

FACULTE DE TECHNOLOGIE
DEPARTEMENT D'ELECTRONIQUE
N°: 2024/INSTR/.....



DOMAINE: SCIENCES ET TECHNOLOGIE
FILIERE: ELECTRONIQUE
OPTION: INSTRUMENTATION

Mémoire Présenté pour L'obtention du Diplôme de Master Académique

Présenté par :

Legoui Tarek

Melki Assem

Intitulé

**Capteur à cristal phononique pour la détection
du chlorure de cadmium dans l'eau douce**

Soutenu devant le jury composé de :

Mr. Noubel Guermat	Université M'sila	Président
Mr. Ahmed Kahlouche	Université M'sila	Encadreur
Mr. Fayçal Saada khelkhal	Université M'sila	Examineur

Année Universitaire : 2023/2024

Remerciement

Avant d'entamer le détail de notre projet de fin d'études, il nous tient à cœur de remercier toutes les personnes de mérite sans qui ce travail n'aurait jamais abouti.

*Nous exprimons nos vifs remerciements à notre encadreur **Dr. AHMED KAHLOUCHE** pour son soutien inconditionnel, sa disponibilité, ses conseils, son apport dans le projet et l'aide permanente qu'il nous a prodiguée.*

Très grands sont les sentiments de gratitude et de considération que j'exprime à l'égard de notre tuteur de stage pour ses orientations, ses conseils et son aide précieuse tout au long de notre période de stage.

Nous savons gré également aux membres du jury qui ont eu l'obligeance d'accepter d'évaluer ce travail.

Enfin, nous remercions toutes les personnes qui ont contribué de loin ou de près à la concrétisation de ce travail.

Dédicacs

Avec l'expression de ma reconnaissance, je dédie ce modeste travail à ceux qui, quels que soient les termes embrassés, je n'arriverais jamais à leur exprimer mon amour sincère.

- *A l'homme, mon précieux offre du dieu, qui doit ma vie, ma réussite et tout mon respect : mon cher père **LEGOUI NAOUI**.*
- *A la femme qui a souffert sans me laisser souffrir, qui n'a jamais dit non à mes exigences et qui n'a épargné aucun effort pour me rendre heureux : mon adorable mère **AHMEDI FATIMA***
- *À mon cher ami qui m'a soutenu tout au long des cinq années à l'Université **GHADRI ALI** .*
- *À ma chère sœur qui m'a soutenu tout au long de mon parcours scolaire **MEBARKA**.*
- *A tous mes amis que j'ai connu jusqu'à maintenant. Merci pour leurs amours et leurs encouragements.*

*Sans oublier mon binôme **ASSEM** pour son soutien moral, sa patience et sa compréhension tout au long de ce projet*

Dédicacs

La réalisation de ce mémoire a été possible grâce au concours de plusieurs personnes à qui je voudrais témoigner toute ma gratitude.

*Je voudrais tout d'abord adresser toute ma reconnaissance à mon encadreur de ce mémoire, **Kahlouche Ahmed**, pour sa patience, sa disponibilité et surtout ses judicieux conseils, qui ont contribué à alimenter ma réflexion.*

*Je voudrais exprimer ma reconnaissance envers mon collègue **LEGOUI TAREK** qui m'ont apporté son soutien moral et intellectuel tout au long de notre démarche.*

J'adresse mes sincères remerciements à tous les professeurs, intervenants et toutes les personnes qui par leurs paroles, leurs écrits, leurs conseils et leurs critiques ont guidé mes réflexions et ont accepté de me rencontrer et de répondre à mes questions durant mes recherches.

*Je remercie mon père **MELKI ABDELHAK**, et à ma mère **MELKI KHADIJA**, très chers qui ont toujours été là pour moi. Je remercie mes sœurs et mes frères pour leurs encouragements.*

Enfin, je remercie mes amis qui ont toujours été là pour moi. Leur soutien inconditionnel et leurs encouragements ont été d'une grande aide.

À tous ces intervenants, je présente mes remerciements, mon respect et ma gratitude.

Résumé

Récemment, l'analyse de l'eau contaminée par des métaux lourds à faible concentration représente un défi majeur pour l'ensemble de l'humanité. Toutefois, les capteurs à cristaux phononiques proposent une technologie innovante pour les applications de détection à haute performance. Ce travail contribue à l'étude et à la conception d'un détecteur de chlorure de cadmium dans l'eau douce. La structure suggérée est celle de [(Plomb/Epoxy)²/Couche de cavité/(Plomb/Epoxy)²], où la couche de cavité est remplie avec diverses concentrations de CdCl₂.

Les coefficients de transmission calculés à l'aide de la méthode TMM révèlent la génération de modes résonnants dans la bande interdite. La fréquence de résonance du mode transmis est également fortement influencée par la concentration de chlorure de cadmium et les paramètres géométriques de la structure. Ainsi, ce type de capteurs utilisant des matériaux abordables est hautement adaptable peut offrir une plateforme nouvelle et simple de détection pour divers ions de métaux lourds présents dans l'eau douce.

Mots clés : Métaux lourds, Capteurs à cristaux phononiques, Bande interdite phononique, ondes acoustiques, méthode TMM.

Abstract

Recently, the analysis of water contaminated with heavy metals at low concentrations represents a major challenge for all of humanity. However, phononic crystal sensors offer innovative technology for high-performance sensing applications. This work contributes to the study and design of a cadmium chloride detector in fresh water. The suggested structure is that of [(Lead/Epoxy)²/Cavity_layer/(Lead/Epoxy)²], where the cavity layer is filled with various concentrations of CdCl₂.

The transmission coefficients calculated using the TMM method reveal the generation of resonant modes in the band gap. The resonant frequency of the transmission mode is also strongly influenced by the concentration of cadmium chloride and the geometric parameters of the structure. Thus, this type of sensors using affordable and highly adaptable materials can offer a new and simple detection platform for various heavy metal ions present in fresh water.

Keywords : Heavy metals, Phononic crystal sensors, Phononic band gap, acoustic waves, TMM method.

الخلاصة :

في السنوات الأخيرة، أصبح تحليل المياه الملوثة بالمعادن الثقيلة ذات التركيز المنخفض يمثل تحدي كبيراً للبشرية. إن أجهزة الاستشعار المعتمدة على البلورات الصوتية توفر تقنية مبتكرة لتطبيقات الاستشعار عالية الأداء. يساهم هذا العمل في دراسة وتصميم كاشف كلوريد الكاديوم في المياه العذبة. التركيب المقترح هو $[(\text{Lead/Epoxy})_2/\text{Cavity_layer}/(\text{Lead/Epoxy})_2]$ ، حيث يتم ملء طبقة التجويف بتركيز مختلفة من CdCl_2 .

معاملات النقل المحسوبة باستخدام طريقة TMM تكشف عن توليد أوضاع الرنين في فجوة النطاق. كما يتأثر تردد الرنين في وضع الإرسال بشدة بتركيز كلوريد الكاديوم والخصائص الهندسية للهيكلم. هذا النوع من أجهزة الاستشعار الذي يستخدم مواد غير مكلفة وقابلة للتكيف بدرجة كبيرة يمكن أن يوفر منصة جديدة وبسيطة للكشف عن مختلف أيونات المعادن الثقيلة في المياه العذبة.

Sommaire

Remerciements	
Dedicaces	
Resume Abstract	
Sommaire	
Liste des Tableaux & Figures	
Introduction Generale	1
Chapitre I : Generalites sur les cristaux phononiques	
I.1. Introduction	5
I.2. Les Cristaux Phononiques	5
I.2.1. Définitions	5
I.2.2. Évolution des cristaux phononiques	6
I.2.3. Comparaison avec d'autres cristaux	7
I.3. Familles des cristaux phononiques	8
I.3.1. Structures périodiques 1D	8
I.3.2. Structures périodiques 2D	9
I.3.3. Structures périodiques 3D	10
I.4. Caractéristiques géométriques et physiques d'un Cristal 1D	12
I.4.1. Bandes interdites phononiques	12
I.4.2. Type de réseau cristallin	12
I.4.3. Facteur de remplissage	13
I.4.4. Effet de la masse volumique	13
I.4.5. Effet de la célérité du son	13
I.4.6. Propagation des ondes acoustiques	14
I.5. Application des cristaux phononiques	15
I.5.1. Applications dans des capteurs phononiques	15
I.5.2. Applications dans des barrières phoniques	15
I.5.3. Cavités résonantes et résonateurs acoustiques	15
I.5.4. Applications des cavités résonantes	16
I.5.5. Applications des résonateurs acoustiques :	16
I.5.6. Filtrage	17
I.6. Conclusion	17

Chapitre II : Generalites Méthodes numériques de simulation	
II.1. Introduction	19
II.2. Méthode des éléments finis FEM	19
II.2.1. Variétés de la Méthode des Éléments Finis	20
II.2.2. Processus de la méthode des éléments finis	20
II.2.3. Bénéfices et Utilisations de la technique FEM	21
II.3. Technique de différences finies en temporalité (FDTD)	22
II.3.1. Genèse et fondement de la FDTD	23
II.3.2. Démarche de la méthode FDTD	25
II.3.3. Avantages et limitations de la méthode FDTD	26
II.4. Méthodologie d'expansion des ondes planes (PWE)	27
II.4.1. Fondement et Evolution de la méthode PWE	27
II.4.2. Cadre Théorique de la méthode PWE	27
II.4.3. Utilisations Diversifiées de la méthode PWE	27
II.4.4. Déroulement méthodique de la PWE	28
II.5. Méthodes de la Matrice de Transfert	28
II.5.1. Super-réseaux unidimensionnels	29
II.5.2. Le Cadre de la Matrice de Transfert	30
II.5.3. Avantages et inconvénients de la TMM	37
II.6. Conclusion	38
Chapitre III : Résultats de Simulation et Discussions	
III.1. Introduction	40
III.2 Métaux Lourds dans L'eau	40
III.2.1. Classification des métaux lourds	41
III.2.2. Le Cadmium	41
III.2.3. Diverses approches pour la détection du cadmium	42
III.3. Structure Etudiée	43
III.4. Spectre de Transmission et de Réflexion	44
III.5. Etude de La Bande Interdite Phononiques	46
III.5.1. Influence du nombre de couches	46
III.5.2. Influence du facteur de remplissage	47
III.6. Application a la détection du Chlorure de Cadmium	49
III.6.1. Structure étudiée	49
III.6.2. Résultats de simulations	50

III.6.3. Influence de concentration de CdCl ₂	52
III.6.4. Résultats de simulations	52
III.7. Les Performances du Capteur	54
III.7.1. La sensibilité	54
III.7.2. Le facteur de qualité	55
III.7.3 La figure de mérite	56
III.8. Influence de l'épaisseur de la couche de cavité sur la sensibilité	57
III.9. Conclusion	59
Conclusion Generale	61
References Bibliographiques	

Liste des Tableaux

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

Tableau III.1: Densité et célérité de propagation des matériaux constituant le cristal phononique-1D [Plomb/Epoxyde] .

Tableau III. 2: Différents valeurs des paramètres géométriques et physiques de la structure parfaite (PnC-1D).

Tableau III.3: Résultats de simulations obtenus par la méthode TMM.

Tableau.III.4: Célérité du son et densité à différentes concentrations de CdCl_2 Données à 20 °C selon la référence .

Tableau.III.5: Résultats de simulations obtenus pour différentes valeurs de concentration de chlorure de cadmium CdCl_2 en ppm.

Tableau III.6 : Sensibilité, facteur de qualité et la figure de mérite en fonction la concentration de chlorure de cadmium.

Tableau III.7: L'effet du changement de l'épaisseur de la cavité sur la sensibilité du capteur pour deux concentration de CdCl_2

Liste des Figures

Figure I.1: Représentation schématique de cristaux périodiques photoniques/phononiques unidimensionnel (1D : matériau multicouches), bidimensionnel (2D : Réseau de cylindres dans une matrice) et tridimensionnel (3D : Réseau de sphères dans une matrice) .

Figure I.2: Schéma d'un cristal phononique unidimensionnel constitué de deux matériaux A et B.

Figure I.3: Schéma d'une structure PnC-1D composée d'un réseau périodique de plomb et d'époxy avec une couche de défaut remplie d'acétone .

Figure I.4 : Structures périodiques constituées d'arrangement bidimensionnelles (a) tiges d'inclusions dans l'air et (b) Cylindre d'air dans une matrice.

Figure I.5: Images de structure périodique tridimensionnelle -3D- .

Figure I.6 : Représentation schématique d'un solide traversé par une onde sonore longitudinale.

Figure I. 7: Représentation schématique dans le cas d'un solide traverse par une vague d'ondes sonores transversales.

Figure II.1 : Méthode Crank-Nicolson .

Figure II.2 : Un super-réseau à CnP-1D formé par alternance de deux couches d'impédances Z_1 et Z_2 .

Figure II.3 : Une bicouche 1D avec des impédances Z_1 et Z_2 avec des couches externes d'impédances Z_0 et Z_L .

Figure II.4: Un système à cristal phononique 1D composé de N bicouches.

Figure II.5 .Un système 1D composé de N bicouches et d'un défaut central de largeur d_C et d'impédance Z_C .

Figure III.1 : Tableau périodique des éléments chimiques (en rouge: métaux lourds) .

Figure III.2 : Illustration des Propriétés de Cadmium [34].

Figure III.3: Schéma d'un cristal phononique 1D de type solide/solide composé de N cellules ; [Plomb/Epoxy]^N.

Figure III.4: Coefficients de transmission (en noir) et de réflexion (en rouge)

D'une onde longitudinale en fonction les fréquences normalisées.

Figure III.5: Spectre de Transmission /Réflexion en fonction de la fréquence absolue.

Figure III.6: Spectre de transmission en fonction le nombre de bicouches ; pour N=2 (en noir) et pour N= 4 (en rouge).

Figure III. 7: Evolution des propriétés de la bande phononique en fonction le nombre de bicouches N.

Figure III. 8: Spectre de transmission pour une onde longitudinale à incidence normale

(a) pour $ff=20\%$, (b) pour $ff=35\%$, (c) Pour $ff=50\%$ et (d) pour $ff=70\%$.

Figure III.9: Représentation schématique d'un cristal phononique PnC-1D [(Plomb/Epoxy)²/CdCl₂/(Plomb/Epoxy)²] avec couche de cavité de largeur D

Figure III.10: Spectre de transmission pour un CnP -1D parfait (en Noir), ensuite avec une couche de cavité remplie par l'eau à 20°C d'épaisseur D=0.1μm (en rouge).

Figure III.11: Spectre de transmission en fonction la fréquence absolue pour une couche de cavité de l'eau douce à 20°C d'épaisseur D=0.1μm (en rouge).

Figure III.12: Caractéristiques du pic de résonance pour une couche de cavité est remplie par l'eau douce à 20°C

Figure.III.13: Spectres de transmission calculés en injectant différentes concentrations de Chlorure de cadmium CdCl₂ dans la couche de cavité en ppm à 20°C.

Figure III.14: Evolution de la sensibilité en fonction la concentration de CdCl₂ en ppm.

Figure III.15: Facteur de qualité en fonction la concentration de CdCl₂

Figure III.16: Le facteur de mérite en fonction de la concentration C en ppm.

Figure III.17: L'effet du changement de la couche de cavité sur la sensibilité du capteur pour deux concentration de de CdCl₂ en ppm.

Figure III.18: (a) Evolution de la fréquence de résonance, (b) Evolution de la sensibilité en fonction de la variation de l'épaisseur de la couche de cavité ΔD (nm).

Introduction Générale

INTRODUCTION GENERALE

Les cristaux phononiques (PnCs) constituent une catégorie émergente de matériaux synthétiques caractérisés par des répartitions périodiques de leur densité et de leurs attributs mécaniques dans les espaces unidimensionnels, bidimensionnels ou tridimensionnels [1]. Ces cristaux offrent la possibilité de manipuler et d'ajuster la propagation des ondes acoustiques et élastiques dans les liquides et les solides, respectivement.

Une particularité notable de ces systèmes est qu'ils engendrent des bandes interdites, empêchant la transmission des ondes acoustiques dans certaines gammes de fréquences et directions. La fabrication de ces structures repose sur la modulation de l'impédance acoustique des matériaux constitutifs. Ainsi, la conception des cristaux phononiques nécessite la prise en compte de la géométrie, de la masse volumique, des propriétés acoustiques telles que la vitesse du son, et de l'angle d'incidence des ondes [2].

Récemment, il y a eu un intérêt marqué pour les structures phononiques multicouches, examinées et envisagées pour de nouvelles méthodes de caractérisation acoustique des gaz et des liquides [3,4]. La performance de ces dispositifs est typiquement évaluée suivant la fréquence de résonance, le taux de transmission et la sélectivité des pics de transmission. Ce mémoire de master se divise en trois sections principales.

Le premier chapitre traite exclusivement des cristaux phononiques, introduisant leur histoire et les études antérieures. Une comparaison entre ces cristaux et leurs homologues électroniques et photoniques est établie. De plus, les concepts essentiels relatifs aux ondes acoustiques sont discutés et des applications spécifiques : telles que la bio-détection et l'isolation phonique.

Dans le second chapitre, nous décrivons les principales méthodes, utilisés généralement pour l'étude et la modélisation des structures périodiques notamment les structures multicouches. Les méthodes discutées pour calculer les coefficients de transmission et de réflexion sont la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD), la méthode de décomposition en ondes planes (PWE), la méthode des éléments finis FEM et la méthode des matrices de transfert (TMM).

Le troisième chapitre est entièrement dédié aux capteurs. Nous présenterons en premier temps ; des notions fondamentales, les différents types des capteurs. Ensuite, nous donnerons quelques caractéristiques métrologiques. Ensuite, nous donnerons quelques notions de base sur les métaux lourds et les méthodes d'analyse et de détection des métaux lourds.

Le dernier chapitre de ce travail s'articule autour de l'étude approfondie d'une structure phononique à une seule dimension, spécifiquement élaborée pour identifier la présence de chlorure de cadmium dans l'eau. Ce chapitre envisage les fondamentaux théoriques et les applications pratiques de cette technologie de détection fait en utilisation de logiciel Matlab pour faire les simulations. Il aborde la sensibilité de la structure aux variations de concentration de chlorure de cadmium, l'efficacité de la méthode dans diverses conditions et les limites potentielles de la technique.

Divers paramètres sont pris en compte, tels que la dimension des cellules du cristal phononique, le matériau utilisé et la configuration de l'interface avec l'eau. L'impact de ces paramètres sur la performance du capteur est examiné par des simulations numériques et des expérimentations pour déterminer les conditions optimales d'opération.

Les résultats obtenus mettent en lumière la manière dont la structure phononique peut être utilisée pour la mesure quantitative de chlorure de cadmium, offrant ainsi un outil potentiellement utile dans le domaine de l'environnement pour surveiller les eaux douces et prévenir les risques de contamination. Ensuite, ce chapitre présente les avantages des cristaux phononiques par rapport aux méthodes de détection traditionnelles, en termes de coût, d'efficacité, et d'intégration dans des systèmes plus larges de suivi de la qualité de l'eau. Finalement, nous terminons ce manuscrit par une conclusion générale et avec quelques perspectives.

CHAPITRE I

Généralités sur les cristaux phononiques

I.1. Introduction

Durant ces dernières années, l'étude de la transmission des ondes acoustiques ou élastiques au à travers des nouveaux matériaux désignés sous le nom des cristaux phononiques (PnCs). Ces structures périodiques ont attiré une attention croissante des chercheurs et ont fait l'objet de progrès remarquables. La disposition périodique des cristaux phononiques engendre des caractéristiques inédites, absentes dans le cas des matériaux massifs, comme la maîtrise de la transmission des ondes acoustiques ou élastiques.

Les cristaux phononiques sont des matériaux composites présentant des densités et des propriétés élastiques variées. Les études approfondies sur ces cristaux ont révélé une multitude de leurs caractéristiques acoustiques extraordinaires, notamment en ce qui concerne la configuration et le positionnement de leurs composantes. La caractéristique dominante de cette structure périodique, qui a fortement captivé les scientifiques, réside dans la création de plages de fréquences où ces cristaux agissent comme des barrières pour les ondes acoustiques et élastiques, appelées bandes interdites phononiques.

Une grande partie des travaux de recherche relatifs aux phénomènes de dispersion au sein des cristaux phononiques est de nature théorique et s'est basée sur des outils de simulation numérique avancés. Cela a permis aux scientifiques d'explorer une vaste gamme de contextes phononiques pour préciser leur comportement physique.

Des études approfondies ont également permis l'émergence de nouvelles configurations structurales, illustrant des phénomènes physiques hors du commun, qui ont mené à l'avènement d'une nouvelle catégorie de matériaux, connus sous le nom de méta-matériaux acoustiques.

I.2. Les Cristaux Phononiques

I.2.1. Définitions

Les matériaux appelés cristaux phononiques se présentent sous forme de structures périodiques en une, deux ou trois dimensions spatiales. Ces substances innovantes ont le pouvoir de diriger la propagation des ondes acoustiques selon certaines trajectoires et gammes de fréquence, soit par des réflexions de type Bragg soit par la résonance locale spécifique aux éléments structurés en réseau. L'appellation "cristaux phononiques" a été inspirée en référence aux cristaux photoniques qui présentent des caractéristiques similaires.

Au sein de la plage de fréquences caractérisée par un écart, une onde venant frapper un cristal phononique sera réverbérée, faisant de celui-ci un miroir parfait qui ne capte pas l'énergie. Cette caractéristique ouvre la voie à diverses applications potentielles telles que la réflexion des ondes sismiques, la création de barrières sonores, ou la fabrication de miroirs acoustiques pour

l'insonorisation. Pour obtenir un cristal phononique, il faut assembler au moins deux matériaux dont les propriétés mécaniques diffèrent [1].

I.2.2. Évolution des cristaux phononiques

Les cristaux phononiques représentent un domaine prometteur dans le champ des ondes acoustiques/élastiques et ont suscité un vif intérêt ces dernières deux décennies. Leurs premières apparitions remontent aux années 70, impulsées par des motivations tant fondamentales que pratiques. Parmi les travaux pionniers, on note ceux de L. P. Solie sur les filtres à ondes de surface, les recherches de J. D. Achenbach portant sur l'analyse de la dispersion dans des composites à inclusions sphériques, ou encore les contributions de V. Narayanamurti qui a étudié des filtres à phonons à l'aide de super-réseaux de AsGa. Peu après, la notion de cristaux phononiques, avec leurs structures bidimensionnelles ou tridimensionnelles ouvrant la possibilité de bandes interdites pour les ondes élastiques, a vu le jour presque simultanément grâce aux travaux de Kushwaha et al. Ainsi que ceux de Economou et Sigalas aux alentours de 1993.

