



Eléments de cours de

MECANIQUE DES MILIEUX CONTINUS ET DENSES

Yann VAILLS
Professeur



Lisez et relisez ce cours afin d'être presque aptes à le refaire vous-mêmes.

« Le travail : ce qui est susceptible d'introduire une différence significative dans le champ du savoir, au prix d'une certaine peine..., et avec l'éventuelle récompense d'un certain plaisir, c'est-à-dire d'un accès à une autre figure de la vérité ».

Michel Foucault, Jean-Claude Milner, Paul Veyne et François Wahl

Bibliographie

- Physique des matériaux : Systèmes anisotropes. Représentations, propriétés physiques simples et couplées, M. Rousseau, A. Désert et M. Henry, ed. Ellipse, coll. TechnoSup (2012)
- Ondes élastiques dans les solides, application au traitement du signal, E. Dieulesaint et D. Royer, ed. Masson (1996)
- Physique des solides, Neil-W Ashcroft, N-David Mermin ed. EDP Sciences (2002)
- Introduction to Solid State Physics, Charles Kittel 8th edition John Wiley & Sons, Inc. 2005 ou la version française de la 8^{ème} édition : Physique de l'état solide françaises, Dunod, (2007)
- Mécanique des milieux déformables, équations générales, solides élastiques, fluides, turbomachines, Mostafa FOURAR et Claude CHEZE, *Ellipses* (2002)
- Résistance des matériaux, Pierre AGATI, Frédéric LEROUGE et Marc ROSSETO, *DUNOD* (1999)
- Mécanique des matériaux solides, Jean LEMAITRE et Jean-Louis CHABOCHE, *DUNOD* (1996)
- Cours de Physique, Electromagnétisme Tome 2, Chap. 31, 38 et 39, [Richard Feynman](#), on en trouvera la dernière édition française, datée de 2013, chez Dunod. Ce magnifique document pédagogique a été rédigé le Prix Nobel de Physique 1965, à partir des notes prises par ses étudiants lors de ses leçons.
- Mémo visuel de Physique : l'essentiel en fiches (Licence-Prépas-CAPES), sous la direction de Giancarlo Faini, Dunod 2017

Ce document est une copie du diaporama projeté en cours. Les explications orales données lors des leçons ne sont donc pas rédigées ici.



*Naica - La grotte aux cristaux géants
(État de Chihuahua, Mexique)*



La chaussée des géants (Irlande)

Ce cours est construit en trois parties. La première, intitulée « VECTEURS – TENSEURS-PROBLEMES RELATIFS AUX CHANGEMENTS DE REPERES – SYMETRIES », introduit la notion mathématique de tenseurs, qui permet de représenter des grandeurs ou propriétés physiques, et de les relier entre elles.

On trouvera ensuite dans ce cours des éléments traditionnellement dits de « mécanique milieux continus » (deuxième partie) où le milieu, considéré comme continu, se prête ainsi à un traitement mathématique simplifié, qui néglige en particulier la discontinuité de la matière due à sa structure à l'échelle atomique. Ainsi on peut utiliser des fonctions continues et dérivables pour décrire la matière, et assimiler les petits déplacements ou petites variations à des différentielles, dans la plupart des cas. Cette deuxième partie, intitulée « PROPRIETES MECANQUES DE LA MATIERE - ELASTICITE STATIQUE - ELASTICITE DYNAMIQUE », traite des déformations élastiques statiques et dynamiques de la matière considérée comme milieu continu. Les vibrations de la matière qui sont abordées sont celles qui apparaissent en proximité du centre de la 1^{ère} zone de Brillouin.

Dans une troisième partie, intitulée « VIBRATIONS ATOMIQUES, PHONONS », l'approche des phénomènes de vibration dans la matière est élargie en prenant en compte la discontinuité de la matière qui apparaît en prenant en compte l'aspect atomique. Cette échelle de description généralise et donc incluse les résultats obtenus dans l'approche continue.

Au total il s'agit donc ici du traitement de la mécanique des milieux denses, dans un premier temps dans l'approximation des milieux continus, puis prenant en compte la structure atomique de la matière, dans le cadre des approximations adiabatique et harmonique, typiques de la physique des solides.

VECTEURS – TENSEURS- PROBLEMES RELATIFS AUX CHANGEMENTS DE REPERES - SYMETRIES

I. Loi de Curie ou : « Comment trouver un lien élémentaire entre cause et effet »

« Dans un processus physique la symétrie des effets est supérieure à la symétrie des causes : on ne peut pas perdre de symétrie au cours d'un processus physique. »

Exemples (développés en séance) :

- Réflexion d'un rayon lumineux sur un miroir : la loi de Curie montre que le rayon réfléchi est dans le plan défini par le rayon incident et la normale au miroir
- L'action d'un champ magnétique sur un fil parcouru par un courant électrique : la loi de Curie montre que le fil est soumis à une force qui se trouve dans le plan perpendiculaire au champ magnétique
- La loi de Curie montre que l'effet piézoélectrique ne peut avoir lieu que dans des milieux dont le groupe de symétrie ne contient pas de centre d'inversion

A partir de ce point le problème posé est celui de la traduction mathématique de la relation entre causes et effets.

Dans les milieux anisotropes une cause C appliquée suivant une direction donne naissance à un effet $E(C)$, en général non parallèle à la cause.

Illustration: dans un milieu non ordonné on a une relation scalaire entre champ électrique appliqué et densité de courant induite : $\vec{j} = \gamma \vec{E}$. Par contre dans les milieux anisotropes \vec{j} et \vec{E} ne sont généralement pas parallèles.

$$\vec{j} = \begin{pmatrix} j_1 \\ j_2 \\ j_3 \end{pmatrix} = \bar{\gamma} \vec{E} = \begin{bmatrix} \gamma_{11} & \gamma_{12} & \gamma_{13} \\ \gamma_{21} & \gamma_{22} & \gamma_{23} \\ \gamma_{31} & \gamma_{32} & \gamma_{33} \end{bmatrix} \times \begin{pmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \end{pmatrix}$$

La notion de « **tenseur¹** » apparaît donc dès que l'on veut établir des **relations linéaires** entre **causes \mathcal{C}** et **effets \mathcal{E}** dans les milieux anisotropes.

Si \mathcal{C} et \mathcal{E} sont des grandeurs vectorielles, en se limitant au domaine linéaire la relation entre les composantes \mathcal{C}_1 , \mathcal{C}_2 et \mathcal{C}_3 des causes et \mathcal{E}_1 , \mathcal{E}_2 et \mathcal{E}_3 des effets fait intervenir **9 coefficients \mathcal{A}_{ij}**

$$\vec{\mathcal{E}} = \begin{pmatrix} \mathcal{E}_1 \\ \mathcal{E}_2 \\ \mathcal{E}_3 \end{pmatrix} = \bar{\mathcal{A}} \times \vec{\mathcal{C}} = \begin{bmatrix} \mathcal{A}_{11} & \mathcal{A}_{12} & \mathcal{A}_{13} \\ \mathcal{A}_{21} & \mathcal{A}_{22} & \mathcal{A}_{23} \\ \mathcal{A}_{31} & \mathcal{A}_{32} & \mathcal{A}_{33} \end{bmatrix} \times \begin{pmatrix} \mathcal{C}_1 \\ \mathcal{C}_2 \\ \mathcal{C}_3 \end{pmatrix}$$

\mathcal{C}_i ou \mathcal{E}_i et \mathcal{A}_{ij} sont de natures différentes :

- \mathcal{C}_i ou \mathcal{E}_i sont des **grandeurs physiques**, elles caractérisent l'état du milieu physique, elles peuvent être nulles ou non
- \mathcal{A}_{ij} ces coefficients caractérisent une **propriété** du matériau, ils ne peuvent pas être tous nuls.

Quelques exemples de tenseurs :

- tenseur de rang 0 (scalaire) :
 - densité, chaleur spécifique (propriétés)
 - température (grandeur d'état du milieu)
- tenseur de rang 1 (vecteur) :
 - pyroélectricité (propriétés)
 - champ électrique, force (grandeurs d'état du milieu)
- tenseur de rang 2 : permittivité diélectrique $D_i = \epsilon_{ij} E_j$
- tenseur de rang 3 : piézoélectricité $D_k = d_{ijk} S_{ij}$
- tenseur de rang 4 : élasticité $T_{ij} = C_{ijkl} S_{kl}$

¹ On pourra se référer à l'excellent cours de Richard Feynman « Electromagnétisme » Tome 2, Chap. 31 : Tenseurs

II. Coordonnées covariantes et contravariantes

Soient un espace vectoriel E et deux bases dans cet espace $\{|e_i\rangle\}$ et $\{|e_i'\rangle\}$ $i = 1, 2, 3$

$$|e_j\rangle = \sum_i a_j^i |e_i'\rangle = a_j^i |e_i'\rangle$$

en notation d'Einstein : sommation sur les indices répétés

$$(|e_1\rangle |e_2\rangle |e_3\rangle) = (|e_1'\rangle |e_2'\rangle |e_3'\rangle) \begin{pmatrix} a_1^1 & a_2^1 & a_3^1 \\ a_1^2 & a_2^2 & a_3^2 \\ a_1^3 & a_2^3 & a_3^3 \end{pmatrix}$$

Sommation sur les lignes

a_j^i → Indice de ligne
 a_j^i → Indice de colonne

Problème de la transformation des vecteurs et de leurs coordonnées dans un changement de repère :

$$\text{soit } |V\rangle \in E, |V\rangle = \alpha^j |e_j\rangle \quad \text{et} \quad |V\rangle = \beta^i |e_i'\rangle$$

$$\text{donc } \alpha^j |e_j\rangle = |V\rangle = \beta^i |e_i'\rangle = \alpha^j a_j^i |e_i'\rangle$$

Remarque : pour représenter les vecteurs on utilise ici la notation $\langle \quad |$: appelée « **bra** »

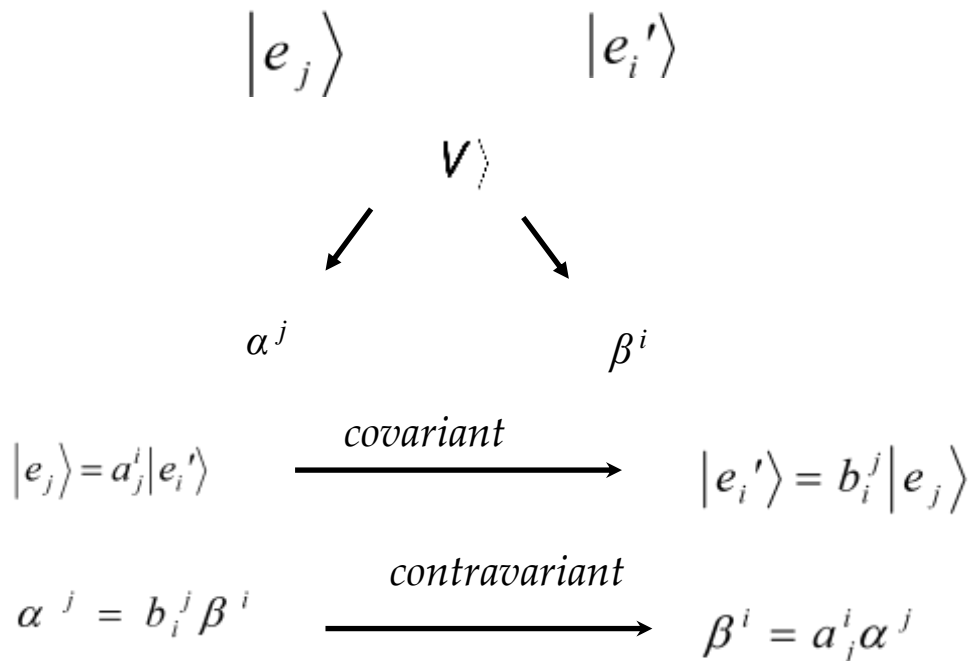
pour les *vecteurs lignes* et $|\quad \rangle$ appelée « **ket** » pour les *vecteurs colonnes*, provenant de l'anglais « **bracket** » : signifiant « crochets ».

$$\text{On a donc : } \beta^i = \alpha^j a_j^i \quad \text{de même} \quad \alpha^j = \beta^k b_k^j$$

$$\text{d'où } \beta^i = a_j^i b_k^j \beta^k \quad \text{donc} \quad a_j^i b_k^j = \delta_k^i \quad \text{et} \quad [a_j^i]^{-1} = [b_k^j]$$

on pourra donc écrire :

$$\left. \begin{pmatrix} \alpha^1 \\ \alpha^2 \\ \alpha^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1^1 & b_2^1 & b_3^1 \\ b_1^2 & b_2^2 & b_3^2 \\ b_1^3 & b_2^3 & b_3^3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta^1 \\ \beta^2 \\ \beta^3 \end{pmatrix} \right\} \text{Somme sur les colonnes}$$



En physique dans 95% des cas on travaille avec des repères orthonormés. Dans ce cas la matrice de changement de base est unitaire, et on a :

$$\boxed{B = [b_j^i] = A^{-1} = A^t} \quad \text{soit : } a_i^j = b_j^i \text{ d'où :}$$

$$\begin{aligned} |e_j\rangle &= a_j^i |e_i'\rangle & |e_i'\rangle &= a_j^i |e_j\rangle \\ \alpha^j &= a_j^i \beta^i & \beta^i &= a_j^i \alpha^j \end{aligned}$$

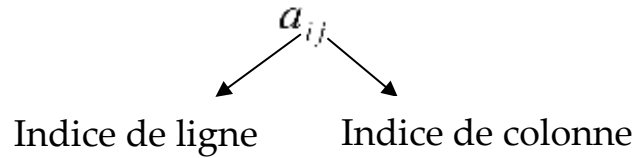
on change alors de notation en amenant les deux indices en bas, l'indice de ligne devenant le premier des deux :

$$|e_j\rangle = a_{ij}|e_i'\rangle$$

$$|e_i'\rangle = a_{ij}|e_j\rangle$$

$$\alpha_j = a_{ij}\beta_i$$

$$\beta_i = a_{ij}\alpha_j$$



III. Notion de tenseur

III.1. Transformation des composantes d'un tenseur

Soient deux repères orthonormés munis des deux bases suivantes $(|e_i\rangle)$ et $(|e_i'\rangle)$

Soient deux vecteurs et leurs coordonnées dans les deux repères :

$$|p\rangle : (p_i) \text{ et } (p_i')$$

$$|q\rangle : (q_i) \text{ et } (q_i')$$

$$i = 1, 2, 3$$

ces deux vecteurs représentent des grandeurs physiques reliées entre elles par une propriété traduite par un tenseur T . On peut écrire les relations suivantes :

$$p_i = T_{ij}q_j \quad \text{et} \quad p'_k = T'_{kl}q'_l$$

$$\text{soit : } \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \end{pmatrix}$$

$$\text{et : } \begin{pmatrix} p'_1 \\ p'_2 \\ p'_3 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} T'_{11} & T'_{12} & T'_{13} \\ T'_{21} & T'_{22} & T'_{23} \\ T'_{31} & T'_{32} & T'_{33} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} q'_1 \\ q'_2 \\ q'_3 \end{pmatrix}$$

$$\text{or } p'_k = a_{ki}p_i = a_{ki}T_{ij}q_j$$

de plus $q_j = a_{ij}q'_l$

donc $p'_k = a_{ki}a_{lj}T_{ij}q'_l = T'_{kl}q'_l$

soit :

$$T'_{kl} = a_{ki}a_{lj}T_{ij} \text{ et } T_{kl} = a_{ik}a_{jl}T'_{ij}$$

par ailleurs :

$$x'_k = a_{ki}x_i \text{ et } y'_l = a_{lj}y_j$$

donc :

$$x'_k y'_l = a_{ki}a_{lj}x_i y_j$$

Ce qui démontre que les composantes d'un tenseur de rang 2 se transforment comme un produit de 2 composantes de vecteur.

On admettra que cette propriété des tenseurs de rang 2 se généralise aux tenseurs de rang n soit : **les composantes d'un tenseur de rang n se transforment comme le produit de n composantes de vecteurs.** Ainsi on écrira :

$$A'_{...ijk...} = \dots a_{il}a_{jm}a_{kn} \dots A_{...lmn...}$$

Ceci provient de ce qu'un tenseur de rang n peut être considéré comme le produit tensoriel de n tenseur de rang 1.

III .2. Eléments de symétrie des cristaux et composantes indépendantes des tenseurs (réduction des tenseurs)

$A_{...ijk...}$ sont les composantes, dans un repère $Ox_1x_2x_3$ d'un tenseur traduisant une propriété donnée d'un certain cristal.

$A'_{...ijk...}$ sont les composantes de ce tenseur dans le même repère et pour **une orientation nouvelle du cristal** obtenue en appliquant une opération de symétrie S , appartenant au groupe de symétrie ponctuelle du cristal.

Il revient au même d'appliquer S^{-1} au système d'axes en laissant le cristal dans son orientation initiale.

[a] = matrice de changement de repère associée à S^{-1} , on a :

$$A'_{...ijk...} = \dots a_{ip}a_{jq}a_{kr} \dots A_{...pqr...}$$

S étant une opération de la classe de symétries ponctuelles du cristal, la nouvelle orientation est indiscernable de celle de départ donc :

$$A'_{...ijk...} = A_{...ijk...}$$

Ainsi l'invariance des propriétés physiques au cours des opérations de symétries impose des relations entre les termes des tenseurs, réduisant le nombre des termes indépendants.

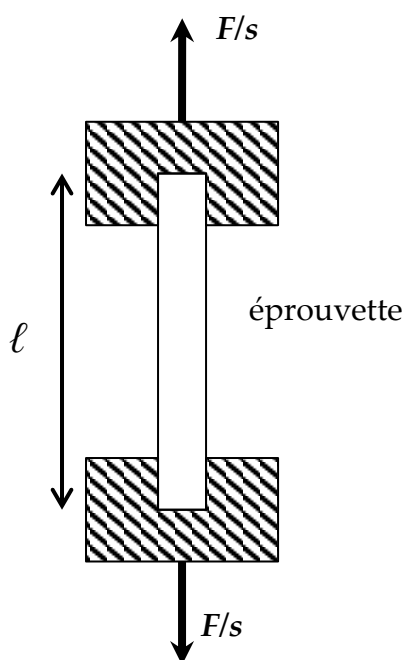
$$A_{...ijk...} = \dots a_{ip} a_{jq} a_{kr} \dots A_{...pqr...}$$

Ces relations réduisent généralement le nombre des composantes indépendantes des tenseurs.

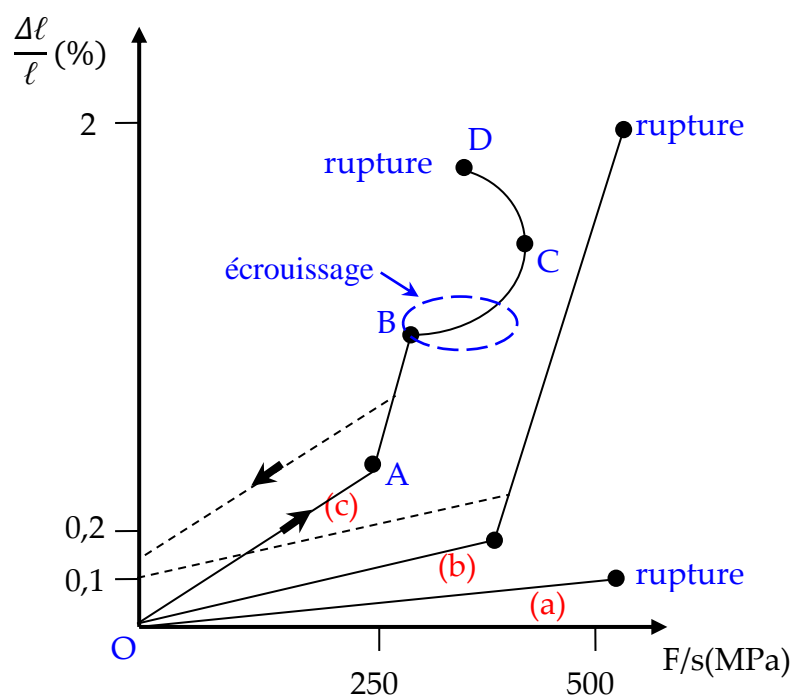
PROPRIETES MECANIQUES DE LA MATIERE

A. ELASTICITE STATIQUE²

L'application d'efforts à un solide provoque des déplacements d'ensemble et des déformations (variations de directions et de distances relatives entre les points). On ne s'intéresse ici qu'aux dernières.



