

THÈSE

présentée à

L'UNIVERSITÉ BORDEAUX I

ÉCOLE DOCTORALE DE SCIENCES PHYSIQUES ET DE L'INGENIEUR

par **Pierre MAZEIN**

POUR OBTENIR LE GRADE DE

DOCTEUR

SPÉCIALITÉ : ELECTRONIQUE

Étude de dispositifs à ondes de Love par modélisation numérique de la propagation d'ondes acoustiques. Application à l'optimisation de structures et à la caractérisation de matériaux en vue de la réalisation de capteurs chimiques.

Soutenu le 3 Octobre 2005

Après avis de :

MM.

P. Temple-Boyer
F.J. Josse

Docteur, Chargé de Recherche, LAAS CNRS
Professeur, Marquette University (Milwaukee)

Rapporteur
Rapporteur

Devant la commission formée de :

MM.

D. Rebière
J. Pistré
L. Hairault
J. Gracia

Professeur, Université Bordeaux 1
Professeur, ENSEIRB
CEA Le Ripault
CEIT, San Sebastian, Espagne

Examineur
Examineur
Examineur
Examineur

Remerciements

Les travaux présentés dans ce mémoire se sont déroulés au sein du Laboratoire d'Etude de l'Intégration des Composants et Systèmes Electroniques (IXL), UMR 5818 CNRS, ENSEIRB, Université Bordeaux 1. Je souhaite ici remercier les personnes qui ont contribué à l'élaboration de ces travaux.

J'adresse mes remerciements à Monsieur le Professeur André Touboul, Directeur du Laboratoire IXL, pour m'avoir accueilli au sein du Laboratoire IXL.

J'adresse mes remerciements à Monsieur Javier Gracia, chercheur au CEIT de San Sebastian, pour la présidence du jury de soutenance.

Je tiens à remercier vivement Monsieur Fabien J. Josse, Professeur à l'Université Marquette, Milwaukee, d'avoir accepté, en qualité de rapporteur, d'examiner ce mémoire. Qu'il trouve ici l'expression de ma reconnaissance pour sa présence au sein de ce jury ainsi que pour les quelques conversations que nous avons eues pendant cette étude et qui m'ont conforté dans certains choix ambitieux.

Mes sincères remerciements vont à Monsieur Pierre Temple-Boyer, chargé de recherches au LAAS à Toulouse, pour avoir accepté la charge de rapporteur de cette thèse et pour l'intérêt qu'il porte à ces travaux.

Je tiens à exprimer ma pleine reconnaissance à Monsieur Lionel Hairault, chargé de recherche au CEA-Le Ripault pour l'honneur qu'il me fait en participant à ce jury.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude à Monsieur Jacques Pistré, Professeur à l'ENSEIRB, pour la confiance qu'il m'a accordée en co-encadrant ces travaux de recherches. Je lui suis particulièrement reconnaissant de son attention permanente au bon déroulement de cette thèse.

Je remercie vivement Monsieur Dominique Rebière, Professeur à l'IUT Bordeaux 1, pour m'avoir proposé ce sujet d'étude et en avoir assumé la direction, ainsi que pour la liberté d'initiative et l'attention qu'il a portées à l'avancement de mes travaux ainsi qu'à la rédaction de ce mémoire.

Mes sincères remerciements vont à Madame Corinne Déjous, Maître de Conférences à l'Université Bordeaux 1, pour sa disponibilité et sa bonne humeur permanente tout au long des ces travaux.

Je remercie également Mesdames Mireille Bernard, Valérie Cauhapé, Elisabeth Drillon et Simone Dang Van de m'avoir apporté leur aide lorsque je croulai sous les formalités administratives.

Remerciements

Que les thésards et membres du groupe capteur et microsystèmes, qui m'ont apporté un soutien par les échanges de points de vue et les conversations fructueuses durant ces années, trouvent ici l'expression de ma reconnaissance et de ma sympathie : Isabelle Dufour, Ludivine Fadel, Jean-Luc Lachaud, Ollivier Tamarin, Frédéric Lochon, Vincent Rimbault, Nicolas Moll, Florence Razan et Céline Zimmermann.

Je tiens à adresser des remerciements particuliers à Laurent Mendizabal, qui porte mes troisième et quatrième hémisphères cérébraux depuis un temps qui est, précisément, mémorisé dans l'un de ces hémisphères.

« Nous sommes des nains juchés sur des épaules de géants. Nous voyons davantage et plus loin qu'eux, non parce que notre vue est plus aigüe ou notre taille plus haute, mais parce qu'ils nous portent en l'air et nous élèvent de toute leur hauteur gigantesque ». Bernard de Chartres, XIII^{ème} siècle.

Je remercie également ces Géants pour leurs épaules.

Table des matières

Table des matières

Table des matières.....	7
Conventions de notation.....	13
Introduction.....	17
Chapitre I - Etude bibliographique.....	21
I.1. Les dispositifs à ondes acoustiques.....	23
I.1.1. Types d'ondes et polarisations.....	23
I.1.2. La piézoélectricité.....	25
I.1.3. Les transducteurs.....	26
I.1.3.a - Transducteurs pour dispositifs à ondes de volume.....	26
I.1.3.b - Transducteurs pour dispositifs à ondes de surface.....	27
I.1.4. La ligne à retard.....	28
I.1.5. Résonateurs à ondes de surface.....	29
I.1.6. Du composant au capteur.....	30
I.2. Les capteurs à ondes de Love.....	32
I.3. La modélisation.....	34
I.3.1. Méthodes de résolution.....	35
I.3.1.a - Méthodes analytiques.....	35
I.3.1.b - Méthodes numériques.....	36
I.4. Méthodes de modélisation.....	36
I.4.1. Permittivité piézoélectrique de surface.....	36
I.4.2. Analogie avec les lignes de transmission.....	37
I.4.3. Méthode des matrices de transfert.....	39
I.4.4. Le formalisme de Stroh.....	39
I.5. Les modèles développés au laboratoire.....	40
I.6. Conclusion.....	41
Chapitre II - Modélisation.....	43
II.1. La problématique.....	45
II.2. Les équations du modèle physique.....	47
II.2.1. Pour les milieux solides.....	47
II.2.2. Pour les milieux fluides.....	48
II.2.3. Cas des polymères.....	50
II.3. La modélisation.....	54
II.3.1. Le noyau.....	55
II.3.1.a - Matrice de transfert d'une couche d'épaisseur finie.....	56
II.3.1.a.a - Forme matricielle des équations de propagation.....	57
II.3.1.a.b - Résolution des équations de propagation – Vecteurs d'ondes normalisés.....	58
II.3.1.a.c - Calcul de la matrice d'état.....	60
II.3.1.a.d - Calcul de la matrice de transfert.....	61
II.3.1.b - Matrice de transfert globale.....	61
II.3.1.c - Vecteurs d'état des milieux semi-infinis.....	61
II.3.1.d - Fin du calcul.....	65
II.3.2. L'interface.....	65
II.3.2.a - Gestion des données.....	66

Table des matières

II.3.2.b - Conditionnement des matrices.....	68
II.3.2.c - Recherche du nombre minimal de polarisations.....	69
II.3.2.d - Détermination d'un intervalle de recherche.....	72
II.3.2.e - Recherche des zéros du déterminant.....	74
II.3.2.e.a - Zéros ou minimums locaux ?.....	74
II.3.2.e.b - Zéros de la partie réelle et imaginaire.....	77
II.3.2.e.c - Utilisation d'une vitesse complexe.....	77
II.3.2.f - Algorithmes utilisés.....	80
II.4. Autres fonctionnalités.....	84
II.5. Du recul	84
II.6. Conclusion.....	86
Chapitre III - Applications de la modélisation.....	89
III.1. Validation du simulateur par analyse comparative.....	92
III.1.1. A partir des résultats issus de [TCZ].....	92
III.1.1.a - Calcul de vitesses de phase en fonction de l'épaisseur de la couche guidante.....	92
III.1.1.b - Vitesse de groupe.....	93
III.1.1.b.a - Calcul de la vitesse de groupe.....	93
III.1.1.b.b - Comparaison entre modèles.....	94
III.1.1.c - Sensibilité de la vitesse de phase au dépôt d'une couche.....	95
III.1.1.d - Sensibilité à l'effet de masse.....	96
III.1.2. A partir des résultats issus de [TOT].....	97
III.1.2.a - Effet de la viscosité - liquide Newtonien.....	97
III.1.2.b - Effet de la viscoélasticité - liquide Maxwellien.....	100
III.1.3. Effets des variations du module de rigidité transverse.....	101
III.1.3.a - Sensibilité aux variations du module d'élasticité transverse.....	101
III.1.3.b - Sensibilité aux variations du module de pertes d'un solide.....	103
III.2. Validation de la prise en compte de la température.....	109
III.3. Caractérisation de couches de matériaux isotropes.....	111
III.3.1. Protocole de caractérisation.....	112
III.3.1.a - Description de la méthode.....	112
III.3.1.b - Utilisation de la vitesse de groupe.....	114
III.3.1.c - Généralisation de la méthode.....	114
III.3.2. Résultats expérimentaux.....	115
III.3.3. Conclusion sur la méthode de caractérisation.....	117
III.4. Optimisation de structures – matériaux virtuels.....	118
III.4.1. Principes de l'application.....	119
III.4.2. Simulations.....	120
III.4.2.a - Description des figures.....	120
III.4.2.b - Interprétations.....	123
III.5. Conclusion.....	124
Chapitre IV - Détection et mesure.....	127
IV.1. Moyens mis en oeuvre.....	130
IV.1.1. Cellule de tests.....	130
IV.1.2. Capteurs.....	131
IV.1.3. Oscillateur.....	131
IV.1.4. Banc de dilution.....	132

IV.1.5. Réponse typique.....	133
IV.2. Evolution des méthodes d'analyse utilisées au laboratoire IXL.....	135
IV.3. Méthode employée dans cette étude.....	136
IV.3.1. Pré-traitement des données.....	138
IV.3.2. Extraction de paramètres transitoires.....	139
IV.3.3. L'analyse en composantes principales.....	141
IV.4. Résultats expérimentaux.....	143
IV.4.1. Sélection des paramètres transitoires.....	143
IV.4.2. Temps d'acquisition.....	144
IV.4.3. Mesures.....	145
IV.4.3.a - Mesures sous air sec.....	145
IV.4.3.b - Mesures sous air humide.....	147
IV.5. Conclusion.....	149
Conclusion générale.....	153
Perspectives.....	159
Bibliographie.....	163
Documents annexes.....	169
Annexe A. Interface graphique.....	171
Annexe B. Structure des fichiers de données.....	175
B.1. Format de fichier d'un fluide.....	175
B.2. Format de fichier d'un solide.....	176
B.2.1. Fichier des données élastiques.....	176
B.2.2. Fichier des données dissipatives.....	176
B.3. Format de fichier d'un solideGPGS.....	177
Annexe C. Fichiers de données de matériaux utilisés.....	179
C.1. Quartz.....	179
C.1.1. Fichier élastique.....	179
C.1.2. Fichier dissipatif.....	179
C.2. SiO ₂	180
C.2.1. Fichier élastique.....	180
C.2.2. Fichier dissipatif.....	180
C.3. PMMA.....	181
C.3.1. Fichier élastique.....	181
C.3.2. Fichier dissipatif.....	181
C.4. Vide.....	182
C.5. Eau.....	182
C.6. PMMAGPGS.....	182
C.6.1. Fichier élastique.....	182
C.6.2. Fichier dissipatif.....	183
Annexe D. Modélisation en mode manuel.....	185
D.1. Simulations simples.....	185

Table des matières

D.2. Optimisation de structure.....	188
-------------------------------------	-----

Remarque : La hiérarchisation fait apparaître une numérotation en chiffres romains pour les chapitres, en chiffres pour les éléments de plan, et en lettres pour les énumérations de cas différents ou les étapes de réalisation d'une méthodologie.

Conventions de notation

Conventions de notation

– α	Amplitude des composantes partielles du déplacement
– Φ	Potentiel électrique
– C^t	Constante
– D	Induction électrique
– S_{vd}	Sensibilité de la vitesse de phase v au dépôt d'une couche
– S_{vm}	Sensibilité de la vitesse de phase v à l'effet de masse m
– $S_{vG''}$	Sensibilité de la vitesse de phase v à l'effet de module de pertes G''
– $S_{\delta m}$	Sensibilité des pertes par propagation δ à l'effet de masse m
– $S_{\delta G''}$	Sensibilité des pertes par propagation δ à l'effet de module de pertes G''
– T	Contraintes mécaniques
– u	Déplacements mécaniques
– x	Position de la particule dans la structure

Introduction

Lorsque vous avez éliminé l'impossible, ce qui demeure,
aussi improbable que cela paraisse, doit être la vérité.

S. Holmes

L'étude des interactions ondes acoustiques-environnement constitue un axe de recherche majeur avec pour objectif final le développement de microsystemes de détection (bio)chimiques dédiés. La littérature met en évidence un grand nombre d'études qui présentent des modèles analytiques, introduisant de ce fait un nombre important de limitations (caractéristiques des matériaux, structure multicouche). Ces études ne permettent pas d'avoir une optimisation donnée de dispositifs génériques (plateformes) de détection par ondes acoustiques. Pour répondre à cet objectif, il nous a été demandé de développer un outil permettant la simulation de la propagation d'ondes acoustiques dans une structure placée dans un environnement donné.

Au cours des années précédentes, deux études ([TCZ] et [TOT]) ont été menées sur le thème de la perturbation de la propagation des ondes de Love. Ces deux études ont montré la faisabilité et les performances des capteurs à ondes de Love pour la réalisation de capteurs.

La diversité et le nombre des paramètres à prendre en compte font qu'il n'est plus concevable de réaliser une étude théorique exclusivement analytique car les équations s'enrichissent de termes, notamment dus à l'anisotropie et à la piézoélectricité. Ceux-ci empêchent la résolution des équations de propagation. De plus nous avons souhaité pouvoir transcrire théoriquement toutes les conséquences sur la structure d'une manipulation expérimentale, ce qui sous entend une grande facilité d'accès à tous les paramètres du modèle.

Dans cet esprit nous avons réalisé une synthèse des phénomènes physiques qui influent sur le capteur afin de décrire le plus globalement possible le fonctionnement d'un capteur à ondes de Love; il faut en effet réaliser des optimisations spécifiques à une application, compenser des phénomènes tels que la température ou encore caractériser des matériaux par recherche par ajustement des paramètres afin de retrouver les résultats expérimentaux.

L'étude comporte quatre chapitres ainsi qu'une conclusion suivie de perspectives. Dans le premier chapitre nous présentons les éléments qui font les capteurs à ondes élastiques de surface : les ondes, les transducteurs, les capteurs, et une présentation plus détaillée des ondes de Love. Cette première partie est suivie d'une étude bibliographique présentant les méthodes de modélisation de la propagation utilisées au laboratoire lors d'études précédentes, ainsi que les méthodes les plus généralement présentées dans la communauté. Nous nous sommes focalisés sur celles utilisant un formalisme matriciel, afin de prendre en compte la problématique spécifique.

Le second chapitre présente les paramètres pris en compte dans la modélisation et la réalisation, étape par étape, des deux parties qui font l'outil de modélisation : l'une physique, qui constituera le

Introduction

noyau dans lequel sont résolues les équations de propagation et appliquées les conditions aux limites, l'autre mathématique, plus proche de l'analyse numérique, qui constitue l'interface permettant d'introduire des données (paramètres physiques, dimensions ...) dans le noyau et d'en extraire les informations qui permettront de trouver la vitesse de phase de l'onde de Love. Une fois la vitesse de phase obtenue, l'interface la communique à l'application développée.

Le troisième chapitre présente les applications réalisées à l'aide de l'outil de modélisation réalisé au chapitre II : une interface graphique qui permet de réaliser des simulations simples utilisées afin de valider la fiabilité du noyau du simulateur, et deux applications. La première combine manipulations et simulations dans le but de caractériser les matériaux utilisés pour réaliser les structures, la seconde est en fait un outil de prospection théorique destiné à orienter le choix des matériaux qui permettront d'obtenir le capteur le plus sensible possible.

Le quatrième chapitre présente une étude expérimentale du fonctionnement des capteurs à ondes de Love appliqués à la détection de composés organophosphorés à l'état de vapeurs. A l'occasion de cette étude, nous avons réalisé un protocole d'analyse de la réponse en fréquence des capteurs basé sur l'extraction de paramètres transitoires. Ce protocole est destiné à compléter la chaîne de détection, le but final étant de parvenir à un ensemble intégré sous forme de microsystème.

Chapitre I – Etude bibliographique

L'objet de ce chapitre est d'effectuer une synthèse des capteurs à ondes acoustiques de surface. Tous ces capteurs ont deux points communs : l'utilisation de la piézoélectricité pour générer l'onde, et la nature du signal généré par le capteur (une variation de phase ou de fréquence). Toutefois, les nombreuses possibilités d'applications conduisent à une grande variété de configurations des transducteurs, de types d'ondes et de combinaisons de polarisations.

Cette synthèse a pour but de faire l'inventaire des dispositifs à ondes de surface existants, et d'évoquer leur fonctionnement au travers de la configuration de l'électronique de mesure, des applications, et des performances de fonctionnement. Une attention particulière sera portée sur les dispositifs à ondes de Love.

Nous passerons en revue les différentes méthodes de modélisation de ces ondes acoustiques de surface ainsi que la résolution des équations de propagation. Enfin, nous réaliserons une synthèse concernant les travaux de modélisation de la propagation des ondes acoustiques effectués par l'équipe capteurs et microsystèmes jusqu'à présent. Ainsi nous parviendrons au coeur de cette étude : la réalisation et l'exploitation d'un outil de modélisation de la propagation des ondes de Love.

1.1. Les dispositifs à ondes acoustiques

1.1.1. Types d'ondes et polarisations

On distingue trois polarisations : la polarisation longitudinale dans laquelle la particule se déplace dans un mouvement colinéaire au vecteur d'onde, et les deux polarisations transverses (verticales et horizontales), dans lesquelles la particule se déplace orthogonalement au vecteur d'onde.

On peut distinguer quatre grandes familles de dispositifs à ondes acoustiques :

- Les dispositifs à ondes de volume (BAW, pour Bulk Acoustic Waves)
- Les dispositifs à ondes de surface (SAW, pour Surface Acoustic Waves)
- Les dispositifs à modes de plaque
- Les dispositifs à ondes guidées dans une structure hétérogène.

Dans le premier groupe, c'est tout le volume du matériau qui se déforme, la polarisation peut être longitudinale ou transverse. Dans le second groupe, l'onde est guidée à la surface du matériau : la figure I.1 (gauche) représente une onde de Rayleigh (polarisation longitudinale et transverse verticale déphasées de 90°), la figure I.1 (droite) représente une onde de Bleustein-Gulyaev (polarisation transverse horizontale).

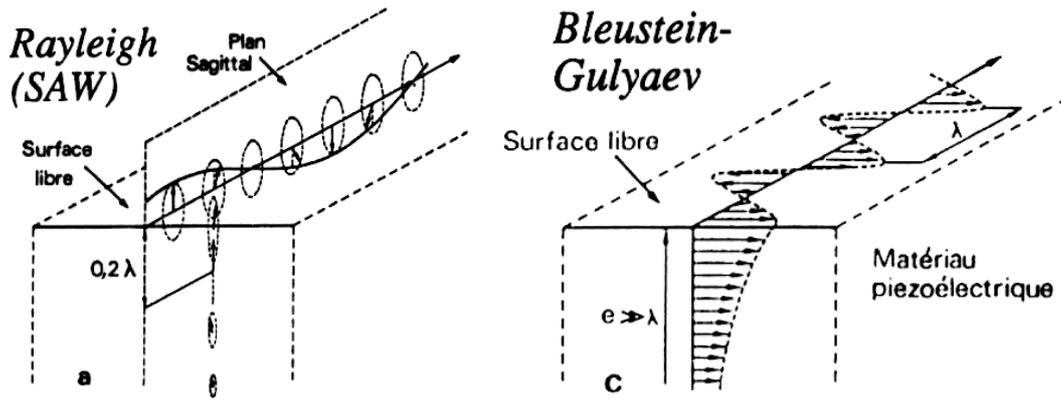


Figure I.1 gauche : déplacement des particules au passage d'une onde de Rayleigh. Droite : déplacement des particules lors de la propagation d'une onde de Bleustein-Gulyaev.

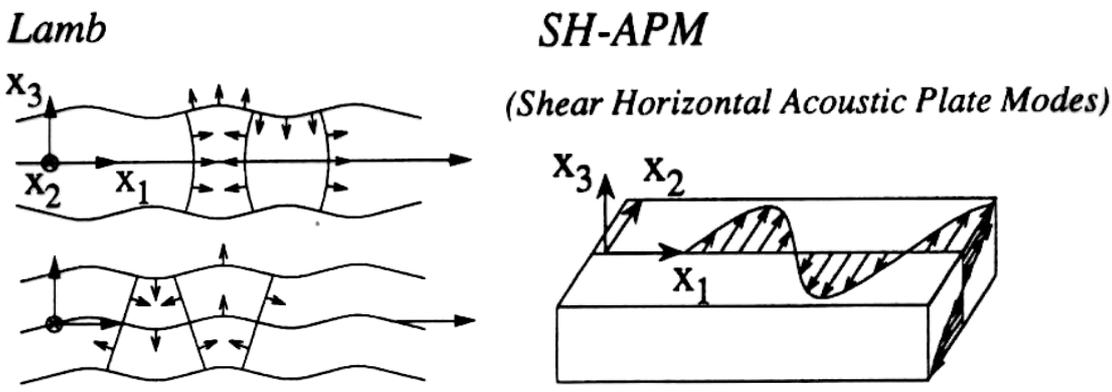


Figure I.2 gauche : déplacement des particules au passage d'une onde de Lamb (haut : mode symétrique, bas : mode antisymétrique). droite : déplacement des particules au passage d'une onde SH-APM (mode d'ordre 1).

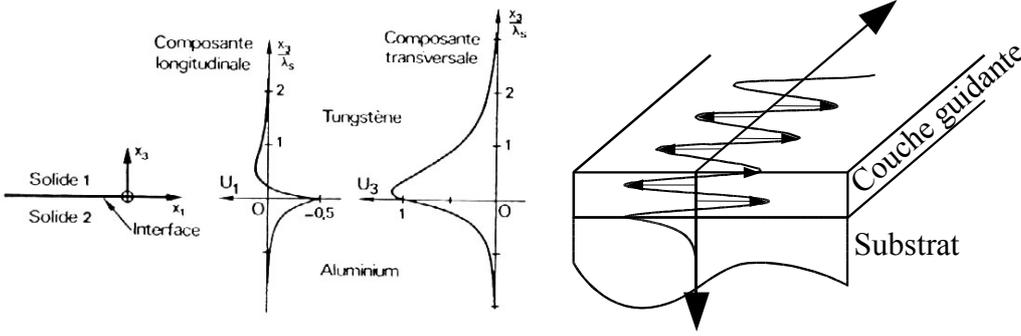


Figure I.3 gauche : amplitude des composantes longitudinales et transverses verticales dans le cas de la propagation d'une onde de Stoneley. droite : déplacement dans le cas de la propagation d'une onde de Love.

Figures extraites de [EDieul1].

Dans le troisième groupe l'onde se propage dans le volume du matériau, soit sous la forme de deux ondes de Rayleigh (une par face) pour une onde de Lamb (cf. figure I.2 à gauche) ou sous la

forme d'une onde transverse horizontale subissant des réflexions aux faces du matériau (onde SH-APM figure I.2 à droite).

Enfin, le quatrième groupe implique des structures dans lesquelles il y a au moins deux solides rigidement liés entre eux : l'onde de Stoneley qui est une onde de Rayleigh se propageant à l'interface entre deux solides (cf. figure I.3 à gauche), et l'onde de Love dans laquelle l'onde se propage essentiellement dans la couche guidante (cf. figure I.3 à droite).

L'anisotropie des cristaux a pour effet de coupler mécaniquement certaines polarisations, on a alors des polarisations quasi-longitudinales et/ou quasi-transverses, dans lesquelles le déplacement n'est ni colinéaire ni orthogonal au vecteur d'onde. On nomme alors la polarisation d'après l'importance de chacune des projections du déplacement de la particule sur un repère lié au vecteur d'onde.

I.1.2. La piézoélectricité

C'est en 1880, qu'avec son frère Jacques, Pierre Curie observe qu'une pression exercée sur un cristal de quartz crée un potentiel électrique. Les frères Curie baptisent ce phénomène piézoélectricité.

Ce phénomène trouve son origine dans la structure cristalline du matériau, plus précisément dans l'agencement spatial des atomes et la polarisation des liaisons. La figure I.4 est l'exemple d'un cristal de quartz, une maille est représentée, elle contient trois molécules de SiO_2 . L'atome d'oxygène est plus électronégatif que l'atome de silicium, il a donc tendance à drainer à lui les électrons de la liaison covalente Si-O. Ceci a pour effet de polariser chaque « molécule ». Or, au repos, sa structure cristalline fait que les barycentres des charges positives et négatives sont superposés, la polarisation est donc nulle. Une fois le cristal déformé (extension verticale, ou compression horizontale, ici), les barycentres s'éloignent donnant naissance à un champ électrique.

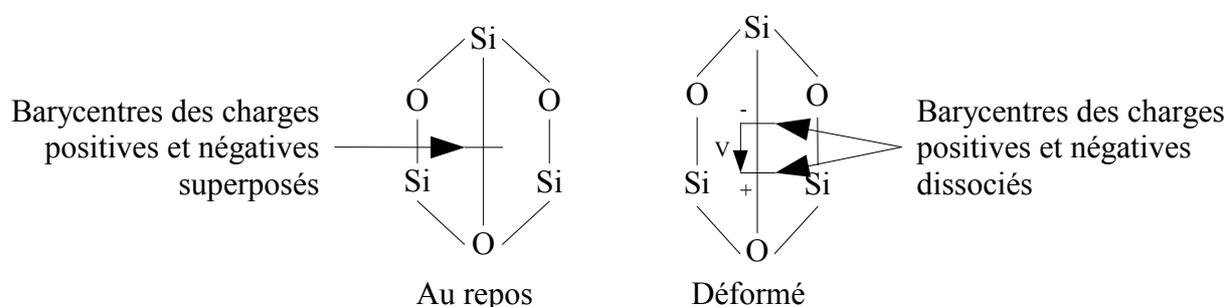


Figure I.4 Projection dans le plan des atomes d'un cristal de quartz.

Ce phénomène est réversible : l'application d'un champ électrique correctement orienté par rapport aux mailles cristallines causera une déformation du matériau. Ainsi on pourra de façon électrique causer la déformation mécanique du cristal. Réciproquement, ces déformations mécaniques permettront de capter un signal électrique à l'aide de transducteurs.

I.1.3. Les transducteurs

Selon que l'on veut générer une onde de volume ou de surface, on utilisera soit des électrodes placées de part et d'autre du volume, soit des transducteurs interdigités (IDTs, pour InterDigital Transducers). Ils correspondront aux lieux d'émission ou de réception de l'onde.

I.1.3.a - Transducteurs pour dispositifs à ondes de volume

Pour des raisons d'atténuation de l'amplitude, les dispositifs BAW sont en général des résonateurs à ondes de volume. Les électrodes sont donc placées de part et d'autre du matériau, figure I.5. L'onde est émise entre les parties en regard des électrodes.

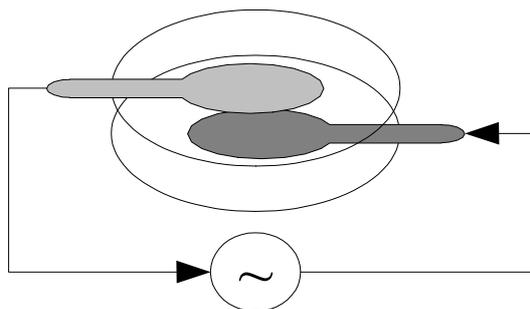


Figure I.5 Position des électrodes pour un résonateur à ondes de volume

Lorsque la fréquence du signal appliqué aux électrodes est proche de la fréquence de résonance, il s'établit une onde stationnaire entre les électrodes, et l'impédance du résonateur diminue brutalement car le coefficient de qualité est élevé. On tire généralement partie de ce mode de fonctionnement en utilisant un montage oscillateur type Colpitts (figure I.6) pour son excellente stabilité de phase, et donc de fréquence.

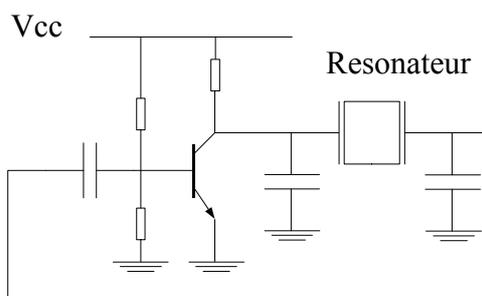


Figure I.6 Oscillateur Colpitts

I.1.3.b - Transducteurs pour dispositifs à ondes de surface

Deux électrodes métalliques sont déposées en surface d'un matériau piézoélectrique. L'application d'une tension entre ces électrodes génère une contrainte mécanique qui se propage dans le matériau. Afin d'augmenter l'effet produit, on place plusieurs paires d'électrodes alimentées par la même différence de potentiel et disposées de telle sorte que compte tenu de la vitesse de propagation de la contrainte produite l'effet devienne cumulatif, la périodicité des électrodes correspond alors à la longueur d'onde. On obtient ainsi une structure interdigitée. Ces transducteurs à structure d'électrodes interdigitées sont déposées pour générer un ébranlement mécanique à la surface d'un matériau piézoélectrique (cf. figure I.7, à gauche).

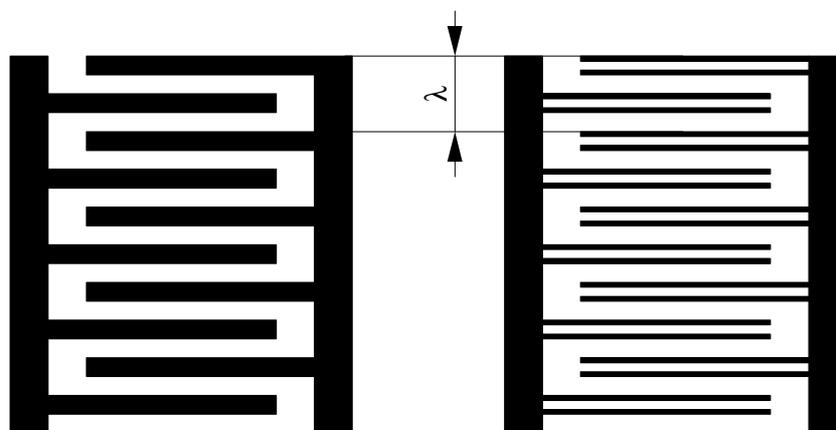


Figure I.7 Configurations usuelles de transducteurs interdigités.
Gauche transducteurs simples. Droite transducteurs à doigts doubles.

L'effet piézoélectrique étant réversible, le même transducteur peut collecter les déformations mécaniques. Ainsi après émission et propagation de l'onde à la surface du matériau on peut la capter après un certain temps (retard), qui dépend de la vitesse de propagation et de la distance entre transducteurs.

Les performances de ces transducteurs dépendent principalement du taux de métallisation de leur surface : celle-ci doit être uniformément recouverte de métal sinon des déphasages apparaissent dus à la différence de vitesse de phase entre les zones avec et sans métal. En particulier, ces déphasages peuvent gêner la réception. Elles dépendent aussi des réflexions successives sur les doigts successifs : le fait de scinder les doigts en deux permet de limiter l'écho de triple transit, phénomène particulièrement pénalisant pour les lignes à retard, tout en conservant une métallisation uniforme. Enfin elles dépendent du coefficient de piézoélectricité du matériau.

Plusieurs autres paramètres influent (cf. [EDieul2], paragraphe 7.1.1), mais dans des cas particuliers qui ne sont pas le nôtre (résonateur, traitement du signal). Tout au plus nous signalerons une structure de transducteurs unidirectionnels qui, en exploitant les réflexions, permettent d'émettre l'énergie dans une seule direction lors de l'utilisation en configuration de ligne à retard. Les pertes sont ainsi réduites (théoriquement d'un facteur 2) en comparaison avec la même ligne à retard exploitant des transducteurs bidirectionnels.

D'une manière générale ce type de transducteur peut aussi générer une onde de volume non guidée à la surface du matériau. Dans le cas d'une onde à mode de plaque (cf. figure I.2, droite), c'est elle qui est exploitée : elle se propage par réflexions successives sur les deux faces d'une lame de matériau (cf. [TCD] et [TIE]). C'est le seul cas où ce type de transducteur est utilisé pour générer une onde de volume.

I.1.4. La ligne à retard

La structure présentée figure I.8 est appelée ligne à retard en raison du retard que présente le signal acoustique par rapport au signal électromagnétique qui transiterait directement d'un transducteur à l'autre.

Cette structure fut réalisée pour la première fois par R.M. White et F.W. Woltmer [Whi65], elle permet de générer les ondes acoustiques par couplage piézoélectrique. Outre la longueur d'onde λ des transducteurs, la ligne à retard est également caractérisée par la distance centre à centre L_{cc} d'un transducteur à l'autre, et l'ouverture W , qui est la longueur de recouvrement des doigts. Celle-ci doit être grande devant λ pour pouvoir considérer que l'onde est plane. Le retard, qui donne son nom à la ligne, est le temps τ mis par l'énergie pour aller du centre d'un transducteur à l'autre : $\tau = L_{cc}/V_g$, où V_g est la vitesse de groupe.

Lorsque l'on excite le transducteur à sa fréquence de synchronisme $f = V_p/\lambda$, une onde est émise et se propage à la surface du matériau avec la vitesse de phase V_p . En associant la ligne à retard avec un amplificateur, de sorte à réaliser une contre réaction, on réalise un oscillateur (cf. figure I.9).

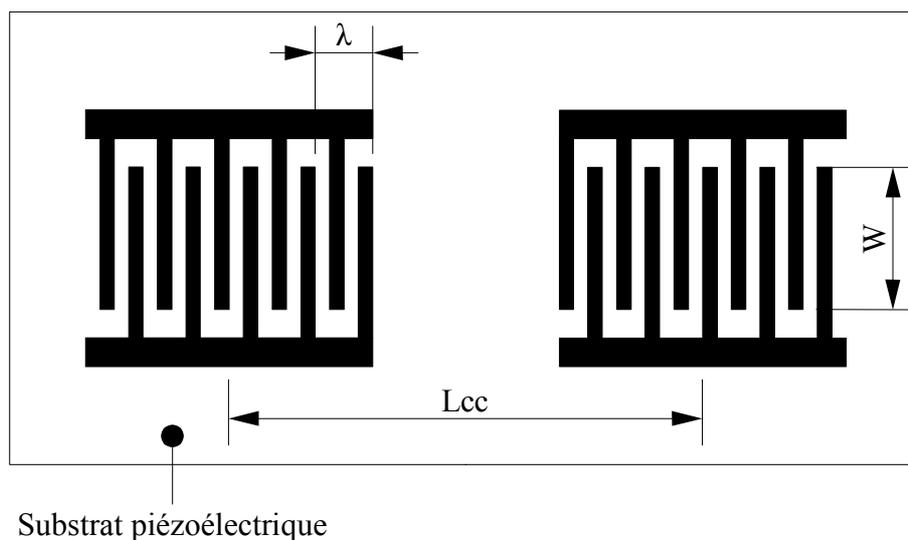


Figure I.8 Ligne à retard vue de dessus.

La fréquence d'oscillation est prélevée à l'aide d'un coupleur. Connaissant la périodicité λ des transducteurs, on peut en déduire la vitesse de phase simplement $V_p = \lambda \cdot f$, où f est la fréquence du minimum de pertes sur le diagramme de bode de la ligne à retard. Sur les dispositifs présentant plusieurs modes de propagation (c'est à dire plusieurs fréquences d'oscillation), on peut avoir recours à un filtre passe bande ou à un déphaseur afin de sélectionner le mode souhaité.

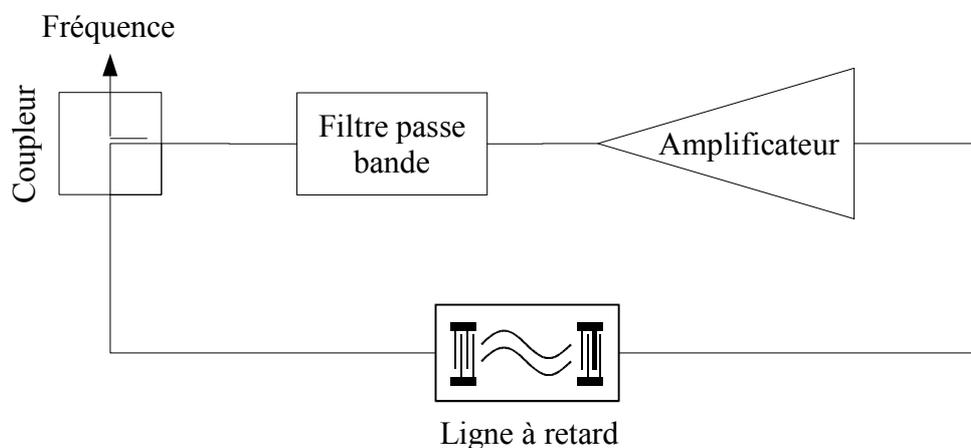


Figure I.9 Utilisation d'une ligne à retard dans la boucle de rétroaction d'un oscillateur.

I.1.5. Résonateurs à ondes de surface

Ces composants fonctionnent grâce à un réseau de réflecteurs métalliques (cf. figure I.10) déposés de manière identique à celle des IDTs. Ces réflecteurs sont disposés de part et d'autre d'un IDT comportant en général peu de paires de doigts, comparé à ceux des lignes à retard. La périodicité spatiale des réflecteurs est identique à celle des transducteurs.

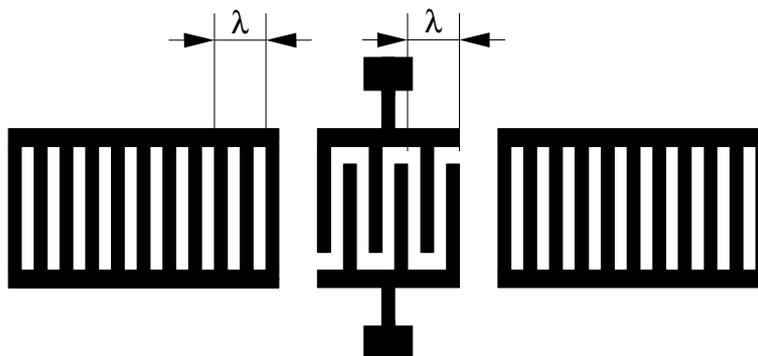


Figure I.10 Electrodes (au centre) et réseaux de réflecteurs (de part et d'autre) d'un résonateur à ondes de surface typique.

Lorsqu'un signal est appliqué avec une fréquence f telle que le produit $\lambda.f$ soit égal à la vitesse de phase de l'onde, les ondes réfléchies sur les transitions métal/nu et nu/métal reviennent en phase vers le transducteur, causant alors une brutale chute de l'impédance du composant.

L'architecture de l'électronique associée est identique à celle du résonateur à ondes de volume (cf. figure I.5). En général ces résonateurs utilisent des ondes de Rayleigh, bien que rien n'interdise fondamentalement de réaliser des résonateurs à ondes de Bleustein-Gulyaev, de Love, ou tout autre mode présenté au paragraphe I.1.1 - Types d'ondes et polarisations.

I.1.6. Du composant au capteur

Quelle que soit sa structure ou l'électronique associée, l'oscillateur réalisé à l'aide des structures précédemment décrites verra sa stabilité en fréquence assurée par la stabilité des caractéristiques physiques de chacun des matériaux le composant, ainsi que par la stabilité de sa structure géométrique.

Réciproquement, toute modification d'une caractéristique aura une influence sur la fréquence d'oscillation. De ce point de vue, toute structure est intrinsèquement le capteur de ses propres caractéristiques physiques. Cependant, afin de réaliser un capteur dans un but précis, il faut privilégier une interaction spécifique entre le composant et son environnement : en diminuant l'influence des autres mesurandes et en exacerbant celle du mesurande désiré.

Remarque : la mesure qui est réalisée est la fréquence d'oscillation. Ainsi le capteur est constitué par la boucle d'oscillation en entier. Par la suite nous restreindrons le terme capteur à la structure à ondes acoustiques ; la partie électronique sera alors considérée comme parfaitement stable de sorte que toute variation de fréquence soit due uniquement au capteur.

S'il est difficile de diminuer simultanément l'influence de tous les mesurands non désirés, il est en revanche possible de jouer très fortement sur l'augmentation de la sensibilité et la sélectivité de la structure au mesurande désiré. On utilisera pour cela un matériau dont les caractéristiques physiques dépendent spécifiquement de l'interaction avec le mesurande pour réaliser l'interface avec le milieu environnant (cf. figure I.11). Dans cette configuration l'interface joue le rôle d'un filtre sélectif, et le capteur voit un environnement qui contient uniquement le mesurande souhaité, les étoiles dans la figure I.11.

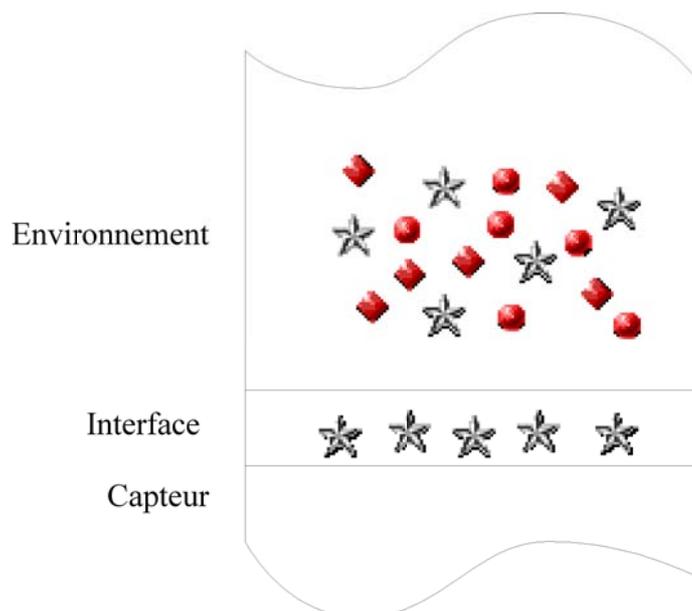


Figure I.11 La couche sensible spécifique est utilisée pour réaliser l'interface avec le milieu environnant.

Cette configuration est particulièrement adaptée aux capteurs à ondes élastiques de surface : l'interface entre l'environnement et le capteur peut faire partie intégrante du capteur, agissant ainsi directement sur la propagation de l'onde : la sorption d'un composé dans cette couche d'interface en modifiera la masse volumique, la rigidité, ou bien encore l'épaisseur, qui sont autant de grandeurs qui influent sur la vitesse de phase dans le capteur, et donc la fréquence d'oscillation. La couche n'est plus uniquement sélective, mais aussi sensible car elle sera à l'origine de la perturbation de la propagation de l'onde.

Dans le cas de la détection de variations de propriétés physiques du milieu environnant, il n'est pas toujours nécessaire d'ajouter une interface, puisqu'il y a souvent interaction directe entre le guide d'onde et le mesurande de par la continuité des déplacements et contraintes à l'interface capteur/environnement.

Les performances théoriques atteintes en terme de sensibilité à l'effet de masse en milieu gazeux sont résumées dans le tableau I.1 (extrait de [Zim02_1]). La sensibilité étant calculée comme la variation relative de vitesse ramenée à l'épaisseur de la couche sensible et à l'augmentation de masse volumique de cette couche comme suit :

$$S_{vm} = \frac{Vp - Vp_0}{Vp_0} \cdot \frac{1}{\Delta \rho_{couche} \times h_{couche}}$$

C'est l'onde de Lamb qui offre la meilleure sensibilité à l'effet de masse, toutefois cette onde se propage dans une lame mince de matériau auto-supporté (quelques μm d'épaisseur), ce qui la rend extrêmement fragile à manipuler (de même pour les structures propageant des ondes SH-APM).

L'onde de Love devient alors l'onde la plus intéressante car la structure associée est très robuste mécaniquement : le substrat peut être épais, son épaisseur n'étant pas un paramètre de la sensibilité de la structure. La couche guidant l'onde sert également de protection aux IDTs contre l'abrasion et la corrosion. La nature transverse horizontale de l'onde permet le fonctionnement en milieu liquide sans rayonner son énergie dans le volume du liquide.

Type d'onde	Structure du capteur	Fréquence de fonctionnement	Valeur typique (m^2/kg)
BAW ¹	Quartz, coupe AT	6 MHz	1,4
Rayleigh	Quartz, coupe ST	97 MHz	13,3
Lamb	ZnO, sur nitrure de silicium	4,7 MHz	45,0
SH-APM	Quartz, coupe ST	156 MHz	1,5
Love	Quartz, coupe AT, couche guidante de SiO ₂ de 4,5 μm d'épaisseur	115 MHz	22,1

Tableau I.1 Comparaison des sensibilités théoriques à l'effet de masse pour diverses ondes.

¹Mode transverse horizontal, cf. paragraphe I.1.1 - Types d'ondes et polarisations.

Les capteurs SAW à ondes de Rayleigh présentent aussi une sensibilité à l'effet de masse intéressante, mais la polarisation transverse verticale interdit l'utilisation en milieu liquide du fait des fortes pertes dues au rayonnement de l'énergie dans le volume du liquide. De plus, il faut protéger les IDTs qui se trouveraient exposés dans l'environnement.

I.2. Les capteurs à ondes de Love

Ces ondes tiennent leur nom du mathématicien anglais Augustus Edward Hough Love (figure I.12) qui en fit la description mathématique dans le cadre de la géologie en 1911.

Nous avons présenté dans les paragraphes précédents les différents éléments qui constituent le capteur. Nous allons maintenant présenter les capteurs à ondes de Love tels qu'ils sont étudiés au Laboratoire et dans la communauté.



Figure I.12 A.E.H. Love, mathématicien anglais, 1863-1940.

Nous avons vu au paragraphe précédent, tableau I.1, l'ordre de grandeur de la sensibilité par type d'onde utilisée. Une logique sous-jacente à ce tableau est que la sensibilité du capteur croît avec l'augmentation de la densité d'énergie à proximité de l'interface avec l'environnement. En effet BAW et SH-APM ont les sensibilités les plus faibles car l'énergie se trouve répartie dans tout le volume de matériau (quelques centaines de micromètres), l'énergie de l'onde de Bleustein-Gulyaev se trouve répartie en profondeur sur plusieurs longueurs d'ondes (cf. Figure I.1, page 24), l'énergie de l'onde de Rayleigh se répartie sur une épaisseur de l'ordre de la longueur d'onde (cf. figure I.1, page 24), soit quelques dizaines de micromètres, l'énergie de l'onde de Love se trouve essentiellement répartie dans la couche guidante, soit quelques micromètres, et enfin l'onde de Lamb se trouve répartie dans une lame dont l'épaisseur est faible devant la profondeur de pénétration de chaque onde de Rayleigh (cf. Figure I.1, page 24).

Ainsi, pour une quantité d'énergie à peu près identique apportée par les transducteurs, plus l'énergie se trouve concentrée près de la zone d'interaction avec l'environnement, plus le rapport quantité d'énergie perturbée/quantité d'énergie non perturbée sera important sur le transducteur de réception de l'onde, un peu à la manière d'un rapport signal/bruit. De cette manière la sensibilité augmente, et le seuil de détection diminue. Ajoutons que c'est sur ce point que se conclue la thèse sur les SH-APM d'Irène Esteban [TIE], introduisant ainsi les études sur les ondes de Love au laboratoire.

La figure I.13 présente les deux structures les plus répandues : dans l'une les fonctions de guidage de l'onde et de sélectivité/sensibilité sont dissociées (figure I.13 gauche), dans l'autre (figure I.13 droite) ces fonctions sont associées. L'épaisseur pour la couche guidante est de quelques microns, pour la couche sensible de quelques centaines de nanomètres.

Le choix entre ces deux structures est en fait imposé par le matériau qui va assurer le rôle de couche sensible/spécifique, et plus particulièrement par son module de rigidité transverse. Si le matériau sensible est visqueux, il conduira à des pertes par propagation et ne pourra être employé que dans une structure qui dissocie guidage et sélectivité/sensibilité (figure I.13 gauche). Dans le cas contraire il pourra faire double emploi et servir de guide et de couche sélective/sensible (figure I.13 droite).

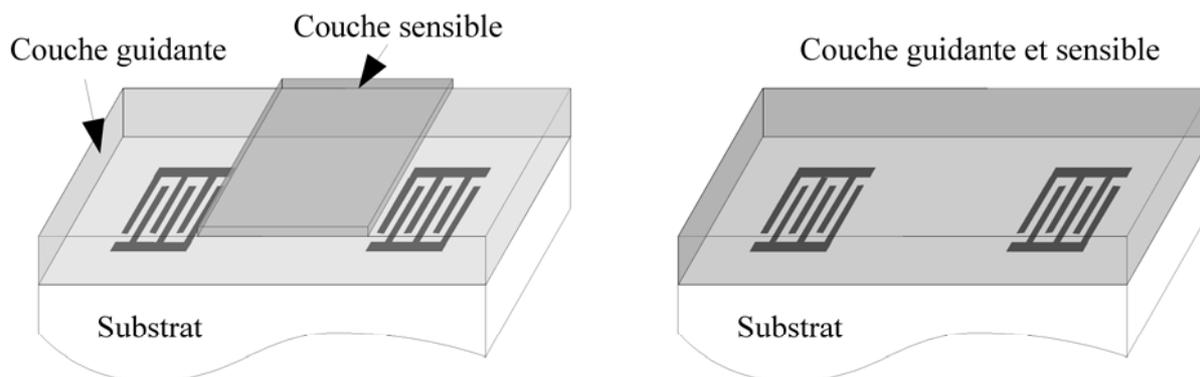


Figure I.13 Structures possibles pour les capteurs à ondes de Love.

La seconde structure est intrinsèquement plus sensible car la zone d'interaction et la zone dans laquelle se trouve confinée l'énergie de l'onde sont la même. Lorsque la réalisation d'une telle structure n'est pas possible, on utilise une couche élastique peu visqueuse pour guider l'onde avec un minimum de pertes. On détermine l'épaisseur de cette couche pour obtenir la plus grande sensibilité du capteur aux paramètres physiques de la couche sensible spécifique.

De par sa polarisation transverse horizontale, l'onde de Love permet le fonctionnement en milieu liquide aussi bien qu'en milieu gazeux, car l'interface solide ne rayonne pas dans le fluide en raison de l'absence de composante normale au plan de propagation. Toutefois on observe une nette augmentation des pertes par propagation due au frottement visqueux des particules du liquide au contact de la surface du capteur.

Enfin, la couche guidante joue un important rôle de protection des transducteurs interdigités vis à vis du milieu de détection.

1.3. La modélisation

Les phénomènes physiques qui influent sur le capteur (masse volumique des matériaux, dimensions, caractéristiques du milieu environnant) ont été étudiés expérimentalement séparément les uns des autres au laboratoire et dans la communauté.

Or, dans les faits, lorsque le capteur est en fonctionnement, il est soumis à des combinaisons de variations simultanées de plusieurs grandeurs : par exemple lorsque la température d'une masse d'air humide augmente, son taux d'humidité relative diminue. Si la couche sensible présente une affinité pour l'eau, celle-ci va désorber, donc causer une variation de fréquence par effet de masse qui s'ajoutera à l'effet de la variation de température. Il peut aussi y avoir une modification du volume de la couche lors de la désorption (connu sous le nom de « swelling effect » dans la littérature anglo-saxonne) en plus de la dilatation thermique. Ainsi pour une même cause (la variation de température), la réponse du capteur a trois origines : la température, la désorption et la variation d'épaisseur.

Des techniques de traitement du signal permettent de décorrélérer ces influences, pourvu que le capteur ait été étalonné pour chacune des grandeurs d'influence. Il faut aussi qu'une fois en opération le capteur reste dans le domaine de fonctionnement défini par l'étalonnage. Toutefois, la variété des paramètres, et la multitude de leurs combinaisons, font qu'une étude exclusivement expérimentale n'est pas envisageable : une connaissance a priori des influences entre le mesurand et les grandeurs d'interférence reste essentielle en vue de réduire la nécessité de post-traitements du signal de mesure.

I.3.1. Méthodes de résolution

Parmi les méthodes de résolution disponibles, il faut commencer par distinguer les méthodes analytiques, qui sont basées sur la résolution directe des équations différentielles de propagation pour trouver la vitesse de propagation de l'onde, des méthodes numériques qui cherchent la vitesse qui permettra de résoudre les équations de propagation.

I.3.1.a - Méthodes analytiques

Ce sont ces méthodes qui ont été utilisées dans les travaux de thèses précédents menés au laboratoire : I. Esteban [TIE], C. Zimmermann [TCZ] et O. Tamarin [TOT].

Ces méthodes ont pour avantage de calculer directement la vitesse de phase comme une fonction de la structure. Elles ont pour inconvénient de devoir négliger la piézoélectricité, qui rend plus complexe les calculs au point de rendre la résolution analytique impossible. On peut noter que le cas d'un substrat de quartz de coupe cristallographique d'angles d'Euler $\langle 0, \theta \rangle$ est un cas particulier qui permet une résolution exacte (toujours sans la piézoélectricité). Dans un autre plan de coupe la résolution analytique aurait été empêchée par l'anisotropie.