Sous l'angle des applications pratiques, les cristaux phononiques ont trouvé leur place dans multiples domaines: isolation acoustique, construction parasismique, filtrage et traitement de signaux acoustiques. Une étude marquante de S. Kushwaha présente l'analyse de la structure de bandes pour un matériau composite périodique fait de cylindres en nickel intégrés dans de l'aluminium. Il a mis en lumière pour la première fois un matériau capable de bloquer la propagation d'ondes transversales venant de toutes directions. D'étonnants tests empiriques ont initialement eu lieu à partir d'une œuvre d'art minimaliste de « Eusebio Semper » qui se situe dans les jardins de la Fondation Juan March à Madrid [2].

La figure I.1, illustre une sculpture composée de cylindres en acier de 2,9 cm de diamètre arrangés en une grille carrée régulière avec un espacement de 10 cm entre chaque cylindre. Cette configuration révèle l'existence de bandes interdites pour les ondes sonores oscillant entre 1,7 kHz et 2,4 kHz. Les réductions du signal observées sont associées à la diffraction qui se produit au niveau des plans cristallins [3].

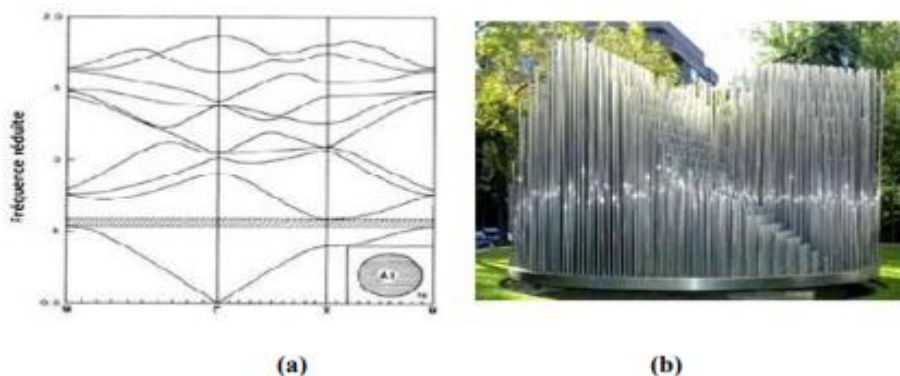


Figure I.1 : (a) Bandes pour un cristal phononique formé par des tiges d'aluminium dans une matrice de nickel [3]. (b) Sculpture minimaliste de l'artiste Eusebio Semper [2].

I.2.3. Comparaison avec d'autres cristaux

L'étude de la diffusion des ondes électromagnétiques et acoustiques élastiques dans des agencements composites a été minutieusement examinée. Définis comme dans le paragraphe qui les précède, les cristaux phononiques constituent des agencements périodiques. Néanmoins, des parallèles sont notables en ce qui concerne la transmission des électrons au sein des cristaux semi-conducteurs et la diffusion des ondes électromagnétiques dans les cristaux photoniques. Les cristaux phononiques partagent des caractéristiques comparables avec celles des autres types de cristaux, notamment les cristaux photoniques.

Le tableau I.1 met en évidence les caractéristiques fondamentales des cristaux électroniques, photoniques et phononiques.

Propriété	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
Constante de maille	1 - 5Å (microscopique)	0.1 μm - 1 cm (mésoscopique ou macroscopique)	Mésoscopique ou macroscopique
Ondes	de Broglie (électrons) ψ	Électromagnétiques ou lumineuses (photons) E,B	Vibratoires ou sonores (phonons) u
Polarisations	Spin (haut et bas)	Transverse : $\nabla \cdot \mathbf{D} = 0$ ($\nabla \cdot \mathbf{E} \neq 0$)	Trans.-longit. ($\nabla \cdot \mathbf{u} \neq 0$, $\nabla \times \mathbf{u} \neq 0$)
Équation différentielle	$\nabla^2 \psi + V(\mathbf{r})\psi = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi$ $= i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$	$\nabla^2 \mathbf{E} - \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}$	$\frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{1}{\rho} \left\{ \lambda \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_i^2} + \mu \left(\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_i^2} \right) \right\}$
Particules libres	$W = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ (électrons)	$\omega = \frac{c}{\sqrt{\epsilon}} k$ (photons)	$\omega = c_s k$ (phonons)
Bande interdite	Augmente avec le potentiel dans le cristal ; pas d'état électronique possible	Augmente avec ; pas de $ \epsilon_a - \epsilon_b $ photons, pas de lumière	Augmente avec ; pas de $ \rho_a - \rho_b $ vibration, pas de son
Gamme spectrale	Ondes radio, micro-ondes, optique, rayons X	Micro-ondes, optique	$\leq \text{qq GHz}$

Tableau I.1 : Propriétés clés pour l'étude des structures de bandes dans les matériaux tridimensionnels isotropes [4].

Les cristaux photoniques sont définis par deux paramètres principaux, à savoir le taux de remplissage diélectrique et la proportion de volume occupé par l'un de ses constituants ; alors que pour les cristaux phononiques, plusieurs facteurs peuvent influencer la transmission des ondes élastiques ou acoustiques, comme le rapport des vitesses de cisaillement, le rapport des vitesses longitudinales, la densité ainsi que le taux de remplissage volumétrique.

De façon générale, dans les deux types de cristaux, la diffusion des ondes est conditionnée par la structure.

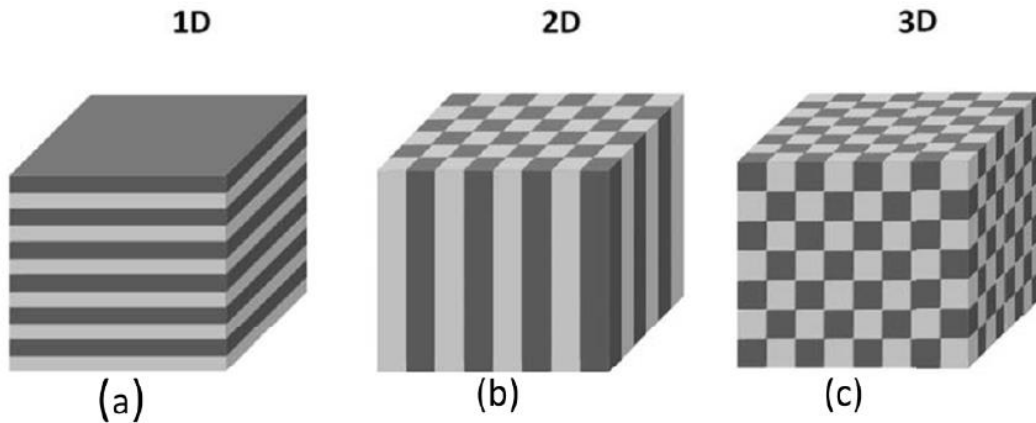


Figure I.1: Représentation schématique de cristaux périodiques photoniques/phononiques unidimensionnel (1D : matériau multicouches), bidimensionnel (2D : Réseau de cylindres dans une matrice) et tridimensionnel (3D : Réseau de sphères dans une matrice) [3].

I.3. Familles des cristaux phononiques

Selon la régularité dans l'espace, on peut regrouper les cristaux phononiques en trois catégories: les cristaux phononiques à une dimension (1D), à deux dimensions (2D) et à trois dimensions (3D).

I.3.1. Structures périodiques 1D

Les agencements périodiques unidimensionnels (1D), qui sont les premiers du genre, résultent de la superposition alternée dans un axe unique de deux substances distinctes en termes de caractéristiques physiques (voir Figure I.2).

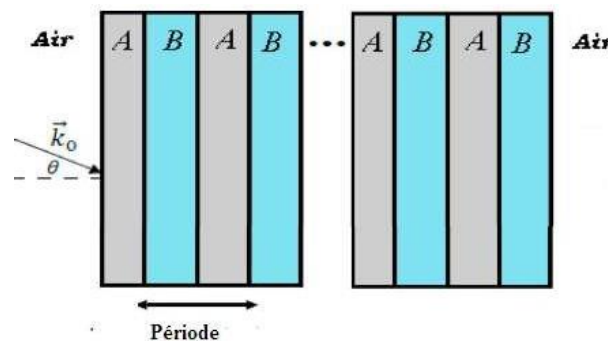


Figure I.2: Schéma d'un cristal phononique unidimensionnel constitué de deux matériaux A et B [5].

Il est possible de produire des configurations périodiques unidimensionnelles grâce à diverses méthodologies, incluant la lithographie, l'holographie et l'assemblage spontané. Ces configurations se caractérisent par des zones de fréquences spécifiques où les bandes interdites se forment, déterminées surtout par l'orientation de l'onde entrante, ce qui les rend pratiques pour différents usages, comme l'élaboration de dispositifs dans les secteurs photonique, électronique et acoustique [8].

En acoustique, ces agencements périodiques unidimensionnels peuvent servir à la fabrication de filtres qui éliminent certaines fréquences, de guides d'ondes dirigeant et modulant les ondes acoustiques, et de détecteurs réagissant à certaines fréquences précises.

Les études récentes sont orientées vers l'élaboration de nouvelles structures unidimensionnelles en utilisant divers assemblages de matières et arrangements géométriques pour acquérir des caractéristiques inédites. Par exemple, l'intégration de matériaux comme le graphène avec d'autres substances montre un potentiel élevé pour la création de dispositifs électroniques de haute performance.

La figure I.3 illustre un modèle de structure phononique unidimensionnelle laquelle est utilisée dans les technologies de détection de fluides [9].

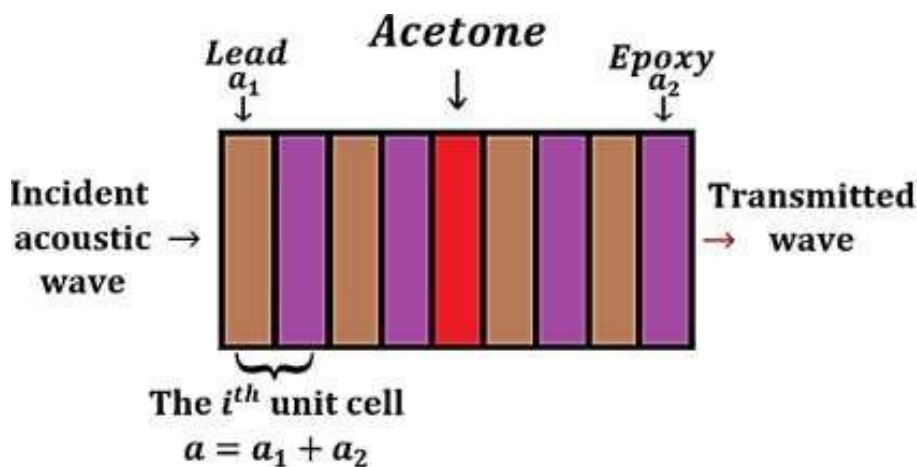


Figure I.3: Schéma d'une structure PnC-1D composée d'un réseau périodique de plomb et d'époxy avec une couche de défaut remplie d'acétone [10].

I.3.2. Structures périodiques 2D

Le cristal bidimensionnel est une structure plane qui manifeste une périodicité dans deux dimensions, possédant des propriétés physiques qui se répètent le long de deux axes dans l'espace tout en restant invariable sur le troisième axe. Cette famille de structures est principalement classée en trois sortes de réseaux : carré, triangulaire et hexagonal. Ils se composent normalement de composants diffractants intégrés dans une matrice (Figure I.4).

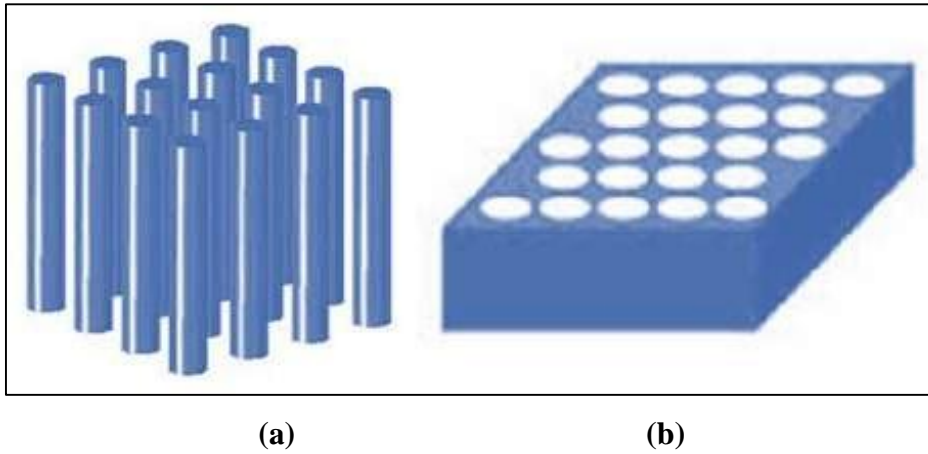


Figure I.4 : Structures périodiques constituées d'arrangement bidimensionnelles
(a) tiges d'inclusions dans l'air et (b) Cylindre d'air dans une matrice.

Le choix de la configuration du réseau a un impact significatif et détermine les propriétés de la bande interdite, c'est-à-dire la plage de fréquences pour lesquelles la bande interdite apparaît dans la structure périodique. Ajuster les paramètres périodiques de la structure, comme la taille de la cellule unitaire, est essentiel pour contrôler les caractéristiques de la bande interdite du cristal.

Les architectures 2D arborent une géométrie épurée qui simplifie leurs analyses théoriques et pratiques. De plus, la gamme de matériaux employés pour réaliser ces structures périodiques 2D est vaste, incluant polymères, métaux, semiconducteurs et matériaux diélectriques, leur octroyant ainsi une utilité dans divers domaines d'application. En photonique, elles régulent le comportement lumineux à travers le guidage d'onde, la filtration et la création de réseaux photoniques en deux dimensions. En électronique, elles permettent de maîtriser le déplacement des électrons, ce qui contribue à l'élaboration de composants électroniques sophistiqués tels que des transistors et des photodétecteurs. Concernant l'acoustique, elles servent de filtres, guides d'ondes ou capteurs, à l'instar des structures 1D périodiques.

Les structures périodiques en 2D constituent un champ de recherche intéressant avec un potentiel considérable d'applications. Elles proposent une maîtrise et une manipulation inédites sur le comportement des ondes sonores dans un milieu bidimensionnel. Avec leur développement continu, elles présentent un avenir prometteur pour la conception de la prochaine génération de dispositifs avancés, en particulier dans le secteur des capteurs [11].

I.3.3. Structures périodiques 3D

Les matériaux structurés de manière périodique en trois dimensions (3D) exhibent des modulations régulières dans les trois axes de l'espace. Leur distinctivité repose dans leur périodicité tridimensionnelle, ce qui les différencie des agencements périodiques

unidimensionnels (1D) et bidimensionnels (2D). Ils possèdent des caractéristiques particulières qui les rendent extrêmement pertinents pour de multiples usages dans des domaines comme la photonique, l'électronique et l'acoustique. Néanmoins, les structures 3D (CnPs-3D) souffrent d'un désavantage considérable dû à la complexité de leur fabrication expérimentale.

L'une des méthodes les plus répandues pour élaborer des structures périodiques en 3D est la technique nommée "écriture directe par laser", qui consiste à solidifier un matériau photosensible au moyen d'un rayon laser concentré. Parmi les autres techniques figurent la lithographie de projection et la lithographie électronique, toutes deux aptes à produire des architectures tridimensionnelles de haute résolution.

Dans le champ de la photonique, les structures 3D sont cruciales. Modifier des éléments structurels périodiques, tel que l'intervalle entre les cellules unitaires, permet la création de configurations qui sélectionnent ou confinent la lumière spécifiquement. Les cristaux photoniques 3D peuvent aussi servir à l'élaboration de dispositifs de guides d'ondes.

En électronique, les structures périodiques en 3D favorisent l'invention de composants électroniques nouveaux ou améliorés, incluant les éléments pour les technologies radiofréquence et hyperfréquence. Les dispositifs conçus à partir de métamatériaux, comme les antennes, les filtres et les détecteurs, peuvent aussi être développés grâce à ces structures.

Pour finir, en acoustique, les structures 3D périodiques trouvent leur utilité en tant que filtres sonores, guides d'ondes acoustiques et variété d'autres appareils. Elles permettent également de réguler et manipuler la propagation et la dispersion des ondes sonores, débloquent par là des voies innovantes pour l'ingénierie acoustique. La figure I.4 illustre quelques exemples de structures tridimensionnelles (3D).

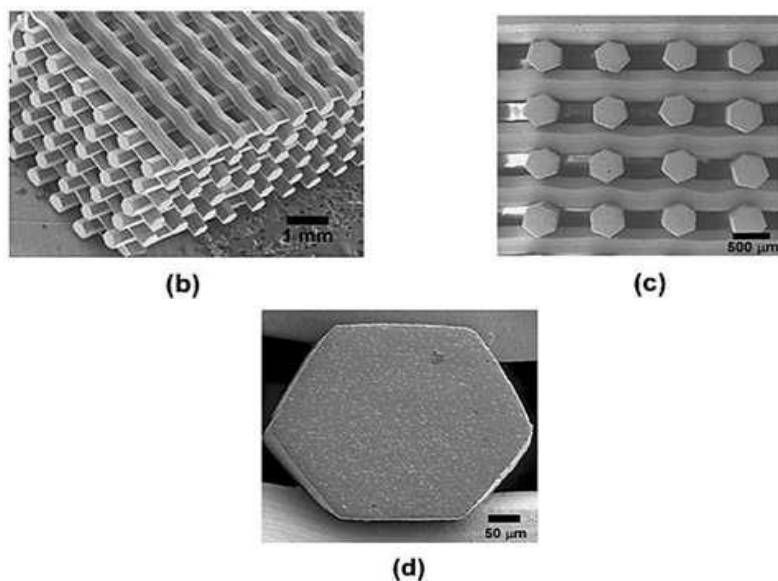


Figure I.5: Images de structure périodique tridimensionnelle -3D- [12].

Pour conclure, les agencements périodiques en 3D constituent un domaine de recherche intéressant doté d'une vaste étendue d'applications futures dans les secteurs de la photonique, de l'électronique et de l'acoustique. En affinant avec précision leurs caractéristiques géométriques, il est envisageable de concevoir des structures aux fonctionnalités à la fois adaptées et avantageuses. Comme les explorations scientifiques dans ce domaine progressent, les perspectives des structures périodiques en 3D pour transformer les techniques d'ingénierie et de fabrication de haute précision ne cessent de croître [13].

I.4. Caractéristiques géométriques et physiques d'un Cristal 1D

I.4.1. Bandes interdites phononiques

À l'instar de la zone interdite en électronique ou photonique, la bande interdite phononique représente le domaine fréquentiel où les ondes acoustiques ou élastiques sont interdites de propager à travers des structures périodiques. L'apparition d'une bande d'arrêt dans le plan ou dans l'espace se produit lors d'un recouvrement, même partiel, entre toutes les bandes d'arrêt unidimensionnelles dans la première zone de Brillouin. L'optimisation de la largeur de la bande phononique s'observe lorsque les bandes d'arrêt se concentrent autour d'énergies voisines. Les conditions les plus convenables à la création de larges bandes interdites surviennent lorsque la zone de Brillouin est aussi isotrope que possible. Cette situation est en particulier réalisée pour des agencements bidimensionnels en réseau triangulaire ou pour des structures tridimensionnelles à réseau cubique à faces centrées [14].

Plusieurs facteurs physiques et géométriques influencent de manière significative sur la largeur et la location des bandes interdites ouvertes, tels que le type de réseau, le taux de remplissage et le contraste des propriétés physiques, y compris la densité et la vitesse sonore des ondes.

I.4.2. Type de réseau cristallin

En parallèle avec les cristaux électroniques et photoniques, la localisation et l'amplitude des bandes interdites phononiques sont grandement influencées par la géométrie du réseau cristallin ainsi que par la forme des inclusions. L'impact de la configuration et de la symétrie des éléments diffusants sur le gap phononique dans un cristal phononique bidimensionnels a été analysé par Kuang et ses collègues [14].

La fabrication des cristaux phononiques peut s'effectuer selon divers types de réseaux tels que le réseau carré triangulaire et hexagonal. Les éléments de diffusion adoptent également diverses formes telles que la forme circulaire, la forme triangulaire, la forme hexagonale et la forme carrée.

I.4.3. Facteur de remplissage

Les caractéristiques des bandes d'arrêt, telles que leur largeur et leur emplacement, sont intimement dépendantes du taux de remplissage. Il est possible que des bandes interdites phononiques de petite échelle se manifestent pour des valeurs faibles ou élevées de ce facteur. En revanche, on observe l'apparition de bandes pour des valeurs intermédiaires du taux de remplissage. Ces bandes d'arrêt peuvent même se volatiliser lorsque le taux de remplissage est excessivement bas ou haut. Cette situation s'explique par le fait qu'avec un facteur de remplissage de 0% ou de 100%, la structure cristalline devient équivalente à un milieu homogène, soit constitué uniquement d'inclusions ou de la matrice elle-même.

I.4.4. Effet de la masse volumique

La formation de bandes d'arrêt est favorisée quand les matériaux composant le cristal diffèrent notablement en termes de densité et de constantes élastiques. Les diagrammes de dispersion révèlent une bande phononique interdite significative lorsque l'écart entre les densités et les constantes élastiques des deux matériaux est plus marqué, atteignant une largeur maximale quand cette différence est particulièrement grande. Les études sur les miroirs de Bragg unidimensionnels indiquent que l'écartement de la bande interdite s'accroît avec le contraste des impédances acoustiques entre les matériaux du miroir. En dimension unidimensionnelle, ce phénomène est dû à un accroissement du coefficient de réflexion des ondes élastiques aux frontières entre les inclusions et la matrice, ce qui intensifie la diffusion et diminue la transmission directe de l'onde à travers les inclusions. [15].

I.4.5. Effet de la célérité du son

La probabilité d'obtenir une bande interdite phononique est accrue lorsque les ondes sonores se déplacent plus lentement à l'intérieur des inclusions que dans la matrice environnante. Ce phénomène peut s'expliquer par la présence de multiples parcours ondulatoires au sein du cristal. Les ondes, une fois traversé les inclusions, sont sujettes à de multiples réflexions entre celles-ci, avant de générer des interférences avec les ondes qui les traversent directement. Cette condition est remplie uniquement lorsque la vitesse des ondes traversant directement est réduite par rapport à celles circulant sur des chemins plus longs au sein de la matrice. [15].