F/s contrainte exercée : F = force,
 s = section de l'éprouvette



$$\frac{\Delta \ell}{\ell} = \frac{1}{E} \frac{F}{s}$$

² On se référera à l'excellent cours de Richard Feynman « Electromagnétisme » Tome 2, Chap. 38 : Elasticité, Chap. 39 : Milieux élastiques

Dans le domaine des petites déformations **réversibles**, la relation entre efforts et déformations est linéaire, c'est le domaine de l'élasticité.


Le **milieu** déformé est considéré comme **continu**.

(a) : rupture fragile, c'est le cas des céramiques ou des verres en général

(b) et (c) : minéraux, métaux, plastiques, bois...

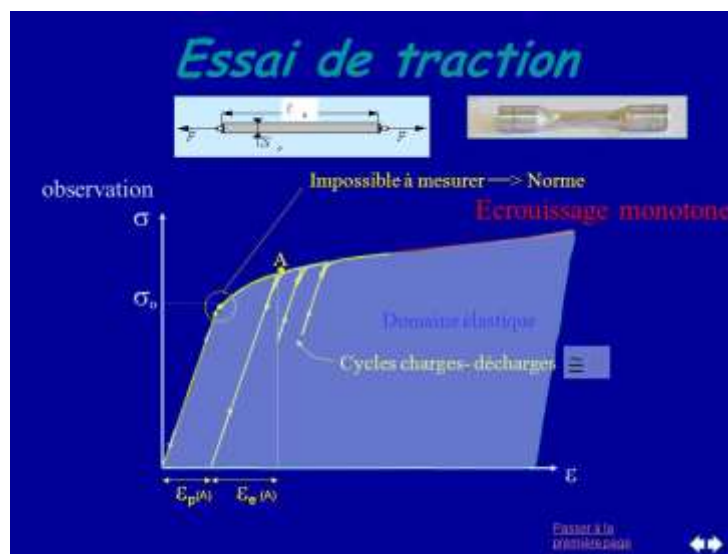
OA : zone d'élasticité (réversible)

AB : zone de plasticité (apparition d'étirements irréversibles)

BC : zone de durcissement 

CD : étirements locaux 

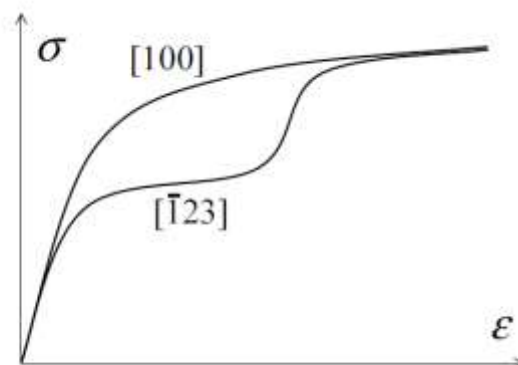
D : rupture



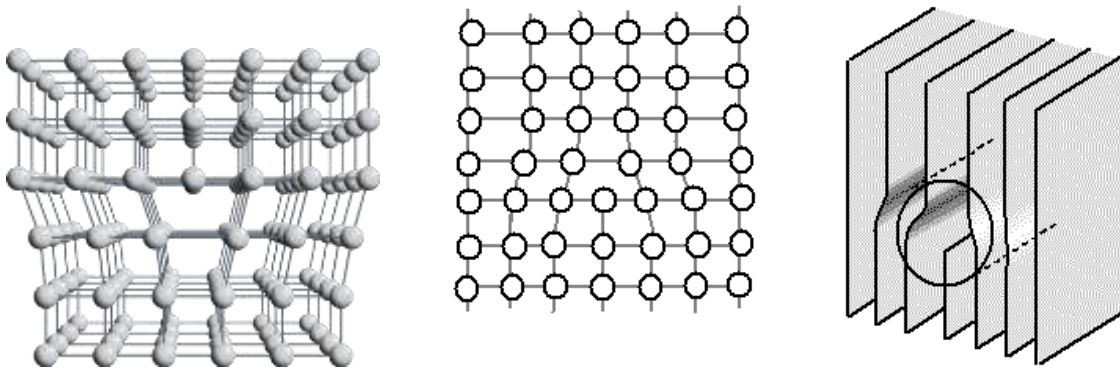
Document d'après Evrard Samson



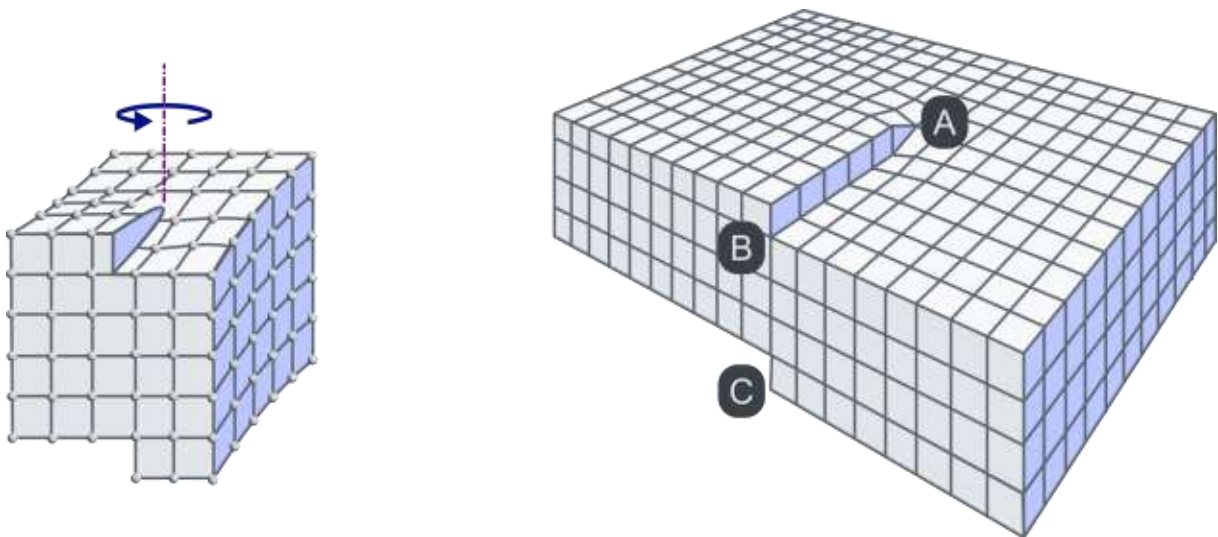
Déformation plastique d'un monocristal d'aluminium en traction : les dislocations coins, au terme de leurs déplacements sont sorties du matériau



Courbe de traction schématique d'un monocristal d'aluminium pur deux axes différents de traction



Dislocation coin



Dislocation vis

II-1 Dislocations Vis et Coin

Dislocation Découpe selon S en appui sur l Translation des lèvres de b^* **Vecteur de Burgers**
 Déplacement de matière et Recollage \rightarrow Création d'un **Champ Contraintes Internes** Indépendant de S
 Caractérisé par la **Ligne de Dislocation** l orientée (t^*) et son vecteur b^*

Réseau sans défaut \vec{d}_{ij} déplacement d'un atome par rapport au réseau sans défaut

Dislocation Coin $b^* \perp l^*$
 Une Ligne de Dislocation se termine à la Surface, en Boucle ou sur un Noeud
 Loi des Noeuds l^* tous convergents ou divergents $\sum b^* = 0$

Dislocation Vis $b^* \parallel l^*$

Insertion d'un demi Plan atomique

$\oint \vec{d}_{ij} = \oint \text{Grad} \vec{d}_{ij} \cdot d\vec{x} = b^*$

Document d'après Asce Lefeuvre

Plan de glissement

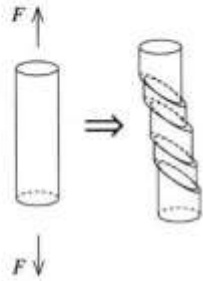
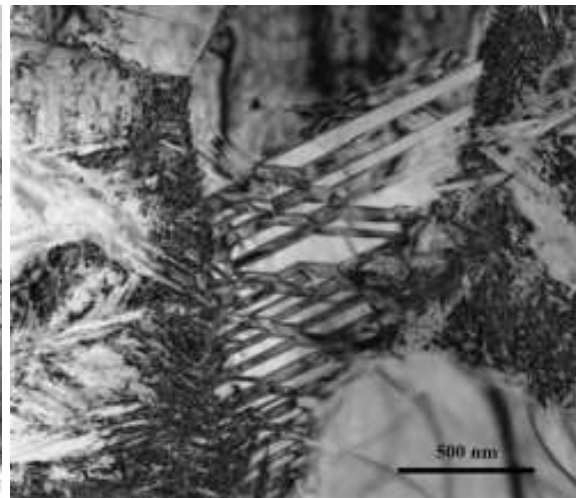
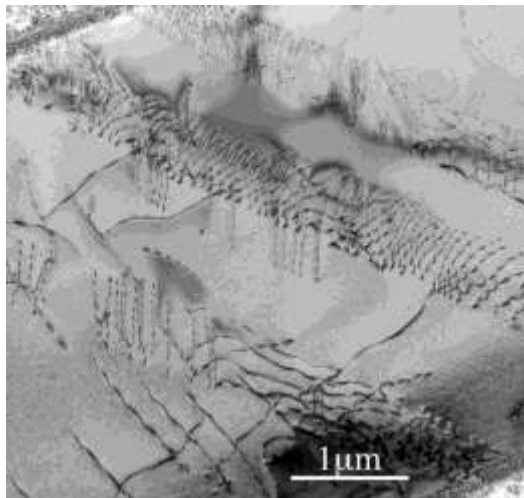
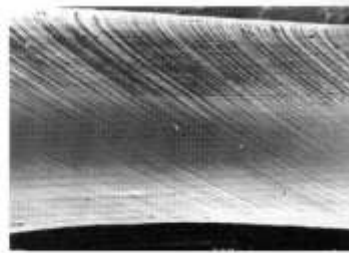
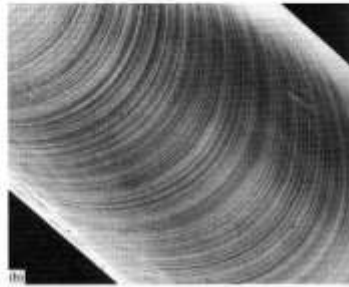


Image de microscopie optique de la surface d'un fil de fer déformé par une flexion (en haut). Les lignes fines visibles sur la surface du fil correspondent à l'intersection de plan de glissement avec cette dernière.

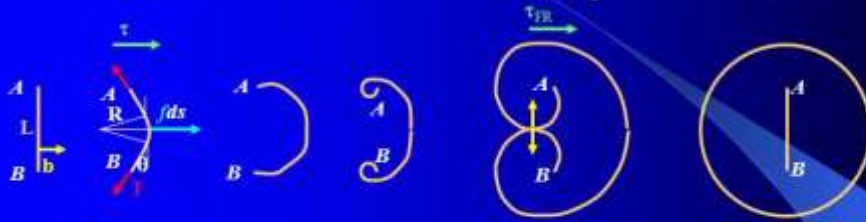


*Dislocations dans un métal vues par microscope électronique à transmission (MET)
Crédit : Centre des matériaux – Ecole des Mines de Paris*

III-5 Multiplication des Dislocations

Moulin de Frank – Read

Le **Moulin** de Frank – Read est un des mécanismes efficaces de **Multiplication des Dislocations**.



Un segment de **Dislocation** de longueur L , vecteur de Burgers b est ancré en deux points A et B

Sous l'action de la **Cission réduite** τ qui s'exerce dans le plan de glissement il se courbe (Rayon R)

L'arc ds est en équilibre sous l'action de la Force $f ds = \tau b ds$ et des Tensions de Ligne T $f ds = 2 T \sin \theta \approx 2 T \frac{ds}{R} \Rightarrow \theta = \frac{\tau b ds}{2 T}$

Lorsque $\tau \approx R$ jusqu'à $R = \frac{L}{2}$ pour $\tau = \tau_{FR}$ Contrainte **Critique** d'Activation du **Moulin** $T = \frac{1}{2} \mu b^2 \Rightarrow \tau_{FR} = \frac{\mu b^2}{L}$

où la recombinaison des portions de signes opposés éjecte une boucle qui se propage par glissement et un nouveau segment AB qui démarre un nouveau cycle



Un tel moulin peut produire jusqu'à 500 boucles

Photos J.M. Marchon, G. Wynn

Document d'après Asce Lefevre

Arrêt d'une source

- Les dislocations s'arrêtent sur des obstacles
 - croisement avec d'autres dislocations circulant dans des plans qui se coupent (réseaux cubiques)
 - défauts 2D ou 3D
- Généralement ceci provoque l'arrêt des sources après création de 1.000 à 10.000 boucles de dislocations.

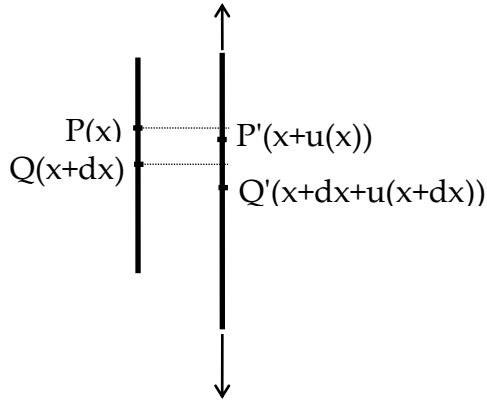


Crédit : Mélissa Dias

I. Déformations élastiques

I.1. Déformation unidimensionnelle

L'allongement d'un fil soumis à une force \vec{F} va permettre d'introduire les grandeurs que l'on retrouvera dans un cas plus général.



$$PQ = dr$$

$$P'Q' = dr'$$

$dr' - dr$ caractérise la déformation du segment PQ
ici $dr' - dr = u(x+dx) - u(x)$

$$dr' - dr = \frac{\partial u}{\partial x} dx = du$$

$\frac{\partial u}{\partial x}$ caractérise la déformation et est sans dimension. La position du point choisi comme origine est sans importance.

I.2. Déformation tridimensionnelle

$$P(x_1, x_2, x_3)$$

$$Q(x_1 + dx_1, x_2 + dx_2, x_3 + dx_3)$$

On exerce une contrainte sur le segment PQ \Rightarrow P'Q'

$$P' \begin{pmatrix} x_1 + u_1(x_1, x_2, x_3) \\ x_2 + u_2(x_1, x_2, x_3) \\ x_3 + u_3(x_1, x_2, x_3) \end{pmatrix}$$

$$Q' \begin{pmatrix} x_1 + dx_1 + u_1(x_1 + dx_1, x_2 + dx_2, x_3 + dx_3) \\ x_2 + dx_2 + u_2(x_1 + dx_1, x_2 + dx_2, x_3 + dx_3) \\ x_3 + dx_3 + u_3(x_1 + dx_1, x_2 + dx_2, x_3 + dx_3) \end{pmatrix}$$

$$|dV\rangle = |dr'\rangle - |dr\rangle = \begin{pmatrix} du_1 = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial u_1}{\partial x_2} dx_2 + \frac{\partial u_1}{\partial x_3} dx_3 \\ du_2 = \frac{\partial u_2}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} dx_2 + \frac{\partial u_2}{\partial x_3} dx_3 \\ du_3 = \frac{\partial u_3}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} dx_2 + \frac{\partial u_3}{\partial x_3} dx_3 \end{pmatrix}$$

Soit :

$$|dV\rangle = |dr'\rangle - |dr\rangle = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} & \frac{\partial u_1}{\partial x_2} & \frac{\partial u_1}{\partial x_3} \\ \frac{\partial u_2}{\partial x_1} & \frac{\partial u_2}{\partial x_2} & \frac{\partial u_2}{\partial x_3} \\ \frac{\partial u_3}{\partial x_1} & \frac{\partial u_3}{\partial x_2} & \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} dx_1 \\ dx_2 \\ dx_3 \end{pmatrix}$$

$$\text{soit : } |dV\rangle = [V] |dr\rangle$$

$[V]$ est appelé **tenseur des variations**, il traduit non seulement les déformations, mais aussi, les éventuelles rotations et translations d'ensemble (qui ne sont pas des déformations puisqu'elles conservent les longueurs).

Le tenseur $[V]$ traduit aussi une modification des distances entre points. Vérifions-le en calculant $dr'^2 - dr^2$:

$$\begin{aligned} dr'^2 - dr^2 &= (dx_1 + du_1)^2 + (dx_2 + du_2)^2 + (dx_3 + du_3)^2 - (dx_1^2 + dx_2^2 + dx_3^2) \\ &= 2(dx_1 du_1 + dx_2 du_2 + dx_3 du_3) + du_1^2 + du_2^2 + du_3^2 \end{aligned}$$

Or dans le domaine des déformations élastiques les déformations sont très petites par rapport aux dimensions des objets.

Donc $du_k du_l \ll dx_i du_j$ (généralement $\approx 10^2$ à 10^3 fois plus petit) et on peut écrire :

$$dr'^2 - dr^2 \approx 2(dx_1 du_1 + dx_2 du_2 + dx_3 du_3)$$

soit encore :

$$dr'^2 - dr^2 \approx 2(dx_1 du_1 + dx_2 du_2 + dx_3 du_3)$$

et

$$dr'^2 - dr^2 = 2\langle dr|dV\rangle$$

$$\boxed{dr'^2 - dr^2 = 2\langle dr|V|dr\rangle}$$

quadrique associée à $[V]$

Propriétés d'un tenseur : on peut l'écrire sous la forme de la somme d'un tenseur symétrique et d'un tenseur antisymétrique. D'où :

$$[V] = [S] + [A]$$

$$[V] = \begin{bmatrix} V_{11} & \frac{V_{12} + V_{21}}{2} & \frac{V_{13} + V_{31}}{2} \\ \frac{V_{21} + V_{12}}{2} & V_{22} & \frac{V_{23} + V_{32}}{2} \\ \frac{V_{31} + V_{13}}{2} & \frac{V_{32} + V_{23}}{2} & V_{33} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & \frac{V_{12} - V_{21}}{2} & \frac{V_{13} - V_{31}}{2} \\ -\frac{V_{12} - V_{21}}{2} & 0 & \frac{V_{23} - V_{32}}{2} \\ -\frac{V_{13} - V_{31}}{2} & -\frac{V_{23} - V_{32}}{2} & 0 \end{bmatrix}$$

La quadrique associée à un tenseur antisymétrique étant nulle il reste :

$$\boxed{dr'^2 - dr^2 = 2\langle dr|S|dr\rangle}$$

Donc ce qui caractérise les déformations est la partie symétrique du tenseur des variations.

On appelle **$[S]$: tenseur des déformations**

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \text{ avec } i, j = 1, 2, 3$$

Remarque :

La partie antisymétrique du tenseur des variations correspond à une rotation du système dont le tenseur est $[R] = [I] + [A]$ où $[I]$ est la matrice identité.

En effet : une matrice de rotation dans l'espace à 3 dimensions autour d'un axe quelconque prend la forme suivante $[R] = \begin{bmatrix} 1 & R_{12} & R_{13} \\ -R_{12} & 1 & R_{23} \\ -R_{13} & -R_{23} & 1 \end{bmatrix}$. Où il existe bien entendu des relations entre les différentes valeurs des éléments R_{ij} .