I.3.1.b - Méthodes numériques

On distingue ensuite les résolutions numériques qui reprennent le modèle analytique, mais dans lequel on recherche la vitesse de phase par des méthodes d'analyse numérique : on fait l'hypothèse d'une vitesse de phase, et on vérifie avec le modèle si cette vitesse permet de satisfaire les équations de propagation, les conditions aux interfaces, et les conditions aux limites.

C'est le cas d'un des modèles de [TOT] qui reprend strictement le modèle analytique introduit dans l'équipe dans [TIE], en y ajoutant la piézoélectricité. En revanche la mise en oeuvre de ce modèle par ces deux chercheurs demeure limitée en nombre et types de couches, ainsi qu'en paramètres pris en compte.

Viennent enfin les résolutions par éléments finis qui calculent directement les contraintes et les déformations des matériaux. En mesurant à l'aide des résultats de simulation la période spatiale des déplacements on peut extraire les vitesses de déplacement des particules, et en déduire la vitesse de phase de l'onde. Ces modèles ont l'inconvénient de plus longs temps de calculs, et ne permettent pas d'obtenir directement la vitesse de phase de l'onde.

I.4. Méthodes de modélisation

Il existe plusieurs techniques pour obtenir la vitesse de phase de l'onde acoustique, ces méthodes incluent toujours une résolution des équations de propagation qui peut être analytique ou numérique. Dans ce cas encore le choix se fera en fonction de la complexité du modèle choisi : sans anisotropie et/ou sans piézoélectricité la résolution peut être analytique, sinon elle ne peut être que numérique.

Il y a plusieurs approches qui permettent de résoudre dans leur cas le plus général les équations de propagation, les conditions aux interfaces et les conditions aux limites. Parmi elles nous présenterons les trois principales : la méthode utilisant le concept de permittivité effective de surface, la méthode d'analogie avec les lignes de transmission en électronique et la méthode des matrices de transfert.

I.4.1. Permittivité piézoélectrique de surface

Lorsqu'une onde acoustique se propage dans un cristal piézoélectrique, ou bien à sa surface, le couplage élasto-électrique a pour conséquence d'augmenter le nombre de degrés de liberté d'une unité, il y a alors une variable de plus que d'équations, et le système n'a plus de solution. Il faut donc une condition aux limites supplémentaire pour décrire la propagation.

K.A. Ingbrigstein [Ing69] introduit le fait que les ondes se propageant à la surface d'un cristal piézoélectrique sont affectées par les propriétés électromagnétiques du milieu environnant, ajoutant ainsi la condition aux limites manquante pour équilibrer le système d'équations.

Les ondes partielles qui résultent de la résolution des équations de propagation font que dans le matériau piézoélectrique l'induction et le potentiel ne sont plus strictement proportionnels comme dans le cas d'un diélectrique, mais ils dépendent de ces ondes partielles et donc de la fréquence de l'onde.

Toutefois, à l'interface entre un matériau diélectrique et un matériau piézoélectrique, le potentiel est continu. R.F Millsom & al. [Mil77] introduisent le concept de permittivité effective de surface en recalculant la permittivité diélectrique comme le rapport de l'induction et du potentiel électrique.

Cette méthode se généralise dans le cas d'une onde guidée, où l'on calcule la permittivité sur un interface après avoir exprimé toutes les autres conditions aux limites mécaniques. Elle est détaillée dans [EDieul1] dans le cas des ondes de volume et des ondes de Rayleigh, utilisée par F. Teston dans son étude des capteurs à ondes de plaques transverses horizontales [TFT], et dans le cas de milieux liquides [Tes00] pour étudier la viscosité, puis pour étudier l'importance relative de la viscosité et de l'effet de masse sur les mêmes structures [Tes99].

I.4.2. Analogie avec les lignes de transmission

Cette méthode reprend la méthode d'étude des lignes de transmission de l'électronique par l'analyse infinitésimale d'un élément de la ligne de propagation.

Une longueur infinitésimale de la ligne est représentée (figure I.14) par une impédance série Z et une admittance parallèle Y . La tension $V(r)$ et le courant $I(r)$ sont reliés par :

$$\begin{cases} -\frac{\partial V(r)}{\partial r} = Z.I(r) \\ -\frac{\partial I(r)}{\partial r} = Y.V(r) \end{cases} \quad Eq.I.1$$

Pour décrire une onde de polarisation transverse horizontale, dans un milieu isotrope, l'analogie s'établit en identifiant les grandeurs mécaniques aux grandeurs électriques de la figure I.14 :

$$\begin{cases} T_{32} \equiv -V(r) \\ v_2 \equiv I(r) \end{cases} \quad Eq.I.2$$

Où v_2 est la vitesse de déplacement de la matière dans la direction transverse horizontale, et T_{32} est la composante dans la direction transverse horizontale (indice 2) de la contrainte dans le plan de la surface du capteur (indice 3).

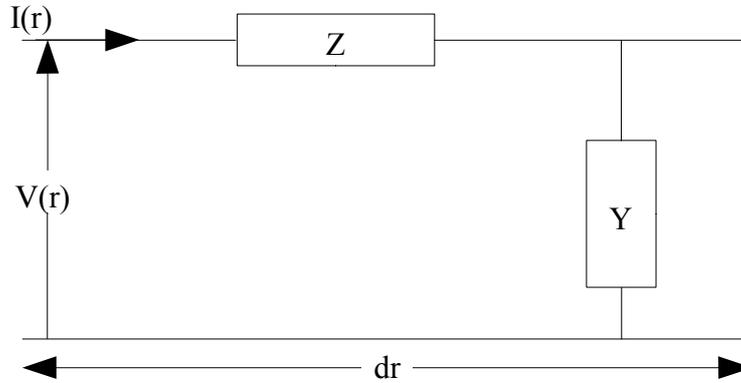


Figure I.14 Elément infinitésimal de ligne de propagation

Les valeurs de v_2 et T_{32} sont obtenues en résolvant les équations de propagation décrites ultérieurement. Là encore on doit choisir entre résolution analytique et numérique.

La valeur de l'impédance série Z et de l'admittance parallèle Y sont :

$$\begin{cases} Z = j\omega\rho \\ Y = \frac{j\omega}{C_{44}} \end{cases} \quad \text{Eq.I.3}$$

où j est l'unité imaginaire, ω la pulsation de l'onde, ρ la masse volumique du matériau et C_{44} son module de rigidité transverse, on peut en déduire l'impédance caractéristique et le vecteur d'onde :

$$\begin{cases} Z_c = \sqrt{\frac{Z}{Y}} = \sqrt{\rho C_{44}} = \rho V_p \\ k = \sqrt{ZY} = j\omega\sqrt{\frac{\rho}{C_{44}}} = \frac{j\omega}{V_p} \end{cases} \quad \text{Eq.I.4}$$

où V_p est la vitesse de phase de l'onde.

L'avantage est la souplesse de cette modélisation qui peut décrire de façon simple des structures multicouches. Le fait qu'elle puisse être utilisée dans les logiciels de simulation de circuits électroniques, une fois les équations résolues, la rend très pratique puisque ces logiciels sont très aboutis.

I.4.3. Méthode des matrices de transfert

Cette méthode de modélisation est probablement la plus ancienne méthode de modélisation directe de la propagation des ondes acoustiques dans des structures multicouches. Initialement présentée en 1950 par W.J. Thomson [Tho50], elle fut approfondie en 1953 par N.A. Haskell [Has53] au point que ces deux publications sont rarement citées indépendamment.

L'approche est matricielle et elle permet de garder le nombre d'équations à résoudre constant, quel que soit le nombre de couches de la structure : après la résolution séparée des équations de propagation, une matrice qui décrit la propagation d'une face de la couche à l'autre est obtenue (la matrice de transfert) pour chacune des couches. Le produit de ces matrices décrit la propagation de l'onde à travers la structure.

Cette méthode a été adaptée au cas des matériaux anisotropes, dissipatifs et hétérogènes (ex : des fibres prises dans une matrice de résine). Elle n'a pratiquement qu'un facteur limitant : la présence d'une exponentielle contenant le produit \pm épaisseur*fréquence, qui fait que pour les fréquences élevées et/ou pour des couches épaisses, l'exponentielle complexe du terme de phase diverge ou s'annule, causant des singularités dans les matrices. Toutefois, les épaisseurs et les fréquences en jeu dans cette étude sont telles que nous ne nous sommes pas heurtés à ce facteur limitant. J.M. Orellana & al. présentent dans [Ore01] une comparaison de la stabilité pour la méthode des matrices de transfert, la méthode de l'impédance de surface, et la méthode de la matrice globale (technique classique qui consiste à écrire chaque équation séparément, et qui conduit à de grands systèmes).

La robustesse de la méthode a été améliorée en réarrangeant les termes pour passer d'une matrice de transfert à une matrice de rigidité équivalente de la couche, qui ne fait plus intervenir ce produit épaisseur*fréquence. Depuis les travaux de Wang et Rokhlin [Wan01], la solution est générale pour tous les systèmes cristallographiques, mais les manipulations de matrices sont plus nombreuses et complexes, ce qui rend la méthode moins intuitive car plus éloignée de la phénoménologie.

I.4.4. Le formalisme de Stroh

En 1953, J.D. Eshelby & al. ont présenté une théorie de l'élasticité dans les milieux anisotropes dans les trois dimensions, indépendante du système d'axe choisis. A.N. Stroh présente deux études, en 1958 [Str58] et 1962 [Str62], en s'appuyant sur la théorie présentée par Eshelby. Dans ces théories apparaît le formalisme consistant en l'écriture des systèmes d'équations comme une seule équation. Dans cette équation les variables et les constantes apparaissent sous la forme de matrices.

En effet, les grandeurs différentes, mais reliées entre elles de façon identique peuvent se regrouper en une seule équation. La description globale peut ainsi croître en exhaustivité sans pour autant nécessiter de manipuler des équations en nombre croissant, ou des équations plus complexes.

Ainsi tout l'état du solide peut être résumé dans un seul vecteur : déplacements et contraintes mécaniques ainsi que potentiel et induction électriques. Ce vecteur est en général logiquement appelé vecteur d'état.

Il est intuitif de relier la méthode des matrices de transfert à ce formalisme de Stroh, d'autant plus que les dates de publications de ces méthodes sont proches. Toutefois la méthode des matrices de transfert de Thomson/Haskell a été publiée avant et ne fait pas intervenir le formalisme de Stroh. Ce n'est que par la suite que des publications exposant des travaux réalisés sur la base de la méthode des matrices de transfert font intervenir le formalisme de Stroh. En effet, celui-ci convient idéalement à la description des phénomènes se déroulant dans les milieux stratifiés, puisqu'une matrice décrit le comportement d'une strate, et un vecteur l'état de la strate en un point.

Mathématiquement, les méthodes matricielles sont rendues possibles par des manipulations des systèmes d'équations différentielles à coefficients constants pour les transformer en un système d'équations linéaires.

1.5. Les modèles développés au laboratoire

C'est Irène Esteban [TIE], lors de son étude des ondes SH-APM, qui s'est la première intéressée au modèle des matrices de transfert en s'appuyant en particulier sur les travaux de J.C. Andle [TJCA]. Ses contraintes étaient avant tout l'étude de la propagation dans une lame mince de quartz. Ceci lui a permis de simplifier considérablement le modèle en jouant sur le découplage des polarisations transverses horizontales et électriques d'une part et transverses verticales et longitudinales d'autre part. De plus, grâce au fait que le quartz est assez faiblement piézoélectrique, il a été fait l'approximation de la non piézoélectricité des matériaux de la structure.

Vu le faible nombre de couches et les approximations possibles, la résolution analytique ne pose pas de problème. Ont aussi été pris en compte les milieux pouvant environner la lame de quartz : vide et liquide, vide et vide, liquide et liquide. Il a été fait la modélisation des effets de l'ajout d'une couche sensible par dessus la lame de quartz, dans un environnement gazeux.

Céline Zimmermann [TCZ] a ensuite entrepris l'étude des ondes de Love, avec un substrat de quartz. Les approximations faites sur le substrat sont les mêmes que celles faites par Irène Esteban, la résolution est entièrement analytique. Dans le cas des ondes de Love la résolution se complexifie

en raison de la présence du guide, et dans le cas du choix fait par l'équipe de l'IXL d'utiliser une couche supplémentaire (la couche sensible par dessus le guide), on commence à voir la limite d'une résolution analytique manuelle. Dans le cadre de ses travaux, Céline Zimmermann n'a eu à s'intéresser qu'au milieu gazeux.

La thèse d'Ollivier Tamarin [TOT] a eu pour objet d'exploiter le fait que l'onde de Love ne rayonne pas dans les milieux liquides. Il a donc modifié le modèle de Céline Zimmermann, plus particulièrement les conditions aux limites avec le milieu gazeux, pour tenir compte d'un milieu liquide.

Il s'est avéré que la conductivité du milieu liquide devait être prise en compte, de ce fait, la piézoélectricité du substrat intervenait. C'est pourquoi Ollivier Tamarin est le premier, au Laboratoire, à avoir implémenté une résolution numérique des équations de propagation. Il a ainsi réalisé deux modèles avec ou sans couche sensible en milieu liquide, et pu modéliser et vérifier expérimentalement des effets de viscosité, de viscoélasticité et de conductivité du liquide sur le capteur.

	Esteban			Zimmermann	Tamarin	
Onde	SH-APM			Love	Love	
Résolution	Analytique			Analytique	Numérique	
Anisotropie	Oui			Oui	Oui	
Piézoélectricité	Non			Non	Oui	
Milieu	Gazeux	liquide	Gazeux	Gazeux	Liquide	Liquide
Viscosité des solides	Non			Non	Non	
Nombre de couches ¹	3	3	4*	4*	3	4*

Tableau I.2 : Paramètres inclus dans les modèles précédemment développés.

¹ : Le substrat et le milieu environnant sont considérés comme une couche.

* : Les modèles à 4 couches ont une couche sensible.

Le tableau I.2 synthétise la progression de l'effort de modélisation de la propagation des ondes de polarisation transverse horizontale dans l'équipe du Laboratoire IXL.

I.6. Conclusion

Dans ce chapitre nous avons évoqué la variété des dispositifs possibles pour les capteurs à ondes acoustique, ainsi que l'effort réalisé au Laboratoire IXL au cours des dix années précédentes pour en

explorer le potentiel et l'appliquer à des champs toujours plus spécifiques et requérant plus de sensibilité.

Les deux dernières thèses ([TCZ] et [TOT]) soutenues se sont focalisées sur l'exploration du potentiel des ondes de Love, par la réalisation de démonstrateurs de faisabilité et de performance. Cependant les études théoriques accompagnant ces thèses se sont montrées insuffisantes pour explorer toutes les structures possibles, et expliquer les variations de vitesse de phase à partir des phénomènes mis en jeu.

C'est pour aller plus loin dans ce sens que nous avons choisi d'utiliser la méthode des matrices de transfert associée à une résolution numérique des équations de propagation afin de mieux modéliser la propagation de l'onde et les mécanismes de perturbation associés. Notre démarche pourra s'appuyer sur les résultats obtenus à l'aide des méthodes précédentes.

Notre méthode permet le calcul direct de la vitesse de propagation de l'onde sans calculer l'amplitude des déplacements et des contraintes. Elle permet enfin d'exploiter les particularités des coupes de matériaux pour supprimer, lorsque c'est possible, les polarisations autres que transverses horizontales.

Les caractéristiques des matériaux prises en compte diffèrent selon le type de matériau :

- Pour les solides nous garderons la masse volumique, la rigidité, la piézoélectricité et la permittivité diélectrique, selon qu'ils sont anisotropes et/ou piézoélectriques.
- Pour les solides visqueux (type polymères) nous ajouterons un coefficient imaginaire de viscosité au coefficient réel de rigidité [Hol67].
- Pour les fluides nous garderons la compressibilité, la viscosité, la masse volumique, la conductivité, et la viscoélasticité.

Le chapitre suivant détaillera la méthode et les algorithmes utilisés pour trouver les vitesses de propagation, ainsi que les problèmes impliqués par des structures contenant des matériaux visqueux.

Le troisième chapitre présentera les résultats obtenus dans le sens des objectifs de cette étude : confirmation théorique du bon fonctionnement du programme réalisé, applications du programme à la caractérisation de matériaux isotropes déposés en couche sur le capteur et simulations prospectives de matériaux permettant de réaliser des structures de sensibilité encore supérieure.

Chapitre II - Modélisation

Alors que le chapitre précédent présentait une vue générale sur les capteurs à ondes de Love, et un inventaire des méthodes de modélisation existantes, ce chapitre se focalise sur la modélisation de la propagation : c'est à dire que nous nous intéressons uniquement aux phénomènes ayant lieu entre les transducteurs interdigités pour, à partir des propriétés physiques du capteur (matériaux et structure), déduire la vitesse de phase de l'onde de Love.

Nous commencerons par établir la forme de l'onde décrite et les équations de propagation pour chacun des milieux modélisés. Nous ajouterons à ce modèle des spécificités supplémentaires pour décrire au mieux les milieux polymères, qui ont à la fois des propriétés des matériaux solides et liquides.

Nous expliquerons ensuite en deux parties comment la modélisation proprement dite est réalisée. La première explique comment obtenir les matrices de transfert (cf. paragraphe I.4.3 - Méthode des matrices de transfert, page 39), et comment résoudre les conditions aux interfaces et aux limites. Elle constitue ainsi le noyau de la modélisation. Dans la seconde partie nous détaillerons l'interface, c'est à dire le programme qui permet de trouver la vitesse de phase de l'onde de Love.

Dans cette seconde partie seront évoqués la plupart des problèmes soulevés par la résolution numérique des équations de propagation : sur les hypothèses initiales de résolution, sur le critère d'obtention de la solution, et sur la complexité induite sur les méthodes de recherche. En effet, à de rares exceptions près ([Lowe95], [Ogi96], [Ogi97]) ces problèmes sont intégralement passés sous silence, alors que ce sont eux qui, dans cette étude, ont posé les principales difficultés.

II.1. La problématique

Très concrètement, le modèle devrait être un calculateur qui donne la vitesse de phase de l'onde pour une structure donnée, en fonction de ses paramètres physiques sélectionnés. Il doit donc pouvoir gérer des structures différentes en terme de matériaux, de types de matériaux (solides, fluides), de leurs dimensions, de leur agencement dans la structure.

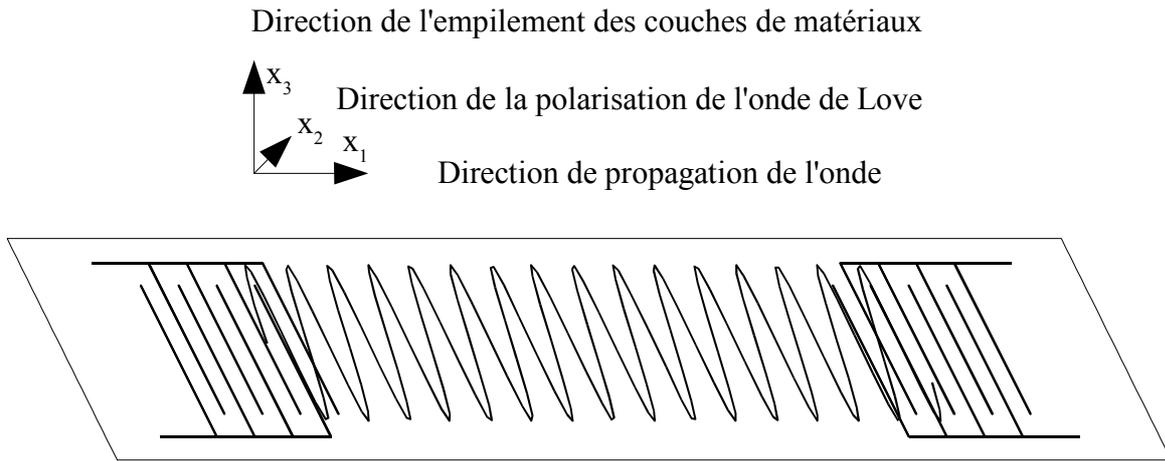


Figure II.1 Orientation du référentiel par rapport à la structure du capteur.

La propagation étant unidirectionnelle, suivant x_1 , nous utiliserons un modèle à une dimension pour la propagation. En revanche la structure est faite de couches disposées les unes sur les autres : il faudra donc aussi décrire le déplacement transverse horizontal u_2 des particules en fonction de la position de la particule dans la direction normale au plan des couches x_3 , c'est à dire $u_2(x_3)$ (cf. figure II.1 ci-après).

Ce raisonnement permet doré et déjà d'écrire le vecteur qui décrira la propagation de l'onde :

$$\vec{u} = \vec{\alpha} \cdot e^{j \cdot (\omega \cdot t - k_1 \cdot x_1 - k_3 \cdot x_3)} \tag{Eq.II.1}$$

où \vec{u} est le vecteur de polarisation, $\vec{\alpha}$ l'amplitude initiale du vecteur polarisation, j est l'unité imaginaire, ω la pulsation angulaire, t le temps, k_1 la composante du vecteur d'onde suivant la direction de propagation, k_3 la composante du vecteur d'onde suivant la direction normale au plan des couches du capteur, x_1 et x_3 sont les coordonnées d'un point de la structure.

Nous faisons deux hypothèses supplémentaires : l'une implicite dans II.1 qui est que ce sont des ondes planes qui se propagent, l'autre porte sur la composante longitudinale k_1 du vecteur d'onde qui sera supposé réelle.

En effet de manière générale une onde se propage en s'atténuant suivant sa direction de propagation. Ici nous avons supposé qu'il n'en est rien et k_1 est réel. Cette hypothèse est fréquente dans la modélisation de la propagation, mais nous verrons plus loin dans ce chapitre, les conséquences de cette hypothèse sur laquelle il a finalement fallu revenir pour décrire la propagation à l'aide d'un vecteur d'onde complexe.

II.2. Les équations du modèle physique

II.2.1. Pour les milieux solides

Les milieux solides sont décrits par [Hol67] :

- Leur masse volumique ρ
- Leur tenseur de rigidité C_{ijkl}
- Leur tenseur de viscosité η_{ijkl}
- Leur tenseur de piézoélectricité e_{ijk}
- Leur tenseur de permittivité ϵ_{ij}
- Leur tenseur de conductivité σ_{ij}

Ces grandeurs sont reliées entre elles par la loi de Hooke généralisée [EDieul1], qui lie le tenseur des contraintes T_{ij} aux déplacements mécaniques U_i , et au potentiel électrique Φ :

$$T_{ij} = C_{ijkl} \frac{\partial U_l}{\partial x_k} + \eta_{ijkl} \frac{\partial^2 U_l}{\partial x_k \partial t} + e_{kij} \frac{\partial \Phi}{\partial x_k} \quad \text{Eq.II.2}$$

et par les lois de l'électrostatique [EDieul1], qui lient le tenseur induction électrique D_j aux déplacements mécaniques U_i , et au potentiel électrique Φ :

$$D_j = e_{jkl} \frac{\partial U_l}{\partial x_k} - \epsilon_{jk} \frac{\partial \Phi}{\partial x_k} - \sigma_{jk} \int_t \Phi \quad \text{Eq.II.3}$$

Afin d'améliorer la lisibilité chaque coefficient dissipatif (η et σ) sera inclus dans le coefficient réactif (C et ϵ) correspondant, avec ω la pulsation de l'onde :

$$\begin{cases} C_{ijkl} \equiv C_{ijkl} + j\omega \eta_{ijkl} \\ \epsilon_{ij} \equiv \epsilon_{ij} - j \frac{\sigma_{ij}}{\omega} \end{cases} \quad \text{Eq.II.4}$$

Ainsi les équations II.2 et II.3 peuvent s'écrire comme :

$$T_{ij} = C_{ijkl} \frac{\partial U_l}{\partial x_k} + e_{kij} \frac{\partial \Phi}{\partial x_k} \quad \text{Eq.II.5}$$

et

$$D_j = e_{jkl} \frac{\partial U_l}{\partial x_k} - \epsilon_{jk} \frac{\partial \Phi}{\partial x_k} \quad \text{Eq.II.6}$$

Pour écrire les équations de propagation, il faut reporter II.5 dans l'équation fondamentale de la dynamique (en l'absence de forces extérieures au système) :

$$\sum \vec{F}_{\text{int}} = \rho \frac{d^2 U}{dt^2} \quad \text{Eq.II.7}$$

et II.6 dans l'équation de Poisson (en l'absence de charges d'espace) :

$$\frac{\partial D_i}{\partial x_i} = 0 \quad \text{Eq.II.8}$$

Or chaque la force associée à chaque contrainte est donnée par :

$$\vec{F}_{\text{int}} = \frac{\partial T}{\partial x} \quad \text{Eq.II.9}$$

Enfin, on obtient, en combinant d'une part les équations II.5, II.7 et II.9 pour la partie mécanique et d'autre part les équations II.6 et II.8 pour la partie mécanique, le système qui décrit la propagation dans le milieu :

$$\begin{cases} \rho \frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = C_{ijkl} \frac{\partial^2 U_l}{\partial x_j \partial x_k} + e_{kij} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_j \partial x_k} \\ e_{jkl} \frac{\partial^2 U_l}{\partial x_j \partial x_k} - \epsilon_{jk} \frac{\partial \Phi}{\partial x_j \partial x_k} = 0 \end{cases} \quad \text{Eq.II.10}$$

II.2.2. Pour les milieux fluides

Dans beaucoup de modèles, les milieux fluides ne sont possibles que pour l'environnement de la structure du capteur : ils sont introduits par une perturbation des déplacements et contraintes à la surface de la couche en contact avec le fluide.

Ici nous avons considéré que l'onde de Love peut être amenée à se propager dans le milieu fluide, ou que le milieu fluide peut se trouver entre d'autres couches solides (par exemple dans le cas d'une cellule où l'épaisseur du fluide est faible devant la profondeur de pénétration dans le fluide). On peut aussi, grâce à cette prise en compte de liquides d'épaisseurs finies, décrire des matériaux dont les propriétés physiques sont plus proches d'un liquide que d'un solide.

En principe, les fluides sont décrits par les équations de Navier-Stokes, qui sont aux milieux fluides ce que le principe fondamental de la dynamique est à la cinématique. Il apparaît donc nécessaire de prendre en compte ces équations. Cependant on peut identifier les coefficients des déplacements et des contraintes dans les équations de Navier-Stokes avec les coefficients de Lamé dans les équations de propagation d'un solide isotrope [Tes00]. De cette manière on peut décrire le fluide en utilisant les mêmes équations que pour un solide.

Nous avons pris les modèles issus de la rhéologie. Les auteurs s'intéressant à la propagation des ondes transverses horizontales ont montré ([Jac98], [Her99]) que pour les solutions aqueuses peu visqueuses, un modèle n'incluant que la viscosité suffit. Pour des liquides plus visqueux, il faut tenir compte de la viscoélasticité.

Les paramètres pris en compte sont :

- La masse volumique ρ
- la viscosité η
- la viscoélasticité μ
- la compressibilité χ
- la permittivité ϵ
- la conductivité σ

Le modèle programmé est donc celui qui décrit un liquide de Maxwell [Cou91]:

$$G = \frac{j\omega\eta}{1 + j\omega\frac{\eta}{\mu}} \quad \text{Eq.II.11}$$

G est appelé module transverse, j est l'unité imaginaire, ω la pulsation, η la viscosité, et μ la viscoélasticité (ne pas confondre μ avec le coefficient de Lamé en général, bien que son unité soit aussi le Pascal, c'est bien G qui s'identifie avec le coefficient μ de Lamé).

Selon la fréquence de déplacement des particules on peut distinguer trois régimes de fonctionnement en fonction de la pulsation du déplacement des particules :

- Le régime Newtonien : lorsque la pulsation est telle que le coefficient $\omega\eta/\mu$ est très petit devant 1, G tend vers $j\omega\eta$, le liquide est purement visqueux (figure II.2 a).
- Le régime Maxwellien dans lequel les deux comportements sont présents, le fluide se comporte comme un solide visqueux, et G garde l'expression de l'équation II.11 (figure II.2 b).
- Le régime élastique : lorsque la pulsation est telle que le coefficient $\omega\eta/\mu$ est très grand devant 1, G tend alors vers μ . A ce moment le liquide se comporte comme un solide purement élastique, puisque G est réel (figure II.2 c).

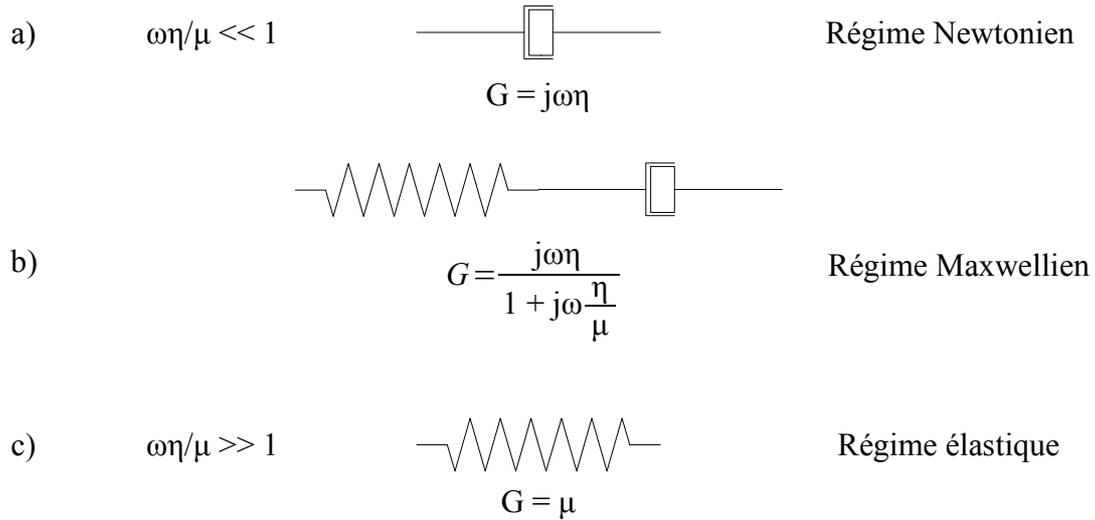


Figure II.2 Représentation rhéologique d'un fluide Maxwellien en fonction du domaine de fréquence

Dans la direction longitudinale, le liquide est décrit par :

$$\lambda \equiv \frac{1}{\chi} - \frac{2}{3} j\omega\eta \tag{Eq.II.12}$$

Où χ est le coefficient de compressibilité du fluide. Dans ce cas, l'analogie avec le coefficient λ de Lamé est directe.

Le tenseur de rigidité équivalent s'écrit alors [Tes00] :

$$\begin{bmatrix} \lambda+2 G & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda+2 G & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \lambda+2 G & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & G & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & G & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & G \end{bmatrix} \tag{Eq.II.13}$$

Le milieu fluide peut être considéré comme un milieu solide isotrope : les équations pour décrire la propagation de l'onde dans un milieu fluide seront donc les mêmes que celles des milieux solides (équations II.6).

La partie électrique du modèle des matériaux liquides est identique à celle du solide isotrope.

II.2.3. Cas des polymères

On peut trouver dans [Wil99] une étude théorique et expérimentale du module de rigidité transverse complexe G^* pour plusieurs polymères et dans une très grande plage de fréquences (de

$\omega=10^{-3}$ à $\omega=10^{+20}$ rad/s). Un modèle de Maxwell généralisé [Cou91] est employé pour suivre les valeurs mesurées :

$$G^*(\omega) = G_0 + \sum_{i=1}^{i=n} \frac{j\omega\eta_i}{1 + j\omega\frac{\eta_i}{\mu_i}} \quad \text{Eq.II.14}$$

Où G_0 est le module d'élasticité résiduel, les autres variables ont le même sens que pour l'équation II.7. Plus on souhaitera décrire précisément sur une large plage de fréquences le comportement du matériau, plus il faudra augmenter le nombre i de termes Maxwelliens.

D'une manière générale le module de rigidité complexe s'écrit comme

$$G^* = G' + jG'' \quad \text{Eq.II.15}$$

Où G' , qui correspond à la rigidité apparente du matériau, est le module de stockage de l'énergie (storage modulus), et G'' est le module de pertes de l'énergie (loss modulus). G'' correspond à la viscosité apparente du matériau. D'après l'équation II.14 nous voyons que G' et G'' ne sont pas indépendants. La figure II.3 présente la représentation rhéologique du modèle de Maxwell généralisé.

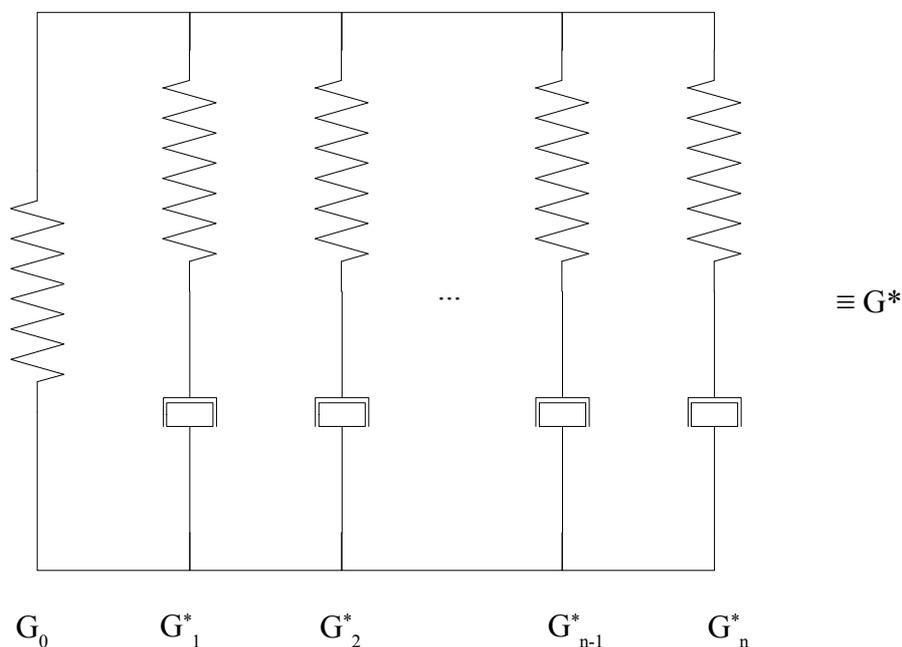


Figure II.3 Représentation rhéologique du modèle de Maxwell généralisé.

Ce type de description est nécessaire au vu de la grande variété des comportements possibles des polymères différents. Ainsi, un polymère peut avoir, pour une fréquence le comportement d'un solide et pour une autre celui d'un liquide visqueux (cf. figure II.4).

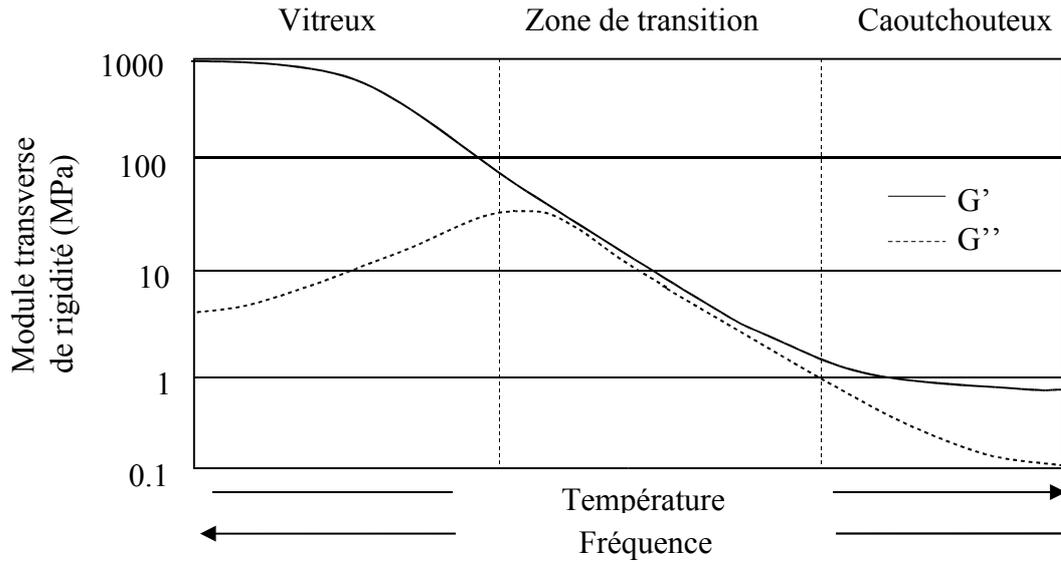


Figure II.4 Variations du module transverse de rigidité $G^* = G' + J.G''$ en fonction de la fréquence et/ou de la température.

[Wil99] et [Fer80] présentent pour des cas particuliers les caractéristiques des polymères les plus courants et illustrent la grande variabilité de leur comportement. Ils nous confortent dans l'idée d'implémenter de façon aussi souple que possible la description du comportement des couches de polymères. Le modèle de maxwell généralisé a été retenu dans cette optique.

D'un point de vue purement mathématique, le modèle de Maxwell généralisé peut se voir comme un développement limité au voisinage de la pulsation ω : plus on souhaitera décrire précisément le matériau sur de larges plages de fréquences, plus il faudra faire intervenir un nombre n de termes élevés dans l'équation II.14.

Dans notre cas spécifique, les variations de fréquence d'utilisation sont faibles : nous avons donc implémenté dans le noyau uniquement le terme au premier ordre de l'équation II.14. Il reste toutefois possible de modifier le code du programme pour utiliser un comportement en fréquence plus sophistiqué.

Ensuite, selon le polymère, la fréquence ou la température on peut avoir un matériau :

- Purement élastique ($\eta = 0$ et $\mu = 0$) :

$$\begin{cases} G' = \Re(G^*) = G_0 \\ G'' = \Im(G^*) = 0 \end{cases} \quad \text{Eq.II.16}$$

- Visqueux, ou visqueux Newtonien ($\mu = \text{très grand}$) :

$$\begin{cases} G' = \Re(G^*) = G_0 \\ G'' = \Im(G^*) = \omega \eta \end{cases} \quad \text{Eq.II.17}$$

- Elastique visqueux (G' et G'' ne dépendent plus de la fréquence):

$$\begin{cases} G' = \Re(G^*) = C^t \\ G'' = \Im(G^*) = C^t \end{cases} \quad \text{Eq.II.18}$$

- « liquide » ($G_0 = 0$) :

$$\begin{cases} G' = \Re(G^*) = \omega^2 \frac{\eta^2}{\mu} \frac{1}{1 + \omega^2 \frac{\eta^2}{\mu^2}} \\ G'' = \Im(G^*) = \omega \frac{\eta}{1 + \omega^2 \frac{\eta^2}{\mu^2}} \end{cases} \quad \text{Eq.II.19}$$

- Ou encore viscoélastique (visqueux Maxwellien) :

$$\begin{cases} G' = \Re(G^*) = G_0 + \omega^2 \frac{\eta^2}{\mu} \frac{1}{1 + \omega^2 \frac{\eta^2}{\mu^2}} \\ G'' = \Im(G^*) = \omega \frac{\eta}{1 + \omega^2 \frac{\eta^2}{\mu^2}} \end{cases} \quad \text{Eq.II.20}$$

II.3. La modélisation

La modélisation est divisée en trois parties distinctes (cf. figure II.5) :

- le noyau de calcul qui implémente le modèle des matrices de transfert décrit au paragraphe I.4.3 - Méthode des matrices de transfert en page 39
- l'interface, décrite au paragraphe II.3.2 - L'interface en page 65
- l'application dont le chapitre III fait l'objet

Toutes ont été programmées dans l'environnement Matlab[®], qui permet un développement simple et une mise au point rapide, fournit toutes les fonctions mathématiques standard et des bibliothèques dédiées (traitement du signal, algèbre linéaire, optimisations ...), des bibliothèques de visualisation ergonomiques, ainsi que la possibilité de réaliser une interface graphique, utilisée au chapitre III.

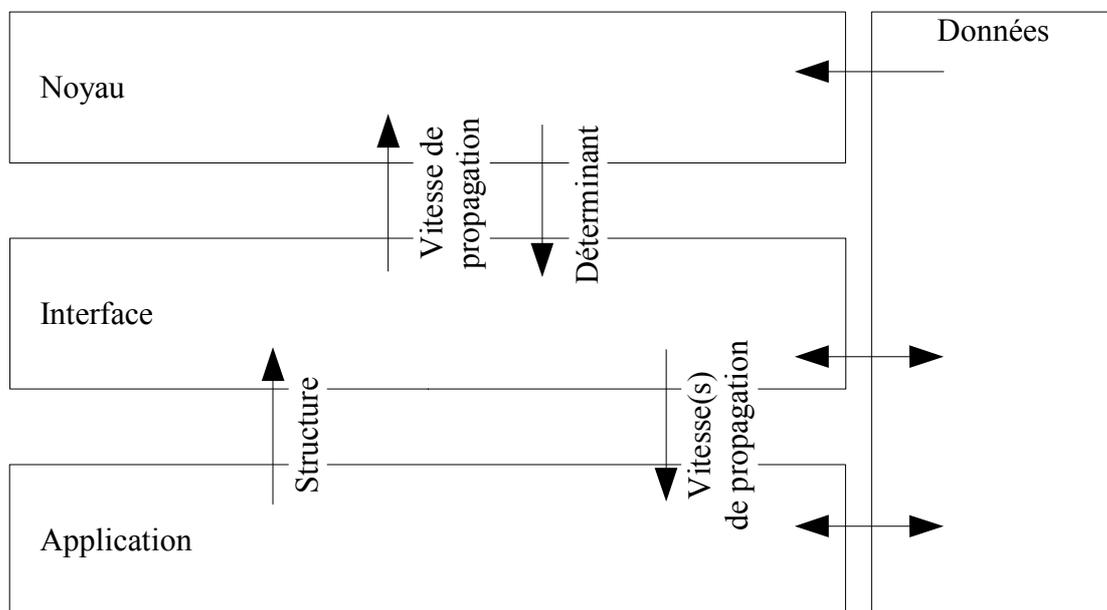


Figure II.5 Communication entre les modules de la modélisation

Le noyau réalise les tâches suivantes :

- Lecture des paramètres des matériaux
- Résolution des équations de propagation de façon numérique pour une vitesse de propagation possible transmise par l'interface
- Détermination des matrices de transfert de chacune des couches
- Calcul de la matrice de transfert globale
- Calcul du déterminant
- Transmission du déterminant à l'interface

L'interface réalise les tâches suivantes :

- Calcul du domaine de vitesses possibles pour la propagation d'une onde de Love dans la structure définie par l'application
- Utilisation des algorithmes pour trouver la (ou les) vitesse(s) de propagation telle que le déterminant transmis par le noyau soit nul
- Transmission de la (ou des) vitesse(s) de propagation trouvée(s) à l'application.

Des exemples d'applications (optimisation, caractérisation) seront décrits au chapitre III.

Pour des raisons de compacité et de concision, à partir de ce point dans le mémoire le terme « déplacement » englobera le déplacement mécanique et le potentiel électrique. De même, le terme « contrainte » englobera les contraintes mécaniques et l'induction électrique. Toujours pour la même raison le terme de phase sera mis en facteur dans les écritures matricielles, mais la plupart du temps ne sera pas explicitement écrit.

II.3.1. Le noyau

Nous avons vu au paragraphe II.2 que tous les matériaux sont décrits par les mêmes équations de propagation et que seules les valeurs numériques dans les tenseurs de paramètres physiques les différencient. De ce fait, la résolution numérique de ces équations est identique pour toutes les couches, ainsi que l'obtention des déplacements et des contraintes aux interfaces. Cependant, il faut distinguer le cas des couches de matériaux semi-infinis (couches 1 et N, dans la figure II.6), des autres couches de la structure.

Nous considérons qu'une couche réellement finie du point de vue matériel (le substrat de quartz) est semi-infinie du point de vue de l'onde, dès lors que son épaisseur est telle qu'aucune onde provenant de la structure ne revient vers la structure après réflexion, c'est à dire que son épaisseur est très grande devant la profondeur de pénétration de l'onde dans le matériau.

Les grandeurs transférées par la méthode des matrices de transfert sont les déplacements et les contraintes. Ces grandeurs physiques sont transférées d'une face d'une couche à l'autre face de cette même couche. Or les matériaux semi-infinis n'ont qu'une face : pour ces matériaux la matrice obtenue ne sera donc pas une matrice de transfert mais un vecteur d'état.

C'est ainsi que la description du noyau va se diviser en trois parties : la description de l'obtention des matrices de transfert pour les couches d'épaisseur finie (couches 2 à N-1), puis l'obtention de la matrice de transfert globale et enfin l'obtention des vecteurs d'état par l'application des conditions aux limites.

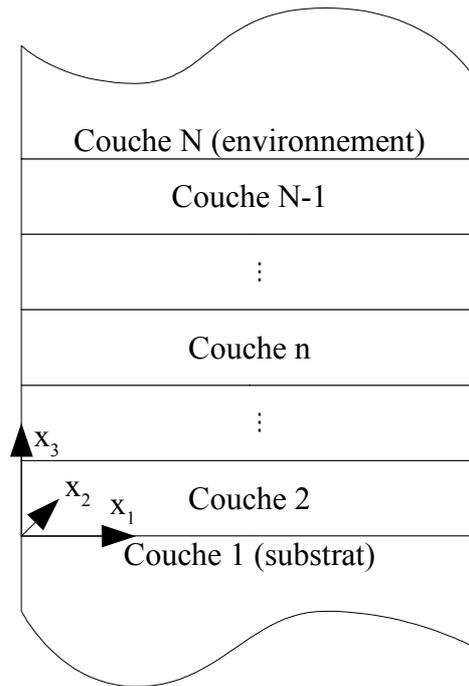


Figure II.6 Structure multicouche

II.3.1.a - Matrice de transfert d'une couche d'épaisseur finie

La figure II.7 décrit l'algorithme qui permet, à partir des données transmises (vitesse de phase, tenseurs de rigidité, piézoélectricité, permittivité, ainsi que la masse volumique, la longueur d'onde et l'épaisseur de la couche) d'obtenir la matrice de transfert T de la couche. Dans ce paragraphe nous décrivons les étapes de cet algorithme. La littérature est riche de ce type de descriptions, en particulier les publications citées au chapitre I.4.3 - Méthode des matrices de transfert, page 39, nous

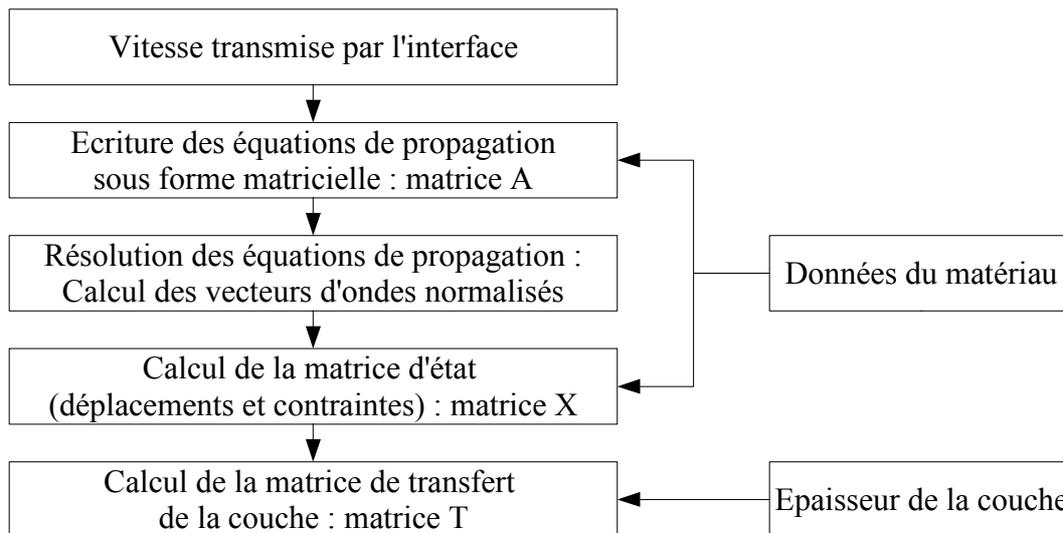


Figure II.7 Algorithme d'obtention de la matrice de transfert d'une couche

ajouterons [Kim97] qui se distingue par sa clarté et son exactitude dans la description de la méthode.

II.3.1.a.a - Forme matricielle des équations de propagation

Nous commencerons par écrire le système des équations de propagation II.10 sous une forme matricielle. Afin de faire apparaître la vitesse de phase V_p dans l'expression du terme de phase, nous allons mettre la composante k_1 du vecteur d'onde en facteur dans le terme de phase II.1. Le terme de phase s'écrit alors :

$$\vec{u} = \vec{\alpha} e^{j k_1 \cdot (V_p \cdot t - x_1 - \beta \cdot x_3)} \quad \text{Eq.II.21}$$

Où β est la composante suivant x_3 (verticale, k_3) normalisée par la composante k_1 du vecteur d'onde suivant la direction de propagation x_1 :

$$\beta = \frac{k_3}{k_1} \quad \text{Eq.II.22}$$

De plus, cette mise en facteur permet de simplifier les expressions des éléments de la matrice A (cf. tableau II.1) d'un facteur $-k_1^2$.

La forme matricielle du système de propagation est :

$$[u] = [A][\alpha] \quad \text{Eq.II.23}$$

Les lignes de la matrice $[A]$ correspondent aux polarisations, les colonnes représentant les coefficients de l'amplitude du déplacement des ondes partielles $[\alpha]$. En effet, la résolution de II.23 fera apparaître plusieurs solutions, et $[u]$ sera la somme de plusieurs produits $[A][\alpha]$. Les éléments de la matrice $[A]$ sont présentés tableau II.1.

$A_{11} = C_{55}\beta^2 + 2C_{15}\beta + C_{11} - \rho \cdot V_p^2$	$A_{23} = C_{43}\beta^2 + (C_{63} + C_{45}) \cdot \beta + C_{65}$
$A_{12} = C_{54}\beta^2 + (C_{14} + C_{56}) \cdot \beta + C_{16}$	$A_{24} = e_{34}\beta^2 + (e_{14} + e_{36}) \cdot \beta + e_{16}$
$A_{13} = C_{53}\beta^2 + (C_{13} + C_{55}) \cdot \beta + C_{15}$	$A_{33} = C_{33}\beta^2 + 2 \cdot C_{53} \cdot \beta + C_{55} - \rho \cdot V_p^2$
$A_{14} = e_{35}\beta^2 + (e_{15} + e_{31}) \cdot \beta + e_{11}$	$A_{34} = e_{33}\beta^2 + (e_{13} + e_{35}) \cdot \beta + e_{15}$
$A_{22} = C_{44}\beta^2 + 2 \cdot C_{46} \cdot \beta + C_{66} - \rho \cdot V_p^2$	$A_{44} = -\epsilon_{33}\beta^2 - 2 \cdot e_{13} \cdot \beta - \epsilon_{11}$

Les éléments non écrits sont obtenus par symétrie

Tableau II.1 Eléments de la matrice A.

Pour résoudre le système II.23, il faut commencer par s'assurer qu'il a une (au moins) solution, c'est à dire que le déterminant de la matrice $[A]$ peut s'annuler. La seule inconnue de ce système est

β , la composante normalisée du vecteur d'onde suivant x_3 . Ensuite, on pourra calculer les solutions de l'équation II.23.

II.3.1.a.b - Résolution des équations de propagation – Vecteurs d'ondes normalisés

De façon générale, le déterminant de $[A]$ est un polynôme d'ordre 8 en β , et il est impossible d'obtenir une forme canonique pour l'expression des solutions d'un polynôme de cet ordre. C'est précisément ce point qui fait que la résolution analytique n'est possible que dans un faible nombre de configurations particulières pour les matériaux anisotropes et/ou piézoélectriques : dans ce cas l'expression polynomiale du déterminant est d'ordre deux, et sa solution est triviale.

Le polynôme est obtenu en décomposant la matrice A par degré du coefficient β :

$$[A]=[A_2]\cdot\beta^2+[A_1]\cdot\beta+[A_0] \quad \text{Eq.II.24}$$

Avec :

$$[A_2]=\begin{bmatrix} C_{55} & C_{45} & C_{35} & e_{35} \\ C_{45} & C_{44} & C_{34} & e_{34} \\ C_{35} & C_{34} & C_{33} & e_{33} \\ e_{35} & e_{34} & e_{33} & -\epsilon_{33} \end{bmatrix} \quad \text{Eq.II.25}$$

$$[A_1]=\begin{bmatrix} 2\cdot C_{15} & C_{14}+C_{56} & C_{13}+C_{55} & e_{15}+e_{31} \\ C_{14}+C_{56} & 2\cdot C_{46} & C_{45}+C_{36} & e_{14}+e_{36} \\ C_{13}+C_{55} & C_{45}+C_{36} & 2\cdot C_{35} & e_{35}+e_{13} \\ e_{15}+e_{31} & e_{14}+e_{36} & e_{35}+e_{13} & -2\cdot\epsilon_{13} \end{bmatrix} \quad \text{Eq.II.26}$$

$$[A_0]=\begin{bmatrix} C_{11}-\rho\cdot Vp^2 & C_{16} & C_{15} & e_{11} \\ C_{16} & C_{66}-\rho\cdot Vp^2 & C_{56} & e_{16} \\ C_{15} & C_{56} & C_{55}-\rho\cdot Vp^2 & e_{15} \\ e_{11} & e_{16} & e_{15} & -\epsilon_{11} \end{bmatrix} \quad \text{Eq.II.27}$$

Puis en calculant le déterminant grâce à la matrice polynomiale ainsi obtenue.

Remarque : Cette décomposition de la matrice en matrice polynomiale du coefficient β est plus du domaine de l'implémentation qu'intrinsèquement liée à la méthode des matrices de transfert. Néanmoins elle permet d'obtenir le polynôme du déterminant sans passer par la fastidieuse et risquée étape de son écriture sous forme analytique.