I.4.6. Propagation des ondes acoustiques

Les ondes sonores sont des vibrations propagées à travers un milieu par des charges et des décharges électriques adiabatiques. La vitesse des ondes sonores dépend des propriétés du milieu, telles que sa densité, son élasticité et sa viscosité. Les ondes sonores peuvent être

généérées par diverses sources, notamment des instruments de musique, des haut-parleurs et des phénomènes naturels tels que les tremblements de terre et le tonnerre. L'étude des propriétés et du comportement des ondes sonores s'appelle l'acoustique.

Dans un milieu isotrope uniforme, tel que l'air ou l'eau, les ondes sonores se propagent dans toutes les directions à des vitesses égales. C'est ce qu'on appelle la propagation sphérique. Cependant, dans un milieu hétérogène, tel qu'une pièce avec des murs, les ondes sonores peuvent être réfléchies, diffractées et absorbées, ce qui entraîne des formes d'onde complexes et une propagation directionnelle.

Un concept important dans la propagation des ondes acoustiques est l'équation d'onde, qui décrit la relation entre la fréquence, la vitesse et la longueur d'onde de l'onde. L'équation d'onde peut être utilisée pour analyser les propriétés des ondes acoustiques, telles que leur comportement de diffraction et d'interférence.

Un autre facteur important dans la propagation des ondes acoustiques est les conditions aux limites du milieu. L'impédance acoustique du milieu, qui est le produit de sa densité et de la vitesse du son, joue un rôle essentiel dans la détermination de la manière dont les ondes acoustiques interagissent avec les frontières. Par exemple, lorsqu'une onde acoustique rencontre une frontière entre deux supports avec des impédances acoustiques différentes, elle peut être réfléchiée dans le support d'origine ou transmise dans l'autre support [15].

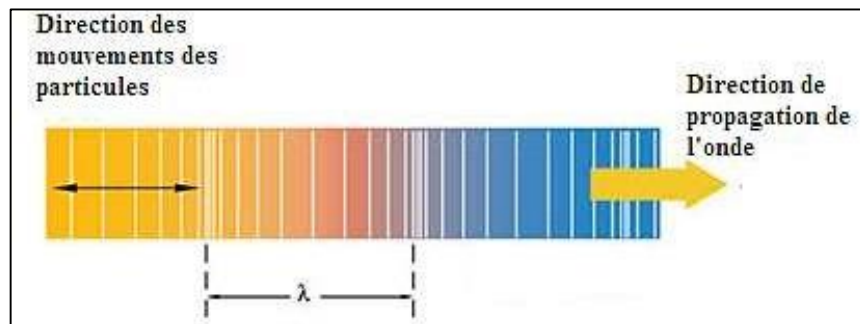


Figure I.6 : Représentation schématique d'un solide traversé par une onde sonore longitudinale [16].

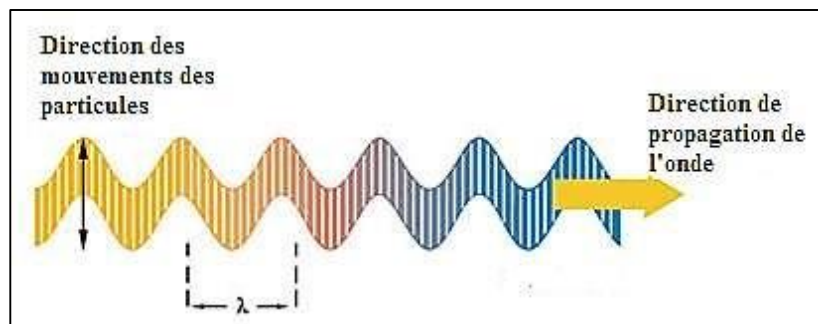


Figure I. 7: Représentation schématique dans le cas d'un solide traversé par une vague d'ondes sonores transversales [16].

I.5. Application des cristaux phononiques

Les cristaux phononiques sont des structures disposées périodiquement. Ces matériaux sont capables de diriger, bloquer ou contrôler la propagation des ondes acoustiques grâce à la présence de bandes interdites phononiques. Ces dernières années, ces structures ont une large gamme d'applications, notamment dans le domaine de la détection des liquides.

I.5.1. Applications dans des capteurs phononiques [17]

- Cristaux phononiques 1D utilisés en capteurs phononiques haute précision.
- Capacité de confinement et de guidage des ondes acoustiques.
- Bande interdite sensible à des paramètres physiques tels que pression/température.
- Applications possibles dans la détection environnementale et biologique.
- Surveillance de la transmission à travers le cristal/fréquences de résonance pour détecter changements environnementaux.
- Les modifications de l'impédance acoustique mesurées avec haute sensibilité.
- Cristaux phononiques 1D vus comme plate-forme d'avenir pour capteurs de gaz, liquides et biomolécules.

I.5.2. Applications dans des barrières phoniques [17]

- Utilisation des cristaux phononiques 1D (PnC-1D) en tant que barrières acoustiques de haute performance.
- Exploitation des bandes interdites pour bloquer des fréquences acoustiques précises.
- Configuration adaptable pour des fréquences ciblées, utile pour l'isolation acoustique.
- Idéal pour environnements nécessitant silence : salles de concert, studios d'enregistrement.
- Positionnement stratégique possible autour d'infrastructures nécessitant calme, ex. hôpitaux.
- Contribution à la création de zones silencieuses, améliorant confort et productivité.

I.5.3. Cavités résonantes et résonateurs acoustiques [17]

- Fondement de cristaux phononiques 1D pour cavités et résonateurs acoustiques.
- Création de cavités résonantes par introduction de défauts/impuretés dans le cristal.
- Localisation d'ondes acoustiques à fréquence de résonance spécifique grâce à ces cavités.
- Utilisation des résonateurs acoustiques pour stabilisation de fréquences en électronique et horlogerie atomique.
- Possibilité d'employer ces cavités dans le développement de sasars (lasers acoustiques).
- Divers domaines d'application pour les cavités résonantes et résonateurs acoustiques basés sur cristaux phononiques 1D.

I.5.4. Applications des cavités résonantes

– **Traitement et contrôle des signaux :**

Les cavités résonantes peuvent être utilisées pour filtrer, stocker et manipuler les ondes acoustiques, facilitant un contrôle précis des signaux dans des dispositifs tels que les filtres de fréquence [18].

– **Lasers à son – Sasers:**

Similaires aux lasers optiques mais utilisant des phonons (particules de son) au lieu des photons, les sasars exploitent les cavités résonantes des cristaux phononiques pour amplifier les ondes acoustiques [18].

– **Capteurs ultra-sensibles :**

Les variations infimes des propriétés physiques ou chimiques peuvent modifier la fréquence de résonance de la cavité, ce qui permet de détecter de faibles forces, des changements de température ou la présence de molécules spécifiques.

– **Métrologie et standards de fréquence:**

Ces dispositifs servent de références de fréquence pour les mesures de temps et de distances extrêmement précises.

– **Horloges atomiques:**

La stabilité spectaculaire des résonateurs acoustiques permet leur utilisation dans les horloges atomiques où la précision est primordiale.

– **Recherche fondamentale en physique:**

Les cavités résonantes sont utilisées pour étudier les propriétés quantiques des phonons ainsi que pour explorer des phénomènes tels que le confinement phononique et la superfluidité acoustique.

I.5.6. Applications des résonateurs acoustiques:

– **Circuits électroniques:**

Les résonateurs acoustiques sont incorporés dans les circuits de filtrage électronique et les oscillateurs pour maintenir des fréquences stables [18].

– **Télécommunications:**

Ils sont essentiels dans les technologies sans fil pour le filtrage des signaux radio et la sélectivité des fréquences dans des dispositifs tels que les smartphones et les stations de base.

– **Systèmes microélectromécaniques (MEMS):**

Les résonateurs acoustiques sont souvent utilisés dans les MEMS pour des applications telles que les gyroscopes et les capteurs de pression.

– **Bio-détection:**

Des résonateurs spécialement conçus peuvent être utilisés pour la détection de biomolécules par changement de fréquence à la suite de l'interaction avec des analytes.

– **Imagerie et diagnostic médical:**

Ils peuvent être appliqués dans des équipements d'imagerie ultrasonore en médecine, où une résolution élevée est nécessaire.

– **Systèmes de contrôle acoustique:**

Ils peuvent être utilisés pour le contrôle actif du bruit en générant des fréquences qui interfèrent destructivement avec le bruit ambiant.

Ces applications démontrent bien la diversité et la large gamme d'utilisations des cristaux phononiques 1D dans la technologie contemporaine, où la gestion précise des ondes acoustiques est essentielle.

I.5.7. Filtrage

La propriété de filtrage des cristaux phononiques 1D est l'une des applications les plus directes. En ajustant la périodicité et le contraste d'impédance acoustique, il est possible de concevoir des filtres acoustiques qui permettent le passage de certaines bandes de fréquences tout en bloquant d'autres. Leur haute sélectivité en fréquence et la possibilité de miniaturisation les rendent utiles dans des applications variées, allant des systèmes de communication à la métrologie de précision. De tels filtres sont également envisagés pour la séparation des signaux acoustiques dans les systèmes multifréquence.

I.6. Conclusion

Ce chapitre présente les principes fondamentaux des cristaux phononiques et des ondes acoustiques. Les cristaux phononiques sont un secteur émergent dans le domaine de la physique appliquée qui a suscité un vif intérêt de la part de la communauté scientifique au cours des vingt dernières années. Ces structures périodiques, constituées d'au moins deux matériaux distincts, nous donnent la capacité de diriger et de réguler la propagation des ondes mécaniques à travers les matériaux. La technologie des cristaux phononiques ouvre des nouvelles perspectives, en particulier pour la bio-détection. Enfin, nous avons cité quelques notions de base concernant certaines utilisations des technologies phononiques.

CHAPITRE II

*Méthodes numériques
de simulation*

II.1. Introduction

L'introduction des techniques de simulation assistée par ordinateur implique le déploiement d'algorithmes pour recréer des processus existants dans le monde réel et concevoir des données sans mener d'expérimentations physiques. Avec l'avancée de la technologie informatique et l'élargissement des possibilités de calcul, ces techniques gagnent en popularité à travers de multiples secteurs, y compris dans le domaine du génie, de la physique et des sciences de la vie. Elles sont particulièrement appréciées pour leur aptitude à éclairer sur des systèmes complexes qui seraient difficiles, voire impossibles, à analyser via des méthodes conventionnelles.

Elles permettent la simulation de la transmission des ondes acoustiques dans des agencements périodiques et l'examen des caractéristiques des cristaux phononiques telles que les dimensions et la localisation des bandes interdites, les coefficients de transmission et de réflexion, ainsi que la vitesse de propagation des ondes.

L'étude de structures cristallines phononiques périodiques constitue un champ de recherche dynamique, favorisant la création et l'optimisation de nouvelles configurations. Diverses techniques de simulation ont été élaborées : la méthode des éléments finis (FEM), la méthode des différences finies en temporel (FDTD), la méthode d'expansion par ondes planes (PWE) et la méthode de transfert matriciel (TMM). Il existe également un éventail de logiciels pour la modélisation des cristaux phononiques, notamment COMSOL Multiphysics, Lumerical FDTD et MATLAB.

Ce chapitre détaille certains outils de simulation numérique, en insistant sur diverses approches et algorithmes fréquemment utilisés. Nous considérerons aussi bien les bénéfices que les simulations numériques peuvent apporter que les défis et limites auxquels les chercheurs peuvent se heurter dans leur utilisation.

II.2. Méthode des éléments finis FEM

La technique des éléments finis (FEM) représente une approche numérique courante pour le traitement des équations différentielles fréquemment rencontrées dans le domaine de l'ingénierie et de la modélisation mathématique. Cette méthode efficace apporte des réponses à des questions complexes en décomposant une structure en segments plus élémentaires et en évaluant chaque segment de manière isolée. Fondée sur la notion de discrétisation, la structure est segmentée en petits éléments interconnectés par des points de jonction, ou nœuds. Pendant l'analyse, les distributions de charge, les conditions limites et les caractéristiques des matériaux

de chaque élément sont considérées, résultant en un système d'équations qui modélise le fonctionnement global de la structure [20].

Sur le plan historique, l'utilisation initiale de la FEM s'est concentrée sur des enjeux structuraux en mécanique, avec un accent particulier sur la résolution des questions de contraintes et de déformations dans les matériaux élastiques. L'introduction de cette méthode remonte aux années 1940 et est l'œuvre de Richard Courant, un mathématicien allemand, qui s'est penché sur des techniques analytiques pour les équations aux dérivées partielles. Bien que les premiers usages de la FEM aient été principalement axés sur la mécanique structurelle et le transfert thermique, son application s'est élargie à des domaines diversifiés, incluant la mécanique des fluides, l'électromagnétisme et l'acoustique.

II.2.1. Variétés de la Méthode des Éléments Finis

- Plusieurs variétés de la FEM : éléments finis standards, Galerkin discontinue, éléments finis mixtes, avantages et limites selon le problème.
- Méthode statique linéaire courante pour prédiction des systèmes linéaires sous charges statiques.
- Méthode non linéaire pour déformations importantes ou non-linéarité des matériaux.
- Analyse dynamique pour charges en mouvement et systèmes évolutifs.
- Analyse thermique pour comportement des matériaux et structures sous température.
- Interaction fluide-structure pour l'étude couplée des fluides et solides.
- FEM : des outils variés pour des problèmes d'ingénierie et de physique, largement adoptés en recherche et industrie [21].

II.2.2. Processus de la méthode des éléments finis

- Discrétisation de la structure en multiple éléments finis.
- Dérivation des équations élémentaires basées sur l'élasticité et la rigidité.
- Assemblage des équations globales à travers les connexions des éléments finis.
- Résolution du système d'équations global via des techniques numériques (inversion matricielle, élimination de Gauss, méthodes itératives).
- Post-traitement des résultats pour déterminer les valeurs requises.

Prenons l'exemple d'une fonction de trois variables $f(x_1, x_2, x_3)$, l'équation suivante :

$$a_1 \frac{\partial f}{\partial x_1} + a_2 \frac{\partial f}{\partial x_2} + \frac{\partial f}{\partial x_3} + A = 0 \quad \dots\dots\dots (II.1)$$

L'équation II.1 est une équation aux dérivées partielles. Cette équation est associée aux conditions aux limites (valeurs de la fonction ou de ses dérivées partielles en certains points). Notons que :

- La fonction f peut être une fonction vectorielle,
- L'équation fait souvent intervenir des dérivées secondes $\partial^2 f / \partial x_i^2$ ou $\partial^2 f / \partial x_i \partial x_j$ (voire d'ordres plus élevés),
- Et que les coefficients a_i et A ne sont pas nécessairement des constantes mais peuvent être des fonctions.

La résolution exacte, analytique, de telles équations devient vite impossible manuellement. Par contre, si l'on découpe le domaine spatial en éléments finis, on peut résoudre simplement l'équation aux dérivées partielles sur chaque élément [22].

Les simulations par la méthode des éléments finis impliquent plusieurs étapes clés qui jettent les bases d'un modèle précis et exact. Voici un aperçu des étapes essentielles impliquées dans la réalisation de simulations par la méthode des éléments finis :

- Développement d'un modèle du système ou de la structure à analyser.
- Génération du maillage de la géométrie complexe du système en petits
- Définition des équations différentielles gouvernantes le comportement de la structure.
- Résoudre les déplacements nodaux en utilisant diverses techniques numériques ;
- Calculer les contraintes et les déformations des éléments puis les comparer aux propriétés des matériaux définis précédemment ;
- Les résultats des simulations de la méthode des éléments finis sont évalués pour déterminer la validité du modèle.
- Post-traitement qui consiste à produire des représentations visuelles des résultats.

II.2.3. Bénéfices et Utilisations de la technique FEM

La technique des éléments finis est mise en œuvre dans divers domaines du design technique, notamment pour l'analyse de la tension et la déformation dans les pièces mécaniques, la création de dispositifs électromagnétiques, ainsi que le design de systèmes de flux de fluides. Elle est aussi employée dans l'analyse d'équipements médicaux, tels que les implants et prothèses.

La FEM peut simuler l'interaction des ondes sonores avec les cristaux phononiques et d'autres structures régulières. Elle divise les structures complexes en éléments finis, une méthode de calcul qui s'appuie sur une modélisation mathématique simplifiée pour estimer le comportement de la structure, et résout ceux-ci de façon itérative pour modéliser la propagation

des ondes mécaniques. La méthode FEM est appliquée dans de nombreux champs concernant la propagation d'ondes acoustiques : des ondes libres et guidées, aux vibrations et la diffusion.

Les simulations numériques par la FEM permettent aux chercheurs d'examiner en profondeur la propagation des ondes sonores dans les cristaux phononiques. Ces simulations ont révélé que ces cristaux peuvent diriger et manipuler avec précision la direction et la fréquence des ondes sonores, ce qui augmente significativement leur champ d'applications potentielles dans des secteurs tels que le contrôle acoustique, la détection et l'imagerie.

La méthode FEM est aussi utilisée pour analyser l'effet de différents facteurs sur le comportement de la structure. Les résultats démontrent que cette méthode est pertinente pour représenter le comportement des cristaux phononiques face à la propagation d'ondes acoustiques. Elle peut prédire les bandes interdites, définir les constantes élastiques de la structure, et modéliser la propagation, la réflexion, et l'absorption des ondes.

En outre, des avancées dans la recherche sur les structures cristallines phononiques via des simulations FEM pourraient mener à la création de nouveaux dispositifs et applications pour manipuler les ondes acoustiques / élastiques.

La technique des éléments finis est une approche numérique avancée qui a transformé le domaine du génie technique. Elle offre une méthode systématique pour examiner des structures et systèmes complexes, ce qui permet aux ingénieurs d'optimiser les conceptions et de réduire les erreurs.

Les simulations par éléments finis sont un moyen extrêmement efficace pour représenter avec précision le comportement de structures complexes. Les étapes essentielles du processus comportent la création du modèle, la production du maillage, la spécification des équations directrices, le calcul des déformations nodales, la mesure des tensions et des déformations des éléments, l'évaluation des résultats et l'analyse post-simulation. Si chaque étape est méticuleusement exécutée, les simulations FEM peuvent produire des prédictions très justes et fiables sur le comportement des systèmes analysés [23].

II.3. Technique de différences finies en temporalité (FDTD)

La technique de différences finies en temporalité (ou Domaine Temporel pour les Différences Finies - FDTD) représente une approche de modélisation numérique déployée pour déchiffrer des enjeux liés aux champs électromagnétiques. Elle se fonde sur la discrétisation dans les dimensions spatiales et temporelles et le traitement numérique des équations de Maxwell, appliqué de manière isolée pour chaque point de l'espace et instant dans le temps. La FDTD s'avère pertinente pour la modélisation d'une vaste gamme de problématiques

électromagnétiques, englobant les circuits à micro-ondes, les antennes, et les dispositifs à base de photons.

La simulation de la transmission des ondes acoustiques à travers des structures cycliques et des cristaux phononiques est un défi complexe qui exige des méthodologies de modélisation poussées. La méthode FDTD compte parmi les moyens les plus performants pour réaliser ces types de simulations [24].

Spécialement taillée pour les simulacres qui nécessitent de combiner les ondes électromagnétiques et acoustiques, la FDTD trouve fréquemment son application dans la conception et l'examen de cristaux phononiques et autres architectures périodiques.

II.3.1. Genèse et fondement de la FDTD

Introduit initialement dans les années 1960 par K. S. Yee, le principe des différences finies en temporalité n'a régalement capté l'intérêt qu'au cours des années 1980, ère où les chercheurs ont commencé à utiliser des systèmes informatiques pour mener des études complexes. Depuis cette période, la FDTD s'est imposée comme l'une des techniques prédominantes pour la représentation numérique des champs électromagnétiques [24].

Ce procédé repose sur la transformation des équations de Maxwell, qui régissent les champs électromagnétiques, en un système d'équations différentielles finies, traitées séparément pour chaque point spatial et moment temporel.

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\vec{E}) = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad \operatorname{rot}(\vec{E}) = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} & \dots\dots\dots (II.2) \\ \text{(Maxwell-Gauss)} \quad \text{(Maxwell-Faraday)} & \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\vec{B}) = 0 \quad \operatorname{rot}(\vec{B}) = \mu_0 \vec{J} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} & \dots\dots\dots (II.3) \\ \text{(Maxwell-Flux)} \quad \text{(Maxwell-Ampère)} & \end{aligned}$$

Ces équations sont ensuite résolues à l'aide de techniques numériques, telles que l'algorithme leap-frog ou le schéma de Crank-Nicolson. Les solutions résultantes fournissent une représentation précise du comportement des champs électromagnétiques dans la structure simulée.

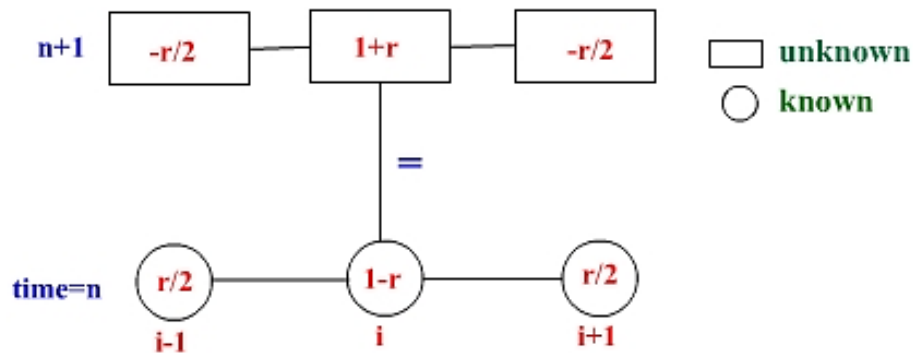


Figure II.1 : Méthode Crank-Nicolson [25]

La technique FDTD opère par la segmentation de l'espace de calcul en un réseau de cellules réduites. L'onde en transposition est reconstituée dans son parcours au sein de chaque cellule, en considérant les attributs des substances et les conditions limitrophes de la simulation.

Les opérations se déroulent via des intervalles de temps distincts, où la résolution à chaque intervalle s'établit sur la base des résolutions antérieures.

Dans l'objectif de modéliser des ondes acoustiques au travers de structures cycliques, le procédé FDTD peut servir à définir les propriétés de transmission, réflexion et diffraction de ladite structure. Ces données sont alors exploitables pour des analyses plus poussées, comme la conception de filtres ou la canalisation des ondes acoustiques en directions choisies.