Rappel sur la rotation à 2 dimensions :

Ainsi à deux dimensions nous allons montrer que la matrice de rotation d'un angle θ dans le sens direct s'écrit :

$$[R_\theta] = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}$$

On exprimera l'image \vec{W}' de \vec{W} dans la rotation d'angle θ par la relation :

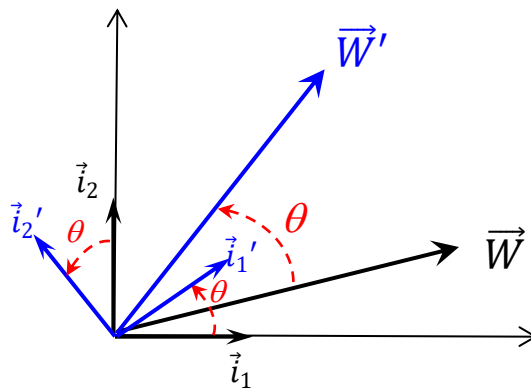
$$\vec{W}' = [R_\theta]\vec{W}$$

Or si \vec{W} se décompose comme suit en fonction des vecteurs de la base orthonormée (\vec{i}_1, \vec{i}_2) :

$$\vec{W} = \alpha\vec{i}_1 + \beta\vec{i}_2$$

Son image \vec{W}' par la rotation d'angle θ sera :

$$\begin{aligned} \vec{W}' &= \alpha[R_\theta]\vec{i}_1 + \beta[R_\theta]\vec{i}_2 \\ \vec{W}' &= \alpha\vec{i}_1' + \beta\vec{i}_2' \end{aligned}$$



Soit d'après la figure ci-dessus :

$$\vec{W}' = \alpha(\cos\theta\vec{i}_1 + \sin\theta\vec{i}_2) + \beta(-\sin\theta\vec{i}_1 + \cos\theta\vec{i}_2)$$

Soit :

$$\vec{W}' = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} \vec{W}$$

D'où l'on voit effectivement que :

$$[R_\theta] = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}$$

Avec les notations qui nous intéressent ici nous écrivons donc :

$$|dr'\rangle = [R] |dr\rangle$$

Or :

$$|dr'\rangle - |dr\rangle = [V] |dr\rangle$$

Donc :

$$|dr'\rangle = [V] |dr\rangle + |dr\rangle = \{[V] + [I]\} |dr\rangle$$

Dans le cas où il n'y a pas déformation, mais seulement rotation nous aurons :

$$[S] = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Donc :

$$[V] = [A]$$

D'où :

$$[R] = [I] + [A]$$

I.3. Signification des termes du tenseur de déformations

a) Trace de [S]

La trace de [S] est égale à la dilatation relative

$$\theta = \frac{d\tau}{\tau} = \sum_{i=1}^{i=3} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial u_i}{\partial x_i}$$

(en utilisant la notation d'Einstein)

en effet :

$$d\tau = \tau' - \tau = (dx_1 + du_1)(dx_2 + du_2)(dx_3 + du_3) - dx_1 dx_2 dx_3$$

$$= dx_1 dx_2 du_3 + dx_1 dx_3 du_2 + dx_3 dx_2 du_1 + dx_1 du_2 du_3 + dx_2 du_3 du_1 + dx_3 du_2 du_1 + du_1 du_2 du_3$$

$$\neq dx_1 dx_2 du_3 + dx_1 dx_3 du_2 + dx_3 dx_2 du_1$$

avec $\tau = dx_1 dx_2 dx_3$ il vient immédiatement :

$$(\tau' - \tau) / \tau = du_1 / dx_1 + du_2 / dx_2 + du_3 / dx_3$$

Quod erat demonstrandum !

b) Allongement relatif dans une direction donnée

L'allongement relatif dans une direction $|n\rangle$ est égal à la quadrique de $[S]$ pour cette direction :

$$\frac{\Delta \ell}{\ell}(|n\rangle) = \langle n|S|n\rangle$$

en effet :

$$dr'^2 - dr^2 = (dr' - dr)(dr' + dr) \approx 2 dr(dr' - dr)$$

or :

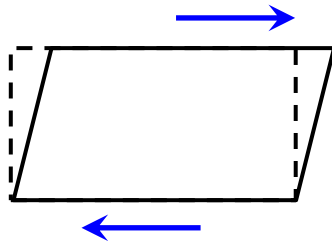
$$dr(dr' - dr) = \langle dr|V|dr\rangle$$

donc :

$$\frac{\Delta \ell}{\ell} = \frac{(dr' - dr)}{dr} = \frac{\langle dr|V|dr\rangle}{dr^2} = \langle n|V|n\rangle = \langle n|S|n\rangle$$

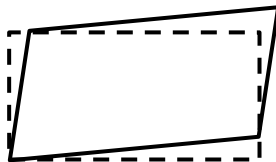
I.4. Exemples de variations

a) Cisaillement simple



Tenseur des variations associé : $[V] = \begin{bmatrix} 0 & k \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$

b) Cisaillement pur

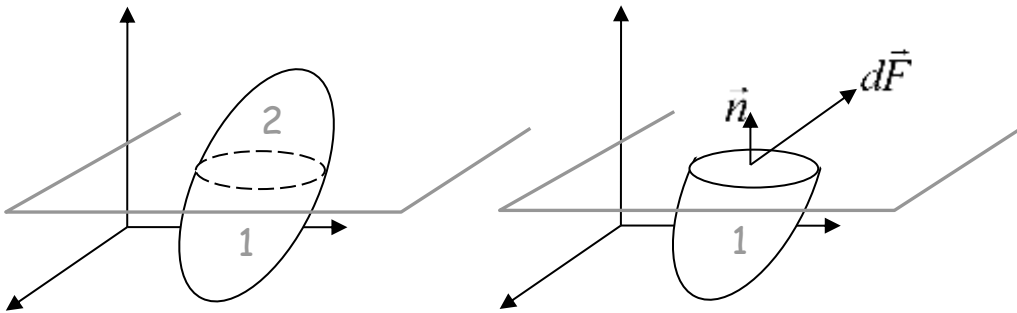


Tenseur des variations associé : $[V] = \begin{bmatrix} 0 & k' \\ k' & 0 \end{bmatrix}$

II. Contraintes

On considère un corps en équilibre statique. Il est soumis à des contraintes homogènes. La force \vec{F} agissant sur le volume est la somme des forces qui s'exercent sur sa surface Σ . On peut écrire :

$$\vec{F} = \oiint_{\Sigma} d\vec{F} = \oiint_{\Sigma} \vec{T} ds = \vec{0}$$



On a : $|dF\rangle = \begin{pmatrix} dF_1 \\ dF_2 \\ dF_3 \end{pmatrix}$ et

le vecteur surface $|ds\rangle = ds|n\rangle = \begin{pmatrix} ds_1 \\ ds_2 \\ ds_3 \end{pmatrix} = ds \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{pmatrix}$

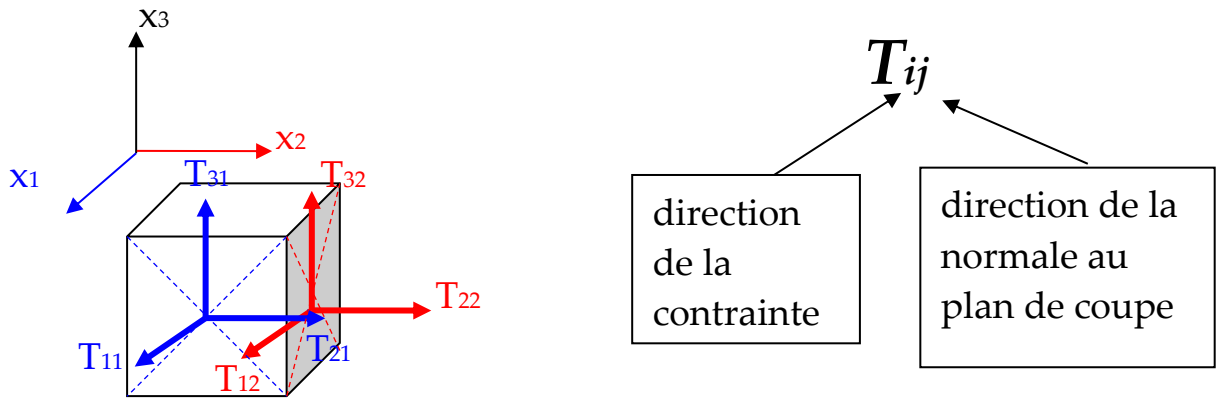
soit : $dF_i = T_{i1}ds_1 + T_{i2}ds_2 + T_{i3}ds_3$

soit : $\frac{dF_i}{ds} = T_{i1} \frac{ds_1}{ds} + T_{i2} \frac{ds_2}{ds} + T_{i3} \frac{ds_3}{ds} = T_{i1}n_1 + T_{i2}n_2 + T_{i3}n_3$

finalement : $\frac{dF_i}{ds} = T_{ij}n_j$

T est un tenseur de rang 2, il est appelé **tenseur des contraintes**.

On montre que c'est un tenseur symétrique : $T_{ij} = T_{ji}$



Enfin les contraintes seront représentées par un tenseur dit « des contraintes » que l'on écrira :

$$[T] = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{12} & T_{22} & T_{23} \\ T_{13} & T_{23} & T_{33} \end{bmatrix}$$

III. Relation entre contraintes et déformations

III.1. Constantes élastiques

Dans le cas de la déformation élastique d'un corps on peut écrire (développement de Taylor) :

$$T_{ij}(S_{kl}) = T_{ij}(0) + \left(\frac{\partial T_{ij}}{\partial S_{kl}} \right)_{S_{kl}=0} S_{kl} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 T_{ij}}{\partial S_{kl} \partial S_{mn}} \right)_{S_{kl}=S_{mn}=0} S_{kl} S_{mn} + \dots$$

Le comportement élastique est décrit par le deuxième terme de ce développement : car $T_{ij}(0) = 0$

donc
$$T_{ij}(S_{kl}) = \left(\frac{\partial T_{ij}}{\partial S_{kl}} \right)_{S_{kl}=0} S_{kl}$$

C'est la loi de Hooke. On écrira :

$$T_{ij}(S_{kl}) = C_{ijkl} S_{kl} \quad \text{en posant} \quad C_{ijkl} = \left(\frac{\partial T_{ij}}{\partial S_{kl}} \right)_{S_{kl}=0}$$

$[C_{ijkl}]$: tenseur de rang 4, dit des « constantes élastiques » ou des rigidités élastiques

$$S_{ijkl} = \left(\frac{\partial S_{ij}}{\partial T_{kl}} \right)_{T_{kl}=0} \quad \text{tenseur des modules d'élasticité ou}$$

des compliances élastiques.

Loi de transformation :
$$C'_{klmn} = a_{ki} a_{lj} a_{mp} a_{nq} C_{ijpq}$$

C_{ijkl} se transforme comme un produit de 4 composantes.

Il possède $3^4 = 81$ composantes.

III.2. réduction du nombre des termes indépendants dans $[C_{ijkl}]$

i) Influence de la symétrie de T_{ij}

$$T_{ij} = C_{ij11}S_{11} + C_{ij12}S_{12} + C_{ij13}S_{13} + \dots$$

$$T_{ji} = C_{ji11}S_{11} + C_{ji12}S_{12} + C_{ji13}S_{13} + \dots$$

Ceci est vrai $\forall S_{kl}$ donc $C_{ijkl} = C_{jikl}$

ii) Influence de la symétrie de S_{kl}

$$T_{ij} = C_{ij11}S_{11} + (C_{ij12} + C_{ij21})S_{12} + \dots$$

$[S]$ étant symétrique par nature, on ne peut mesurer que la somme $C_{ij12} + C_{ij21}$ et non chacun de ces termes séparément, donc par convention on pose $C_{ijkl} = C_{ijlk}$

Finalement $C_{ijkl} = C_{jikl} = C_{ijlk} \Rightarrow [C_{ijkl}]$ contient seulement 36 termes indépendants.

iii) Contraction des indices de C_{ij11} : la notation de Voigt

on présentera les 36 termes indépendants de C_{ijkl} sous forme d'un tableau 6x6 et on réduira ses indices de la façon suivante :

$$T_{11} = C_{1111}S_{11} + C_{1122}S_{22} + C_{1133}S_{33} + 2C_{1123}S_{23} + 2C_{1113}S_{13} + 2C_{1112}S_{12}$$

$$T_1 = C_{11}S_1 + C_{12}S_2 + C_{13}S_3 + 2C_{14}S_{23} + 2C_{15}S_{13} + 2C_{16}S_{12}$$

avec :

$$\begin{array}{lll} S_1 = S_{11} & S_2 = S_{22} & S_3 = S_{33} \\ S_4 = 2S_{23} & S_5 = 2S_{13} & S_6 = 2S_{12} \end{array}$$

et

$$\begin{array}{lll} T_1 = T_{11} & T_2 = T_{22} & T_3 = T_{33} \\ T_4 = T_{23} & T_5 = T_{13} & T_6 = T_{12} \end{array}$$

Pour représenter l'équation $T_{ij} = C_{ijkl}S_{kl}$ on écrira : $T_\alpha = C_{\alpha\beta}S_\beta$ $\alpha, \beta = 1$ à 6
 La numérotation contractée se met en place de façon tout à fait arbitraire selon le schéma ci-dessous :

$$\begin{bmatrix} X_{11} & X_{12} & X_{13} \\ & X_{22} & X_{23} \\ & & X_{33} \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} X_1 & X_6 & X_5 \\ & X_2 & X_4 \\ & & X_3 \end{bmatrix}$$

Afin de clarifier les concepts nous désignerons sous le nom de « *tableau des constantes élastiques* » le tableau suivant :

$$[C_{\alpha\beta}] = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{43} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{bmatrix}$$

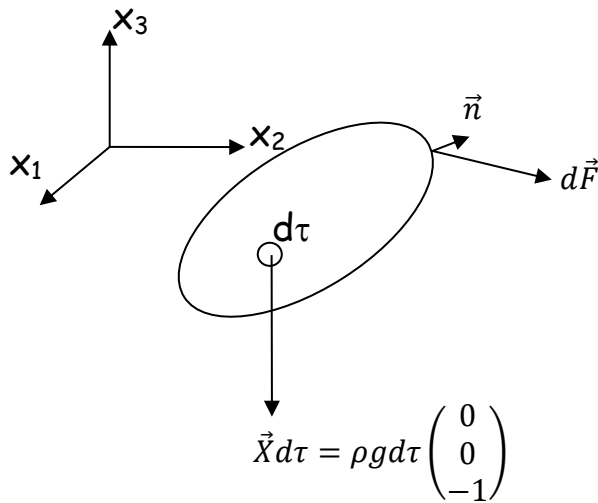
Remarque importante : compte tenu de l'arbitraire qui préside à la numérotation d'indice contracté, $(T_\alpha)_{\alpha=1 \text{ à } 6}$, $(S_\beta)_{\beta=1 \text{ à } 6}$ et $(C_{\alpha\beta})_{\alpha, \beta=1 \text{ à } 6}$ sont des tableaux et non des tenseurs, ils n'ont donc aucune raison de suivre les règles de transformation des tenseurs.

L'équation $T_\alpha = C_{\alpha\beta}S_\beta$ pourra s'écrire :

$$\begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \\ T_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{43} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \\ S_4 \\ S_5 \\ S_6 \end{bmatrix}$$

III.3. Energie élastique

i) Equation générale de l'équilibre dans un champ de force



Contraintes :

$$\frac{d\vec{F}}{ds} = \begin{cases} T_{1j}n_j = \vec{Y}_1 \cdot \vec{n} \\ T_{2j}n_j = \vec{Y}_2 \cdot \vec{n} \\ T_{3j}n_j = \vec{Y}_3 \cdot \vec{n} \end{cases}$$

Champ de force :

$$\vec{X} \cdot d\tau = \begin{cases} X_1 d\tau \\ X_2 d\tau \\ X_3 d\tau \end{cases}$$

A l'équilibre la somme des forces est nulle donc :

$$\oint_{surf} \frac{d\vec{F}}{ds} d\sigma + \iiint_{vol} \vec{X} d\tau = 0$$

soit sur Ox_i

$$\oint_{surf} \vec{Y}_i \cdot \vec{n} d\sigma + \iiint_{vol} X_i d\tau = 0$$

En appliquant le théorème de Green-Riemann on obtient :

$$\iiint_{vol} \text{div} \vec{Y}_i d\tau + \iiint_{vol} X_i d\tau = 0$$

Soit $\text{div} \vec{Y}_i + X_i = 0$

et :

$$\begin{cases} \frac{\partial T_{11}}{\partial x_1} + \frac{\partial T_{12}}{\partial x_2} + \frac{\partial T_{13}}{\partial x_3} + X_1 = 0 \\ \frac{\partial T_{21}}{\partial x_1} + \frac{\partial T_{22}}{\partial x_2} + \frac{\partial T_{23}}{\partial x_3} + X_2 = 0 \\ \frac{\partial T_{31}}{\partial x_1} + \frac{\partial T_{32}}{\partial x_2} + \frac{\partial T_{33}}{\partial x_3} + X_3 = 0 \end{cases} ;$$

$$\begin{cases} \frac{\partial T_{1j}}{\partial x_j} + X_1 = 0 \\ \frac{\partial T_{2j}}{\partial x_j} + X_2 = 0 \\ \frac{\partial T_{3j}}{\partial x_j} + X_3 = 0 \end{cases}$$

Soit encore : $\frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} + X_i = 0$ avec $i \in \{1, 2, 3\}$

ii) Expression de l'énergie élastique

On ne s'intéresse qu'à l'énergie élastique donc il n'y a pas de champ de force : $X_i = 0$

Au cours d'une déformation élastique le bipoint $|dr\rangle$ varie de :

$$|dr'\rangle - |dr\rangle = |\delta v\rangle = \delta \vec{v} = \begin{pmatrix} \delta u_1 \\ \delta u_2 \\ \delta u_3 \end{pmatrix}$$

L'énergie acquise par l'échantillon à l'occasion de cette déformation est donc :

$$\delta E = \oint_{surf} \delta \vec{v} \cdot \frac{d\vec{F}}{ds}(\vec{n}) \cdot d\sigma(\vec{n}) = \iiint_{vol} \delta R \cdot d\tau$$

$\delta R = ?$ variation d'énergie par unité de volume.

$$\delta E = \oint_{surf} \left(\delta u_1 \cdot \frac{dF_1}{ds} + \delta u_2 \cdot \frac{dF_2}{ds} + \delta u_3 \cdot \frac{dF_3}{ds} \right) \cdot d\sigma(\vec{n})$$

$$\delta E = \oint_{surf} (\vec{Y}_1 \cdot \vec{n} \delta u_1 + \vec{Y}_2 \cdot \vec{n} \delta u_2 + \vec{Y}_3 \cdot \vec{n} \delta u_3) \cdot d\sigma(\vec{n})$$

Or (Green-Riemann) :

$$\oint_{surf} (\vec{Y}_1 \delta u_1) \cdot \vec{n} d\sigma(\vec{n}) = \iiint_{vol} \text{div}(\delta u_1 \vec{Y}_1) \cdot d\tau$$

donc sur l'axe Ox_1 on a :

$$\delta E_1 = \iiint_{vol} \left[\frac{\partial(\delta u_1 T_{11})}{\partial x_1} + \frac{\partial(\delta u_1 T_{12})}{\partial x_2} + \frac{\partial(\delta u_1 T_{13})}{\partial x_3} \right] d\tau$$

$$\delta E_1 = \underbrace{\iiint_{vol} \delta u_1 \left[\frac{\partial T_{11}}{\partial x_1} + \frac{\partial T_{12}}{\partial x_2} + \frac{\partial T_{13}}{\partial x_3} \right] d\tau}_{0} + \iiint_{vol} \left[T_{11} \frac{\partial \delta u_1}{\partial x_1} + T_{12} \frac{\partial \delta u_1}{\partial x_2} + T_{13} \frac{\partial \delta u_1}{\partial x_3} \right] d\tau$$

or δu_1 est une différentielle « cinétique » car elle est le résultat d'une contrainte, et $\frac{\partial}{\partial x_i}$ est une différentielle statique. Ces deux entités étant de nature différente elles peuvent commuter, donc :

$$\delta E_1 = \oint_{surf} (\vec{Y}_1 \delta u_1) d\sigma(\vec{n}) = \iiint_{vol} \left[T_{11} \delta \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} \right) + T_{12} \delta \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} \right) + T_{13} \delta \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_3} \right) \right] d\tau$$

finalement :

$$\begin{aligned} \delta R = & T_{11} \delta \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} \right) + T_{22} \delta \left(\frac{\partial u_2}{\partial x_2} \right) + T_{33} \delta \left(\frac{\partial u_3}{\partial x_3} \right) + \\ & T_{12} \delta \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) + T_{13} \delta \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \right) + T_{23} \delta \left(\frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \right) \end{aligned}$$

soit :
$$\delta R = T_\alpha \delta S_\alpha = C_{\alpha\beta} S_\beta \delta S_\alpha \text{ et } R = \frac{1}{2} C_{\alpha\beta} S_\beta S_\alpha$$

R représente la quantité d'énergie élastique stockée par unité de volume dans le matériau, lorsque celui-ci est soumis au champ de contraintes défini par le tenseur T.

iii) Symétrie de $C_{\alpha\beta}$

Soit F l'énergie libre par unité de volume du système étudié. Notons θ sa température et σ son entropie. On a alors :

$$\begin{aligned} dF &= dU - \theta d\sigma - \sigma d\theta \\ &= \delta Q + \delta R - \theta d\sigma - \sigma d\theta \end{aligned}$$

et, pour une transformation réversible (ce qui est le cas pour les déformations élastiques) on a :

$$\delta Q = \theta d\sigma$$

Donc :

$$dF = \delta R - \sigma d\theta$$

soit :
$$dF = T_\alpha dS_\alpha - \sigma d\theta$$

d'où
$$T_\alpha = \left(\frac{\partial F}{\partial S_\alpha} \right)_{\theta=\text{conste}} = C_{\alpha\beta} S_\beta$$

or
$$C_{ijkl} = \left(\frac{\partial T_{ij}}{\partial S_{kl}} \right)_{S_{kl}=0}$$

soit
$$C_{\alpha\beta} = \left(\frac{\partial T_\alpha}{\partial S_\beta} \right)_{S_\beta=0}$$

donc :
$$\mathbf{C}_{\alpha\beta} = \frac{\partial^2 F}{\partial S_\beta \partial S_\alpha} = \frac{\partial^2 F}{\partial S_\alpha \partial S_\beta} = \mathbf{C}_{\beta\alpha} \quad (\text{Cauchy})$$

finalement le tableau 6x6 des $C_{\alpha\beta}$ est réduit de 36 à 21 composantes indépendantes.