Il y a donc 8 racines complexes conjuguées ou réelles et opposées deux à deux au déterminant de $[A]$. Comme les coefficients β sont des vecteurs d'ondes normalisés, il y aura 8 ondes pouvant se propager. Le déplacement global d'une particule sera la somme des déplacements partiels dus à

chacune des racines. Le comportement de l'onde correspondant à la racine est directement lié aux signes des parties réelles et imaginaires de la racine.

Avec l'expression utilisée pour le terme de phase (équation II.21), où j est en facteur, et pour des couches au-dessus de l'origine des ordonnées (cas des couches 2 à N, figure II.6), la partie réelle indique la direction de propagation suivant x_3 , et la partie imaginaire indique l'atténuation suivant x_3 :

- $\text{Re}(\beta) > 0 \Rightarrow$ propagation suivant les x_3 décroissants
- $\text{Re}(\beta) < 0 \Rightarrow$ propagation suivant les x_3 croissants
- $\text{Im}(\beta) > 0 \Rightarrow$ amplitude croissante suivant les x_3 croissants
- $\text{Im}(\beta) < 0 \Rightarrow$ amplitude décroissante suivant les x_3 croissants

Maintenant que les vecteurs d'ondes sont connus, il reste à résoudre l'équation II.23 pour chacun d'entre eux, c'est-à-dire calculer les amplitudes des ondes partielles (les coefficients α). Nous disposons ainsi de 8 « jeux » (figure II.8) composés d'une composante normalisée β et de 4 amplitudes de polarisation des ondes partielles $\alpha_{1..4}$.

$$\begin{array}{cccccccc} \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 & \beta_4 & \beta_5 & \beta_6 & \beta_7 & \beta_8 \\ \left[\begin{array}{cccccccc} \alpha_{1_1} & \alpha_{1_2} & \alpha_{1_3} & \alpha_{1_4} & \alpha_{1_5} & \alpha_{1_6} & \alpha_{1_7} & \alpha_{1_8} \\ \alpha_{2_1} & \alpha_{2_2} & \alpha_{2_3} & \alpha_{2_4} & \alpha_{2_5} & \alpha_{2_6} & \alpha_{2_7} & \alpha_{2_8} \\ \alpha_{3_1} & \alpha_{3_2} & \alpha_{3_3} & \alpha_{3_4} & \alpha_{3_5} & \alpha_{3_6} & \alpha_{3_7} & \alpha_{3_8} \\ \alpha_{4_1} & \alpha_{4_2} & \alpha_{4_3} & \alpha_{4_4} & \alpha_{4_5} & \alpha_{4_6} & \alpha_{4_7} & \alpha_{4_8} \end{array} \right] \end{array}$$

Figure II.8 « Jeux » de vecteurs d'onde et amplitude des ondes partielles

Ces ondes partielles forment une base, au sens de l'algèbre linéaire, de l'espace des ondes qui peuvent se propager dans le matériau. C'est à dire que toute onde se propageant dans la couche est une combinaison linéaire de ces 8 ondes partielles.

Remarque : ces « jeux » sont au système ce que les valeurs propres ($\beta_{1..8}$) et les vecteurs propres ($\alpha_{1..8}$) sont à la résolution du problème sans la piézoélectricité (auquel cas les vitesses de phase sont directement les valeurs propres de la matrice $[A]$, et les coefficients β deviennent triviaux à calculer). En termes mathématiques, le problème résolu est celui du calcul de valeurs propres généralisées [Wob87].

II.3.1.a.c - Calcul de la matrice d'état

L'état physique du matériau est déterminé par l'amplitude des déplacements, mais aussi par les contraintes causées par les déplacements. Nous venons de calculer l'amplitude des déplacements (les ondes partielles), il faut donc obtenir les contraintes associées.

Les couches de matériaux sont empilées suivant l'axe x_3 , et les dimensions suivant x_1 et x_2 étant supposées infinies, les seules composantes des contraintes pour lesquelles il faudra assurer la continuité aux interfaces sont T_{3j} ($j=1..3$) et D_3 . Pour ce faire, il faut reporter chacun des « jeux » présentés figure II.8 dans les équations II.5 et II.6, dont l'expression matricielle réduite à T_{3j} et D_3 est :

$$\begin{bmatrix} T_{31_i} \\ T_{32_i} \\ T_{33_i} \\ D_{3_i} \end{bmatrix} = -j \cdot k_1 \cdot \begin{bmatrix} C_{15} - C_{55} \cdot \beta_i & C_{56} - C_{45} \cdot \beta_i & C_{55} - C_{35} \cdot \beta_i & e_{15} - e_{35} \cdot \beta_i \\ C_{14} - C_{45} \cdot \beta_i & C_{46} - C_{44} \cdot \beta_i & C_{45} - C_{34} \cdot \beta_i & e_{14} - e_{34} \cdot \beta_i \\ C_{13} - C_{35} \cdot \beta_i & C_{36} - C_{34} \cdot \beta_i & C_{35} - C_{33} \cdot \beta_i & e_{13} - e_{33} \cdot \beta_i \\ e_{31} - e_{35} \cdot \beta_i & e_{36} - e_{34} \cdot \beta_i & e_{35} - e_{33} \cdot \beta_i & -\epsilon_{13} + \epsilon_{33} \cdot \beta_i \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \alpha_{1_i} \\ \alpha_{2_i} \\ \alpha_{3_i} \\ \alpha_{4_i} \end{bmatrix} \quad Eq.II.28$$

La matrice d'état est la matrice qui donne l'amplitude des contraintes et des déplacements en fonction de la position dans le matériau :

$$\begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ \Phi \\ T_{31} \\ T_{32} \\ T_{33} \\ D_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_{1_1} & \alpha_{1_2} & \alpha_{1_3} & \alpha_{1_4} & \alpha_{1_5} & \alpha_{1_6} & \alpha_{1_7} & \alpha_{1_8} \\ \alpha_{2_1} & \alpha_{2_2} & \alpha_{2_3} & \alpha_{2_4} & \alpha_{2_5} & \alpha_{2_6} & \alpha_{2_7} & \alpha_{2_8} \\ \alpha_{3_1} & \alpha_{3_2} & \alpha_{3_3} & \alpha_{3_4} & \alpha_{3_5} & \alpha_{3_6} & \alpha_{3_7} & \alpha_{3_8} \\ \alpha_{4_1} & \alpha_{4_2} & \alpha_{4_3} & \alpha_{4_4} & \alpha_{4_5} & \alpha_{4_6} & \alpha_{4_7} & \alpha_{4_8} \\ T_{31_1} & T_{31_2} & T_{31_3} & T_{31_4} & T_{31_5} & T_{31_6} & T_{31_7} & T_{31_8} \\ T_{32_1} & T_{32_2} & T_{32_3} & T_{32_4} & T_{32_5} & T_{32_6} & T_{32_7} & T_{32_8} \\ T_{33_1} & T_{33_2} & T_{33_3} & T_{33_4} & T_{33_5} & T_{33_6} & T_{33_7} & T_{33_8} \\ D_{3_1} & D_{3_2} & D_{3_3} & D_{3_4} & D_{3_5} & D_{3_6} & D_{3_7} & D_{3_8} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \zeta_1 \cdot e^{j \cdot k_1 \cdot \beta_1 \cdot x_3} \\ \zeta_2 \cdot e^{j \cdot k_1 \cdot \beta_2 \cdot x_3} \\ \zeta_3 \cdot e^{j \cdot k_1 \cdot \beta_3 \cdot x_3} \\ \zeta_4 \cdot e^{j \cdot k_1 \cdot \beta_4 \cdot x_3} \\ \zeta_5 \cdot e^{j \cdot k_1 \cdot \beta_5 \cdot x_3} \\ \zeta_6 \cdot e^{j \cdot k_1 \cdot \beta_6 \cdot x_3} \\ \zeta_7 \cdot e^{j \cdot k_1 \cdot \beta_7 \cdot x_3} \\ \zeta_8 \cdot e^{j \cdot k_1 \cdot \beta_8 \cdot x_3} \end{bmatrix} \quad Eq.II.29$$

Où les coefficients ζ_i sont des coefficients de pondération de chacune des ondes partielles.

Nous allons maintenant ré-écrire II.29 pour faire apparaître les noms des sous-matrices qui permettront d'établir la matrice de transfert :

$$P(x_3) = X \cdot W(x_3) \cdot \zeta \quad Eq.II.30$$

Où P est le vecteur d'état, X la matrice 8x8 des amplitudes des déplacements et contraintes, W(x_3) une matrice diagonale 8x8 contenant les termes de phase, et ζ est le vecteur colonne des coefficients de pondération des ondes partielles ζ_i (à ne pas confondre avec le tenseur de rigidité).

II.3.1.a.d - Calcul de la matrice de transfert

La matrice de transfert est la matrice qui donne le vecteur d'état en un point de la couche (soit h l'épaisseur de la couche) connaissant le vecteur d'état à l'origine :

$$P(h) = T(h) \cdot P(0) \quad \text{Eq.II.31}$$

Exprimons à l'aide de II.30 le vecteur d'état en 0 et en h :

$$P(0) = X \cdot \zeta \quad \text{Eq.II.32}$$

Puisque $W(0)$ est la matrice identité, et :

$$P(h) = X \cdot W(h) \cdot \zeta \quad \text{Eq.II.33}$$

Expressions que nous reportons dans II.31 :

$$X \cdot W(h) \cdot \zeta = T(h) \cdot X \cdot \zeta \quad \text{Eq.II.34}$$

Qui se simplifie, et donne l'expression de la matrice de transfert d'une couche d'épaisseur h , d'une face de la couche à l'autre :

$$T(h) = X \cdot W(h) \cdot X^{-1} \quad \text{Eq.II.35}$$

II.3.1.b - Matrice de transfert globale

On peut maintenant établir la matrice de transfert globale qui transfère les déplacements et les contraintes d'un domaine semi-infini à l'autre comme le produit de toutes les matrices de transfert entre les deux espaces semi-infinis :

$$P_{\text{sup}} = T_{n-1} \cdot T_{n-2} \cdot \dots \cdot T_3 \cdot T_2 \cdot P_{\text{sub}} = T_{\text{Globale}} \cdot P_{\text{sub}} \quad \text{Eq.II.36}$$

Où P_{sub} est la matrice d'état du milieu semi-infini inférieur (couche 1 ou substrat sur la figure II.6) P_{sup} est la matrice d'état du milieu semi-infini supérieur (couche N ou environnement figure II.6). De ce fait, toutes les conditions aux interfaces entre les couches sont naturellement vérifiées. La dernière étape consiste à déterminer les vecteurs d'état P_{sup} et P_{sub} .

II.3.1.c - Vecteurs d'état des milieux semi-infinis

La particularité des milieux semi-infinis est de n'avoir qu'une face dans la structure, parler de matrice de transfert serait non seulement impropre, mais aussi inutile : il s'agit ici non pas de transférer les déplacements et contraintes, mais d'imposer les conditions aux limites. Cette limite étant la décroissance de l'amplitude des ondes lorsque $|x_3| \rightarrow \infty$.

En revanche les étapes à suivre sont les mêmes qu'au paragraphe II.3.1.a, de la première étape (paragraphe II.3.1.a.a) au calcul de la matrice d'état inclus (paragraphe II.3.1.a.c).

En substituant dans II.36 P_{sup} et P_{sub} par leur décomposition en matrices X , $W(x_3)$ et ζ_i (cf. équation II.30), on obtient l'expression :

$$X_{\text{sup}} \cdot W_{\text{sup}}(x_3) \cdot \zeta_{\text{sup}} = T_{\text{Globale}} \cdot X_{\text{sub}} \cdot W_{\text{sub}}(x_3) \cdot \zeta_{\text{sub}} \quad \text{Eq.II.37}$$

Dans les deux cas W_{sup} et W_{sub} sont la matrice unité, puisqu'on se situe à l'origine de chaque couche semi-infinie, on peut donc récrire II.33 comme :

$$\zeta_{\text{sup}} = X_{\text{sup}}^{-1} \cdot T_{\text{Globale}} \cdot X_{\text{sub}} \cdot \zeta_{\text{sub}} = T_{\text{structure}} \cdot \zeta_{\text{sub}} \quad \text{Eq.II.38}$$

Dans cette étude, le calcul de ζ_{sup} et ζ_{sub} ne nous intéresse pas. Nous voulons simplement savoir si l'onde se propage à la vitesse V_p choisie. Si tel est le cas, l'équation II.38 a une solution, et donc le déterminant de $T_{\text{structure}}$ est nul (cf paragraphe II.3.1.a.c- Fin du calcul ci-après).

De plus, la nature semi-infinie des milieux a pour conséquence de rendre la propagation de certaines ondes impossible : les vecteurs d'ondes qui décrivent une onde dont l'amplitude augmente à l'infini doivent être éliminés, cette considération énergétique constitue en fait les conditions aux limites. Comme nous considérons la structure isolée de son environnement, aucune onde incidente ne doit parvenir sur la structure. Il faudra donc aussi éliminer les vecteurs qui décrivent une onde incidente.

Nous avons vu précédemment (paragraphe II.2.3) qu'il y a au plus 8 vecteurs d'ondes normalisés répartis par paires réelles pures et paires complexes conjuguées. Or seulement la moitié des vecteurs d'ondes vérifient les hypothèses précédentes ([TJCA], pages 36-37 et [Adl00], pages 123-124).

Les tableaux II.2 et II.3 résument toutes les combinaisons possibles pour les vecteurs d'ondes sur les colonnes, les lignes sont les deux hypothèses. Les cellules précisent si le vecteur d'onde en colonne vérifie ou contredit l'hypothèse en ligne. Enfin la dernière ligne indique si le vecteur d'onde est gardé ou rejeté. Ils sont écrits dans le $\frac{1}{2}$ espace inférieur (couche 1 figure II.6), dans lequel x_3 est négatif, comme β est multiplié par x_3 dans le terme de phase (cf. équation II.21), pour savoir quels vecteurs garder dans le $\frac{1}{2}$ espace supérieur (couche N figure II.6), dans lequel x_3 est positif, il faut remplacer mot pour mot positif par négatif, et vice versa, dans les deux tableaux.

Vecteur d'onde réel - Décrit une onde de volume

Signe		Positif	Négatif
Hypothèse	Structure isolée	Contradiction : ce vecteur d'onde décrit une onde incidente	L'onde de volume s'éloigne de la structure
	Quantité d'énergie finie	L'énergie rayonnée est constante (uniquement celle apportée par les transducteurs)	
Vecteur d'onde		Rejeté	Gardé

Tableau II.2 Choix du vecteur d'onde pour satisfaire les conditions aux limites dans le cas d'un vecteur d'onde réel pur.

Vecteur d'onde complexe - Déplacement sinusoïdal amorti

Signe partie réelle		Positif		Négatif	
Signe partie imaginaire		Positif	Négatif	Positif	Négatif
Hypothèse	Structure isolée	Contradiction l'onde arrive depuis l'infini avec une amplitude croissante, donc la structure reçoit de l'énergie	L'onde arrive depuis l'infini avec une amplitude décroissante, donc nulle si le $\frac{1}{2}$ infini est assez grand pour dissiper toute cette énergie	L'onde s'éloigne de la structure	L'onde s'éloigne de la structure
	Quantité d'énergie finie	Contradiction l'onde arrive depuis l'infini avec une amplitude croissante, donc l'énergie diverge	L'onde arrive depuis l'infini avec une amplitude décroissante, donc nulle si le $\frac{1}{2}$ infini est assez grand	Contradiction l'onde s'éloigne de la structure avec une amplitude croissante	L'onde s'éloigne avec une amplitude décroissante
Vecteur d'onde		Rejeté	Gardé	Rejeté	Gardé

Tableau II.3 Choix du vecteur d'onde pour satisfaire les conditions aux limites dans le cas d'un vecteur d'onde complexe.

En résumé :

- Dans le cas de la couche 1, qui correspond au substrat dans la figure II.6, il faut ne garder que les vecteurs d'onde complexes tels que $\text{Im}(\beta) < 0$ et les vecteurs d'ondes réels tels que $\text{Re}(\beta) < 0$.
- Pour ce qui est de la couche N, qui correspond au milieu environnant le capteur, il faut ne garder que les vecteurs d'onde complexes tels que : $\text{Im}(\beta) > 0$ et les vecteurs d'ondes réels tels que $\text{Re}(\beta) > 0$.

Une fois que l'on a obtenu la matrice d'état (cf. équations II.29 et II.30) il faut enlever les lignes du vecteur ζ ainsi que les colonnes de la matrice X correspondantes aux vecteurs d'ondes ne vérifiant pas les critères énergétiques décrits ci-dessus :

$$P_{\text{sub}} = \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ \Phi \\ T_{31} \\ T_{32} \\ T_{33} \\ D_3 \end{bmatrix}_{\text{sub}} = \begin{bmatrix} \alpha_{1_1} & \alpha_{1_3} & \alpha_{1_5} & \alpha_{1_7} \\ \alpha_{2_1} & \alpha_{2_3} & \alpha_{2_5} & \alpha_{2_7} \\ \alpha_{3_1} & \alpha_{3_3} & \alpha_{3_5} & \alpha_{3_7} \\ \alpha_{4_1} & \alpha_{4_3} & \alpha_{4_5} & \alpha_{4_7} \\ T_{31_1} & T_{31_3} & T_{31_5} & T_{31_7} \\ T_{32_1} & T_{32_3} & T_{32_5} & T_{32_7} \\ T_{33_1} & T_{33_3} & T_{33_5} & T_{33_7} \\ D_{3_1} & D_{3_3} & D_{3_5} & D_{3_7} \end{bmatrix}_{\text{sub}} \cdot \begin{bmatrix} \zeta_{\text{sub } 1} \\ \zeta_{\text{sub } 3} \\ \zeta_{\text{sub } 5} \\ \zeta_{\text{sub } 7} \end{bmatrix} = X_{\text{sub}} \cdot \zeta_{\text{sub}} \quad \text{Eq.II.39}$$

En revanche pour ce qui est de la couche supérieure, il faut commencer par inverser la matrice X_{sup} : en effet la suppression des colonnes rend la matrice rectangulaire et il n'est plus possible alors de l'inverser. Ensuite seulement, il faut enlever les lignes correspondant aux colonnes à supprimer.

En raisonnant du point de vue de l'algèbre linéaire, la matrice X_{sup} exprime les coordonnées du vecteur d'état dans la base des ondes partielles. Supprimer des vecteurs d'ondes revient donc à supprimer des vecteurs de base. L'inversion de la matrice X_{sup} va exprimer les vecteurs de base dans la base du vecteur d'état, donc pour supprimer les vecteurs d'ondes il faudra alors supprimer les lignes de X_{sup}^{-1} .

Dans l'expression de l'équation II.39 nous avons enlevé un vecteur d'onde sur deux pour chaque polarisation. C'est le cas lorsque l'on est dans une structure qui permet la propagation d'une onde de Love. En pratique les indices dépendent de l'ordre dans lequel les racines du déterminant de la matrice A sont retournées par la fonction qui les calcule, et aussi du signe des parties réelles et imaginaires qui pourraient aussi bien être telles qu'il reste au total 3 vecteurs d'onde, 5 vecteurs d'onde, ou bien aucun.

Dans le cas de l'onde de Love dans une structure avec une unique couche guidante et un substrat, le déplacement est sinusoïdal pur dans la couche, et sinusoïdal amorti dans le substrat. On se trouvera dans le cas d'une composante k_3 du vecteur d'onde imaginaire (β réel pur) pour la couche, et complexe (β complexe) pour le substrat.

II.3.1.d - Fin du calcul

On peut alors calculer la matrice $T_{\text{structure}}$ définie dans l'équation II.38 (après avoir supprimé de X_{sup} et X_{sub} les vecteurs d'état ne pouvant exister) dont le sens est d'assurer la continuité mécanique de $-\infty$ à $+\infty$. Pour vérifier que la vitesse de phase transférée par l'interface au noyau permet la propagation, on calcule le déterminant de cette matrice. S'il est nul alors l'interface conclura que cette vitesse est une vitesse de propagation pour une onde dans la structure, sinon, l'interface poursuivra la recherche en transmettant une autre vitesse.

II.3.2. L'interface

Le rôle de cette partie de la modélisation est de fournir des facilités pour réaliser des applications. En fait, l'interface peut être considérée comme une application à part entière, base des autres applications, qui ne sont au final que des combinaisons des vitesses de propagation pour calculer des sensibilités, des fréquences d'oscillation, des optimisations...

Elle se subdivise en deux parties :

- la première partie, qui correspond aux flèches horizontales sur la figure II.5 en page 54, est chargée de gérer les données
- la deuxième partie, qui correspond aux flèches verticales sur la même figure, cherche à trouver le plus rapidement les zéros du déterminant renvoyé par le noyau.

La recherche des zéros se subdivise elle même en deux étapes :

- une première fonction qui limite le nombre de déplacements et de contraintes à modéliser afin d'optimiser la rapidité, par l'intermédiaire d'une fonction de détermination de l'intervalle de recherche minimal dans lequel la propagation d'une onde de Love est possible
- la recherche proprement dite des zéros du déterminant.

Une attention importante a été portée à la performance de chacune des fonctions de gestion des données car la modélisation numérique impose de refaire toutes les opérations du noyau à chaque nouvelle vitesse communiquée (lecture des données dans les fichiers, rotations de tenseurs ...).

II.3.2.a - Gestion des données

Une des contraintes importante lors de la décision de réaliser cette modélisation était de pouvoir aisément simuler des effets sur tous les paramètres numériques de la modélisation. Cet objectif a été atteint en insérant un système de modification des paramètres lus dans les fichiers de données sur disque, entre la lecture proprement dite et l'étape de mise en forme des données des matériaux. Cette étape calcule les coefficients faisant intervenir la vitesse de phase (coefficients de viscosité, viscoélasticité, calcul des coefficients de Lamé équivalents) et les rotation de tenseurs.

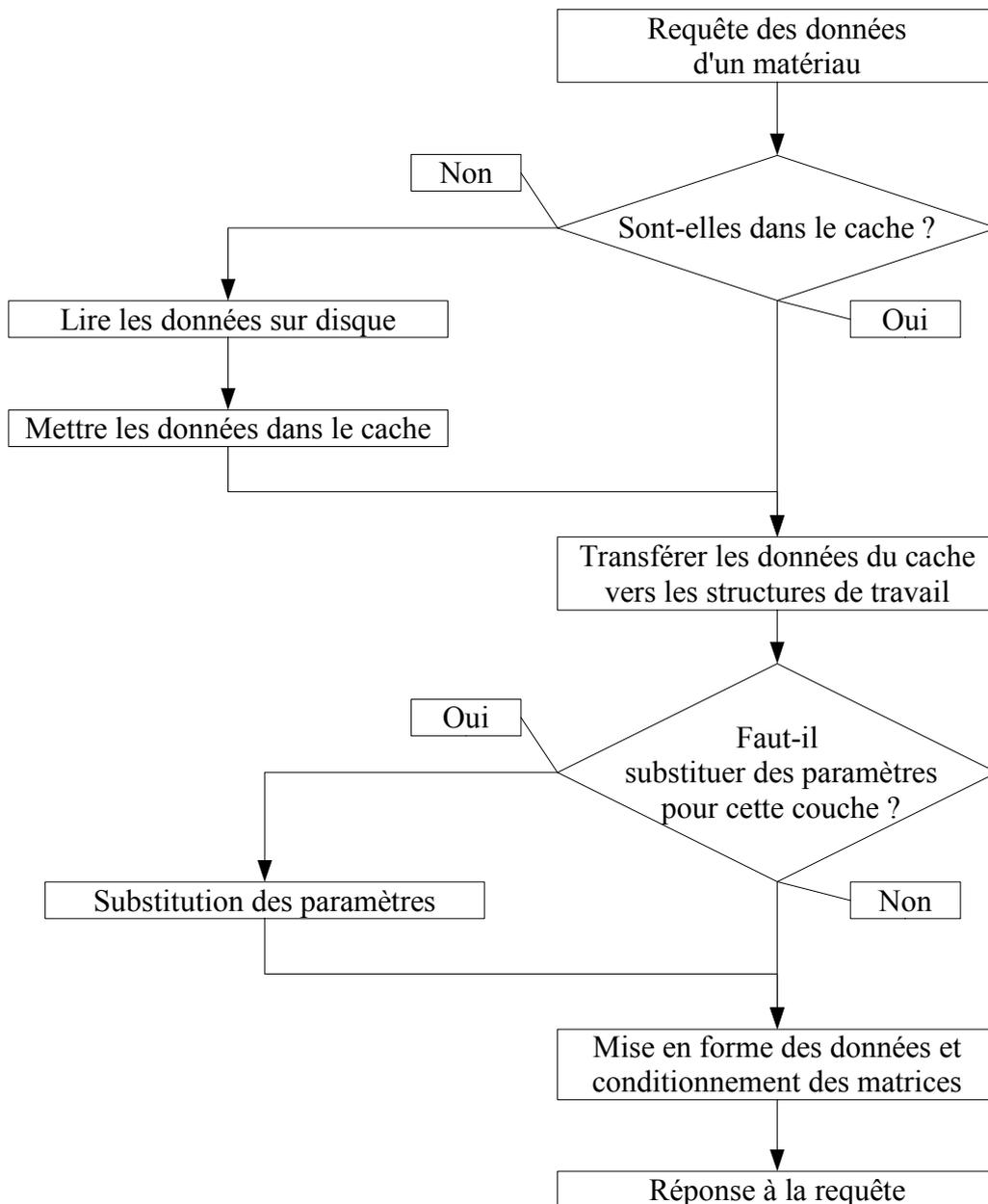


Figure II.9 Algorithme de gestion des données

La figure II.9 représente les étapes se succédant lors de la requête des données d'un matériau par une des fonctions qui les requiert.

Le « cache » fait référence à une technique répandue en informatique qui consiste à stocker en mémoire des données se trouvant sur un support à accès lent (ici des fichiers sur le disque), pour y accéder plus rapidement par la suite en les lisant en mémoire plutôt que sur le disque. L'implémentation de ce système a permis un gain de performances de 30% environ. Une fonction est aussi disponible pour forcer le rafraîchissement du cache lorsqu'il a été nécessaire de modifier des données directement dans le fichier sur le disque.

La substitution des valeurs des paramètres se fait en utilisant le numéro de la couche dans la structure : l'application appelle une fonction qui va stocker le numéro de la couche, le paramètre à faire varier, et la valeur de ce paramètre. Lors d'une requête, le paramètre de la couche est mis à la valeur stockée, quelle que soit la fonction qui requiert les données.

Exemple : il est fréquent que la couche guidante et la couche sensible soient une seule et même couche, (couche 2, figure II.10) gage d'une bonne sensibilité. Cependant, on peut tenter de rapprocher la théorie de l'expérience dans le cas où elle mettrait en évidence la non pénétration en volume des espèces chimiques à détecter (phénomène d'adsorption). Il faut donc subdiviser la couche sensible/guidante en deux sous couches (2' et 3' sur la même figure) : une partie profonde dans laquelle le matériau demeure inchangé, et une fine partie superficielle dans laquelle on simulera un effet de masse par une augmentation de la masse volumique. A ce moment, utiliser le nom du matériau (PMMA dans cet exemple) ne suffit pas : il faut aussi communiquer la position de la couche dans la structure afin de ne pas appliquer l'effet à toutes les couches de matériaux identiques.

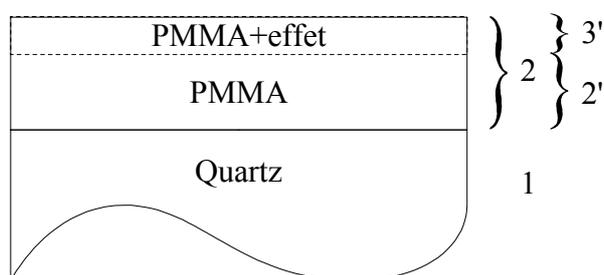


Figure II.10 Structure avec effet sur une partie de l'épaisseur d'une couche dans le but de modéliser un phénomène d'adsorption.

Ainsi l'application exécutera l'appel « `modif_struct('densite', 3, 1155)` ». « 1155 » étant la masse volumique du PMMA (1100 kg/m^3) à laquelle on ajoute 5% pour simuler l'effet de la sorption. Lors

de la requête la commande « densite=1155; » sera interprétée juste après la lecture des paramètres de la troisième couche (dans les fichiers ou le cache). Cette méthode manipule des chaînes de caractères, qui n'est pas le mécanisme le plus performant en terme de vitesse d'exécution, mais elle procure la meilleure souplesse, notamment lorsqu'il s'agit d'appliquer des modifications sur les tenseurs.

La transparence du type de matériau (solide, fluides et polymères sont « vus », et donc traités, de façon identique du point de vue du noyau) est complète vis à vis du noyau qui ne voit que des solides. Cette transparence vaut aussi pour l'interface et l'application : notre objectif de polyvalence et de souplesse de gestion des matériaux est atteint, tout en restant relativement simple au niveau des règles d'implémentation lors de la réalisation d'applications.

En revanche, dans l'éventualité du port vers un autre langage (pour améliorer encore les performances, protéger le code source de la recopie en le compilant ...), il faudra envisager une refonte d'une partie du code pour se passer de l'interprétation de la commande de substitution des paramètres.

II.3.2.b - Conditionnement des matrices

La précision des unités de calcul d'un microprocesseur n'étant pas infinie, il faut tenir compte des erreurs d'arrondis d'opérations en opérations. Les problèmes posés sont amplifiés par les ordres de grandeur en jeu dans les variables qui ont pour effet, lors des opérations, de faire remonter les erreurs vers les premiers chiffres significatifs [Jed00].

Dans le cas des ondes acoustiques se propageant dans des milieux piezoélectriques, les ordres de grandeur extrêmes sont 10^{11} pour les coefficients de rigidités, et 10^{-9} pour les coefficients de permittivité. Lorsque ces deux unités sont multipliées, l'erreur, qui porte toujours sur les derniers chiffres significatifs, est de l'ordre de l'unité, et ce dès le premier calcul.

Or il se trouve que c'est aussi l'ordre de grandeur des coefficients de piézoélectricité. Ainsi, négliger ces erreurs, reviendrait à négliger entre autre la piézoélectricité ainsi que tous les autres paramètres d'un ordre encore inférieur. Lors des premières simulations de faibles effets, conduisant à des variations de vitesses de l'ordre du mm/s, le bruit de calcul numérique maculait les résultats d'erreurs, ce qui les rendait inexploitable.

Une telle erreur n'est donc pas tolérable, et c'est justement l'objet de cette manipulation des données que l'on appelle le « conditionnement » [Las04] que de ralentir la remontée de l'erreur des

derniers chiffres significatifs d'un résultat vers les premiers. Il consiste à changer certaines des unités pour réduire les ordres de grandeur en jeu dans les calculs.

Les unités des paramètres dans les équations sont :

- Rigidité : $Pa = N/m^2$, ordre de grandeur : 10^9
- Piézoélectricité : C/m^2 , ordre de grandeur : unité
- Permittivité : $F/m = C^2 / N.m$, ordre de grandeur : 10^{-9}
- Masse volumique : kg/m^3 , ordre de grandeur : 10^3

Il se trouve que le Newton intervient dans la rigidité et la permittivité, donc si l'on utilise des données en giganewton au lieu de Newtons on va simultanément ramener les ordres de grandeurs à des valeurs d'un ordre proche de l'unité.

Il faut aussi ajuster l'unité de la masse volumique, afin que l'unité de la vitesse reste le m/s, en la divisant par 10^9 .

Ainsi on passe d'un intervalle de valeurs comprises entre 10^9 et 10^{-9} , c'est à dire 18 ordres de grandeur, à un intervalle de valeurs comprises entre 10^3 (pour les valeurs de la vitesse) et 10^{-6} pour la masse volumique, c'est à dire 9 ordres de grandeur. Ceci se traduit par la possibilité de calculer précisément des vitesses au nm/s.

II.3.2.c - Recherche du nombre minimal de polarisations

Pour modéliser la propagation des ondes de Love, on peut ne garder que le déplacement transverse horizontal U_2 , la contrainte T_{32} et les vecteurs d'ondes associés. Cependant, comme l'onde est générée par effet piézoélectrique, la prise en compte des effets électriques dans la couche guidante devient implicite.

C'est uniquement pour se réserver la possibilité à long terme de l'étude d'autres cas (matériaux et couplages), que nous avons fait le choix de garder tous les axes de polarisations possibles pour le déplacement des particules dans les équations qui précèdent.

Ceci est à priori pénalisant à court terme pour le temps de calcul, mais nous allons voir au travers d'un exemple comment un simple examen des coefficients nuls dans la matrice $[A]$ permet de simplifier le problème en sous-problèmes plus faciles à résoudre.

Si nous écrivons la matrice A du quartz dans une coupe $\langle 0, \theta, 90^\circ \rangle$ nous constatons que toutes les polarisations ne sont pas couplées entre elles :

$$\begin{bmatrix} A_{11} & 0 & A_{13} & 0 \\ 0 & A_{22} & 0 & A_{24} \\ A_{13} & 0 & A_{33} & 0 \\ 0 & A_{24} & 0 & A_{44} \end{bmatrix} \quad \text{Eq.II.40}$$

Les coefficients hors de la diagonale de la matrice [A] indiquent quelles polarisations seront couplées entre elles. Dans le cas de la matrice II.40 seuls les coefficients A_{13} et A_{24} sont non nuls ainsi on a deux couples de polarisations couplées : longitudinale/transverse verticale (A_{13}) et transverse horizontale/électrique (A_{24}).

Il est aussi intéressant dans cette étude que dans les précédentes, de ne garder que la partie de cette matrice qui nous intéresse :

$$\begin{bmatrix} A_{22} & A_{24} \\ A_{24} & A_{44} \end{bmatrix} \quad \text{Eq.II.41}$$

car cela permettra de ne plus gérer que des matrices d'état 4x4, augmentant d'autant plus les performances, car les matrices d'état et de transfert deviennent 4x4 au lieu de 8x8. De plus, il est possible de pré-calculer l'expression du déterminant de cette matrice sans passer par le calcul d'une matrice polynomiale comme décrite au paragraphe II.3.1.a.b, page 58, gage d'un gain de vitesse de calcul encore supérieur.

Toutefois, avant de procéder à la suite de la modélisation, il faut vérifier que dans toutes les autres couches du matériau l'une d'elles ne va pas coupler entre elles d'autres polarisations. Imaginons par exemple qu'une couche déposée sur le quartz soit décrite par la matrice [A] suivante :

$$\begin{bmatrix} A_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_{33} & A_{34} \\ 0 & 0 & A_{34} & A_{44} \end{bmatrix}$$

Cette matrice peut se subdiviser en trois « couples » A_{11} , A_{22} et $\begin{bmatrix} A_{33} & A_{34} \\ A_{34} & A_{44} \end{bmatrix}$, on constate que les polarisations transverses verticale et électrique sont couplées. Il semble à première vue que l'on puisse aussi diminuer le nombre de polarisations à garder dans la couche. Si on observe maintenant les deux matrices [A] simultanément, figure II.11, on constate que cette conclusion est hâtive.

En effet, les IDTs amènent le potentiel électrique à l'interface entre le guide et le substrat. Dans le substrat le coefficient A_{24} cause (flèches en pointillés, figure II.11) un déplacement mécanique TH,

qui, par continuité du déplacement à l'interface Guide/Couche, cause un déplacement TH, nous sommes dans le cas d'une onde de Love.

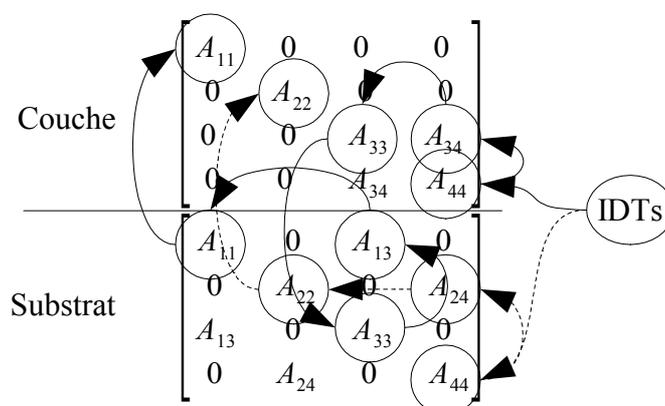


Figure II.11 Relations entre les couplages électriques et mécaniques pour une structure à une couche guidante.

Or, dans le guide le coefficient A_{34} cause un déplacement (lignes continues) transverse vertical, qui, toujours par continuité du déplacement à l'interface Guide/Couche, va causer dans le substrat un déplacement TV, or cette polarisation est couplée au déplacement longitudinal par le coefficient A_{13} . Une fois de plus par continuité, causera un déplacement longitudinal dans la couche.

Dans ce cas, malgré la possibilité de découpler certaines polarisations dans chacun des matériaux, il faudra tout de même garder toutes les polarisations pour décrire la propagation de l'onde dans la structure. De plus, toutes les polarisations étant couplées entre elles, il devient impropre de parler d'onde de Love.

La première partie de la recherche réalise ce travail. Elle ajoute aussi la possibilité de forcer un couple de polarisation. Si par exemple on veut faire l'approximation d'un quartz non piézoélectrique, il suffit de forcer la polarisation 2 (indice des grandeurs transverses horizontales), et elle seule sera gardée dans toute les couches.

Contrairement au noyau, l'interface est dédiée à l'étude des ondes des Love. Si des structures communiquées à l'interface font intervenir une polarisation mécanique supplémentaire, l'interface aura un comportement qui n'a pas été étudié. Toutefois l'hypothèse la plus probable est la présence de zéros qu'il faudra analyser pour savoir s'ils décrivent une onde au déplacement plutôt longitudinal, plutôt transverse vertical ou horizontal, ou plutôt électrique.

II.3.2.d - Détermination d'un intervalle de recherche

Les travaux précédents ont montré [TCZ] qu'il est possible de borner un intervalle de recherche des vitesses de phase possibles pour l'onde de Love (pages 59-60). Les bornes de cet intervalle sont déterminées d'après les racines du vecteur d'onde normalisé dans chacune des couches (notée $V_{\beta=0}$).

Dans les milieux semi-infinis, le vecteur d'onde doit décrire une onde amortie, ce qui a pour conséquence d'imposer une vitesse de phase V_p inférieure à $V_{\beta=0}$, notée $V_{\text{semi-infini}}$ dans ce cas.

Dans les couches finies, les vecteurs d'ondes doivent décrire une onde sinusoïdale, ce qui impose que la vitesse de phase de l'onde soit supérieure à $V_{\beta=0}$, notée V_{couche} .

On peut résumer ce critère comme :

$$V_{\text{couche}} < V_p < V_{\text{semi-infini}} \tag{Eq.II.42}$$

Ici le critère est exprimé dans le cas d'une seule couche finie dans la structure, mais il peut se généraliser ([TCZ] pages 77-78) en prenant pour V_{couche} la vitesse $V_{\beta=0}$ la plus faible de chacun des matériaux en couche, et pour $V_{\text{semi-infini}}$ la vitesse $V_{\beta=0}$ la plus faible des deux matériaux semi-infinis. La figure II.12 résume graphiquement la détermination de l'intervalle de recherche des vitesses de phase dans une structure complète avec plusieurs couches.

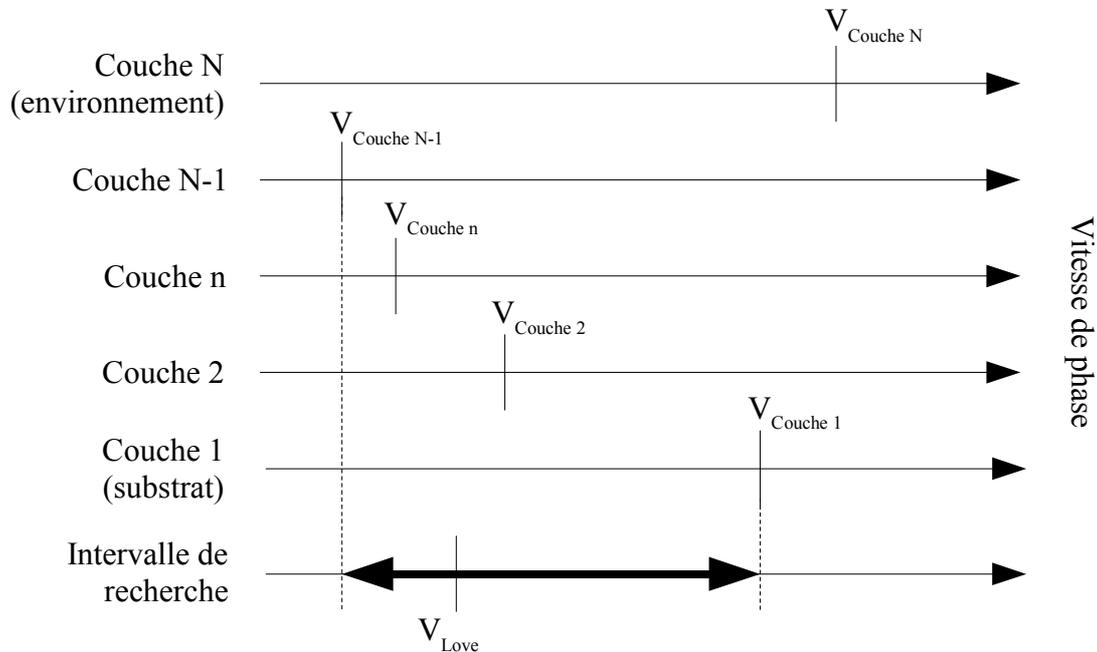


Figure II.12 Détermination de l'intervalle de recherche d'après les racines du vecteur d'onde, les marques sont les vitesses de phase telles que $\beta = 0$.

Admettons que cette structure soit telle que la vitesse de propagation de l'onde soit celle marquée V_{love} sur la figure. Dans ce cas, l'onde n'est à proprement parler « de Love » que dans les couches $N-1$ et n , car V_{love} est supérieure à $V_{\beta=0}$. Dans la couche 2, la polarisation suivant x_3 est sinusoïdale amortie, de même dans le substrat et l'environnement.

En revanche, il faut distinguer en général la vitesse $V_{\beta=0}$ de la vitesse de l'onde de volume (cf. figure II.13). Ces deux vitesses sont égales s'il s'agit d'un matériau isotrope, ou d'un matériau anisotrope dont la coupe est telle que le tenseur de rigidité redevienne identique à celui d'un matériau isotrope (cas du quartz dans la coupe AT, cf. figure II.13). Dans [TCZ], il est fait en page 60 la confusion entre $V_{\beta=0}$ (notée V_s), et la vitesse de l'onde de volume.

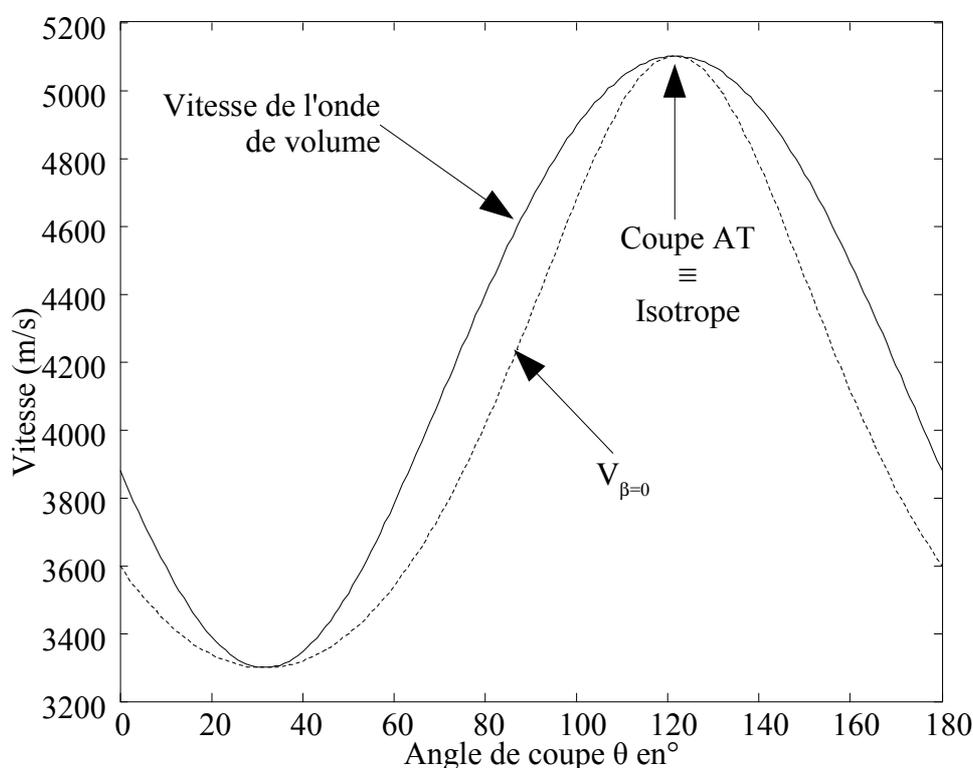


Figure II.13 Mise en évidence de la différence entre $V_{\beta=0}$ et la vitesse de l'onde de volume dans un matériau anisotrope

On peut encore, dans le cas de la figure II.13, borner un intervalle en n'utilisant que la vitesse de l'onde de volume, mais cet intervalle ne sera pas le plus petit possible, car celle-ci est plus grande que $V_{\beta=0}$. De plus, pour les vitesses comprises entre $V_{\beta=0}$ et la vitesse de l'onde de volume, le critère de sélection conduira pour les milieux semi-infini à enlever un vecteur d'onde de trop, rendant la matrice de transfert globale rectangulaire, et empêchant le calcul de son déterminant.

Il faut, en général, se livrer à une étude complète du signe des vecteurs d'ondes en fonction de la valeur de la vitesse de phase lorsque le matériau est anisotrope. Si le matériau est isotrope, un simple calcul de la vitesse de l'onde de volume suffit.

Ce travail n'est pas effectué pour les milieux fluides. En effet, s'ils sont purement visqueux, ils ne permettent pas la propagation d'une onde. S'ils sont viscoélastiques, il faut alors tenir compte de la fréquence de l'onde pour calculer sa vitesse de phase. Mais dans tous les cas les pertes par propagation sont telles que l'existence de vecteurs d'ondes normalisés satisfaisant les conditions aux limites est assurée (cf. paragraphe II.3.1.c-Vecteurs d'état des milieux semi-infinis).

II.3.2.e - Recherche des zéros du déterminant

Au paragraphe précédent nous avons vu comment passer d'une recherche des solutions d'un intervalle $]0, \infty[$ à un intervalle borné dépendant des caractéristiques des matériaux utilisés dans la structure. Il faut maintenant explorer cet intervalle de manière optimale pour trouver la vitesse de phase de l'onde de Love en un temps le plus réduit possible.

En effet, la première approche qui consiste à parcourir l'intervalle avec la précision souhaitée sur le résultat (au moins le cm/s) produit des temps de calcul de l'ordre de la minute, alors qu'avec les algorithmes présentés dans ce paragraphe le temps se réduit à moins d'une seconde, pour une structure identique.

II.3.2.e.a - Zéros ou minimums locaux ?

Les premières versions de l'algorithme recherchaient la nullité du module du déterminant (pour les raisons énoncées au paragraphe II.3.1.d-Fin du calcul, page 65). C'est un bon critère qui permet de vérifier en une opération la nullité de la partie réelle et de la partie imaginaire.

Il avait aussi pour avantage de supprimer des problèmes d'opposition de signe du déterminant d'une vitesse à l'autre, et qui causaient une discontinuité à chacune de ces oppositions. Ces discontinuités, imprévisibles, empêchaient l'utilisation d'algorithmes de recherche de zéros performants, puisque basés sur la continuité de la fonction à minimiser. Elles proviennent de la recherche des racines du déterminant de $[A]$ dans le cas d'un matériau piézoélectrique qui retourne les racines dans un ordre aléatoire.

Par contre, il avait l'inconvénient de ne pas faire apparaître de zéros, mais seulement des minimums locaux. Signalons ici que le déterminant est une fonction très complexe, résultat du produit de plusieurs matrices, pouvant elle aussi présenter « naturellement » des extremums locaux.

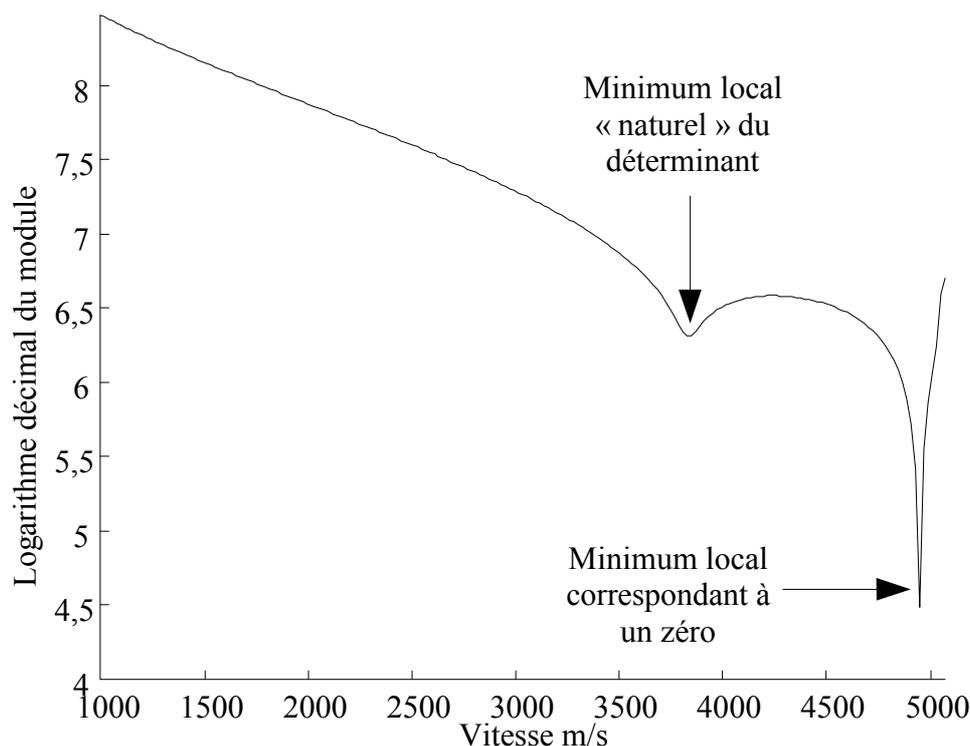


Figure II.14 Logarithme décimal du module du déterminant en fonction de la vitesse

Dans l'étude limitée à une structure polymère/SiO₂/quartz, et pour un faible nombre de modes, cela ne pose pas réellement de problèmes car les minimums locaux correspondant aux zéros sont nettement inférieurs à ceux « naturels » dûs à la complexité du déterminant (cf. figure II.14). C'est ainsi que cette étude est réalisée dans [TOT].

Cependant, en modélisant des structures plus complexes faisant intervenir des matériaux aux caractéristiques particulières (très faibles masse volumiques et/ou rigidités par exemple) ou présentant un grand nombre de modes, il est devenu impossible de différencier, autrement qu'avec un examen au cas par cas, les zéros des minimums locaux.

C'est un problème car lorsqu'on intègre l'interface dans un algorithme automatique (simples boucles de parcours de plage de paramètres ou optimisation plus complexe) il est impossible de pratiquer cette analyse. Tous les critères géométriques, basés sur des angles de tangentes au minimum, sur des écarts à la valeur moyenne sur l'intervalle (ou localement proche du minimum), se sont trouvés pris en défaut les uns après les autres, car ils imposent des paramètres subjectifs, fixés au début de l'exécution d'une application, alors que le déterminant change continûment pendant le déroulement de l'application.

La solution est venue d'une simulation qui ne présentait plus aucun minimum local : il a donc fallu reconsidérer le module du déterminant comme critère : nous sommes passés à la recherche séparée des zéros de chacune des parties réelle et imaginaire du déterminant.

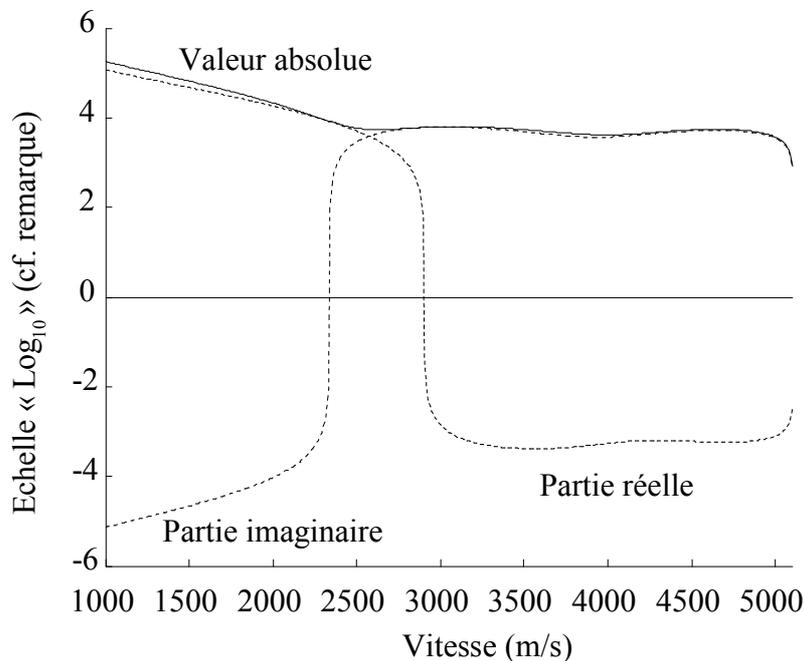


Figure II.15 Cas dans lequel le module du déterminant ne s'annule pas

Comme on le voit sur la figure II.15, le module du déterminant présente deux minimums locaux, que l'on peut difficilement discerner (à 2500 m/s et 4000 m/s). Si on détaille la partie réelle et la partie imaginaire du déterminant, on constate qu'un seul des deux minimums locaux peut correspondre à un zéro du déterminant : celui qui se situe entre les racines des parties réelles et imaginaires.