La FDTD offre aussi la possibilité d'examiner les répercussions de déformations ou d'altérations sur le comportement structural [26].

La méthode FDTD, lorsqu'appliquée à des structures périodiques, est capable de calculer plusieurs caractéristiques importantes, telles que:

1. Les coefficients de transmission : Elle détermine la part de l'onde acoustique ou électromagnétique qui traverse la structure.
2. Les coefficients de réflexion : Elle évalue quel pourcentage de l'onde est réfléchi par la structure.
3. Le phénomène de dispersion : La méthode analyse comment les différentes fréquences d'une onde se propagent à des vitesses variées à travers la structure, ce qui peut conduire à la séparation des ondes en composants fréquentiels.
4. Les modes de propagation : Elle identifie les manières spécifiques dont les ondes se propagent à travers la structure, y compris les modes guidés et les résonances.

5. Les bandes interdites : La méthode peut prédire les fréquences auxquelles les ondes ne se propagent pas à travers la structure, créant des bandes interdites qui sont critiques pour la conception de filtres et autres dispositifs de contrôle d'onde.

6. Les effets de défauts ou d'imperfections : FDTD permet d'étudier comment les anomalies structurelles influentes sur les propriétés acoustiques ou électromagnétiques de la structure.

7. L'interaction ondes matière : Elle étudie de quelle manière les ondes interagissent avec le matériau constituant la structure périodique, prenant en compte les propriétés diélectriques et magnétiques du matériau.

En combinant ces caractéristiques, la méthode FDTD fournit une image détaillée du comportement des ondes à l'intérieur de la structure périodique, ce qui est essentiel pour le design et l'analyse de nouveaux matériaux et dispositifs dans les domaines de la photonique et de la phononique.

II.3.2. Démarche de la méthode FDTD

Les étapes clés pour exécuter une simulation par la méthode de différences finies en domaine temporel (FDTD) sont les suivantes :

- Cerner le problème : il s'agit de préciser la géométrie de l'espace de simulation, y compris les dimensions et la configuration du domaine, l'emplacement des sources et la localisation des matériaux ayant des attributs divers.
- Discrétisation de l'espace : opérer une division de l'espace de simulation en cellules élémentaires;
- Établir les conditions limites : définir les conditions aux frontières de l'espace de simulation, incluant la nature de ces conditions limites et toute valeur définie pour les champs.
- Attribuer les caractéristiques des matériaux : affecter aux cellules les propriétés matérielles adéquates, comprenant leurs constantes diélectriques, perméabilité magnétique ou conductivité.
- Détermination des coefficients d'actualisation : évaluer les coefficients permettant la réactualisation des valeurs des champs à chaque échéance temporelle.
- Avancement dans le temps : avec les coefficients d'actualisation estimés, réviser les valeurs des champs électriques et magnétiques à chaque période temporelle. Ce processus est répété jusqu'à l'aboutissement du temps de simulation ciblé.
- Examen des données : après l'achèvement de la simulation, les données recueillies sont examinées afin de déchiffrer le comportement des champs, y compris leur amplitude, le sens de propagation et quelconque interaction avec des constructions ou matières avoisinantes.

La méthode FDTD est apte à la simulation d'un éventail vaste de systèmes, qu'ils soient électromagnétiques ou acoustiques, incluant des architectures élaborées ou des matières périodiques. Cette approche technique, aux multiples domaines d'application comme l'optique, l'électronique, et l'acoustique, demeure un instrument d'analyse et de conception inestimable pour les chercheurs et concepteurs qui ambitionnent d'optimiser la conception et les fonctionnalités des dispositifs complexes [27].

II.3.3. Avantages et limitations de la méthode FDTD

La méthode FDTD peut être utilisée pour l'analyse des champs électromagnétiques, notamment la conception de circuits hyperfréquences, d'antennes et de dispositifs photoniques. Elle est également utilisée pour modéliser la propagation des ondes électromagnétiques dans des milieux complexes, tels que les tissus biologiques.

- L'un des principaux avantages de la méthode FDTD est sa précision, car elle fournit une représentation très précise du comportement électromagnétique d'une structure.
- La FDTD est également bien adaptée à la modélisation de structures aux géométries complexes, car elle peut facilement gérer des formes irrégulières et des angles vifs.
- De plus, la méthode FDTD est efficace en termes de calcul, ce qui en fait un bon choix pour les simulations complexes nécessitant une puissance de calcul élevée.

Parmi les limitations de la méthode FDTD, on peut citer les suivantes:

- Le schéma de Yee impose une discrétisation en mailles régulières.
- Il faut des longueurs d'arêtes entre $\lambda/16$ et $\lambda/20$ pour avoir la convergence en maillage.
- Il est difficile de prendre en compte des matériaux dispersifs.
- Les conditions aux limites approchées introduisent une approximation qui peut avoir une influence sur la précision du calcul.
- La méthode FDTD étant un schéma explicite, le pas temporel maximal est relié au pas spatial par une condition de stabilité.
- Le pas de maillage et par conséquent le pas sur le temps sont liés à la plus petite longueur d'onde λ considérée. Un maillage typique aura au moins 10 mailles par longueur d'onde pour garantir une précision acceptable sur la solution. Donc, pour traiter un objet de taille 100λ , il faudra un maillage $1000 \times 1000 \times 1000$, soit 6 milliards d'inconnues scalaires, d'où un coût mémoire très important sur de gros maillages.

Le principal inconvénient de la FDTD est qu'elle nécessite de longs temps de calculs et un espace mémoire important, en particulier pour les calculs 3D.

II.4. Méthodologie d'expansion des ondes planes (PWE)

L'approche connue sous le nom d'expansion des ondes planes (PWE pour Plane Wave Expansion) représente une procédure de calcul sophistiquée pour examiner les structures de bande des milieux périodiques. Elle repose sur un principe mathématique, celui que les ondes stables peuvent être décomposées en une superposition d'ondes planes diverses.

La méthode PWE s'avère être une méthode d'analyse souvent privilégiée dans la recherche des caractéristiques liées aux champs électromagnétiques, acoustiques et même aux contraintes mécaniques au sein des milieux comme les cristaux photoniques, les matières acoustiques, les semi-conducteurs et différents autres milieux à caractère périodique, révélant ainsi leurs diagrammes de bande spécifiques [28].

II.4.1. Fondement et Evolution de la méthode PWE

La genèse de la méthode PWE remonte aux découvertes scientifiques des années 1920 et 1930, période pendant laquelle les chercheurs ont fait des avancées significatives dans la compréhension de la réfraction des ondes électromagnétiques et acoustiques par les structures périodiques. Toutefois, il aura fallu attendre les décennies 1960 et 1970 pour que des progrès concrets soient effectués dans l'application de la PWE aux milieux tels que les cristaux photoniques et les matériaux acoustiques. Aujourd'hui, cet outil est un pilier dans l'analyse et la compréhension des structures de bande des matériaux périodiques.

II.4.2. Cadre Théorique de la méthode PWE

La méthode PWE tire ses fondements théoriques de l'expansion de la fonction de Bloch, elle-même illustrant les modes de propagation dans un milieu périodique. Cette fonction peut être exprimée grâce à un ensemble d'ondes planes à partir d'un éventail fini, en concordance avec des conditions limites périodiques dictées par la structure du milieu. En résolvant une série d'équations linéaires, on peut déterminer les coefficients associés à chaque onde plane, et par intégration, préciser avec exactitude la nature des bandes interdites qui s'établissent dans le matériau étudié.

II.4.3. Utilisations Diversifiées de la méthode PWE

En plus d'être cruciale pour l'étude des cristaux photoniques, qui grâce à leurs caractéristiques périodiques, révèlent des bandes interdites photoniques distinctes, la PWE est fondamentale pour l'examen des propriétés des cristaux acoustiques. De fait, dans le domaine des ondes acoustiques, ses implications sont similaires. Élargissant son champ d'applications, cette

méthode est également utilisée pour décortiquer les phénomènes physiques au sein de super-réseaux semi-conducteurs, de méta-matériaux, et de matériaux magnétiques, entre autres.

La méthode PWE déploie ses atouts dans la simulation de la diffusion des ondes acoustiques à travers des agencements périodiques, ainsi que pour l'investigation des comportements complexes des cristaux phononiques. Ce processus consiste à modéliser les ondes comme une agrégation d'ondes planes, dont la composition et les interactions sont ensuite méticuleusement étudiées pour déduire les lois régissant la structure [29].

II.4.4. Déroulement méthodique de la PWE

La démarche PWE, de sa conception formelle à son application pratique, forme un arsenal numérique prodigieux qui jouit d'une vaste utilisation dans l'analyse de la périodicité des matériaux. Elle se distingue par sa précision redoutable et par son efficacité dans la prédiction des configurations de bande dans tout un éventail de cristaux, qu'ils soient de nature photonique, acoustique, ou autre. Les étapes de cette méthode s'étendent comme suit :

- **Caractérisation du Cristal** : Cette étape nécessite une définition exhaustive de la géométrie du cristal ou de la structure périodique concernée, en prenant en compte les dimensions de la cellule unitaire, sa forme, ainsi que la répartition des matériaux qui la constituent.
- **Segmentation de la Structure** : Il s'agit ensuite de diviser cette cellule unitaire en un maillage de points, chacun devenant le siège d'une fonction de base représentative du champ de déplacement à cet emplacement.

II.5. Méthodes de la Matrice de Transfert

Pour approfondir l'étude de la diffusion des ondes au sein de structures stratifiées, nous nous appuyons sur une approche qui combine l'usage d'équations locales précises à celui de conditions inter-faciales bien définies. Afin de représenter de manière adéquate le passage d'un vecteur à travers les diverses couches qui composent le milieu, il est indispensable d'introduire ce que l'on nomme une matrice globale. Cette dernière joue un rôle crucial, car elle permet d'assurer la continuité des contraintes mécaniques et des déformations à travers les interfaces.

Parmi les techniques employées pour démêler cette complexité, on retrouve notamment la matrice de transfert Thomson-Haskell ainsi que la matrice d'impédance de surface; ces outils analytiques et numériques se révèlent être indispensables pour résoudre les équations caractéristiques de notre problème. Cependant, il est important de souligner que la complexité numérique de ces opérations tend à s'accroître en fonction du nombre d'éléments impliqués et de l'amplitude de la longueur d'onde étudiée.

Pour parvenir à des résultats justes et précis, il est essentiel de veiller à ce que les problèmes soient correctement dimensionnés et que les matrices impliquées soient bien conditionnées. Lorsque nous nous retrouvons face à un milieu multicouche de nature périodique, nous pouvons faire appel aux ondes de Bloch ou aux ondes de Floquet, des concepts qui tirent leur origine de la physique de l'état solide. D'un autre côté, si le milieu se caractérise par son homogénéité et sa continuité, le développement en série de Peano se présente comme une méthode offrant une solution analytique viable et robuste [30].

II.5.1. Super-réseaux unidimensionnels

Prenons en compte un super-réseau composé de deux couches successives, représenté dans la figure II.5. Les couches 1 et 2 ont des épaisseurs d_1 et d_2 , ainsi que des impédances Z_1 et Z_2 respectives.

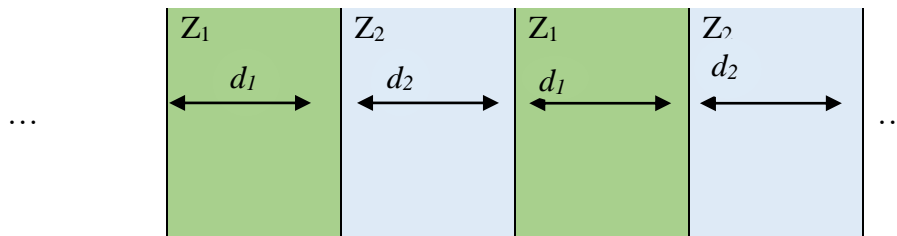


Figure II.2 : Un super-réseau à CnP-1D formé par alternance de deux couches d'impédances Z_1 et Z_2

Nous écrivons d'abord les équations fondamentales de l'acoustique [21]:

$$\begin{cases} \frac{\partial P}{\partial x} = -\rho(x) \frac{\partial v}{\partial t} \\ \frac{\partial P}{\partial t} = -Y(x) \frac{\partial v}{\partial x} \end{cases}, \quad c = \sqrt{\frac{Y}{\rho}} \dots \dots \dots \text{II.4}$$

Où (P) est la pression, (v) est la vitesse des particules, (ρ) est la masse volumique et (Y) est le module de Young. Ces équations sont équivalentes à:

$$\begin{cases} \frac{\partial \tau}{\partial x} = \rho(x) \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \\ \tau = Y(x) \frac{\partial u}{\partial x} \end{cases} \dots \dots \dots \text{II.5}$$

Où :

($\tau = -p$) est la contrainte et (u) est le déplacement des particules.

Pour une onde harmonique, la solution générique de ce système d'équations pour une couche d'impédance Z_i est une onde plane, composée d'une onde incidente d'amplitude A et d'une onde réfléchie d'amplitude B . Dans ce cas, en considérant $p = Ve^{j\omega t}$ et $v = Ve^{j\omega t}$, nous pouvons écrire la solution ainsi :

$$\begin{cases} P = Z_i A(\omega) e^{-jkx} - Z_i B(\omega) e^{jkx} \\ V = A(\omega) e^{-jkx} + B(\omega) e^{jkx} \end{cases} \dots\dots\dots \text{II.6}$$

II.5.2. Le Cadre de la Matrice de Transfert

L'approche formelle de la matrice de transfert est caractérisée par une solution qui peut être exprimée à l'aide des équations précédentes qui prend la forme d'un produit matriciel impliquant une matrice et un vecteur. Ce cadre matriciel est particulièrement efficace pour formuler la description des phénomènes de propagation d'ondes à travers des structures multicouches, que ces structures aient des imperfections ou non. Nous allons établir que dans des situations spécifiques, notamment pour des couches conçues pour avoir une épaisseur égale à un quart de la longueur d'onde cible, les propriétés se simplifient notablement et révèlent des caractéristiques d'un grand intérêt pratique. Cela est dû à leur capacité d'influencer et de contrôler la phase des ondes traversantes de manière significative, ce qui ouvre la porte à de nombreuses applications dans le domaine de l'optique et de la photonique.

- Propagation dans une couche

À partir de l'équation (II.20), la propagation dans une couche, de la position $x = 0$ à la position x peut être écrite comme un produit de matrices:

$$\begin{bmatrix} P \\ V \end{bmatrix}_x = \begin{bmatrix} Z_i e^{-jk_i x} & -Z_i e^{jk_i x} \\ e^{-jk_i x} & e^{jk_i x} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}_0 = \begin{bmatrix} Z_i & -Z_i \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{-jk_i x} & 0 \\ 0 & e^{jk_i x} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}_0 \dots\dots\dots \text{II.7}$$

Nous pouvons écrire:

$$\begin{bmatrix} P \\ V \end{bmatrix}_x = F_i H_i \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}_0 \dots\dots\dots \text{II.8}$$

Avec :

$$F_i = \begin{bmatrix} Z_i & -Z_i \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \text{ et } H_i = \begin{bmatrix} e^{-jk_i x} & 0 \\ 0 & e^{jk_i x} \end{bmatrix} \dots\dots\dots \text{II.9}$$

Dans l'équation (II.23), H_i décrit la propagation des ondes dans la couche i à une distance x . On peut également noter que :

$$\begin{bmatrix} P \\ V \end{bmatrix}_0 = F_i \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}_0 \dots\dots\dots \text{II.10}$$

Alors :

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}_0 = F_i^{-1} \begin{bmatrix} P \\ V \end{bmatrix}_0 \text{ avec : } F_i^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{Z_i} & 1 \\ -\frac{1}{Z_i} & 1 \end{bmatrix} \dots\dots\dots \text{II.11}$$

De cette façon, on obtient pour la propagation à travers une couche d'impédance Z_i et une longueur x :

$$\begin{bmatrix} P \\ V \end{bmatrix}_x = F_i H_i F_i^{-1} \begin{bmatrix} P \\ V \end{bmatrix}_0 = M_i \begin{bmatrix} P \\ V \end{bmatrix}_0 \dots\dots\dots \text{II.12}$$

Avec :

$$M_i = F_i H_i F_i^{-1} \begin{bmatrix} \cos(k_i x) & -jZ_i \sin(k_i x) \\ -\frac{1}{Z_i} \sin(k_i x) & \cos(k_i x) \end{bmatrix} \dots\dots\dots \text{II.13}$$

- Propagation dans une bicouche

Pour écrire la propagation dans une bicouche, nous utilisons la propriété de continuité de P et V aux interfaces:

$$\begin{bmatrix} P \\ V \end{bmatrix}_{x^+} = \begin{bmatrix} P \\ V \end{bmatrix}_{x^-} \dots\dots\dots \text{II.14}$$

où x^+ appartient à Z_2 et x^- appartient à Z_1 . Ainsi, nous avons:

$$\begin{bmatrix} P \\ V \end{bmatrix}_{d_1+d_2} = M_2 M_1 \begin{bmatrix} P \\ V \end{bmatrix}_0 = M \begin{bmatrix} P \\ V \end{bmatrix}_0 \dots\dots\dots \text{II.15}$$

Avec :

$$M = \begin{bmatrix} \cos(k_2 k_2) & -jZ_2 \sin(k_2 k_2) \\ -\frac{j}{Z_2} \sin(k_2 k_2) & \cos(k_2 k_2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos(k_1 k_1) & -jZ_1 \sin(k_1 k_1) \\ -\frac{j}{Z_1} \sin(k_1 k_1) & \cos(k_1 k_1) \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} \cos(k_1 k_1) \cos(k_2 k_2) - \frac{Z_2}{Z_1} \sin(k_1 k_1) \sin(k_2 k_2) & -jZ_1 \cos(k_2 k_2) \sin(k_1 k_1) - jZ_2 \sin(k_2 k_2) \cos(k_1 k_1) \\ -\frac{j}{Z_2} \cos(k_1 k_1) \sin(k_2 k_2) - \frac{j}{Z_1} \cos(k_2 k_2) \sin(k_1 k_1) & -\frac{Z_1}{Z_2} \sin(k_1 k_1) \sin(k_2 k_2) - \frac{Z_2}{Z_1} \sin(k_1 k_1) \sin(k_2 k_2) \end{bmatrix}$$

Ou sous forme condensée :

$$M = (F_2 H_2 F_2^{-1})(F_1 H_1 F_1^{-1}) \dots\dots\dots \text{II.16}$$

Dans un milieu périodique ($d = d_1 + d_2$), les modes de propagation sont les modes de Bloch et les valeurs propres de M sont donnés par :

$$Y_1 = e^{jkd} \dots\dots\dots \text{II.17}$$

$$Y_2 = e^{-jkd} \dots\dots\dots \text{II.18}$$

la trace de la matrice M est:

$$Tr(M) = Y_1 + Y_2 = 2\cos(kd) \dots\dots\dots \text{II.19}$$

La loi de dispersion du milieu infini périodique bicouche peut s'écrire:

$$\cos(kd) = \frac{1}{2} Tr(M) = \cos(k_1 d_1) \cos(k_2 d_2) - \frac{1}{2} \left(\frac{Z_1}{Z_2} + \frac{Z_2}{Z_1} \right) \sin(k_1 d_1) \dots\dots \text{II.20}$$

À l'aide de l'équation (II.35), nous pouvons calculer les courbes de dispersion.

Pour un super-réseau 1D, la première zone de Brillouin s'étend de $-\pi/d$ à $+\pi/d$ pour les vecteurs d'onde k. En considérant le terme $F_2^{-1} F_1$ dans l'équation (II.31), nous pouvons maintenant donner une interprétation physique des matrices F_i :

$$F_2^{-1}F_1 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \frac{1}{Z_2} & \mathbf{1} \\ -\frac{1}{Z_2} & \mathbf{1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Z_1 & -Z_1 \\ \mathbf{1} & \mathbf{1} \end{bmatrix} = \frac{Z_1+Z_2}{2Z_2} \begin{bmatrix} \mathbf{1} & rp \\ rp & \mathbf{1} \end{bmatrix} = \frac{1}{tp} \begin{bmatrix} \mathbf{1} & \frac{Z_2-Z_1}{Z_1+Z_2} \\ \frac{Z_2-Z_1}{Z_1+Z_2} & \mathbf{1} \end{bmatrix} =$$

$$M_{12}^t \dots \dots \dots \text{II.21}$$

Ou :

$$rp = \frac{Z_2-Z_1}{Z_1+Z_2} \dots \dots \dots \text{II.22}$$

r_p : est le coefficient de réflexion entre un milieu d'impédance Z_1 et un autre d'impédance Z_2 .

et
$$tp = \frac{2Z_2}{Z_1+Z_2} \dots \dots \dots \text{II.23}$$

t_p : est le coefficient de transmission du même support, il semble donc que M_{12}^t représente la matrice de transfert via une interface entre le support 1 et le support 2.

- Propagation des Amplitudes

On peut aussi relier les amplitudes A et B en position d aux amplitudes A et B en position 0 avec :

$$\begin{bmatrix} P \\ V \end{bmatrix}_{d_1^-} = F_1 H_1 \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}_0 \dots \dots \dots \text{II.24}$$

Et

$$\begin{bmatrix} P \\ V \end{bmatrix}_{d_1^+} = \begin{bmatrix} P \\ V \end{bmatrix}_{d_1^-} \dots \dots \dots \text{II.25}$$

Manent :

$$\begin{bmatrix} P \\ V \end{bmatrix}_{d_1^+} = F_1 H_1 \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}_0 \text{ et } \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}_{d_1^+} = F_2^{-1} \begin{bmatrix} P \\ V \end{bmatrix}_{d_1^+} \dots \dots \dots \text{II.26}$$

Après propagation à travers la Z_2 , on obtient:

$$\begin{bmatrix} P \\ V \end{bmatrix}_{d^+} = \begin{bmatrix} P \\ V \end{bmatrix}_{d^-} = (F_2 H_2)(F_2^{-1} F_1 H_1) \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}_0 \dots \dots \dots \text{II.27}$$

et enfin :

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}_{d^+} = (F_1^{-1} F_2 H_2)(F_2^{-1} F_1 H_1) \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}_0 = C_1 \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}_0 \dots \dots \dots \text{II.28}$$

Ou nous avons introduit les notations suivantes :

$$C_1 = \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ \beta^* & \alpha^* \end{bmatrix}, \text{ avec } \begin{cases} \alpha = (\cos(k_2 d_2) - jS \sin(k_2 d_2)) e^{-jk_2 d_2} \\ \beta = jD_{12} \sin(k_2 d_2) e^{jk_1 d_1} \\ S = \frac{1}{2} \left(\frac{Z_1}{Z_2} + \frac{Z_2}{Z_1} \right) \\ D_{12} = \frac{1}{2} \left(\frac{Z_1}{Z_2} - \frac{Z_2}{Z_1} \right) \end{cases} \dots \dots \dots \text{II.29}$$

Ainsi, en exprimant les valeurs des amplitudes A et B à la position d sous forme d'un produit matriciel avec le vecteur des valeurs initiales de ces amplitudes, nous observons que :

$$\det(C_1) = \alpha\alpha^* - \beta\beta^* = 1 \dots\dots\dots \text{II.30}$$

et : $\frac{1}{2}Tr(C_1) \frac{\alpha+\alpha^*}{2} = Re(\alpha)$

$$Re(\alpha) = \cos(k_1 d_1) \cos(k_2 d_2) - S \sin(k_1 d_1) \sin(k_2 d_2) = \frac{1}{2}Tr(M) \dots\dots\dots \text{II.31}$$

- **Transmission via une bicouche**

Nous examinons la propagation d'une onde élastique dans une bicouche (Figure II.3) en utilisant le formalisme précédent pour déterminer les coefficients de transmission et de réflexion pour cette structure.