La prise en compte des symétries cristallines abaissera encore le nombre de ces composantes indépendantes (jusqu'à 3 dans le cas de la symétrie cubique, et 2 dans le cas des milieux isotropes). On utilisera la méthode d'inspection directe pour effectuer cette réduction (Fumi 1952).

En prenant en compte les différents types de symétries que l'on rencontre dans la nature, le tableau des constantes élastiques se réduit de la façon représentée dans le tableau ci-dessous.

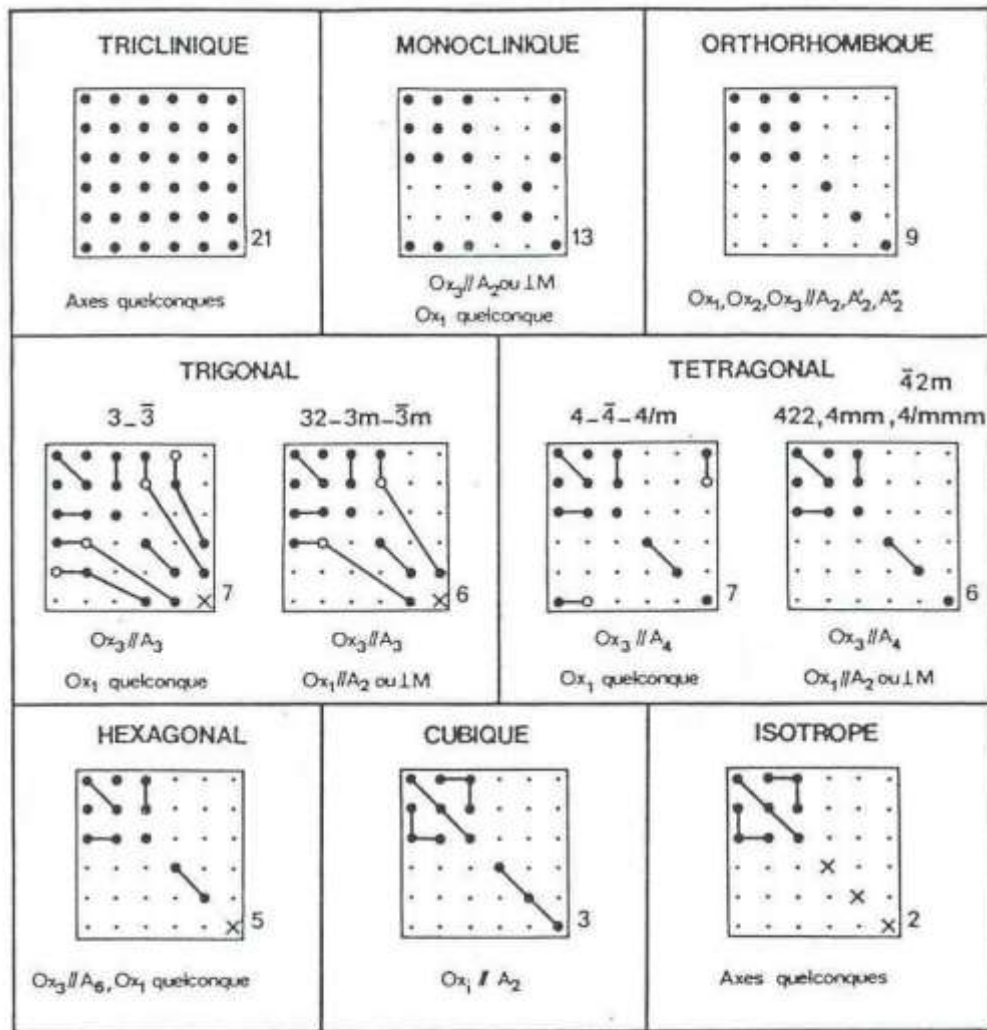


FIG. 4. 6. — Tableau des matrices des rigidités $c_{\alpha\beta}$.

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

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

IV. PROPRIETES DES MILIEUX ANISOTROPES : LE CAS DE LA SYMETRIE CUBIQUE

IV.1. Réduction du nombre d'éléments indépendants du tableau des constantes élastiques (voir travaux dirigés)

La symétrie cubique est caractérisée par l'existence d'un axe d'ordre 4 et d'un axe d'ordre 3 ayant entre eux un angle α défini par : $\alpha = \text{Arc cos } \sqrt{3}/3$. Choisissons d'exprimer le tableau des $C_{\alpha\beta}$ dans $Ox_1x_2x_3$, $Ox_1 // [100]$.

i) effet d'un unique axe $A_4 // Ox_3$:

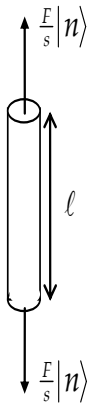
$$[C_{\alpha\beta}] = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & C_{16} \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & -C_{16} \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ C_{16} & -C_{16} & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{bmatrix}$$

ii) effet d'un axe supplémentaire $A_3 // [111]$:

$$[C_{\alpha\beta}] = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix}$$

IV.2. Tenseurs des contraintes et des déformations

Une des façons de déterminer les propriétés élastiques d'un solide dans une direction $|n\rangle$ donnée est d'effectuer un test de traction sur une éprouvette longiligne d'axe parallèle à $|n\rangle$.



L'allongement relatif $\frac{\Delta\ell}{\ell}$ est mesuré dans l'expérience ci-contre.

La traduction analytique d'une telle expérience nécessite l'expression des tenseurs $[S]$ des déformations et $[T]$ des contraintes, correspondants, dans le repère $Ox_1x_2x_3$ où le tableau des constantes élastiques $[C_{\alpha\beta}]$ prend sa forme la plus simple. On relie allongement relatif $\frac{\Delta\ell}{\ell}$ et contrainte $\frac{F}{s}$ par la relation (loi de Hooke)

:

$$\frac{\Delta\ell}{\ell} = \frac{1}{E} \frac{F}{s} \quad (1)$$

où E est le module d'Young caractérisant le solide dans la direction $|n\rangle$.

a) Expression du tenseur des contraintes

De façon générale, on écrit que la force par unité de surface $\frac{\vec{F}}{s} = \frac{F}{s} |n\rangle$ a pour coordonnées :

$$\frac{dF_i}{ds} = T_{ij}n_j \quad (2)$$

on pourra donc représenter la contrainte par :

$$\frac{F}{s} |n\rangle = [T]|n\rangle \quad (3)$$

en multipliant à droite par $\langle n||n\rangle = 1$

$$[T]|n\rangle = \frac{F}{s} |n\rangle\langle n||n\rangle$$

on fait apparaître le produit tensoriel $|n\rangle\langle n|$ qui est un tenseur de rang 2, et on voit que le tenseur des contraintes peut s'écrire :

$$[\mathbf{T}] = \frac{F}{s} |\mathbf{n}\rangle\langle\mathbf{n}| \quad (4)$$

$$\text{avec : } |n\rangle\langle n| = \begin{bmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{bmatrix} (n_1, n_2, n_3) = \begin{bmatrix} n_1^2 & n_1 n_2 & n_1 n_3 \\ n_2 n_1 & n_2^2 & n_2 n_3 \\ n_3 n_1 & n_3 n_2 & n_3^2 \end{bmatrix}$$

$$\text{on a donc : } [\mathbf{T}] = \frac{F}{s} \begin{bmatrix} n_1^2 & n_1 n_2 & n_1 n_3 \\ n_2 n_1 & n_2^2 & n_2 n_3 \\ n_3 n_1 & n_3 n_2 & n_3^2 \end{bmatrix} \quad (5)$$

b) Expression du tenseur des déformations dans le repère des axes cristallographiques

En appliquant à la symétrie cubique l'équation :

$$\mathbf{T}_\alpha = \mathbf{C}_{\alpha\beta} \mathbf{S}_\beta \quad (6)$$

on obtient :

$$\begin{aligned} T_1 &= C_{11} S_1 + C_{12} S_2 + C_{12} S_3 \\ &= C_{11} S_1 + C_{12}(S_2 + S_3) = (C_{11} - C_{12})S_1 + \theta C_{12} = \frac{F}{s} n_1^2 \end{aligned}$$

Où θ est la dilatation relative égale à la trace du tenseur des déformations

De même nous avons :

$$\begin{aligned} T_2 &= (C_{11} - C_{12})S_2 + C_{12} \theta = \frac{F}{s} n_2^2 \\ T_3 &= (C_{11} - C_{12})S_3 + C_{12} \theta = \frac{F}{s} n_3^2 \\ T_4 &= C_{44} S_4 \Rightarrow S_4 = \frac{T_4}{C_{44}} = \frac{F}{s} \frac{n_2 n_3}{C_{44}} = 2S_{23} \\ T_5 &= C_{44} S_5 \Rightarrow S_5 = \frac{T_5}{C_{44}} = \frac{F}{s} \frac{n_1 n_3}{C_{44}} = 2S_{13} \\ T_6 &= C_{44} S_6 \Rightarrow S_6 = \frac{T_6}{C_{44}} = \frac{F}{s} \frac{n_1 n_2}{C_{44}} = 2S_{12} \end{aligned}$$

il vient alors :

$$T_1+T_2+T_3 = (C_{11}+2C_{12})\theta = \frac{F}{s} \Rightarrow \theta = \frac{l}{C_{11}+2C_{12}} \frac{F}{s}$$

et

$$S_1 = \frac{(C_{11}+2C_{12})n_1^2 - C_{12}}{(C_{11}+2C_{12})(C_{11}-C_{12})} \frac{F}{s}$$

finalement :

$$[S] = \frac{F}{s} \begin{vmatrix} \frac{(C_{11}+2C_{12})n_1^2 - C_{12}}{(C_{11}+2C_{12})(C_{11}-C_{12})} & n_1n_2/2C_{44} & n_1n_3/2C_{44} \\ n_1n_2/2C_{44} & \frac{(C_{11}+2C_{12})n_2^2 - C_{12}}{(C_{11}+2C_{12})(C_{11}-C_{12})} & n_2n_3/2C_{44} \\ n_1n_3/2C_{44} & n_2n_3/2C_{44} & \frac{(C_{11}+2C_{12})n_3^2 - C_{12}}{(C_{11}+2C_{12})(C_{11}-C_{12})} \end{vmatrix}$$

IV.3. Module d'Young dans la direction $|n\rangle$

on a par définition :

$$\frac{F}{s} = E_{|n\rangle} \frac{\Delta\ell}{\ell} \quad (7)$$

avec $\frac{\Delta\ell}{\ell} = \langle n|S|n\rangle$

$$= S_{11}n_1^2 + S_{22}n_2^2 + S_{33}n_3^2 + 2(S_{23}n_2n_3 + S_{13}n_1n_3 + S_{12}n_1n_2)$$

$$= \frac{F}{s} \left[\frac{C_{11}+2C_{12}}{(C_{11}+2C_{12})(C_{11}-C_{12})} (n_1^4 + n_2^4 + n_3^4) - \right.$$

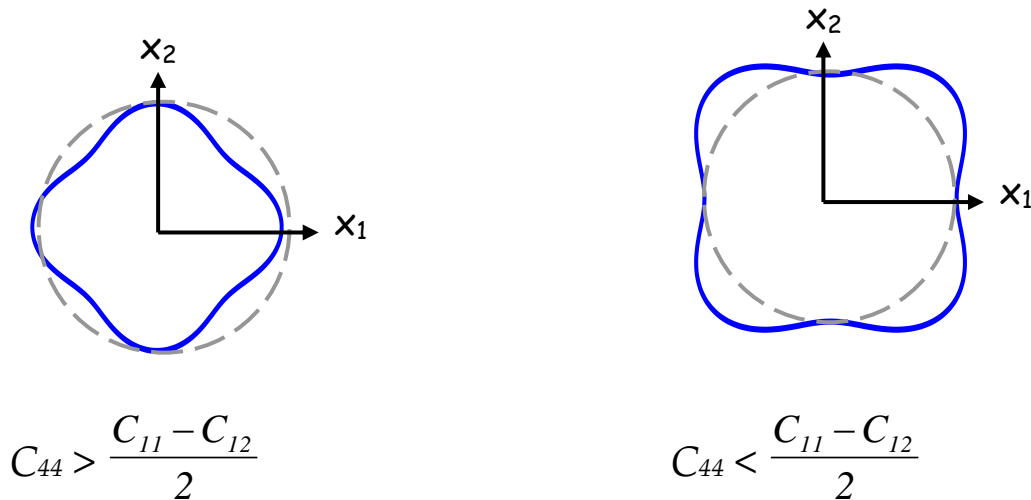
$$\left. \frac{C_{12}}{(C_{11}+2C_{12})(C_{11}-C_{12})} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) + \frac{1}{C_{44}} (n_1^2n_2^2 + n_1^2n_3^2 + n_2^2n_3^2) \right]$$

Or $(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)^2 = 1 = n_1^4 + n_2^4 + n_3^4 + 2(n_1^2n_2^2 + n_1^2n_3^2 + n_2^2n_3^2)$

donc : $\frac{\Delta\ell}{\ell} = \frac{F}{s} \left[\frac{C_{11}+C_{12}}{(C_{11}+2C_{12})(C_{11}-C_{12})} + (n_1^2n_2^2 + n_2^2n_3^2 + n_1^2n_3^2) \left(\frac{1}{C_{44}} - \frac{2}{C_{11}-C_{12}} \right) \right]$

$$E_{|n\rangle} = \left[\frac{C_{11}+C_{12}}{(C_{11}+2C_{12})(C_{11}-C_{12})} + (n_1^2n_2^2 + n_2^2n_3^2 + n_1^2n_3^2) \left(\frac{1}{C_{44}} - \frac{2}{C_{11}-C_{12}} \right) \right]^{-1} \quad (8)$$

$\frac{l}{E_n}$ sera représenté par la quadrique $\langle n/S/n \rangle = \frac{\Delta l}{l}$ à $\frac{F}{s}$ près.



Sur cette figure sont représentées les rosettes de déformation du matériau dans les deux cas $C_{44} > \frac{C_{11} - C_{12}}{2}$ et $C_{44} < \frac{C_{11} - C_{12}}{2}$

Sur cette figure on a représenté les variations de $\frac{l}{E}$ dans le plan Ox_1x_2

Le cercle en pointillés sur la figure a pour rayon R tel que :

$$R = \frac{C_{11} + C_{12}}{(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})}$$

Isotropie : d'après l'expression (8) on voit que E est « isotrope » si et seulement si :

$$C_{44} = \frac{C_{11} - C_{12}}{2} \quad (9)$$

Cette dernière relation est appelée « relation de Cauchy ». Dans les milieux isotropes il n'y a donc plus que deux constantes élastiques indépendantes. Pour caractériser les propriétés élastiques d'un matériau on choisira des couples de constantes tels que : (C_{11}, C_{44}) ou (E, σ_p) ou (λ, μ) . Le coefficient de Poisson σ_p sera défini plus loin. Il existe bien sûr des relations entre ces coefficients. Par exemple, pour un matériau isotrope le module d'Young E s'exprime en fonction des constantes élastiques C_{11} et C_{12} :

$$\frac{1}{E} = \frac{C_{11} + C_{12}}{(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{12})} \quad (10)$$

On définit alors les coefficients de Lamé λ et μ par

$$\mu = C_{44}$$

$$\lambda = C_{12}$$

$$\Rightarrow C_{11} = 2\mu + \lambda$$

V. PROPRIETES DES MILIEUX ISOTROPES

Ce sont les gaz, les liquides, solides amorphes, poly- cristallins. Le tableau des constantes élastiques s'exprime de la façon suivante:

$$\begin{vmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{C_{11} - C_{12}}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{C_{11} - C_{12}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{C_{11} - C_{12}}{2} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 2\mu + \lambda & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & 2\mu + \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & 2\mu + \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{vmatrix}$$

Dans ce cas l'équation (6) devient :

$$T_1 = (\lambda + 2\mu)S_1 + \lambda(S_2 + S_3) = \lambda\theta + 2\mu S_1$$

$$T_2 = (\lambda + 2\mu)S_1 + \lambda(S_2 + S_3) = \lambda\theta + 2\mu S_2$$

$$T_3 = (\lambda + 2\mu)S_1 + \lambda(S_2 + S_3) = \lambda\theta + 2\mu S_3$$

$$T_4 = \mu S_4$$

$$T_5 = \mu S_5$$

$$T_6 = \mu S_6$$

a) Module d'Young (par exemple dans la direction [0,0,1])

$$[T] = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{F}{s} \end{vmatrix} \quad \theta(3\lambda + 2\mu) = \frac{F}{s} \quad \begin{aligned} \vec{a}_1 &= [1,0,0] \\ \vec{a}_2 &= [0,1,0] \\ \vec{a}_3 &= [0,0,1] \end{aligned}$$

$$[S] = \frac{F}{s} \begin{bmatrix} -\lambda & & \\ \frac{2\mu(3\lambda + 2\mu)}{2\mu(3\lambda + 2\mu)} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{-\lambda}{2\mu(3\lambda + 2\mu)} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\lambda + \mu}{\mu(3\lambda + 2\mu)} \end{bmatrix}$$

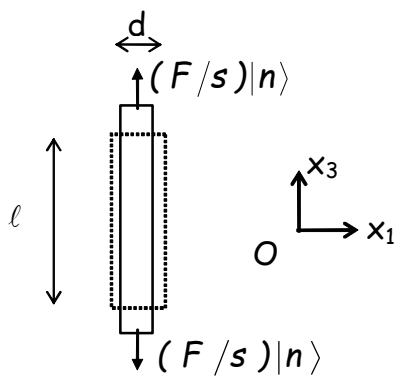
$$\frac{\Delta \ell}{\ell} = \langle a_3 | S | a_3 \rangle = \frac{F}{s} \frac{\lambda + \mu}{\mu(3\lambda + 2\mu)}$$

d'où
$$\mathbf{E} = \frac{\mu(3\lambda + 2\mu)}{\lambda + \mu} \quad (11)$$

$$E = \frac{C_{44}(3C_{11} - 4C_{44})}{C_{11} - C_{44}}$$

b) Coefficient de Poisson : σ_p

Il caractérise les déformations dans une direction perpendiculaire à celle d'application de la contrainte.



$$\sigma_p = -\frac{\frac{\Delta d}{d}}{\frac{\Delta \ell}{\ell}} = -\frac{\langle a_2 | S | a_2 \rangle}{\langle a_3 | S | a_3 \rangle} = -\frac{\langle a_1 | S | a_1 \rangle}{\langle a_3 | S | a_3 \rangle}$$

$$\sigma_p = \frac{\lambda}{2(\mu + \lambda)} \quad (12)$$

c) Module de cisaillement

$$\boxed{G = \frac{T_4}{S_4} = C_{44} = \mu} \quad (13)$$

d) Compressibilité

$$\chi = -\frac{1}{V} \left[\frac{\partial V}{\partial p} \right]_T \cong -\frac{1}{V} \left[\frac{dV}{dp} \right]_T = -\frac{\theta}{dp}$$

Où θ est la dilatation relative.

