L_1 et L_2 ; (i, j, k, et l) réseaux triangulaire de paramètre a. en (a, b, c) les diffuseurs sous forme de cercle de rayon r_0 ;en (b, f, j) hexagone régulière de longueur latéral b ; en (c, j, k) carré ; en (d, h, l) rectangle de longueur l_1 et l_2 .

De plus, pour une forme donnée de diffuseur, le gap se manifeste également plus large et ceci lorsque le réseau a la plus grande coordination, car la symétrie du cristal n'est pas réduite par les diffuseurs, à ce moment le gap phononique peut être contrôlé en ajustant l'orientation et la taille des diffuseurs [43]. À cet effet, des études ont été effectuées dans le but de voir l'influence de certains paramètres structurels des tiges (*inclusions*) et de la matrice en particulier la densité de masse sur la bande interdite phononique, alors deux classes de cristaux phononiques se présentent ; ceux avec des tiges de haute densité insérés dans une matrice de faible densité, et ceux avec des tiges de faible densité noyées dans une matrice de haute densité. Par conséquent l'écartement du gap phononique apparait plus notable dans les structures contenant des diffuseurs de haute densité noyés dans une matrice de faible densité ; ce qui n'est pas le cas dans la seconde classe dont le gap apparait plus étroit.

Les paramètres régissant les cristaux phononiques bidimensionnels ont fait l'objet d'études approfondies ; Economou, Sigalas, Kushwaha et Halevi [33, 45,46] établissent quelques règles de base pour le dimensionnement de structures bidimensionnelles à bandes interdites complètes. Les paramètres ayant une influence significative sont la topologie du réseau, le contraste de vitesse et de densité et la fraction volumique des inclusions.

La topologie *cermet*, constituée de diffuseurs isolés, semble généralement préférable à la topologie *réseau*, dans laquelle les diffuseurs sont interconnectés. Diminuer la symétrie de la maille semble généralement fournir de bons résultats : un arrangement cubique à faces centrées est *a priori* plus favorable qu'un arrangement cubique simple ou centré. En ce qui concerne les composites solide-solide, un contraste de densité important est crucial pour l'apparition de bandes interdites totales. Plus spécifiquement, des diffuseurs de forte densité dans une matrice de faible densité semblent favorables, alors que c'est l'opposé pour les composites liquide-liquide. Quant à la fraction volumique optimale d'apparition d'une large bande interdite absolue (définie par le rapport de sa largeur sur sa fréquence centrale), s'étend de 10 à 50 %, et dépend fortement des autres paramètres [2].

I.4.6 Guidage et filtres sélectifs

Il est possible de réaliser des guides d'ondes et des filtres en fréquences très sélectifs en modifiant localement la structure périodique du cristal bidimensionnel (2D). Ainsi, en enlevant une ou plusieurs rangées de cylindres dans une structure bidimensionnelles 2D, on crée un guide creux (*figure I.13a*) permettant la propagation pratiquement sans perte d'ondes de fréquence appartenant à la bande interdite du cristal parfait [2]. De plus, en enlevant dans la direction perpendiculaire à ce guide creux un ou plusieurs cylindres, on donne naissance à un résonateur de taille finie (*figure I.13b*) qui a pour effet d'empêcher la transmission de certaines fréquences. Ces *zéros* de transmission peuvent aussi être obtenus en créant des cavités au voisinage du guide (*figure I.13c*). Des géométries de guide plus complexes peuvent être envisagées. Par exemple, en enlevant des cylindres dans deux directions perpendiculaires, on crée un guide coudé en forme de « L » (*figure I.13d*), cependant une onde de fréquence bien déterminée peut se propager en suivant la forme coudée du guide [2].

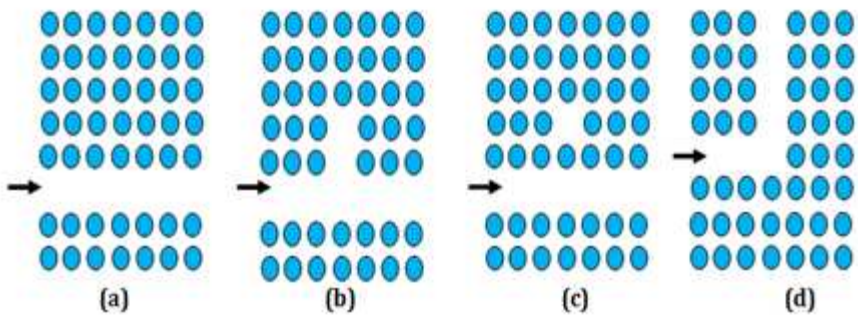


Figure I.13 Différentes géométries de guides d'onde et de filtres obtenues à partir d'un cristal phononique à deux dimensions : (a) guide linéaire, (b) résonateur, (c) cavité créée au voisinage du guide linéaire, (d) guide coudé. La flèche indique la direction de propagation du faisceau d'onde incident.

À l'égard de filtre sélectif, cela consiste à changer la nature d'une rangée de cylindres dans le cristal phononique bidimensionnel (2D). L'étude a montré qu'un système composite mixte formé d'un réseau carré de barreaux d'acier insérés dans de l'eau ; une rangée de barreaux a été remplacée par des cylindres creux dont le volume intérieur est aussi rempli d'eau et de même diamètre extérieur (*figure I.14*) [2]. Le signal se propageant dans le cristal phononique perturbé a été normalisé par le signal se propageant dans un même volume d'eau. Ainsi donc il résulte de cette normalisation des transmissions légèrement supérieures à l'unité. Le cristal phononique parfait présente une bande interdite allant de 105 à 210 kHz et il apparaît pour une fréquence de 148 kHz un pic de transmission situé à l'intérieur de la bande.

Le défaut rectiligne inséré dans la structure parfaite a donné naissance au pic de transmission, un filtre fréquentiel sélectif a été ainsi obtenu. Cette propriété peut être utilisée pour séparer à partir d'un signal incident une large bande de fréquences spécifiques. Il suffit pour cela de remplacer dans la structure parfaite plusieurs rangées de cylindres par des tubes de diamètres intérieurs différents [44,47].

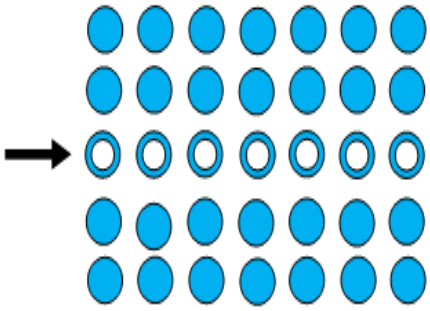


Figure I.14 Systèmes composites mixtes formés d'un réseau carré de barreaux d'acier insérés dans de l'eau ; une rangée de barreaux a été remplacée par des cylindres creux dont le volume intérieur est aussi rempli d'eau et de même diamètre extérieur. La flèche indique la direction de propagation du faisceau d'onde incident.