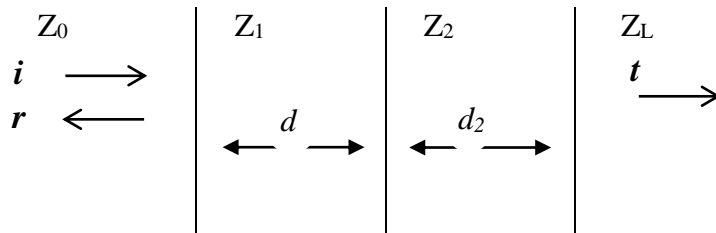


Figure II.3 : Une bicouche 1D avec des impédances Z_1 et Z_2 avec des couches externes d'impédances Z_0 et Z_L [30].

En utilisant l'équation (II.43), nous dérivons l'ensemble des équations suivantes pour Z_0 et Z_L arbitraires :

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}_L = (F_L^{-1} F_1) C_1 (F_1^{-1} F_0) \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}_0 = M \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}_0 \dots\dots\dots \text{II.32}$$

En utilisant $B_L = 0$ pour le support de sortie d'impédance Z_L , nous obtenons les coefficients de transmission (t) et de réflexion (r) : $t = A_L / A_0$ et $r = B_0 / A_0$:

$$\begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix}_0 \dots\dots\dots \text{II.33}$$

En résolvant le système d'équations, nous obtenons:

$$r = M_{21}/M_{22} \text{ et } t = \det(M)/M_{22} \dots\dots\dots \text{II.34}$$

- **Transmission via N bicouches**

Nous étudions maintenant la propagation d'une onde élastique à travers un système composé de N bicouches, comme indiqué sur Figure II.4.

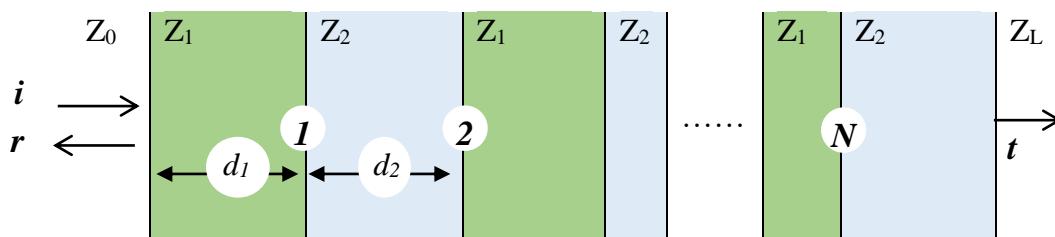


Figure II.4: Un système à cristal phononique 1D composé de N bicouches.

Pour un système de N bicouches, on peut écrire:

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}_{LN} = C_1 \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}_{L(N-1)} = C_1^N \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}_0 \dots\dots\dots \text{II.35}$$

Ainsi, en considérant une couche d'entrée d'impédance Z_0 et une couche de sortie d'impédance Z_L , la transmission est donné par: $\begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix} = M^T \begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix}$

avec : $M^T = (F_L^{-1}F_1)C_1^N(F_L^{-1}F_0) \dots\dots\dots \text{II.37}$

- **Transmission par N bicouches avec un défaut**

Nous étudions maintenant la propagation d'une onde élastique à travers le système composé de N bicouches et d'un défaut central, comme représenté sur la figure II.5 [29] :

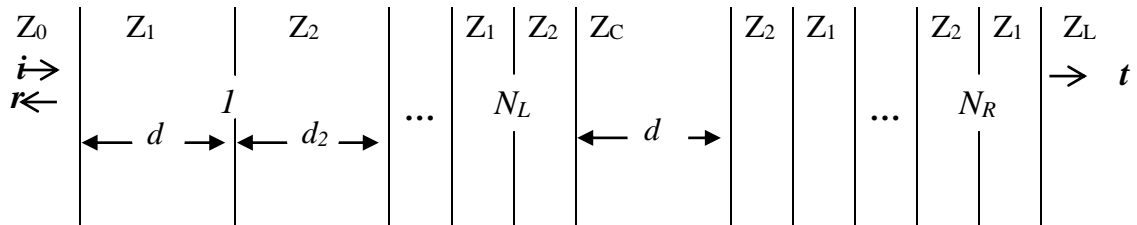


Figure II.5 Un système 1D composé de N bicouches et d'un défaut central de largeur d_c et d'impédance Z_c .

Dans ce cas la transmission est donnée par :

$$\begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix} = M^T \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix}, \text{ avec } M^T = M^{TR}H_C M^{TL} \dots\dots\dots \text{II.38}$$

Avec :

$$\begin{cases} M^{TL} = (F_C^{-1}F_1)C_1^{NL}(F_1^{-1}F_0) \\ M^{TR} = (F_L^{-1}F_2)C_2^{NR}(F_2^{-1}F_C) \\ C_2 = (F_2^{-1}F_1H_1)(F_1^{-1}F_2H_2) \end{cases} \dots\dots\dots \text{II.39}$$

- **Transmission à travers N bicouches avec couches quart d'onde**

Notre objectif est de dériver une expression analytique épurée pour déterminer le coefficient de transmission qui traverse un ensemble de N bicouches dont l'épaisseur est ajustée à un quart de longueur d'onde. Cette démarche vise à établir une corrélation directe entre le facteur de qualité d'un résonateur et deux paramètres clés : le nombre de bicouches en cascade et le déphasage induit par la différence d'impédance à l'interface de deux couches successives.

$$\begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ \alpha & \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha + \beta & 0 \\ 0 & \alpha - \beta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \dots\dots\dots \text{II.40}$$

$$\begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 \\ \beta_1 & \alpha_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_2 & \beta_2 \\ \beta_2 & \alpha_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_2 & \beta_2 \\ \beta_2 & \alpha_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 \\ \beta_1 & \alpha_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_1\alpha_2 + \beta_1\beta_2 & \alpha_1\beta_2 + \alpha_2\beta_1 \\ \alpha_2\beta_1 + \alpha_1\beta_2 & \alpha_1\alpha_2 + \beta_1\beta_2 \end{bmatrix} \dots\dots\dots \text{II.41}$$

Puisque nous utilisons des couches quart d'onde, nous réécrivons la matrice C_1 de l'équation en utilisant:

$$d_1 = \frac{\lambda_1}{4} \text{ et } d_2 = \frac{\lambda_2}{4} \text{ ou équivalent:}$$

$$k_1 d_1 = k_2 d_2 = \frac{\pi}{2} \dots\dots\dots \text{II.42}$$

Donc, nous pouvons obtenir:

$$C_1 = \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ \beta & \alpha \end{bmatrix}, \text{ avec } \begin{cases} \alpha = -S \\ \beta = -D_{12} \\ S = \frac{1}{2} \left(\frac{z_1}{z_2} + \frac{z_2}{z_1} \right) \\ D_{12} = \frac{1}{2} \left(\frac{z_1}{z_2} - \frac{z_2}{z_1} \right) \end{cases} \dots\dots\dots \text{II.43}$$

Dans ce cas :

$$\det(C_1) = \alpha^2 - \beta^2 = 1 \dots\dots\dots \text{II.44}$$

et :

$$\alpha + \beta = \frac{z_1}{z_2}, \alpha - \beta = \frac{z_2}{z_1} \dots\dots\dots \text{II.45}$$

En utilisant l'équation II.54, nous obtenons :

$$C_1^N = \begin{bmatrix} \alpha_N & \beta_N \\ \beta_N & \alpha_N \end{bmatrix}, \text{ avec } \begin{cases} \alpha_N = \frac{(\alpha+\beta)^N + (\alpha-\beta)^N}{2} \\ \beta_N = \frac{(\alpha+\beta)^N - (\alpha-\beta)^N}{2} \end{cases} \dots\dots\dots \text{II.46}$$

Nous notons que :

$$\det(C_1^N) = \alpha_N^2 - \beta_N^2 = (\det(C_1))^N = 1 \dots\dots\dots \text{II.47}$$

et :

$$\alpha_N + \beta_N = (\alpha + \beta)^N, \alpha_N - \beta_N = (\alpha - \beta)^N \dots\dots\dots \text{II.48}$$

Dans le cas général, sans hypothèse sur les valeurs de Z_0 et Z_L , d'après l'équation (II.35), les coefficients de réflexion et de transmission sont donnés par :

$$r = -\frac{M_{21}^T}{M_{22}^T}, \text{ et } t = \frac{\det(M^T)}{M_{22}^T} \dots\dots\dots \text{II.49}$$

en utilisant les expressions II.22,II.23 et II.25 :

$$F_1^{-1}F_0 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \frac{1}{z_1} & 1 \\ -\frac{1}{z_1} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Z_0 & -Z_0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 + \frac{Z_0}{z_1} & 1 - \frac{Z_0}{z_1} \\ 1 - \frac{Z_0}{z_1} & 1 + \frac{Z_0}{z_1} \end{bmatrix} \dots\dots\dots \text{II.50}$$

Donc, étant donné leurs formes, selon l'équation (II.55), C_1^N et $(F_1^{-1}F_0)$ font la navette.

Donc:

$$M^T = (F_L^{-1}F_1)C_1^N(F_1^{-1}F_0) = (F_L^{-1}F_1)(F_1^{-1}F_0)C_1^N = (F_L^{-1}F_0)C_1^N \dots\dots \text{II.51}$$

Et nous obtenons :

$$F_L^{-1}F_0 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \frac{1}{Z_L} & \mathbf{1} \\ -\frac{1}{Z_L} & \mathbf{1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Z_0 & -Z_0 \\ \mathbf{1} & \mathbf{1} \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \mathbf{1} + \frac{Z_0}{Z_L} & \mathbf{1} - \frac{Z_0}{Z_L} \\ \mathbf{1} - \frac{Z_0}{Z_L} & \mathbf{1} + \frac{Z_0}{Z_L} \end{bmatrix} \dots\dots\dots \text{II.52}$$

Ce qui conduit à l'expression suivante de la matrice de transmission M^T :

$$M^T = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \mathbf{1} + \frac{Z_0}{Z_L} & \mathbf{1} - \frac{Z_0}{Z_L} \\ \mathbf{1} - \frac{Z_0}{Z_L} & \mathbf{1} + \frac{Z_0}{Z_L} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_N & \beta_N \\ \beta_N & \alpha_N \end{bmatrix} \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \alpha_N + \beta_N + (\alpha_N - \beta_N) \frac{Z_0}{Z_L} & \alpha_N + \beta_N + (\beta_N - \alpha_N) \frac{Z_0}{Z_L} \\ \alpha_N + \beta_N + (\beta_N - \alpha_N) \frac{Z_0}{Z_L} & \alpha_N + \beta_N + (\alpha_N - \beta_N) \frac{Z_0}{Z_L} \end{bmatrix} \dots\dots\dots \text{II.53}$$

En introduisant ces expressions dans l'équation (II.63), le coefficient de transmission devient:

$$t = \frac{\det M^T}{M_{22}^T} \dots\dots\dots \text{II.54}$$

Où : $\det M^T = \det F_L^{-1} \det F_0 \det C_1^N = \frac{Z_0}{Z_L}$ et $M_{22}^T = \frac{1}{2} \left((n)^N + \left(\frac{1}{n}\right)^N \frac{Z_0}{Z_L} \right) \dots\dots\dots \text{II.55}$

avec l'introduit les notations suivantes:

$$\alpha + \beta = \frac{Z_1}{Z_2} = n \text{ et } \alpha - \beta = \frac{Z_2}{Z_1} = \frac{1}{n} \dots\dots\dots \text{II.56}$$

alors l'expression de t sera :

$$t = \frac{Z_0}{Z_L} \frac{2}{(n)^N + \left(\frac{1}{n}\right)^N \frac{Z_0}{Z_L}} = \frac{2Z_0}{Z_L n^N + \frac{Z_0}{n^N}} = \frac{2n^N}{\frac{Z_L}{Z_0} n^{2N} + 1} \dots\dots\dots \text{II.57}$$

le coefficient de transmission en énergie peut s'écrire:

$$T = \frac{Z_L}{Z_0} t^2 = \frac{Z_L}{Z_0} \frac{4n^{2N}}{\left(\frac{Z_L}{Z_0} n^{2N} + 1\right)^2} \dots\dots\dots \text{II.58}$$

On peut noter que dans le cas particulier où $Z_0 = Z_L$, lorsqu'on regarde l'énergie, le coefficient de transmission est:

$$T = t^2 = \frac{4n^{2N}}{(1+n^{2N})^2} \dots\dots\dots \text{II.59}$$

Où N est le nombre de bicouches, donc 2N est le nombre des couches.

Maintenant, si l'on considère le cas où $Z_0 = Z_2$ et $Z_L = Z_1$ alors le coefficient de transmission en énergie devient:

$$T = \frac{4n^{2N+1}}{(1+n^{2N+1})^2} \dots\dots\dots \text{II.60}$$

II.5.3. Avantages et inconvénients de la TMM

L'approche de la matrice de transfert (Transfer Matrix Method ou TMM) se révèle être un outil de calcul particulièrement pertinent pour l'obtention des coefficients de réflexion et de transmission dans le cadre des structures multicouches. Elle est flexible et s'applique aux matériaux indépendamment de leurs caractéristiques, qu'ils soient non-absorbants, absorbants ou présentant des pertes. Un des avantages majeurs de cette méthode réside dans sa capacité à prendre en compte un nombre quelconque de couches composant une structure multicouche.

La TMM n'impose aucune contrainte concernant l'ordre ou la disposition périodique des couches; par exemple, dans le cas d'une structure périodique, l'unité de répétition peut comprendre autant de couches que souhaité.

Les épaisseurs ainsi que les paramètres physiques propres à chaque couche peuvent être ajustés de manière indépendante, faisant de la méthode TMM un choix prédominant pour simuler des structures multicouches, en particulier lorsque ces dernières se répètent de façon périodique.

Cette méthode est particulièrement efficace dans le cas de structures offrant un contraste élevé dans les propriétés optiques entre les différentes couches. Cependant, elle n'est pas exempte de limitations. Par hypothèse, elle suppose que chaque couche a une extension infinie le long de deux dimensions, supposition qui s'écarte de la réalité.

La TMM présente également une lacune dans le traitement de la propagation d'impulsions lumineuses, qui plus est, doit être adressée par la combinaison avec des techniques telles que la transformée de Fourier pour une analyse temporelle.

Pour contourner les erreurs potentielles dues aux hypothèses simplificatrices, il convient de modéliser les couches de manière à ce qu'elles soient suffisamment étendues pour que les résultats soient valides. Avec la méthode TMM, le calcul du champ électromagnétique se fait à travers l'établissement de relations matricielles qui lient entre elles les différentes couches de façon séquentielle.

II.6. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons abordé diverses méthodes numériques qui s'avèrent essentielles pour analyser la propagation des ondes acoustiques dans les structures périodiques, notamment les cristaux phononiques.

Notre travail s'est concentré sur l'utilisation de la méthode TMM pour sa pertinence et son adéquation avec l'étude des phénomènes de propagation des ondes acoustiques à travers des structures multicouches. La technique TMM permet de déterminer avec précision les coefficients de transmission et de réflexion d'une onde acoustique en incidence normale.

En effet, la TMM est également appliquée à l'étude de la propagation d'autres types d'ondes, incluant par exemple les ondes électromagnétiques et les ondes thermiques. Sa force repose sur l'emploi d'une série d'équations matricielles qui traitent de manière détaillée la progression de l'onde à travers chaque couche distincte de la structure multicouche examinée. En supplément, la méthode TMM permet l'intégration des phénomènes de réflexion et de transmission à chaque interface intercouche.

CHAPITRE III

Résultats de Simulation et Discussions

III.1. Introduction

Au cours de ce chapitre, nous allons étudier et simuler un biocapteur à base d'un cristal phononique unidimensionnel (PnC-1D), dont l'unité élémentaire est (Plomb/Epoxy). En premier temps, nous allons étudier l'évolution de la bande interdite phononique pour un cristal parfait, constitué par l'alternance de N couches de plomb et de l'Epoxy afin de comprendre le comportement des ondes acoustiques à travers ce cristal. Ensuite, notre intérêt sera porté sur l'étude d'un cristal phononique unidimensionnel (PnC-1D) imparfait ou une couche de défaut est placée au centre de la structure multicouche. La couche de défaut est remplie par l'eau à différentes concentration de chlorure de cadmium.

Mais, avant d'entamer notre étude concernant la conception d'un biocapteur à cristal phononique unidimensionnels, nous allons présenter tout d'abord, un aperçu général sur les métaux lourds, notamment l'élément du cadmium, ainsi quelques techniques utilisées pour détecter les métaux lourds et toxiques dans l'eau.

III.2. Métaux lourds dans l'eau

Le terme métal lourd n'a pas de définition scientifique (Seigneur, 2018). On considère généralement que ce sont des éléments métalliques dont la masse volumique est supérieure à 5 g/cm³. Les métaux pour lesquels des mesures de contrôle et de réduction des émissions dans l'ensemble des compartiments air, eau, sols ont été mises en place aux niveaux international, européen et national, regroupent un ensemble de composés métalliques reconnus pour leurs effets toxiques. La Convention sur la pollution atmosphérique transfrontière à longue distance (Convention LRTAP) a été la première convention à suivre les métaux dans l'environnement et à mettre en place un Protocole international visant à réduire les émissions de trois métaux lourds (cadmium (Cd), mercure (Hg), plomb (Pb)), (Aarhus 2012). Le rapportage des émissions dans l'atmosphère par les parties est obligatoire pour ces trois métaux.

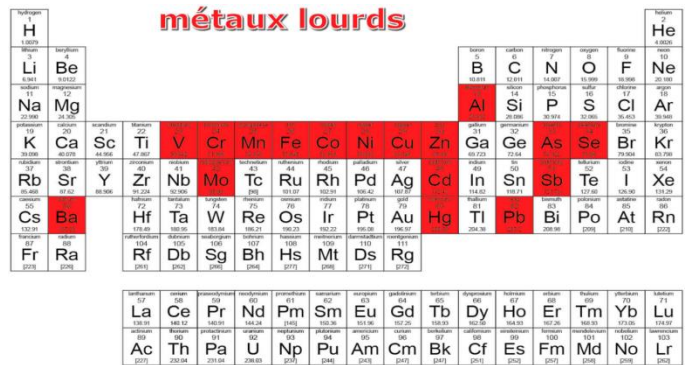
L'ensemble des métaux concernés par la Convention LRTAP: arsenic (As), cadmium (Cd), chrome (Cr), cuivre (Cu), manganèse (Mg), mercure (Hg), nickel (Ni), plomb (Pb), sélénium (Se), zinc (Zn).

Ainsi, parmi les métaux suivis en termes d'inventaires des émissions dans l'atmosphère, certains correspondent à la définition de « métal lourd » et d'autres non. Ainsi, le zinc ne peut être qualifié de métal lourd. Il fait partie des métaux contrôlés pour sa toxicité. L'arsenic n'est pas un métal mais un métalloïde (ayant des caractéristiques d'un métal mais aussi des caractéristiques opposées), reconnu très toxique[31].

III.2.1 Classification des métaux lourds

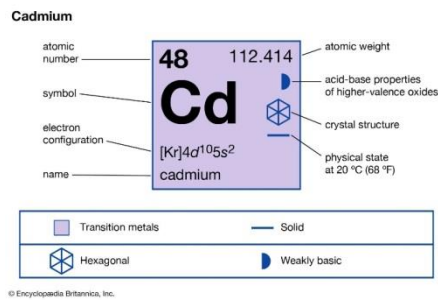
- **Les métaux essentiels :** Ce sont des éléments indispensables à l'état de trace pour de nombreux processus cellulaires et qui se trouvent en proportion très faible dans les Tissus biologiques (Loue, 1993). Certains peuvent devenir toxiques lorsque la Concentration dépasse un certain seuil. C'est le cas du cuivre (Cu), Du zinc (Zn), du fer (Fe). Par exemple, le zinc (Zn), à la concentration du milli molaire, est un oligo-élément qui intervient dans de nombreuses réactions enzymatiques (déshydrogénases, protéinase, peptidase) et joue un rôle important dans le métabolisme des protéines, des glucides et des lipides [32].

- **Les métaux toxiques :** Ont un caractère polluant avec des effets toxiques pour les organismes vivants même à faible concentration. Ils n'ont aucun effet bénéfique connu pour la cellule. C'est le cas du plomb (Pb), du mercure (Hg), du cadmium (Cd) [33].



III.2.2. Le cadmium

Le cadmium est un élément chimique de symbole Cd et de numéro atomique 48 (Mahan, 1987). Le cadmium fut découvert en 1808 par Magnus Martin af Pontin, mais c'est en 1817 que l'allemand Friedrich Stromeyer le prépara pour la première fois (Mahan, 1987). Le nom de Cadmium vient du latin cadmia, « calamine », ancien nom donné au carbonate de zinc – le cadmium était extrait de ce minerai aux environs de la ville de Thèbes, qui fut fondée par Cadmos, et dont la citadelle porte le nom de kadmeia, en français Cadmée (Anonyme, 2007). Le cadmium est un métal blanc, mou et malléable. Il ternit au contact de l'air (Callender, 2003).