Soit une compression hydrostatique : $T_1 = T_2 = T_3 = -dp$ et $T_4 = T_5 = T_6 = 0$

$$[T] = \begin{vmatrix} -dP & 0 & 0 \\ 0 & -dP & 0 \\ 0 & 0 & -dP \end{vmatrix}$$

$$-dp = \lambda\theta + 2\mu S_1$$

$$-dp = \lambda\theta + 2\mu S_2$$

$$-dp = \lambda\theta + 2\mu S_3$$

d'où :
$$-3dp = (3\lambda + 2\mu)\theta$$

et
$$\chi = \frac{3}{3\lambda + 2\mu} \quad (14)$$

on introduit aussi le module d'élasticité volumique (en anglais « bulk modulus ») qui est l'inverse de la compressibilité :

$$K = \chi^{-1} = \frac{3C_{11} - 4C_{44}}{3}$$

**PROPRIETES MECANIQUES DE LA
MATIERE
B. ELASTICITE DYNAMIQUE**

Il existe une grande variété d'ondes élastiques pouvant se propager dans les solides (Rayleigh, Bleustein-Gulayev, Lamb, Love, Stoneley), par contre il n'existe que 2 types d'ondes fondamentales se propageant dans le volume :

- **Les ondes longitudinales**, ou ondes **de compression** : le déplacement des particules est parallèle à la direction de propagation, de sorte que le volume occupé par un nombre donné d'atomes varie.
- **Les ondes transversales**, ou ondes **de cisaillement** : le déplacement des particules est perpendiculaire à la direction de propagation, de sorte que le volume occupé par un nombre donné d'atomes ne varie pas.

On supposera ici que les ondes se propagent dans un milieu **illimité**, **anisotrope** (cristallin), mais **homogène**.

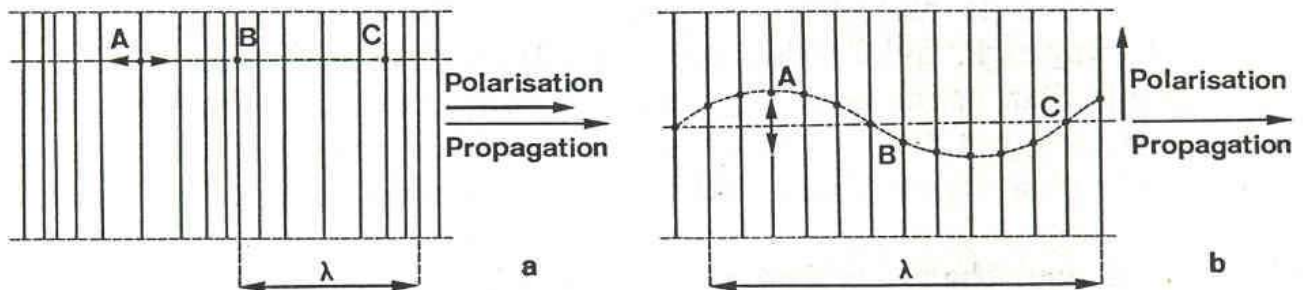
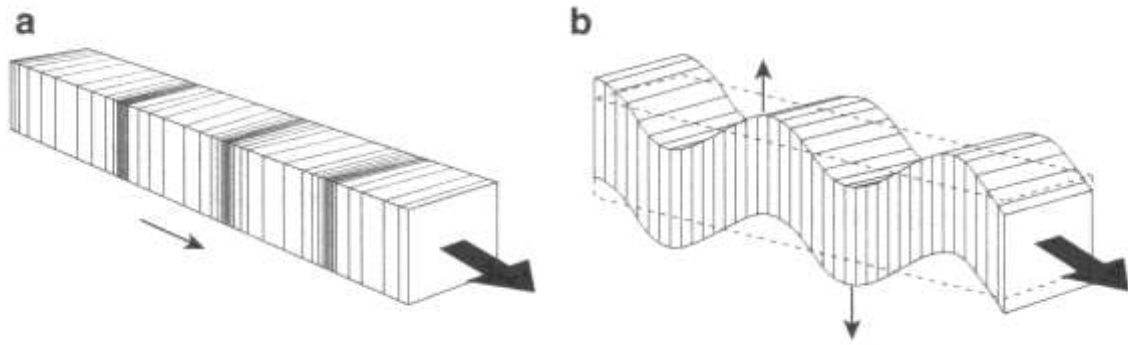


FIG 5. 1. — Ondes élastiques dans un milieu isotrope illimité.

- a) *Onde longitudinale* : polarisation et vecteur d'onde sont parallèles. Les particules A, B, C oscillent suivant une même droite. L'onde apparaît, à un instant donné, comme une succession de compressions et de dilatations.
- b) *Onde transversale* : polarisation et vecteur d'onde sont perpendiculaires. Les particules A, B, C oscillent de part et d'autre de la droite sur laquelle elles sont situées en l'absence d'onde. Les plans perpendiculaires au vecteur d'onde glissent les uns par rapport aux autres en conservant leurs distances.



Ondes acoustiques longitudinales (a) et transversale (b). Les grandes flèches indiquent la direction de propagation du vecteur d'onde, les petites celles des déplacements de la matière (représentés pour une seule des deux polarisations transverses)

I. PRELIMINAIRE MATHEMATIQUE : résolution du problème aux valeurs propres et aux vecteurs propres

On pourra télécharger un cours de mathématique sur ce sujet à l'adresse suivante : <http://www.cemhti.cnrs-orleans.fr/people/textes/vlpvtp.pdf>

On pourra aussi suivre le cours de mathématique en ligne donné par Jacques Vélou à l'adresse suivante :

http://www.canal-u.tv/video/les_amphis_de_france_5/determinants_diagonalisation_des_matrices.3046

Ce qui suit concerne les propriétés physiques qui sont représentées par un tenseur de rang 2 dans un espace à 3 dimensions, mais est tout aussi valable pour un espace à n dimensions.

Considérons une propriété physique \mathbf{A} représentable dans un espace à trois dimensions par un tenseur de rang 2 noté $\bar{\bar{A}} = [A_{ij}]$ (i et $j = 1, 2, 3$) dans un repère quelconque $\{e_i\}$ $i = 1, 2, 3$

$$\bar{\bar{A}} = [A_{ij}] = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{bmatrix}_{\{e_i\}}$$

Si le tenseur est symétrique alors on montre qu'il existe un repère de vecteurs de base unique $\{e'_i\}$ $i = 1, 2, 3$ dans lequel la propriété \mathbf{A} est représentée par un tenseur $\bar{\bar{A}} = [A'_{ij}]$ diagonal, et que les éléments du tenseur sont des nombres réels.

$$\bar{\bar{A}} = [A'_{ij}] = \begin{bmatrix} A'_{11} & 0 & 0 \\ 0 & A'_{22} & 0 \\ 0 & 0 & A'_{33} \end{bmatrix}_{\{|e'_i\rangle\}}$$

Les vecteurs $\{|e'_i\rangle\}$ sont appelés **vecteurs propres** du tenseur et sont orthogonaux entre eux.

Les éléments diagonaux du tenseurs sont appelés **valeurs propres** du tenseur

Il apparaît clairement de ce qui précède que les valeurs propres λ_i d'un tenseur $\bar{\bar{T}}$, et leurs vecteurs propres associés $|\Psi_i\rangle$, satisfont l'équation suivante, dite *équation aux valeurs propres et aux vecteurs propres* :

$$\bar{\bar{T}}|\Psi_i\rangle = \lambda_i|\Psi_i\rangle$$

1) Recherche des valeurs propres d'un tenseur

Il suffit d'écrire que les valeurs propres et les vecteurs propres satisfont l'équation

$$\bar{\bar{T}}|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle$$

$$\text{Avec } \bar{\bar{T}} = [T_{ij}] = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{12} & T_{22} & T_{23} \\ T_{13} & T_{23} & T_{33} \end{bmatrix}_{\{|e_i\rangle\}}$$

Il vient alors :

$$\bar{\bar{T}}|\Psi\rangle - \lambda|\Psi\rangle = [\bar{\bar{T}} - \lambda\bar{\bar{I}}]|\Psi\rangle = 0$$

Où $\bar{\bar{I}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$ représente le tenseur unité (ou identité)

Cette équation s'écrit explicitement :

$$\begin{cases} (T_{11} - \lambda)x_1 + T_{12}x_2 + T_{13}x_3 = 0 \\ T_{12}x_1 + (T_{22} - \lambda)x_2 + T_{23}x_3 = 0 \\ T_{13}x_1 + T_{23}x_2 + (T_{33} - \lambda)x_3 = 0 \end{cases}$$

Ce système de 3 équations à 3 inconnues, les coordonnées (x_1, x_2, x_3) de $|\Psi\rangle$, est dit homogène, et n'a de solution que si son déterminant est nul, soit :

$$\Delta = \begin{vmatrix} T_{11} - \lambda & T_{12} & T_{13} \\ T_{12} & T_{22} - \lambda & T_{23} \\ T_{13} & T_{23} & T_{33} - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

Autrement dit :

$$(T_{11} - \lambda)[(T_{22} - \lambda)(T_{33} - \lambda) - T_{23}^2] - T_{12}[T_{12}(T_{33} - \lambda) - T_{13} T_{23}] + T_{13}[T_{12} T_{23} - (T_{22} - \lambda) T_{13}] = 0$$

Cette équation du 3^{ème} degré en λ a 3 solutions, qui sont les 3 valeurs propres de $\bar{\bar{T}}$

2) Recherche des vecteurs propres d'un tenseur

Les vecteurs propres s'obtiennent en résolvant l'équation $\bar{\bar{T}}|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle$ pour chaque valeur de λ , c'est-à-dire le système de 3 équations ci-dessus pour chacune des valeurs λ_1, λ_2 et λ_3 de λ déterminées à l'étape ci-dessus.

Le tenseur $\bar{\bar{T}}$ étant ici exprimé dans le repère de coordonnées $\{e_i\}$, on trouvera l'expression des coordonnées des vecteurs propres exprimées dans ce repère de coordonnées. Le vecteur associé à la valeur propre λ_i sera donc solution de :

$$\begin{cases} (T_{11} - \lambda_i)x_1 + T_{12}x_2 + T_{13}x_3 = 0 \\ T_{12}x_1 + (T_{22} - \lambda_i)x_2 + T_{23}x_3 = 0 \\ T_{13}x_1 + T_{23}x_2 + (T_{33} - \lambda_i)x_3 = 0 \end{cases}$$

3) Quelques propriétés des solutions du problème aux valeurs et aux valeurs

Les quelques propriétés ci-dessous seront très utile pour contrôler la justesse des solutions trouvées.

- i) Si \vec{V} est vecteur propre de la matrice $\bar{\bar{T}}$ avec la valeur propre λ , alors il en est de même pour tout vecteur $\alpha\vec{V}$, avec α réel quelconque.
- ii) Les vecteurs propres associés à des valeurs propres différentes sont perpendiculaires entre eux.
- iii) Si \vec{V} et \vec{V}' sont vecteurs propres de $\bar{\bar{T}}$ associés à la même valeur propre λ , alors toute combinaison linéaire de \vec{V} et \vec{V}' est vecteur propre associée à la même valeur propre.

Démonstration :

$$\text{On a : } \bar{\bar{T}}\vec{V} = \lambda\vec{V} \text{ et } \bar{\bar{T}}\vec{V}' = \lambda\vec{V}'$$

$$\text{On a alors : } \bar{\bar{T}}(a\vec{V} + b\vec{V}') = \bar{\bar{T}}a\vec{V} + \bar{\bar{T}}b\vec{V}'$$

$$\text{Soit : } \bar{\bar{T}}(a\vec{V} + b\vec{V}') = \lambda a\vec{V} + \lambda b\vec{V}' = \lambda(a\vec{V} + b\vec{V}')$$

Donc $(a\vec{V} + b\vec{V}')$ est bien valeur propre de $\bar{\bar{T}}$, et ceci est vrai quel que soit a et b réels (ou complexe).

II. EQUATION DE PROPAGATION

Nous supposons maintenant, contrairement au cas de l'élasticité statique, que le milieu est traversé par un ébranlement, qui le met localement en mouvement. Le déplacement u_i de chaque point, qui ne dépendait que des coordonnées initiales x_i , dépend maintenant également du temps : $u_i = u_i(x_k, t)$

L'équation fondamentale de la dynamique en l'absence de champ de force (en particulier en négligeant la pesanteur), compte tenu du fait que la densité de force par unité de volume est $f_i = \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j}$ s'écrit :

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j}, \text{ or}$$

$$\mathbf{T}_{ij} = \mathbf{C}_{ijkl}\mathbf{S}_{kl} \quad \text{loi de Hooke}$$

Avec $S_{kl} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_l} + \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right)$ on a :

$$T_{ij} = \frac{1}{2} C_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} + \frac{1}{2} C_{ijkl} \frac{\partial u_l}{\partial x_k}$$

la sommation sur les indices muets k et l permet d'écrire :

$$T_{ij} = C_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} = C_{ijkl} \frac{\partial u_l}{\partial x_k}$$

l'équation devient donc :

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = C_{ijkl} \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_j \partial x_k}$$

Ce système de trois équations (i a 3 valeurs possibles : 1, 2 et 3) différentielles du second ordre généralise à trois dimensions et dans un milieu anisotrope, l'équation de propagation établie dans le cas d'un fluide :

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{1}{\chi} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

où χ est la compressibilité du milieu.

Par analogie avec la solution générale de cette dernière équation dont la solution s'écrit :

$$u = F \left(t - \frac{x}{V} \right) \quad \text{avec} \quad V^2 = \frac{1}{\rho \chi}$$

Où V est la vitesse de propagation des ondes. Nous cherchons une solution sous la forme d'une onde plane progressive, se propageant dans la direction $\vec{n}(n_1, n_2, n_3)$ perpendiculairement au plan d'équation $\vec{n} \cdot \vec{r} = \text{conste}$ (plan d'onde). On a donc :

$$u_i = {}^0u_i F \left(t - \frac{\vec{n} \cdot \vec{r}}{V} \right) = {}^0u_i F \left(t - \frac{n_j x_j}{V} \right) \text{ d'où}$$

$$\frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = {}^0u_i F'' \quad \text{et} \quad \frac{\partial^2 u_l}{\partial x_j \partial x_k} = {}^0u_l \frac{n_j n_k}{V^2} F''$$

en reportant cette solution dans l'équation du mouvement il vient :

$$\rho {}^0u_i = C_{ijkl} \frac{n_j n_k}{V^2} {}^0u_l$$

soit :

$$\rho V^2 {}^0u_i = \Gamma_{il} {}^0u_l$$

$$\text{avec } \Gamma_{il} = C_{ijkl} n_j n_k$$

équation de Christoffel

Cette équation s'écrit explicitement :

$$\bar{\bar{\Gamma}} \cdot \vec{{}^0u} = \begin{bmatrix} \Gamma_{11} & \Gamma_{12} & \Gamma_{13} \\ \Gamma_{21} & \Gamma_{22} & \Gamma_{23} \\ \Gamma_{31} & \Gamma_{32} & \Gamma_{33} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} {}^0u_1 \\ {}^0u_2 \\ {}^0u_3 \end{bmatrix} = \rho V^2 \begin{bmatrix} {}^0u_1 \\ {}^0u_2 \\ {}^0u_3 \end{bmatrix}$$

On reconnaît ici que la résolution de cette équation est la résolution du problème aux valeurs propres et aux vecteurs propres.

$\bar{\bar{\Gamma}} = [\Gamma_{il}]$ est un tenseur de rang 2 et l'équation de Christoffel, qui est l'équation de propagation des ondes de déformation dans le milieu considéré, a pour **vecteurs propres** les vecteurs polarisations des ondes $\vec{{}^{\alpha}u}_i = ({}^{\alpha}u_1, {}^{\alpha}u_2, {}^{\alpha}u_3)$ et pour **valeurs propres** le carré des vitesses de propagation correspondantes multipliées par la masse volumique du milieu :

$${}^{\alpha}\gamma = \rho {}^{\alpha}V^2$$

Dans un espace à 3 dimensions, comme c'est le cas dans le présent problème, le tenseur $\bar{\bar{\Gamma}}$ a 3 vecteurs propres et 3 valeurs propres. Nous les repérons ici en leur affectant un exposant α en haut à gauche. Cet exposant est un numéro arbitraire d'ordre, allant par exemple de 1 à 3.

Ainsi les vitesses et les polarisations des ondes qui se propagent suivant une direction \vec{n} dans un milieu caractérisé par les rigidités élastiques C_{ijkl} s'obtiennent en cherchant les valeurs et vecteurs propres du tenseur dont les éléments sont les $\Gamma_{il} = C_{ijkl} n_j n_k$. Il y a en général, pour une direction donnée, trois vitesses de propagation qui sont les racines de l'équation séculaire suivante :

$$\boxed{|\Gamma_{il} - \rho V^2 \delta_{il}| = 0}$$

où δ_{il} est le symbole de Kronecker ($\delta_{il} = 1$ si $i = l$; $\delta_{il} = 0$ si $i \neq l$).

A chaque vitesse correspond un vecteur propre définissant la direction du déplacement de la matière (la polarisation de l'onde).

Les éléments de la matrice de Christoffel s'expriment comme indiqué dans le tableau ci-dessous, en fonction des constantes élastiques et des coordonnées du vecteur unitaire \vec{n} caractérisant la direction et le sens de déplacement des ondes élastiques :

Remarque : il peut arriver que la recherche des valeurs propres de la matrice Γ_{ii} passe par la résolution d'une équation du 3^{ème} degré. Une telle équation peut être compliquée à résoudre. On simplifie cette résolution en soumettant la matrice à des modifications telles que celles décrites ci-dessous.

Techniques de simplification du calcul d'un déterminant

Le calcul du déterminant d'une matrice carrée de dimension n nécessite le calcul d'autant de produits que de permutations à n éléments c'est-à-dire $n!$ produits à effectuer, soit 2 pour une matrice de dimension 2, 6 pour une matrice de dimension 3 et 24 pour une matrice de dimension 4. De plus, il s'agit de trouver la signature de chacune des permutations. Le développement suivant une ligne ou une colonne permet d'organiser plus clairement les calculs mais ne diminue en rien le nombre de produits à effectuer.