I.4.7 Comparaison entre les cristaux phononiques et photoniques

Les cristaux phononiques tels qu'ils sont définies auparavant, sont des structures périodiques. Cependant, il y a de fortes analogies entre la propagation des électrons dans les cristaux ordinaires et les ondes électromagnétiques et élastiques dans les cristaux photoniques et phononiques respectivement. Les propriétés fondamentales régissant la propagation des ondes électroniques, électromagnétiques et élastiques dans les structures périodiques tridimensionnelles isotropes sont résumées sur le tableau I.1 [48].

propriétés	**Cristal *électronique***	**Cristal *photonique***	**Cristal *phononique***
Matériaux	Cristallin (naturel ou obtenu par croissance)	Composé de deux matériaux diélectriques.	Composé de deux matériaux élastiques.
Paramètres	Constantes universelles nombres atomiques	Constantes diélectriques des constituants.	Densités, vitesse du son dans les constituants
Constantes de maille	1-5Å (microscopique)	0.1μm -1cm (mésoscopiques ou macroscopiques)	mésoscopiques ou macroscopiques
Ondes	De Broglie (électron) ψ	Électromagnétiques ou lumineuses (photon) E.B	Vibration ou sonores (phonon) u
Polarisation	Spin (haut et bas)	Transversale : $\nabla . D = 0$ $\nabla . E \neq 0$	Trans. Longit : $\nabla . \mathrm{u} \neq 0$ $\nabla \times \mathrm{u} \neq 0$
Équation différentielle	$\left(-\frac{\hbar}{2m}\right)\nabla^2\psi\, v(r)\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$	$\nabla^2\mathrm{E} - \nabla(\nabla\mathrm{E}) = \frac{\varepsilon(\mathrm{r})}{\mathrm{c}^2}\frac{\partial^2\mathrm{E}}{\partial \mathrm{t}^2}$	$\frac{\partial^2 u_i}{\partial^2 t} = \frac{1}{\rho}\{\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\lambda\frac{\partial u_l}{\partial x_l}\right) + \frac{\partial}{\partial x_l}[\,\mu\left(\frac{\partial u_l}{\partial x_l} + \frac{\partial u_i}{\partial x_l}\right)]\}$ milieu isotrope
Particules libres	$W = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ (electron)	$w\ \frac{c}{\sqrt{\varepsilon}}k$ (photons)	$w = c_{t,l}k$ (phonons)
Bandes interdite	Augmente avec le potentiel dans le cristal ; pas d'état électronique possible.	Augmente avec $\lvert\mathcal{E}_a - \mathcal{E}_b\rvert$; pas de photons, pas de lumière.	Augmente avec $\lvert\rho_a - \rho_b\rvert$; pas de vibration, pas de son
Gamme spectrale	Ondes radio, micro-ondes, optiques, rayons X	Micro-ondes, optique	$w \leq qq\ GHz$

Tableau I.1 Propriétés clés pour l'étude des structures de bandes dans les matériaux tridimensionnels isotropes.

Bien que la structure de bandes phononiques d'un cristal à gap phononique est analogue à la structure de bande d'un cristal à gap photonique, celle-ci est aussi analogue à la structure de bande électronique d'un semi-conducteur. Le concept de bandes interdites développé initialement dans le cadre de la théorie électronique des solides peut être étendu à d'autres types d'ondes se propageant dans les matériaux composites.

La propagation des ondes électromagnétiques et/ou élastiques acoustiques dans les matériaux composites a fait l'objet d'une attention particulière. Ces derniers en l'occurrence les cristaux photoniques et phononiques respectivement, existent naturellement, ou sont fabriqués artificiellement. Ils montrent une grande variété d'intérêt de propriétés physiques, à la fois sur le plan de la recherche fondamentale et celui de la recherche appliquée.

Les cristaux phononiques ont des propriétés qui concordent avec celles des cristaux photoniques, toute fois il existe une certaine nuance entre eux. Les cristaux photoniques peuvent être caractérisés par deux paramètres indépendants, à savoir le rapport de la fonction diélectrique et la fraction volumique occupée par un de ces composants ; tandis que pour les cristaux phononiques plusieurs paramètres peuvent déterminer la propagation des ondes, tels que : le rapport des vitesses transversales et longitudinales, la densité, la fraction volumique…etc. [49]. Dans les deux cas la propagation des ondes dépend de la structure.

En outre, ces dernières années, il a été démontré que les cristaux photoniques sous certaines conditions, se comportent comme des matériaux à indice de réfraction négatif et que ces types de matériaux peuvent être utilisés dans la fabrication de super lentilles. En parallèle, de fortes résonances apparaissent à des faibles fréquences et ceci ouvre la possibilité de produire des lentilles phoniques [49].

CHAPITRE II

METHODES DE RESOLUTION DES EQUATIONS DE PROPAGATION DES ONDES ELASTIQUES

II.1. Introduction

L'idée qu'un matériau composite constitué de réseaux périodiques d'inclusions à une, deux ou trois dimensions peut agir fortement sur la propagation des ondes élastiques ou acoustiques n'est pas ancienne. Cette nouvelle classe de matériaux est qualifiée de cristaux phononiques comme nous l'avons déjà évoqué dans le chapitre précédent. Ceci en fait un domaine de recherche d'ébullition exponentielle et en évolution permanente.

Aujourd'hui, la communauté scientifique dispose de nombreuses méthodes numériques efficaces pour simuler la propagation des ondes élastiques ou acoustiques au sein des cristaux phononiques telles que : la méthode de diffusion multiple (*multiple scattering method*) (**MSM**) [50], la méthode de la masse condensée (*lumped mass method*) (**LMM**) [51], la méthode des petites ondelettes (*wavelet based method*) (**WBM**) [52], la méthode à matrice de transfert (*transfer matrix method*) (**TMM**) [53,54], la méthode variationnelle (*variational method*) (**VM**) [55], la théorie d'adaptation des modes propres (*Eigen-mode matching theory*) (**EMMT**) [56] , la méthode des éléments finis (*finite element method*) (**FEM**) [57] incluant la méthode de développement en ondes planes (*plane wave*) (**PW**) [48,58-60], et la méthode des différences finies dans le domaine temporel (*finite difference time-domain method*) (**FDTD**) [61-63].

Toutes ces méthodes ont été développées pour déterminer les structures des bandes électroniques ; elles sont étendues pour calculer celles des cristaux photoniques et phononiques, en particulier celles des cristaux phononiques bidimensionnels.

II.2. Méthode des éléments finis

La méthode des éléments finis (**FEM**) est une méthode numérique adaptée à la résolution des équations aux dérivées partielles, elle est basée sur la description géométrique de la structure sous forme d'un maillage.

Dans le cadre de ce modèle, le cristal phononique est considéré comme un arrangement périodique infini dans les directions X et Y. Le domaine est ensuite fragmenté en cellules élémentaires indexées par la paire d'entiers (*m*, *p*), chacune étant composée d'un trou unique entouré du matériau constitutif de la matrice. Cette cellule élémentaire est ensuite divisée en éléments connectés par des nœuds. On excite alors la structure complète avec une onde plane, caractérisée par un vecteur d'onde réel *k* [7]. La méthode des éléments finis est capable de simuler des structures phononiques de dimension finie ou infinie avec ou sans défauts. Cette méthode a connu un développement prodigieux mais elle nécessite de grands espaces mémoires pour des structures à géométrie complexe.

II.3. Méthode de diffusion multiple

La méthode de diffusion multiple (**MSM**) découla de la méthode Korring- Kohn-Rostoker (**KKR**) [15,35, 50], développée initialement pour le calcul de la structure électronique des solides. Le succès de cette méthode réside dans le calcul des structures de bandes électroniques et électromagnétiques. Son application a été étendue à des problèmes acoustiques ou élastiques, pour calculer les structures de bande phononique. Elle est également susceptible de calculer la transmission de ces ondes dans les matériaux composites à structure périodiques et aléatoires ; ce qui n'est pas le cas pour la méthode de développement en ondes planes, alors que la MSM semble être numériquement efficace.

Dans un système périodique ou aléatoire formé de tiges (*diffuseurs*), par exemple, parallèles à une direction donnée, de section quelconque (circulaire, carré, rectangulaire, elliptique…) insérées dans une matrice, l'onde incidente sur chaque diffuseur est la somme des ondes diffusées par tous les autres diffuseurs. D'ou l'appellation *diffusion multiple.*

Dans ce qui suit nous détaillons les méthodes sur lesquelles s'appuiera notre travail, éventuellement la méthode de développement en ondes planes (**PWE**) et la méthode des différences finies dans le domaine temporel (**FDTD**).