Le cadmium n'existe pas à l'état natif. Son minerai, la greenockite est très rare et inexploité (Hurlbut Jr. et Klein, 1982 ; Wedepohl, 1995). Le cadmium est présent dans presque tous les minerais de zinc (la teneur en cadmium varie de 0.01 à 0.05%). Le cadmium est également présent dans des minerais de plomb et de cuivre, ainsi que dans des phosphates naturels (Hurlbut Jr. et Klein, 1982) [35].

Dans les eaux naturelles l'ion Cd^{2+} prédomine au-dessous de pH 8. Dans sa spéciation, il est généralement considéré comme dissous, seules les rivières très riches en matières en suspension ou des eaux proches du fond des rivières, peuvent présenter du Cd adsorbé à la fraction solide (Li et al., 1984). L'adsorption du Cd dans la fraction solide est considéré comme étant un enjeu majeur pour expliquer la concentration de cet élément dans les eaux naturelles (Lum, 1987).

Le cadmium a de multiples utilisations : notamment dans les écrans de télévision, les barres de contrôles des réacteurs nucléaires, les colorants (émail, glaçure). Il entre dans la composition de nombreux alliages à bas point de fusion (soudures, brasures) et sert à la fabrication de certaines batterie d'accumulateurs.

Le cadmium est très toxique sous toutes ses formes (métal, vapeur, sels, composés organiques), le cadmium est l'un des rares éléments n'ayant aucune fonction connue dans le corps humain ou chez l'animal. Il faut éviter son contact avec des aliments. Chez l'Homme, il provoque notamment des problèmes rénaux et l'augmentation de la tension (Plumlee et Ziegler, 2003). Les effets toxiques du Cd ne le sont pas seulement pour l'homme, mais aussi pour les végétaux et les animaux (Benito et al., 1999) [36].

III.2.3. Diverses approches pour la détection du cadmium

La détection du cadmium, un élément chimique aux conséquences potentiellement toxiques pour l'environnement et la santé humaine, a été l'objet de diverses méthodes d'étude et d'analyses. Le cadmium est souvent analysé dans les échantillons environnementaux et biologiques en raison de son implication dans la pollution et les intoxications [37].

- **La spectroscopie d'absorption atomique (SAA) :** La spectroscopie d'absorption atomique est une technique fréquemment utilisée pour la détection et la quantification du cadmium. Elle fonctionne sur le principe de l'absorption de photons par les atomes libres dans l'état gazeux. Les atomes de cadmium absorbent la lumière à une longueur d'onde spécifique, ce qui permet de déduire la concentration de l'élément présent dans l'échantillon [38]. Cette méthode est reconnue pour sa précision et sa limite de détection relativement basse, ce qui la rend efficace même dans les analyses de traces.

- **La colorimétrie** : La colorimétrie, moins coûteuse et plus accessible que la SAA, est aussi utilisée pour évaluer la présence de cadmium. Cette technique repose sur le changement de couleur que subit un indicateur chimique lorsqu'il réagit avec le cadmium. Même si cette méthode peut ne pas être aussi sensible que la SAA, elle permet un repérage rapide et visuel du cadmium, ce qui peut être utile dans des analyses préliminaires ou sur le terrain [39].
- **La spectrométrie de masse** : Quant à la spectrométrie de masse, elle se présente comme une méthode analytique de pointe permettant l'identification et la quantification des isotopes du cadmium. En utilisant la spectrométrie de masse couplée à la chromatographie ou à la mobilité ionique (par exemple, ICP-MS), les chercheurs peuvent détecter et mesurer le cadmium avec une grande sensibilité et spécificité. Cette technique peut également isoler et mesurer différents isotopes du cadmium, ce qui est nécessaire pour des études d'origine ou de biodisponibilité [40].

III.3. Structure étudiée

La structure étudiée est un cristal phononique unidimensionnel (CnP-1D) de type solide/solide, comme, il est schématisé sur la figure III.3. La structure périodique est composée de N cellules élémentaires où chaque cellule de base est composée de deux matériaux le plomb et de l'Epoxy ; [Lead/Epoxy]. Ici, tous les résultats de simulation sont obtenus en utilisant un code écrit en Matlab de la méthode de la matrice de transfert (TMM).

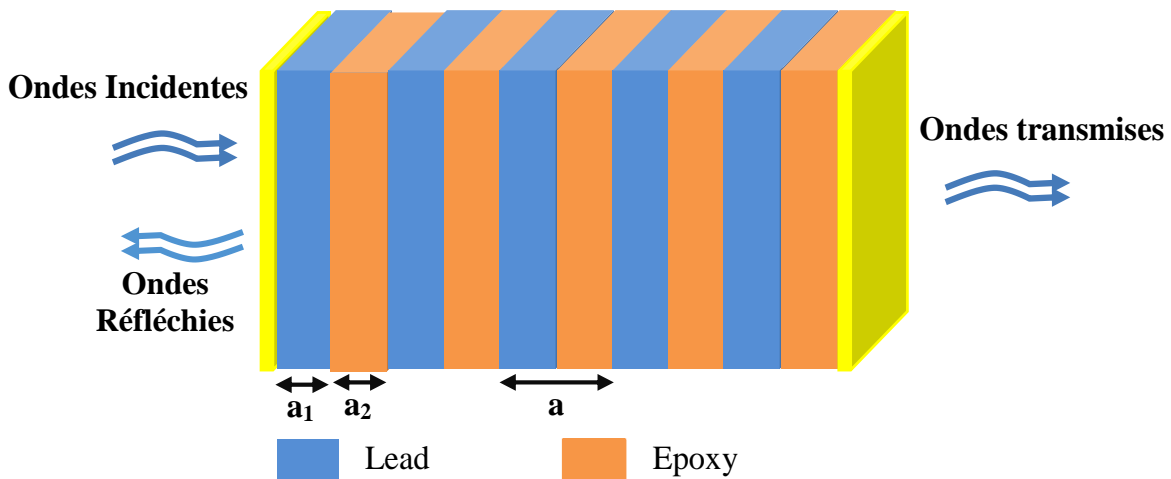


Figure III.3: Schéma d'un cristal phononique 1D de type solide/solide composé de N cellules ; [Plomb/Epoxy]^N.

Où : a_1 : l'épaisseur de la couche du Plomb.

a_2 : l'épaisseur de la couche d'Epoxy.

Les propriétés mécaniques des matériaux qui constituent le cristal phononique unidimensionnel sont illustrées dans le tableau suivant.

Matériau	Plomb	Epoxy	Nylon
Densité ρ (kg/m ³)	11400	1180	1110
Célérité transversale C_T (m/s)	800	1160	1100
Célérité longitudinale C_L (m/s)	1960	2539.5	2600

Tableau III.1: Densité et célérité de propagation des matériaux constituant le cristal phononique-1D [Plomb/Epoxyde] [41].

III.4. Spectre de transmission et de réflexion

Dans le tableau III.2, nous avons reporté les paramètres géométriques et acoustiques de la structure périodique multicouche (Plomb/Epoxy)^N. Les coefficients de transmission et de réflexion sont obtenus en utilisant un code écrit en Matlab de la méthode des matrices de transfert (TMM).

Nombre de couches (N)	8
Densité de la couche A (kg/m ³)	11400
Densité de la couche B (kg/m ³)	1180
Vitesse de propagation (C_L) dans la couche A (m/s)	1960
Vitesse de propagation (C_L) dans la couche B (m/s)	2539.5
l'épaisseur de la couche du plomb (μm)	0.1
l'épaisseur de la couche de L'Epoxy (μm)	0.1

Tableau III. 2: Différents valeurs des paramètres géométriques et physiques De la structure parfaite (PnC-1D).

La figure (III.4) illustre le spectre de transmission en noir et le spectre de réflexion (en rouge) dans le cas de la propagation longitudinale d'une onde acoustique à incidence normale. D'après les spectres, on peut constater clairement l'absence de la propagation sur toute une gamme de fréquences (coefficients de transmission nuls égale presque à 0% et coefficients de réflexion est presque à 100%). Par conséquent, une bande interdite phononique est ouverte entre les fréquences normalisées [3.2 - 3.7].

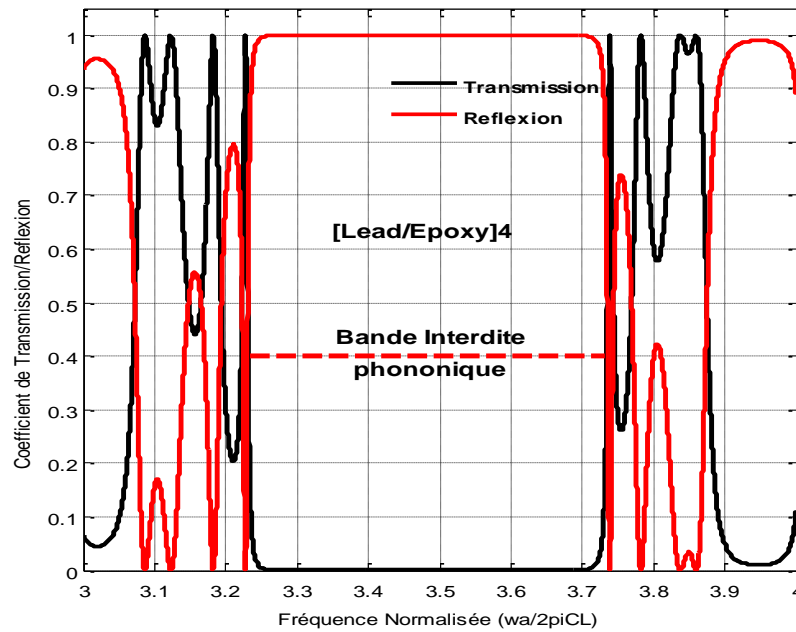


Figure III.4: Coefficients de transmission (en noir) et de réflexion (en rouge) d'une onde longitudinale en fonction des fréquences normalisées.

La figure III.5 illustre le spectre de transmission et de réflexion en fonction de la fréquence absolue pour la propagation d'une onde longitudinale à incidence normale à travers la structure multicouche laquelle est décrite dans le paragraphe précédent. Le spectre montre clairement l'ouverture d'une bande interdite phononique ou les coefficients de transmission et de réflexion sont (au voisinage de 0%, respectivement de 100%), ce qui présente une bande interdite dans la gamme des fréquences absolues est [40.98 – 47.47] GHz.

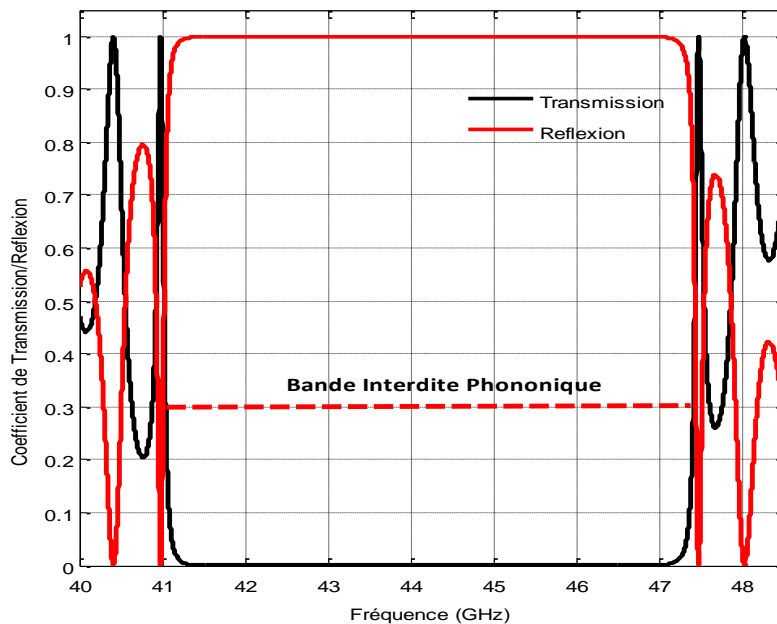


Figure III.5: Spectre de Transmission / Réflexion en fonction de la fréquence absolue.

III.5. Etude de la bande interdite phononique

L'étude de la bande interdite est une phase indispensable avant de passer à la conception de notre composant « capteur de CdCl_2 à cristal phononique CnP-1D ». Dans la section suivante, on va analyser et étudier l'influence de certains paramètres géométriques sur les variations de la bande interdite afin d'optimiser ces paramètres.

III.5.1. Influence du nombre de couches

Pour étudier l'influence du nombre de couches sur la bande interdite phononique. Nous avons fixé tout d'abord les épaisseurs de la couche du plomb et celle de la couche de l'Epoxy ainsi que les propriétés physiques de la structure proposée. Ensuite, en utilisant le même code de la méthode des matrices de transfert TMM, nous allons effectuer les simulations.

Les figure III.6 montre le coefficient de transmission en fonction le nombre de cellules élémentaires (de bi-couches) utilisées dans la construction du cristal phononique CnP-1D , il est obtenu pour $N=2$ (en noir) et $N=4$ (en rouge).

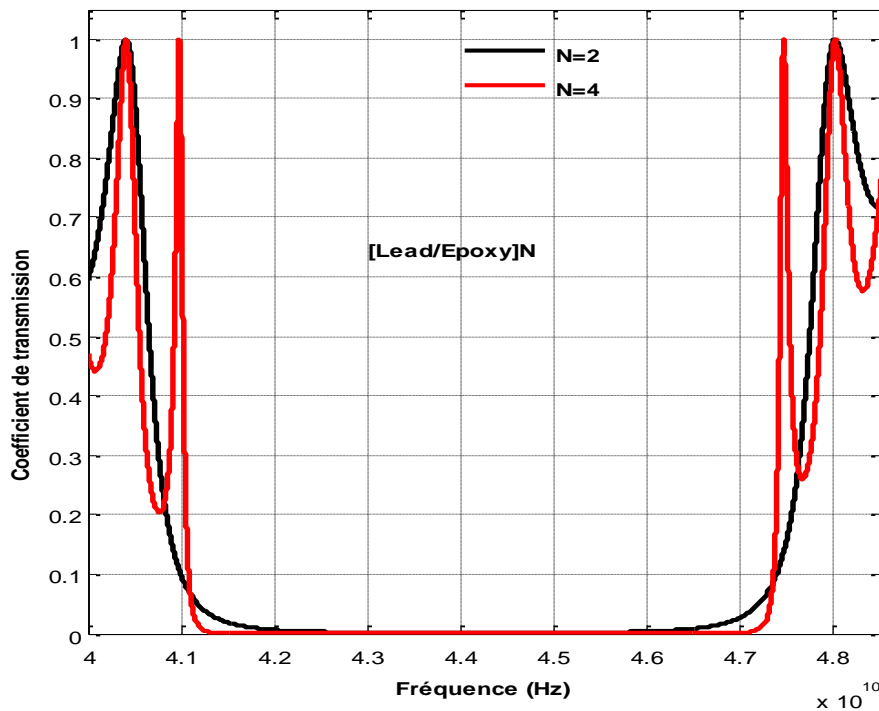


Figure III.6: Spectre de transmission en fonction le nombre de bi-couches ; pour $N=2$ (en noir) et pour $N= 4$ (en rouge).

D'après les résultats obtenus, il est clair que plus le nombre des cellules élémentaires (N) est important, plus la bande interdite phononique ouverte est plus raide. Les résultats de simulation qu'on a obtenus en utilisant le même code de la méthode de la matrice de transfert (TMM) sont illustrés dans le tableau ci-dessous.

N	f_1 (Hz)	f_2 (KHz)	Δf (Hz)	f_0 (Hz)
2	40500627914	47919994645	7419366731	44210311280
3	40852641808	47590252479	6737610671	44221447144
4	40994132700	47454620700	6460488000	44224376700
5	41064222900	47387070000	6322847100	44225646450
6	41094189000	47348728399	6254539399	44221458700
8	41139956894	47313854547	6173897653	44226905720,5

Tableau III.3: Résultats de simulations obtenus par la méthode TMM.

Les figures ci-dessous illustrent respectivement ; l'évolution de la fréquence centrale f_0 de la bande interdite phononique (Figure III.7(a)), ainsi que la variation de la largeur de bande ouverte Δf en fonction de nombre bicouches (Figure III.7(b)). Il est clair que plus le nombre de bicouches est élevé la fréquence centrale augmente et tend vers une valeur constante. D'autre part, lorsque le nombre de couche devient supérieur à N=8, la variation dans la largeur de la bande diminue ce qui explique notre choix de N=8 dans les paragraphes suivants.

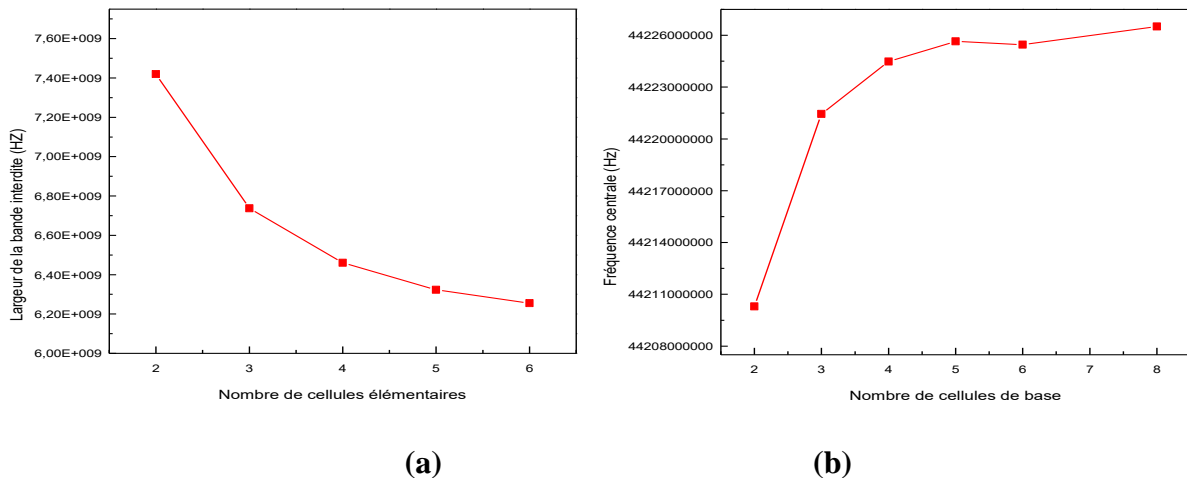


Figure III. 7: Evolution des propriétés de la bande phononique en fonction le nombre de bicouches N.

III.5.2. Influence du facteur de remplissage

Au cours du paragraphe suivant, on a fixé les paramètres élastiques et la période du cristal lequel est composé de 4 bicouches (N=8) alternées [Plomb/Epoxyde]⁴. Ensuite, nous allons étudier l'influence des épaisseurs a_1 et a_2 des deux couches sur les variations de la bande interdite. Pour cela, il est intéressant d'étudier l'influence du facteur de remplissage volumique,

défini comme étant le rapport entre l'épaisseur de la couche du plomb par rapport la période du cristal. Le facteur de remplissage est donné par: $ff(\%) = \frac{a_1}{a_1+a_2} * 100$.

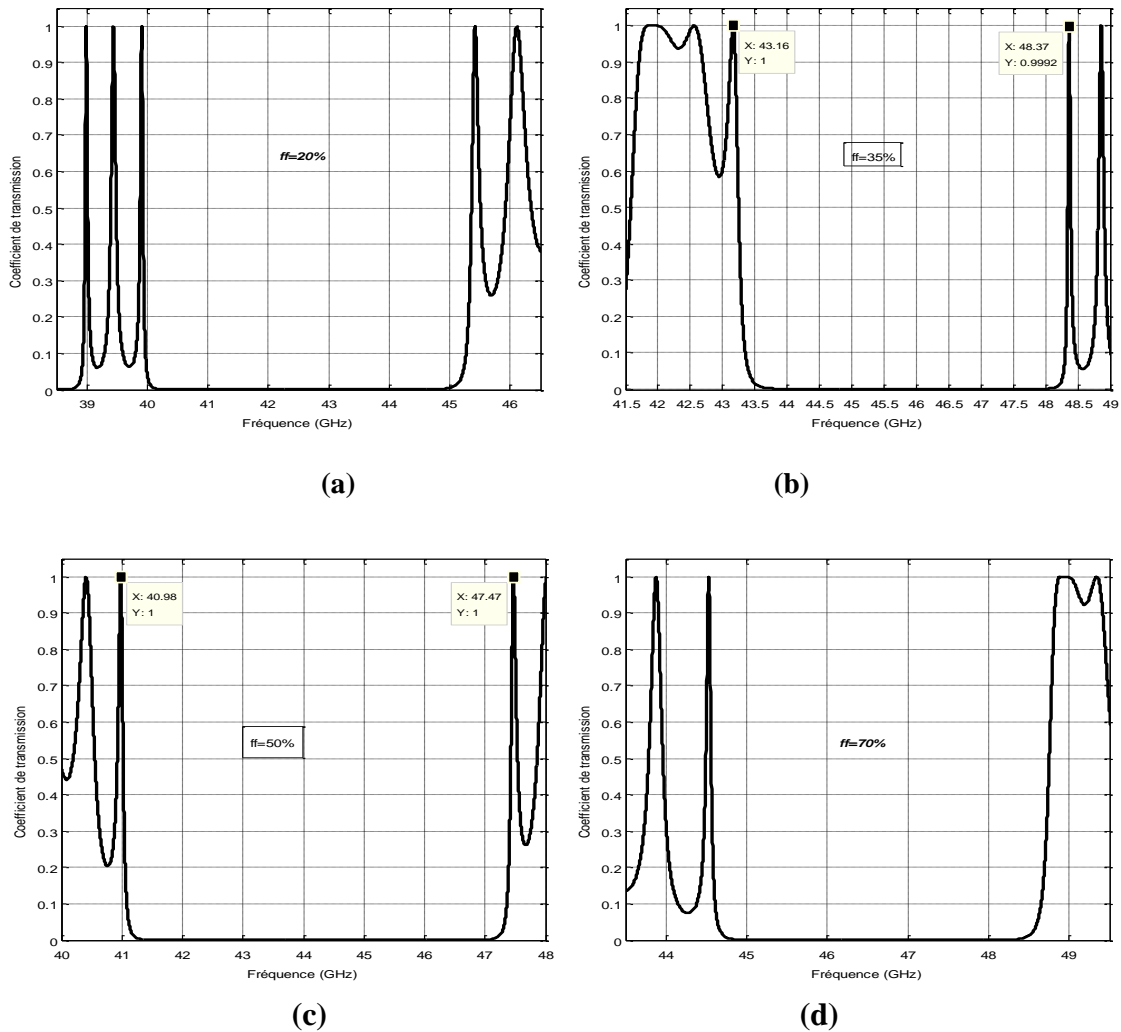


Figure III. 8: Spectre de transmission pour une onde longitudinale à incidence normale:

(a) pour $ff=20\%$, (b) pour $ff=35\%$, (c) Pour $ff=50\%$ et (d) pour $ff=70\%$.