Remarque : puisqu'il n'est pas possible de calculer le logarithme d'une valeur négative, la figure II.15 ne représente pas « $\log_{10}(\text{partie réelle ou imaginaire})$ » mais « $\text{signe}(\text{partie réelle ou imaginaire}) * \log_{10}(\text{valeur absolue}(\text{partie réelle ou imaginaire}))$ ». Avec cette échelle, si 4 lu sur l'axe vertical correspond bien à 10000, -4 ne correspond pas à 0,0001 mais à -10000. Cette échelle est bien adaptée pour voir des grands chiffres, elle fait apparaître des discontinuités lors du passage par zéro.

Pour information, [TOT] attribuait dans son étude le fait que nous ayons des minimums locaux au lieu de zéros du module du déterminant à des bruits de calculs numériques. Or il n'en est rien : le conditionnement des matrices (paragraphe II.3.2.b, page 68) a notoirement réduit la portée de ce problème, sans pour autant faire apparaître de zéros, même pour les minimums locaux les plus prononcés.

II.3.2.e.b - Zéros de la partie réelle et imaginaire

Pour redonner tout son potentiel à la modélisation il a donc fallu reconsidérer séparément les racines de la partie réelle et imaginaire du déterminant. Cela alourdi considérablement le travail à réaliser car il faut doubler le nombre de calculs, et prendre en compte les oppositions de signe du déterminant.

Néanmoins ce calcul procure une robustesse supérieure à l'algorithme, tout en supprimant tous les paramètres fixes qui devaient servir à discriminer les minimums correspondant à des zéros des extremums locaux.

On constate sur les figures II.15 et II.16 (à gauche) que les parties réelles et imaginaire ont des racines sans ambiguïté, mais pour des vitesses de phase différentes. C'est ce décalage entre les racines qui fait que le module ne peut s'annuler en aucun point : il y a toujours une partie différente de zéro.

Pour résoudre ce problème, et faire que les racines des parties réelle et imaginaire aient la même vitesse de phase, il faut reprendre le problème à son commencement : à l'écriture du terme de phase (équation II.21), que l'on a écrit pour décrire une onde sans atténuation.

Fondamentalement, il faut tenir compte de l'atténuation pour modéliser la propagation. Jusqu'ici, nous faisons l'hypothèse qu'elle est négligeable, cette hypothèse devient fautive pour certaines structures.

La conséquence est qu'il faut réécrire les équations du noyau avec une composante suivant x_1 du vecteur d'onde complexe (au lieu de réelle actuellement), et que d'une recherche à une dimension (la vitesse) il faut passer à une recherche à deux dimensions (vitesse et pertes).

$$\vec{u} = \vec{\alpha} e^{jk_1 \cdot (Vp \cdot t - x_1 \cdot (1 + i \cdot \delta) - \beta \cdot x_3)} \quad \text{Eq.II.43}$$

Nous avons alors à résoudre un système de deux équations (partie réelle et imaginaire du déterminant) à deux inconnues : la vitesse de phase et les pertes (δ dans l'équation II.43).

II.3.2.e.c - Utilisation d'une vitesse complexe

Avant de se lancer dans la réécriture complète des équations du noyau, nous avons cherché comment rajouter cette « contribution » de la partie imaginaire du vecteur d'onde qui manque dans les équations de propagation. Il s'avère qu'un moyen simple est de communiquer une vitesse complexe au noyau.

Le fait d'utiliser un vecteur d'onde complexe implique une vitesse complexe, mais dans notre cas de modélisation numérique les équations sont figées dans le noyau. Elles ne font donc plus intervenir le vecteur d'onde, et la méthode n'est plus rigoureuse de ce fait.

En effet, si nous comparons le termes A_{11} écrit sans (eq. II.44) et avec (eq. II.45) la prise en compte de l'atténuation :

$$A_{11} = C_{55}\beta^2 + 2 C_{15}\beta + C_{11} - \rho \cdot Vp^2 \quad \text{Eq.II.44}$$

$$A_{11} = C_{55}\beta^2 + 2 C_{15}\beta \cdot (1 + j\delta) + C_{11} \cdot (1 + j\delta)^2 - \rho \cdot Vp^2 \quad \text{Eq.II.45}$$

nous constatons la présence des facteurs $(1+j\delta)$ dûs à l'atténuation. Vp permettra donc d'ajouter une partie de l'influence des facteurs $(1+j\delta)$ dans l'équation II.44.

Si nous comparons deux termes en dehors de la diagonale, A_{21} par exemple, sans (eq. II.46) et avec (eq. II.47) la prise en compte de l'atténuation :

$$A_{12} = C_{54}\beta^2 + (C_{14} + C_{56}) \cdot \beta + C_{16} \quad \text{Eq.II.46}$$

$$A_{12} = C_{54}\beta^2 + (C_{14} + C_{56}) \cdot \beta(1 + j\delta) + C_{16} \cdot (1 + j\delta)^2 \quad \text{Eq.II.47}$$

Il n'y a pas dans l'équation II.46 de terme Vp , il ne sera donc pas possible de compenser l'absence des facteurs $(1+j\delta)$ qui devraient y être présents.

Cette méthode ne permet donc de modifier que les coefficients A_{11} , A_{22} et A_{33} de la matrice $[A]$, alors que tous les coefficients font normalement intervenir l'atténuation. C'est ce point qui confère à cette méthode son caractère peu rigoureux. Cette méthode n'est en fait rigoureuse que dans le cas d'un matériau tel que la matrice $[A]$ soit diagonale, pour un matériau non piézoélectrique.

De plus, pour des matériaux visqueux le coefficient de viscosité dépend de la fréquence, donc dans ce cas les deux variables Vp et δ ne sont pas indépendantes, ce qui n'est pas bien traduit par une partie imaginaire constante quelle que soit la vitesse d'essai communiquée au noyau.

Toutefois cette méthode approximative permet de confirmer que la prise en compte des pertes par propagation est un point clé de la réalisation d'un outil modélisation qui donne des résultats fiables lorsque l'on souhaite travailler avec des structures dissipatives.

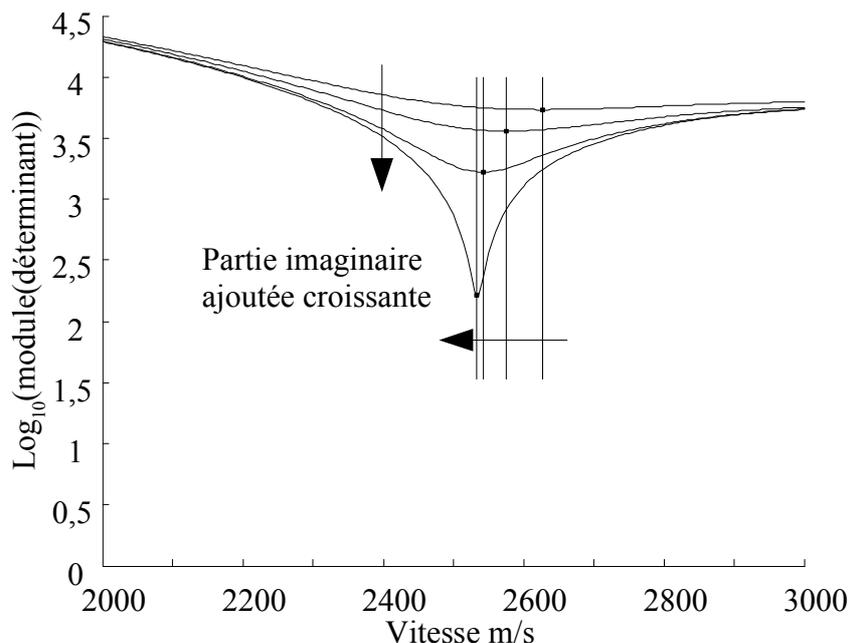


Figure II.17 Effet sur le déterminant de l'ajout d'une partie imaginaire croissante à la vitesse

Dans un deuxième temps, le noyau de calcul a été ré-écrit en utilisant l'équation II.43 (p. 77) comme terme de phase, et l'algorithme de recherche en deux dimensions est en phase finale de mise au point. La détermination de l'intervalle de recherche ajoute aussi des problèmes puisque les pertes rendent les déplacements de particules sinusoïdaux amortis, quelle que soit la couche : il n'y a plus de vitesse de phase telle que β soit nul (cf. II.3.2.c-Recherche du nombre minimal de polarisations, p. 69).

Des résultats cohérents avec l'expérience commencent à être obtenus, mais l'algorithme, basé sur la méthode de Nelder et Mead [Nel65], dite du « downhill-simplex », souffre encore d'un manque de robustesse qui ne permet pas d'en systématiser l'utilisation. Le chapitre III présentera ces premiers résultats.

II.3.2.f - Algorithmes utilisés

Pour trouver tous les zéros d'une fonction continue sur un intervalle borné, il est nécessaire de le parcourir de façon méthodique et systématique en cherchant un zéro lorsque les valeurs prises par la fonction aux bornes sont de signes différents. Lorsque celles-ci sont de même signe, on cherche un extremum dans le $\frac{1}{2}$ plan de signe opposé à celui des bornes. Ainsi après avoir trouvé un zéro, il faudra chercher de part et d'autre deux extremums, et, réciproquement, après avoir trouvé un extremum, on cherchera, si nécessaire, deux zéros de part et d'autre de cet extremum.

L'algorithme est donc structuré, figure II.18, autour de deux fonctions (l'une cherchant un zéro, et l'autre un extremum) qui s'appellent l'une l'autre de manière récursive. L'intervalle est parcouru comme un arbre dont les branches sont des intervalles, et dont les noeuds sont les zéros ou les extremums. Chaque noeud permet de déterminer deux sous intervalles de recherche.

Afin de trouver en premier la vitesse du premier mode de propagation, il faut parcourir l'arbre vers la gauche, c'est à dire que pour un zéro trouvé en X sur un intervalle $[\text{borneinf } \text{bornesup}]$, on cherchera en premier un extremum sur $[\text{borneinf } X]$, puis sur $[X \text{ bornesup}]$.

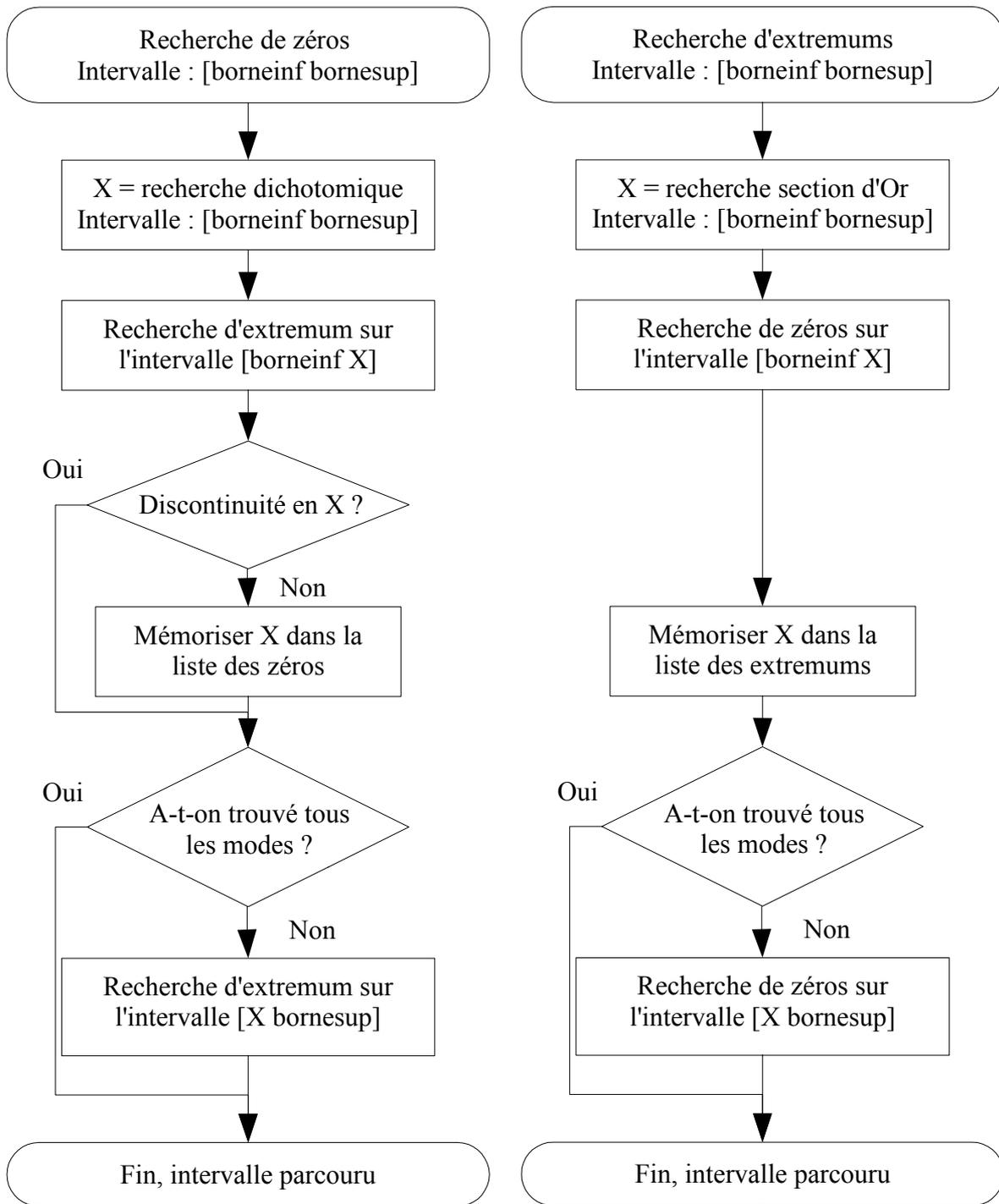


Figure II.18 Algorithme de recherche de zéros.

Les méthodes de recherche de zéros et d'extremums sont nombreuses, et diffèrent par le nombre de dimensions, la vitesse de convergence et la robustesse, un compromis étant à établir entre ces deux derniers points. L'expérience a montré que la robustesse de la méthode est à privilégier devant la vitesse de convergence, car il n'y a aucun moyen a posteriori de vérifier que l'algorithme a, par

exemple, trouvé un minimum, ou s'est « perdu » en le cherchant. Ainsi les algorithmes retenus sont parmi les plus lents, mais lorsqu'il y a un zéro ou un extremum, ils le trouvent.

L'algorithme utilisé pour la recherche des extremums locaux est basé sur celui fourni par l'environnement Matlab® qui utilise l'algorithme de recherche de la « section dorée » (Golden section search) [Pre92], basé sur le découpage de l'intervalle en trois longueurs calculées d'après le nombre d'or afin de minimiser le nombre de calculs. Il utilise aussi, lorsque c'est possible, une interpolation parabolique afin d'augmenter la vitesse de convergence. Il faut aussi s'assurer au préalable que la fonction possède bien un extremum sinon les résultats sont erronés, et à moins de parcourir l'intervalle avec pour pas la précision sur la vitesse il n'est pas possible de le vérifier. La limitation de la fonction Matlab® de cette méthode vient de sa combinaison avec l'interpolation parabolique, qui suppose que dans la pratique la parabole est une bonne approximation de la fonction autour du minimum. Or, ce n'est pas notre cas, nous avons programmé l'algorithme sans l'interpolation parabolique.

L'algorithme utilisé pour la recherche des zéros est l'algorithme de dichotomie, qui est loin d'être le plus performant en terme de vitesse de convergence, mais les algorithmes qui peuvent l'accélérer ont des problèmes avec les ordres de grandeurs en jeu dans les variations du déterminant, à l'approche de la racine, et se « perdent ». La dichotomie n'utilisant que le signe des valeurs calculées, et non pas leur valeur en elle-même, n'est pas sensible à ces problèmes.

De plus, la recherche de zéros doit, une fois la racine trouvée, vérifier qu'il ne s'agit pas d'une discontinuité due à une opposition de la valeur du déterminant (problème évoqué au paragraphe II.3.2.e.a, page 74). Cette vérification est effectuée en comparant les quadrants dans lesquels se trouvent la dérivée à droite et la dérivée à gauche du déterminant autour de la racine, considérée comme l'origine d'un repère local : dans les quadrants pairs ou impairs, et c'est une racine que l'on stocke (cf. figure III.18 à gauche), dans un quadrant pair et un impair (cf. figure III.18 à droite : les dérivées sont ramenées à l'origine), et c'est une discontinuité dont la valeur ne sera pas gardée.

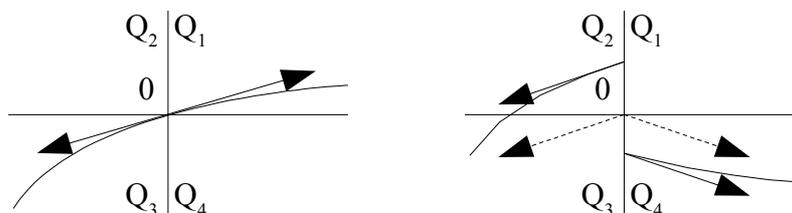


Figure II.19 Illustration de la méthode de discrimination des racines et des discontinuités.

II.4. Autres fonctionnalités

Au fil du développement, certains objectifs sont devenus prioritaires par rapport à d'autres, notamment la robustesse de calcul. Ceci a été réalisé au détriment de la programmation de la gestion de certains phénomènes : notamment la prise en compte des effets de température et la prise en compte de l'effet d'une couche conductrice dont le potentiel est fixé par l'extérieur de la structure.

La prise en compte des effets de température est un problème qui va au delà de la propagation car lors de variations de température sur une structure multicouche, il se produit un effet bilame qui perturbe la dilatation des couches dans le plan de la surface du capteur. Une fois ce problème résolu, l'implémenter dans le noyau requiert un effort minime car les structures de données et les fichiers incluent déjà les paramètres thermiques individuels.

La prise en compte actuelle des effets de température impose les coefficients de dilatation du substrat dans le plan des couches (plan $x_1 x_2$) à toutes les couches qui lui sont directement ou indirectement rigidement liées. Le coefficient de dilatation dans la direction normale x_3 est celui propre au matériau. Les milieux fluides se dilatent librement.

Il n'en va pas de même pour la prise en compte d'un potentiel fixé par l'extérieur de la structure (par exemple un plan de masse) : en effet il faut introduire deux matrices de transfert virtuelles qui transfèrent les grandeurs mécaniques sans perturbations d'une face à l'autre de la couche conductrice [Now87], et qui imposent des vecteurs d'états vérifiant l'équation de Laplace sur ces mêmes faces [Kim97].

Or le fonctionnement de la modélisation fait que le nombre de couches et le nombre de matrices de transfert doivent être égales. Il faut donc pour prendre en compte l'imposition d'un potentiel dans la structure reprogrammer le noyau, l'interface et le mécanisme de substitution de paramètres. Dans la pratique les plans métalliques sont utilisés pour supprimer l'effet de la piézoélectricité dans la structure, ceci peut malgré tout être réalisé en forçant les polarisations gardées par le noyau (cf. paragraphe II.3.2.c-Calcul de la matrice d'état, p.69) pour modéliser la propagation.

II.5. Du recul ...

L'étude présentée dans ce chapitre n'est pas fondamentalement nouvelle, que cela soit la méthodologie de description des matériaux ou celle de la propagation. Le nombre de références est là pour le confirmer.

En revanche, elle est originale dans sa recherche d'exhaustivité de description des paramètres physiques des matériaux, et dans sa façon de prendre en compte l'influence du milieu environnant

lors de l'examen des conditions aux limites. Cette exhaustivité place l'outil réalisé à la frontière entre la modélisation physique et la conception assistée par ordinateur, les applications développées au chapitre III en sont l'expression.

La méthode employée est une résolution numérique classique d'un système d'équations. C'est à dire que l'on suppose le problème résolu en imposant la vitesse de phase, et on vérifie qu'il l'est bien par la suite. Cependant, afin de diminuer l'ordre des matrices, qui croit avec le nombre de couches et d'interfaces, et les problèmes associés (conditionnement, lenteur de calcul) un travail d'analyse et de sélection est réalisé.

Dans le cas général, la résolution des équations de propagation (eq. II.10 p. 48, et eq. II.23 p. 57 sous forme matricielle) a plusieurs solutions : 8 (au plus) vecteurs d'onde normalisés et l'amplitude partielle associée. Les contraintes sont calculées à partir des solutions, et le vecteur d'état qui donne les déplacements et contraintes en fonction de la position dans la couche est obtenu.

Si la vitesse de phase imposée permet bien la propagation, les conditions aux interfaces sont nécessairement satisfaites, et on peut calculer simplement le vecteur d'état en tout point de la structure si on le connaît en un point de la structure. Ceci permet de maintenir constant le nombre d'équations à 8 (au plus) pour décrire la structure multicouche, et fait tout l'intérêt de la méthode employée par rapport à la résolution directe des équations.

Les conditions aux limites imposent de choisir certains des 8 vecteurs d'onde pour des raisons de conservation de l'énergie, ce qui a pour effet de diminuer le nombre d'équations. Si le déterminant de ces équations est nul, alors nous vérifions que la propagation est possible, c'est à dire que l'hypothèse que la vitesse de phase imposée au début de la méthode est bien la vitesse de l'onde dans la structure, et que le problème est résolu.

L'hypothèse que la propagation de l'onde se fait sans atténuation vient de l'observation des manipulations, qui fait apparaître les matériaux caoutchouteux (peu rigides et dissipatifs) comme étant plus vitreux (plus rigides et moins dissipatifs) qu'ils ne le sont à cause de phénomènes de relaxation mécanique. Ce qui est valable pour le module de conservation ne l'est pas pour le module de pertes : il est maintenant avéré que cette hypothèse n'est pas transposable directement dans la description théorique car il n'est pas possible de résoudre le problème de la propagation dans ce cas où des matériaux dissipatifs sont présents.

L'emploi d'une vitesse complexe a permis d'isoler le fait qu'un second degré de liberté, qui s'est avéré être l'atténuation, permettait d'aller au delà des limitations qui sont apparues après la validation du simulateur. Puis les équations de propagation ont été réécrites.

Les méthodes numériques employées sont elles aussi présentées dans la littérature. Toutefois il est admis qu'il n'y a pas de solution universelle aux problèmes d'analyse numérique. Ainsi, tous ont dû être adaptés à la problématique spécifique en ajoutant des contraintes de bornes, en prenant en compte les échelles logarithmiques sur lesquelles varient certains paramètres et la valeur du déterminant, en ajoutant la possibilité de communiquer des données spécifiques au problème étudié.

II.6. Conclusion

Dans ce chapitre nous avons détaillé la construction d'un noyau générique de description de la propagation d'une onde élastique de surface, et d'une interface de calcul spécifique à la modélisation de la propagation des ondes de Love.

Cette réalisation constitue, tant dans l'équipe capteurs et microsystemes du laboratoire que dans la communauté, un des efforts les plus importants dans la synthèse des mécanismes d'interaction entre un capteur à ondes de Love et son environnement dans un modèle unique.

Le modèle du noyau enrichit tous les modèles créés au laboratoire par :

- un grand nombre de paramètres physiques pris en compte :
 - Masse volumique
 - Rigidité
 - Piézoélectricité
 - Permittivité diélectrique
 - Viscosité des solides et fluides
 - Viscoélasticité des solides et fluides
 - Conductivité
- la prise en compte des milieux fluides qui n'est plus uniquement la perturbation de la surface de la structure, mais un volume à part entière
- la possibilité de décrire des structures multicouches, et virtuellement sans limite de nombre
- la prise en compte de matériaux isotropes, anisotropes et fluides.

Nous avons vu qu'il fallait préciser des notions comme le critère d'existence de l'onde de Love sur les vitesses des ondes de volume, ainsi que celui sur la nullité du module du déterminant de la

matrice de transfert globale, comme critère de fin de recherche de la vitesse de propagation de l'onde de Love.

Nous avons aussi constaté la nécessité de la prise en compte des pertes par propagation dans le terme de phase de l'onde afin de trouver des solutions dans les structures les plus dispersives, et vu comment compenser, en première approche, cette lacune par l'utilisation dans le noyau d'une vitesse de phase complexe. Nous avons présenté les méthodes qui permettront une prise en compte rigoureuse par la ré-écriture du noyau et l'emploi d'une recherche en deux dimensions.

Le chapitre suivant commencera par la comparaison des résultats de cette modélisation avec les modèles précédemment étudiés au laboratoire, puis présentera des applications pour la caractérisation des matériaux ainsi que l'optimisation de structures et le choix des matériaux de couche guidante.

Chapitre III - Applications de la modélisation

Dans ce troisième chapitre nous allons comparer nos résultats de simulations à d'autres résultats théoriques antérieurs dans le but de valider le bon fonctionnement de la modélisation, puis nous utiliserons le simulateur pour deux applications importantes : la caractérisation de matériaux et l'optimisation de structures en vue de développer une plateforme de détection chimique.

Une interface graphique a été réalisée dans le but de simplifier les simulations simples de calculs de vitesses de phase, la sensibilité à l'effet de masse et de dépôt d'une couche. Son fonctionnement est présenté dans l'annexe A. Son utilisation n'est pas conseillée pour les matériaux dissipatifs puisqu'elle n'inclue pas le calcul des pertes par propagation. La structure des fichiers de données des matériaux est présentée annexe B, les valeurs des paramètres des matériaux impliqués dans cette étude sont présentées dans l'annexe C. L'annexe D présente un script de simulations réalisant un travail identique à celui présenté dans l'annexe A.

Ce chapitre débute par une analyse comparative de nos travaux à ceux développés dans [TCZ] et [TOT]. L'accent est mis sur les phénomènes de perturbation de la propagation (vitesse de phase en particulier) dûs au dépôt d'une couche pour simuler la sorption de composés gazeux, et à la viscoélasticité d'un fluide et d'un solide. Le but dans cette première partie n'est pas directement l'investigation scientifique, mais la validation des résultats fournis par le simulateur pour en confirmer la fiabilité lors de ses applications concrètes.

Le simulateur requiert des données sur les caractéristiques physiques des matériaux. Malheureusement, ces données ne sont disponibles que rarement dans le contexte spécifique des ondes acoustiques se propageant dans des couches minces de matériaux.

En première approximation, on peut se contenter dans notre contexte des valeurs des paramètres volumiques, tels que la masse volumique ou la permittivité, qui, hormis quelques cas particuliers, varient peu selon la manière dont le matériau est élaboré. En revanche, d'autres tels que la rigidité et la viscosité, varient sur plusieurs ordres de grandeur. De plus, dans le cas de la viscosité, les rares données que l'on trouve dans la littérature sont mesurées à de très basses fréquences en utilisant des rhéomètres classiques. Par exemple : un polymère visqueux à basse fréquence apparaît complètement rigide dans le domaine de la centaine de mégahertz.

C'est pourquoi la première utilisation de la simulation a été la caractérisation de matériaux. En effet, en réalisant plusieurs manipulations impliquant le matériau à caractériser dans des configurations différentes, on peut extraire la valeur des paramètres de la couche. Nous avons intégré l'interface de calcul des vitesses à un programme spécifique qui combine simulations et

mesures expérimentales afin de déterminer le module transverse de rigidité et la masse volumique d'une couche isotrope, connaissant son épaisseur.

Dans l'objectif de développer des plateformes optimisées, nous avons réalisé l'application qui répond à la problématique initiatrice de cette étude : pour un substrat et une couche sensible donnée, quel matériau de couche guidante sera le plus adapté à l'obtention d'une sensibilité à l'effet de masse maximale.

III.1. Validation du simulateur par analyse comparative

Tous les calculs nécessaires à la validation du modèle en le comparant aux modèles précédents au laboratoire ont été effectués en exploitant uniquement l'interface graphique présentée à l'annexe A.

III.1.1. A partir des résultats issus de [TCZ]

Le modèle employé dans [TCZ] est une résolution analytique des équations de propagation (cf tableau I.2) pour des structures à deux et trois couches non piézoélectriques. Le simulateur a donc été configuré pour ignorer la piézoélectricité. Les données utilisées dans les deux cas sont celles de la littérature [Slob73].

III.1.1.a - Calcul de vitesses de phase en fonction de l'épaisseur de la couche guidante

La structure est constituée d'un substrat de quartz coupe ST (angles d'Euler $\langle 0 ; 132,75 \rangle$) et d'une couche guidante en SiO_2 , la propagation se faisant à 90° par rapport à l'axe cristallographique X. La longueur d'onde est de $40 \mu\text{m}$. La précision sur le calcul numérique est de $\pm 0,01 \text{ m/s}$. La figure III.1 représente les deux premiers modes de propagation. Nos résultats font apparaître une parfaite adéquation avec les résultats obtenus dans [TCZ].

Le résultat de cette comparaison est prévisible : nous utilisons les mêmes données, et en supprimant la piézoélectricité du quartz dans le simulateur tout se passe comme si nous utilisons le même modèle. Il est donc normal que les différences entre les vitesses calculées par les deux modèles soient indiscernables sur la figure III.1.

Cette comparaison permet une validation du bon fonctionnement, non seulement de l'interface graphique, mais surtout du couple interface/noyau sur plusieurs points :

- Le mécanisme de substitution de paramètres fonctionne correctement pour l'épaisseur, qui est bien prise en compte.

- La recherche de plusieurs modes de propagation.
- Les résultats sont identiques à ceux obtenus dans [TCZ] (cf. [TCZ] figure II.3, p 66), à la précision des calculs numériques près.

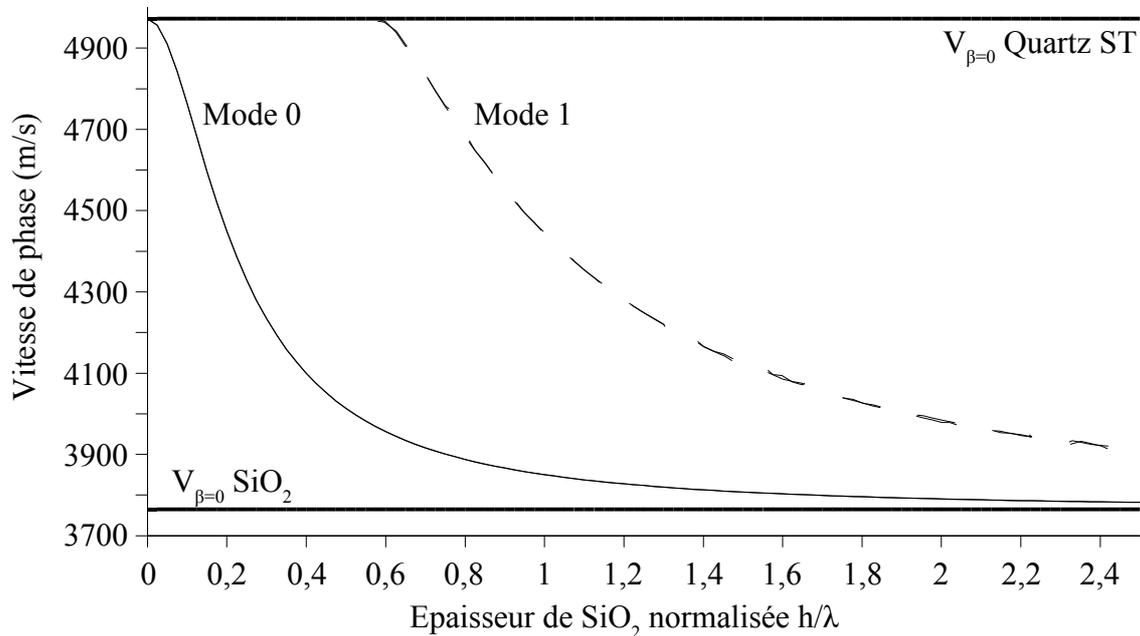


Figure III.1 Vitesses calculées en utilisant une résolution analytique et numérique, en fonction de l'épaisseur de la couche guidante, pour les deux premiers modes (structure quartz ST SiO₂).

III.1.1.b - Vitesse de groupe

Il est présenté dans [TCZ] le calcul de la sensibilité de la fréquence à l'effet de masse à partir de la sensibilité de la vitesse de phase à l'effet de masse, afin de prendre en compte la configuration en oscillateur. Ce calcul fait intervenir la vitesse de groupe. Il est donc nécessaire de disposer de cette fonctionnalité afin de modéliser et d'optimiser le capteur.

III.1.1.b.a - Calcul de la vitesse de groupe

Les vitesses de groupe et de phase sont définies comme :

$$V_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} \text{ et } V_p = \frac{\omega}{k} \tag{Eq.III.1}$$

En reprenant la définition de la dérivée partielle (cf. [TJCA] p. 68, [TCZ] p. 201) on a :

$$V_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \lim_{k' \rightarrow k} \frac{\omega(k') - \omega(k)}{k' - k} = \lim_{k' \rightarrow k} \frac{V_p(k')k' - V_p(k)k}{k' - k} \tag{Eq.III.2}$$

De plus :

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \tag{Eq.III.3}$$

En reportant III.3 dans III.2 on obtient :

$$V_g = \lim_{\lambda' \rightarrow \lambda} \frac{V_p(\lambda')/\lambda' - V_p(\lambda)/\lambda}{1/\lambda' - 1/\lambda} \tag{Eq.III.4}$$

Pour calculer la vitesse de groupe pour une structure dont les IDTs ont une période λ_0 , on calculera la vitesse de phase pour deux structure avec $\lambda' = \lambda_0(1-\epsilon)$ et $\lambda = \lambda_0(1+\epsilon)$:

$$V_g = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{V_p(\lambda_0(1-\epsilon)) \cdot (1-\epsilon) - V_p(\lambda_0(1+\epsilon)) \cdot (1+\epsilon)}{-2\epsilon} \tag{Eq.III.5}$$

Il faut donc prendre ϵ très petit devant 1 : en pratique $\epsilon < 0,00001$ convient.

III.1.1.b.b - Comparaison entre modèles

La comparaison porte sur une structure sur substrat de quartz coupe AT, et une couche guidante de SiO₂ d'épaisseur variable, la longueur d'onde est de 40 μm . Seul le premier mode est calculé.

Là encore, le résultat était prévisible, pour les mêmes raisons que précédemment. Ce résultat permet de confirmer le fonctionnement correct du calcul de la vitesse de groupe.

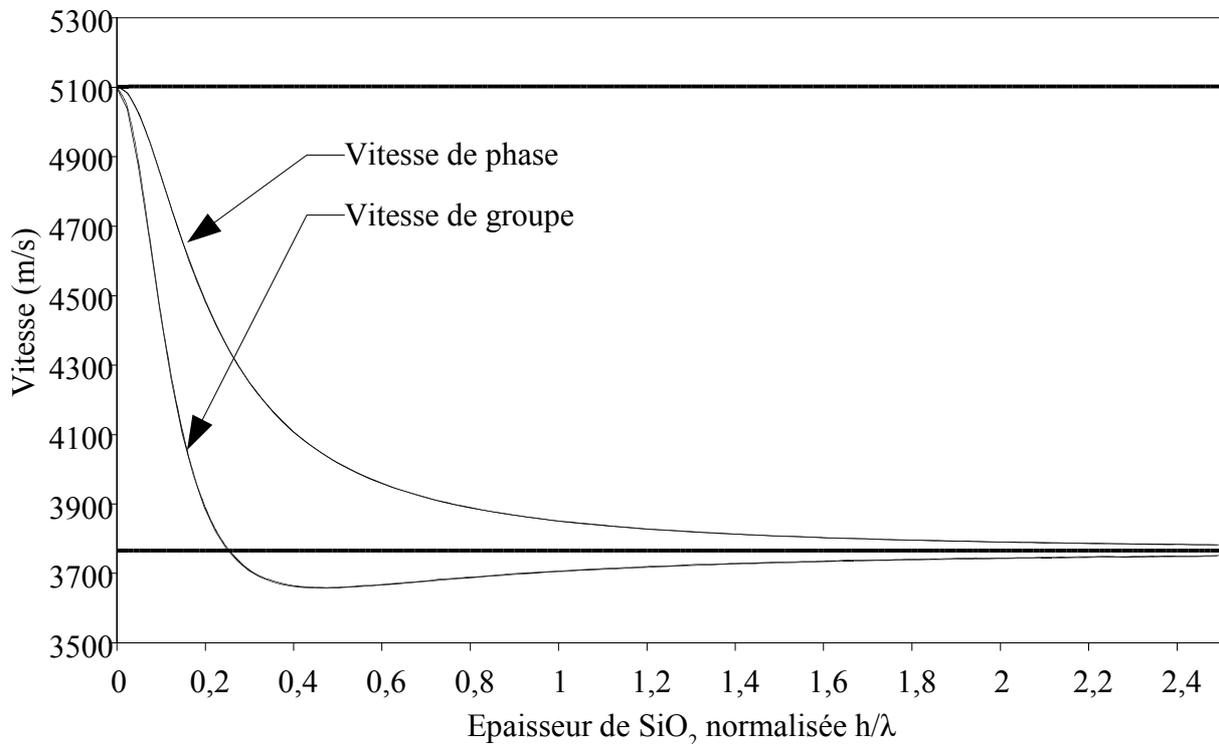


Figure III.2 Comparaison des modèles lors du calcul de la vitesse de groupe. En abscisse, l'épaisseur normalisée. (structure quartz coupe AT/SiO₂), $\lambda = 40 \mu\text{m}$

III.1.1.c - Sensibilité de la vitesse de phase au dépôt d'une couche

La sensibilité de la vitesse de phase au dépôt d'une couche est définie comme la variation de vitesse relative ramenée à la masse surfacique de matière déposée :

$$S_{vd} = \frac{Vp - Vp_0}{Vp_0} \cdot \frac{1}{\rho_{couche} \times h_{couche}} \quad Eq.III.6$$

Où : Vp_0 est la vitesse de phase avant dépôt de la couche, Vp la vitesse de phase après dépôt, ρ_{couche} la masse volumique de la couche, et h_{couche} l'épaisseur de la couche déposée.

La structure modélisée est réalisée sur un substrat de quartz de coupe variant de 80° à 160° , avec une couche de SiO_2 d'épaisseur variable (entre 1 et $10 \mu m$), placée dans l'air. La couche déposée est une couche de PMMA de 500 nm d'épaisseur.

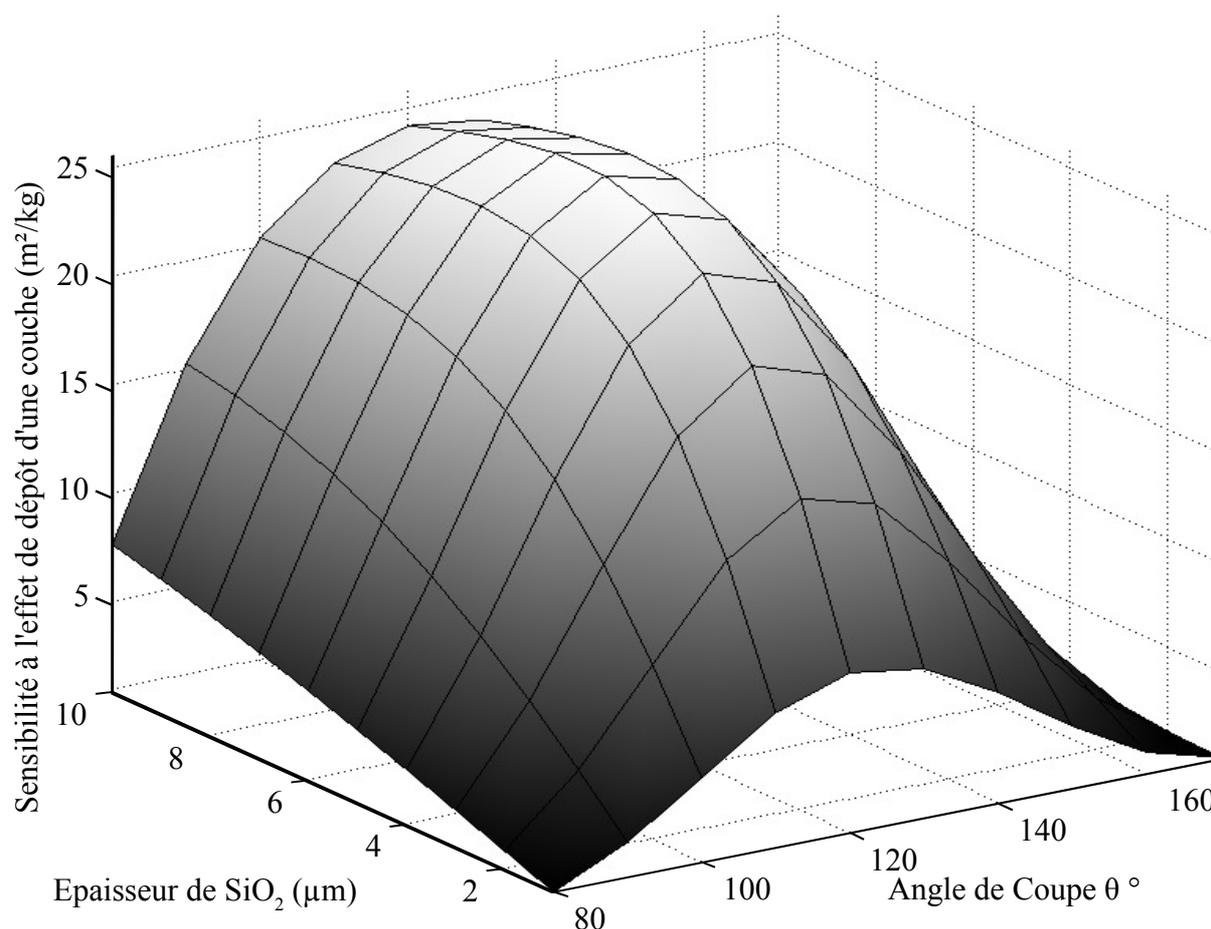


Figure III.3 Sensibilité de la structure au dépôt d'une couche de $0,5 \mu m$ de PMMA

La figure III.3 fait apparaître un maximum de sensibilité pour une coupe de quartz d'environ 120° et une épaisseur de SiO_2 de $4,5 \mu m$. Cette simulation confirme le bon fonctionnement de tous les

organes du simulateur : substitution de plusieurs paramètres (épaisseur de la couche de SiO₂, coupe du quartz), calcul direct d'effets de masse, exportation des résultats de calculs ...

III.1.1.d - Sensibilité à l'effet de masse

La sensibilité de la vitesse à l'effet de masse est définie comme la sensibilité au dépôt d'une couche ; l'effet de masse étant modélisé par une variation de la masse volumique de la couche sensible :

$$S_{vm} = \frac{Vp - Vp_0}{Vp_0} \cdot \frac{1}{\Delta \rho_{couche} \times h_{couche}} \quad Eq.III.7$$

Où : Vp_0 est la vitesse de phase sans l'effet de masse dans la couche sensible, et Vp est la vitesse de phase avec l'effet de masse dans la couche sensible. $\Delta \rho_{couche}$ est la variation de masse volumique due à l'augmentation de la masse de la couche, à volume supposé constant. C'est par ce biais que nous modéliserons l'effet de la sorption d'un composé dans une couche. Cette hypothèse suppose que la sorption s'effectue sans effet de gonflement.

La structure simulée est basée sur un substrat de quartz de coupe variant de 80° à 160°, avec une couche de SiO₂ d'épaisseur variable (entre 1 et 10 μm), et une couche de PMMA d'épaisseur 0,5 μm, placée dans l'air. L'augmentation de la masse volumique du PMMA est de 5%.

Nous obtenons un maximum de sensibilité (cf. figure II.5) pour la même coupe et la même épaisseur que précédemment. Nous constatons là encore le bon fonctionnement de la modélisation.

En termes d'optimisation de structures, ces simulations sont intéressantes car elles permettent de dégager un maximum de sensibilité pour une épaisseur de couche guidante d'environ 5,5 μm d'épaisseur et une coupe de quartz proche de la coupe AT.

Au travers de la coupe du quartz, proche de la coupe AT, c'est en fait la vitesse $V_{\beta=0}$ qui est la plus élevée pour le quartz, assurant le maximum d'écart possible des vitesses $V_{\beta=0}$ du guide et du substrat. Enfin, pour un matériau de couche guidante choisi, l'épaisseur est le seul paramètre qui influe sur la sensibilité à l'effet de masse. Ces deux points prendront une importance particulière au paragraphe III.4 - Optimisation de structures – matériaux virtuels, p. 118, car ils justifient le choix de la coupe AT pour ces simulations et celui d'optimiser l'épaisseur pour chaque matériau de couche guidante.

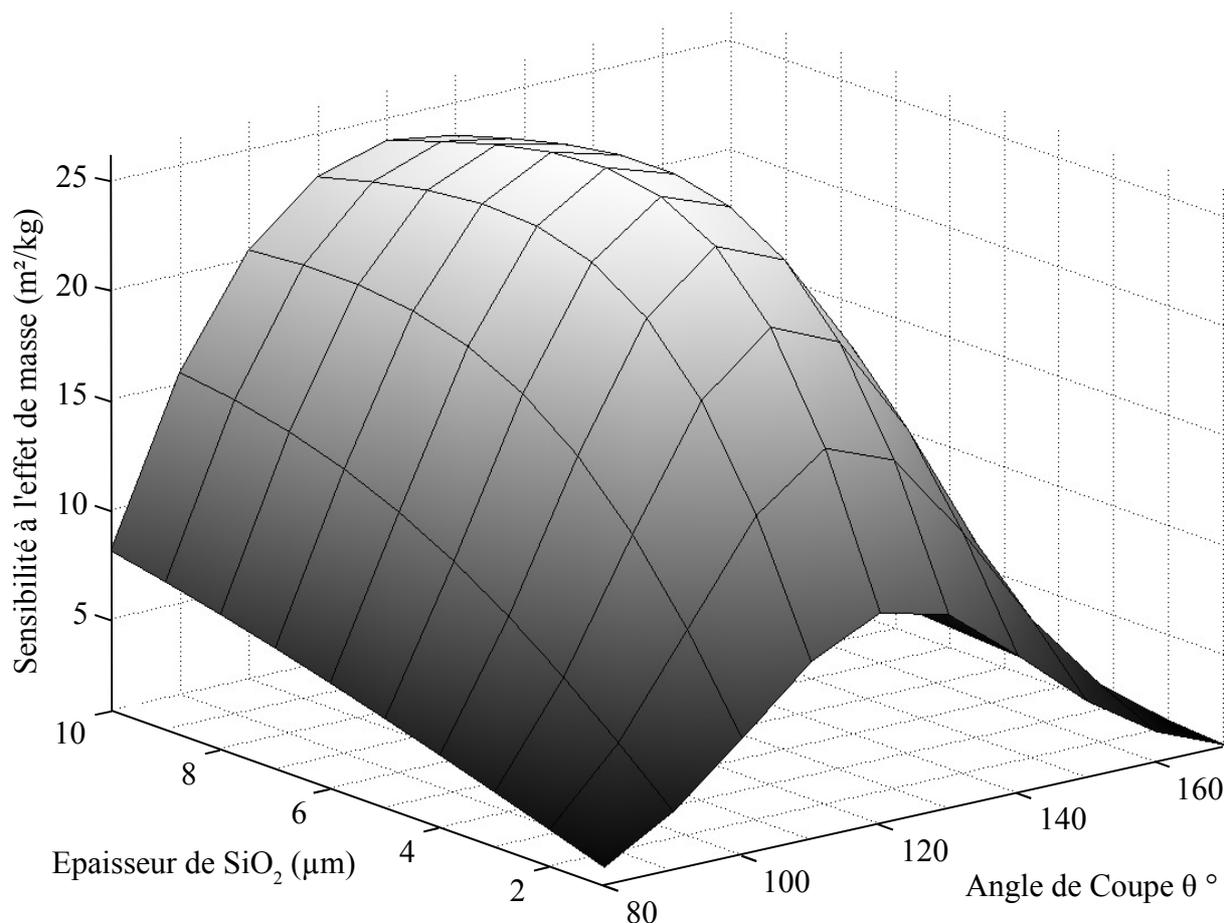


Figure III.4 Sensibilité à l'effet de masse d'une structure Quartz/SiO₂, $\lambda=40 \mu\text{m}$, avec une couche de PMMA de $0,5 \mu\text{m}$ d'épaisseur.
L'augmentation de la masse volumique du PMMA est de 5%

III.1.2. A partir des résultats issus de [TOT]

III.1.2.a - Effet de la viscosité - liquide Newtonien

La réponse du capteur à la viscosité a été menée théoriquement et expérimentalement [TOT], il est donc possible de comparer le modèle avec à la fois la théorie et l'expérience. La structure est un substrat de quartz coupe ST ($\theta=132,75^\circ$) et une couche guidante de SiO₂ de $6 \mu\text{m}$ d'épaisseur, la longueur d'onde est de $52 \mu\text{m}$. La valeur du module transverse du SiO₂ sera prise égale à $2,5 \cdot 10^{10} \text{Pa}$, valeur déterminée par ajustement (fit) de calculs théoriques sur des mesures expérimentales [TCZ].

Le protocole expérimental de mesure de la variation de fréquence en fonction de la viscosité est décrit dans [TOT] pages 124-127, et consiste à augmenter la proportion de glycérol dans un mélange eau/glycérol par incréments, augmentant ainsi progressivement la viscosité du mélange. Bien que la masse volumique varie légèrement en fonction des proportions du mélange, nous

devons, pour respecter le protocole, garder pour la masse volumique du mélange celle de l'eau pure : 1000 kg/m^3 . Les mesures ont été effectuées en configuration oscillateur.

La figure III.5 montre que le modèle développé dans cette étude semble plus apte à décrire l'expérience, mais il faut se rappeler que la variation de masse volumique du mélange n'est pas prise en compte.

Le point important est le relatif désaccord qui apparaît entre les modèles : avec les mêmes valeurs initiales pour les paramètres on devrait, à priori, retrouver les mêmes valeurs, comme lors de la comparaison avec les résultats théoriques du paragraphe III.1.1. En fait l'eau est un fluide maxwellien. Aux basses viscosités le comportement newtonien prédomine sur le comportement maxwellien (cf. paragraphe suivant). [TOT] utilise directement un modèle newtonien, alors que nous utilisons un modèle maxwellien, ce qui explique l'écart des résultats théoriques des deux modélisations.

Au delà du résultat des simulations, il est important de remarquer qu'à travers l'augmentation de la viscosité du liquide on augmente les pertes du dispositif, de ce fait on augmente l'écart entre les racines des parties réelles et imaginaires. Dans cette comparaison avec les résultats issus de [TOT], nous avons classiquement recherché les minimums du module du déterminant sans procéder au rapprochement des racines des parties réelles et imaginaires (cf. paragraphe II.3.1.a.c - Zéros de la partie réelle et imaginaire) par l'ajout de la recherche des pertes par propagation.

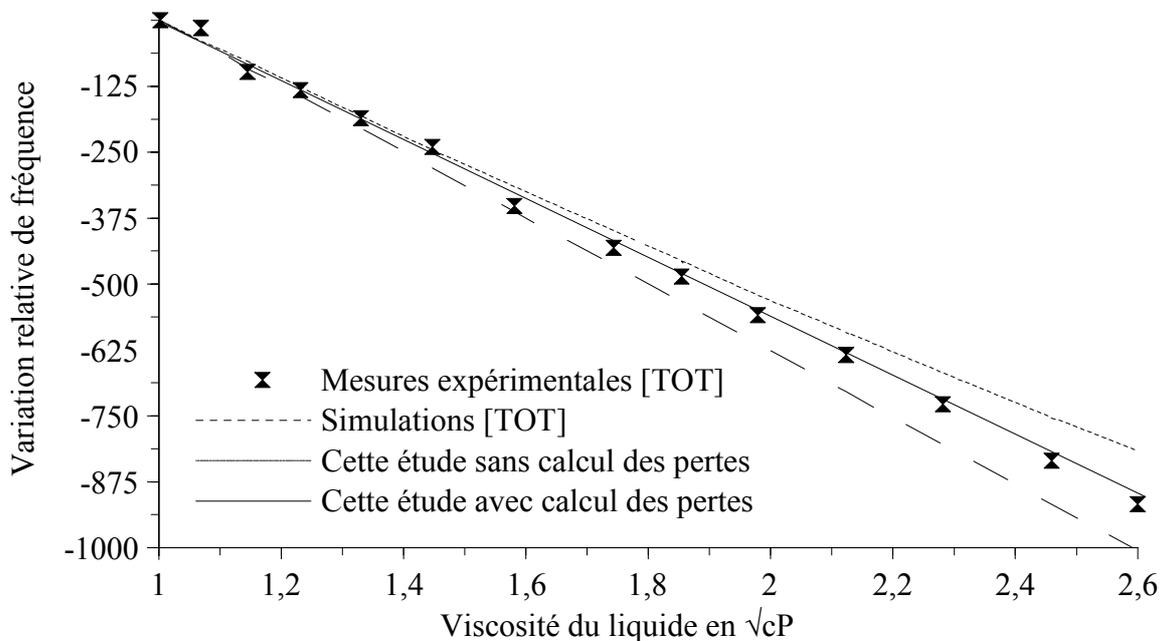


Figure III.5 Variation relative de fréquence d'un liquide Newtonien. Comparaison expérience et théories.