II.4- Méthode de développement en ondes planes

II.4.1- Introduction à la méthode

La Méthode de développement en ondes planes(ou PWE *Plane Wave Expansion*), introduite en acoustique par Economou en 1993 [33], permet de calculer rapidement les relations de dispersion des cristaux phononiques parfaits. A l'origine, cette méthode vient du monde de la physique des solides, puisqu'elle est inspirée de la méthode dite *Augmented Plane Wave Method* (APW), qui a rencontré un grand succès pour les calculs de structures de bandes [33]. Son principe repose sur la décomposition en séries de Fourier des coefficients élastiques du milieu hétérogène, combinée à l'utilisation du théorème de Floquet-Bloch [33].

II.4.2 Description de la méthode

Dans un solide homogène et isotrope le champ de déplacement ou vecteur de déplacement élastique dépend du temps *t* et de la position $\vec{r}$, il peut se décomposer sous la forme [2]:

$$\vec{u} = \overrightarrow{u_l} + \overrightarrow{u_t}\,, \qquad \text{(II.1)}$$

$\overrightarrow{u_l}$ est la composante longitudinale c'est-à-dire parallèle à la direction de propagation de l'onde et $\overrightarrow{u_t}$ la composante transversale ou perpendiculaire à cette direction. A chaque composante $\overrightarrow{u_l}$ et $\overrightarrow{u_t}$ est associé une vitesse $C_l\, et\, C_t$ longitudinale et transversale respectivement. Un solide homogène et isotrope peut être alors caractérisé par sa densité ρ et par les deux vitesses $C_l\, et\, C_t$.

Par ailleurs, un milieu inhomogène infini, dont les constituants sont des matériaux solides supposés élastiquement isotropes. En tout point $\vec{r}$, ce milieu est caractérisé par la densité $\rho(\vec{r})$ et par les deux constantes élastiques $C_{11}(\vec{r})$ et $C_{44}(\vec{r})$. Le vecteur de déplacement élastique $\vec{u}(\vec{r},t)$ associé à la propagation de l'onde élastique satisfait l'équation suivante [2]:

$$\rho(\vec{r})\frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \vec{\nabla}\left[C_{44}(\vec{r})\,\vec{\nabla}u_i\right] + \vec{\nabla}\left[C_{44}(\vec{r})\,\frac{\partial \vec{u}}{\partial x_i}\right] + \frac{\partial}{\partial x_i}\left[\left(C_{11}(\vec{r}) - 2C_{44}(\vec{r})\right)\vec{\nabla}.\vec{u}\right], \qquad \text{(II.2)}$$

avec $u_i(i = 1,2,3)$, la composante de $\vec{u}$ selon les axes du repère cartésien (*O*, *X*, *Y*, *Z*).

En élasticité, pour un solide homogène et isotrope, les constantes élastiques C_{11} et C_{44} sont définies par les relations suivantes :

$$C_{11} = \rho C_l^2, \tag{II.3}$$

$$C_{44} = \rho C_t^2. \tag{II.4}$$

Ces deux constantes ont la dimension d'une pression, de même pour un milieu inhomogène, les constantes élastiques $C_{11}(\vec{r})$ et $C_{44}(\vec{r})$ sont données pars les expressions suivantes, [43]:

$$C_{11}(\vec{r}) = \rho(\vec{r})C_l^2(\vec{r}), \tag{II.5}$$

$$C_{44}(\vec{r}) = \rho(\vec{r})C_t^2(\vec{r}). \tag{II.6}$$

En remplaçant les équations (II.5) et (II.6) dans l'équation (II.2), cette dernière devient :

$$\rho(\vec{r})\frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \vec{\nabla}\left[\rho(\vec{r})C_t^2(\vec{r})\vec{\nabla}u_i\right] + \vec{\nabla}\left[\rho(\vec{r})C_t^2(\vec{r})\frac{\partial \vec{u}}{\partial x_i}\right],$$

$$+\frac{\partial}{\partial x_i}\left[(\rho(\vec{r})C_l^2(\vec{r}) - 2\rho(\vec{r})C_t^2(\vec{r}))\vec{\nabla}.\vec{u}\right]. \tag{II.7}$$

C_l et C_t Sont respectivement les vitesses longitudinale et transversale et ρ désigne la densité.

Dans un cristal phononique infiniment étendu, les fonctions $c_l(r)$, $\rho(r)$ et $c_t(r)$ sont invariantes par translation d'un vecteur du réseau direct. Par conséquent, leurs transformées de Fourier sur les vecteurs **G** du réseau réciproque, sont données par [43]:

$$\rho(r) = \sum_{\vec{G}} \rho(\vec{G}) e^{i\vec{G}\vec{r}}, \tag{II.8a}$$

$$C_{11}(\vec{r}) = \rho(r)c_l^2(r) = \sum_{\vec{G}} \Lambda(\vec{G}) e^{i\vec{G}\vec{r}}, \tag{II.8b}$$

$$C_{44}(\vec{r}) = \rho(r)c_t^2(r) = \sum_{\vec{G}} \tau(\vec{G}) e^{i\vec{G}\vec{r}}. \tag{II.8c}$$

L'analogie entre l'équation de propagation (II.7) et l'équation de Schrödinger [33,48], nous permet d'appliquer ici le théorème de Floquet-Bloch. Les solutions de l'équation de propagation dans un cristal phononique infini prennent donc la forme d'ondes planes (de vecteur de Bloch ***K***), modulées en amplitude par une fonction φ(r) respectant la périodicité du cristal. Cette fonction peut elle aussi s'écrire comme une série de Fourier sur les vecteurs ***G*** du réseau réciproque :

$$u(r,t) = \varphi(r)\exp(iK.r - iwt) = \exp(iK.r - iwt)\sum_{\vec{G}} u_K(\vec{G})e^{i\vec{G}\vec{r}}\,. \qquad \text{(II.9)}$$

w étant la fréquence de l'onde.

En substituant les expressions (II.8a), (II.8b), (II.8c) et(II.9) dans l'équation (II.7), l'équation du mouvement s'écrit :

$$\sum_{G'}\{\tau(G-G')u_K(G')(K+G').(K+G) + \tau(G-G')u_K(G').(K+G')(K+G) +$$
$$[\Lambda(G-G') - 2\Lambda(G-G')]u_K(G').(K+G')(K+G) - w^2\rho(G-G')u_K(G')\} = 0. \qquad \text{(II.10)}$$

Si nous permettons à *G* de prendre tout les points du réseau réciproque alors l'équation (II.10) est un ensemble infini d'équations linéaires pour les vecteurs propres $u_K(G)$. Pour une valeur donnée du vecteur de Bloch ***K*** cet ensemble d'équations a des solutions pour certaines valeurs propres $w_n(K)$ où n = 1.2..

En tenant compte de l'hypothèse que le cristal phononique en question est constitué de deux matériaux différents notés *a* et *b*, chaque maille élémentaire est composée seulement de ces deux matériaux. Les matériaux *a* et *b* sont caractérisés par leurs constantes élastiques respectivement : $\rho_a, \rho_b, c_{ta}, c_{tb}, c_{la}$ et c_{lb}. De plus les coefficients de remplissage des matériaux *a* et *b* sont notés *f* et (*f-1*) respectivement.

En revanche, les coefficients de Fourier de l'équation (II.8a) prennent une forme particulièrement simple, et s'expriment comme suite :

$$\rho(G) = V_c^{-1}\int \rho(r)e^{-iG.r}d^3r\,. \qquad \text{(II.11)}$$

L'intégration s'effectue sur toute la cellule élémentaire, V_c étant son volume, dans le cas d'un cristal bidimensionnel, que nous traiterons plus tard dans le chapitre suivant, d^3r est remplacé par d^2r et le volume V_c remplacé par l'aire de la cellule élémentaire A_c.