Afin d'étudier l'influence du facteur de remplissage sur les caractéristiques des bandes ouvertes. Ensuite, nous avons effectué une série de simulations avec le même code de la méthode TMM pour différentes valeurs du facteur de remplissage. La figure III.8, illustre les spectres de transmissions obtenus pour quatre valeurs du facteur de remplissage $ff=20\%$, $ff=35\%$, $ff=50\%$ et $ff=70\%$. Il est clair que pour un facteur de remplissage $ff=50\%$, on obtient une large bande interdite autour d'une fréquence centralisée de pulsation $\omega_N = \frac{w.a}{2\pi.C_L(Epoxy)} = 3.5$; c'est la fréquence correspondante à la propagation de l'onde longitudinale dans la couche de l'Epoxy.

III.6. Application à la détection du chlorure de cadmium

Récemment, les structures périodiques, présentent une nouvelle plate-forme pour la réalisation des détecteurs de liquides. Dans la partie suivante, notre intérêt sera reporté sur l'étude et la conception d'un bio-capteur pour la détection des métaux lourds dans l'eau en particulier la détection de chlorure de cadmium (CdCl_2).

III.6.1. Structure étudiée

La Figure III.9 illustre le diagramme schématique de notre conception utilisée pour la détection du chlorure de Cadmium. Cette configuration est formée par l'empilement de quatre bicouches (Plomb/Epoxy). Ensuite, la couche de cavité est placée au centre de la structure conçue et remplie avec différentes concentrations de CdCl_2 . Ainsi, la conception proposée est représenté par $[(\text{Plomb/Epoxy})^{N/2} / \text{couche de cavité} / (\text{Plomb/Epoxy})^{N/2}]$. Où N définit le nombre d'unités élémentaires.

Au cours de cette étude, la structure considérée est supposée traversée par une onde acoustique longitudinale à incidence normale, d'autre part, Les propriétés acoustiques de la solution CdCl_2 sont discutées en détail dans les références [25].

Les épaisseurs des différentes couches ; (Plomb), (Epoxy) et la couche de cavité sont respectivement a_1 , a_2 et D telle que: $a_1=a_2=D=0.1\mu\text{m}$.

Où : $C_1(\text{Epoxy})= 1960 \text{ m/s}$ et $C_1(\text{Plomb})=2539.5 \text{ m/s}$ sont la célérité du son dans la couche de Epoxy et du plomb respectivement.

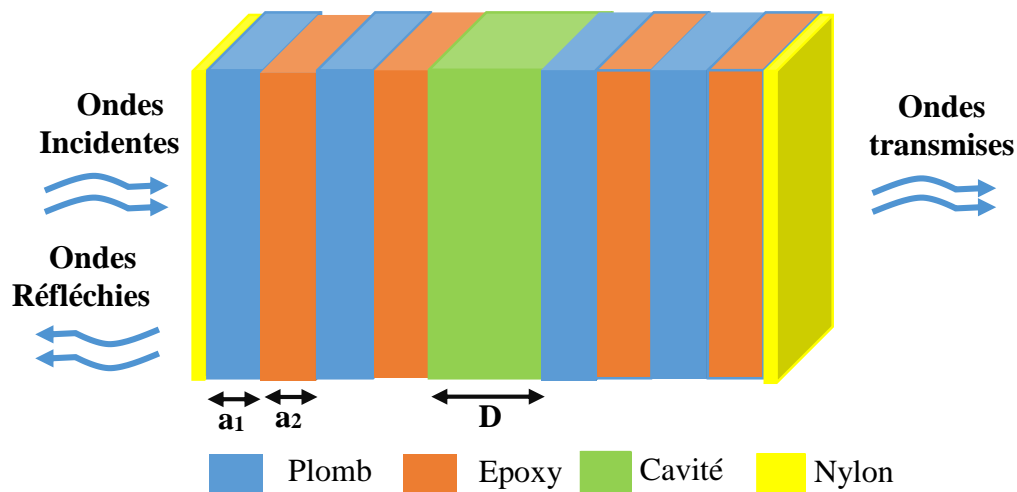


Figure III.9: Représentation schématique d'un cristal phononique PnC-1D $[(\text{Plomb/Epoxy})^2/\text{CdCl}_2/(\text{Plomb/Epoxy})^2]$ avec couche de cavité de largeur D

III.6.2. Résultats de simulations

La figure III.10 montre le spectre de transmission de la structure conçue par rapport aux ondes acoustiques à incidence normale. Le spectre de transmission est tracé en fonction de la fréquence normalisée ($\omega a/2\pi c$), où c : est la vitesse du son dans la couche de l'époxy et est utilisé dans tous les calculs. Pour illustrer l'effet de la couche de cavité sur le spectre de transmission, nous calculons d'abord le spectre de transmission pour une conception parfaite (en noir). Alors que le spectre en rouge est obtenu après l'insertion d'une couche de cavité d'épaisseur $D=0.1\mu\text{m}$, remplie par l'eau douce à 20°C . Il est clair que le défaut provoque l'apparition de deux pics de résonance dont les fréquences normalisées sont 3.37 et 3.627.

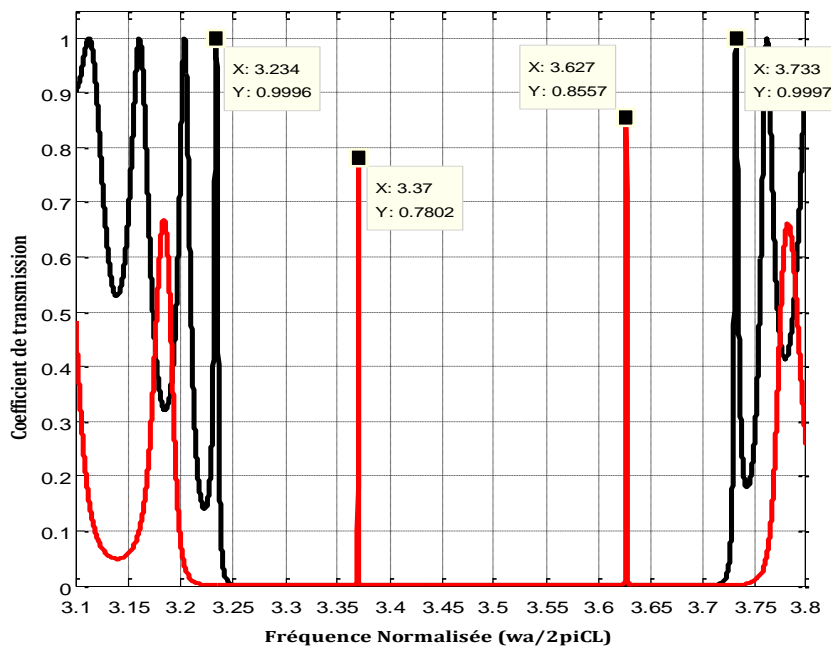


Figure III.10: Spectre de transmission pour un CnP -1D parfait (en Noir), ensuite avec une couche de cavité remplie par l'eau à 20°C d'épaisseur $D=0.1\mu\text{m}$ (en rouge).

En fonction des fréquences absolues, le spectre de transmission de la configuration proposée ($[\text{plomb}/\text{époxy}]^2/([\text{CdCl}_2]/[\text{plomb}/\text{époxy}])^2$) est représenté sur la Figure III.11. Avant d'examiner l'influence de diverses concentrations de CdCl_2 (en ppm) sur le spectre de transmission, nous commencerons par supposer que la couche de défaut est remplie par l'eau douce (0 ppm) à 20°C . À une concentration de 0 ppm (eau douce), nous constatons l'apparition de deux modes résonnants dont les fréquences de résonance sont ; 42.78 GHz et 46.06 GHz.

Le pic transmis est une propriété caractéristique importante de la structure conçue du cristal proposée et que la fréquence de résonance est proportionnelle aux propriétés acoustiques du liquide introduit dans la couche de cavité. Dans ce qui suit, on ne s'intéresse qu'au second mode de résonance dont la fréquence de résonance est 46.06 GHz.

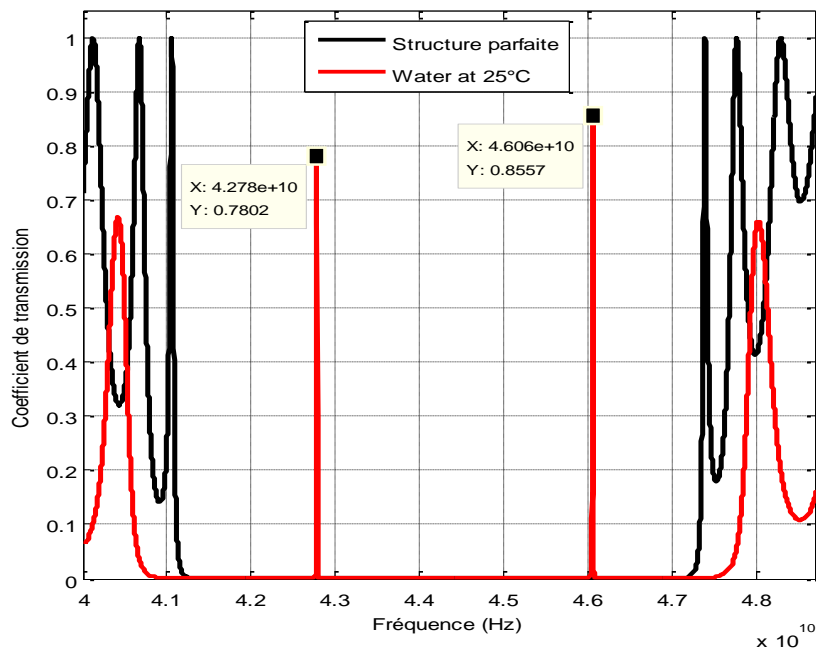


Figure III.11: Spectre de transmission en fonction de la fréquence absolue pour une couche de cavité de l'eau douce à 20°C d'épaisseur $D=0.1\mu\text{m}$ (en rouge).

La figure III.12 illustre un exemple pour le calcul de la fréquence de résonance et la largeur à mi-hauteur FWHM. Le second pic est obtenu lorsque la couche de cavité est remplie par l'eau pure à 20°C (Concentration égale 0 ppm). D'autre part, on peut constater que le taux de transmission est de l'ordre de 85% et une largeur à mi-hauteur $\text{FWHM}=3898957\text{ Hz}$.

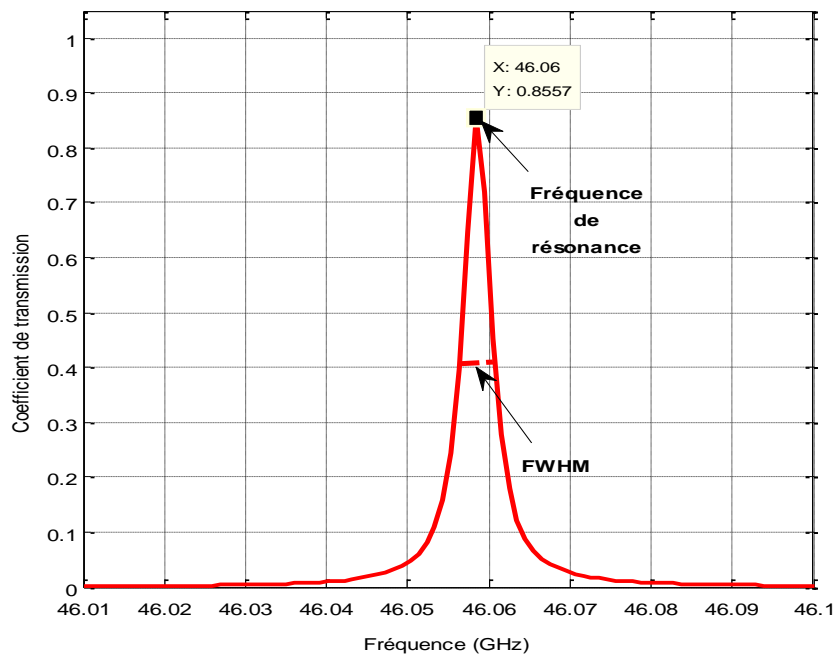


Figure III.12: Caractéristiques du pic de résonance pour une couche de cavité est remplie par l'eau douce à 20°C

III.6.3. Influence de concentration de CdCl₂

Dans la partie suivante, nous allons étudier un biocapteur à base d'un cristal phononique unidimensionnels (CnP-1D) de type [(Plomb/Epoxy)²/CdCl₂/(Plomb/Epoxy)²]. Nous considérons tout au long de cette partie que la fréquence de résonance de l'eau à 20°C ($f_{res}=46.06$ GHz) comme fréquence de référence pour les fréquences de résonance lesquelles correspondent aux solutions de chlorure de cadmium (CdCl₂) à différentes concentrations. Les propriétés acoustiques de la solution de CdCl₂ en ppm peuvent être dérivées des données expérimentales inespérées de la référence [41]. Sur la base de ces données, il est clair que la densité et la vitesse du son dans le chlorure de cadmium ; augmente avec l'augmentation de la concentration de chlorure de cadmium CdCl₂.

Concentration de CdCl ₂ en ppm	Densité (kg/m ³)	Vitesse C _L (m/s)
0	998	1483
50000	1040	1510
100000	1080	1512
175000	1140	1517
275000	1220	1522
350000	1270	1530
550000	1450	1540

Tableau.III.4: Célérité du son et densité à différentes concentrations de CdCl₂
Données à 20 °C selon la référence [41]

III.6.4. Résultats de simulations

Lorsque l'eau dans la couche de cavité est remplacée par une solution de CdCl₂, le pic de résonance se déplacera à une nouvelle fréquence de résonance. La figure III.13 montre que le spectre de transmission simulé dans le cas où la couche de cavité est remplie par la solution à différentes concentrations. Les résultats montrent clairement qu'avec l'augmentation de la concentration de CdCl₂, le pic de résonance est lié aux propriétés physiques notamment à la concentration de CdCl₂ et que les modes résonnants décalent progressivement vers les hautes fréquences. D'autre part, tous les modes de résonance ont une intensité de transmission très élevée (autour de 90 %). Cela suggère le confinement de l'énergie acoustique à l'intérieur de la couche de cavité pour toutes les concentrations. Physiquement, chaque pic est considéré comme une bande passante de largeur étroite, il provient du couplage entre le mode de résonance dans la couche de cavité et l'onde évanescence dans les couches solides.

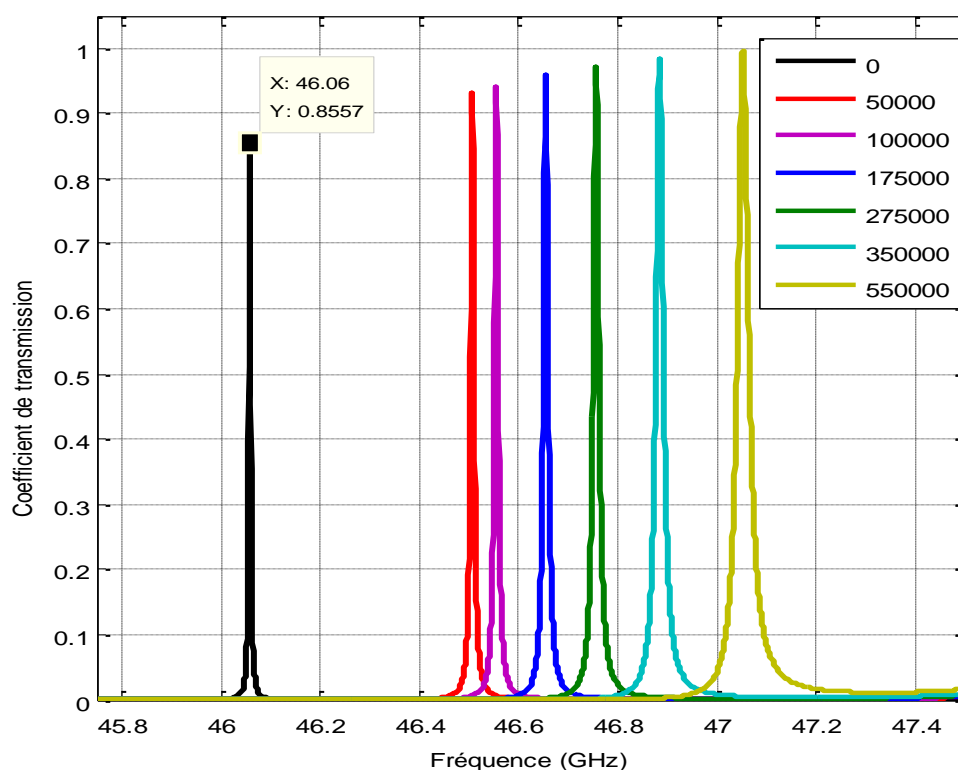


Figure.III.13: Spectres de transmission calculés en injectant différentes concentrations de Chlorure de cadmium CdCl_2 dans la couche de cavité en ppm à 20°C .

Le tableau suivant, résume les résultats de simulations obtenus par la méthode TMM pour les différentes concentrations de chlorure de cadmium en ppm.

Concentration(ppm)	C_i (m/s)	ρ (Kg/m ³)	$f_{\text{Résonance}}$ (Hz)	Δf (Hz)	f_{WHM}
0	1483	998	46058403600	0	3898957
50000	1510	1040	46507387200	448983600	7309699
100000	1512	1080	46555637700	497234100	8246290
175000	1517	1140	46655186100	596782500	10020680
275000	1522	1220	46756766100	698362500	12715140
350000	1530	1270	46884756900	826353300	16569870
550000	1540	1450	47052871800	994468200	25609879

Tableau.III.5: Résultats de simulations obtenus pour différentes valeurs de concentration de chlorure de cadmium CdCl_2 en ppm.

III.7. Les performances du capteur

Pour analyser les performances du capteur conçu, il est nécessaire d'étudier l'évolution de certains paramètres en particulier la sensibilité (S), la figure de mérite (FOM) et le facteur de qualité (Q). Sur le tableau III.6, nous avons reporté les valeurs des paramètres cités en fonction les différentes concentrations.

Concentration de CdCl ₂ en ppm	S (Hz/ppm)	Q	FOM (x10 ⁻⁴)
0	0	11813,0063	0
50000	8979,672	6362,42165	1,57172859
100000	4972,341	5645,64643	1,77127635
175000	3410,185	4655,89023	2,14781696
275000	2539,5	3677,25138	2,71942246
350000	2361,010	2829,51869	3,53416997
550000	1808,124	1837,2938	5,44278766

Tableau III.6 : Sensibilité, facteur de qualité et la figure de mérite en fonction la concentration de chlorure de cadmium.

III.6.1. La sensibilité

La sensibilité d'un capteur est définie comme étant le rapport entre la variation de la fréquence de résonance et la variation de la concentration en CdCl₂. Dans le cas d'un capteur linéaire, la sensibilité est constante. Ce paramètre peut être obtenu en utilisant l'expression suivante:

$$S = \Delta f / \Delta C \dots \dots \dots (III.01)$$

Où : $\Delta f = f_w - f_{rés} \dots \dots \dots (III.02)$

f_w : est la fréquence de résonance de l'eau pur, f_r (eau pure) = 46.06 GHz, $f_{rés}$: est la fréquence de résonance du mode qui correspond à la concentration C en ppm et ΔC : la variation la concentration de CdCl₂ de la solution en ppm.

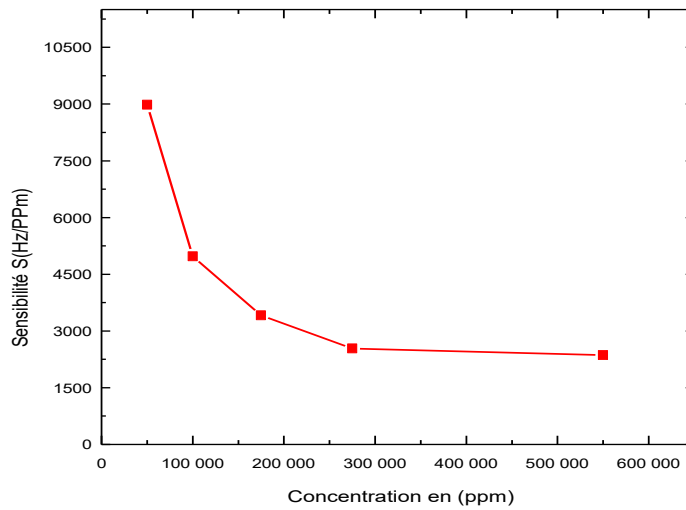


Figure III.14: Evolution de la sensibilité en fonction la concentration de CdCl₂ en ppm.

La figure III.14, montre l'évolution de la sensibilité en fonction la concentration C (en ppm). D'après cette courbe, il est clair que la sensibilité est maximale pour une concentration de de égale à 50000 ppm, elle atteint 9000 Hz/ppm. Ensuite, elle diminue vers 1800 Hz/ppm pour une concentration de 550000 en ppm.

III.7.2. Le facteur de qualité

Comme tout dispositif destiné au filtrage, les capteurs acoustiques utilisant la résonance acoustique doivent être réglés le plus finement possible. Cela se traduit par un facteur de qualité très élevé. Par définition, le facteur de qualité est défini comme étant le rapport entre la fréquence de résonance et la largeur à mi-hauteur du pic [8,9]. Le facteur de qualité est exprimé par :

$$Q = f_{rés} / FWHM \dots \dots \dots (III.03)$$

Où : FWHM est la pleine largeur à mi-hauteur du pic de résonance.