On remarque cependant que la présence d'un zéro dans une des cases de la matrice permet de faire disparaître $(n-1)!$ calculs. L'idée est donc de trouver des techniques remplaçant le calcul du déterminant d'une matrice par celui d'une matrice contenant de nombreux zéros, dite matrice à trous. On dispose pour cela d'un certain nombre de propriétés opératoires et de quelques techniques

Propriétés opératoires élémentaires

Le déterminant est une forme n -linéaire alternée de vecteurs colonnes ou de vecteurs lignes. Cette propriété a les conséquences suivantes :

- *si on permute deux lignes ou deux colonnes, le déterminant change de signe ;*
- *si deux lignes ou deux colonnes sont identiques, le déterminant est nul ;*
- *si on multiplie tous les termes d'une même ligne ou d'une même colonne par un réel k , le déterminant est multiplié par k ;*
- *on peut ajouter à une colonne (ou une ligne) un multiple d'une autre colonne (ou d'une autre ligne) sans changer la valeur du déterminant ;*
- *en conséquence, si une ligne ou une colonne est nulle, le déterminant est nul.*

Enfin le déterminant se comporte bien avec le produit des matrices :

- *$\det(A \times B) = \det(A) \cdot \det(B)$.*

par définition du tenseur $[\Gamma_{ij}] : \Gamma_{il} = C_{ijkl}n_jn_k$ se développe comme suit par exemple sur l'élément Γ_{11} :

$$\Gamma_{11} = C_{1111}n_1n_1 + C_{1221}n_2n_2 + C_{1331}n_3n_3 + C_{1231}n_2n_3 + C_{1321}n_3n_2 + C_{1131}n_1n_3 + C_{1311}n_3n_1 + C_{1121}n_1n_2 + C_{1211}n_2n_1$$

Soit en notation contractée :

$$\Gamma_1 = C_{11}n_1n_1 + C_{66}n_2n_2 + C_{55}n_3n_3 + C_{65}n_2n_3 + C_{56}n_3n_2 + C_{15}n_1n_3 + C_{51}n_3n_1 + C_{16}n_1n_2 + C_{61}n_2n_1$$

Et finalement :

$$\Gamma_1 = C_{11}n_1^2 + C_{66}n_2^2 + C_{55}n_3^2 + 2C_{56}n_3n_2 + 2C_{15}n_1n_3 + 2C_{16}n_1n_2$$

et représente de façon très astucieuse par le produit ci-dessous d'un tableau 6x6 et d'un pseudo-vecteur à 6 composantes :

$$\Gamma_{ij} \equiv \Gamma_\alpha$$

$$\begin{bmatrix} \Gamma_1 \\ \Gamma_2 \\ \Gamma_3 \\ \Gamma_4 \\ \Gamma_5 \\ \Gamma_6 \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \Gamma_{11} \\ \Gamma_{22} \\ \Gamma_{33} \\ \Gamma_{23} \\ \Gamma_{13} \\ \Gamma_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{66} & C_{55} & 2C_{56} & 2C_{15} & 2C_{16} \\ C_{66} & C_{22} & C_{44} & 2C_{24} & 2C_{46} & 2C_{26} \\ C_{55} & C_{44} & C_{33} & 2C_{34} & 2C_{35} & 2C_{45} \\ C_{56} & C_{24} & C_{34} & C_{23} + C_{44} & C_{36} + C_{45} & C_{25} + C_{46} \\ C_{15} & C_{46} & C_{35} & C_{36} + C_{45} & C_{13} + C_{55} & C_{14} + C_{56} \\ C_{16} & C_{26} & C_{45} & C_{25} + C_{46} & C_{14} + C_{56} & C_{12} + C_{66} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} n_1^2 \\ n_2^2 \\ n_3^2 \\ n_2n_3 \\ n_1n_3 \\ n_1n_2 \end{bmatrix}$$

Le tableau 6x6 ci-dessus donne les valeurs de Γ_{ij} en fonction des constantes élastiques $C_{\alpha\beta}$ en notation contractée et des coordonnées n_i du vecteur

$$\vec{n} = \frac{\vec{q}}{\|\vec{q}\|} \text{ où } \vec{q} \text{ est le vecteur d'onde.}$$

Nous baptiserons du nom de « *tableau de Christoffel* » le tableau ci-dessus utilisé et dont nous rappelons ici le contenu :

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{66} & C_{55} & 2C_{56} & 2C_{15} & 2C_{16} \\ C_{66} & C_{22} & C_{44} & 2C_{24} & 2C_{46} & 2C_{26} \\ C_{55} & C_{44} & C_{33} & 2C_{34} & 2C_{35} & 2C_{45} \\ C_{56} & C_{24} & C_{34} & C_{23} + C_{44} & C_{36} + C_{45} & C_{25} + C_{46} \\ C_{15} & C_{46} & C_{35} & C_{36} + C_{45} & C_{13} + C_{55} & C_{14} + C_{56} \\ C_{16} & C_{26} & C_{45} & C_{25} + C_{46} & C_{14} + C_{56} & C_{12} + C_{66} \end{bmatrix}$$

III. PROPRIETES DES ONDES ELASTIQUES PLANES

Le tenseur Γ_{ij} est symétrique :

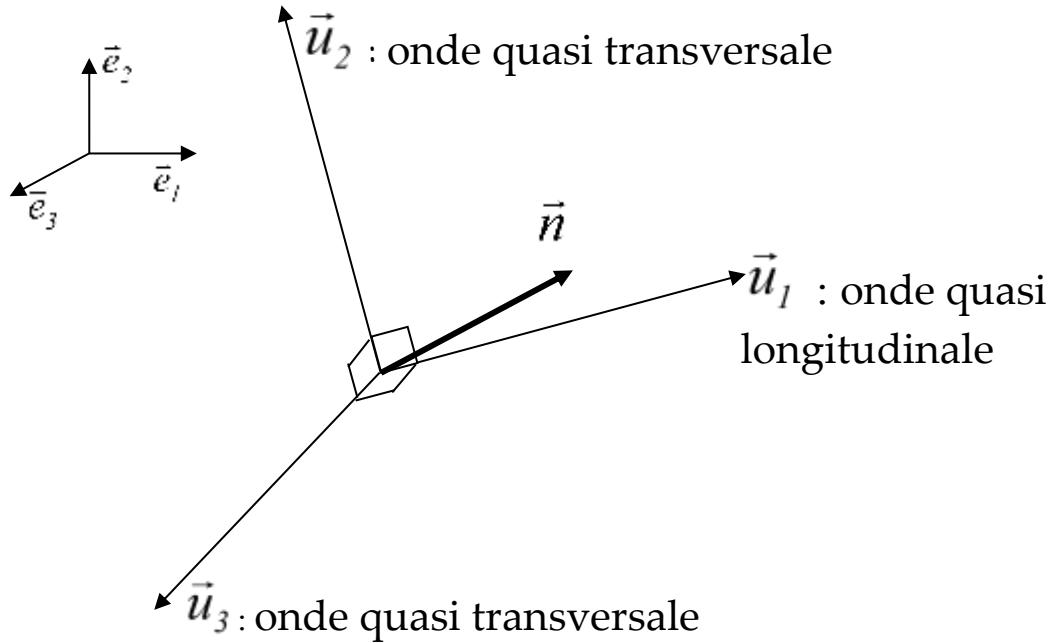
$$\begin{aligned}\Gamma_{il} &= C_{ijkl} n_j n_k = C_{klij} n_j n_k \text{ pour des raisons thermodynamiques} \\ &= C_{lkji} n_j n_k \text{ en raison de la symétrie des tenseurs } T_{kl} \text{ et } S_{ij} \\ &= \Gamma_{li}\end{aligned}$$

Les valeurs propres du tenseur Γ sont donc réelles, et ses vecteurs propres orthogonaux entre eux.

De plus les valeurs propres $\gamma = \rho V^2$ sont positives donc dans le cas général il existe 3 ondes planes se propageant dans une même direction avec des vitesses différentes et des polarisations orthogonales entre elles.

Le vecteur déplacement de la matière \vec{u} (la polarisation de l'onde) n'est pas, dans le cas le plus général, colinéaire ni perpendiculaire à la direction de propagation \vec{n} .

L'onde dont la polarisation est la plus proche de \vec{n} est dite « *quasi longitudinale* » (ou « *pseudo longitudinale* »), les autres sont dites « *quasi transversales* » (ou « *pseudo transversales* »). Ces dernières progressent habituellement toujours plus lentement que l'onde *quasi longitudinale*. Ce n'est que suivant des directions de propagation particulières que les ondes sont purement longitudinales ou transversales.



IV. EXEMPLES DE PROPAGATION

Déterminons les caractéristiques (vitesses et polarisations) des ondes élastiques qui se propagent dans la direction $\vec{n}(0, 0, 1)$, parallèle à Ox_3 .

Il faut en premier lieu exprimer le tenseur $[\Gamma_{il}]$

Par définition on a :

$$\Gamma_{il} = C_{i11l} n_1^2 + C_{i22l} n_2^2 + C_{i33l} n_3^2 + (C_{i12l} + C_{i21l}) n_1 n_2 + (C_{i13l} + C_{i31l}) n_1 n_3 + (C_{i23l} + C_{i32l}) n_2 n_3$$

pour une propagation selon le vecteur $\vec{n}(n_1 = 0, n_2 = 0, n_3 = 1)$, le tenseur $[\Gamma_{il}]$ s'écrira donc :

$$[\Gamma]_{(0,0,1)} = \begin{bmatrix} C_{55} & C_{45} & C_{35} \\ C_{45} & C_{44} & C_{34} \\ C_{35} & C_{34} & C_{33} \end{bmatrix}$$

1) Supposons que le milieu dans lequel se propage l'onde ait un axe de symétrie binaire (type A_2) selon Ox_3 (c'est le cas d'un milieu monoclinique). Dans ce cas en consultant le tableau ci-dessous, on voit que $C_{34} = C_{35} = 0$

D'où :

$$[\Gamma]_{(0,0,1)//A_2} = \begin{bmatrix} C_{55} & C_{45} & 0 \\ C_{45} & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & C_{33} \end{bmatrix}$$

Ils se propagent donc dans ce milieu :

- Une onde longitudinale à la vitesse $V_\ell = \sqrt{C_{33}/\rho}$
- Deux ondes transversales se propageant respectivement avec les vitesses suivantes :

$$V_{t1} = \sqrt{\frac{C_{44} + C_{55} + \sqrt{(C_{44} - C_{55})^2 + 4(C_{45})^2}}{2\rho}}$$

et

$$V_{t2} = \sqrt{\frac{C_{44} + C_{55} - \sqrt{(C_{44} - C_{55})^2 + 4(C_{45})^2}}{2\rho}}$$

2) Si le milieu a un deuxième axe binaire placé selon la direction Ox_1 (c'est le cas d'un milieu à symétrie orthorhombique). Alors C_{45} est nul et le tenseur Γ devient :

$$[\Gamma]_{(0,0,1) \text{ et } (1,0,0)//A_2} = \begin{bmatrix} C_{55} & 0 & 0 \\ 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & C_{33} \end{bmatrix}$$

Dans ce cas ils se propagent donc dans ce milieu :

- Une onde longitudinale à la vitesse $V_\ell = \sqrt{C_{33}/\rho}$
- Deux ondes transversales se propageant respectivement avec les vitesses suivantes :

$$V_{t1} = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}} \quad \text{de polarisation parallèle à } Ox_2 \quad \text{et}$$

$$V_{t2} = \sqrt{\frac{C_{55}}{\rho}} \quad \text{de polarisation parallèle à } Ox_1$$

Dans le cas où l'un des deux axes de symétrie ci-dessus a un ordre supérieur à 2 (A_3 , A_4 ou A_6), alors $C_{44} = C_{55}$ et les deux ondes transversales ont même vitesse. Leur polarisation est alors quelconque dans le plan Ox_1x_2 . Les ondes transversales sont dites « dégénérées » et, par analogie avec l'optique, l'axe Ox_3 est dit « *axe acoustique* ».

Ordres de grandeur : exemple de Al structure cubique :

$$C_{11} = 107 \text{ GPa} \quad C_{44} = 28 \text{ GPa} \quad \rho = 2,7 \cdot 10^3 \text{ kg.m}^{-3}$$

$$\vec{n}(0,0,1) \Rightarrow V_L = \sqrt{\frac{C_{11}}{\rho}} = 6295 \text{ m.s}^{-1} \text{ et } V_T = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}} = 3220 \text{ m.s}^{-1}$$

matériaux	Système cristallographique	ρ (g.cm ⁻³)	C_{11} (GPa)	C_{33} (GPa)	C_{44} (GPa)
Diamant	Cubique - Oh	3,53	1060	1060	570
Graphite	Hexagonal - D6h	2,28	1060	36	4
Quartz c-SiO ₂	Trigonal - D3d	2,65	90	107	60

VIBRATIONS ATOMIQUES, PHONONS

Bibliographie :

- *Physique de l'état Solide, C. KITTEL, Dunod*
- *Physique des solides, N.W. ASHCRIFF et N.D. MERMIN, EDP Sciences*

Dans les molécules il y a trois types d'énergies :

- Les énergies de rotation } **Infrarouge lointain énergie**
- Les énergies de vibration } **Infrarouge**
- Les énergies électroniques } **U.V.,visible croissante**



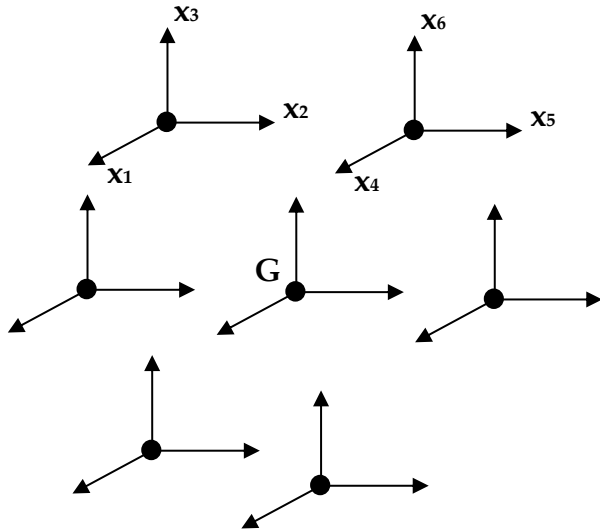
Les approximations de la physique du solide sont les suivantes :

- **L'approximation adiabatique** faite par Born et Oppenheimer : elle considère le mouvement des noyaux atomiques comme indépendant de celui des électrons, ce qui entraîne la séparation des hamiltoniens concernés.
- **L'approximation harmonique** : les noyaux exercent les uns sur les autres des forces proportionnelles à leurs déplacements

I. ETUDES DES VIBRATIONS D'UN SYSTEME DE POINTS MATERIELS

L'espace des configurations : soit un système de n masses.

G est le centre de gravité du système au repos



à trois dimensions le système est décrit par $3n$ coordonnées

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ x_{3n-1} \\ x_{3n} \end{pmatrix} = |X\rangle \text{ à tout instant}$$

$$|X\rangle = |{}^0X\rangle + |u\rangle \quad \text{où}$$

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} u_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ u_{3n} \end{pmatrix}$$

$|{}^0X\rangle$: coordonnées au repos, représentent un vecteur défini dans le repère du centre de masse du système des n masses

$|u\rangle$: variations de $|{}^0X\rangle$, représente un vecteur défini dans le repère des masses.

L'espace des configurations est un espace vectoriel de dimension $3n$ dont les éléments sont les vecteurs $|x\rangle$

Avec ces notations les énergies cinétique T et potentielle V s'écrivent :

$$T = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3n} m_i \dot{u}_i^2$$

$$\text{et } V = V(x_1, \dots, x_{3n})$$

car cette énergie ne dépend que de la distance entre les atomes. On ne connaît pas *a priori* sa forme, donc on l'écrit comme un développement limité autour de la position d'équilibre :

$$V(x_1, \dots, x_{3n}) = V(|^0 X\rangle) + \sum_{i=1}^{3n} \left(\frac{\partial V}{\partial x_i} \right)_{x_i=x_{i0}} u_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{3n} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \right)_{x_i, x_j=x_{i0}, x_{j0}} u_i u_j + \dots$$

À l'équilibre, l'énergie potentielle est minimum, donc le gradient est nul :

$$\left(\frac{\partial V}{\partial x_i} \right)_{x_i=x_{i0}} = 0 \quad \forall i$$

Par ailleurs on choisit le « zéro » de l'énergie pour que $V(|^0 x\rangle)$ soit nul. En conséquence on a :

$$V(x_1, \dots, x_{3n}) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{3n} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \right)_{x_i, x_j=x_{i0}, x_{j0}} u_i u_j + \dots$$

Dans l'approximation harmonique on ne prend en compte que les termes d'ordre 2 de ce développement, en négligeant les termes d'ordre supérieurs.

On écrira donc simplement :

$$V(x_1, \dots, x_{3n}) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{3n} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \right)_{x_i, x_j=x_{i0}, x_{j0}} u_i u_j$$

Posons maintenant $V_{ij} = \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j}$, $[V_{ij}]$ est un tenseur symétrique de rang 2

Effectuons le changement de variable suivant : $q_i = \sqrt{m_i} u_i$ il vient alors :

$$T = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3n} \dot{q}_i^2 = \frac{1}{2} \langle \dot{\xi} | \dot{\xi} \rangle \quad \text{où} \quad |\xi\rangle = \begin{pmatrix} q_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ q_{3n} \end{pmatrix} \quad \text{et}$$

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{3n} \frac{V_{ij}}{\sqrt{m_i m_j}} q_i q_j = \frac{1}{2} \langle \xi | A | \xi \rangle \quad \text{où} \quad A_{ij} = \frac{V_{ij}}{\sqrt{m_i m_j}}$$

A est appelée **matrice dynamique** du système.

On fait alors un nouveau changement de repère afin de se placer dans le repère propre de la matrice A .

$$\text{Dans le nouveau repère on écrit : } |\xi\rangle = \begin{pmatrix} Q_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ Q_{3n} \end{pmatrix}$$

Avec $[M]$, matrice de changement de base on peut écrire :

$$q_i = M_{ij} Q_j$$

Dans son repère propre la matrice A est diagonale :

$$A_Q = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdot & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \lambda_{3n-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \lambda_{3n} \end{pmatrix}$$

On a alors :

$$T = \frac{1}{2} \langle \dot{\xi} | \dot{\xi} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3n} \dot{Q}_i^2$$

$$V = \frac{1}{2} \langle \xi | A | \xi \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3n} \lambda_i Q_i^2$$

les Q_i sont ici des modes découplés

remarque : $\forall i, \lambda_i \geq 0$ car si on écarte le système sa position d'équilibre il tend toujours à y revenir $\Rightarrow \lambda_i = \omega^2$

Le Lagrangien d'un système de n atomes dans l'espace à 3 dimensions s'écrira donc :

$$L = T - V = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3n} (\dot{Q}_i^2 - \lambda_i Q_i^2)$$

et l'équation du mouvement d'un tel système, appelée équation de Hamilton est :

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_i} \right) = \frac{\partial L}{\partial Q_i}$$

cette équation, compte tenu de l'expression de L , se transforme en :

$$\ddot{Q}_i = -\lambda_i Q_i \quad \text{avec } \lambda_i \geq 0$$

dont les solutions sont :

$$Q_k = A_k e^{j\sqrt{\lambda_k} t} + B_k e^{-j\sqrt{\lambda_k} t}$$

soit :

$$Q_k = A_k e^{j\omega_k t} + B_k e^{-j\omega_k t}$$

Q_k représente une composante d'un **mode propre de vibration.**

Le mouvement réel des atomes s'écrit comme suit dans le repère des masses :

$$q_i = \sum_{k=1}^{3n} M_{ik} Q_k = \sum_{k=1}^{3n} M_{ik} (A_k e^{j\sqrt{\lambda_k} t} + B_k e^{-j\sqrt{\lambda_k} t})$$

$$\text{soit } q_i = \sum_{k=1}^{3n} M_{ik} Q_k = \sum_{k=1}^{3n} M_{ik} (A_k e^{j\omega_k t} + B_k e^{-j\omega_k t})$$

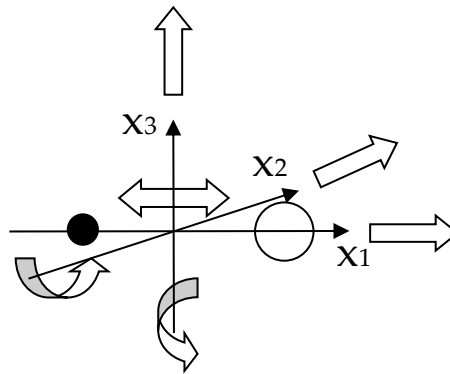
remarque : en général

- 3 des λ_i sont nulles car elles correspondent aux translations globales du système
- 3 des λ_i correspondent aux rotations globales du système

Cas particuliers :

$n = 1$: le système ne contient qu'un seul atome, il y a 3 degrés de liberté, les mouvements sont des translations

$n = 2$: il y a 6 degrés de liberté, dont 3 de translations globales, 2 de rotations globales et 1 de vibration, comme indiqué sur la figure ci-dessous.