Pour un vecteur d'onde du réseau réciproque nul (*G = 0*), l'équation (II.11) donne simplement la densité moyenne, par conséquent :

$$\rho(G=0) = \overline{\rho} = \rho_a f + \rho_b(1-f). \qquad \text{(II.12)}$$

Pour G ≠ 0, nous pouvons écrire :

$$\rho(G) = V_c^{-1}\rho_a\int e^{-iG.r}d^3r + V_c^{-1}\rho_b\int e^{-iG.r}d^3r. \qquad \text{(II.13)}$$

La première intégration de l'équation (II.13) couvre le matériau *a*, tandis que la seconde couvre le matériau *b*, alors nous pouvons écrire l'équation (II.11) sous la forme suivante :

$$\rho(G) = V_c^{-1}\rho_b \int_{a+b} e^{-iG.r} d^3r + V_c^{-1}(\rho_a - \rho_b)\int_a e^{-iG.r} d^3r. \qquad \text{(II.14)}$$

Le deuxième terme de l'équation (II.14) correspond à la fonction de structure notée :

$$F(G) = V_c^{-1}\int_a e^{-iG.r} d^3r. \qquad \text{(II.15)}$$

Finalement, nous avons :

$$\rho(G) = \begin{cases} \rho_a f - \rho_b(1-f) \equiv \overline{\rho}, & G = 0, \\ (\rho_a - \rho_b)F(G) \equiv (\Delta\rho)F(G), & G \neq 0. \end{cases} \qquad \text{(II.16)}$$

De façon similaire les équations (II.8b) et (II.8c) donnent :

$$\Lambda(G) = \begin{cases} \rho_a c_{la}^2 f - \rho_b c_{lb}^2(1-f) \equiv \overline{\rho c_l^2} \equiv \overline{\Lambda}, & G = 0, \\ (\rho_a c_{la}^2 - \rho_b c_{lb}^2)F(G) \equiv (\Delta\rho c_l^2)F(G) \equiv (\Delta\Lambda)F(G), & G \neq 0, \end{cases} \qquad \text{(II.17)}$$

$$\tau(G) = \begin{cases} \rho_a c_{ta}^2 f - \rho_b c_{tb}^2(1-f) \equiv \overline{\rho c_t^2} \equiv \overline{\tau}, & G = 0, \\ (\rho_a c_{ta}^2 - \rho_b c_{tb}^2)F(G) \equiv (\Delta\rho c_t^2)F(G) \equiv (\Delta\tau)F(G), & G \neq 0. \end{cases} \qquad \text{(II.18)}$$

Finalement, si nous égalons le terme G' à G dans la sommation de l'équation (II.10), celle-ci peut être réécrite comme ceci :

$$\begin{aligned} &(\overline{\tau}\,|K+G|^2 - \overline{\rho}w^2)u_K(G) + \left(\overline{\Lambda} - \overline{\tau}\right)(K+G)(K+G).u_K(G) + \\ &\quad \sum_{G\neq G'} F(G-G')\{(\Delta\tau)[(K+G).(K+G')u_K(G') + (K+G)(K+G').u_K(G') - \\ &2(K+G)(K+G').u_K(G')] + (\Delta\Lambda)(K+G)(K+G').u_K(G') - (\Delta\rho)w^2u_K(G')\} = 0 \end{aligned} \qquad \text{(II.19)}$$

La relation de dispersion $w(k)$ s'obtient donc en résolvant l'équation ci-dessus pour chaque vecteur de Bloch ***K***. Toutefois la résolution d'une telle équation est compliquée. La difficulté réside dans l'inséparabilité des différents modes de vibration.

De nombreuses méthodes de calcul ont été mises en œuvre afin de permettre le dimensionnement ou la prédiction du comportement des ondes élastiques au cours de leur propagation dans des cristaux phononiques. Après avoir rappelé la méthode de développement en ondes planes, nous nous attachons ici à donner quelques rappels sur la méthode des différences finies, communément désignée par l'acronyme anglais FDTD (*Finite Difference Time Domain*), qui a été largement employée pour le traitement théorique de ces cristaux phononiques.

II.5 -La méthode des différences finies dans le domaine temporel

II.5.1 -Introduction à la méthode FDTD

La méthode des différences finies permet une résolution numérique rigoureuse des équations de Maxwell pour les ondes électromagnétiques dans les cristaux photoniques. Les champs électrique et magnétique sont échantillonnés dans le domaine de calcul en utilisant le maillage de Yee [7] de façon à pouvoir appliquer un schéma de différences finies centrées. Elle a été introduite pour les cristaux phononiques par Sigalas et Garcia, [7] pour pallier aux problèmes de convergence numérique initialement rencontrés lors du calcul de diagrammes de bandes pour des systèmes mixtes (inclusions liquides dans une matrice solide ou inversement) par la méthode de décomposition en ondes planes [18].

La FDTD présente un avantage considérable par rapport à sa consœur permettre de modéliser une onde incidente sur un cristal phononique que l'on peut spécifier comme étant de dimension finie, sous la forme de paquets d'ondes, résultant en un système d'excitation plus proche de l'expérience qu'un modèle d'ondes planes. Cette méthode a été préalablement exploitée pour la simulation de matériaux périodiquement structurés, en particulier pour les cristaux photoniques, à l'image des travaux de Chan et al. [64] ou encore de Fan et al. [65].

Le principe consiste de façon très sommaire à discrétiser dans le domaine spatial comme temporel les équations constitutives du problème ; à fixer des conditions aux limites adaptées et à calculer de manière explicite l'évolution dans le domaine temporel d'une grandeur physique, à considérer par exemple le champ électrique ou magnétique dans le cas d'un cristal photonique, ou le champ de déplacement ou de vitesse dans celui d'un cristal phononique.

II.5.2-Description de la méthode

L'équation de propagation des ondes élastiques dans un solide inhomogène et isotrope est donnée par l'équation(II.7).

$$\frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{1}{\rho}\left\{\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\lambda\frac{\partial u_l}{\partial x_l}\right) + \frac{\partial}{\partial x_l}\left[\mu\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_l} + \frac{\partial u_l}{\partial x_i}\right)\right]\right\}.$$

Cette équation peut être reformulée sous une forme condensée comme suit [31,51] :

$$\frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{1}{\rho}\frac{\partial T_{ij}}{\partial x_i}, \qquad \text{(II.20)}$$

avec $T_{ij} = \lambda(r)u_{ll}\delta_{ij} + 2\mu(r)u_{ij},$ (II.21.a)

$$u_{ij} = \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right)/2. \quad \text{(II.21.b)}$$

Dans les expressions ci-dessus :

u_i : représente la i^{ieme} composante du vecteur du déplacement élastique $u(r)$.

u_{ij} : Le tenseur de déformation

T_{ij} : Le tenseur de contrainte

$\lambda(r), \mu(r)$ sont les coefficients de Lamé, $\rho(r)$ est la densité massique.

$\lambda, \mu \; et \; \rho$ sont reliées aux vitesses de propagations des ondes élastiques dans le milieu considéré par les relations suivantes :

$$\mu = \rho C_t^2, \quad \text{(II.23)}$$

$$\lambda = \rho(C_l^2 - 2C_t^2). \quad \text{(II.24)}$$

$C_l \; et \; C_t$ sont les vitesses longitudinale et transversale respectivement.