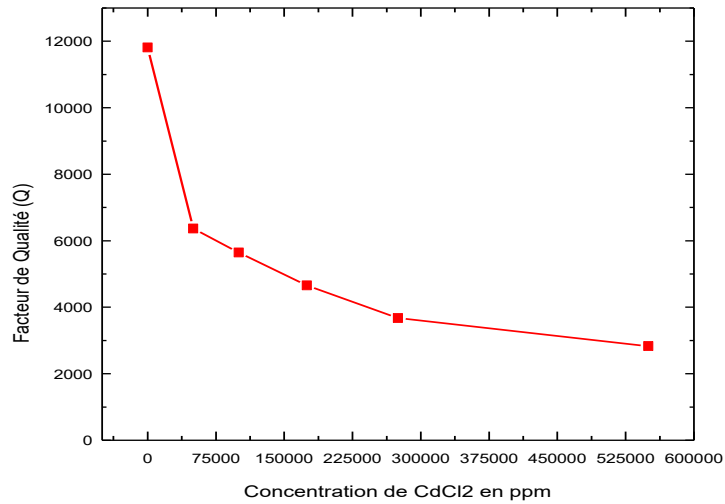


Figure III.15: Facteur de qualité en fonction la concentration de CdCl₂

La figure III.15, montre l'évolution du facteur de qualité pour différentes concentration en CdCl₂. Le facteur de qualité Q atteint son maximum pour les faibles concentrations de CdCl₂, il est d'environ 6362 à 50000 ppm. Puis, il diminue progressivement pour les fortes concentrations, il atteint son minimum 1837 pour une concentration de 550000 ppm.

III.7.3 La figure de mérite

La figure de Mérite (FOM) est définie comme étant le rapport entre la sensibilité et la pleine largeur à mi-hauteur du mode résonnant (FWHM). Il fournit, en plus de la sensibilité, l'information de la finesse du pic de résonance. La figure de mérite est donnée par l'expression suivante [10]:

$$FOM=S/FWHM.....(III.04)$$

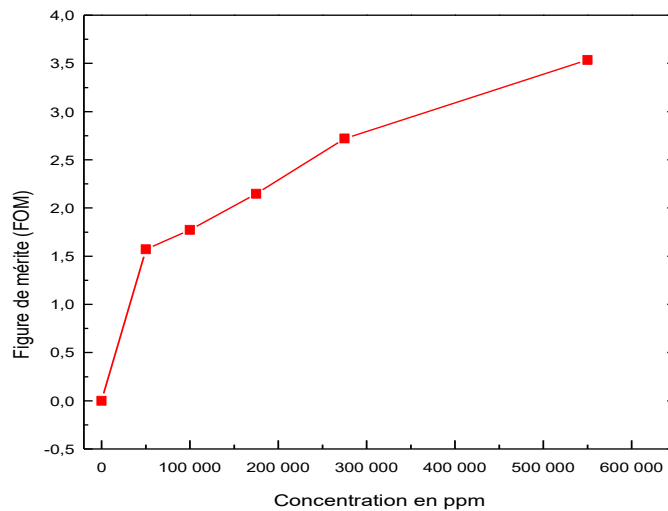


Figure III.16: Le facteur de mérite en fonction de la concentration C en ppm.

La figure III.16, illustre l'évolution de la figure de mérite FOM en fonction les concentrations de CdCl_2 . D'après la courbe, il est clair que la figure de mérite possède le même allure que la sensibilité, la FOM augmente proportionnellement avec la concentration en chlorure de cadmium.

III.8. Influence de l'épaisseur de la couche de cavité sur la sensibilité

Dans le paragraphe suivant, on va étudier l'influence du changement de l'épaisseur de la couche de cavité ΔD (nm) sur les performances du capteur et notamment sur la sensibilité et le facteur de qualité du capteur pour les faibles concentrations [$c=0$ ppm, $c=51729.048$ ppm]. Pour cela, on suppose que l'épaisseur de la couche de cavité prend la valeur $D = D_0 + \Delta D$. Où D_0 est de $0.1 \mu\text{m}$ et ΔD prend les valeurs suivantes : 0 nm, 3 nm, 7 nm et 10 nm.

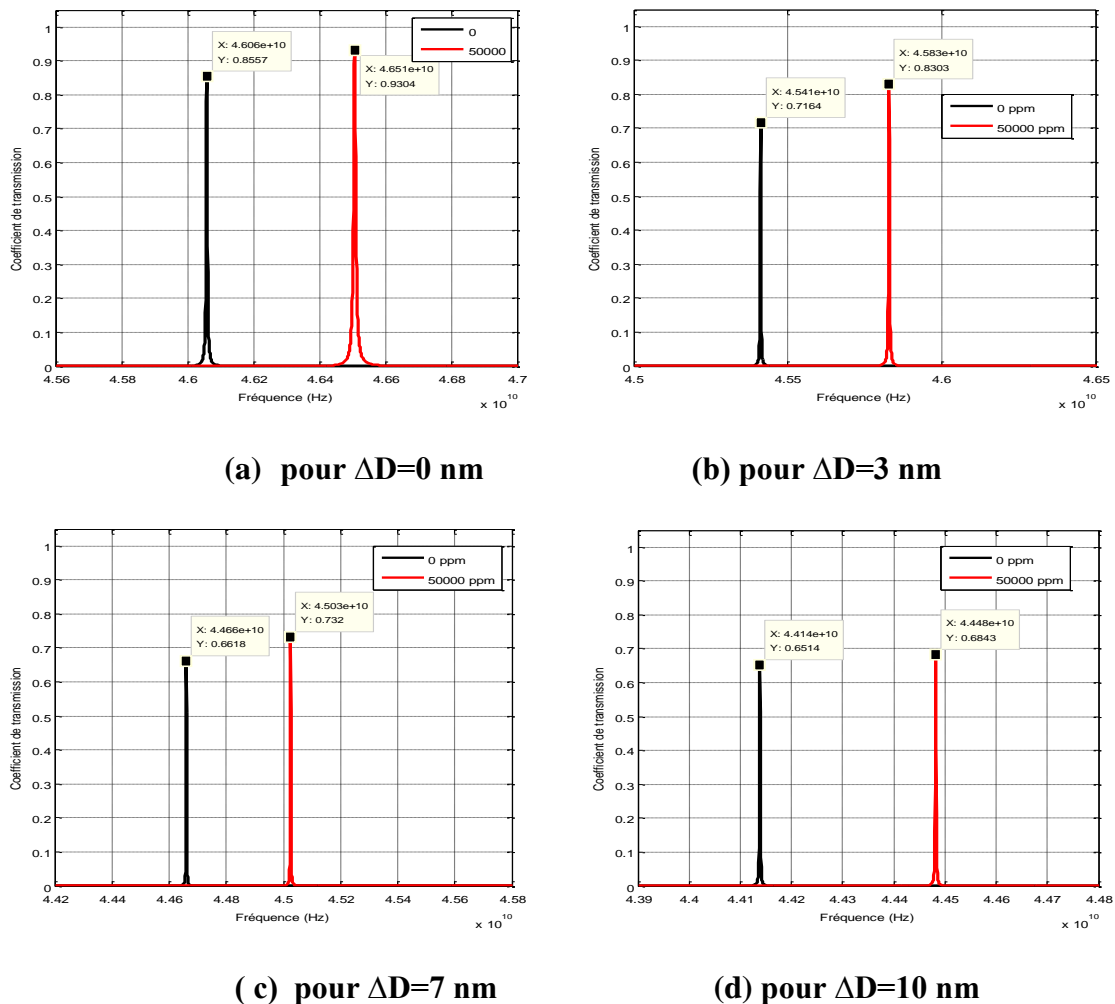


Figure III.17: L'effet du changement de la couche de cavité sur la sensibilité du capteur pour deux concentration de de CdCl_2 en ppm.

La figure III.17 présente l'effet du changement de l'épaisseur de la couche de cavité sur la transmission de la résonance maximale. À la même concentration, la résonance maximale se déplace vers une fréquence inférieure, comme le montre clairement les figures III.17 (a) à (d).

La sensibilité diminue de 8979,672 à 6876,966 Hz/ppm à mesure que la valeur de ΔD augmente de 0 à 10 nm comme il est indiqué dans le tableau III.7.

ΔD (nm)	f_0 (Hz) à c=0 ppm	f_i (Hz) à C=50000 ppm	Δf_r (Hz)	S (Hz/ ΔC)
0	46058403600	46507387200	448983600	8979,672
1	45833403900	46275784800	442380900	8847,618
3	45411846900	45828832800	416985900	8339,718
5	45023811300	45412862700	389051400	7781,028
7	44660662800	45025335000	364672200	7293,444
10	44138033700	44481882000	343848300	6876,966

Tableau III.7: L'effet du changement de l'épaisseur de la cavité sur la sensibilité du capteur pour deux concentration de de CdCl_2

Les figures III.18 (a) et (b) représentent l'influence du décalage dans l'épaisseur de la couche de cavité sur la fréquence de résonance et la sensibilité du capteur conçu. Il est clair que la sensibilité est importante pour les faibles concentrations en chlorure de cadmium.

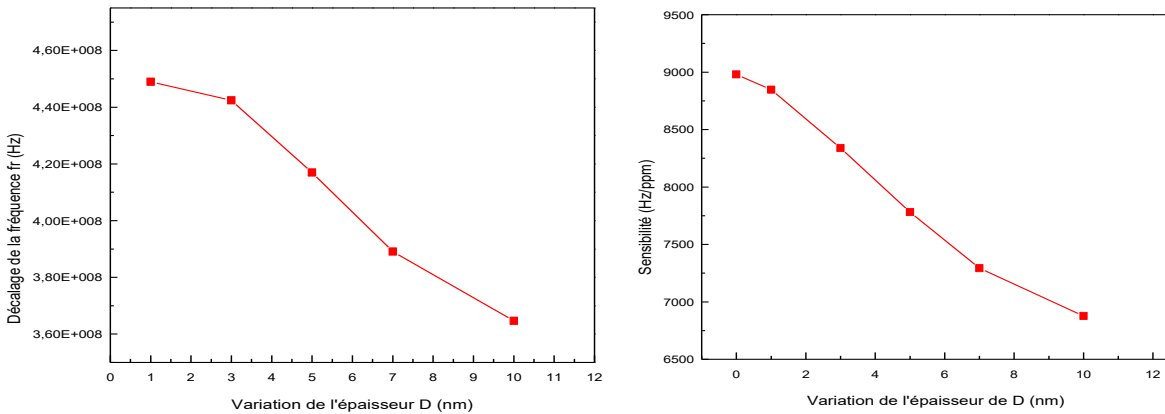


Figure III.18: (a) Evolution de la fréquence de résonance, (b) Evolution de la sensibilité en fonction de la variation de l'épaisseur de la couche de cavité ΔD (nm).

III.9. Conclusion

Dans cette étude, nous avons présenté théoriquement un biocapteur à base d'un cristal phononique 1D pour la détection de chlorure de cadmium CdCl_2 . La conception est basée sur l'introduction d'une couche de cavité à l'intérieur d'un PnC-1D. En premiers temps, nous nous sommes intéressés à l'étude d'une structure parfaite, les résultats de simulations montrent clairement l'ouverture de bandes phononiques et que les propriétés de la bande ouverte sont liées aux paramètres géométriques et physiques. En second temps, nous avons examiné et simulé la structure imparfaite de type $[(\text{Plomb}/\text{Epoxy})^2/\text{CdCl}_2/(\text{Plomb}/\text{Epoxy})^2]$ dans laquelle la couche de avec différentes concentrations de CdCl_2 (0 à 750 000 ppm).

Les résultats obtenus montrent clairement que le décalage dans l'épaisseur de la couche de cavité s'est avérée avoir un effet prononcé sur la valeur de sensibilité. Par conséquent, ce capteur peut être utilisé efficacement pour détecter les faibles concentrations en CdCl_2 ainsi que d'autres types de métaux lourds.

Conclusion Générale

CONCLUSION GENERALE

Les cristaux phononiques (PnCs) sont des structures périodiques artificielles constituées au moins de deux matériaux de propriétés élastiques différentes. Toutes les études théoriques ont montrées l'existence de bandes interdites phononiques où aucune propagation d'ondes acoustiques n'est permise. Pour cela, ces structures représentent un domaine de recherche en pleine effervescence dans divers domaines, allant de l'isolation acoustique au domaine des capteurs. D'autre part, l'analyse de l'eau infectée par les métaux lourds ou toxiques à faible niveau de concentrations a attiré une grande attention. De nombreux chercheurs estiment que ce type de pollution constitue un grand danger pour l'ensemble de l'humanité.

Le travail présenté dans ce mémoire de master, représente une contribution à l'étude et à la conception d'un biocapteur à base d'un cristal phononique unidimensionnels (PnC-1D), dont l'objectif principal est de contribuer d'une manière significative au développement des capteurs à cristaux phononiques, destinés à la détection du chlorure de cadmium dans l'eau douce.

Tout d'abord, nous avons étudié un cristal phononique 1D formé par l'empilement de N bicouches [Lead/Epoxy]^N. En utilisant un code écrit en Matlab de la méthode de la matrice de transfert (TMM), nous avons calculé les coefficients de transmission et de réflexion et nous avons constaté l'ouverture de bandes interdites. Egalement, nous avons démontré à travers la simulation que les paramètres géométriques et physiques jouent un rôle important sur les propriétés de ces bandes interdites phononiques.

Dans la seconde partie, nous avons étudié un capteur à cristal phononique unidimensionnels (PnC-1D) de type [(Plomb/Epoxy)²/couche de cavité/(Plomb/Epoxy)²]. La structure proposée est formée par l'insertion d'une couche de cavité au centre de la structure parfaite. Ensuite, la couche de cavité est remplie avec une solution de différentes concentrations en CdCl₂. Les résultats obtenus en utilisant la méthode de la matrice de transfert (TMM) montrent clairement que les caractéristiques du mode résonnant sont fortement liées à la concentration de Chlorure de cadmium. Les résultats obtenus montrent clairement que la sensibilité du capteur conçu est influencée par différents paramètres tels que le nombre de couches du cristal, le facteur de remplissage et l'épaisseur de la couche de cavité. A travers les résultats obtenus, on peut conclure que ce capteur utilisant des

matériaux peu coûteux est hautement adaptable peut fournir une technologie de détection simple pour différents ions de métaux lourds dans l'eau douce.

Enfin, nous pensons que ce capteur pourrait constituer un élément clé d'une plateforme viable pour surveiller efficacement et précisément la qualité de l'eau. Cependant, des efforts de recherche sont nécessaires pour améliorer les performances des capteurs à cristaux phononiques dans le domaine de la détection des métaux lourds dans l'eau, contribuant ainsi à la protection de la santé publique et de l'environnement.

Références Bibliographiques

- [1] Kushwaha M.S., Halevi P., Dobrzynski L., Djafari-Rouhani B. Acoustic band structure of periodic elastic composites. *Phys. Rev. Lett.* 1993;71:2022–2025. doi: 10.1103/PhysRevLett.71.2022.
- [2] Lu M.-H., Feng L., Chen Y.-F. Phononic crystals and acoustic metamaterials. *Mater. Today.* 2009;12:34–42. doi: 10.1016/S1369-7021(09)70315-3.
- [3] Khelif A., Wilm M., Laude V., Ballandras S., Djafari-Rouhani B. Guided elastic waves along a rod defect of a two-dimensional phononic crystal. *Phys. Rev. E.* 2004;69:067601. doi: 10.1103/PhysRevE.69.067601.
- [4] Lucklum R., Li J. Phononic crystals for liquid sensor applications. *Meas. Sci. Technol.* 2009;20:124014. doi: 10.1088/0957-0233/20/12/124014.
- [5] Lucklum R., Ke M., Zubtsov M. Two-dimensional phononic crystal sensor based on a cavity mode. *Sens. Actuators B.* 2012;171–172:271–277. doi: 10.1016/j.snb.2012.03.063.
- [6] Ke M., Zubtsov M., Lucklum R. Sub-wavelength phononic crystal liquid sensor. *J. Appl. Phys.* 2011;110:026101. doi: 10.1063/1.3610391.
- [7] Molerón M., Serra-Garcia M., Daraio C. Acoustic Fresnel lenses with extraordinary transmission. *Appl. Phys. Lett.* 2014;105:114109. doi: 10.1063/1.4896276.
- [8] M. S. Kushwaha, P. Halevi, L. Dobrzynski et B. Djafari-Rouhani, « Acoustic band structure of periodic elastic composites ». *Phys. Rev. Lett.* 71, 2022 (1993).
- [9] R. Martínez-Sala, J. Sancho, J. V. Sánchez, V. Gómez, J. Llinares, F. Meseger, « Sound Attenuation by Sculpture », *Nature*, 378, pp. 241, 1995.
- [10] Lucklum R., Zubtsov M., Oseev A. Phononic crystals—A new platform for chemical and biochemical sensors. *Anal. Bioanal. Chem.* 2013;405:6497–6509. doi: 10.1007/s00216-013-70939.
- [11] N. Mukhin, M. Kutia, A. Oseev, U. Steinmann, S. Palis and R. Lucklum, « Narrow Band Solid-Liquid Composite Arrangements: Alternative Solutions for Phononic Crystal-Based Liquid Sensors », *Sensors* 19(17) 3743, 2019.
- [12] Jaffre, T., « Caractérisation des matériaux à bande interdite électromagnétique multipériodiques et leurs applications aux antennes », Thèse de doctorat - Université de Limoges, (2005)
- [13] Ho, K. M., Che Ting Chan, and Costas M. Soukoulis. « Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures », *Physical Review Letters* 65.25 (1990): 3152.

[14] Van Der Biest, F., « Diffusion multiple et renversement du temps ultrasonore dans des milieux périodiques et désordonnés », Thèse de doctorat - Université de Paris 7, (2006).

[15] Rock Akiki. Cristaux phononiques aléatoires. Acoustique [physics.class-ph]. Université de Lille, 2022. Français. ffNNT : 2022ULILN027ff.

[16] Kutsenko, A.A. and Shuvalov, A.L. 2013 Shear surface waves in phononic crystals. J. Acoust. Soc.. Am. 248 653-660

[17] Oseev A., Lucklum R., Ke M., Zubtsov M., Grundmann R. Phononic Crystal Sensor for Liquid Property Determination; Proceedings of the International Society for Optics and Photonics; San Diego, USA. 30 March 2012; p. 834607.

[18] ANNECCA Gaëtan, CAPTEURS Instrumentation Industrielle. Université de Lorraine - France, (consulté le 5 avril 2023).

Lien : <http://dptgeii.iutsd.univ-lorraine.fr/cours/geii2/ER3/introCAPTEUR.pdf>

[19] M. Maldovan and E. L. Thomas, Simultaneous complete elastic and electromagnetic band gaps in periodic structures, Appl. Phys. B 83, 595 (2006).

[20] Acquisition D'une Grandeur Physique (Capteurs) . les-electroniciens.com. Lien : <http://www.les-electroniciens.com/sites/default/files/cours/capteurs.pdf> (accessed April 5, 2023).

[21] Zaki, S.E., Mehaney, A., Hassanein, H.M. et al. Fano resonance based defected 1D phononic crystal for highly sensitive gas sensing applications. Sci Rep 10, 17979 (2020). <https://doi.org/10.1038/s41598-020-75076-8>

[22] Nguyen, Ngan. (2015). Fabrication and optimization of polymer-based photonic structures and applications to nonlinear optics.

[23] Contributeurs de Wikilivres, « Méthode des éléments finis/Présentation générale », Wikilivres, La bibliothèque libre . Lien : (accédé le 3 avril 2023).

[24] Yin, J., Ruzzene, M., Wen, J. et al. Band transition and topological interface modes in 1D elastic phononic crystals. Sci Rep 8, 6806 (2018). <https://doi.org/10.1038/s41598-018-24952-5>

[25] Sun, Jia-Hong and Tsung-Tsong Wu. "4G-3 Guided Surface Acoustic Waves in Phononic Crystal Waveguides." 2006 IEEE Ultrasonics Symposium (2006): 673-676.

[26] Mehaney A, Ahmed AM. Locally Resonant Phononic Crystals at Low Frequencies Based on Porous SiC Multilayer. Sci Rep. 2019 Oct 14;9(1):14767. doi: 10.1038/s41598-019-51329-z. PMID: 31611574; PMCID: PMC6791839.

[27] R. Lucklum, "Phononic crystal sensors," 2012 European Frequency and Time Forum, Gothenburg, Sweden, 2012, pp. 196-199, doi: 10.1109/EFTF.2012.6502366.

[28] Méthode de Crank-Nicolson. (2019, janvier 3). Wikipédia, l'encyclopédie libre. Page consultée le 15:15, janvier 3, 2019 à partir de http://fr.wikipedia.org/w/index.php?title=M%C3%A9thode_de_Crank-Nicolson&oldid=155454905.

[29] Bougriou Feida, «Etude théorique des matériaux a bandes interdites photoniques bidimensionnels: applications dans le domaine du guidage optique et la détection», thèse doctorat, université Constantine 1, 2013..

[30] John B. Schneider , Understanding the Finite-Difference Time-Domain Method, December 20, 2022.

[31] Benjamin CUNIASSE, Tara GLASS, Métaux lourds , Citepa. Rapport Secten édition 2020. Lien : https://www.citepa.org/wp-content/uploads/1.3-ML_2020.pdf

[32] Kabata- Pendias A., et Pendias H. Trace Elements in Soils and Plants, 2010.

[33] Behanzin G. J., et al, Effet des sels de métaux lourds, 2014.

[34] Métal lourd, Site Internet Aqua Portail, publiée le 29/09/2009 (mise à jour le 15/04/2023). Lien : <https://www.aquaportail.com/dictionnaire/definition/5602/metal-lourd>.


[35] Britannica, The Editors of Encyclopaedia. "cadmium". Encyclopedia Britannica, 28 Apr. 2024, <https://www.britannica.com/science/cadmium>. Accessed 21 April 2024.

[36] Matías Miguel Salvarredy Aranguren. Contamination en métaux lourds des eaux de surface et des sédiments du Val de Milluni (Andes Boliviennes) par des déchets miniers Approches géochimique, minéralogique et hydrochimique.. Planète et Univers [physics]. Université Paul Sabatier – Toulouse III, 2008. Page 20-21.

[37] Smith, J.C., "Environmental Cadmium Monitoring and Analysis," Environ. Monitoring, vol. 10, no. 4, pp. 657-664, 2018.

[38] Connors, K.A., "Principles and Applications of Atomic Absorption Spectroscopy," Chem. Anal., vol. 48, pp. 137-142, 2020

[39] Wang, Y., et al., "Colorimetric Detection Strategies for Cadmium Ions: Approaches and Applications," Biochem. Analysis, vol. 55, pp. 23-29, 2019.



[40] Martinez, S., “Advancements in Mass Spectrometry for Environmental Cadmium Analysis,” J. Mass Spectrom., vol. 52, p. 112-120, 2021

[41] Site Internet : Convertisseur d'unité Cadmium Chloride composition et masse molaire,
Lien : <https://www.translatorscafe.com/unit-converter/fr-FR/molar-mass/?q=CdCl2>