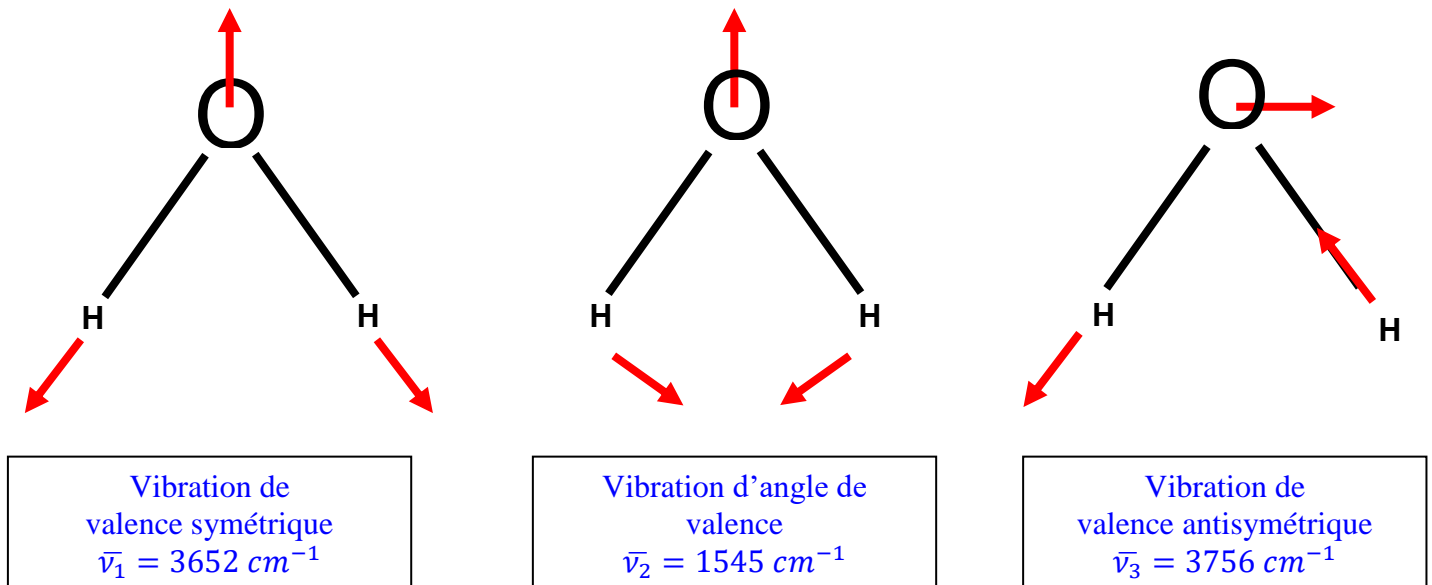
la rotation autour de Ox_1 n'a aucune signification physique car il n'y a pas de moment cinétique sur cet axe.

Ainsi voici quelques exemples de fréquences de modes propres de vibration pour des molécules diatomiques :

HF	3962 cm^{-1}
HCl	2886 cm^{-1}
HBr	2558 cm^{-1}
CO	2144 cm^{-1}
BrCl	440 cm^{-1}
H ₂	4401 cm^{-1}
HD	3813 cm^{-1}
D ₂	3315 cm^{-1}

$n = 3$: 9 degrés de liberté dont 3 de translations globales, 3 de rotations globales et 3 de vibrations

La résolution du problème aux valeurs propres et vecteurs propres décrivant les vibrations de la molécule d'eau dans le cadre de l'approximation harmonique donne les modes de vibrations suivants, dont les valeurs des fréquences sont obtenues par mesures spectroscopiques



Exemple :

Considérons la translation d'ensemble $|T_{x_1}\rangle$ selon Ox_1 pour un système à n atomes dans un espace à 3 dimensions.

$|T_{x_1}\rangle$ est un vecteur à $3n$ coordonnées, toutes égales entre elles.

Avant translation les coordonnées de configuration du système sont $|\xi\rangle$

Après translation elles sont $|\xi'\rangle = |\xi\rangle + |T_{x_1}\rangle$

Les énergies potentielles avant et après translations sont respectivement :

$$V = \frac{1}{2} \langle \xi | A | \xi \rangle \quad \text{et} \quad V' = \frac{1}{2} \langle \xi + T_{x_1} | A | \xi + T_{x_1} \rangle$$

On sait par ailleurs qu'une translation d'ensemble selon Ox_1 n'affecte pas l'énergie potentielle interne du système.

Donc $V = V'$

Or le calcul donne :

$$V' = \frac{1}{2} \left[\langle \xi | A | \xi \rangle + \langle \xi | A | \xi + T_{x_1} \rangle + \langle \xi + T_{x_1} | A | \xi \rangle + \langle T_{x_1} | A | T_{x_1} \rangle \right]$$

$$d'o\grave{u} : \langle \xi | A | \xi + T_{x_i} \rangle + \langle \xi + T_{x_i} | A | \xi \rangle + \langle T_{x_i} | A | T_{x_i} \rangle = 0 \quad \forall T_{x_i}$$

$V = V'$ impose donc $A|T_{x_i}\rangle = 0$ ce qui signifie que $|T_{x_i}\rangle$ est vecteur propre de la matrice A , avec la valeur propre 0

Les translations d'ensemble correspondent donc bien à des valeurs propres nulles.

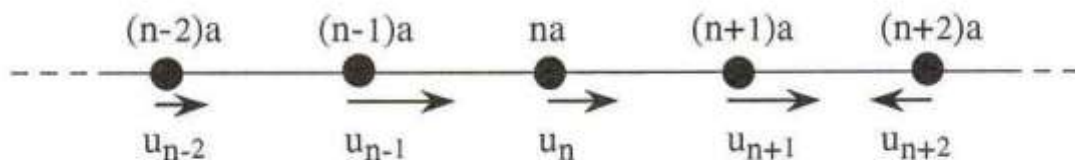
Chaque système matériel possède des fréquences propres. Exemple : les fréquences propres d'un pont, voir pont du Tocama, effondré en 1940 :

https://www.youtube.com/watch?v=uhWQ5zr5_xc

II. Quantification

1) Rappels de mécanique classique :

a) *Chaîne infinie à 1 type d'atome :* on modélise la chaîne par des atomes de masses m , espacés d'une distance a reliés entre eux par une liaison assimilable à un micro-ressort de raideur k



Les vibrations qui se propagent dans la chaîne sont les solutions de l'équation suivante :

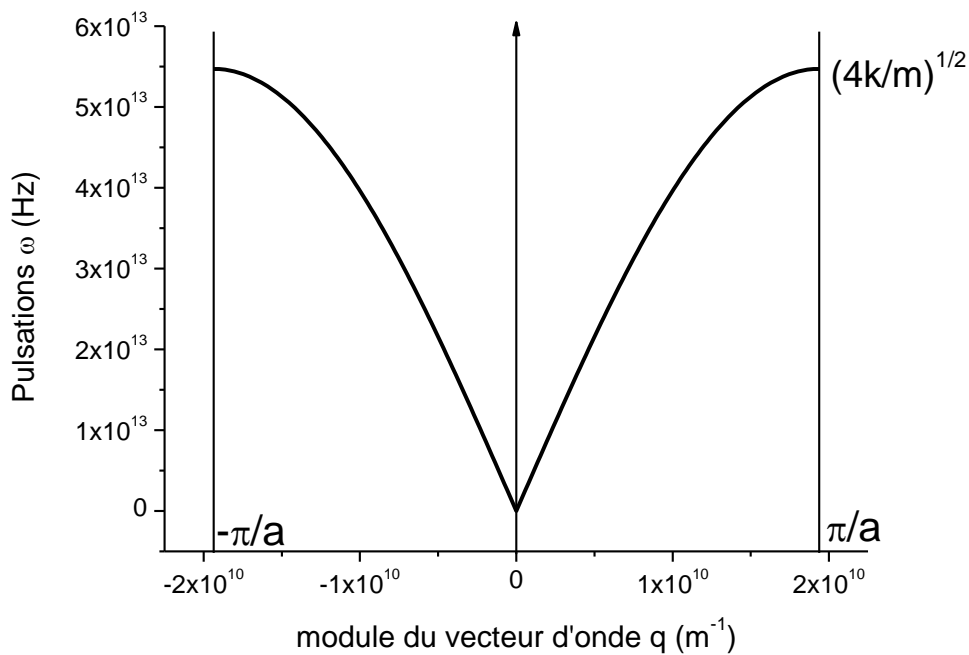
$$m \frac{d^2 u_n}{dt^2} = k(u_{n+1} - u_n) - k(u_n - u_{n-1})$$

Les solutions se mettent sous la forme $u_n = A e^{j(\omega t - qna)}$ où la pulsation est :

$$\omega = 2 \sqrt{\frac{k}{m}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right|$$

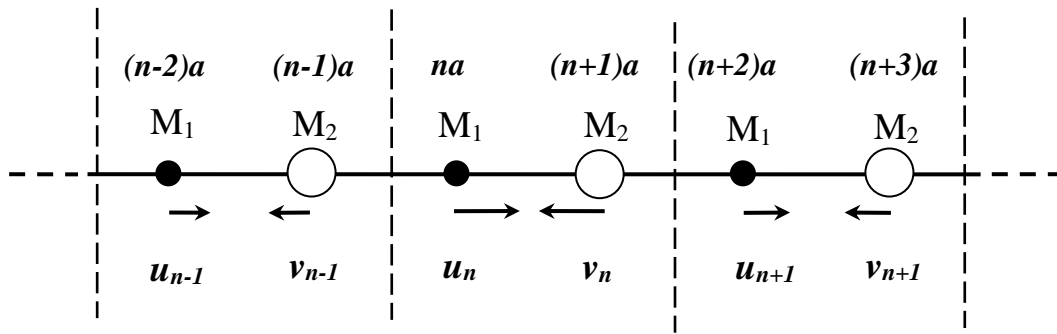
Cette équation exprimant la pulsation en fonction du vecteur d'onde est, comme en électromagnétisme, appelée « relation de dispersion »

La pulsation est donc une fonction périodique de q et il suffit de la représenter sur une seule période, centrée sur $q = 0$, appelée « **1^{ère} zone de Brillouin** »



Courbe de dispersion de la chaîne linéaire à 1 type d'atome de masses m , de périodicité a , liaison interatomique est assimilable à un ressort de raideur k

b) Chaîne infinie à 2 types d'atomes : on modélise la chaîne par des atomes de masses M_1 et M_2 espacés d'une distance a reliés entre eux par une liaison assimilable à un micro-ressort de raideur C



Les vibrations qui se propagent dans la chaîne sont les solutions du système d'équations suivant :

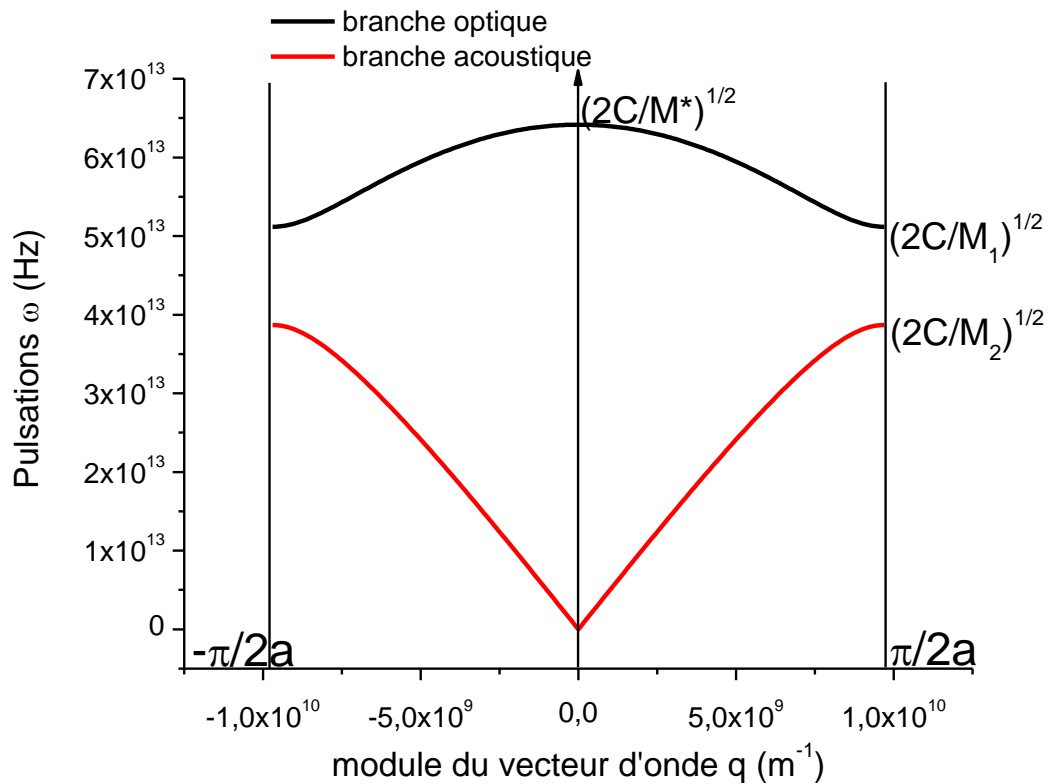
$$M_1 \frac{d^2 u_n}{dt^2} = C(v_n - u_n) - C(u_n - v_{n-1})$$

$$M_2 \frac{d^2 v_n}{dt^2} = C(u_{n+1} - v_n) - C(v_n - u_n)$$

Les solutions se mettent sous la forme $u_n = A e^{j(\omega t - qna)}$ et $v_n = B e^{j(\omega t - q(n+1)a)}$ où la pulsation prend les deux séries de valeurs ci-dessous :

$$\omega^2 = \frac{C}{M_*} \pm C \sqrt{\frac{1}{M_*^2} - 4 \frac{\sin^2(qa)}{M_1 M_2}}$$

où $\frac{1}{M_*} = \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)$



Courbes de dispersion de la chaîne linéaire à 2 types d'atomes espacés d'une distance a (remarque : la périodicité du réseau est ici $2a$), de masses M_1 et M_2 ($M_1 < M_2$) et dont la liaison interatomique est assimilable à un ressort de raideur C

Montrons comment apparaît la quantification en retournant au cas simplifié de la chaîne à 1 type d'atome de périodicité a .

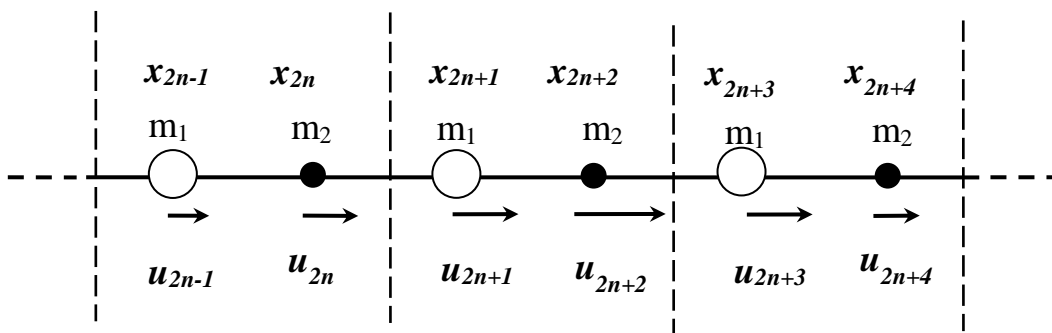
On remarquera qu'en centre de zone de Brillouin la valeur de $\frac{\partial \omega}{\partial q}$ pour les branches acoustiques, représente la vitesse des ondes sonores dans le matériau.

Etude détaillée des vibrations dans la matière : cas des vibrations d'une chaîne linéaire à deux types d'atomes (traitement classique)

I. Vibrations longitudinales

On considère une file illimitée d'atomes équidistants de masses m_1 et m_2 ($m_1 > m_2$). La distance au repos entre deux atomes consécutifs est a . Entre deux atomes consécutifs de la chaîne s'exercent des forces de rappel de nature élastique modélisées par des ressorts identiques de raideur k . On ne considère que les interactions entre atomes premiers voisins.

Les atomes de masse m_2 sont repérés par une position d'équilibre notée x_p et un déplacement par rapport à cette position noté u_p où l'indice p est pair. Les atomes de masse m_1 sont repérés par une position d'équilibre notée x_p et un déplacement par rapport à cette position noté u_p où l'indice p est impair.



- 1) Ecrire les équations du mouvement des deux types d'atomes lorsque la chaîne est soumise à un ébranlement longitudinal.

$$m_1 \frac{d^2 u_{2n+1}}{dt^2} = k[(u_{2n+2} - u_{2n+1}) - (u_{2n+1} - u_{2n})]$$

$$= k(u_{2n+2} + u_{2n} - 2u_{2n+1})$$

$$m_2 \frac{d^2 u_{2n}}{dt^2} = k[(u_{2n+1} - u_{2n}) - (u_{2n} - u_{2n-1})]$$

$$= k(u_{2n+1} + u_{2n-1} - 2u_{2n})$$

2) Chercher une solution sinusoïdale de ces équations sous la forme :

$$u_{2n} = A_2 e^{j(\omega t - qx)} \text{ avec } x = 2na$$

$$u_{2n+1} = A_1 e^{j(\omega t - qx)} \text{ avec } x = (2n + 1)a$$

lorsque \vec{q} est le vecteur d'onde dans la direction de propagation et x l'abscisse au repos de l'atome considéré.