Nous traitons ici le cas d'un cristal phononique bidimensionnels infini dans une direction donnée par exemple suivant *Z*. Pour un tel système, il existe une symétrie de translation le long de l'axe *Z*, et les coefficients $\lambda(r), \mu(r)$ et $\rho(r)$ ne dépendent pas de Z. L'équation de propagation de l'onde pour la composante *z* est alors découplée des équations d'ondes pour les composantes *x* et *y*. Les équations décrivant les composantes *x* et *y* s'écrivent [35,61] :

$$\frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = \frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial T_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial T_{xy}}{\partial y}\right), \quad \text{(II.25)}$$

$$\frac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} = \frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial T_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial T_{yy}}{\partial y}\right), \quad \text{(II.26)}$$

avec, $T_{xx} = (\lambda + 2\mu)\frac{\partial u_x}{\partial x} + \lambda\frac{\partial u_y}{\partial y}, \quad \text{(II.27)}$

$$T_{yy} = (\lambda + 2\mu)\frac{\partial u_y}{\partial y} + \lambda\frac{\partial u_x}{\partial x}, \quad \text{(II.28)}$$

$$T_{xy} = \mu\left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x}\right). \quad \text{(II.29)}$$

Ces équations constituent la base de la méthode FDTD dans les systèmes bidimensionnels, l'application de cette dernière consiste à diviser le domaine de simulation en $i_{max} \times j_{max}$ subdomaines (*grilles*) avec des dimensions $\Delta x, \Delta y$ et les composantes du vecteur de déplacement élastique sont discrétisées, définies comme suit :

$$u_l(i,j,k) = u_l(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta t), \quad \text{(II.30)}$$

avec, $l = x, y \;, 1 \le i \le i_{max} \;,\; 1 \le j \le j_{max} \; et \; k \ge 0.$

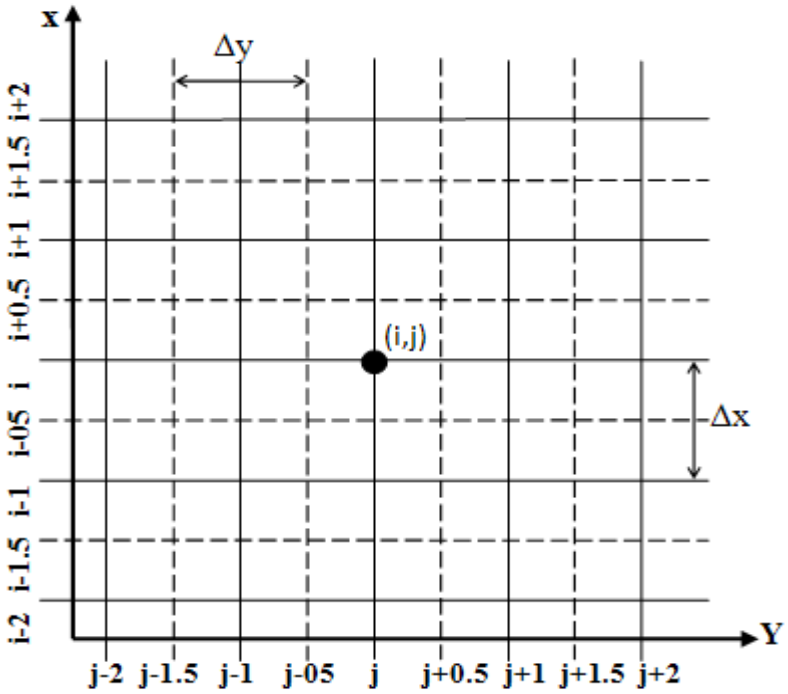


Figure II.1 Grille FDTD bidimensionnelle.

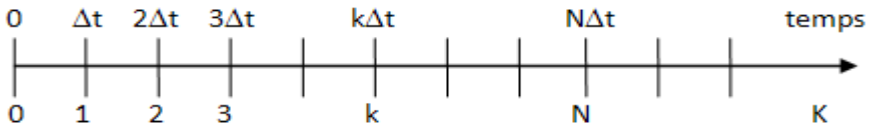


Figure II.2 Echantillonnage temporel.

Les équations (II.25) à (II. 29) citées ci-dessus, leurs dérivées spatiales et temporelles sont approximées par les différences finies telles que [35-61] :

Pour les dérivées spatiales, nous utilisons les différences centrées (*central differences*) :

$$\left.\frac{\partial u_l}{\partial x}\right|_{i,j,k} \approx D_0^x u_l(i,j,k) = \left[u_l\left(i+\tfrac{1}{2},j,k\right) - u_l\left(i-\tfrac{1}{2},j,k\right)\right]/\Delta x, \qquad \text{(II.31)}$$

$$\left.\frac{\partial u_l}{\partial y}\right|_{i,j,k} \approx D_0^y u_l(i,j,k) = \left[u_l\left(i,j+\tfrac{1}{2},k\right) - u_l\left(i,j-\tfrac{1}{2},k\right)\right]/\Delta y. \qquad \text{(II.32)}$$

Pour les dérivées temporelles, nous utilisons les différences en avant et en arrière (*forward and backward differences*) :

$$\left.\frac{\partial^2 u_l}{\partial t^2}\right|_{i,j,k} \approx D_+^t D_-^t u_l(i,j,k), \qquad \text{(II.33)}$$

avec,

$$D_{+}^{t}u_l(i,j,k) = [u_l(i,j,k+1) - u_l(i,j,k)]/\Delta t, \quad \text{(II.34)}$$

$$D_{-}^{t}u_l(i,j,k) = [u_l(i,j,k) - u_l(i,j,k-1)]/\Delta t. \quad \text{(II.35)}$$

A partir de l'équation (II.25), en utilisant l'expansion à (*i*, *j*, *k*) et en suivant la procédure décrite plus haut nous obtenons :

$$u_x(i,j,k+1) = 2u_x(i,j,k) - u_x(i,j,k-1)$$

$$+\frac{\Delta t^2}{\rho(i,j)\Delta x}\left[T_{xx}\left(i+\tfrac{1}{2},j,k\right) - T_{xx}\left(i-\tfrac{1}{2},j,k\right)\right]$$

$$+\frac{\Delta t^2}{\rho(i,j)\Delta y}\left[T_{xy}\left(i,j+\tfrac{1}{2},k\right) - T_{xy}\left(i,j-\tfrac{1}{2},k\right)\right] \quad \text{(II.36)}$$

De même, à partir de l'équation (II.26), en faisant l'expansion à (*i+1/2*, *j+1/2*, *k*), nous obtenons :

$$u_y\left(i+\tfrac{1}{2},j+\tfrac{1}{2},k+1\right) = 2u_y\left(i+\tfrac{1}{2},j+\tfrac{1}{2},k\right) - u_y\left(i+\tfrac{1}{2},j+\tfrac{1}{2},k-1\right),$$

$$+\left\{\frac{\Delta t^2}{\rho(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2})\Delta x} \times \left[T_{xy}\left(i+1,j+\tfrac{1}{2},k\right) - T_{xy}\left(i,j+\tfrac{1}{2},k\right)\right]\right\},$$

$$+\left\{\frac{\Delta t^2}{\rho(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2})\Delta y} \times \left[T_{yy}\left(i+\tfrac{1}{2},j+1,k\right) - T_{yy}\left(i+\tfrac{1}{2},j,k\right)\right]\right\}. \quad \text{(II.37)}$$

II.5.3 Discrétisation du tenseur de contrainte

Les composantes du tenseur des contraintes $T_{xx}, T_{yy}\ et\ T_{xy}$ peuvent s'écrire suivant le même principe que nous avons développé pour discrétiser le vecteur du déplacement élastique et cela à partir de l'équation (II.21a). Leurs expressions après discrétisation sont données par [35] :

$$T_{xx}\left(i+\tfrac{1}{2},j,k\right)=(\lambda+2\mu)\left(i+\tfrac{1}{2},j\right)\times\left[\frac{u_x(i+1,j,k)-u_x(i,j,k)}{\Delta x}\right],$$

$$+\lambda\left(i+\tfrac{1}{2},j\right)\times\left[\frac{u_y\left(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k\right)-u_y\left(i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k\right)}{\Delta y}\right]. \quad \text{(II.38)}$$

$$T_{xx}\left(i-\tfrac{1}{2},j,k\right)=(\lambda+2\mu)\left(i-\tfrac{1}{2},j\right)\times\left[\frac{u_x(i,j,k)-u_x(i-1,j,k)}{\Delta x}\right],$$

$$+\lambda\left(i-\tfrac{1}{2},j\right)\times\left[\frac{u_y\left(i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k\right)-u_y\left(i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k\right)}{\Delta y}\right]. \quad \text{(II.39)}$$