La figure III.6 représente l'écart entre les racines des parties réelles et imaginaires du déterminant en fonction de la viscosité. Sans présumer du lien mathématique entre la viscosité, la vitesse de phase et les pertes par propagation, on peut établir intuitivement que plus le liquide est visqueux, plus il y a de pertes, et plus l'erreur commise en ne les calculant pas est grande. C'est ce qu'indique la figure III.6.

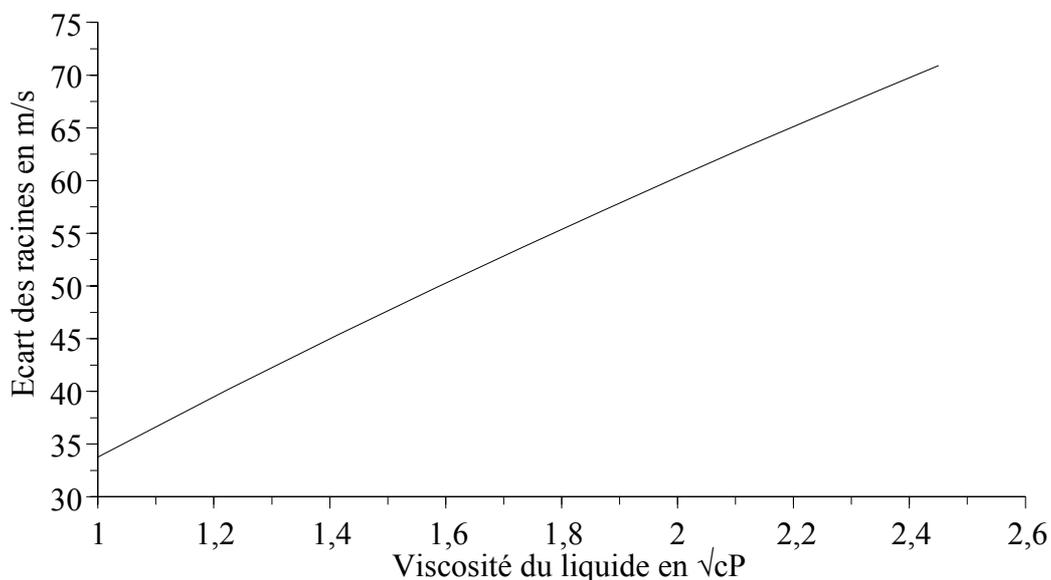


Figure III.6 Ecart entre les racines de parties réelles et imaginaires en fonction de la viscosité

Cependant, les dernières évolutions du noyau permettent d'effectuer des calculs de vitesse de phase en prenant en compte les pertes par propagation. C'est la courbe continue présentée figure III.5. On constate que l'ajout du calcul des pertes par propagation permet au modèle une bonne adéquation avec les résultats expérimentaux. De plus, l'écart entre les zéros des racines des parties réelles et imaginaires est si faible dans ce cas, que la valeur du déterminant de la matrice de transfert global est inférieur à 10^{-8} , contre 10^2 sans recherche des pertes par propagation.

Toutefois, ce dernier calcul a été effectué sans tenir compte de la piézoélectricité du quartz, car l'algorithme de recherche de la vitesse de phase et des pertes n'est pas assez robuste pour contourner toute la complexité de la fonction du déterminant de la matrice de transfert globale dans ce cas, cf. paragraphe II.3.2.e - Recherche des zéros du déterminant, page 74.

III.1.2.b - Effet de la viscoélasticité - liquide Maxwellien

Le module transverse équivalent d'un liquide de Maxwell est donné par :

$$\mu_{\text{equiv}} = \frac{j \omega \eta}{1 + j \omega \frac{\eta}{\mu}}$$

La figure III.7 illustre la transition du comportement Newtonien, dans lequel le dénominateur est proche de 1, au comportement Maxwellien dans lequel le terme $\omega \frac{\eta}{\mu}$ domine au dénominateur et μ_{equiv} tend vers μ , c'est à dire que, à haute fréquence, le liquide Maxwellien se comporte comme un solide.

Lorsque la viscosité η augmente, le terme $\omega \frac{\eta}{\mu}$ devient grand devant 1 de plus en plus tôt en fréquence, ce qui explique la diminution de la variation relative de vitesse sur la figure III.7.

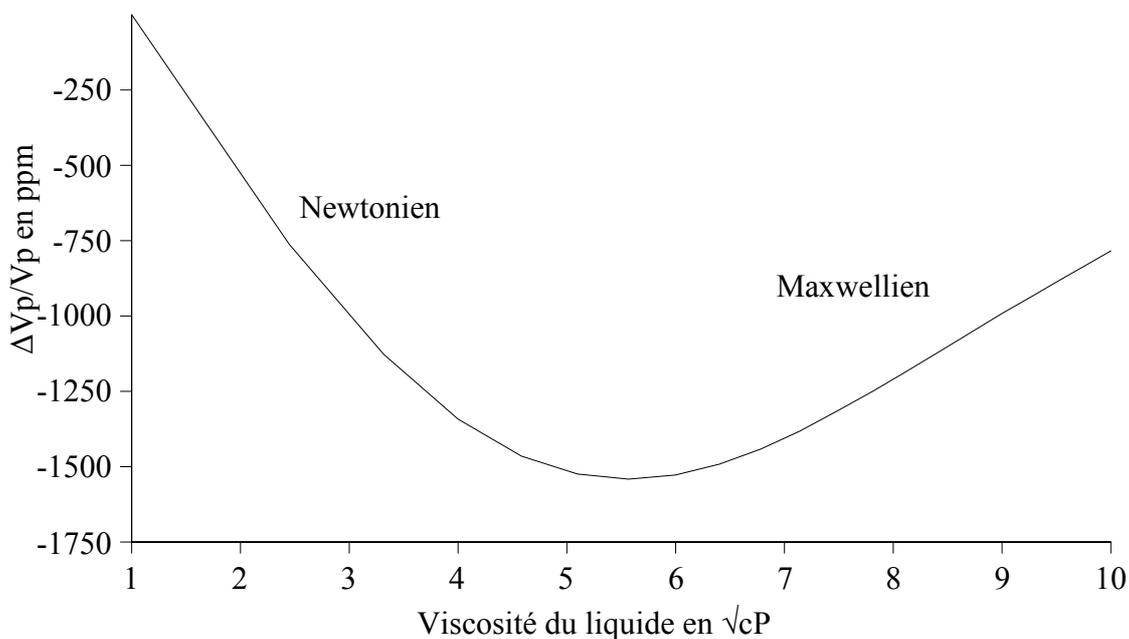


Figure III.7 Variation relative de vitesse de phase d'un liquide Maxwellien

L'état rhéologique initial du fluide est à prendre en compte, car aux petites variations de viscosité autour de l'état initial, les variations relatives de vitesse, et donc de fréquence, sont opposées dans les régimes Newtoniens et Maxwelliens.

III.1.3. Effets des variations du module de rigidité transverse

Dans ce paragraphe nous nous intéressons à la dépendance de la vitesse de phase au module de rigidité transverse complexe ($G^* = G' + jG''$, solide visqueux) de la couche sensible d'une structure sur substrat de quartz, coupe AT, avec un guide de PMMA d'épaisseur variable, et une couche sensible PMMA, d'épaisseur fixe de $0,3\mu\text{m}$ (cf. chapitre II, paragraphe II.2.3 - Cas des polymères, page 50 pour la description de G^* , G' et G'').

Cette étude est particulièrement intéressante pour l'étude des polymères car ils présentent des caractéristiques intéressantes en vue d'améliorer la sensibilité de dispositifs (cf. paragraphe III.4 - Optimisation de structures – matériaux virtuels), mais leur nature fait que leurs modules de rigidité peuvent varier de façon importante.

L'intérêt d'utiliser des matériaux polymères comme le PMMA vient du contrôle possible de leur rigidité grâce au contrôle de la réticulation des chaînes de polymères. De plus, les épaisseurs en jeu dans ce paragraphe sont des épaisseurs réalisables expérimentalement. Le module de stockage G' du PMMA, supposé purement élastique, variera de 10^6 à $2,8 \cdot 10^{10}$ Pa (une valeur supérieure ne permet plus de respecter le critère sur les vitesses). Il a pour valeur réelle 1,1 GPa [Slob73].

Dans un premier temps nous étudierons la sensibilité de la vitesse de phase à des variations du module stockage (G') pour un PMMA supposé purement élastique, puis à des variations du module de pertes (G'') pour les trois comportements viscoélastiques de base (vitreux, zone de transition vitreuse et caoutchouteux). A chaque fois nous comparerons la sensibilité obtenue à la sensibilité à l'effet de masse de la structure. Les sensibilités calculées sont des variations relatives de vitesse de phase.

III.1.3.a - Sensibilité aux variations du module d'élasticité transverse

Il est intéressant de comparer la sensibilité de la vitesse pour des variations de module de rigidité à celle pour des variations de masse volumique. Les effets appliqués sont une augmentation de 5% de la valeur du paramètre : de 1100 kg/m^3 à 1155 kg/m^3 pour la masse volumique et 1,1 GPa à 1,155 GPa pour le module de rigidité.

Cette comparaison est réalisée (cf. figure III.8) pour des épaisseurs de couche guidante croissantes de $0,3$ à $3 \mu\text{m}$, afin de faire apparaître la sensibilité à l'effet de rigidité lorsque l'on est à l'épaisseur optimale pour la sensibilité à l'effet de masse.

Il apparaît clairement sur la figure III.8 que la sensibilité de la vitesse de phase à la variation de rigidité est toujours inférieure à la sensibilité à l'effet de masse dans la zone utile.

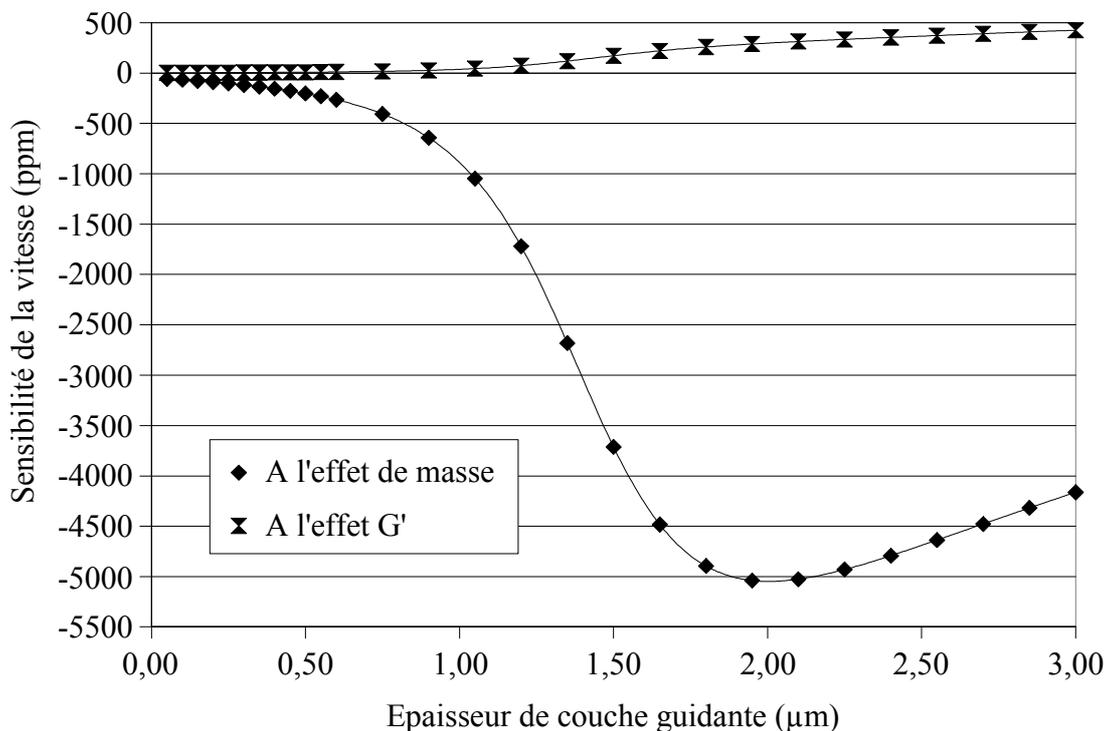


Figure III.8 Comparaison de la sensibilité à l'effet de masse et de rigidité d'une même structure, pour diverses épaisseurs de couche guidante

L'origine de cette prédominance de l'effet de masse sur l'effet de rigidité est difficile à cerner car ces deux paramètres contribuent identiquement à la vitesse de l'onde de volume dans un matériau, de plus, les valeurs numériques du coefficient de rigidité sont nettement plus élevées que celles de la masse volumique, et on aurait pu s'attendre à ce que les variations de vitesse de phase dues à des variations du module transverse de rigidité masquent celles de masse volumique. Or il n'en est rien, et l'effet de masse domine.

L'origine de cette sensibilité supérieure se situe sans doute dans les équations de propagation : il intervient un produit masse volumique*vitesse de phase de l'onde de Love, alors qu'aucun produit rigidité*vitesse de phase de l'onde de Love n'intervient.

III.1.3.b - Sensibilité aux variations du module de pertes d'un solide

Dans ce paragraphe nous étudions la sensibilité du capteur pour un effet de masse (S_{vm}), et pour une augmentation du module de pertes de la couche sensible ($S_{vG''}$). Les valeurs prises par les modules de stockage et de perte sont résumées dans le tableau III.1 (cf. la représentation rhéologique figure III.9).

<i>Comportement viscoélastique</i>	<i>G' (Pa)</i>	<i>G'' (Pa.s)</i>
Vitreux	10^9	10^6
Zone de transition vitreuse	10^8	10^7
Caoutchouteux	10^6	10^6

Tableau III.1 Valeurs en Pa et Pa.s des parties réelles (module de stockage) et imaginaires (module de pertes) du module de rigidité transverse complexe, valeurs d'après [Luc99], en fonction du domaine rhéologique.

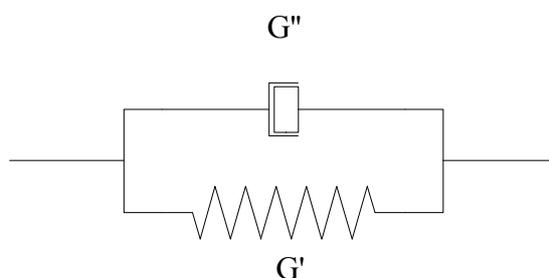


Figure III.9 Représentation rhéologique d'un solide élastique purement visqueux.

Un point important sur les résultats de simulations présentés dans ce paragraphe est qu'elles sont réalisées en calculant les pertes par propagation, comme au paragraphe III.1.2.a lors de calculs de vitesses de phase pour des milieux liquides de viscosités croissantes, mais sans la piézoélectricité pour les mêmes raisons. Nous présenterons aussi l'influence des effets de masse et de module de pertes sur les pertes par propagation, dont les sensibilités seront notées respectivement $S_{\delta m}$ et $S_{\delta G''}$.

La figure III.10 représente les sensibilités pour une structure sur substrat de quartz coupe AT, avec une couche guidante de PMMA dans la zone vitreuse, dont on fait changer l'épaisseur, et une couche sensible, d'épaisseur fixe de $0,3 \mu\text{m}$, dont la densité est de 1100 kg/m^3 , et dont le module de rigidité transverse complexe prend successivement, pour chaque graphe de la figure, les valeurs du tableau III.1.

L'effet de masse est modélisé en augmentant de 5% la masse volumique de la couche sensible, et l'effet sur le module de pertes par une multiplication par 10 du coefficient G'' . Chaque sensibilité est

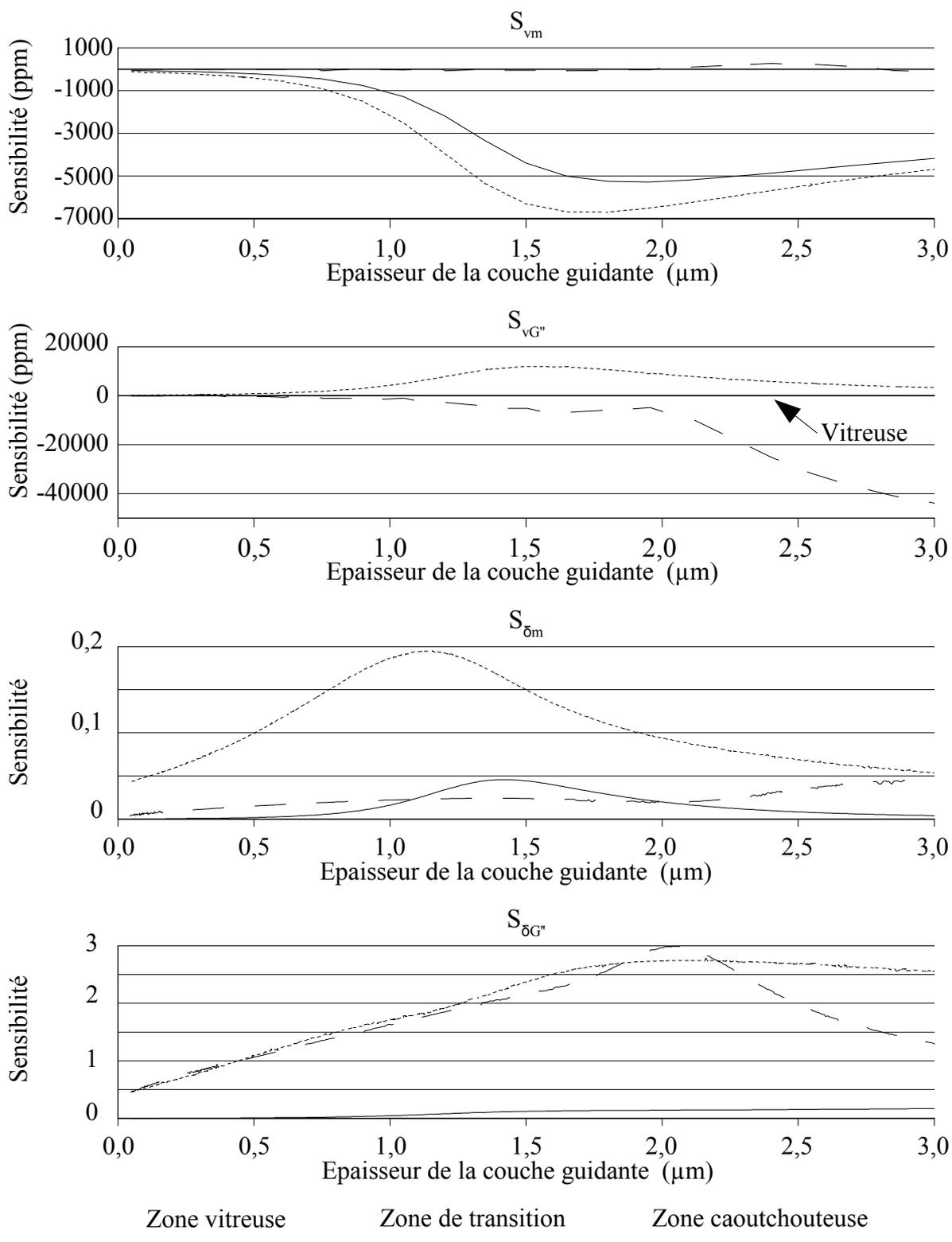


Figure III.10 Influence du domaine rhéologique (légende au bas de la figure) sur la sensibilité (cf. titre de chaque graphique), en fonction de l'épaisseur de couche guidante pour les trois domaines rhéologiques principaux.

	<i>Sensibilité maximale de la vitesse de phase (ppm)</i>			
	S_{vm}	Epaisseur	$S_{vG''}$	Epaisseur
Vitreux	-5 300	1,95	1,11	2,2
Transition	-6 000	1,8	12000	1,5
Caoutchouteux	250	2,4	>> effet de masse	

Tableau III.2 Epaisseurs (μm) pour lesquelles on a S_{vm} et $S_{vG''}$ (ppm) maximales.

Nous pouvons constater que l'influence de la viscosité sur la vitesse de phase est plus importante que celle de l'effet de masse (graphes du haut), excepté pour une couche vitreuse. Or pour favoriser les mécanismes de sorption les couches sensibles sont plutôt de type zone de transition/caoutchouteux.

Nous voyons, tableau III.2, que pour la zone de transition les sensibilités S_{vm} et $S_{vG''}$ sont du même ordre de grandeur et opposées. Il existe donc très probablement un couple de valeurs de G' et G'' telles que les deux effets se compensent. Par exemple, en faisant l'hypothèse que $S_{vG''}$ est linéaire, un facteur 5 au lieu de 10 pour l'effet de viscosité conduirait à une sensibilité apparente très inférieure, voire nulle, à S_{vm} ou $S_{vG''}$, ce qui pourrait se produire expérimentalement.

Nous pouvons voir que l'influence du domaine rhéologique n'est pas monotone sur la sensibilité de la vitesse à l'effet de masse (graphe ligne du haut à gauche, figure III.10) : si le passage de la zone vitreuse à la zone de transition conduit à une augmentation de la sensibilité, lorsqu'on passe en zone caoutchouteuse, la sensibilité décroît. Pour en comprendre la raison, il faut observer les vitesses de propagation dans chacun des trois domaines rhéologiques, et les comparer avec la vitesse de phase d'un capteur sans couche sensible, cf. figure III.11.

Nous pouvons constater sur la figure III.11 que la vitesse de phase sans couche sensible est quasiment égale à celle d'une structure comprenant une couche sensible caoutchouteuse. De ce point de vue, la couche sensible caoutchouteuse a quasiment autant d'influence sur la propagation que l'air qui la remplace lorsqu'on la supprime. Ceci peut s'interpréter empiriquement par la combinaison entre l'« attrait » de la couche pour l'énergie acoustique, c'est à dire son impédance acoustique, et la quantité d'énergie que cette couche peut stocker.

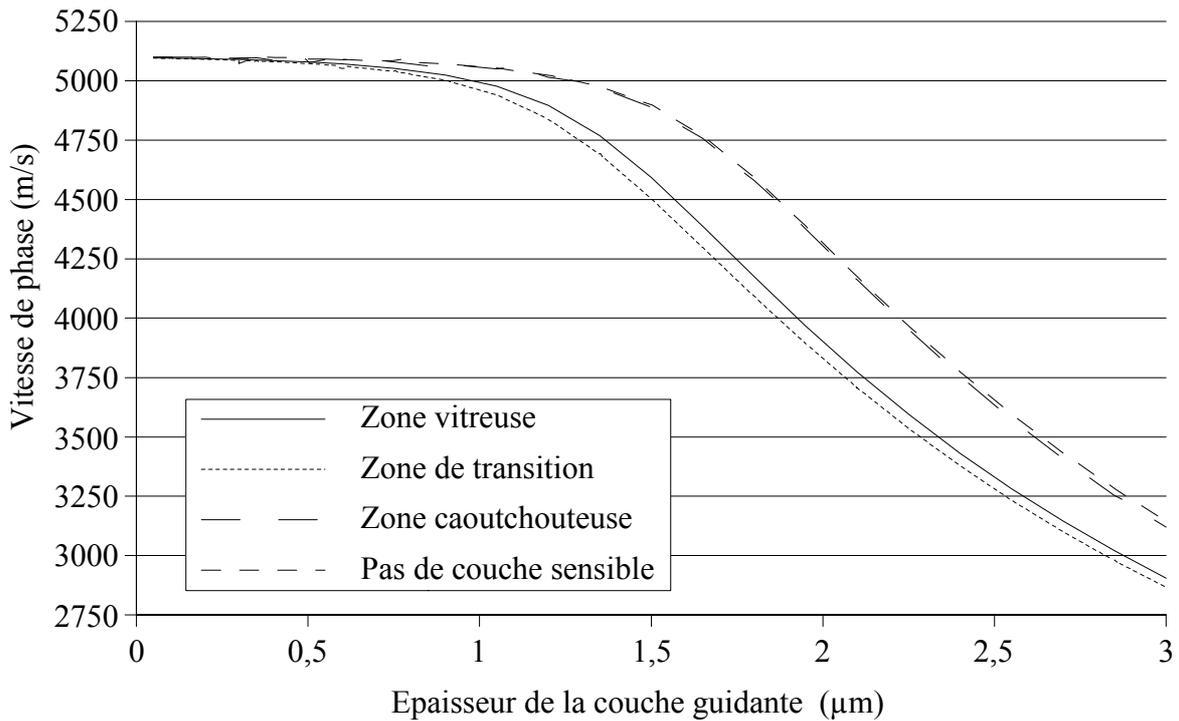


Figure III.11 Comparaison des vitesses de phase de différentes structures

Lorsque le module de rigidité diminue l'impédance acoustique diminue, permettant à la couche d'attirer l'énergie acoustique, mais diminue aussi la quantité d'énergie que la couche va pouvoir stocker sous forme élastique. En effet, l'expression de cette énergie potentielle donnée par [EDieul1] :

$$e = \frac{1}{2} G' S_{ij} S_{kl} \quad \text{Eq.III.8}$$

Où S_{ij} et S_{kl} sont les déformations du solide.

Pour qu'une couche influe significativement sur la propagation, il faut qu'elle contienne une partie significative de l'énergie totale présente dans la structure, or si la diminution de l'impédance acoustique de la couche va dans ce sens, il n'en est pas de même pour l'énergie emmagasinée.

Si la sensibilité augmente lorsque la couche passe du domaine vitreux au domaine caoutchouteux, cela veut dire que le confinement est amélioré dans la couche sensible. Comme le matériau est moins rigide, cela veut dire que l'amplitude de ses déformations a augmenté, faisant même plus que compenser la diminution de G' .

Lorsque la couche sensible devient caoutchouteuse le module de rigidité devient très faible. La figure III.11 nous montre que la vitesse de phase dans ce cas est à peine plus perturbée qu'avec l'air : les vitesses de phase avec et sans cette couche sont très proches.

La figure III.12 présente les pertes par propagation, pour les trois domaines rhéologiques étudiés. La longueur du chemin acoustique étant généralement de l'ordre d'une centaine de fois la longueur d'onde il apparaît que l'épaisseur de la couche guidante, même dans le domaine vitreux, doit être limitée afin de réaliser des dispositifs fonctionnels.

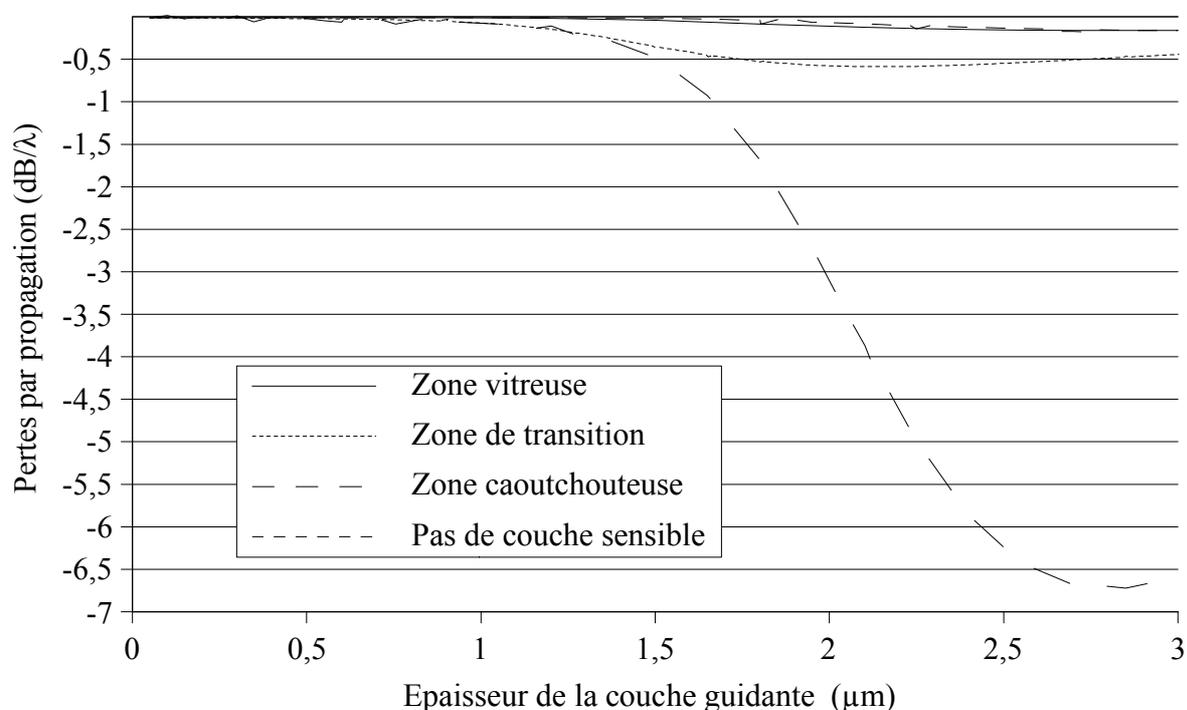


Figure III.12 Pertes par propagation, en dB/longueur d'onde, en fonction de l'épaisseur de la couche guidante.

Nous pouvons constater, figure III.12, que la couche sensible caoutchouteuse a une influence catastrophique sur les pertes par propagation, alors qu'elle n'en a pas sur la vitesse de phase. Les pertes d'un capteur avec une couche sensible caoutchouteuse augmentent rapidement par rapport à celles du capteur sans couche sensible et sont les plus élevées. Nous avons vu que la couche caoutchouteuse se comportait comme l'air vis à vis de la vitesse de phase. Nous pouvons être plus précis : la couche est équivalente à un fluide dissipatif, donc visqueux, ce qui est cohérent avec la valeur de G'' . Et c'est logiquement que les pertes par propagation dans la structure sans couche sensible sont équivalentes à celles dans une structure avec une couche sensible vitreuse, celle-ci dissipant peu d'énergie.

Il est intéressant de vérifier que les instruments de mesure peuvent permettre d'accéder aux variations de pertes par propagation, du moins pour la zone de transition et pour la zone caoutchouteuse. Nous nous placerons dans le cas d'un effet de masse pour une couche sensible dans la zone caoutchouteuse (cf. tableau III.3).

	<i>Sensibilité maximale des pertes par propagation</i>			
	$S_{\delta m}$	Epaisseur	$S_{\delta G''}$	Epaisseur
Vitreuse	0,04	1,5	0,17	>3,0
Transition	0,19	1,1	2,74	2,1
Caoutchouteuse	0,05	>3,0	2,95	2,1

Tableau III.3 Epaisseurs (μm) pour lesquelles on a $S_{\delta m}$ et $S_{\delta G''}$ maximales.

Pour une épaisseur de 1,5 μm nous avons 0,04 dB/ λ d'atténuation, avec $S_{\delta m} = 0,04$. Or $S_{\delta m}$ est définie comme la variation relative de pertes, pour remonter à la variation absolue, il suffit de multiplier $S_{\delta m}$ par la valeur des pertes, soit une variation de $0,04 \times 0,04$ dB/ λ .

Nous avons en général des chemins de propagation de 125 longueurs d'onde, soit un total de pertes par propagation dans le chemin acoustique de $0,04 \times 0,04 \times 125$ dB = 0,2 dB.

Cette variation est largement dans les gammes de mesures possibles d'instruments tels que le wattmètre microonde et dont la précision peut aller jusqu'à 0,1% sur la mesure en dB. De plus, nous avons pris ici le cas de couche dans la zone vitreuse, il faut donc voir cette variation de pertes comme un minimum.

Enfin, pour conclure sur la nécessité du calcul des pertes par propagation, nous comparons figure III.13 les résultats de simulations pour des sensibilités de vitesses de phase à l'effet de masse sans (courbes sans marqueurs) et avec (courbes avec marqueurs) le calcul des pertes par propagation.

Si pour une couche sensible vitreuse les résultats sont assez proches, car le module de pertes est faible (en fait, les deux courbes continues avec et sans marqueurs sont superposées sur la figure III.13), les résultats dans la zone de transition et surtout dans la zone caoutchouteuse sont complètement différents tant pour les valeurs de sensibilité que pour les épaisseurs optimales.

On constate encore que pour une couche sensible dans la zone de transition, l'écart entre les résultats diminue lorsque l'épaisseur de couche guidante, de type vitreuse, devient importante devant celle de la couche sensible. Il en est de même pour des épaisseurs supérieures à celles représentées sur la figure III.13 dans le cas de couches sensibles de type caoutchouteux. Ceci est logique car l'importance de la couche sensible devient mineure devant la couche guidante qui est de type vitreux, or, pour un matériau vitreux la prise en compte des pertes par propagation n'est pas obligatoire.

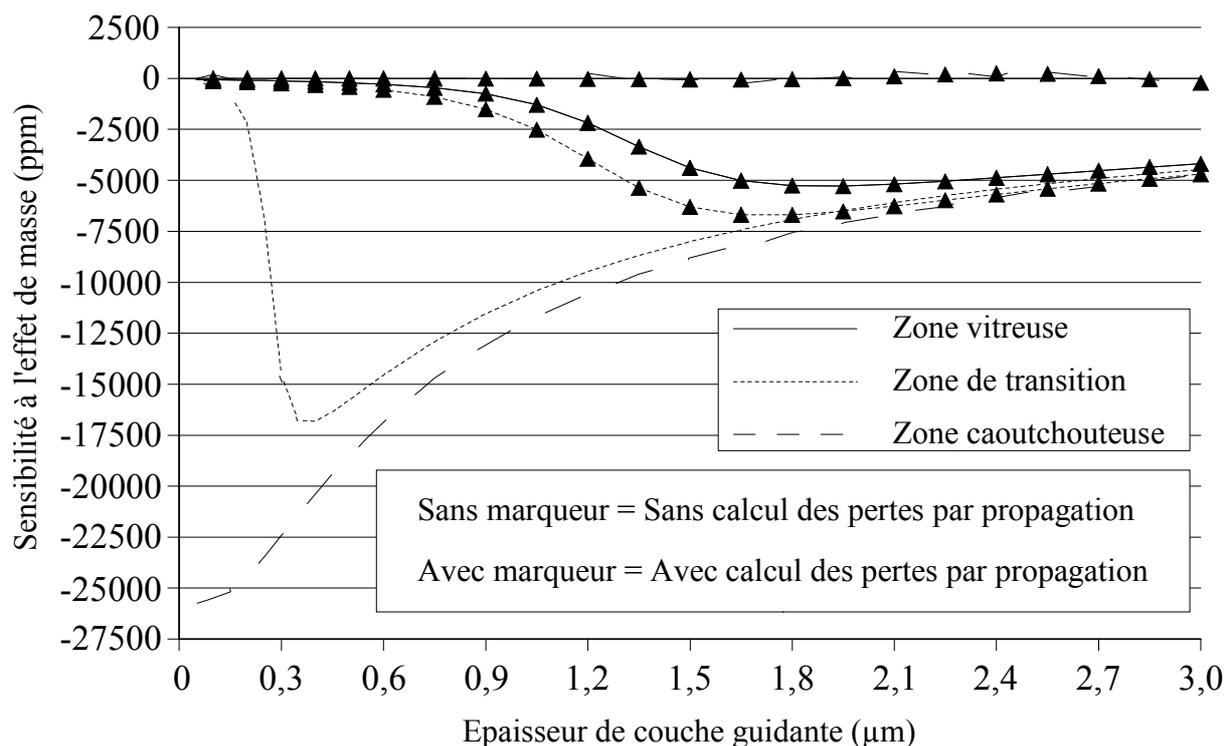


Figure III.13 Comparaison de S_{vm} sans et avec calcul (courbes avec marqueur) des pertes par propagation.

III.2. Validation de la prise en compte de la température

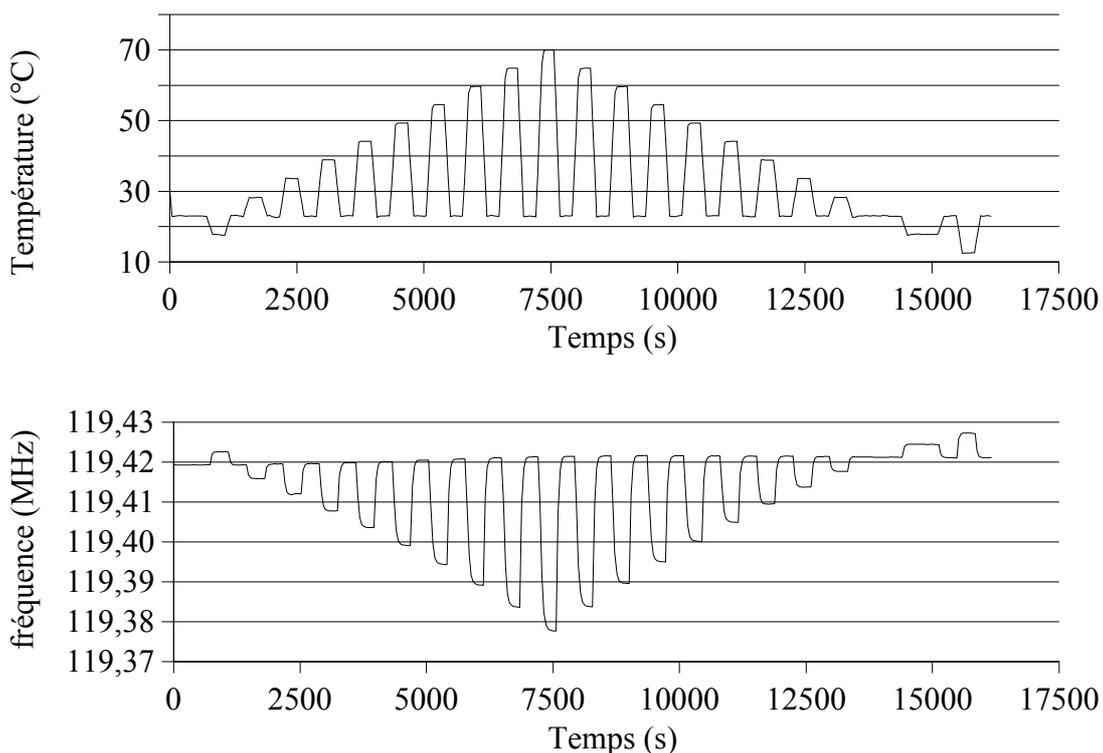
Nous avons évoqué au paragraphe II.4-Autres fonctionnalités (page 84) la façon dont l'influence de la température est prise en compte dans la modélisation. Des manipulations de cyclage thermique ont été réalisées afin de vérifier le fonctionnement de cet aspect de l'outil de modélisation.

Les capteurs utilisés ont un substrat de quartz coupe AT (121°), un plan métallique composé d'une couche de 40 nm de titane et 60 nm d'or, et une couche guidante de SiO_2 . Quatre épaisseurs de SiO_2 ont été utilisées : 3,5, 3,7, 3,8 et 4,5 μm. La longueur d'onde est de 40 μm.

Les manipulations ont été réalisées à l'aide d'une enceinte thermique pilotée. La température varie suivant des échelons, la fréquence est mesurée (cf. figure III.14). La sensibilité est calculée comme la variation relative de fréquence, la fréquence de référence étant prise à 20 °C.

En revanche il manque de nombreux paramètres pour réaliser les simulations : la variation des coefficients de rigidités en fonction de la température pour le titane et l'or, et d'une manière générale pour tous les matériaux, les valeurs de leurs paramètres en couche mince. De plus la prise en compte de la dilatation n'est que partielle (cf. paragraphe II.4-Autres fonctionnalités, page 84).

Comme nous pouvons le constater sur la figure III.15, mesures et simulations ne sont pas en parfait accord, et présentent un écart de près de 100 %. Les simulations ont montré une forte



*Figure III.14 haut : séquence d'échelons de température appliquée aux capteurs.
Bas : réponse du capteur.*

influence des couches métalliques présentes dans la structure, ce qui laisse à penser que l'information de la dépendance à la température de leurs coefficients de rigidité est la cause principale de l'écart observé.

Toutefois nous pouvons constater que d'une épaisseur à l'autre les différences de sensibilité entre théorie et pratique sont quasiment proportionnelles en fonction de la température : un ajustement (fit) les superpose, mais il n'aurait aucun sens physique (ou trop de sens possibles), c'est pourquoi nous nous en sommes abstenus figure III.15.

La littérature présente des études ([Du96], [Her99_1]) du comportement en température de la structure quartz/SiO₂. De telles études n'ont pas été réalisées pour des couches guidantes polymères en raison du manque de données sur ces matériaux, et sont une source motivation supplémentaire pour le développement de la méthode de caractérisation présentée au paragraphe suivant.

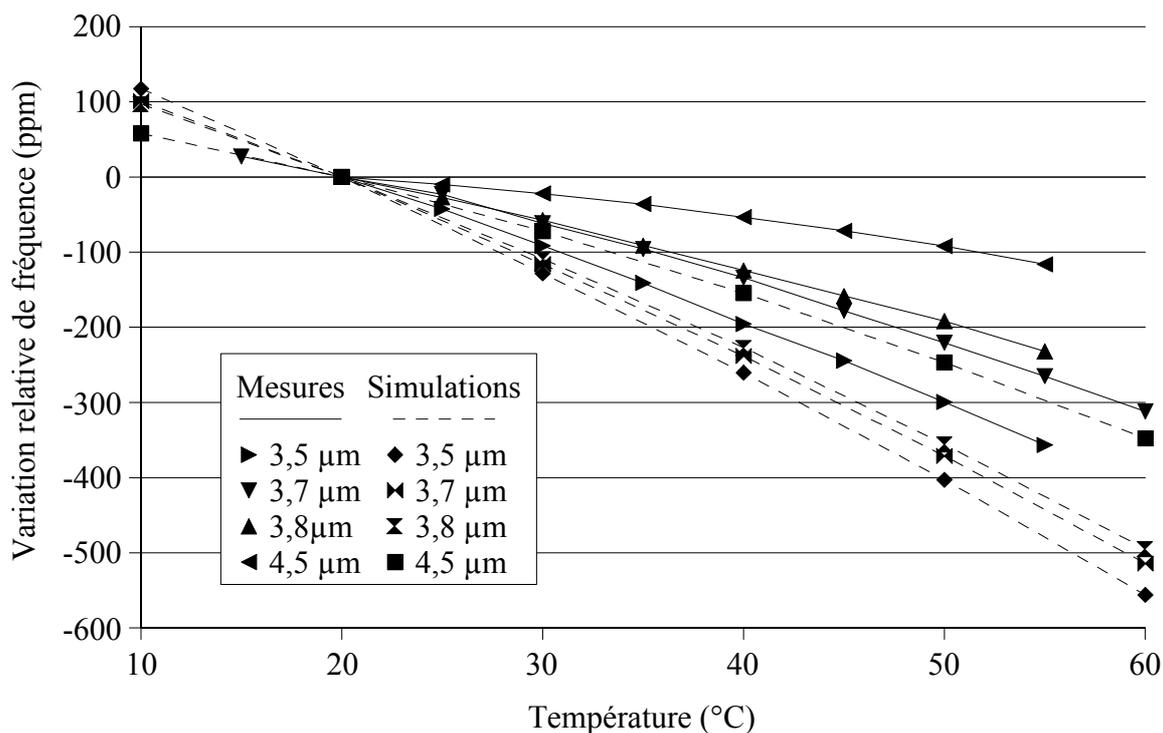


Figure III.15 Sensibilité aux variations de températures mesurées (trait continu) et simulées (trait interrompu).

III.3. Caractérisation de couches de matériaux isotropes

Nous avons évoqué en introduction l'inadéquation entre les valeurs des paramètres physiques donnés dans la littérature et les valeurs qu'ils prennent lorsqu'ils sont utilisés dans nos structures. Cette inadéquation a deux origines : la fréquence mécanique de fonctionnement de nos capteurs et le caractère film mince de nos couches.

La littérature donne, en général, les valeurs des paramètres à basse fréquence, et pour des matériaux volumiques. Or en couches minces (du nm au µm), la technique d'élaboration de la couche a une grande importance sur les paramètres physiques du matériau. Les valeurs de rigidité sont obtenues généralement par des techniques de mesure telles que l'ellipsométrie ou la nanoindentation.

Mais ces techniques ne peuvent fournir que la masse volumique de l'échantillon. Cette limitation conduit à une source d'incertitudes puisqu'il nous faut alors nous reporter sur la littérature pour en connaître la masse volumique.

Nous avons donc mis au point une méthode de caractérisation *in-situ* de matériaux isotropes. Cette méthode se base sur la très bonne connaissance des paramètres mécaniques d'un substrat piézoélectrique, et sur la très faible influence de l'air sur la propagation de l'onde. En effet, les

substrats piézoélectriques font exception à ce qui a été écrit plus haut : ils sont en général très bien référencés car utilisés depuis de nombreuses années pour la réalisation de dispositifs à ondes de surface. De plus ce sont des matériaux volumiques découpés, dont les caractéristiques font l'objet d'une étude rigoureuse, notamment par les organisations IEEE [IEEEStand] et IEC [IEC] : dans le cas du quartz, nous disposons des coefficients de rigidité et de dilatation avec trois chiffres significatifs, et des coefficients thermiques en 10^{-6} , 10^{-9} et 10^{-12} ppm/°C.

III.3.1. Protocole de caractérisation

Le protocole détaillé ici décrit comment, en combinant mesures et simulations, calculer le module de rigidité transverse et la masse volumique d'un matériau isotrope en couche mince dans une structure à ondes de Love.

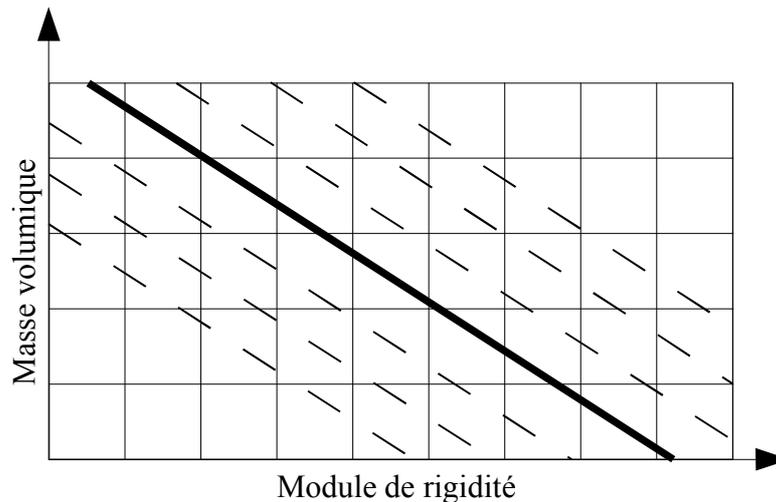
III.3.1.a - Description de la méthode

Dans un premier temps, il faut simuler la vitesse de phase de l'onde de Love de la structure réalisée expérimentalement pour un intervalle de module de rigidité et de masse volumique arbitraire. On peut considérer dans ce cas les valeurs de la littérature comme un centre d'intervalle convenable.

Les points de simulations sont, par exemple, représentés par les intersections du quadrillage sur la figure III.16. Pour chacune des combinaisons masse volumique/module transverse nous simulons la vitesse de phase. On peut tracer en abaque le lieu des vitesses de phase constante : ce lieu est un réseau de courbes « parallèles » entre elles, représentées par des lignes interrompues sur la figure III.16. Nous avons représenté le lieu des vitesses constantes par des droites par soucis de clarté, mais ça n'est pas le cas en général.

Parmi ces lieux, un seul correspond à la vitesse de phase mesurée expérimentalement : c'est la ligne en gras sur la figure III.16. Il y a donc plus d'une solution au problème, et il va falloir ajouter une deuxième expérience et une deuxième série de simulations pour obtenir un second réseau de lieux de vitesses constantes.

Cette deuxième mesure doit être réalisée dans une structure dont au moins un des paramètres est différent : coupe d'un substrat anisotrope, épaisseur de la couche à caractériser, périodicité des transducteurs (longueur d'onde) ou ajout d'une autre couche d'un matériau connu.



*Figure III.16 Superposition des vitesses simulées et mesurées.
 Quadrillage : points de simulation.
 Lignes interrompues : lieux des vitesses constantes.
 Ligne épaisse : Lieu de la vitesse mesurée.*

Les coordonnées du point d'intersection des deux lieux de vitesses simulées égales aux vitesses expérimentales (figure III.17) donneront la valeur de la masse volumique et du module de rigidité transverse.

De plus, les mesures expérimentales sont à prendre avec un facteur d'incertitude qui dépend des instruments, mais aussi des matériaux : le substrat apporte une incertitude sur la coupe, sur chacun des paramètres physiques, l'épaisseur de la couche est connue à la précision près de l'instrument qui a servi à la mesurer, et ainsi on passe, pour le lieu de la vitesse expérimentale, d'une ligne (lignes épaisses, figure III.17) à des bandes, représentées par les surfaces hachurées autour de chaque ligne de lieu de vitesse mesurée, dont la largeur est la résultante de toutes ces incertitudes.

On aura tout intérêt à privilégier l'orthogonalité des lieux des vitesses en leur point d'intersection, de sorte, qu'à incertitudes égales la précision soit meilleure (dimensions de la surface d'incertitude plus réduites).

Pour réduire les incertitudes, on pourra aussi travailler avec des variations de fréquences : de cette manière l'influence des erreurs systématiques de mesure et de manipulation sera minimisée.

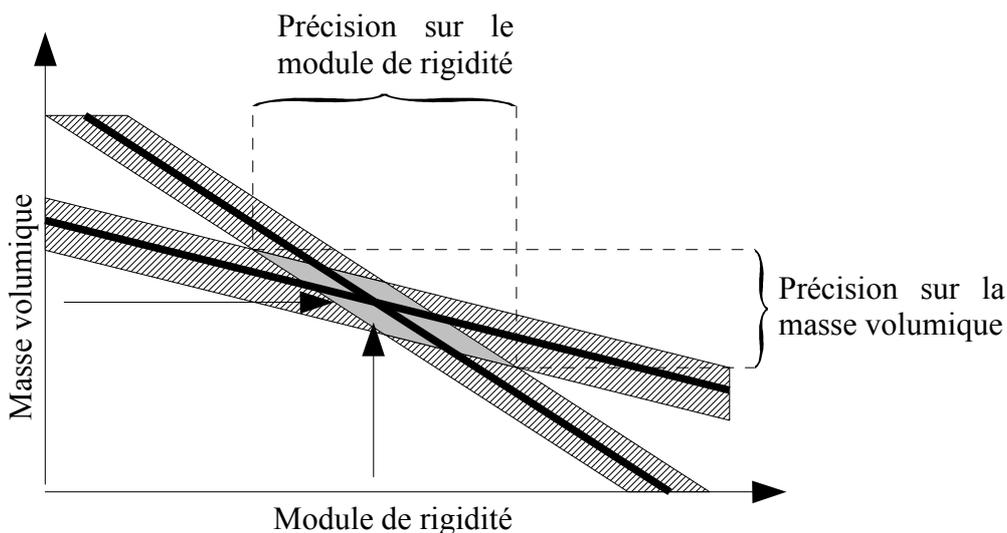


Figure III.17 Combinaison de deux mesures.
En gris, la surface de précision.

III.3.1.b - Utilisation de la vitesse de groupe

La méthode décrite peut aussi bien s'appliquer à la vitesse de groupe, et on peut même considérer, si les variations de vitesse de groupe et de phase ne sont pas colinéaires vis à vis des paramètres à caractériser (c'est le cas pour tout guide d'onde dispersif), que vitesse de phase et de groupe constituent deux expériences à part entière.

Cette possibilité présente un intérêt supérieur car ce sont en fait deux expériences en une qui sont réalisées : il n'y a pas à tenir compte d'étapes de processus de fabrication supplémentaires pouvant perturber l'ensemble de la structure, ni de couches supposées identiques entre elles parce que réalisées dans des intervalles de temps très brefs, ni encore à utiliser de capteurs placés à des endroits différents sur le substrat au moment de la réalisation des métallisations et/ou de couches par dépôt.

III.3.1.c - Généralisation de la méthode

Le fait d'augmenter le nombre de mesures permet d'extraire des paramètres complémentaires dans certains cas. Par exemple caractériser un substrat anisotrope connaissant les couches que l'on y dépose réclamera plusieurs manipulations supplémentaires, impliquant plusieurs coupes, puisque plusieurs coefficients de rigidité et de piézoélectricité influent simultanément sur la vitesse de l'onde.

Pour caractériser des matériaux dont les caractéristiques dépendent beaucoup de la fréquence (liquides, polymères), il sera préférable de changer plusieurs paramètres de sorte que la fréquence

varie peu : en choisissant un substrat tel que la vitesse de phase diminue, puis une périodicité des transducteurs telle que la vitesse de phase augmente et compense la diminution due au substrat, on maintiendra une fréquence constante, tout en ayant deux structures différentes.

Les phénomènes thermiques sont le dernier point à considérer et tout particulièrement les contraintes thermiques liées aux variations de température durant le process. Une modification de l'état de contrainte fausserait ce résultat synthétique. Il convient alors d'être plus prudent, et l'idéal serait de ne changer que la périodicité des transducteurs.

Cependant, le phénomène n'est pas aussi gênant qu'il pourrait paraître au premier abord puisque les contraintes s'accumulent aux interfaces entre matériaux plutôt rigides, dont les caractéristiques dépendent peu de la fréquence, car en général ils ne sont que très peu visqueux/viscoélastiques. À contrario, les matériaux dont les caractéristiques dépendent beaucoup de la fréquence sont en général déposés par des techniques qui accumulent peu, voire pas, de contraintes thermiques (polymère déposé à la tournette ou en spray : le recuit est en général rarement au delà des 100°C).

III.3.2. Résultats expérimentaux

Cette méthode de caractérisation a été mise en oeuvre dans le cadre d'une collaboration avec le Dr Fabien Josse, Marquette University, Milwaukee, Wisconsin, Etats-Unis, et son équipe de recherche. Dans cette collaboration tous les développements théoriques exposés dans le paragraphe III.3.1 ont été réalisés au Laboratoire IXL, et les manipulations ont été réalisées par l'équipe du Professeur Josse.