$$T_{yy}\left(i+\tfrac{1}{2},j+1,k\right)=(\lambda+2\mu)\left(i+\tfrac{1}{2},j+1\right)\times\left[\frac{u_y\left(i+\frac{1}{2},j+\frac{3}{2},k\right)-u_y\left(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k\right)}{\Delta y}\right],$$

$$+\lambda\left(i+\tfrac{1}{2},j+1\right)\times\left[\frac{u_x(i+1,j+1,k)-u_x(i,j+1,k)}{\Delta x}\right]. \quad \text{(II.40)}$$

$$T_{yy}\left(i+\tfrac{1}{2},j,k\right)=(\lambda+2\mu)\left(i+\tfrac{1}{2},j\right)\times\left[\frac{u_y\left(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k\right)-u_y\left(i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k\right)}{\Delta y}\right],$$

$$+\lambda\left(i+\tfrac{1}{2},j\right)\times\left[\frac{u_x(i+1,j,k)-u_x(i,j,k)}{\Delta x}\right]. \quad \text{(II.41)}$$

$$T_{xy}\left(i,j+\tfrac{1}{2},k\right)=\mu\left(i,j+\tfrac{1}{2}\right)\times\left[\frac{u_x(i,j+1,k)-u_x(i,j,k)}{\Delta y}\right]+\mu\left(i,j+\tfrac{1}{2}\right)\times\left[\frac{u_y\left(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k\right)-u_y\left(i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k\right)}{\Delta x}\right]. \quad \text{(II.42)}$$

$$T_{xy}\left(i,j-\tfrac{1}{2},k\right)=\mu\left(i,j-\tfrac{1}{2}\right)\times\left[\frac{u_x(i,j,k)-u_x(i,j-1,k)}{\Delta y}\right]+\mu\left(i,j-\tfrac{1}{2}\right)\times\left[\frac{u_y\left(i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k\right)-u_y\left(i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k\right)}{\Delta x}\right]. \quad \text{(II.43)}$$

$$T_{xy}\left(i+1,j+\tfrac{1}{2},k\right)=\mu\left(i+1,j+\tfrac{1}{2}\right)\times\left[\frac{u_x(i+1,j+1,k)-u_x(i+1,j,k)}{\Delta y}\right],$$

$$+\mu\left(i+1,j+\tfrac{1}{2}\right)\times\left[\frac{u_y\left(i+\frac{3}{2},j-\frac{1}{2},k\right)-u_y\left(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k\right)}{\Delta x}\right]. \quad \text{(II.44)}$$

$$\mathrm{T_{xy}}\left(\mathrm{i,j}+\tfrac{1}{2},\mathrm{k}\right)=\mu\left(\mathrm{i,j}+\tfrac{1}{2}\right)\times\left[\frac{\mathrm{u_x(i,j+1,k)-u_x(i,j,k)}}{\Delta y}\right]+\mu\left(\mathrm{i,j}+\tfrac{1}{2}\right)\times\left[\frac{\mathrm{u_y\left(i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k\right)-u_y\left(i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k\right)}}{\Delta x}\right]. \quad \text{(II.45)}$$

La discrétisation présentée dans les équations précédentes assure de manière précise la dérivée centrale du second degré pour la dérivée spatiale. Cependant, ceci a comme conséquence, les composantes du champ de déplacement ou vecteur de déplacement élastique u_x *et* u_y ont été centrées dans les différents points de l'espace, (i,j) pour u_x et $(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2})$ pour u_y. Pour calculer les composantes $u_x\left(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k\right)$ du champ du déplacement qui ne sont pas enregistrées en mémoire, nous utilisons l'expression suivante :

$$u_x\left(i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k\right)=[u_x(i+1,j+1,k)+u_x(i+1,j,k)+u_x(i,j+1,k)+u_x(i,j,k)]/4.$$

Les u_x et u_y à l'étape *k+1* sont calculées à partir de leur valeurs de l'étape *k.*

II.5.3 Critère de stabilité.

Afin d'assurer la stabilité des calculs, un critère de stabilité est utilisé [35] :

$$\Delta t \leq 0.5/c\sqrt{\frac{1}{\Delta x^2}+\frac{1}{\Delta y^2}} \qquad \text{(II.46)}$$

La vitesse *c* est plus élevée que les vitesses des ondes élastiques des composés du composite, et $\Delta x, \Delta y$ sont souvent choisis comme *1/n* du paramètre du réseau.

De plus, pour le calcule de la bande interdite (*le gap phononique*) dans les structures périodiques dans le plan X-Y, il est plus commode de supposer qu'une distribution d'un champ initial satisfait au théorème de *Bloch* à l'instant t = 0 ; ce qui est compatible aux conditions aux limites périodiques, celles-ci seront traitées en détail dans le chapitre suivant lors du calcul de la relation de dispersion du cristal phononique. Les résultats obtenus dans le domaine temporel sont ensuite transformés dans le domaine de fréquences par la transformation de Fourrier [61, 66,67].

II.6 Organigrammes de calcul.

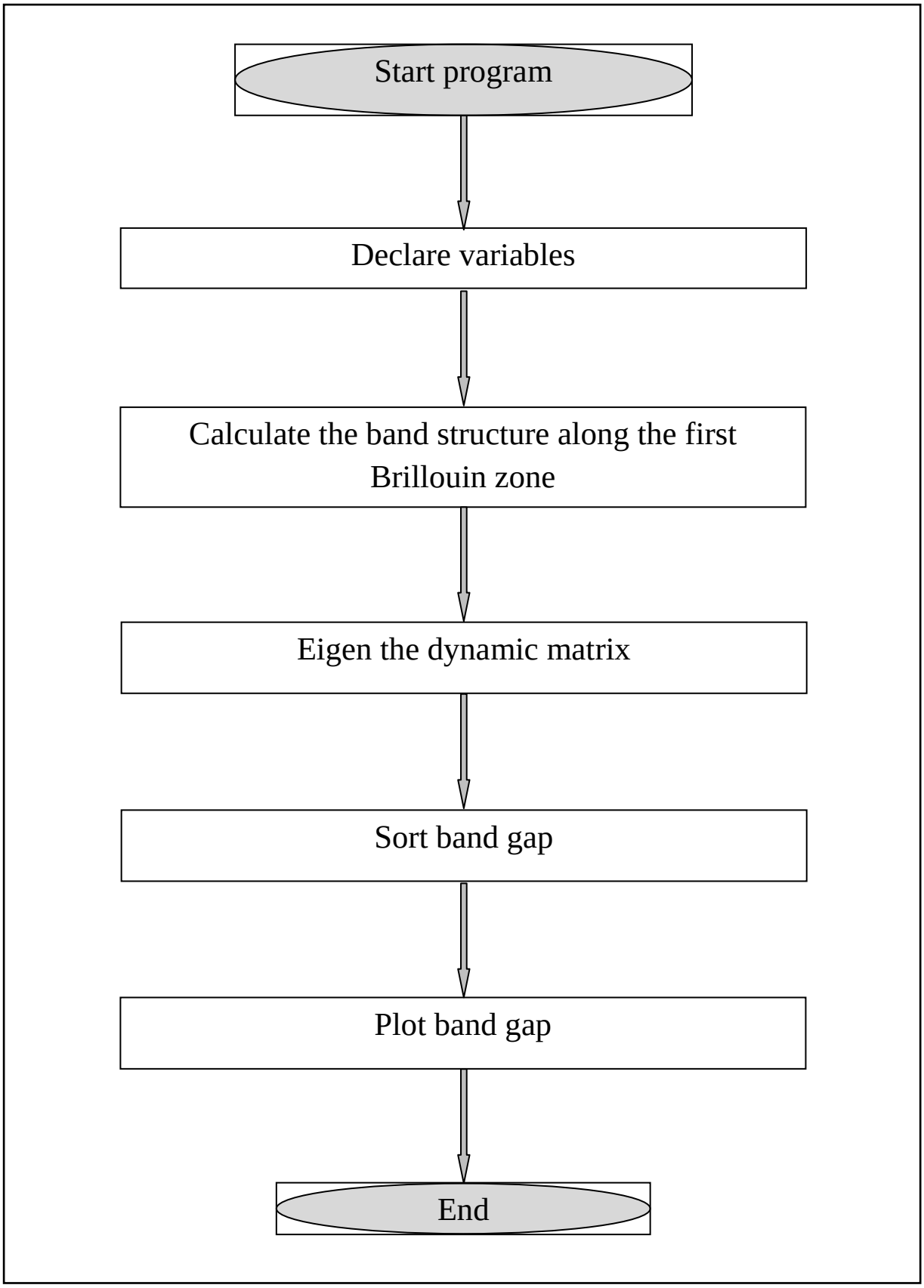


Figure II.3 Organigramme de calcul pour la PWE

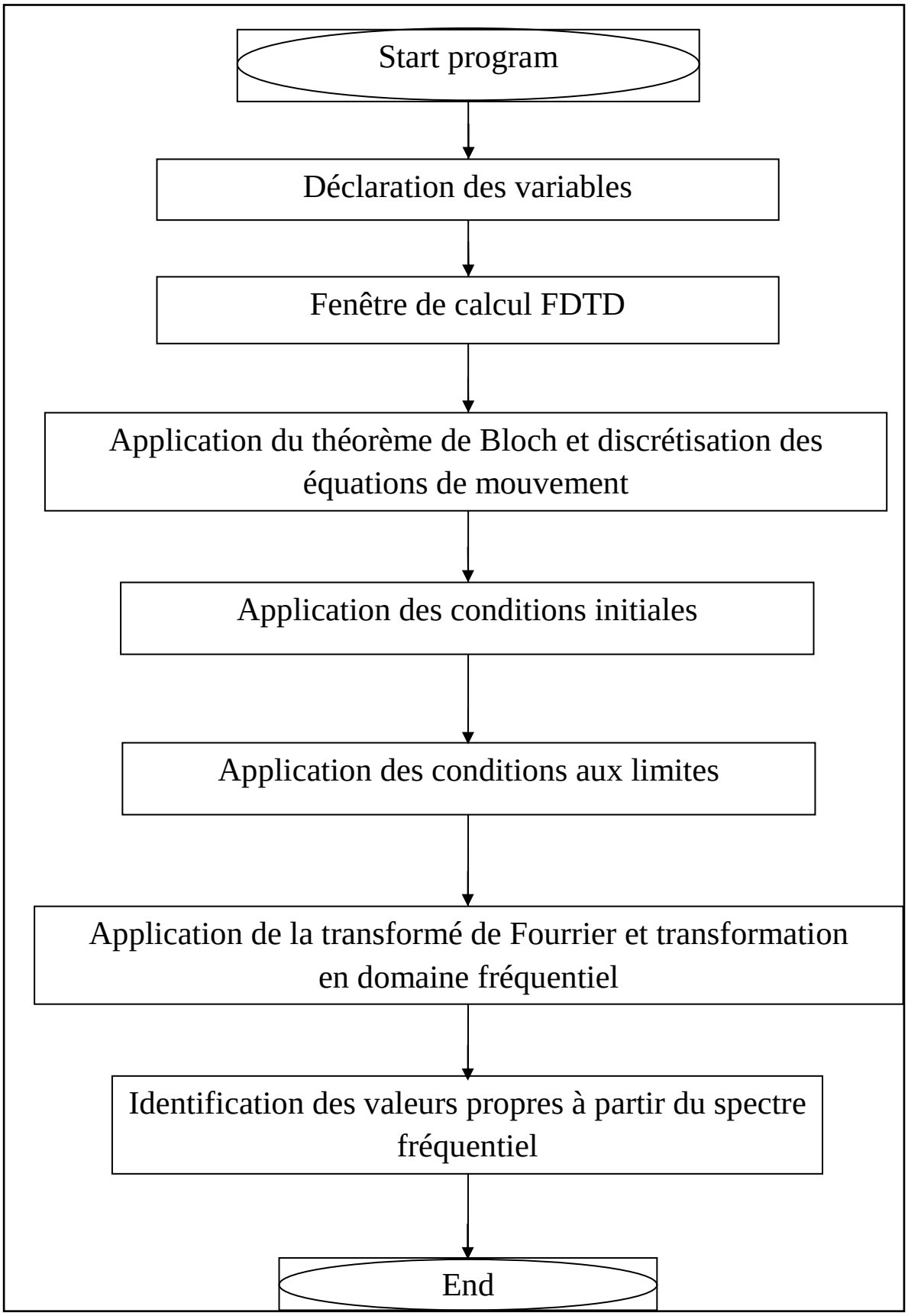


Figure II.3 Organigramme de calcul pour la FDTD.

Conclusions

L'idée qu'un matériau composite constitué de réseaux périodiques d'inclusions à une, deux ou trois dimensions pouvant agir fortement sur la propagation d'ondes élastiques ou acoustiques est d'actualité. Cette nouvelle classe de matériaux est qualifiée de cristaux phononiques. Ceux-ci ont fait un domaine de recherche d'ébullition exponentielle et en évolution permanente. Un grand nombre de structures périodiques a été étudié et des approches théoriques variées ont été employées. Toutes ont mis en évidence l'existence de propriétés physiques telles que la présence de bandes interdites correspondant à une forte atténuation des bandes passantes.

Le travail présenté dans ce mémoire, s'inscrit dans le cadre d'une contribution à l'étude théorique liée à la propagation d'ondes élastiques dans les cristaux phononiques bidimensionnels. Dans ce travail, nous avons calculé les relations de dispersion d'un cristal phononique bidimensionnels, constitué de cylindres en Duralumin disposés suivant un réseau carré ou triangulaire insérés dans une matrice d'époxy dans le cas d'une polarisation transversale. Et ce, en utilisant les deux méthodes sur lesquelles s'est appuyé notre travail, en l'occurrence la méthode d'ondes planes (PWE) et la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD).

Dans un premier temps, nous avons effectué un rappel sur les structures périodiques en passant par les cristaux photoniques, l'émergence des cristaux phononiques et leurs applications, par la suite nous avons décris en détail les deux méthodes cités plus haut.
Le deuxième volet de notre travail est dédié aux calculs des propriétés physiques liées à la propagation d'ondes élastiques dans un cristal phononique (duralumin/époxy). Des calculs numériques montrent l'existence de bandes interdites complètes indépendamment da la direction de propagation, toutefois il existe des bandes interdites non absolues dépendantes de la direction de propagation.

Les relations de dispersion ont été calculées en premier lieu en utilisant la méthode FDTD, les résultats obtenus en utilisant la méthode d'ondes planes (PWE) coïncident parfaitement avec les résultats obtenus en utilisant la première méthode(FDTD).

La méthode de développement en ondes planes permet de déterminer rapidement la structure de bandes, cependant le reste du travail de ce mémoire a été effectué en utilisant cette dernière, notamment pour l'étude de l'influence des paramètres du système sur les gaps.

Nous avons vu l'influence des paramètres du système sur le gap, tel que l'effet de la structure sur la bande phononique ; deux types de structures ont été étudiés, le réseau carré et le réseau triangulaire. Dans ces deux cas de figure il existe des bandes interdites complètes s'étendant sur toute la zone de Brillouin, indépendamment de la direction de propagation. Le plus grand nombre de gaps apparait dans la structure triangulaire.

Par ailleurs, l'étude a été étendue à d'autres paramètres tels que le paramètre de maille, le rayon des cylindres et la fraction volumique. L'influence de ces derniers sur les gaps se traduit par l'apparition de deux grandes larges bandes interdites. Elles s'étalent sur une large gamme de paramètres influant et elles s'étendent du domaine sonique au domaine ultrasonique et ce pour les deux cas de structure triangulaire et carrée.