Nous avons ainsi déposé des couches de PMMA d'épaisseur 0,5 et 1 μm sur deux substrats de coupes cristallographiques différentes (121° et 132°, proches des coupes AT et ST). Le dépôt de PMMA a été réalisé de sorte que la couche soit dans le domaine vitreux. Les vitesses de phase et les temps de groupes ont été mesurés en utilisant un analyseur de réseaux vectoriel.

<i>Epaisseur de PMMA</i>	<i>Angle de coupe</i>	<i>Vitesse de phase (m/s)</i>	<i>Vitesse de groupe (m/s)</i>
0,5 $\mu\text{m} \pm 0,05\mu\text{m}$	121° $\pm 6''$	5074,8	4777,14
	132° $\pm 6''$	4980,8	4446,81
1,0 $\mu\text{m} \pm 0,1\mu\text{m}$	121° $\pm 6''$	5012,1	4400,03
	132° $\pm 6''$	4909,2	4078,05

Tableau III.4 Mesures expérimentales de vitesses de phase et de groupe

La figure III.18 est le lieu des modules transverse et des masse volumiques qui vérifient la vitesse de phase mesurée expérimentalement sur des substrats de coupe orientées à 121° et 132°. Le repère a volontairement été borné par des valeurs encadrant celles de la littérature qui donne une masse volumique de 1100 kg/m³ et un module de rigidité transverse de 10⁹ Pa. La figure III.18 est en fait la réalisation expérimentale de la figure théorique III.17.

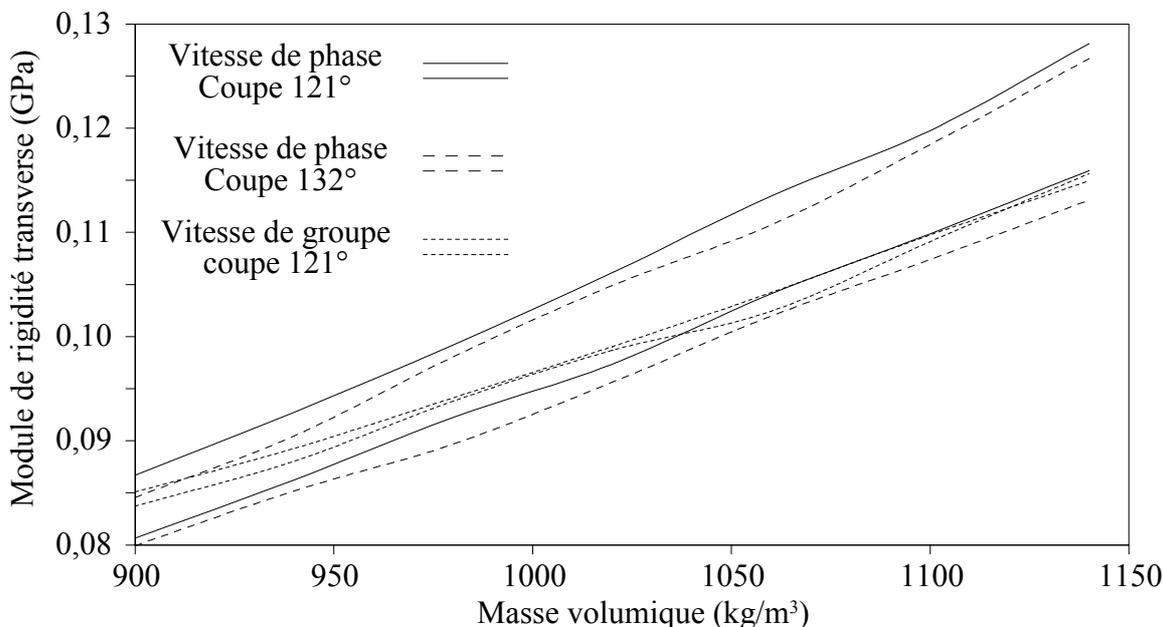


Figure III.18 lieu expérimental de la vitesse de phase dans le domaine de masse volumique et de module de rigidité exploré.

La figure III.18 ne montre pas l'intersection entre les lieux de vitesses comme attendu. Cependant, si on suppose que la masse volumique varie peu par rapport à celle de la littérature, on peut remarquer que lorsque l'épaisseur de PMMA déposée augmente, le module de rigidité tend vers celui de la littérature. Ceci peut aisément se concevoir car la littérature fournit les valeurs des paramètres volumiques : lorsque l'épaisseur augmente, le matériau se comporte de plus en plus comme s'il était un volume plutôt qu'une couche fine.

Cette hypothèse est confirmée (cf. figure III.18) par les expériences réalisées sur des substrats de coupe différente : cet écart entre les lieux des vitesses de phase se confirme, mais le changement de coupe du substrat ne permet pas d'obtenir une intersection entre les lieux de vitesse et donc de déduire un module de rigidité transverse et une masse volumique.

En revanche, les lieux à vitesse de groupe constante et à vitesse de phase constante concourent (cf. figure III.19) pour une masse volumique légèrement inférieure à celle de la littérature (1050

contre 1100 kg/m^3), toutefois, la surface d'intersection est très vaste, ce qui a pour conséquence une incertitude importante : de l'ordre d'environ 10%.

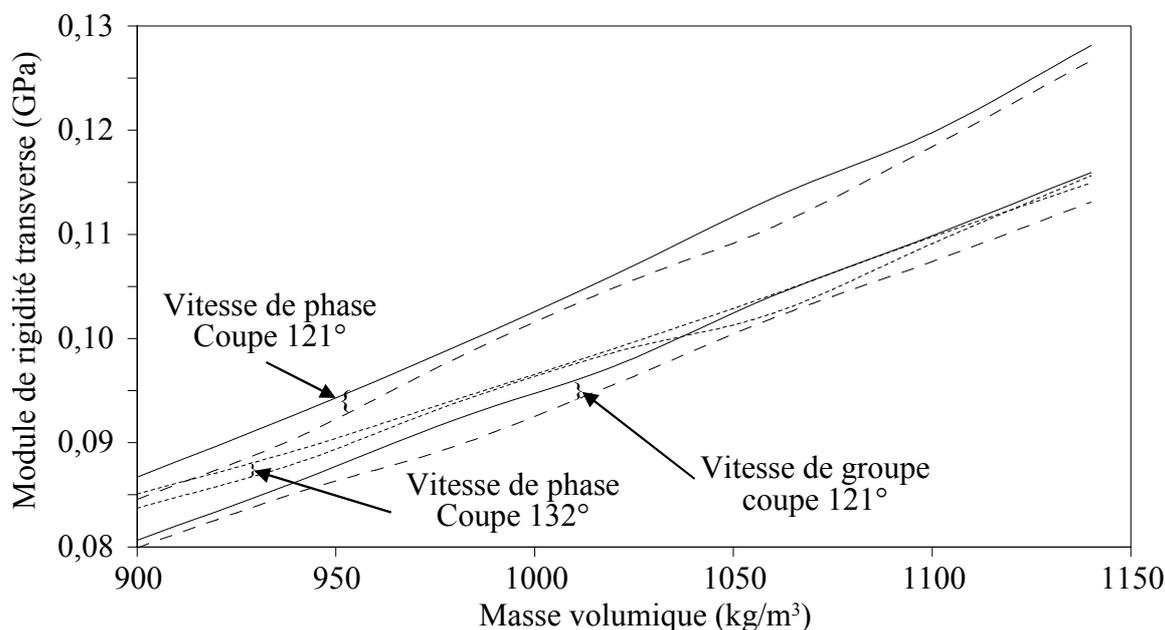


Figure III.19 Lieu des vitesses de phase pour les deux coupes de substrat, et de vitesse de groupe pour une épaisseur de $0,5 \mu\text{m}$ de polymère (en pointillés).

On peut aussi chercher l'explication de cet apparent désaccord expérimental dans les calculs théoriques : au moment de ces expériences le modèle ne prenait pas en compte les pertes par propagation, or nous avons vu, au paragraphe III.1.3.b - Sensibilité aux variations du module de pertes d'un solide page 103, que les pertes influent sur le calcul des vitesses de phase. Il est donc possible qu'une partie du désaccord entre les valeurs caractérisées s'explique par cette lacune de la modélisation.

Cependant, les mesures basées sur des coupes de substrat différents confirment cet écart. On peut en conclure que l'hypothèse la plus probable est la première : les caractéristiques physiques apparentes dépendent de l'épaisseur du dépôt.

III.3.3. Conclusion sur la méthode de caractérisation

La caractérisation nous est apparue comme nécessaire en vue de l'optimisation des capteurs en raison de leur grande sensibilité : ils sont avant tout les capteurs de leurs propres caractéristiques. Nous devons donc disposer de données à la hauteur de leur précision. Ces données ne sont exceptionnellement disponibles dans la littérature. Nous avons profité d'une de ces exceptions (concernant le quartz) pour répondre concrètement à ce besoin de données grâce à la méthodologie présentée dans ce paragraphe.

Pour sa première mise en oeuvre expérimentale, la méthode proposée ici donne des résultats qui, s'ils ne sont pas directement ceux attendus (valeur de la masse volumique et module de rigidité d'une couche isotrope), permettent de conclure que l'épaisseur du dépôt de PMMA joue un rôle sur la valeur de ses propres paramètres physiques. On peut toutefois, à la vue de la figure III.18, conclure dans le cas de la couche d'épaisseur $0,5\mu\text{m}$ que la masse volumique est de 1050 kg/m^3 et que le module de rigidité transverse est $0,1\text{ GPa}$, avec une précision relative de $\pm 10\%$ sur ces deux valeurs.

Les expériences réalisées sur des substrats différents pour des épaisseurs de couche identiques confirment ce point, sans permettre à elles seules de réaliser la mesure du paramètre, car les expériences réalisées conduisent à des lieux de vitesses quasiment parallèles. Les mesures de vitesse de groupe, tout en étant plus orthogonales aux lieux de vitesses de phase, conduisent encore à de grandes incertitudes.

Les expériences futures devraient donc impliquer des structures privilégiant l'orthogonalité des lieux de vitesses, en considérant que deux expériences réalisées avec deux épaisseurs différentes ne constituent pas deux expériences complémentaires, mais bel et bien la caractérisation de deux matériaux différents.

Pour plus de fiabilité sur les valeurs mesurées, et l'indépendance des paramètres mesurés vis à vis du changement de structure, on aura aussi intérêt à réaliser encore d'autres manipulations : des lieux concourant en un même point indiqueront un processus de fabrication stabilisé, sinon, soit le processus de fabrication est encore immature, soit le paramètre à mesurer et celui qui a été modifié pour la structure, ne sont pas indépendants.

III.4. Optimisation de structures – matériaux virtuels

Lorsque l'on souhaite réaliser un capteur, il est nécessaire de disposer en tout premier lieu d'une couche sensible spécifique du composé à détecter. C'est la plus forte des contraintes qui pèsent sur la conception du capteur : cette couche est choisie d'abord pour ses propriétés de sorption vis à vis du composé, et en second lieu seulement pour ses propriétés mécaniques vis à vis de la propagation d'une onde acoustique.

Dans l'optique de l'optimisation de la structure d'un capteur, il faut répondre à la question : « Pour une couche sensible et un substrat donnés, quelle sera la structure substrat-couche guidante-couche sensible qui donnera la sensibilité maximale ? ».

Ce paragraphe présente l'application qui permet de répondre à la question posée dans le contexte spécifique des capteurs développés au Laboratoire IXL : une structure sur substrat de quartz coupe AT, la couche guidante dont le matériau et l'épaisseur seront les paramètres sur lesquels porteront l'optimisation (cf. III.1.1.d - Sensibilité à l'effet de masse, p. 96 pour les raisons de choix), et enfin la couche sensible est une couche de PMMA de 0,3 μm d'épaisseur, choisie dans le but de permettre une confirmation expérimentale.

III.4.1. Principes de l'application

L'application parcourt un espace donné de modules de rigidité transverse et de masses volumiques qui couvre tous les matériaux solides. La figure III.20 montre les familles de matériaux considérés en fonction de leur module d'Young et de leur masse volumique. En toute rigueur c'est le module transverse qu'il faut considérer, mais l'échelle logarithmique sur la figure III.20 écrase l'écart entre module d'Young et module transverse, et ne dévoie donc pas l'aspect qualitatif de cette figure.

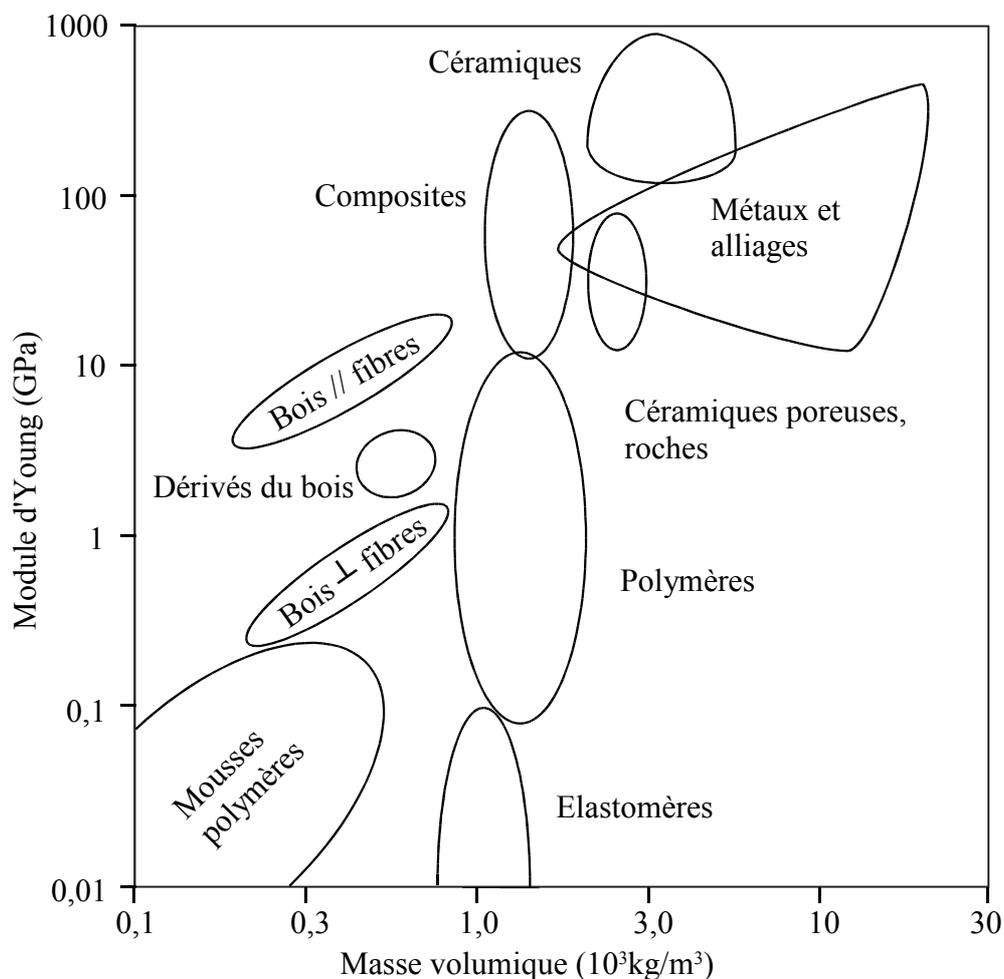


Figure III.20 Familles de matériaux considérés du point de vue de leur module d'Young et de leur masse volumique [Cam03]. Les zones hors des regroupements sont les « matériaux virtuels ».

Pour bon nombre de combinaisons, il n'y a pas de matériau qui existe réellement, d'où le nom de la méthode dite des « matériaux virtuels ». Pour chacune des combinaisons, l'épaisseur est optimisée de sorte que les structures soient comparées entre elles au maximum de leur potentiel.

Le résultat est une vision synthétique et globale de la sensibilité du capteur pour quasiment l'intégralité des matériaux existants : des mousses polymères au diamant, en passant par le bois, les polymères, les composites, les céramiques et les métaux. Bien évidemment d'autres paramètres sont à prendre en compte : les matériaux peu rigides sont en général plus visqueux et se comporteraient probablement assez mal du point de vue de la propagation d'une onde acoustique, de même pour les mousses polymères, ou bien encore la possibilité de déposer en couches minces un matériau prometteur en terme de sensibilité.

A priori, les matériaux les plus aptes à réaliser des couches guidantes de capteurs à ondes de Love sont les polymères et les composites peu visqueux, les céramiques poreuses, si la taille des pores est faible devant la longueur d'onde (matériaux nanostructurés), les métaux et leurs alliages, et les céramiques non poreuses.

III.4.2. Simulations

La structure modélisée est basée sur un substrat de quartz coupe AT, une couche guidante à optimiser dont les valeurs des paramètres parcourront le domaine de la figure III.20 et, pour simuler la couche sensible, une couche de PMMA ayant les valeurs de la littérature (masse volumique 1100 kg/m^3 , module transverse purement élastique : $G = 1,1 \text{ GPa}$) de $0,3 \text{ }\mu\text{m}$ d'épaisseur, le tout étant placé dans l'air.

Comme pour la caractérisation, les simulations réalisées ici ne prennent pas en compte le calcul des pertes par propagation.

III.4.2.a - Description des figures

Nous avons simulé l'effet de masse (équation III.7, page 96) par une augmentation de 5% de la masse volumique du PMMA. L'épaisseur optimale était recherchée sur un intervalle compris entre 0 et $30 \text{ }\mu\text{m}$, de ce fait un faible nombre de matériaux ont une épaisseur inférieure à leur épaisseur optimale.

Les résultats de ces simulations sont synthétisés d'une part par la figure III.21, qui représente la sensibilité du capteur en fonction de l'écart entre la vitesse $V_{\beta=0}$ dans le guide et dans le substrat et d'autre part par les figures III.22 et III.23 qui représentent respectivement la sensibilité maximale et

l'épaisseur pour laquelle cette sensibilité est obtenue en fonction du module de rigidité transverse et de la masse volumique.

Sur chacune de ces figures la couleur de la surface est liée à la sensibilité (vert/clair = sensibilité minimale, rouge/sombre = sensibilité maximale), pour avoir sur la figure III.22 une indication des zones de fortes sensibilité par comparaison avec la figure III.23. Sur chacune de ces surface, la figure III.20 est projetée pour situer les matériaux réels sur ces courbes théoriques. La figure III.23 a subi une rotation autour de l'axe vertical pour faire apparaître les zones d'intérêt plus clairement.

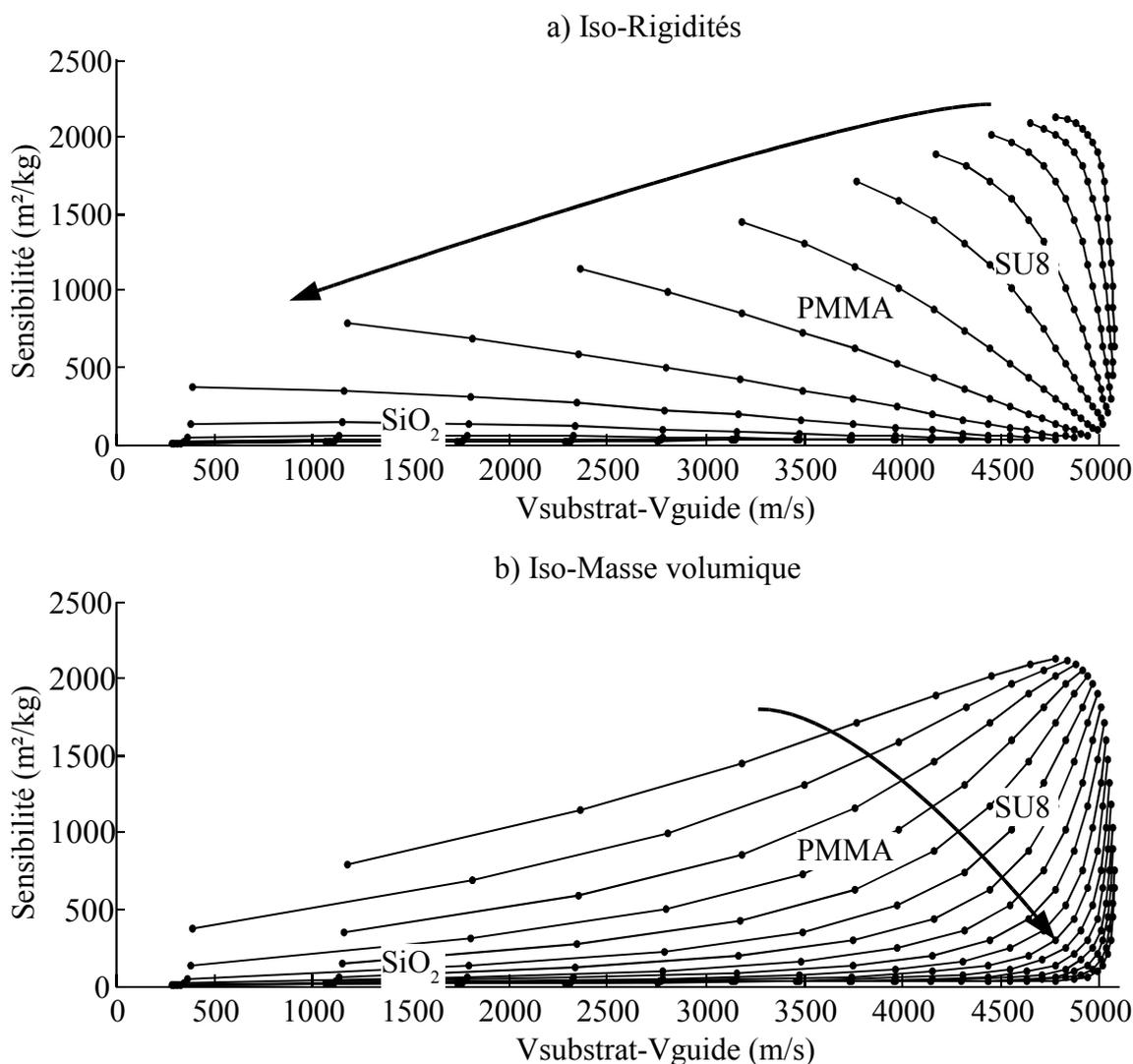


Figure III.21 Sensibilité en fonction de l'écart entre vitesses $V_{\beta=0}$ du substrat et du guide.
 a) Chaque ligne correspond à une rigidité, de 10^6 à 10^{11} Pa, dans le sens de la flèche
 b) Chaque ligne correspond à une masse volumique, de 100 à 30000 kg/m³, dans le sens de la flèche.
 Les valeurs intermédiaires sont réparties logarithmiquement.

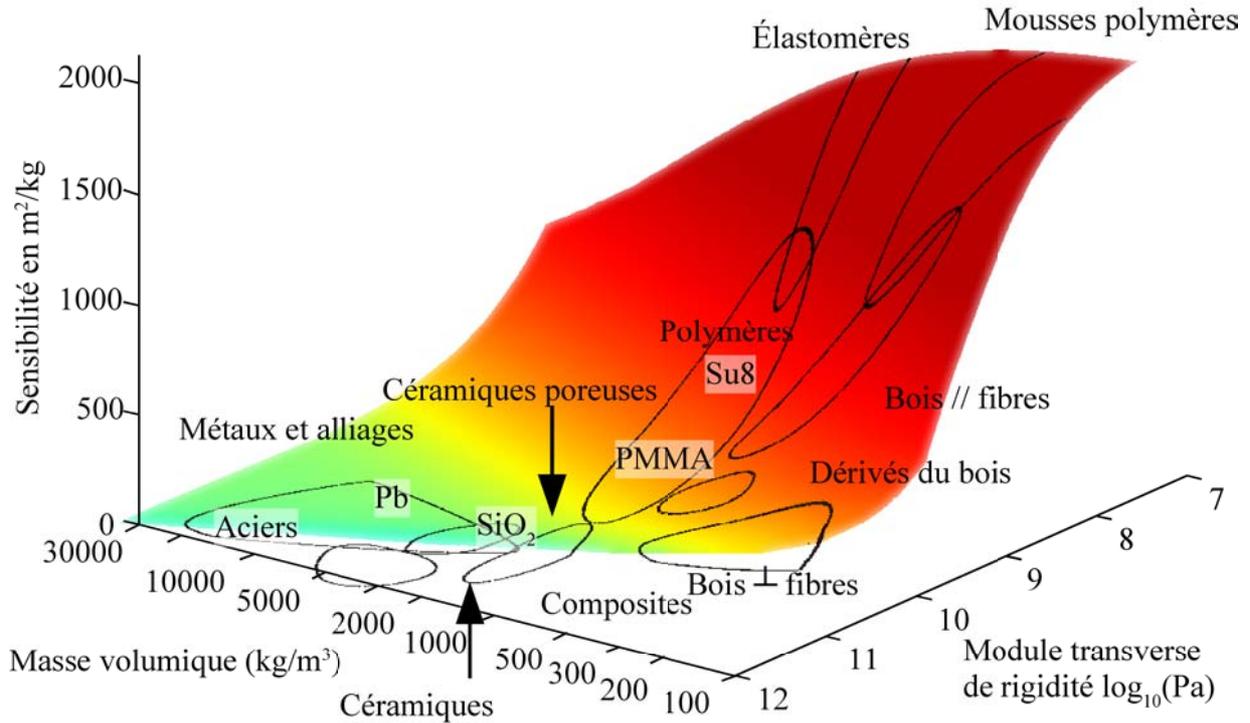


Figure III.22 Sensibilités des matériaux virtuels. Les échelles de masse volumique et rigidité sont logarithmiques. Les domaines délimités, sur fond blanc correspondent à des matériaux pour lequel la propagation d'une onde de Love n'est pas possible dans la couche guidante.

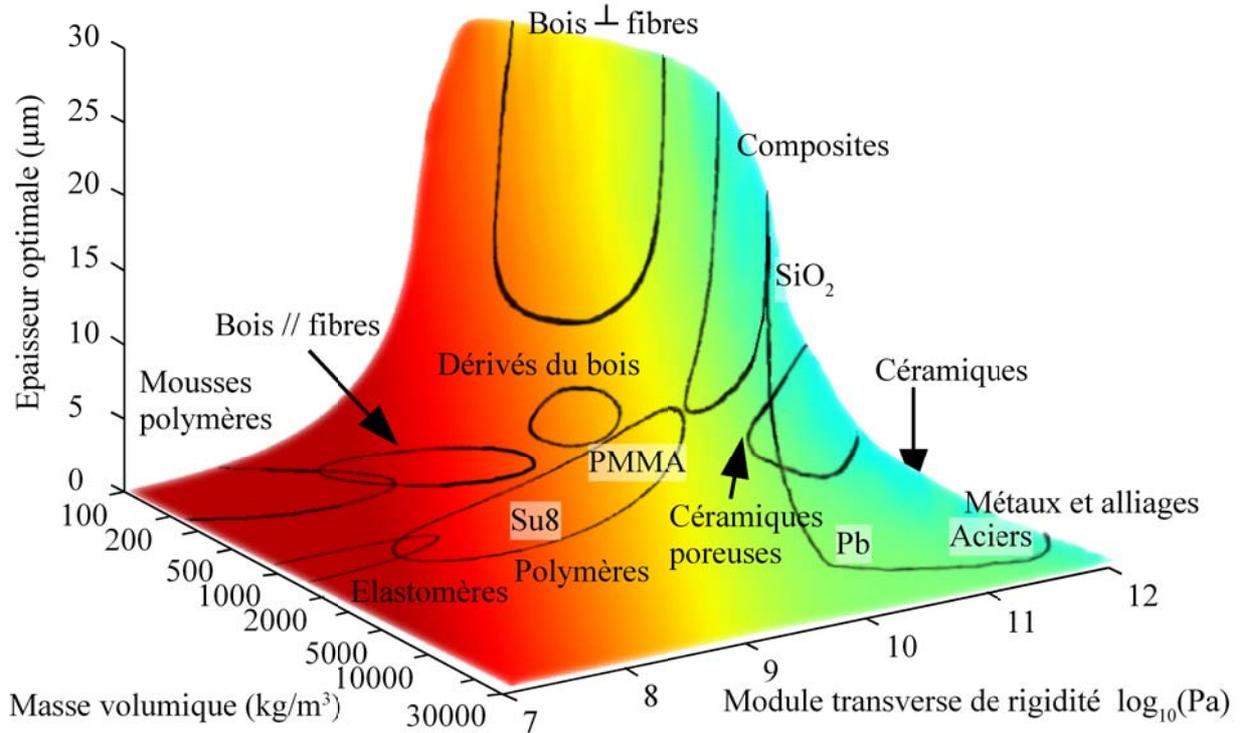


Figure III.23 Epaisseur optimale de la couche guidante. Par rapport à la figure III.22, les axes ont tourné pour mieux faire apparaître les zones d'intérêt.

Sur la figure III.22 certains domaines de matériaux réels sont sur une zone qui n'a pas de sensibilité, ce sont des matériaux pour lesquels le critère sur les vitesses des ondes de volume n'est

pas satisfait.

III.4.2.b - Interprétations

On remarque sur la figure III.21 que la sensibilité augmente quand l'écart entre les vitesses $V_{\beta=0}$ du substrat et du guide augmente. De plus, il apparaît clairement sur la figure III.22 que les matériaux offrant la meilleure sensibilité à l'effet de masse sont les matériaux peu denses (i.e. faible masse volumique) et peu rigides.

Le fait que ce soient les matériaux plutôt légers qui génèrent les sensibilités les plus élevées peut se comprendre aisément car pour percevoir un ajout de masse, il vaut mieux que le capteur soit constitué des matériaux les plus légers possibles, de sorte que l'ajout de cette masse ait une importance relative supérieure.

Pour interpréter le résultat sur la faible rigidité, il faut faire entrer en compte l'écart entre les vitesses $V_{\beta=0}$: il doit être important. Dans notre application la vitesse du substrat reste fixe, la vitesse $V_{\beta=0}$ de la couche guidante est égale à la vitesse de l'onde de volume, puisque le guide est isotrope, et se calcule comme :

$$V_{\beta=0} = V_{Volume} = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}}$$

Pour avoir une vitesse $V_{\beta=0}$ faible, de sorte à avoir un écart maximal, gage d'une sensibilité élevée d'après la figure III.21, il faut donc aussi une diminution du module de rigidité transverse C_{44} .

Toutefois ces matériaux peu denses et peu rigides sont associés à une viscosité qui, jusqu'à présent, les exclue définitivement de toute utilisation en tant que couche guidante, puisque viscosité et pertes par propagation sont fortement liées.

Or, on peut remarquer sur la figure III.23, que pour ces matériaux les épaisseurs optimales sont faibles : inférieures au micromètre. On a donc pour ces matériaux une intéressante possibilité de compromis qui permet d'envisager l'exploitation de ces domaines de très forte sensibilité : la faible épaisseur optimale de ces matériaux peut permettre de contrecarrer l'augmentation des pertes par propagation à cause de la viscosité.

La réalisation de ce compromis n'est pas envisageable dans le cadre de cette étude pour plusieurs raisons : le noyau inclue les pertes par propagation, mais l'interface n'est pas encore assez robuste pour réaliser la recherche en deux dimensions évoquée au chapitre précédent. De plus, les données

manquent sur ces matériaux, dont les caractéristiques physiques cantonnent leur utilisation, dans le domaine des ondes acoustiques, comme absorbant pour limiter la réflexion des ondes sur les bords des capteurs. Il n'est donc pas possible d'utiliser des modèles approximatifs pour estimer les pertes associées à de telles structures, faute de données.

On peut toutefois combiner les interprétations du paragraphe III.1.3.b - Sensibilité aux variations du module de pertes d'un solide, (page 103), à celles-ci pour prendre plus de recul par rapport à ces simulations. En effet, les matériaux polymères et élastomères sont en général associés à une forte viscosité, et nous avons vu que dans ce cas la prise en compte des pertes par propagation est nécessaire pour réaliser des simulations correctes.

Il faut donc tenir compte du fait que, plus on ira dans la zone des matériaux peu rigides sur les figures III.22 et III.23, plus nous devons être prudent par rapport à la sensibilité et à l'épaisseur optimale obtenues. Il faut se baser sur les résultats présentés figure III.13 (page 109) qui nous indiquent que la sensibilité maximale est inférieure à celle calculée sans pertes par propagations et pour une épaisseur optimale supérieure.

Cependant, dans le cas de la figure III.13, c'est la couche sensible et non la couche guidante dont les propriétés changent. Nous supposons que les variations de sensibilité dues au changement de régime viscoélastique de la couche guidante auront lieu dans les mêmes proportions que celles dues au changement de régime de la couche sensible.

On peut supposer que pour le PMMA la sensibilité sera inférieure à celle simulée, et se produira pour une épaisseur plus élevée, ce qui ne va pas dans le bon sens compte tenu des pertes par propagation plus élevées. En extrapolant autour du PMMA, on peut supposer que la figure III.22 présentera un maximum de sensibilité proche de son centre.

III.5. Conclusion

Dans la première partie de ce chapitre nous avons validé de façon théorique le bon fonctionnement de la modélisation, avec toutefois une limitation due à la non prise en compte du calcul systématique des pertes par propagation lors des simulations.

Nous avons présenté plusieurs exemples d'application :

- L'interface graphique, qui est un moyen commode pour réaliser des calculs de vitesses directs ainsi que des calculs basiques d'effets.
- Une méthode de caractérisation en vue de répondre à nos besoins spécifiques de paramètres des matériaux.

- Une application de calcul de sensibilité à l'effet de masse pour une large gamme de matériaux existants, afin de déterminer les paramètres de couche guidante conduisant à la meilleure sensibilité à l'effet de masse.

En particulier le dernier point a permis de mettre en évidence des critères de choix sur la couche guidante et de faire apparaître les meilleurs matériaux.

Lors de la validation théorique nous avons introduit les premières simulations de vitesses prenant en compte les pertes par propagation. Nous avons mis en évidence leur faible influence lors du calcul de vitesses de phase pour des matériaux rigides (quartz et SiO₂) en présence d'un liquide faiblement visqueux. En revanche lorsque l'on introduit des matériaux présentant une viscosité pour la couche guidante (vitreuse) ainsi que pour la couche sensible (dans chaque domaines rhéologiques), le calcul des pertes devient nécessaire pour obtenir une vitesse de phase correcte.

Nous avons vu lors de cette étude de l'influence du module transverse de rigidité complexe de la couche sensible sur la vitesse de phase, que pour une couche sensible vitreuse l'effet de masse est prédominant. Pour une couche sensible dans la zone de transition vitreuse les effets de masse et de viscosité sont de signes opposés et d'ordres de grandeur comparables, pouvant probablement conduire à une compensation de ces deux effets. Et enfin dans la zone caoutchouteuse, la sensibilité de la vitesse de phase à l'effet de masse est négligeable devant celle à l'effet de viscosité.

Ce dernier point est particulièrement important car pour favoriser la sorption de composés chimiques gazeux dans les couches sensibles, celles-ci doivent-être de type caoutchouteux.

Nous avons aussi étudié la sensibilité des pertes par propagation aux mêmes effets. Celle-ci est suffisamment élevée pour que la mesure des variations de pertes par propagation soit possible avec des instruments de mesure en temps réel tels qu'un wattmètre microondes.

Nous avons présenté une comparaison expérimentale du comportement du simulateur utilisé pour modéliser la sensibilité à la température de plusieurs capteurs. Bien que partielle, la prise en compte actuelle donne des résultats corrects, compte tenu du nombre de matériaux dont les paramètres physiques ne sont disponibles que partiellement.

Les premiers résultats de la méthode de caractérisation montrent qu'il faudra à l'avenir considérer, au moins dans le cas du PMMA, que les paramètres physiques dépendent de l'épaisseur des couches déposées. Un premier résultat pour une couche d'épaisseur 0,5 μm est une masse volumique de 1050 kg/m³ et un module transverse de rigidité de 0,1 GPa avec une précision relative de $\pm 10\%$ sur ces deux valeurs.

L'application d'optimisation de structure a confirmé que le fait d'augmenter l'écart entre les vitesses des ondes de volume ($V_{\beta=0}$, en fait) du guide et du substrat, est un moyen d'augmenter la sensibilité à l'effet de masse d'un dispositif. Il est de plus fort probable que cette différence augmente plus généralement la sensibilité de la vitesse de phase aux caractéristiques physiques du guide.

Outre cette confirmation d'un fait communément admis, il ressort de cette étude que les polymères peu denses et les élastomères font, malgré leur viscosité importante, de bon candidats pour la réalisation de couches guidantes. En effet, la valeur très faible de l'épaisseur optimale pour ces matériaux permet de limiter les pertes inhérentes à la viscosité.

Un aspect important des applications de la modélisation présentées dans ce chapitre est l'autonomie qu'elles permettent au niveau de la caractérisation de matériaux puis la réinjection des caractéristiques mesurées dans le simulateur. Le simulateur peut générer ses propres données, qui seront très fiables puisque acquises dans la configuration expérimentale du capteur. Ces données pourront ensuite être utilisées pour optimiser la structure définitive du capteur afin d'avoir les meilleures performances potentielles possibles, c'est à dire pour placer le matériau sur les surfaces de sensibilité et d'épaisseur optimale des matériaux virtuels.

En réalisant une caractérisation couche après couche il est possible de caractériser des structures multicouches complètes. Il est aussi possible de réaliser la caractérisation à différentes températures afin d'obtenir les coefficients de dilatation linéaire (qui influent sur la masse volumique) et la dépendance du module transverse de rigidité à la température. De cette manière il sera possible d'inclure cette importante contrainte de design dans le processus d'optimisation de capteurs.

Le chapitre suivant est une étude du fonctionnement expérimental des capteurs à ondes de Love dans lequel nous nous sommes attachés à développer une technique d'extraction de données basées sur des opérations mathématiques simples afin d'extraire des informations permettant de diminuer les temps d'acquisition, augmenter l'immunité aux bruits de mesure, et de réaliser des mesures de concentrations de polluants dans une atmosphère humide.

Chapitre IV – Détection et mesure

L'équipe capteurs et microsystèmes du Laboratoire IXL collabore depuis maintenant plusieurs années avec le Centre d'Etudes du Bouchet (CEB), dans le cadre de plusieurs conventions de recherche et marchés successifs. Chacune de ces études a pour but la réalisation, et l'amélioration, d'une maquette de laboratoire pour la détection de gaz de combat à l'état de vapeurs à des niveaux très faibles concentrations (ppm et sub-ppm), en utilisant des couches sensibles polymères spécialement développée par nos collègues de Thalès Research & Technology (TRT) France.

L'objet de ce chapitre est de présenter, à partir des travaux précédemment menés par Christophe Bordieu [TCB] l'évolution que nous avons apporté dans le système de traitement de signaux délivrés par nos capteurs à ondes acoustiques.

Les résultats expérimentaux issus des capteurs ont déjà été exploités pour réaliser une analyse de la sorption des composés organophosphorés [Zim01] et l'étude du comportement de la couche sensible en présence d'air humide [Zim02]. Au delà de l'aspect détection, notre objectif est de montrer la possibilité d'extraire des données quantitatives, en particulier la concentration de l'espèce cible.

Nous présenterons les moyens matériels mis en oeuvre et les capteurs utilisés, puis nous réaliserons un bilan des méthodologies d'interprétation des réponses des capteurs utilisées dans les thèses précédentes.

Ensuite, nous décrirons comment nous avons fait évoluer la méthodologie d'interprétation des mesures de fréquence réalisées par les capteurs à ondes de Love en utilisant des paramètres transitoires. Toutefois, le manque de données sur les paramètres de la couche sensible n'ont pas permis à la réalisation de ces manipulations de procéder à l'optimisation complète des capteurs suivant les critères déterminés au chapitre précédent.

Puis, appuyés sur des recherches bibliographiques spécifiques à la problématique posée par l'étude des capteurs chimiques, nous sélectionnerons les meilleurs paramètres transitoires pour interpréter les réponses du capteur grâce à des méthodes utilisées en chimie analytique.

Enfin nous appliquerons la méthode au cas d'échelons de GB (sarin) et de DMMP (DiMéthyl-Méthyl-Phosphonate) sous air sec, et au cas d'échelons de GB sous air dont le taux d'humidité relative varie de 0 à 50 %.

IV.1. Moyens mis en oeuvre

IV.1.1. Cellule de tests

La figure IV.1 donne une vue de la cellule gaz utilisée pour la détection de composés gazeux. Cette cellule est une plateforme générique utilisée par l'équipe depuis un certain nombre d'années (cf [TIE] et [TCZ]). Les accès électriques sont réalisés par des connecteurs SMA et les accès gaz sont réalisés par des raccords en acier inoxydable. La cellule est réalisée en deux parties : sur l'une, qui sert de socle (cf. figure IV.1), les accès électriques, et sur la partie supérieure les accès gaz. L'étanchéité des connexions électriques est réalisée par un joint siliconé, l'étanchéité de la cellule est assurée par un joint en Teflon®, et la fermeture assurée par 6 vis.

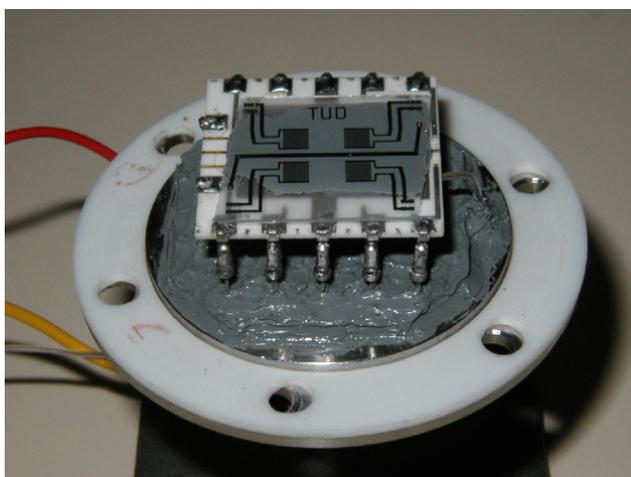


Figure IV.1 Socle de la cellule de test avec un capteur, et le joint d'étanchéité.

L'interconnexion avec le capteur est réalisée par un système de broches métalliques sur lesquelles on vient reporter la structure qui supporte le capteur (cf. figure IV.2). Cette structure est une embase en céramique sur laquelle ont été sérigraphié des pistes conductrices en vue de réaliser l'interface entre les « tulipes » qui se branchent sur les broches de la cellule, et les bondings, seul moyen d'interconnexion du capteur.

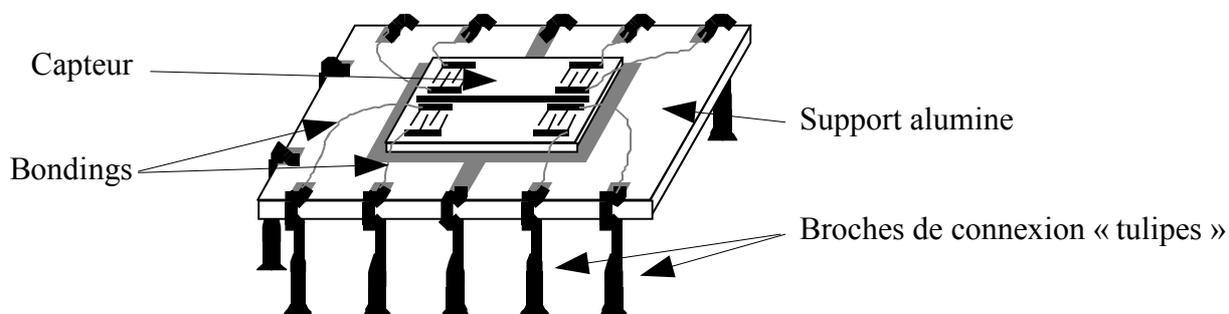


Figure IV.2 Structure de support du capteur. Le capteur est collé sur l'alumine par du joint siliconé.

IV.1.2. Capteurs

Au cours de cette campagne trois capteurs furent utilisés : ils ont été réalisés sur la base d'un substrat de quartz coupe AT, une couche guidante de SiO₂ de 4,6 μm d'épaisseur, et enfin d'une couche sensible de polymère décrite ci-dessous. La périodicité λ des transducteurs interdigités est 40 et 52 μm. Sans couche sensible, ces structures à ondes de Love ont une fréquence de synchronisme voisine de 92 MHz (pour λ = 52 μm) et 115 MHz (pour λ = 40 μm).

La couche sensible déposée sur le chemin de propagation acoustique est un polysiloxane greffé de groupements spécifiques fluorés (cf. figure IV.3) en vue d'obtenir une spécificité accrue vis à vis des composés organophosphorés. La mise en oeuvre du polymère en film mince est réalisée par une technique de pulvérisation (spray coating). L'épaisseur de la couche sensible est difficile à estimer car le but de la pulvérisation est d'obtenir un état de surface présentant la plus grande surface active d'interaction possible avec le milieu environnant, c'est à dire un état de surface très irrégulier. Toutefois, on peut estimer une moyenne de quelques dizaines de nanomètres.

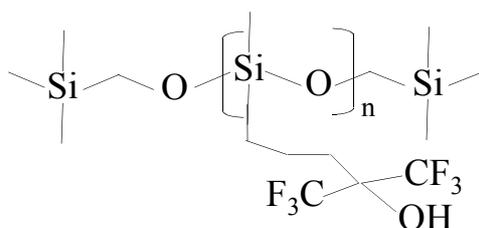


Figure IV.3 Entre crochets : monomère de la couche sensible avec le groupement fluoré.

Les éléments évoqués ici sont détaillés dans [TCZ] ainsi que dans le rapport final d'activité du marché IXL/CEB référence n°99.01.123.00.470.94.50/DGA/DCE/CEB ([DGA]).

IV.1.3. Oscillateur

La ligne à retard est insérée (cf. figure IV.4) dans la boucle de rétroaction d'un oscillateur. Un amplificateur à gain fixe associé à un atténuateur variable permet de réaliser la condition d'oscillation de Barkhausen.

Un filtre passe-bande est ajouté dans la boucle de rétroaction pour que les conditions de Barkhausen ne soient remplies que pour une fréquence correspondant à la propagation de l'onde de Love.

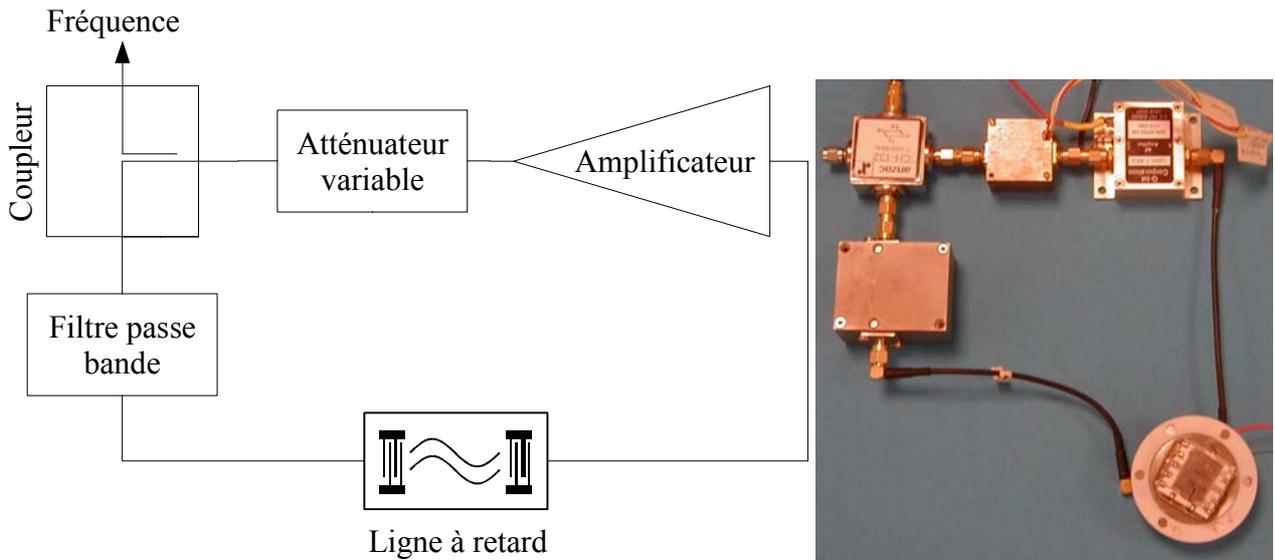


Figure IV.4 Oscillateur à ondes de Love

La mesure de la fréquence d'oscillation est réalisée à l'aide d'un fréquencesmètre HP53131, muni d'une horloge à haute stabilité, qui peut réaliser des mesures fiables à 10 chiffres significatifs par seconde, jusqu'à 225 Mhz. La période d'échantillonnage choisie est de 2s.

IV.1.4. Banc de dilution

Le CEB dispose d'un banc de dilution de gaz automatisé (cf. figure IV.5), les concentrations sont obtenues en faisant passer un flux d'air constant dans un tube à perméation, ce flux d'air primaire constamment pollué est ensuite mélangé en proportions variables dans un flux de gaz vecteur secondaire afin d'obtenir la concentration finale.

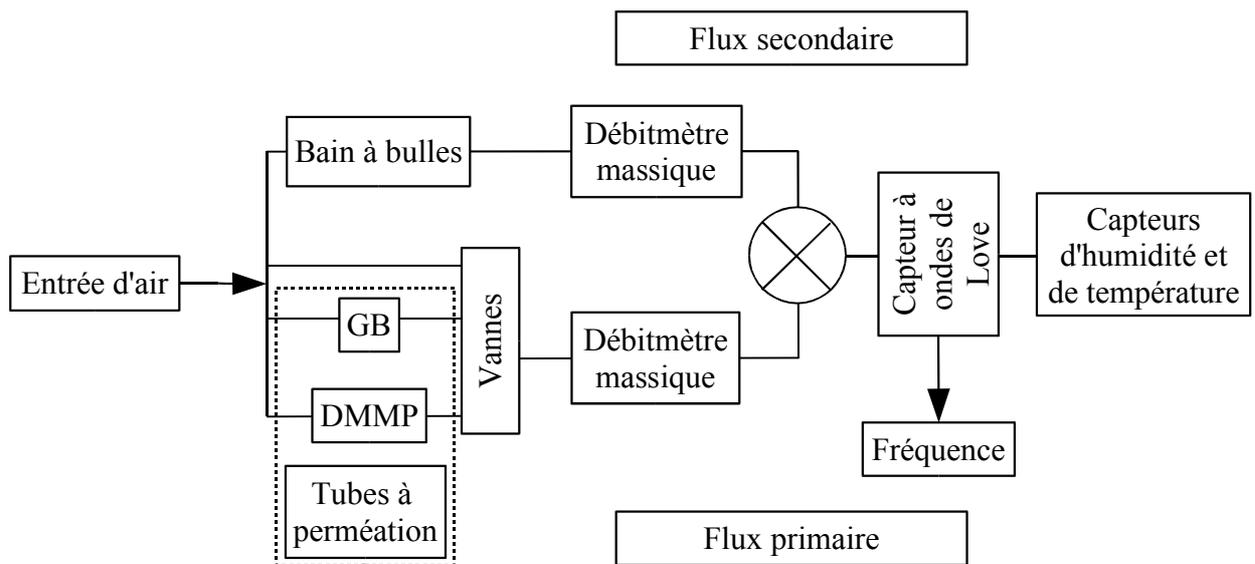


Figure IV.5 Schéma synoptique du banc de dilution du CEB.

Le flux secondaire peut être sec ou humide, avec un taux d'humidité relative réglable par ajustement de la température d'un ballon d'eau dans lequel le flux de gaz vecteur circule et se charge en eau.

Enfin, ajoutons que le banc est automatisé, autorisant le lancement en séquence de plusieurs manipulations, et assurant une bonne reproductibilité des concentrations. Le programme de mesure de la fréquence est synchronisé avec l'ordinateur qui pilote le banc par une liaison réseau. L'automatisation est complète de sorte que les produits toxiques ne sortent jamais de la ligne à gaz, les tubes à perméation n'ont été manipulés (mis en place et pesés) que par le personnel qualifié du CEB.

Le protocole d'expérience prévoit des concentrations de polluant de 0,5, 1, 2 et 5 ppm. Chaque concentration est envoyée deux fois de suite, sous forme d'échelon, la fréquence est mesurée toutes les deux secondes. Les expériences ont été réalisées avec du gaz Sarin (GB) et un simili non létal du Sarin : le diméthyl-méthylphosphonate (DMMP). Les mesures sous Sarin ont été réalisées en air sec et en air humide.

Le basculement des vannes, les temps de réglage des débitmètres et les différents chemins parcourus par les gaz, font que des variations d'humidité relative et de température peuvent apparaître sur le flux obtenu après mélange. Afin de vérifier ce point, et d'en compenser les effets sur les réponses, il est possible de réaliser un flux secondaire sans polluant. Par la différence des réponses aux flux mélangé pollué et non pollué, on pourra identifier quelle est la part strictement due à la présence de polluant. C'est pourquoi chaque échelon avec polluant est précédé par un échelon sans polluant.

Chaque échelon est précédé par 10 minutes de flux d'air sans polluant (uniquement le flux primaire), puis le mélange des flux est appliqué pendant 30 minutes, et suivi par 20 minutes du flux primaire avant d'appliquer l'échelon suivant.

IV.1.5. Réponse typique

La figure IV.6 présente une réponse typique à un échelon de polluant. Nous pouvons noter que la fréquence avant l'ajout du polluant n'est pas constante, et que la variation de fréquence se fait en deux temps après l'ajout du polluant : l'une rapide jusqu'à environ 900 s pour le GB et 1200 s pour le DMMP, l'autre plus lente jusqu'au retour sous air.

Nous pouvons d'emblée constater que les réponses du capteur au GB et au DMMP sont homothétiques et qu'il sera difficile de différencier la réponse à un fort échelon de GB d'un faible

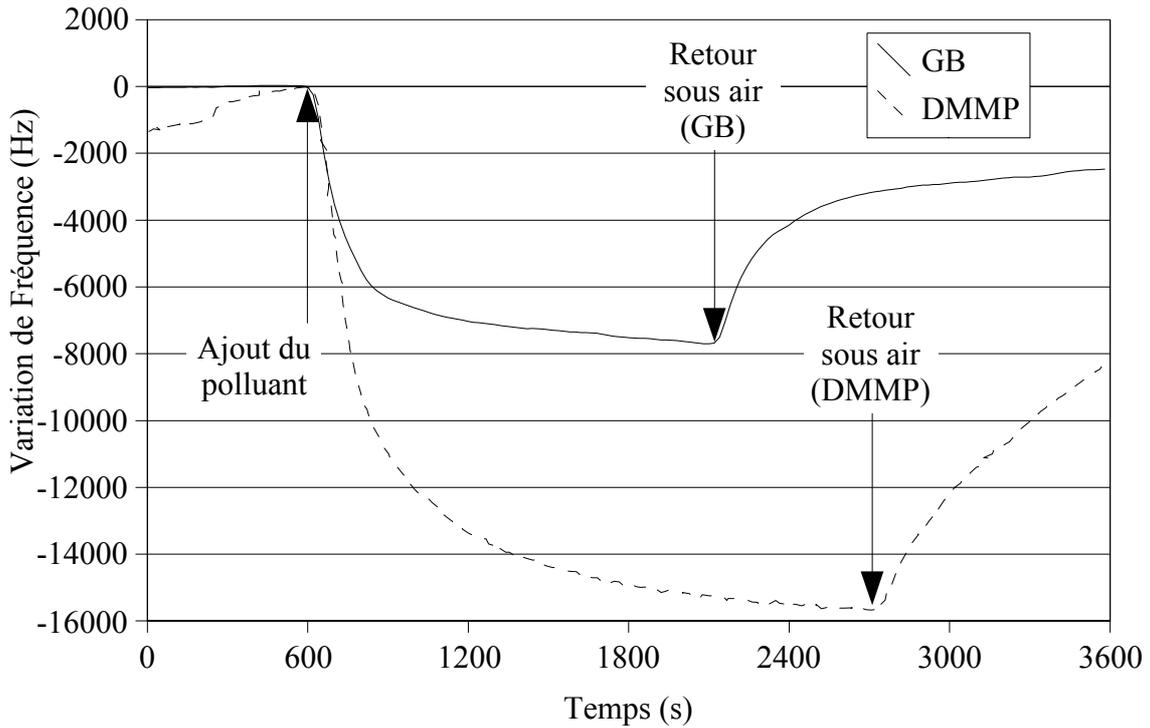


Figure IV.6 Variation de fréquence d'oscillation en réponse à des échelons de 5 ppm de GB et de DMMP. L'origine est prise à l'introduction du polluant (600 s).

échelon de DMMP. C'est la raison pour laquelle nous décrivons les méthodes uniquement pour le GB : elles seront appliquées de façon indifférente au cas du DMMP.

Dans cette étude nous nous intéressons uniquement à la détection, donc aux phénomènes qui se déroulent suite à l'injection du polluant. Le seul aspect de la désorption qui nous intéresse est celui qui traduit la réversibilité de la sorption. Sur la réponse présentée figure IV.6, nous voyons que la fréquence après la désorption ne revient pas à sa valeur initiale, mais à une valeur environ 2,5 kHz inférieure, ce qui indique une réponse irréversible, car tous les paramètres expérimentaux sont restés inchangés. Il a pourtant été prouvé que la sorption des organophosphorés dans le polymère employé est bien réversible.

En fait, à 900 s la sorption du polluant dans la couche sensible est terminée (nous reviendrons sur ce point au paragraphe (IV.3.2 - Extraction de paramètres transitoires, page 139), et entre 900 et 2100 s c'est un important phénomène de dérive qui domine sur la réponse. La variation de fréquence entre 900 et 2100 s est d'environ 1,3 kHz. Si nous supposons que la dérive est indépendante des phénomènes de sorption, elle influence de façon identique lors de la désorption et cause une variation de 1,3 kHz entre 2400 et 3200 s. Soit un cumul de 2,6 kHz de dérive sur la durée de la manipulation, à comparer aux 2,5 kHz de différence de fréquence avec celle de l'instant de l'ajout du polluant. Nous en concluons que la réponse du capteur au phénomène de sorption pris seul est réversible, même si la réponse ne le traduit pas de manière visuelle immédiate.

Ces phénomènes de dérive vont poser problème lors de l'interprétation des résultats de mesure de concentration car ils ne sont pas constants d'un échelon à l'autre, d'une concentration à l'autre, et des mesures basées uniquement sur des variations de fréquence seront bruitées à cause de ces dérives.

De plus, selon l'instant auquel la mesure est réalisée nous obtenons une variation de fréquence, et donc une sensibilité, différente. Ceci n'est pas concevable car cela revient à dire que la sensibilité du capteur est fonction du temps qui passe.

IV.2. Evolution des méthodes d'analyse utilisées au laboratoire IXL

Nous avons mis en évidence les performances des capteurs chimiques en mettant en avant les problèmes de sélectivité, de dérives et de bruits qui imposent l'utilisation de techniques de traitements numériques des mesures.

Aujourd'hui communément utilisées dans le domaine de la chimie analytique, les techniques numériques de traitement des signaux permettent d'élaborer sur la base d'un système multicapteurs des nez et/ou langues électroniques.

De plus, le système sur lequel a travaillé l'équipe capteurs et microsystèmes concernait uniquement la détection. Dans ce cas, le traitement de la réponse du capteur est moins complexe puisque pour une entrée identique (la fréquence mesurée) l'information désirée est de type binaire : présence ou non de polluant.

Une thèse (cf. [TCB]) a été consacrée au traitement de l'information en vue de réaliser la détection de la présence du polluant. Pour répondre aux besoins spécifiques de robustesse et de rapidité de la méthode, il a utilisé un réseau de neurones artificiels pour sa robustesse, associé à une techniques de fenêtres glissantes pour la rapidité et le fonctionnement en temps réel. Le réseau de neurones a en particulier pour avantage sa grande immunité au bruit et à la dérive.

Les autres thèses utilisaient uniquement l'amplitude des échelons prise au moment de l'arrêt du polluant pour comparer entre elles les réponses de plusieurs capteurs, avec tous les problèmes liés à la dérive de la fréquence sous polluant. Toutefois, il ne semble pas que leur auteurs aient eu à revenir sur cette hypothèse dans le cadre de leur étude.

IV.3. Méthode employée dans cette étude

Il s'est avéré que la mesure de la variation de fréquence n'est pas suffisante pour réaliser des mesures de concentrations fiables, pas plus que la variation de fréquence relative alors que qualitativement les réponses semblent assez répétitives. Nous avons donc cherché à extraire des éléments supplémentaires des réponses des capteurs en vue de réaliser des mesures qui soient plus en accord avec l'observation qualitative des réponses.

Nous avons développé cette méthodologie d'extraction pour se placer comme une étape supplémentaire, à celle développée dans [TCB], dans la chaîne d'analyse de la réponse du capteur. En effet, la seule information autre que la fréquence mesurée utilisée dans ce qui suit est la date de début de l'échelon, or c'est précisément l'information générée par le réseau de neurones (cf. figure IV.7) embarqué dans le microcontrôleur. Nous avons aussi gardé pour contrainte de n'utiliser que les opérations mathématiques de base, et en faible nombre, réalisables en temps réel par microcontrôleur (cf. [TCB] chapitre 6).

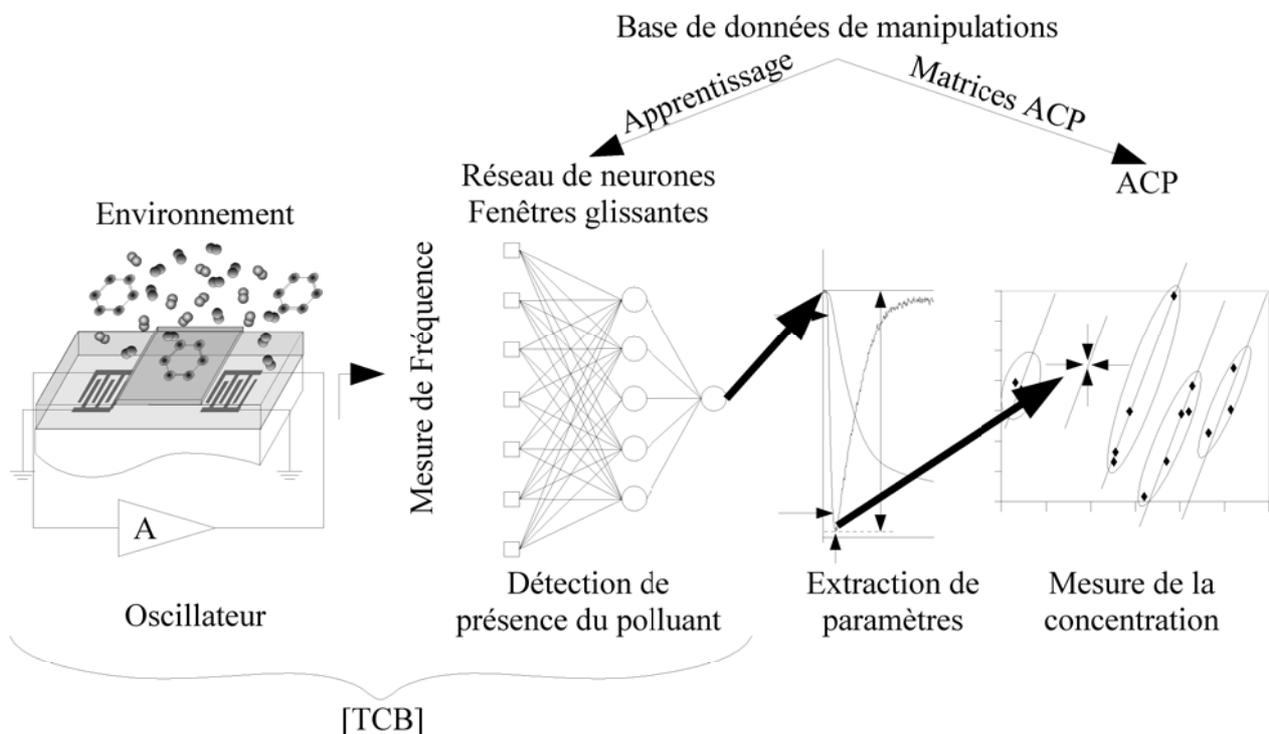


Figure IV.7 La chaîne de mesure.

Le raisonnement qui a initié la mise au point de la méthode décrite dans ce chapitre est le suivant : si la réponse est bruitée par des dérives, la dérivée de la réponse présentera des zones où elle est constante. Entre ces zones de dérivée constante seront les zones de variation correspondant aux mécanismes de sorption. Ces zones apparaissent clairement sur la figure IV.8.

Il semble possible de réaliser les mesures simplement basées sur l'amplitude maximale de la dérivée, qui se détache nettement sur figure IV.8. Pourtant, il n'en est rien, et l'extraction de paramètres a dû être poussée à d'autres caractéristiques des réponses.

Nous pouvons aussi constater sur la courbe de la dérivée figure IV.8 la présence d'un bruit qui « épaisit » le trait par rapport à la courbe de fréquence. La dérivation étant une opération linéaire, elle ne fait apparaître que ce qui était écrasé par l'échelle de la courbe de fréquence.

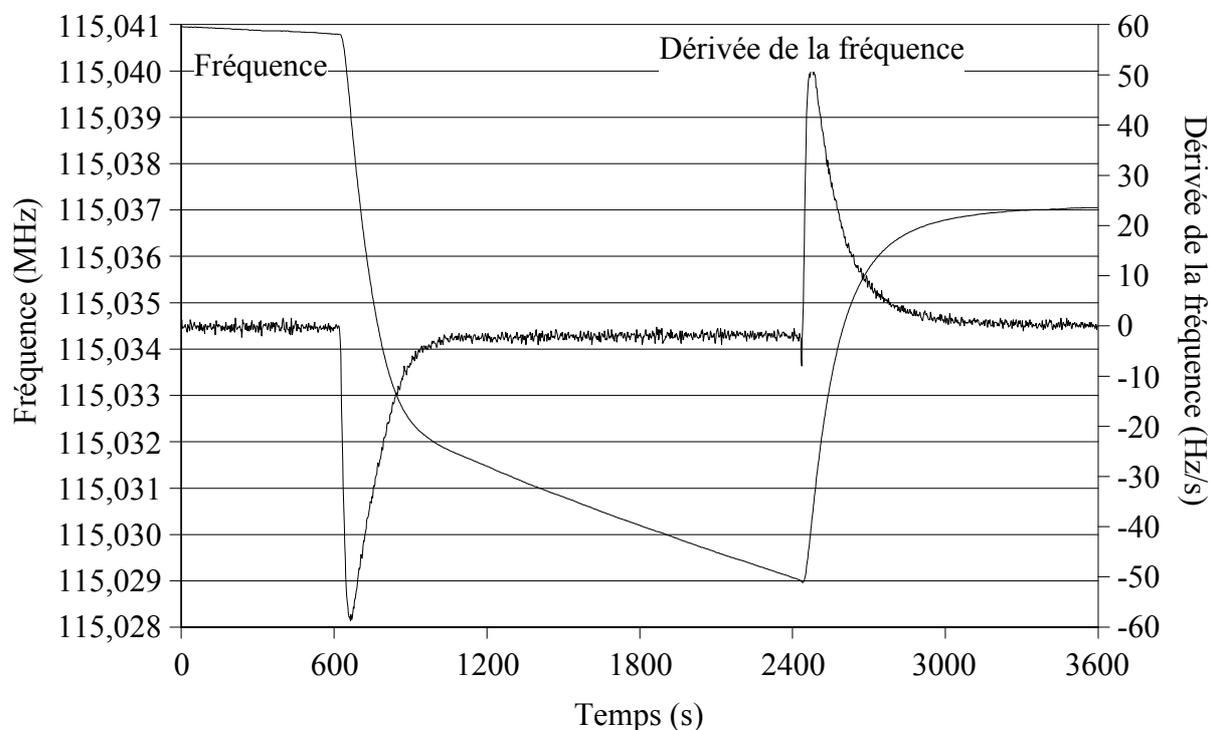


Figure IV.8 Fréquence et sa dérivée pour un échelon de 5 ppm de GB (idem fig. IV.6).

La fréquence mesurée est perturbée par la présence d'un bruit de quelques Hz/s. Ce bruit a deux origines : l'une intrinsèque liée à l'instabilité à court terme de la configuration oscillateur et qui ne dépend pas de la vitesse de phase de l'onde de Love. Les autres sources de bruit sont elles liées à des perturbations de la propagation de l'onde de Love et traduisent les bruits dans l'environnement du capteur : vibrations du banc de dilution, turbulences dans le flux de gaz, instabilité des régulations ... Quelle que soit l'origine de ce bruit de mesure de fréquence, il faudra trouver une solution pour en limiter l'impact.

IV.3.1. Pré-traitement des données

La figure IV.9 présente deux techniques d'atténuation du bruit : le lissage par une moyenne mobile (sur 5 points), et le filtrage (ici un passe bas de Butterworth du premier ordre, atténuant tous les phénomènes de durée inférieure à 10 s). Ces deux techniques ont leurs avantages et leurs inconvénients : le lissage est peu coûteux en temps de calcul, mais il induit des distortions du signal lissé lors des fortes variations (pente adoucie par rapport au signal filtré sur la figure IV.9). Le filtrage est plus coûteux en temps de calcul, et induit un retard dû à sa longueur, mais présente un meilleur respect de la dynamique du signal filtré par rapport au signal d'entrée. En revanche lors d'importants pics de bruit, le filtre numérique a pour inconvénient d'ajouter sa réponse impulsionnelle au signal filtré, ce qui est pire que de ne rien faire, c'est la raison pour laquelle le comparatif est réalisé avec un filtre du premier ordre.

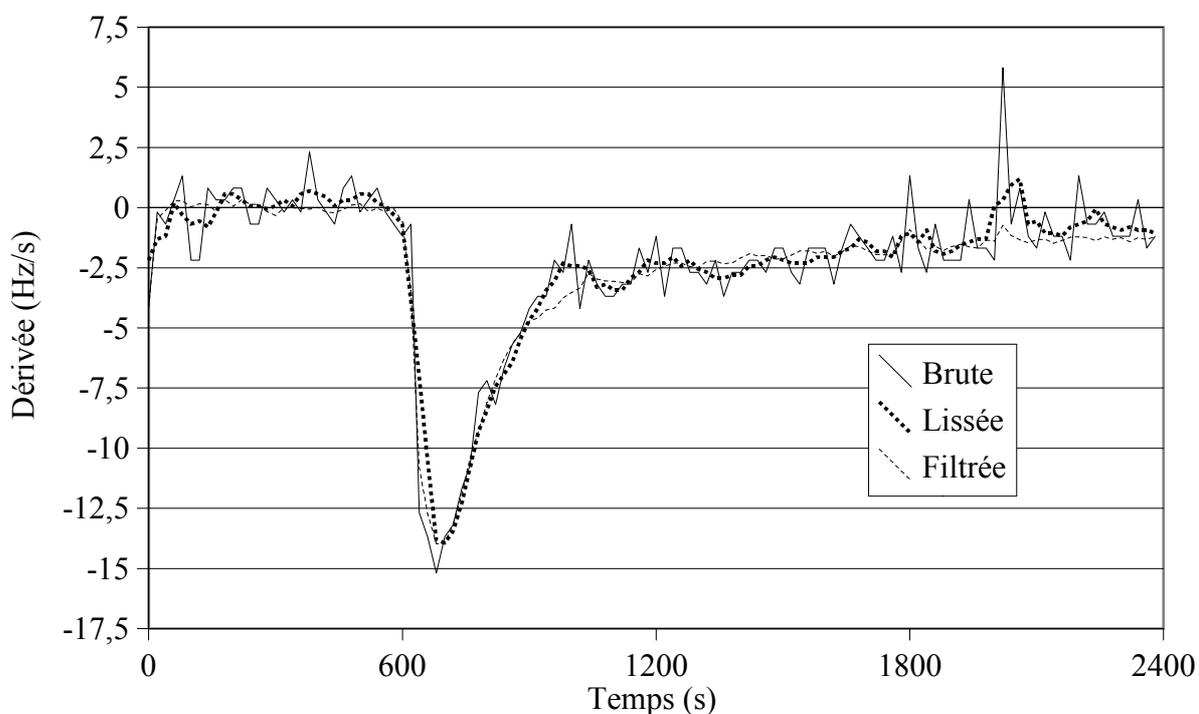


Figure IV.9 Comparaison des techniques de pré-traitement des données.

Si l'idéal semble de combiner les deux approches, c'est à dire effectuer un lissage par moyenne mobile sur trois échantillons pour émuquer les pics de bruit et d'utiliser un filtre numérique en suivant, nous avons préféré privilégier la simplicité du lissage par moyenne mobile, sur cinq échantillons, pour pré-traiter les mesures de fréquence, car elle sera la plus facilement implantable dans un microcontrôleur.

Enfin nous pouvons limiter l'influence de la dérive du capteur avant l'introduction du polluant en calculant la moyenne de la dérivée entre le début de la manipulation (0 s) et l'introduction du polluant (600 s). En soustrayant cette valeur de la courbe de dérivée, puis en réintégrant cette courbe, nous obtenons une courbe de fréquence aux variations identiques, mais « redressée » de la pente moyenne avant l'ajout du polluant. L'intérêt étant de mettre toutes les réponses sur une même ligne de base avant l'introduction du polluant, mais aussi que toutes les variations de fréquences après introduction du polluant soient dues uniquement à celui-ci.

Pour ce qui est de la limitation de l'impact de la dérive après la fin de la sorption (cf. paragraphe IV.1.5 - Réponse typique, page 133) sur la mesure de concentration, nous ne disposons que d'une seule solution : n'utiliser que des paramètres dont l'extraction est possible avant que le capteur n'entre dans ce régime de fonctionnement.

Il reste enfin à considérer le cas de la dérive pendant la sorption dont nous ne pouvons rien estimer, si ce n'est supposer une transition continue entre la dérive avant et après la sorption. Nous ne pourrions donc pas limiter l'influence de cette dérive, autrement que par la réduction du temps d'acquisition car un temps d'acquisition réduit implique une dérive totale réduite.

Ces problèmes de dérives de capteurs et de bruits de mesure sont abordés par H.E. Endres & al. [End95]. Cet article présente une étude des méthodes possibles de pré-traitement du signal, lorsque le signal est utilisé pour les entrées d'un réseau de neurones. Le résultat de cette étude et la nôtre concordent : c'est bien un lissage par moyenne mobile suivi d'un filtre numérique associé à une compensation de la dérive moyenne avant l'introduction du polluant qui donne l'erreur minimale.

IV.3.2. Extraction de paramètres transitoires

Des recherches dans la littérature sur les travaux menés en utilisant les paramètres transitoires des signaux ont mis en avant les travaux de T. Eklöv qui réalise une étude [Ek197] exhaustive des principaux paramètres transitoires que l'on peut extraire d'une réponse telle que celle présentée ici (cf. figure IV.6). Ce sont en tout 48 paramètres différents qui sont extraits des réponses, et qui vont de la valeur finale de la réponse à des coefficients résultant de calculs complexes, tels que régressions polynomiales, exponentielles ou encore les modèles ARX (Auto-Regression with eXogeneous inputs, modèles de régression dont le formalisme est similaire à la fonction de transfert d'un filtre numérique récursif) en passant par les calculs plus simples de pentes et d'intégrales.

Là encore l'efficacité de prédiction de ces paramètres est évaluée grâce à un réseau de neurones, dont la complexité est optimisée pour chacun des paramètres. Un des résultats de cette étude est que

les paramètres issus de régressions sont moins sensibles au bruit sur la réponse en fréquence que les paramètres issus de calculs plus simples (intégrations, dérivations ...). Il est malgré tout possible d'obtenir une précision équivalente sur la mesure finale en combinant les paramètres entre eux.

La figure IV.10 présente graphiquement l'instant T_{max} , instant auquel la dérivée passe par le maximum de variation (pente de la fréquence la plus élevée). H.E. Endres [End95] assimile les variations de réponses en fonction du temps aux phénomènes se déroulant dans la couche sensible, et en particulier les variations après T_{max} sont assimilées à des phénomènes de relaxation dans la couche. En effet la sorption de composés se traduit par une augmentation de la masse volumique, un gonflement et/ou une accumulation de contraintes qui se relâchent encore après que la sorption soit terminée. Ainsi les phénomènes après T_{max} sont liés à l'ajout de composés, mais seulement indirectement et seront susceptible d'être plus bruités. De plus la transition entre le domaine après T_{max} et la dérive est relativement floue et il est apparu que les paramètres tels que la pente de la courbe juste après T_{max} dépendent autant du bruit de mesure de la fréquence que de la concentration de polluant.

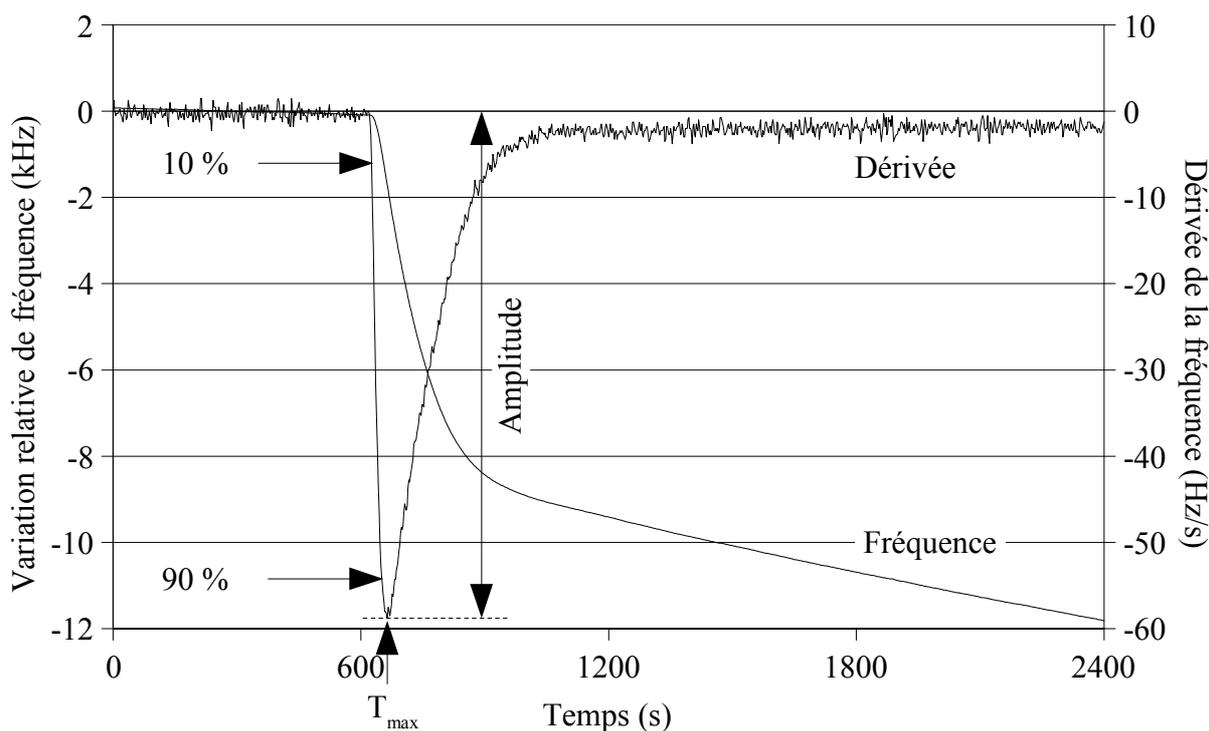


Figure IV.10 Extraction d'informations de la dérivée d'une réponse typique du capteur.

L'acquisition des paramètres transitoires est réalisée entre la date d'entrée du polluant et T_{max} . Ces paramètres sont nombreux :

- La valeur maximale de la dérivée

- La pente moyenne de la dérivée
- La variation relative de fréquence
- L'intégrale de la fréquence
- ...

Si nous calculons ces paramètres entre 10% et 90% de la valeur maximale de la dérivée, afin d'en réduire la sensibilité de la valeur du paramètre aux bruits, nous pouvons extraire plus de 10 paramètres différents pour chaque échelon.

Nous pouvons déjà voir ici le gain de temps apporté par l'analyse des paramètres transitoires par rapport à l'analyse basée sur l'attente du régime permanent. Les durées présentées dans le tableau IV.1 sont des moyennes basées sur plusieurs capteurs, avec plusieurs épaisseurs de couches guidantes et/ou sensibles.

	<i>GB</i>	<i>DMMP</i>
Régime permanent (s)	600	1200
Paramètres transitoires (s)	60	120
Gain de temps	10	10

Tableau IV.1 Gain de temps réalisé en utilisant l'analyse basée sur les paramètres transitoires plutôt que sur le régime permanent.

Nous avons un gain de temps d'un facteur 10, gage d'une réduction importante de l'influence de la dérive après la sorption.

Cependant, et comme indiqué précédemment au paragraphe IV.3, page 136, les paramètres transitoires pris individuellement ne suffisent pas pour réaliser une mesure fiable, nous avons donc repris la démarche suivie par T. Eklöv dans [Ek197] pour, dans un premier temps, sélectionner un jeu de paramètres le plus réduit possible qui exprime le plus de variance possible des réponses des capteurs, et dans un deuxième temps réaliser la mesure.

IV.3.3. L'analyse en composantes principales

L'Analyse en Composantes Principales (ACP) est une méthode statistique répandue, décrite dans la thèse de Christophe Bordieu [TCB], pour réduire le nombre de dimensions d'un jeu de données, nous n'en présenterons ici que les principes.

La réduction du nombre de dimensions n'est possible que si les données présentent des corrélations entre elles. L'ACP va contracter ce jeu de données en un nouveau jeu de données décorréliées, et trié par pourcentage de variance de la réponse exprimé en prenant pour référence la

variance du jeu de données initial. Ainsi la première composante exprime le plus de variance et la dernière exprime le moins de variance. Le jeu des composantes est un jeu de données synthétique, et n'a aucune unité car il ne s'agit que d'une manipulation mathématique de chiffres sans prise en compte de la dimension physique du problème.

L'analyse réalisée ici consiste en plusieurs étapes :

- extraction des paramètres transitoires des réponses des capteurs pour composer le jeu de données à analyser par l'ACP.
- suppression des extractions aberrantes du jeu de données
- normalisation du jeu de données par la moyenne et l'écart type afin que chaque paramètre ait une influence équivalente et qu'aucun ne domine par ses valeurs la première composante (ex : la valeur de la fréquence écrasera la dérivée)
- calcul des matrices de covariance et de corrélation, ainsi que de leurs vecteurs propres
- calcul de la matrice de conversion du jeu de données en composantes
- création du nouveau jeu de données = matrice de conversion x jeu de données initial

La réduction du nombre de dimensions n'est pas le résultat direct de l'ACP : la matrice de conversion est carrée, ce qui implique autant de composantes que de paramètres. Lorsque l'on regarde les coefficients les plus importants dans la matrice de conversion on peut voir pour chaque composante quelle part a chaque vecteur du jeu d'origine dans la composante : un coefficient élevé traduira une forte participation, et un coefficient faible traduira une faible participation.

Pour réduire le nombre de dimensions, c'est à dire avoir à analyser moins de composantes que de vecteurs du jeu de données initial, il faut regarder le pourcentage de variance exprimé par chaque composante, et prendre en compte suffisamment de composantes pour exprimer au moins 90% de la variance totale du jeu de données initial. Pour un jeu de données à quatre dimensions fortement corrélées la première composante exprimera, par exemple, 75 % de la variance, la deuxième 20 %, la troisième 4% et la dernière 1%. Grâce aux deux premières composantes on exprimera 95 % de la variance totale, on peut donc faire l'approximation que ces deux composantes suffisent à décrire le signal et l'interprétation se résume alors à un problème à deux dimensions. Si les données sont moins corrélées, par exemple C1=55%, C2=22%, C3=20% C4=3%, les deux premières composantes expriment 77%, ce qui est insuffisant et impose de tenir compte de la troisième, et l'interprétation est un problème à trois dimensions.

Si un jeu d'origine n'a de coefficients élevés dans la matrice de conversion que pour les dernières composantes, alors il ne participe qu'aux composantes qui expriment peu de variance, c'est à dire qu'il peut être supprimé du jeu de données initial. C'est un point important car il permet de sélectionner les paramètres les plus aptes à permettre une mesure de la concentration. On trouvera dans [Ekl99] des exemples très équivoques pour, notamment, réduire au minimum le nombre de capteurs pour évaluer l'état d'un système.

Nous voyons que pour réaliser la mesure il faut établir la matrice de conversion des paramètres en composantes, ce qui suppose une forme de calibration à réaliser, par exemple, avec la base de données d'apprentissage du réseau de neurones qui sert à détecter l'introduction du polluant. Il faut aussi garder les données ayant servi à la normalisation du jeu de données utilisé pour établir la conversion.

De plus, cette méthode est basée sur l'algèbre linéaire, il faut donc que les données initiales soient linéairement corrélées entre elles pour que l'ACP soit intéressante à réaliser, il peut donc parfois être nécessaire de réaliser un prétraitement supplémentaire pour linéariser une échelle (convertir des dBm en watts par exemple) d'un des membres du jeu de données initial.

IV.4. Résultats expérimentaux

IV.4.1. Sélection des paramètres transitoires

Les mesures expérimentales utilisées dans ce chapitre ont été réalisées dans le but de vérifier des prédictions théoriques sur la sensibilité des capteurs [Zim01] et le comportement de la couche sensible en présence d'air humide [Zim02].

Nous avons vu au paragraphe précédent qu'il est possible d'extraire plus de dix paramètres transitoires et au paragraphe IV.1.4 - Banc de dilution, page 132, que les quatre échelons de concentration sont répétées deux fois, soit au maximum huit données pour le jeu de données initial.

En conséquence les protocoles et les jeux de données ne sont pas parfaitement adaptés à la réalisation de l'ACP (jeux de données de faible taille) et à l'identification des différents gaz utilisés (GB, DMMP et humidité).

En effet, le faible nombre de jeux de données est un facteur limitant pour l'ACP car il faut avoir beaucoup de jeux de données par rapport au nombre de paramètres contenus dans un jeu afin de réaliser une analyse fiable. C'est nécessaire mathématiquement pour pouvoir calculer les vecteurs propres des matrices de covariance et de corrélation, mais c'est souhaitable afin de réduire l'influence du bruit sur les paramètres par un nombre important de mesures.

Afin de sélectionner les meilleurs paramètres à extraire nous avons testé diverses combinaisons regroupant seulement quatre paramètres. En comparant le pourcentage total de variance exprimé par ces quatre paramètres nous avons gardé la combinaison qui cumule la variance la plus élevée sur ses deux premières composantes.

De cette façon nous avons déterminé les quatre paramètres suivants comme étant ceux qui permettent d'exprimer le plus de variance : l'amplitude de la dérivée, la valeur moyenne de la dérivée seconde, la variation relative de fréquence et l'intégrale de la fréquence (cf. paragraphe IV.3.2, p 139 pour la description de ces paramètres, et la méthodologie d'extraction).

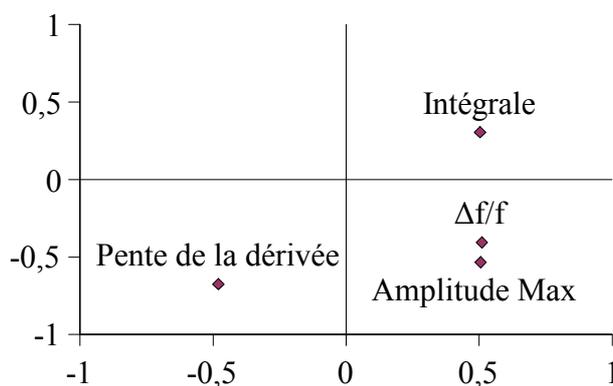


Figure IV.11 Poids des coefficients de la matrice de conversion pour les deux premières composantes.

Ces quatre paramètres suffisent pour exprimer au minimum 95 % de la variance sur les deux premières composantes, la première en exprimant à elle seule 85 %. On peut en déduire une forte corrélation entre ces paramètres. L'observation de la matrice de conversion des données en composantes, figure IV.11, montre que tous les paramètres interviennent, ce qui confirme qu'ils ont été choisis correctement.

Naturellement, il faut ajouter au jeu de données initial les paramètres expérimentaux, lorsqu'ils varient, que sont la température et le taux d'humidité relative (HR).

IV.4.2. Temps d'acquisition

Nous avons déjà présenté le tableau IV.1 et commenté la diminution par un facteur 10 de la durée nécessaire pour réaliser des mesures à partir de l'introduction du polluant. Il apparaît aussi assez clairement que la différence de cinétique entre GB et DMMP pourrait servir pour discriminer ces deux gaz. Cependant, il faut se rappeler que ce sont des moyennes effectuées pour plusieurs capteurs différents, et pour toutes les concentrations. En pratique il serait difficile de différencier un échelon de 5 ppm de GB d'un échelon de 0,5 ppm de DMMP.

Ce facteur 10 (cf. tableau IV.1) se conserve lorsque les conditions expérimentales évoluent : nous l'avons étudié pour les diverses températures et humidités en parallèle de l'étude expérimentale présentée au paragraphe suivant, et ce facteur ne varie pas, même si le temps T_{\max} varie.

Dans cette étude il nous a été impossible d'utiliser le temps T_{\max} comme paramètre. En effet, la fréquence est mesurée toutes les 2 secondes, ce qui implique que T_{\max} est connu à ± 2 s près. Or pour des concentrations de 0,5 ppm et de 5 ppm de GB, ce temps T_{\max} varie de moins de 10 s, ce qui se traduit par une incertitude d'au minimum 40 % si on compare ces deux valeurs extrêmes, et nous contraint à devoir nous passer de ce paramètre, pourtant très significatif de la cinétique de sorption du polluant dans la couche, car pour des valeurs de concentrations intermédiaires, l'écart est inférieur à l'incertitude de mesure du temps. Les prochaines campagnes de mesures seront donc conduites de manière à pouvoir exploiter au mieux ces paramètres temporels.

IV.4.3. Mesures

Nous avons pratiqué l'ACP sur des mesures de GB (cf. figure IV.12), sur des mesures de DMMP (cf. figure IV.13), nous avons aussi superposé les diagrammes de composantes principales (PC1 en abscisse, et PC2 en ordonnées) pour des mesures de GB réalisées avec deux capteurs identiques. Enfin nous avons réalisé des échelons de GB pour divers taux d'humidité relative, en tâchant de séparer l'influence de l'humidité relative.

IV.4.3.a - Mesures sous air sec

Les figures IV.12 et IV.13 (à gauche) sont des graphes typiques d'ACP. Nous avons fait apparaître la concentration de chaque point de mesure, car si les paramètres extraits des réponses sont plus ou moins corrélés entre eux, ils sont avant tout corrélés à la concentration de polluant appliquée au capteur. De cette manière nous avons pu faire ressortir ce qui était intuitif à la vue des courbes de fréquence en fonction du temps mais qu'aucun paramètre extrait ne pouvait illustrer à lui seul.

Nous pouvons noter que les deux premières composantes principales peuvent exprimer respectivement 95,3 % et 96,25 % de la variance totale des paramètres. Les histogrammes, à droite sur les figures IV.12 et IV.13, représentent en noir la variance exprimée par chaque composante et en blanc la somme croissante de la variance totale exprimée. Nous constatons que la réduction à deux dimensions est tout à fait légitime vue la très faible variance exprimée par les composantes 3 et 4. A l'extrême nous aurions pu, au prix d'une incertitude plus importante, ne garder que la première CP, qui exprime à chaque fois plus de 87 % de la variance totale.

Encore une fois il est tentant de comparer la similitude des ACPs pour GB et DMMP : nous avons vu que les réponses d'un même capteur à un échelon de concentration identique de GB et de DMMP sont homothétiques, de plus, avant de réaliser l'ACP, nous avons normalisé chaque jeu de données, ce qui a pour effet de supprimer l'homothétie, et il est logique que les graphes se superposent. Mais cette superposition n'a aucun sens pour deux raisons : les matrices de conversions sont différentes, et elle ne rend toujours pas possible l'identification des deux gaz.

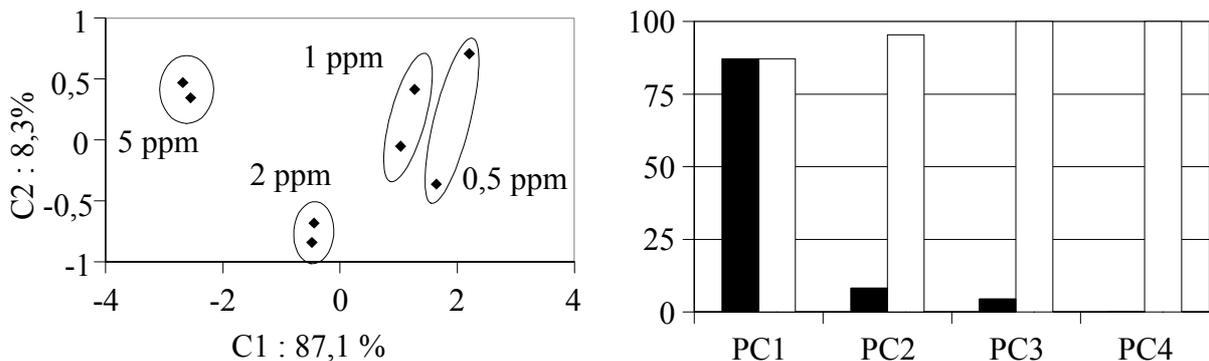


Figure IV.12 graphe des composantes principales (gauche) et pourcentage de variance exprimé par chaque composante (droite, en noir) d'un capteur fonctionnant à 115 MHz exposé à des échelons de GB.

A droite en blanc, les effectifs cumulés croissants de variance exprimée.

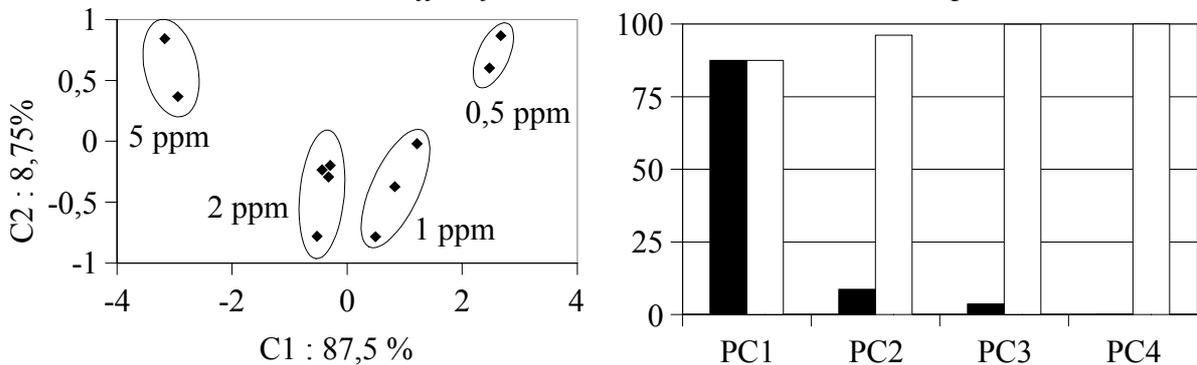


Figure IV.13 graphe des composantes principales (gauche) et pourcentage de variance exprimé par chaque composante (droite, en noir) d'un capteur fonctionnant à 115 MHz exposé à des échelons de DMMP.

A droite en blanc, les effectifs cumulés croissants de variance exprimée.

En revanche nous pouvons comparer les résultats de l'ACP pour un même polluant présenté à deux capteurs identiques, qui ne diffèrent entre eux que par l'épaisseur de la couche sensible. A priori, les résultats devraient être assez proches, et donc les regroupements par concentration se regroupent eux aussi. Nous pouvons voir figure IV.14 que c'est bien le cas.

Nous pouvons remarquer sur les figures IV.13 et IV.14 que les iso-concentrations se répartissent suivant un faisceau de droites parallèle entre elles, matérialisé par l'axe des ellipses regroupant les

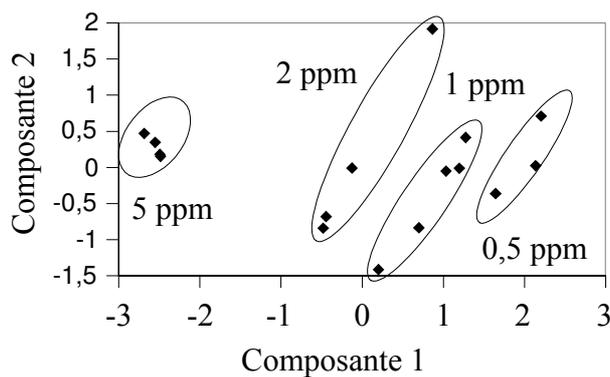


Figure IV.14 Superposition des graphes d'ACP de deux capteurs identiques.

concentrations. La dispersion autour de la droite étant due à la variance non exprimée par les deux premières composantes.

Pour réaliser une mesure, il suffit de normaliser le nouveau vecteur de mesure grâce à la moyenne et à l'écart type obtenu lors de l'étape préliminaire à l'ACP (cf. paragraphe IV.3.3 - L'analyse en composantes principales, page 141), puis multiplier ce vecteur par la matrice de conversion, et reporter ce point sur le graphe des deux composantes principales. Enfin, par une interpolation entre les points ayant servi à l'établissement des iso-concentrations, en déduire la mesure de la concentration de ce nouvel échelon de polluant appliqué sur le capteur.

IV.4.3.b - Mesures sous air humide

La couche sensible spécifique présente aussi une sensibilité pour l'humidité [Zim02]. Or nous avons vu lors de la présentation du banc de dilution (paragraphe IV.1.4 - Banc de dilution, page 132) que le mélange pour obtenir de l'air humide pollué est synthétisé en deux temps, causant de très légères variations du taux d'humidité relative (HR), de l'ordre de 1 à 2 % en général.

Cette variation est relativement faible, et il est difficile de la contrôler. Pourtant elle est très grande devant le taux de polluant : 10000 à 20000 ppm de variation de taux d'humidité pour au plus 5 ppm de variation du taux de polluant. La sélectivité de la couche sensible fait que les variations de fréquence dues à des variations du taux d'HR ne masquent pas celles dues aux variations de la concentration du polluant.

Nous avons donc compensé cette variation du taux d'HR lors du passage de l'air humide sans polluant (flux secondaire, figure IV.5) à l'air humide avec polluant (mélange du flux primaire sec passant par un tube à perméation et du flux secondaire humide) en réalisant une manipulation supplémentaire : un échelon dans lequel le flux primaire sec ne passe par aucun tube à perméation.

La variation d'HR due au mélange de l'air humide du flux secondaire avec l'air sec du flux primaire est ainsi isolée.

La compensation a été réalisée simplement en soustrayant la réponse temporelle du mélange air humide/air sec sans polluant de la réponse du mélange air humide/air sec avec polluant. La figure IV.15 montre que le taux d'HR diminue la sensibilité au polluant du capteur.

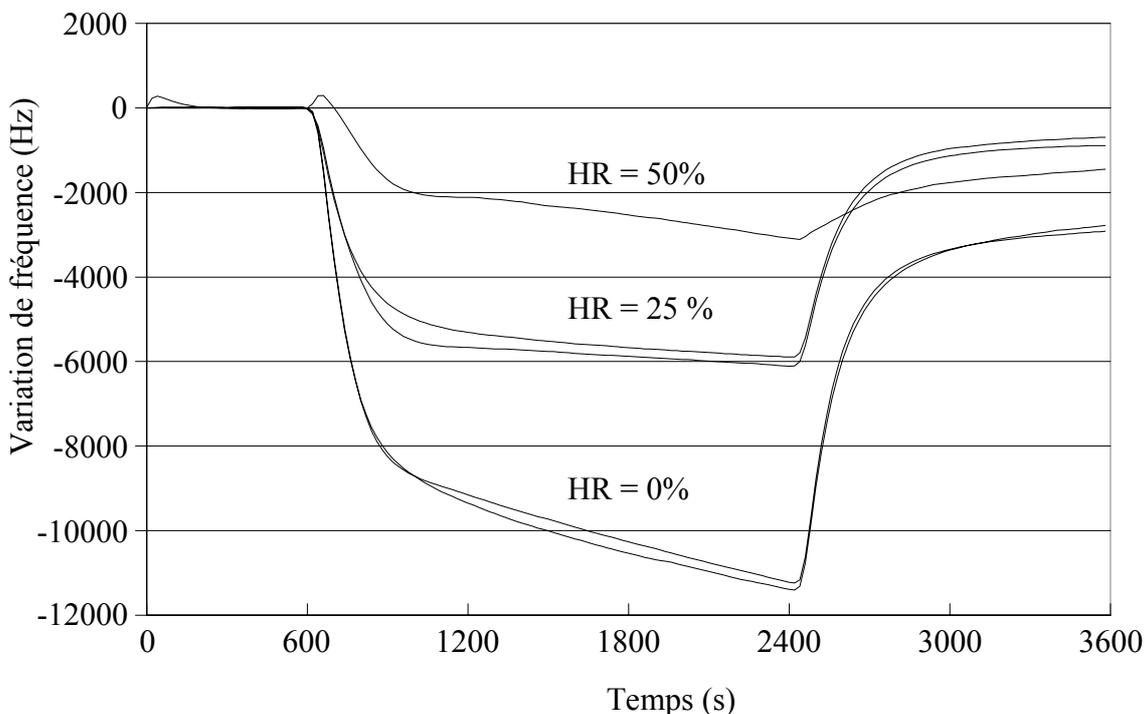


Figure IV.15 Influence du taux d'humidité relative sur la variation relative de fréquence d'un capteur 115 MHz pour des échelons de 5 ppm de GB.

Enfin, le taux d'humidité relative est intégré, en remplacement de l'intégrale, aux paramètres extraits de la réponse du capteur pour réaliser l'ACP pour conserver un nombre de jeux nettement supérieur aux nombres de paramètres..

La figure IV.16 présente le résultat de cette analyse, réalisée en utilisant du GB comme polluant. Nous avons supprimé les mesures à 0,5 ppm car elles devenaient inexploitables dès 25 % de taux d'HR.

Nous voyons aussi que les mesures à 1 ppm sont de plus en plus bruitées (points plus écartés figure IV.16) au fur et à mesure que le taux d'HR augmente, ce qui explique que la variance totale exprimée par les deux premières composantes soit en baisse par rapport à celle obtenue lors des manipulations sous air sec : 90,3 % contre plus de 95 % pour les manipulations sous GB et DMMP.

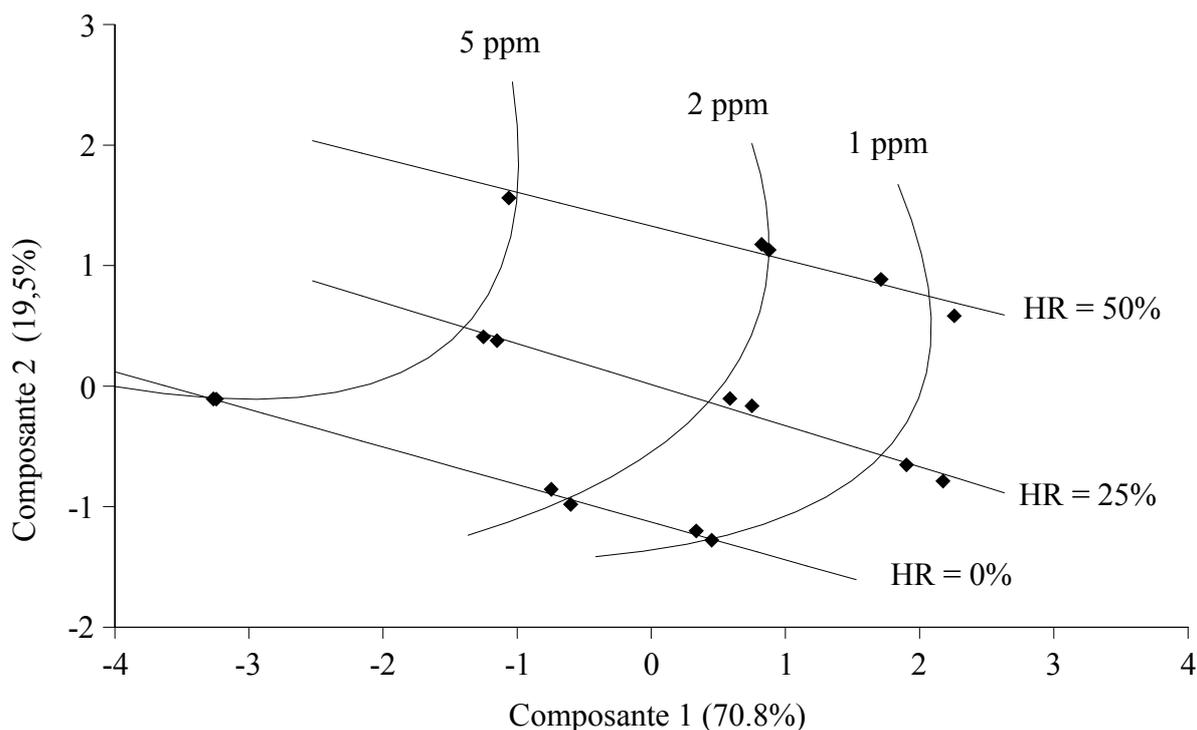


Figure IV.16 Graphe des composantes principales pour un capteur à 115MHz pour des concentrations de 1 à 5 ppm et des taux d'humidité relative de 0 % à 50 %.

Pour le reste, l'interprétation de la figure IV.16 est directe : la localisation des points de mesure connus permet de tracer un abaque des lieux de concentrations (les arcs de paraboles, tracés par régression), et des lieux de taux d'HR (les droites, tracées par régression linéaire). Il suffit de procéder comme décrit au paragraphe précédent pour exploiter les nouveaux points de mesure.

IV.5. Conclusion

Nous avons montré quels bénéfices nous pouvons tirer de l'utilisation de paramètres transitoires extraits des réponses en fréquence pour interpréter les réponses des capteurs en terme de rapidité et de qualité. Cette analyse des paramètres transitoires a été réalisée en réduisant au minimum le temps nécessaire pour s'affranchir de phénomènes de dérive de fréquence après la fin de la sorption du polluant.

Nous avons gardé les contraintes de réalisation du microsysteme en développement au laboratoire IXL, en mettant au point une méthode qui viendrait se placer après la détection de polluant ([TCB]) dans ce qui devient une chaîne de mesure. Tous les traitements mathématiques impliqués, du prétraitement de la réponse en fréquence jusqu'à l'interpolation des mesures sur les graphes d'ACP sont simples et peu nombreux, et réalisables uniquement à l'aide des quatre

opérations de base, sans nécessiter des capacités de mémoire ou de traitement hors de portée du microcontrôleur utilisé actuellement.

L'ACP est en général utilisée lors de l'étude de la réponse d'un grand nombre de capteurs. Ici ce nombre est relativement faible, et c'est plutôt le changement de base, et la rotation dans cette nouvelle base, inhérents à l'ACP qui sont utilisés pour faire ressortir la corrélation des paramètres transitoires et la concentration du polluant.

Malgré ce choix de compromis entre la faisabilité et les performances plutôt que de privilégier la performance pure, les résultats présentés sur les figures IV.12, IV.13, IV.14 et IV.16 sont clairs : l'étude des paramètres transitoires est une étape clé dans l'interprétation de la réponse des capteurs.