Enfin nous avons terminé nos calculs par l'influence de la densité des cylindres sur le gap et parallèlement l'influence de la densité de la matrice. Dans le premier cas, pour des cylindres de haute densité insérés dans une matrice de faible densité la largeur du gap a été augmenté tandis que dans le cas des cylindres de faible densité insérés dans une matrice a forte densité, la largeur du gap est très étroite, quasiment nul. L'écartement de la bande interdite dépend de la structure d'arrangement des cylindres, de la fraction volumique et de la densité du milieu. Les structures possédant ce type de bandes interdites peuvent avoir des applications dans différents domaines tels que les transducteurs, les guides d'ondes ou encore les filtres fréquentiels à haute sélectivité.

Ce travail, limité au calcul de la bande interdite pour des structures carrées et triangulaires dans le cas d'une polarisation transversale peut être étendu à d'autres configurations comme les structures hexagonales ; idem pour la forme des inclusions, dans le cas d'une polarisation mixte. D'autres études s'avèrent nécessaires et porteront sur : l'étude des cristaux anisotropes et des cristaux piézoélectriques qui sont largement utilisés en pratique ainsi que sur l'étude de la diffusion d'ondes élastiques lorsqu'on introduit des défauts dans la structure, tout cela entrent dans nos perspectives.

ANNEXE

Zones de Brillouin

Cette annexe a pour but de fournir quelques définitions fondamentales ayant trait aux réseaux périodiques et en particulier à la notion de zone irréductible de Brillouin. Elle est largement inspirée d'ouvrages traitant de la physique des semi-conducteurs, auxquels nous suggérons au lecteur de se reporter pour de plus amples détails [18].

La cellule de Wigner-Seitz est une cellule primitive rendant compte de la symétrie élémentaire de la maille du système étudié. Elle possède donc la symétrie du réseau de bravais. D'un point de vue géométrique, sa construction s'effectue dans le réseau direct en trois étapes, illustrées sur la figure A.1 :

On définit un point origine dans la maille cristalline, à partir duquel on vient tracer des segments liant ce point à ses voisins immédiats,
On trace ensuite les bissectrices à ces lignes de construction,
Le plus petit polyhèdre compris entre les dites bissectrices est la cellule de wigner-seitz du cristal.

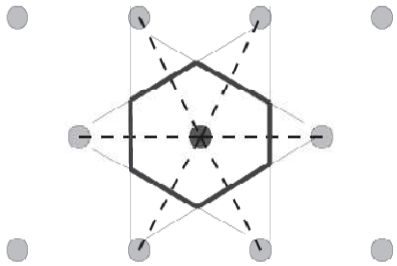


Figure. A.1 : Méthode de construction de la cellule de Wigner-Seitz.

La première zone de Brillouin est l'équivalent direct de cette cellule de Wigner-Seitz pour le réseau réciproque1. Le tableau A.1 montre les cellules de Wigner-Seitz pour les réseaux cubiques centrés (CC) et cubique à faces centrées (FCC), ainsi que leurs homologues dans le réseau réciproque.

On remarque que le réseau CC se mue en FCC et respectivement. La première zone de Brillouin ne définit pas nécessairement le volume élémentaire du réseau dans l'espace réciproque. Dans certains cas, du fait de symétries additionnelles propres au cristal concerné, il est possible de définir une zone de Brillouin irréductible, soit une partie de la première zone de Brillouin qui autorise la reconstruction du réseau réciproque dans son intégralité. Cette zone contient tous les points pertinents du cristal et permet une étude complète des vecteurs d'ondes du cristal tout entier.

Nous nous sommes plus particulièrement intéressés dans le cadre de cette thèse à des structures bidimensionnelles. Les zones de Brillouin se ramènent alors à de simples plans. Celles correspondant à des mailles bidimensionnelles carrées ou triangulaires sont reportées sur la figure A.2. [18].

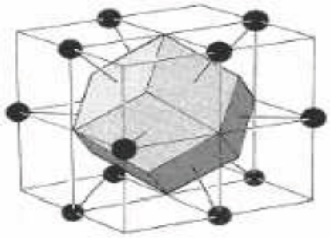
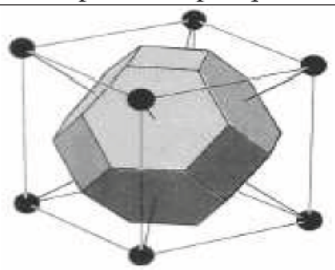
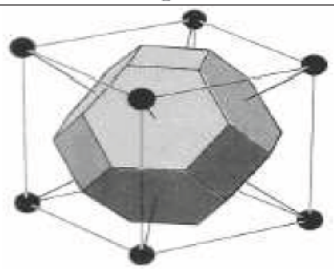
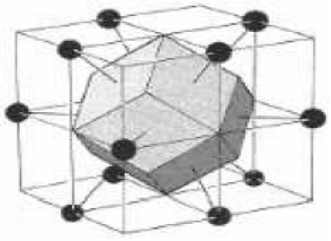
Espace direct	Espace réciproque
 CC : Wigner-Seitz	 CFC : Zone de Brillouin
 CFC : Wigner-Seitz	 CC : Zone de Brillouin

Tableau A.1 : Cellules de Wigner-Seitz et zones de Brillouin pour les mailles cubiques centrées et cubique à faces centrées.

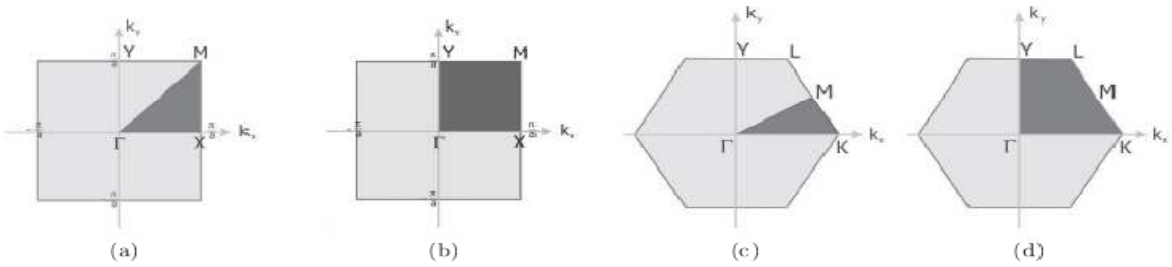


Figure A.2 : Zones de Brillouin et zones de Brillouin irréductibles (en noir) pour les réseaux carrés (a) isotrope et (b) anisotrope, ainsi que pour les réseaux triangulaires (c) isotropes et (d) anisotropes dans le cas d'une maille bidimensionnelle

Points critiques

Certains points de haute symétrie revêtent un intérêt particulier : ils sont appelés *points critiques*. Le tableau qui suit en présente quelques uns [58]. :

Symbole	Description
Γ	Centre de la zone de Brillouin
	Cubique simple
M	Milieu d'une arête
R	sommet
X	Centre d'une face
	Cubique faces centrées
K	Milieu d'une arête joignant deux faces hexagonales
L	Centre d'une face hexagonale
U	Milieu d'une arête joignant une face hexagonale et une face carrée
W	Sommet
X	Centre d'une face carrée
	Cubique centré
H	Sommet joignant 4 arêtes
N	Centre d'une face
P	Sommet joignant trois arêtes
	Hexagonal
A	Centre d'une face hexagonale
H	Sommet
K	Milieu d'une arête joignant deux faces rectangulaires
L	Milieu d'une arête joignant une face hexagonale et une face rectangulaire
M	Centre d'une face rectangulaire

Tous ces points sont liés par des directions, elles-mêmes décrites par des symboles. Ces descriptions sont particulièrement utilisées lors de la caractérisation des propriétés électroniques d'un solide, comme par exemple par les diagrammes de bandes électroniques.