Nous avons vu, figure IV.15, que la présence d'humidité dans l'air diminue la sensibilité du capteur de façon importante, toutefois il reste fonctionnel, et la mesure du taux d'humidité, même avec une assez faible précision comparée à celle de la concentration de polluant (0,1 % contre 0,1 ppm), en utilisant un capteur d'humidité standard, permet de décorréler les variations dues à l'humidité sur la fréquence.

Nous avons évoqué des variations de température, ce sont en fait des variations associées à l'ajout du flux d'air pollué au flux d'air humide (mélange des flux primaires et secondaires figure IV.5, p 132), qui n'ont pas pu être étudiées directement ni prises en compte de la même manière que le taux d'humidité relative. En fait, c'est l'absence de régulation de température de l'air en entrée de la ligne à gaz qui empêche la prise en compte de la température, et c'est probablement cette absence de régulation qui cause, au moins en partie, à la fois les différences entre les réponses du capteur à des échelons successifs de concentrations identiques et les dérives de fréquence, parfois importantes, avant la présence de polluant.

Lors des développements futurs il faudra diminuer la période d'échantillonnage pouvoir intégrer le temps T_{\max} à l'ACP, améliorer la stabilité à court terme de l'oscillateur, assurer la régulation de température du flux d'air et/ou de la partie sensible du capteur.

L'interprétation de la réponse du capteur pourra avantageusement utiliser un réseau de neurones artificiels pour réaliser la mesure à partir des paramètres, plutôt que d'utiliser une interpolation graphique sur le graphe d'ACP. L'utilisation de l'ACP sera alors limitée à l'étude préliminaire qui a pour but de sélectionner les paramètres qui expriment le plus de variance.

Enfin, dans le cadre de l'étude de la sorption du polluant dans la couche sensible, ou si l'on dispose de plus de puissance de calcul dans un microsystème, il peut-être intéressant d'ajuster les réponses sur les lois de diffusion classiques, type lois de Fick.

Conclusion générale

La seule certitude que j'ai,
c'est d'être dans le doute.

P. Desproges

Il suffit de remarquer le nombre élevé de références aux références [TCZ] et [TOT] pour se convaincre du fait que l'étude que nous venons de présenter se situe dans le prolongement direct des problématiques soulevées au cours de ces travaux.

Cette étude avait avant tout pour objectif de pouvoir simuler les structures à ondes de Love utilisées au laboratoire, c'est à dire sur substrat de quartz avec au moins une couche guidante isotrope. La détection en milieu liquides ou gazeux. Tous les paramètres mécaniques et électriques de ces milieux doivent être pris en compte. C'est la raison pour laquelle la totalité des exemples pris impliquent le quartz, avec cependant un soin particulier apporté à la conservation de toutes les polarisations dans l'implémentation de la méthode des matrices de transfert, afin de pouvoir valider la modélisation avec d'autres ondes de surfaces que celles de Love (SH-APM, Rayleigh ...). Nous avons souhaité aussi pouvoir modéliser des structures qui couplent des déplacements transverses verticaux ou longitudinaux, au déplacement transverse horizontal, soit directement, soit via la piézoélectricité.

Au cours de cette étude, il s'est avéré que nous sortions du cadre délimité, en particulier par l'hypothèse d'une propagation supposée sans pertes. Les implications pratiques du fait de devoir revenir sur cette hypothèse ont été telles que certains paramètres ont été laissés à l'état partiellement implémenté dans le noyau, au profit de la réécriture des équations de propagation et de la réalisation de nouveaux algorithmes numériques de recherche en deux dimensions, de la vitesse de phase et des pertes par propagation.

Les paramètres partiellement implémentés sont en particulier : la conductivité des milieux liquides, la prise en compte des effets thermiques, et la prise en compte d'une couche métallique à un potentiel fixé. Si le travail est quasiment complètement réalisé pour les deux premiers, le troisième nécessitera probablement une réécriture du noyau pour ajouter les matrices de transfert correspondant aux conditions électriques imposées.

Malgré tout, l'intégration de la quasi totalité des paramètres physiques au sein d'un même modèle est un succès en terme de fiabilité des résultats, de souplesse d'utilisation pour la réalisation de simulations et d'applications, ainsi que de facilité d'extension pour l'ajout d'autres paramètres physiques (comportements viscolélastiques des solides ou des liquides, par exemple).

Nous avons vérifié au chapitre III le bon fonctionnement de tous les organes fonctionnels de la modélisation (substitution des paramètres, algorithmes de recherche, recherche d'intervalles...), validé la bonne prise en compte des paramètres physiques, montré les erreurs commises dans le cas

Conclusion générale

où nous n'aurions pas pris en compte les pertes par propagation pour les structures incluant des matériaux visqueux, et validé le fonctionnement de la prise en compte de l'influence de la température.

Nous nous sommes ensuite attachés à réaliser des applications de cette modélisation.

La première, qui est la caractérisation de couches de matériaux isotropes s'est naturellement imposée, car pour faire fonctionner le modèle, il faut le nourrir de paramètres physiques. Or notre domaine d'application spécifique fait que les données disponibles dans la littérature s'appliquent pas en raison de la finesse des couches et de la fréquence élevée des déplacements mécaniques. Cette méthode de caractérisation est rendue possible par l'excellente connaissance des caractéristiques du quartz (utilisé à grande échelle et depuis longtemps) qui permet de réduire le nombre d'inconnues lors de la caractérisation des paramètres de la couche isotrope. Les premiers résultats montrent qu'une collaboration plus étroite avec les spécialistes des matériaux est nécessaire afin de réaliser les manipulations adéquates. Ces résultats confirment logiquement qu'une bonne reproductibilité des couches est un préliminaire indispensable à la méthode.

La seconde application est la recherche du matériau de couche guidante qui donnerait la meilleure sensibilité. C'est une étude purement théorique qui, pour chaque matériau, recherche l'épaisseur pour laquelle nous avons le maximum de sensibilité à l'effet de masse. Tout d'abord, nous observons un fait admis dans la communauté sans avoir été objectivement démontré, qui est que la sensibilité est d'autant meilleure que les vitesses des ondes de volume transverses du substrat et du guide sont éloignées. Nous avons pu montrer au cours de cette étude que ce sont les matériaux légers et peu rigides qui ont la sensibilité à l'effet de masse la plus élevée, ce qui correspond aux matériaux types polymères et élastomères. Nous avons également montré que les épaisseurs optimales de ces matériaux sont très faibles (inférieures au micromètre). Si l'on tient compte des résultats de l'étude théorique concernant l'influence du module de rigidité complexe (pour des épaisseurs inférieures au micromètre les pertes par propagation ne sont pas rédhibitoires pour la réalisation d'un capteur), et du fait qu'en pratique les matériaux visqueux à basse fréquence se comportent comme s'ils étaient plus rigides à haute fréquence, nous pouvons penser qu'il font de bons candidats pour la réalisation de couches guidantes.

Ces deux applications sont complémentaires : l'optimisation de structures tirera un grand bénéfice de la méthode de caractérisation développée qui permettra de réaliser des optimisations sur des bases concrètes de valeurs de paramètres physiques fiables.

L'étude expérimentale présentée au chapitre IV représente un exemple d'application à la détection en milieu gazeux par dispositifs à ondes de Love. Elle entre dans la stratégie globale de l'équipe capteurs et microsystèmes, qui est la réalisation d'un microsystème de détection en temps réel de composés chimiques. Le travail réalisé a consisté à comparer la reproductibilité de la réponse de capteurs à diverses concentrations de GB et de DMMP (0,5, 1, 2 et 5 ppm) avec pour gaz vecteur de l'air sec, puis de l'air humide (humidité relative : 0 %, 25 % et 50 %).

A l'occasion de cette étude, nous avons montré comment, avec des méthodes minimales en terme de complexité de réalisation et de mise en oeuvre, nous pouvons réduire l'influence des dérives avant et après l'ajout du polluant et réduire l'influence du bruit à court terme de la configuration oscillateur. Nous avons aussi montré les limitations d'une analyse des réponses exclusivement basées sur l'amplitude de la réponse en fréquence ou même la variation relative de fréquence. La méthode d'extraction des paramètres transitoires de la réponse du capteur mise au point nous permet de réaliser les mesures au maximum d'amplitude de la dérivée (point d'inflexion de la réponse transitoire). Ainsi le temps nécessaire pour réaliser une mesure a été réduit d'un facteur 10. Par ailleurs l'instant est plus facile à localiser car il s'agit d'un extremum et non plus d'un changement de pente.

Le traitement des résultats a nécessité l'utilisation d'une analyse en composantes principales en vue de sélectionner quels paramètres transitoires expriment le mieux la variance du signal. Comme la variance du signal est fortement corrélée à la concentration du polluant, cette dérivée peut être déduite par interpolation sur le graphe des deux premières composantes. Les forts taux de variance exprimée par les deux premières composantes (plus de 90 %) justifient l'emploi de cette méthode et les paramètres transitoires choisis.

Nous avons appliqué cette méthode au cas de la détection en milieu humide en ajoutant la mesure de l'humidité relative aux données lors de la réalisation de l'analyse en composantes principales. Nous pouvons voir que même si la sensibilité du capteur décroît fortement en présence d'humidité les réponses restent cohérentes entre elles, si l'on omet les réponses aux échelons de concentration les plus faibles (0,5 ppm) qui se perdent dans le bruit à 25 % et 50 % d'humidité relative.

Cette méthode expérimentale d'analyse des résultats constitue enfin, dans le cadre de l'équipe, une première tentative de mise en oeuvre des méthodes de chimie analytique pour le traitement de la réponse d'un système multicapteur. Ce dernier est constitué ici par le capteur d'humidité relative et par les différents paramètres qui peuvent être assimilés à différents capteurs. Ces méthodes

Conclusion générale

permettent désormais d'envisager le capteur à ondes de Love comme un élément d'un système complet.

Perspectives

Il est important de compléter les dernières fonctionnalités de base du noyau que sont la prise en compte des paramètres thermiques, de la conductivité des milieux liquides (phénomène de la double couche) et de l'état de déformations/contraintes initiales, avec en particulier l'imposition d'un potentiel fixe sur une couche conductrice.

L'approche actuelle pour l'implémentation des paramètres thermiques n'est pas basée sur celle développée dans [TCZ], qui procède comme si la structure était réalisée après dilatation séparée des matériaux, en imposant à toutes les couches rigidement liées au substrat ses coefficients de dilatation dans le plan de la surface. Dans notre approche, nous faisons l'hypothèse que le substrat étant la couche la plus épaisse, il va se dilater quasi-librement et imposer aux autres matériaux sa dilatation dans le plan de la surface ; cette hypothèse permet de réaliser des simulations intéressantes à comparer avec l'expérience. La prochaine étape pour parfaire le simulateur sur ce point est une modélisation des phénomènes de type bilame.

La conductivité des milieux liquides n'a pas été implémentée totalement car elle est très liée à l'imposition d'un potentiel fixe par l'extérieur de la structure, qui nécessite lui-même de ré-écrire le noyau, afin d'ajouter des matrices de transfert correspondant au générateur externe imposant le potentiel. En effet, le générateur fait partie du problème de la propagation, mais pas encore de sa mise en équations.

Ce problème est en fait un cas particulier de prise en compte des déformations initiales. La prise en compte de ces déformations initiales de façon globale permettrait de résoudre ce problème de potentiel fixe imposé, mais aussi des contraintes initiales dues au processus de fabrication, et aux effets thermiques. Ce travail effectué nous aurions intégré dans un même outil la possibilité de modéliser très précisément chaque matériau du capteur pour différentes températures, et de caractériser le processus de fabrication.

La méthode de caractérisation tirera logiquement un bénéfice important de ces améliorations du noyau, mais elle a surtout besoin de nécessiter le moins de lignes à retard possible, ou d'un processus de fabrication stabilisé, car les résultats fournis actuellement décrivent des matériaux déposés très différents, alors qu'ils ne le sont pas a priori.

Le seul élément dans nos mains étant la méthode de caractérisation, nous pouvons le faire évoluer en combinant vitesse de phase, vitesse de groupe et maintenant pertes par propagation, puisqu'il nous est possible de les calculer. Toutefois, ceci suppose la mise au point d'une

Perspectives

méthodologie systématique de calcul des pertes par propagation, et la modification de nombreuses fonctions de l'interface.

Enfin un gros travail a été réalisé à la suite des manipulations qui ont servi de base à l'étude présentée au chapitre IV. C'est toute la chaîne de mesure qui a été revue :

- la cellule : volume réduit, meilleure ergonomie, connectique plus fiable
- le logiciel d'acquisition : grand nombre d'instruments fonctionnant en multiprocesseur, et à leurs performances maximales, tolérant aux pannes, aisément évolutif, intégrant un séquenceur pouvant actionner pompes et vannes, et évolutif lui aussi, et des possibilités de synchronisation avec un banc externe.
- les capteurs dont les contacts électriques ont été améliorés par l'utilisation de pointes de touches à ressort
- les oscillateurs dont les composants sont désormais intégrés.

Toute cette logistique permet notamment une meilleure stabilité à court terme, et un établissement plus rapide de la concentration finale dans la cellule, permet d'améliorer tous les facteurs limitant lors de cette étude.

C'est le fruit du travail de toute l'équipe capteurs et microsystèmes. Pendant la réalisation de cette étude l'équipe a accueilli N. Moll, F. Razan et V. Rimbault. Le premier a réalisé les oscillateurs intégrés lors de son stage de DEA d'électronique et réalise maintenant une étude dans le prolongement de [TOT] sur le fonctionnement en milieu biochimique. La seconde a eu en charge, dans ce domaine, la réalisation de nouveaux masques de photolithographie. Le troisième est chargé de la caractérisation de membranes polymères dans le cadre de la microsystèmes de détection chimique à ondes acoustiques. Il devrait donc tirer un bénéfice direct de l'application de caractérisation présentée au chapitre III de cette étude.

Enfin, l'analyse des paramètres transitoires en vue de déduire la concentration (partie qui est actuellement réalisée par interpolation graphique) pourrait avantageusement être remplacée par l'utilisation de réseaux de neurones artificiels, ou bien encore, à la vue des importants progrès réalisés sur la stabilité court terme du capteur, par une simple analyse du maximum de l'amplitude de la dérivée de la fréquence.

Bibliographie

Bibliographie

- [Adl00] : Eric L. Adler, « Bulk and surface acoustic waves in anisotropic solids», Intl. J. of High Speed Electronics. and Systems, vol. 10, p. 653-684, 2000.
- [Cam03] : Cambridge University, «Materials data book», 2003.
- [Cou91] : G. Couarraze et J.L. Grossiord, «Initiation à la Rhéologie», 1991, Tech. & Doc..
- [DGA] : C. Déjous, J. Pistré, D. Rebière, O. Tamarin, C. Zimmermann, «Détection des agents chimiques à l'état de vapeur à l'aide de dispositifs à ondes élastiques», Rapport final, 2000.
- [Du96] : J. Du, G. L. Harding, J. A. Ogilvy, P. R. Dencher & M. Lake, « A study of Love-wave acoustic sensors», Sen. & Act. A: Physical, vol. 56, p. 211-219, 1996.
- [EDieul1] : E. Dieulesaint et D. Royer, «Ondes élastiques dans les solides. Tome 1, propagation libre et guidée. Tome 1 Propagation libre et guidée», 1996, Masson.
- [EDieul2] : E. Dieulesaint et D. Royer, «Ondes élastiques dans les solides. Tome 2, Génération, interaction acousto-optique, applications.» , 1996, Masson.
- [Ek197] : T. Eklöv, P. Martensson & I. Lundström, « Enhanced selectivity of MOSFET gas sensors by systematical analysis of transient parameters», Anal. Chim. Acta, vol. 353, p. 291-300, 1997.
- [Ek199] : T. Eklöv, P. Martensson & I. Lundström, « Selection of variables for interpreting multivariate gas sensor data», Anal. Chim. Acta, vol. 381, p. 221-232, 1999.
- [End95] : H.E. Endres, W. Göttler, H.D. Jander, S. Drost, G. Sbervebglieri, G. Faglia, « A systematic investigation on the use of time-dependent sensor signals in signal-processing techniques», Sens. & Act. B, vol. 24-25, p. 785-789, 1995.
- [Fer80] : John D. Ferry, «Viscoelastic Properties of Polymer (3rd Ed.)» , 1980, John Wiley & Sons.
- [Has53] : N.A. Haskell, « The dispersion of surface waves on multilayered media», Bull. Seism. Soc. Am., vol. 43, p. 17-34, 1953.
- [Her99] : F. Herrmann, D. Hahan, S. Büttgenbach, « Separation of density and viscosity influence on liquid loaded surface acoustic wave devices», Appl. Phys. Letter, vol. 74, p. 3410-3412, 1999.
- [Her99_1] : F. Hermann, M. Weihnacht, S. Büttgenbach, « Properties of shear-horizontal surface acoustic waves in different layered quartz-SiO₂ structures», Ultrasonics, vol. 37, p. 335-341, 1999.
- [Hol67] : R. Holland, « Representation of Dielectric, Elastic and Piezoelectric Losses by complex Coefficients», IEEE Trans. on Sonics and Ultrason., vol. SU-14, p. 18-20, 1967.
- [IEC] : International Electrotechnical Commision, «Cristal de quartz synthétique - Spécifications et guide d'utilisation», 1993.
- [IEEEStand] : IEEE ANSI, «IEEE Standard on Piezoelectricity - ANSI/IEEE Std 176-1987», 1987.
- [Ing69] : K.A. Inbrigstein, « Surface Waves in Piezoelectrics», J. Appl Physics, vol. 40, p. 2681-2686, 1969.
- [Jac98] : J. Jakoby, M.J. Vellekoop, « Viscosity sensing using a Love wave device», Sens & Act. A, vol. 68, p. 275-281, 1998.
- [Jed00] : F. Jędrzejewski, «Introduction aux méthodes numériquesIntroduction aux méthodes numériques», 2000, Springer.
- [Kim97] : Hyojin Kim, « Propagation of surface acoustic waves in anisotropic piezoelectric multilayers : transfer matrix formalism», The Korean physical society, vol. 10, p. 125-132, 1997.

Bibliographie

- [Las04] : P. Lascaux, Théodor, «Analyse numérique matricielle appliquée à l'art de l'ingénieur . Tome 1 . Méthodes itératives Analyse numérique matricielle appliquée à l'art de l'ingénieur . Tome 1 . Méthodes itératives», 2004, Dunod.
- [Lowe95] : M.J.S. Lowe, « Matrix Techniques for Modeling Ultrasonic Waves in Multilayered Media», IEEE Trans. on UFFC, vol. 4, p. 525-542, 1995.
- [Luc99] : R. Lucklum, C. Behling, P. Hauptmann, « Role of Mass Accumulation and Viscoelastic Film Properties for the Response of Acoustic-Wave Based Chemical Sensors», Anal. Chem., vol. 71, p. 2488-2496, 1999.
- [Mil77] : R.F. Millsom, N.H.C Kelly et M. Redwood, « Analysis of Generation and Detection of Surface and Bulk Acoustic Waves by Interdigital Transducers», IEEE Trans. on Sonics and Ultrasonics, vol. SU-24, p. 147-166, 1977.
- [Nel65] : J.A. Nelder, R. Mead, « A Simplex Method for Function Minimization», Computing Journal, vol. 7, p. 308-313, 1965.
- [Now87] : H. Nowtony, E. Benes, « General one-dimensional treatment of the layered piezoelectric resonator with two electrodes», Journal of the Acoustical Society of America, vol. 2, p. 513-521, 1987.
- [Ogi96] : J.A. Ogilvy, « An approximate analysis of waves in layered piezoelectric plates from an interdigital source transducer», J. Phys D : Appl Phys., vol. 29 (3), p. 876-884, 1996.
- [Ogi97] : J.A. Ogilvy, « Predicting mass loading sensitivity for acoustic wave sensors operating in air», Sens & Act. B, vol. 42 (2), p. 109-117, 1997.
- [Ore01] : J.M. Orellana & B. Collet, «Ultrasonic Lamb waves in layered piezoelectric plates», IUTAM symposium on mechanical Waves for composite structures characterization, p. 125-140, 2001.
- [Pre92] : W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky et W. T. Vetterling, «Numerical Recipes in C», 1992, Cambridge University Press.
- [Slob73] : A.J. Slobodnik, «Acoustic Wave Handbook», 1973, Masson.
- [Str58] : A.N. Stroh, « Dislocations and cracks in anisotropic elasticity», Philosophical Magazine, vol. 3, p. 625-646, 1958.
- [Str62] : A.N. Stroh, « Steady state problems in anisotropic elasticity», Journal of Mathematical Physics, vol. 41, p. 77-103, 1962.
- [TCB] : Christophe Bordieu, Utilisation des réseaux de neurones artificiels pour la détection et la reconnaissance des gaz en temps réel, thèse de doctorat 1893, 1998.
- [TCD] : Corinne Déjous, Capteurs acoustiques à modes de plaque transverses horizontaux. Application à la détection en milieux liquides et gazeux, thèse de doctorat 1204, 1994.
- [TCZ] : Céline Zimmermann, Conception, réalisation et étude de micro-capteurs à ondes de Love pour application en milieu gazeux. Cas de la détection de composés organophosphorés, thèse de doctorat 2471, 2002.
- [Tes00] : F. Teston, G. Feuillard, L. Tessier, L. P. Tran Hu Hue, et M. Lethiecq, « Analysis of the Coupling Between Shear Horizontal Plate Waves and Liquids: Application to the Measurement of the Shear Rigidity Modulus of Glycerol Solutions», J. Appl. Physics, vol. 87, p. 689-694, 2000.
- [Tes99] : F. Teston, L. Tessier, G. Feuillard, E. Richard, A. Roncin et M. Lethiecq, « The Multi-Layered Effective Permittivity Function Applied to the Mass Loading and Viscous Coupling in Shear Horizontal Acoustic Plate Modes», Sens. & Act. B, vol. 59, p. 171-176, 1999.

- [TFT] : Franck Teston, Modélisation et Réalisation de Capteurs à ondes de plaque : Application à la Caractérisation de Matériaux., thèse de doctorat , 1998.
- [Tho50] : William T. Thomson, « Transmission of elastic waves through a stratified solid medium», J. Appl. Physics, vol. 21, p. 89-93, 1950.
- [TIE] : Irène Esteban, Etude et intégration de capteurs acoustiques à modes de plaque transverses horizontaux (SH-APM). Application à la détection de gaz organophosphorés, thèse de doctorat 2030, 1999.
- [TJCA] : Jeffrey C. Andle, An experimental and theoretical analysis of acoustic plate mode devices for biosensor applications, thèse de doctorat , 1993.
- [TOT] : Ollivier Tamarin, Etude de capteurs à ondes de Love pour applications en milieu liquide. Cas de la détection de bactériophages en temps réel, thèse de doctorat 2623, 2002.
- [Wan01] : L. Wang, S.I. Rokhlin, « Stable reformulation of transfer matrix method for wave propagation in layered anisotropic media», Ultrasonics, vol. 39, p. 413-424, 2001.
- [Whi65] : R.M. White & F.W. Voltmer, « Direct piezoelectric coupling to surface elastic waves», App Phys Lett, vol. 7, p. 314-316, 1965.
- [Wil99] : P.R. Williams, S. Ravji, « Shear Wave Dispersion and Mechanical Relaxation Spectra», J. Phys. D : Appl. Phys., vol. 32, p. 1740-1758, 1999.
- [Wob87] : R. Wobst, « The generalized Eigenvalue problem and acoustic surface wave computations», Computing, vol. 39, p. 57-69, 1987.
- [Zim01] : C. Zimmermann, D. Rebiere, C. Déjous et R. Planade, «Detection of organophosphorous vapors (GB and DMMP) using polysiloxane coated Love-wave sensors: sensitivity and interaction mechanisms analysis», Proceedings of the IEEE Ultrasonics symposium, p. 327-330, 2001.
- [Zim02] : C. Zimmermann, P.Mazein, D. Rebiere, C. Déjous et R. Planade, «Effect of relative humidity on the performance of organophosphorus Love-wave sensors using functionalized polysiloxane with fluoride group», Eurosensors XVI proceedings, p. 1123-1126, 2002.
- [Zim02_1] : C. Zimmermann, D. Rebière, C. Déjous, J. Pistré and R. Planade, «Love-Waves to Improve Chemical Sensors Sensitivity : Theoretical and Experimental Comparison of Acoustic Modes», 2002 IEEE Intl. Freq. Cont. Symp. proceedings, p. 281-286, 2002.

Documents annexes

Annexe A. Interface graphique

Compte tenu du nombre important d'informations à gérer pour réaliser une simulation, le caractère répétitif et la complexité de l'ordre de certaines opérations, il est apparu nécessaire de réaliser un certain nombre de fonctions de base pour sauver/charger des simulations avec leurs paramètres, ainsi que pour configurer ces simulations.

Les simulations possibles sont la détermination d'une vitesse simple, le calcul de la vitesse en fonction d'un ou deux paramètres de la structure, la modélisation de l'effet de la variation d'un paramètre, ainsi que la modélisation de l'effet du dépôt d'une couche. La vitesse calculée peut être la vitesse de phase et/ou la vitesse de groupe.

Tous ces éléments apparaissent sur la capture d'écran de l'interface graphique, figure A.1, dont les informations sont réparties en trois zones de haut en bas :

A- Zone « structure »

Cette zone contient l'ensemble des informations que l'on doit fournir au simulateur pour pouvoir lancer une simulation

- ① Cette zone rassemble la liste des couches de la structure, ainsi que deux boutons permettant de déplacer au sein de la structure une couche déjà entrée. Ici les indices vont de 1 à N contrairement au noyau dans lequel ils vont de 0 à N. A titre d'exemple, la figure A.1 présente le cas d'une structure sur substrat de quartz, avec une couche de 6 μm de SiO_2 , et une couche de PMMA (PolyMéthylMéthAcrylate) de 50 nm, placée dans l'air.
- ② La zone d'édition : c'est ici que l'on choisit le matériau d'après le nom du fichier de la base de données qui rassemble les données sur le matériau. Sur la dernière ligne de champs (coupe), les deux champs de gauche sont les deux angles d'Euler φ et θ , le troisième correspond à la direction de propagation de l'onde. Dans le cas de la figure A.1 la couche de PMMA est éditée.
- ③ Les boutons « Supprimer », « Remplacer » et « Ajouter » permettent respectivement de supprimer une couche de la liste, de remplacer une couche par celle de la zone d'édition, et d'ajouter à la structure la couche de la zone d'édition.
- ④ C'est ici que sont définies la précision sur le calcul de la vitesse et les polarisations à garder lors du calcul. La case à cocher « forcer » permet de laisser ou pas l'interface choisir les polarisations à modéliser. Ici « 2 » correspond à la polarisation transverse horizontale.

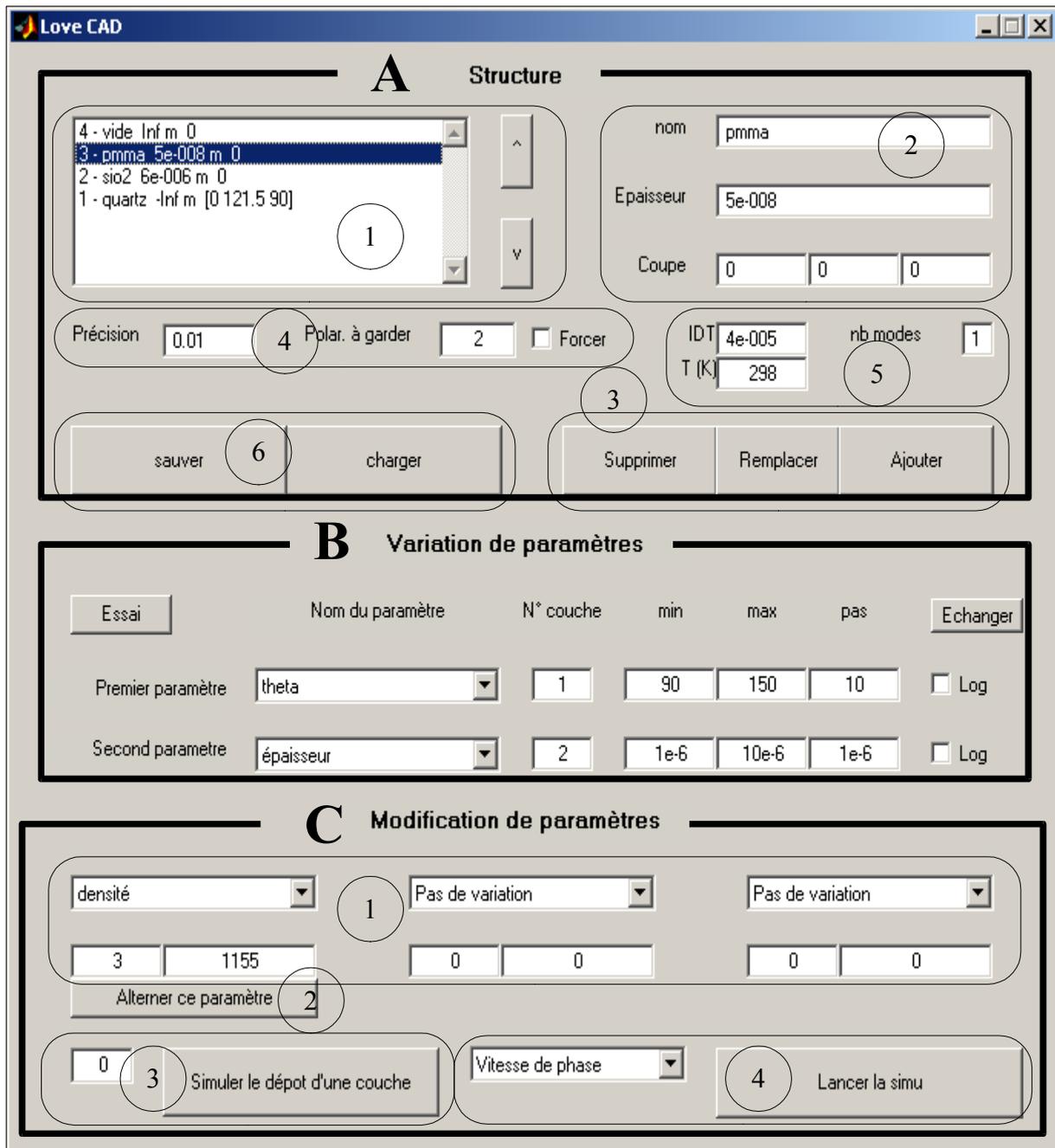


Figure A.1 L'interface graphique du simulateur.

- ⑤ On définit ici la longueur d'onde (IDT), la température (K) et le nombre de modes dont on souhaite obtenir la vitesse.
- ⑥ Enfin cette zone contient des boutons pour sauver et charger dans un fichier (au choix) l'ensemble des champs définissables par l'utilisateur, présents dans toutes les zones de l'interface.

B- Zone « Variation de paramètres »

Cette zone permet de faire varier au choix un maximum de deux paramètres précisés dans la liste déroulante. Ici la ligne premier paramètre s'interprète comme « faire varier l'angle d'Euler θ de la couche 1 de 90° à 150° par pas de 10° ». La seconde comme « faire varier l'épaisseur de la couche 2 de $1 \mu\text{m}$ à $10 \mu\text{m}$ par pas de $1 \mu\text{m}$ ».

Ainsi toutes les simulations seront réalisées en série et les résultats affichés sous la forme d'une surface 3D avec le paramètre 1 sur l'axe X, le paramètre 2 sur l'axe Y, et le résultat de la simulation sur l'axe vertical. Ces données sont aussi sauvegardées dans un fichier, dont le nom reprend les éléments essentiels de la structure, immédiatement interprétable par un logiciel tableur.

La case à cocher « log » est utilisée pour les paramètres variant sur plusieurs ordres de grandeur, tels que la rigidité, la viscosité et la viscoélasticité. Le paramètre variera de 10^{\min} à 10^{\max} avec « pas-1 » valeurs intermédiaires.

Le bouton « échanger » permet d'échanger les axes X et Y lors de l'affichage et de la sauvegarde des résultats de simulation.

C- Zone « Modification de paramètres »

- ① Ces trois groupes identiques de trois champs permettent de modifier un paramètre qui restera constant quels que soient ceux définis dans la zone « Variation de paramètres ». La liste déroulante propose le choix des paramètres, le champ de gauche doit recevoir le numéro de la couche, et celui de droite la valeur du paramètre.
- ② Le bouton « Alternner ce paramètre » permet d'effectuer deux simulations consécutives : l'une avec le paramètre défini dans les champs au dessus du bouton, l'autre en laissant ce paramètre à sa valeur par défaut dans la base de donnée ou la structure. En plus des affichages et sauvegarde des vitesses, ce bouton effectue le calcul de la variation relative de vitesse de phase $\Delta V_p/V_p$. Si de plus le paramètre choisi est « masse volumique », le calcul sera directement la sensibilité à l'effet de masse dans la couche choisie.
- ③ Cette zone est dédiée à la simulation de l'effet du dépôt d'une couche. Le champ de gauche reçoit le numéro de la couche. Le bouton situé à droite lance la simulation avec tous les paramètres définis, et fournit, en plus des vitesses de phase avec et sans la couche, la variation relative de vitesse de phase $\Delta V_p/V_p$ due au dépôt de la couche.

Documents annexes

- ④ La liste déroulante propose deux choix : vitesse de phase et vitesse de groupe. Toutes les simulations lancées seront exécutées en calculant la vitesse choisie. Enfin, le bouton permet de lancer les simulations qui n'ont pas été lancées en alternant un paramètre ou en simulant l'effet de dépôt d'une couche.

L'annexe D.1 présente le script matlab qui réalisera un travail équivalent à celui réalisé grâce à l'interface graphique présenté sur la figure A.1.

Annexe B. Structure des fichiers de données

Dans cette annexe nous présentons le contenu des fichiers de données utilisés par la modélisation. Dans l'annexe suivante, nous présenterons les contenus des fichiers de données utilisées pour réaliser les simulations.

Quelque soit le type de matériau, le fichier commence par une ligne qui contient son nom (qui doit être identique à celui du fichier), sa masse volumique (en kg/m^3), son nom étendu, et sa classe cristallographique. A chaque type est associé une procédure de lecture différente.

A ce jour 3 types sont présents :

- liquide (pour les tous les fluides)
- solideGPGS (pour G Prime G Seconde), le module de rigidité est indépendant de la fréquence
- tous les autres sont traités de façon identiques. Ils sont basés le format de Slobodnik [Slob73], le type est le système cristallographique du matériau.

Remarques :

- Toutes les unités sont les unités SI. Seuls les coefficients de rigidité sont en 10^{11} Pa.
- Les différents coefficients d'une ligne sont séparés les uns des autres par une tabulation.
- Le séparateur décimal est le « . »

B.1. Format de fichier d'un fluide

nom Masse volumique(ρ_0) nom liquide

Permittivité diélectrique

Conductivité électrique

Compressibilité

Coefficient de viscosité (η_0)

Coefficient de viscoélasticité (μ_0)

Température de référence T_0

Coefficients de la masse volumique : $\rho_0 (x_3 \Delta T^3 + x_2 \Delta T^2 + x_1 \Delta T^1 + x_0 \Delta T^0)$

Coefficients de viscosité : $\eta_0 (x_3 \Delta T^3 + x_2 \Delta T^2 + x_1 \Delta T^1 + x_0 \Delta T^0)$

Coefficients de viscoélasticité : $\mu_0 (x_3 \Delta T^3 + x_2 \Delta T^2 + x_1 \Delta T^1 + x_0 \Delta T^0)$

Remarques :

- Pour convertir des Poises en Pascal-secondes multiplier par 0,1
- Pour décrire un fluide visqueux Newtonien (le vide par exemple), donc sans viscoélasticité, il faut mettre +infinity pour neutraliser le coefficient de viscoélasticité.

B.2. Format de fichier d'un solide

Les données des solides sont réparties en deux fichiers : l'un, sans extension contient toutes les caractéristiques élastiques et de température, l'autre, avec l'extension « dis », contient les caractéristiques dissipatives de ce même matériau. La procédure de lecture recherche la présence de ce fichier, et lorsqu'il n'est pas présent, neutralise les paramètres dissipatifs pour ce matériau.

B.2.1. Fichier des données élastiques

nom Masse volumique(ρ_0) nom Classe cristallographique (Trig.32 pour le quartz, Isotropic pour le SiO₂...)

Tenseur de rigidité 6x6

Tenseur de piézoélectricité 3x6

Tenseur de permittivité 3x3

Température de référence T₀

Tenseur des coefficients de température sur la rigidite 6x6

coefficients de dilatations suivant X $x_0 (1 + \alpha_{x1} \Delta T 10^{-6} + \alpha_{x2} \Delta T^2 10^{-9} + \alpha_{x3} \Delta T^3 10^{-12})$

coefficients de dilatations suivant Y $y_0 (1 + \alpha_{y1} \Delta T 10^{-6} + \alpha_{y2} \Delta T^2 * 10^{-9} + \alpha_{y3} \Delta T^3 10^{-12})$

coefficients de dilatations suivant Z $z_0 (1 + \alpha_{z1} \Delta T 10^{-6} + \alpha_{z2} \Delta T^2 10^{-9} + \alpha_{z3} \Delta T^3 10^{-12})$

coefficients de température de la masse volumique $\rho_0 (1 + \alpha_{\rho 1} \Delta T 10^{-6} + \alpha_{\rho 2} \Delta T^2 10^{-9} + \alpha_{\rho 3} \Delta T^3 10^{-12})$, si différent du produit des coefficients (c'est le cas pour le quartz, sinon, les laisser à 0)

Remarque : Les équations pour obtenir un coefficient après une variation de température sont différent pour le solide et le fluide : pour le solide c'est une expression classique en $1 + \alpha \Delta T$, alors que pour le fluide c'est une régression polynomiale.

B.2.2. Fichier des données dissipatives

nom densité nom Système cristallographique (Trig.32 pour le quartz, Isotropic pour le SiO₂)

Tenseur de viscosité 6x6

Tenseur de viscoelasticite 6x6

Tenseur de conductivité 3x3

B.3. Format de fichier d'un solideGPGS

Ce format est identique à celui du solide, seule son interprétation des tenseurs de viscosité et de viscoélasticité est différente. Le but de ce format de fichier est de modéliser les solides dont le module de pertes ne dépend pas de la fréquence, c'est à dire dont le module transverse complexe a pour expression $G^* = G' + jG''$.

G' est stocké dans le fichier de données élastiques, dans le tenseur de rigidité

G'' est stocké dans le fichier de données dissipatives, dans le tenseur de viscosité

Remarque : La conséquence est que pour ce modèle le tenseur de viscoélasticité est inutilisé.

Documents annexes

0.000 0.000 0.000

Remarque : idem SiO₂, à ceci près que des simulations présentée utilisent ce fichier. En fait le fichier n'a servi que de base, et les simulations ont été réalisées exploitant le mécanisme de substitution de paramètres

C.4. Vide

Vide 1.204 Vide liquide
1
0.0
144480.000
1.8e-5
+infinity
293.15
-5.763e-008 1.3115e-005 -0.003372 0.99978
-1.2859e-008 -1.9203e-006 0.0027124 0.99941
0 0 0 1

C.5. Eau

eau 998.2 eau liquide
70.000
0.0
0.2272727273e10
1e-3
3.1e7
293.15
0.000000038045 -0.0000063715 -0.00021271 1.0004
-0.0000025049 0.00041327 -0.026622 1.0232
0 0 0 1

C.6. PMMAGPGS

C.6.1. Fichier élastique

pmma	1100	Polymethylmethacrylate	solideGpGs		
0.068	0.046	0.046	0.000	0.000	0.000
0.046	0.068	0.046	0.000	0.000	0.000
0.046	0.046	0.068	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.011	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.011	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.011
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.600	0.000	0.000			
0.000	2.600	0.000			
0.000	0.000	2.600			
293					

0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
65.00	0.000	0.000			
65.00	0.000	0.000			
65.00	0.000	0.000			
0.000	0.000	0.000			

C.6.2. Fichier dissipatif

pmma 1100	pmma	isotropic			
6.800000e-005	4.600000e-005	4.600000e-005	0.000	0.000	0.000
4.600000e-005	6.800000e-005	4.600000e-005	0.000	0.000	0.000
4.600000e-005	4.600000e-005	6.800000e-005	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	1.100000e-005	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	1.100000e-005	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.100000e-005
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Annexe D. Modélisation en mode manuel

Cette annexe présente le cas de l'utilisation en mode manuel du simulateur. C'est un script matlab. La syntaxe est celle de matlab.

D.1. Simulations simples

Le travail réalisé par cette simulation est identique à celui présenté dans l'annexe A.

```
clear all
%Structures de données *globales*
global precision Ldivers Lnom Lepaisseur Langles Vp delta fichierlog chemindb;
% Mettre le bon chemin
chemindb = 'C:\Documents and Settings\mazein\Mes documents\Love CAD\dat_crstx\';
%nom du fichier dans lequel sauvegarder les données
nomfichier='\Sensibilite effet de masse.xls';
fichier=fopen(nomfichier,'wt');
if fichier==-1
    disp('Impossible d'ouvrir le fichier');
    return
end

% Initialisation des variables globales
Vp=0; % Vitesse de phase
delta=0; % Pertes par propagation
precision=0.01; % sur le calcul de chaque vitesse
nbmodes=1; % nombre de modes à calculer

Ldivers.lambda=40e-6; % périodicité des transducteurs
Ldivers.T=298; % Température
Ldivers.polars_a_garder=2; % Polarisation à garder 2=TH
Ldivers.forcer_polars=0; % Forcer

% Pour réinitialiser les données des matériaux après une (éventuelle)
% exécution précédente
invalide_cache('tous'); % Forcer la relecture des fichiers sur le disque
modif_struct('reset',0,0); % Supprimer les variations de paramètres

% Déclaration de la structure
% Lnom contient le nom du fichier qui contient les données
% Lepaisseur contient l'épaisseur des couches
% Langles contient les angles d'euler ([0,0,0] pour les matériaux isotropes)
couche=1;
Lnom{couche}='quartz';    Lepaisseur(couche)=-Inf;    Langles(couche,:)= [0,132.75,90]; % -Inf
Necessaire sinon ?
couche=couche+1;
Lnom{couche}='sio2';    Lepaisseur(couche)=6e-6;    Langles(couche,:)=zeros(1,3);
couche=couche+1;
Lnom{couche}='pmma';    Lepaisseur(couche)=0.3e-6;    Langles(couche,:)=zeros(1,3);
couche=couche+1;
```

Documents annexes

```
Lnom{couche}='vide';          Lepaisseur(couche)=+inf;          Langles(couche,:)=zeros(1,3); % +Inf
Necessaire sinon ?
Ldivers.nbcouches=couche;
```

```
coupes=[90:10:150]; % Angles de coupes en °
epaisseurs=[1:10]*1e-6; % epaisseurs de SiO2 en m
```

```
% ligne à décommenter pour l'utilisation du C44 de Vellekoop (exemple)
% modif_struct('C44',2,25e9);
```

```
% initialisation des données
nbcoupes = size(coupes,2);
nbepaisseurs = size(epaisseurs,2);
vp_sseffet = zeros (nbepaisseurs,nbcoupes);
vp_aveffet = vp_sseffet;
toto = vp_sseffet;
```

```
disp('début');
disp('Simulations sans effet de masse');
for coupe = 1:nbcoupes
    modif_struct('theta',1,coupes(coupe));
    for epaisseur = 1:nbepaisseurs
        modif_struct('epaisseur',2,epaisseurs(epaisseur));
        s=sprintf('theta = %d - epaisseur = %g',coupes(coupe),epaisseurs(epaisseur));disp(s)
        vp_sseffet(epaisseur,coupe) = calculevitesses(nbmodes,precision);
        toto(epaisseur,coupe) = Lepaisseur(3);
    end
end
```

```
figure
[X,Y]=meshgrid(coupes,epaisseurs);
surf (X,Y,vp_sseffet);
title('Vitesse de phase sans effet de masse');
```

```
%ajout de l'effet de masse
modif_struct('densite',3,1155);
```

```
disp('Simulations avec effet de masse');
for coupe = 1:nbcoupes
    modif_struct('theta',1,coupes(coupe));
    for epaisseur = 1:nbepaisseurs
        modif_struct('epaisseur',2,epaisseurs(epaisseur));
        s=sprintf('theta = %d - epaisseur = %g',coupes(coupe),epaisseurs(epaisseur));disp(s)
        vp_aveffet(epaisseur,coupe) = calculevitesses(nbmodes,precision);
    end
end
```

```
figure
surf (X,Y,vp_aveffet);
title('Vitesse de phase avec effet de masse');
```

```

% Calcul de la sensibilité à l'effet de masse (- pour retourner la courbe)
sens = - ((vp_aveffet-vp_sseffet)./vp_sseffet) * 1/(55 * Lepaisseur(3));

figure
h = surf (X,Y,sens);
colormap('hsv');
shading('interp');
set(h,'EdgeColor','k')
view([-45 15])
title('Sensibilité à l'effet de masse');

%Enregistrement dans le fichier

fprintf(fichier,'Nom\tepaisseur\tphi\ttheta\tpsi\n');
for couche = 1:Ldivers.nbcouches
    fprintf(fichier,'%s\t%g\t%g\t%g\t%g\n',Lnom{couche}, Lepaisseur(couche),Langles(couche,1),
Langles(couche,2),Langles(couche,3));
end

fprintf(fichier,'Vitesses SANS effet de masse\n');
fprintf(fichier,'\t');
fprintf(fichier,'%g\t',coupes);
fprintf(fichier,'\n');

for epaisseur = 1:nbepaisseurs
    fprintf(fichier,'%d\t',epaisseurs(epaisseur));
    fprintf(fichier,'%g\t',vp_sseffet(epaisseur,:));
    fprintf(fichier,'\n');
end

fprintf(fichier,'Vitesses AVEC effet de masse\n');
fprintf(fichier,'\t');
fprintf(fichier,'%g\t',coupes);
fprintf(fichier,'\n');

for epaisseur = 1:nbepaisseurs
    fprintf(fichier,'%d\t',epaisseurs(epaisseur));
    fprintf(fichier,'%g\t',vp_aveffet(epaisseur,:));
    fprintf(fichier,'\n');
end

fprintf(fichier,'Sensibilité à l'effet de masse : 55 kg/m3\n');
fprintf(fichier,'\t');
fprintf(fichier,'%g\t',coupes);
fprintf(fichier,'\n');

for epaisseur = 1:nbepaisseurs
    fprintf(fichier,'%d\t',epaisseurs(epaisseur));
    fprintf(fichier,'%g\t',sens(epaisseur,:));

```

Documents annexes

```
fprintf(fichier,'\n');  
end  
  
fclose(fichier);  
  
disp('fin');
```

D.2. Optimisation de structure

Le but est d'illustrer le fonctionnement de la fonction simplex qui sert à rechercher des minimums dans des espaces à plusieurs dimensions. Un contrôle des bornes y a été ajouté.

La structure est un substrat de quartz, un guide de SiO₂, et une couche sensible de 0,3 µm de PMMA. La longueur d'onde est 40 µm. L'effet de masse est une augmentation de 5 % de la masse volumique du PMMA. L'optimisation porte sur la coupe du quartz et l'épaisseur de SiO₂. Ce calcul revient à chercher le point de sensibilité maximale sur la courbe tracée en D.1.

Elle fait intervenir une fonction intermédiaire, sens_theta_ep, dont le but est de calculer la sensibilité à l'effet de masse. Son code se trouve à la suite

```
% Exemple d'utilisation de la fonction simplex pour optimiser la structure  
% qz/sio2/pmma pour l'effet de masse  
  
clear all  
%Structures de données *globales*  
global precision Ldivers Lnom Lepaisseur Langles Vp delta fichierlog chemindb;  
% Mettre le bon chemin  
chemindb = 'C:\Documents and Settings\mazin\Mes documents\Love CAD\dat_crstx\';  
%nom du fichier dans lequel sauvegarder les données  
  
% Initialisation des variables globales  
Vp=0; % Vitesse de phase  
delta=0; % Pertes par propagation  
precision=0.01; % sur le calcul de chaque vitesse  
nbmodes=1; % nombre de modes à calculer  
  
Ldivers.lambda=40e-6; % périodicité des transducteurs  
Ldivers.T=298; % Température  
Ldivers.polars_a_garder=2; % Polarisation à garder 2=TH  
Ldivers.forcer_polars=1; % Forcer  
  
% Pour réinitialiser les données des matériaux après une (éventuelle)  
% exécution précédente  
invalide_cache('tous'); % Forcer la relecture des fichiers sur le disque  
modif_struct('reset',0,0); % Supprimer les variations de paramètres
```

```

% Déclaration de la structure
% Lnom contient le nom du fichier qui contient les données
% Lepaisseur contient l'épaisseur des couches
% Langles contient les angles d'euler ([0,0,0] pour les matériaux isotropes)
couche=1;
Lnom{couche}='quartz';    Lepaisseur(couche)=-Inf;    Langles(couche,:)= [0,132.75,90]; % -Inf
Necessaire sinon ?
couche=couche+1;
Lnom{couche}='sio2';    Lepaisseur(couche)=6e-6;    Langles(couche,:)=zeros(1,3);
couche=couche+1;
Lnom{couche}='pmma';    Lepaisseur(couche)=0.3e-6;    Langles(couche,:)=zeros(1,3);
couche=couche+1;
Lnom{couche}='vide';    Lepaisseur(couche)=+inf;    Langles(couche,:)=zeros(1,3); % +Inf
Necessaire sinon ?
Ldivers.nbcouches=couche;

% Initialisation du simplex
angles = [100 110 130];
epaisseurs = [1e-6 7e-6 6e-6];
% Tolérances sur les bornes
tol_dim = [0.1 ; 0.1e-6]; %0.1° sur la coupe et 0.1µm sur l'épaisseur
% Tolérance sur la fonction
tol_fun = 0.01;
%initialisation des bornes de recherche
bmin = [80 0];
bmax = [150 10e-6];

simplinit = [angles;epaisseurs];

[p_min,fp_min,nbeval,varargout]=Simplex(@sens_theta_ep,simplinit,tol_dim,tol_fun,'testerbornes',
[bmin; bmax]);

s=sprintf('Angle de coupe = %f°\n epaisseur = %g m\n Sensibilité = %g\n en %d itérations',p_min
(1),p_min(2),fp_min, nbeval);
disp(s);

Fonction sens_theta_ep

function sens=sens_theta_ep(v)
global Lepaisseur;
% v(1)=theta
% v(2)=epaisseur

s=sprintf('theta=%g\tepaisseur=%g',v(1),v(2));disp(s);

modif_struct('theta',1,v(1));
modif_struct('epaisseur',2,v(2));
modif_struct('densite',3,1100);

```

Documents annexes

```
ss=calculevitesses(1,0.01);
```

```
modif_struct('densite',3,1155);
```

```
av=calculevitesses(1,0.01);
```

```
sens=(av-ss)/(ss*55*Lepaisseur(3));
```

Étude de dispositifs à ondes de Love par modélisation numérique de la propagation d'ondes acoustiques. Application à l'optimisation de structures et à la caractérisation de matériaux en vue de la réalisation de capteurs chimiques.

Résumé : L'étude consiste en la réalisation d'une modélisation de la propagation des ondes de Love dans la structure multicouche d'un capteur chimique. L'objectif est d'étudier les performances de différentes structures, une attention particulière a été apportée aux caractéristiques physico-chimiques des matériaux ainsi que des fluides (gaz et liquides) mis en jeux. L'approche numérique proposée permet la résolution des équations de propagation avec en particulier la prise en compte de la piézoélectricité. Les conditions aux interfaces et aux limites sont satisfaites en utilisant la méthode des matrices de transfert. Il en découle la détermination des vitesses de phase et groupe, ainsi que les pertes par propagation. L'outil développé permet de caractériser des matériaux isotropes (masse volumique et module transverse de rigidité) et d'optimiser la sensibilité gravimétrique de plateformes de détection chimique. Une validation expérimentale a été menée visant la détection de composés organophosphorés dans laquelle nous proposons un traitement des réponses transitoires.

<i>Mots clefs</i>	Ondes acoustiques	Ondes de Love	Résolution numérique
	Anisotropie	Piézoélectricité	Pertes par propagation
	Polymères	Viscosité	Viscoélasticité
	Liquide	Gaz	Effet de masse
	Capteurs chimiques	Composés organophosphorés	Humidité

Love wave device study by the numerical modeling of acoustic wave propagation. Application to structure optimization and material characterization in the aim of the design of chemical sensors

Abstract : In this study we model Love wave propagation in the multilayered structure of a chemical sensor. The objective is to study different structures performances and a very close attention was paid to the modeling of solids and fluids mechanical behavior. The numerical approach allows the resolution of propagation equations including piezoelectricity. Interfacial and limit conditions are satisfied using the transfer matrix method. It enabled us to compute wave phase and group velocities, and the loss propagation. The developed tool allows material mass density and shear modulus characterization, and the optimization of chemical compound detection platform gravimetric sensitivity optimization. An experimental validation was done using organophosphorous compounds, we also present a transient analysis of the sensor response.

<i>Keywords</i>	Acoustic waves	Love waves	Numerical resolution
	Anisotropy	Piezoelectricity	Propagation loss
	Polymers	Viscosity	Viscoelasticity
	Liquid	Gaz	Mass effect
	Chemical sensor	Organophosphorous compound	Humidity

Discipline : Electronique

Laboratoire IXL (CNRS UMR 5818) – Université Bordeaux 1 – ENSEIRB
351, Cours de la Libération – 33405 Talence