Monter qu'il existe pour chaque valeur de q deux valeurs de la pulsation ω dont vous donnerez les expressions en fonction de q . Tracer les courbes de dispersion $\omega(q)$ correspondantes.

on écrira donc précisément :

$$u_{2n} = A_2 e^{j(\omega t - q2na)}$$

$$u_{2n+1} = A_1 e^{j(\omega t - q(2n+1)a)}$$

$$u_{2n-1} = A_1 e^{j(\omega t - q(2n-1)a)}$$

$$u_{2n+2} = A_2 e^{j(\omega t - q(2n+2)a)}$$

$$\begin{cases} -m_1 \omega^2 A_1 e^{-jq(2n+1)a} = k(A_2 e^{-jq(2n+2)a} + A_2 e^{-jq2na} - 2A_1 e^{-jq(2n+1)a}) \\ -m_2 \omega^2 A_2 e^{-jq2na} = k(A_1 e^{-jq(2n+1)a} + A_1 e^{-jq(2n-1)a} - 2A_2 e^{-jq2na}) \end{cases}$$

Soit :

$$\begin{cases} -m_1 \omega^2 A_1 = k(A_2 e^{-jq a} + A_2 e^{jq a} - 2A_1) \\ -m_2 \omega^2 A_2 = k(A_1 e^{-jq a} + A_1 e^{jq a} - 2A_2) \end{cases}$$

Finalement il reste :

$$\begin{cases} A_1(m_1 \omega^2 - 2k) + A_2 2k \cos qa = 0 \\ A_2(m_2 \omega^2 - 2k) + A_1 2k \cos qa = 0 \end{cases}$$

Ce système de deux équations homogènes n'a de solution en A_1 et A_2 que si son déterminant est nul, soit si :

$$\Delta = (m_1\omega^2 - 2k)(m_2\omega^2 - 2k) - 4k^2 \cos^2 qa = 0$$

D'où :

$$\omega^4 - \frac{2k}{\mu} \omega^2 + \frac{4k^2}{m_1 m_2} \sin^2 qa = 0$$

$$\text{Avec } \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

Cette équation bicarrée a pour solutions :

$$\omega_+^2 = \frac{k}{\mu} + \frac{k}{\mu} \sqrt{1 - \frac{4\mu^2}{m_1 m_2} \sin^2 qa}$$

Et

$$\omega_-^2 = \frac{k}{\mu} - \frac{k}{\mu} \sqrt{1 - \frac{4\mu^2}{m_1 m_2} \sin^2 qa}$$

➤ En centre de 1^{ère} zone de Brillouin ($q = 0$) les deux solutions valent :

$$\omega_+ = \sqrt{\frac{2k}{\mu}} = \omega_o \quad \text{Branche optique}$$

Et :

$$\omega_- = 0 = \omega_a \quad \text{Branche acoustique}$$

➤ En bord de 1^{ère} zone de Brillouin ($q = \frac{\pi}{2a}$) les deux solutions valent :

$$\omega_+ = \sqrt{\frac{2k}{m_2}} = \omega_o$$

$$\omega_- = \sqrt{\frac{2k}{m_1}} = \omega_a$$

➤ Le développement de ω^2 en $q = 0$ donne :

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{k}{\mu} \pm \frac{k}{\mu} \left[1 - \frac{2\mu^2}{m_1 m_2} q^2 a^2 \right]$$

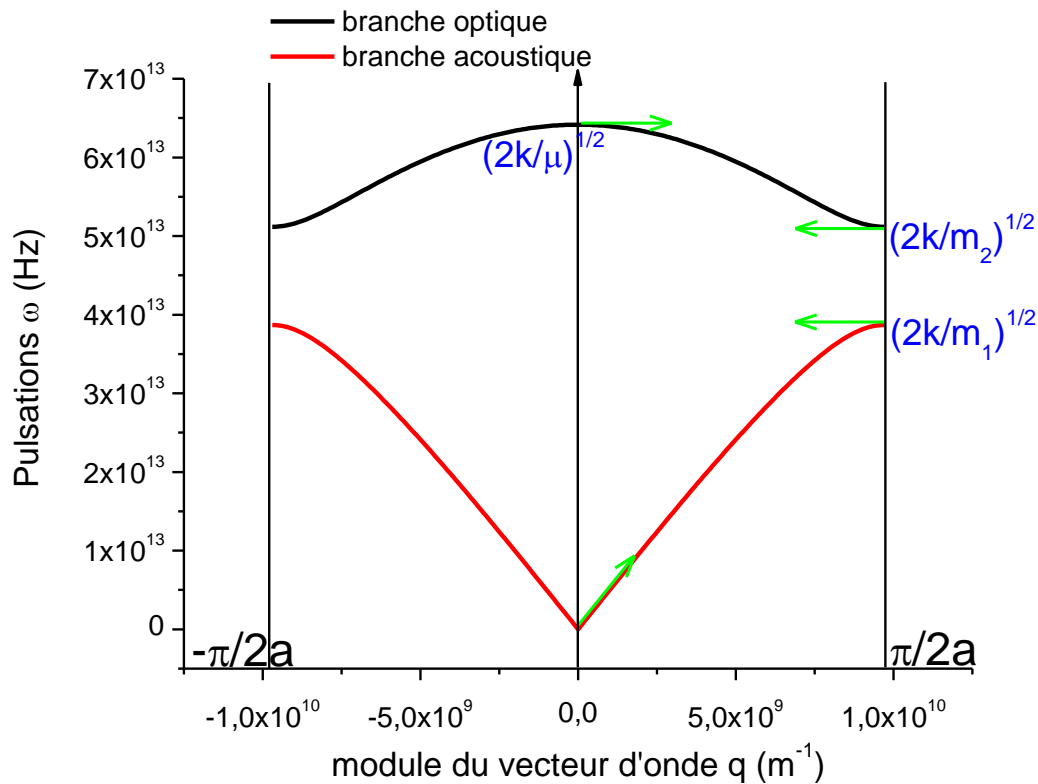
Soit :

$$\omega_+^2 = \omega_0^2 = \frac{2k}{\mu} - \frac{2k\mu}{m_1 m_2} q^2 a^2$$

Cette fonction est décroissante en q

$$\omega_-^2 = \omega_a^2 = \frac{2k\mu}{m_1 m_2} a^2 q^2$$

La fonction ω_- est donc linéairement croissante en q



- 3) Montrer que sur la branche la plus basse (branche acoustique) ω est assimilable à une fonction linéaire de q pour les faibles valeurs du vecteur d'onde. En déduire la vitesse de propagation du son dans la chaîne.

Nous avons vu ci-dessus que pour la branche acoustique, branche la plus basse, le développement de ω_-^2 aux petites valeurs du vecteur d'onde, était :

$$\omega_-^2 = \omega_a^2 = \frac{2k\mu}{m_1 m_2} a^2 q^2$$

Soit pour ω_- :

$$\omega_- = \omega_a = \left(\frac{2k\mu}{m_1 m_2} \right)^{1/2} a q$$

Cette fonction est bien linéairement croissante en q

La vitesse des ondes acoustiques est donc :

$$V_a = \frac{\omega_a}{q} = \left(\frac{2k\mu}{m_1 m_2} \right)^{1/2} a = a \sqrt{\frac{2k}{m_1 + m_2}}$$

- 4) Calculer le rapport des amplitudes A_1/A_2 pour les deux branches en centre et au bord de la 1^{ère} zone de Brillouin. Quelles conditions peut-on tirer pour le déplacement des atomes de chaque sous-réseau ?

Par ailleurs, d'après le système d'équation écrit au 2) il vient :

$$\frac{A_1}{A_2} = -\frac{2k \cos qa}{m_1 \omega^2 - 2k} = -\frac{m_2 \omega^2 - 2k}{2k \cos qa}$$

Donc :

- Pour la branche optique : $\omega > \sqrt{\frac{2k}{m_2}}$ or $\frac{A_1}{A_2} = -\frac{m_2 \omega^2 - 2k}{2k \cos qa}$

D'où $\frac{A_1}{A_2} < 0 \forall q \in 1^{\text{ère}} \text{ zone de Brillouin}$

Donc deux atomes voisins se déplacent en sens opposés. On dira qu'ils vibrent en opposition de phase.

- Pour la branche acoustique : $\omega < \sqrt{\frac{2k}{m_1}}$ or $\frac{A_1}{A_2} = -\frac{2k \cos qa}{m_1 \omega^2 - 2k}$

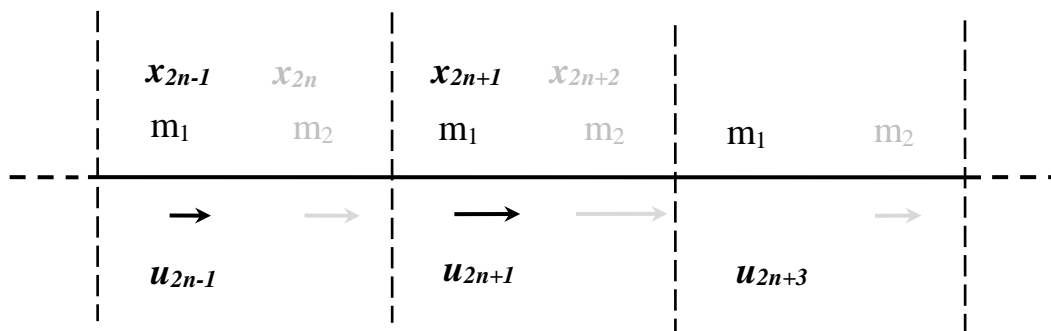
D'où $\frac{A_1}{A_2} > 0 \forall q \in 1^{\text{ère}} \text{ zone de Brillouin}$

Donc deux atomes voisins se déplacent dans le même sens. On dira qu'ils vibrent en phase.

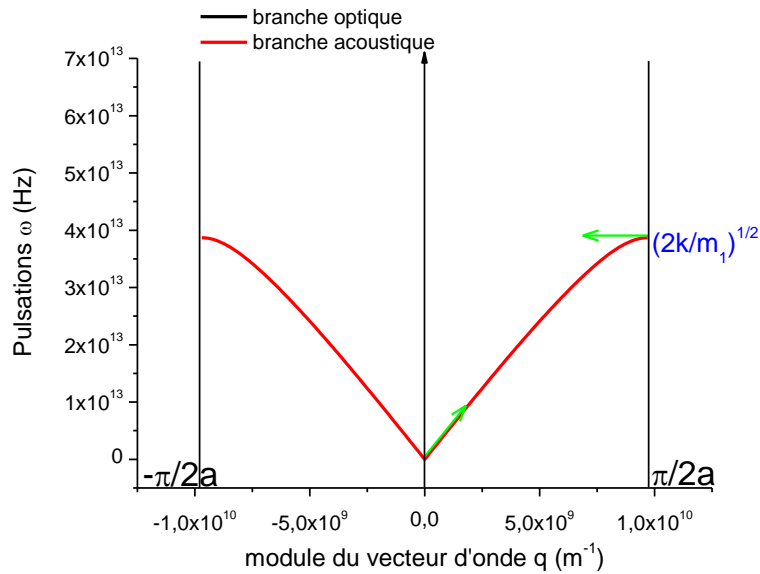
Envisager les cas limites suivants : $m_2 \rightarrow 0$; $m_1 \rightarrow \infty$; $m_1 \rightarrow m_2$.

- $m_2 \rightarrow 0$:

la branche optique disparaît, il n'y a plus qu'une branche de dispersion



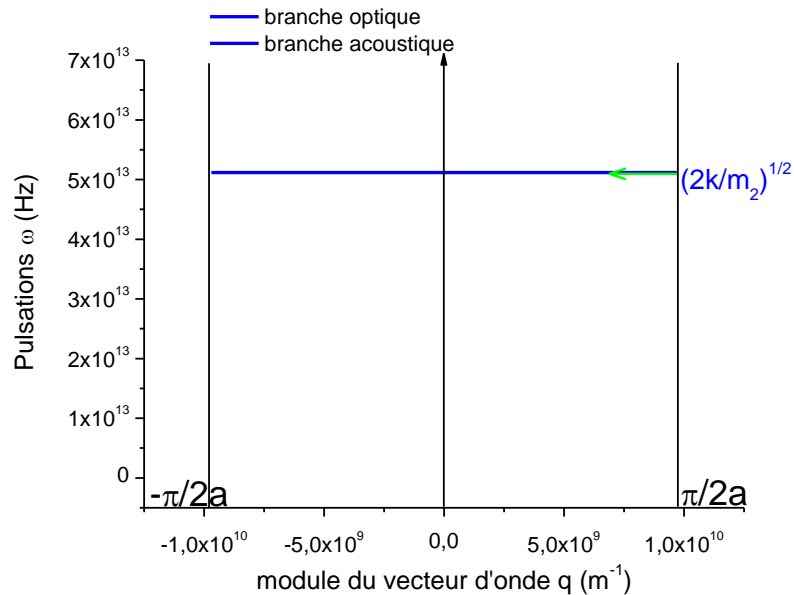
On retrouve une chaîne linéaire à 1 type d'atome, une périodicité de $2a$ dans le réseau directe et π/a dans le réseau réciproque



➤ $m_1 \rightarrow \infty$:

on a ne masse m_2 qui oscille entre 2 ressorts de constante de raideur k

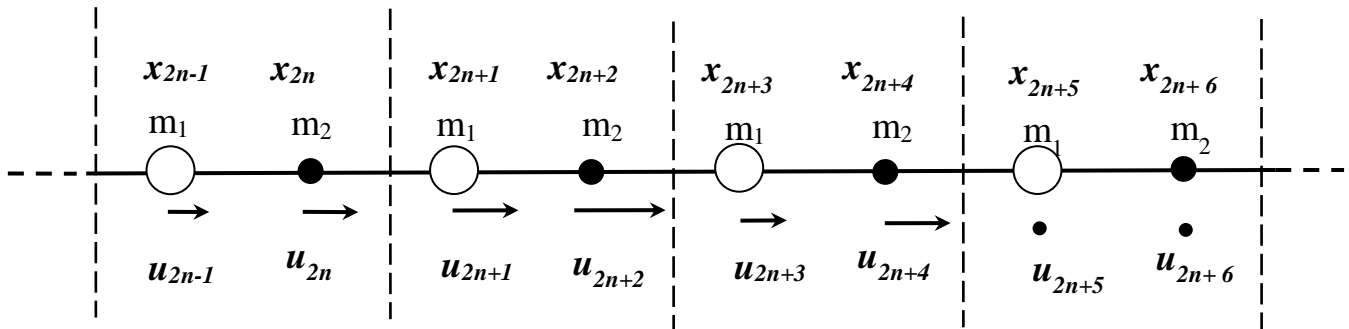
Par ailleurs la masse réduite tend vers m_2 $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \rightarrow m_2$ donc la branche acoustique s'effondre et il ne reste plus que la branche optique avec une fréquence unique.



➤ $m_1 \rightarrow m_2$

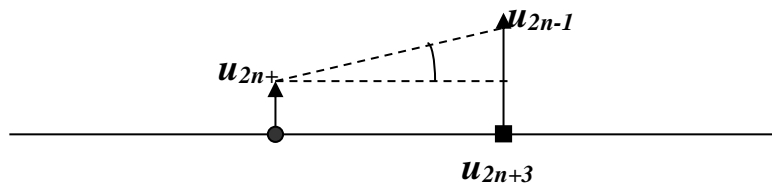
on retrouve les mêmes fréquences que pour la chaîne linéaire à 1 type d'atome, avec une périodicité formelle de $2a$. Il y a « repliement » de la 1^{ère} zone de Brillouin sur elle-même pour former une périodicité de π/a

5) Quel est le vecteur d'onde correspondant à la vibration représentée sur le graphique ci-dessous ?



II. Vibrations Transversales

Pour des déplacements transversaux, la force de rappel est proportionnelle à l'angle θ défini par : $F_{2n+1} = -C\theta$



On désigne par v_{2n} et v_{2n+1} les déplacements transversaux des atomes $(2n)$ et $(2n+1)$ autour de leurs positions d'équilibre, v_{2n} et $v_{2n+1} \ll a$

1. Ecrire les équations du mouvement de ces atomes. En déduire les courbes de dispersion des modes transverses.
2. Les atomes de la chaîne sont supposés avoir des charges $(+\zeta)$ pour l'atome de masse m_2 et $(-\zeta)$ pour l'atome de masses m_1 . Lorsqu'on soumet la chaîne à une onde électromagnétique définie par : $\vec{E} = \vec{E}_0 e^{j(\omega t - q'x)}$, $q' \ll \pi/a$, que deviennent les équations du mouvement ? Avec $\vec{E} //$ direction de v_{2n} .
3. On cherche des solutions de la forme :

$$v_{2n+1} = B_1 e^{j(\omega t - qx)} \quad \text{avec } x = 2na$$

$$v_{2n} = B_2 e^{j(\omega t - qx)}$$

Quelles conditions doivent satisfaire ω , ω' , q et q' pour que les équations du mouvement soient solubles ? Ces conditions étant satisfaites, calculer B_1 et B_2 .

2) Conditions cycliques de Born – von Karman :

Soit un cristal cubique de 1 mm de côté, de périodicité $a = 3 \text{ \AA}$

Cristal : volume $V = 10^{21} \text{ \AA}^3$, surface $S = 6.10^{14} \text{ \AA}^2$

Cellule cubique élémentaire : vol. $v \# 30 \text{ \AA}^3$, surf. $s \# 10 \text{ \AA}^2$

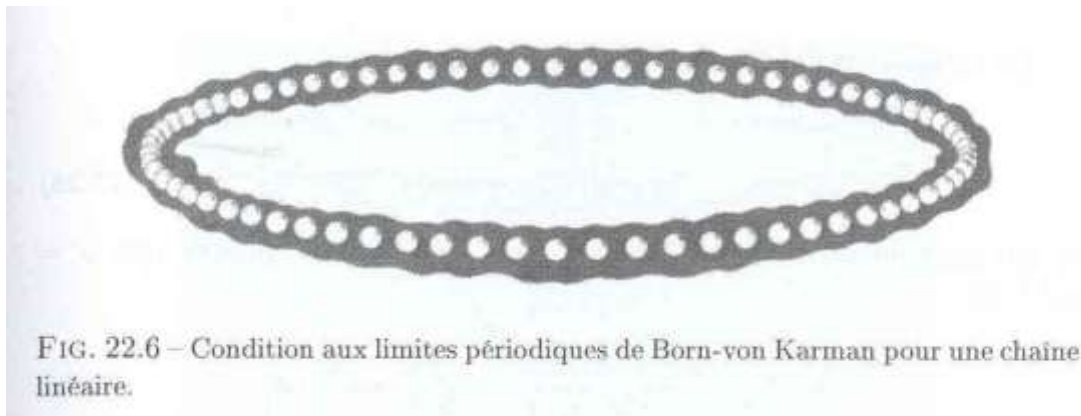
Le nombre d'éléments chimiques élémentaires dans le cristal est :

$$N_v \# V/v \# 3.10^{19}$$

Le nombre d'éléments chimiques élémentaires à la surface du cristal est :

$$N_s \# S/s \# 6.10^{13}$$

$N_s \ll N_v$ donc dans une première approximation on peut négliger les effets des atomes qui se trouvent à la surface du cristal. On affectera ainsi arbitrairement un état de vibration identique à deux atomes situés à deux extrémités opposées du cristal. Dans le cas d'une chaîne linéaire à N atomes cela revient à refermer la chaîne sur elle-même (d'où la dénomination de « *conditions cycliques* »).



Dans ce cas les états de vibration u_n du $n^{\text{ième}}$ atome et u_{n+N} celui du $n+N^{\text{ième}}$ seront tels que :

$$u_n = Ae^{j[\omega t - qna]} = u_{n+N} = Ae^{j[\omega t - q(n+N)a]}$$

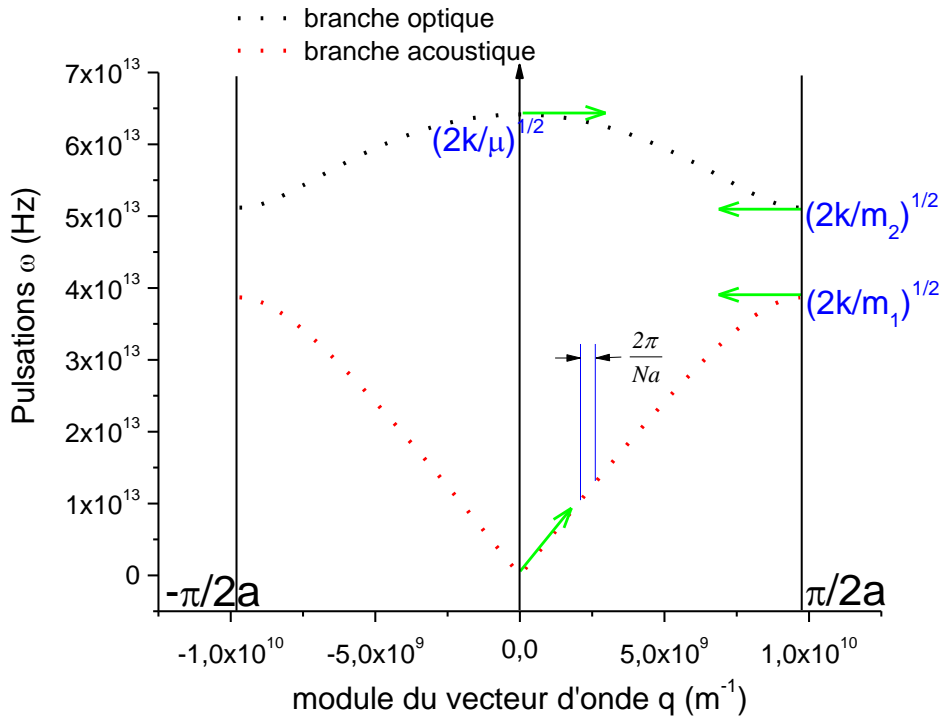
Où \vec{q} représente le vecteur d'onde

Ce qui impose : $qNa = 2\pi p$, p entier relatif, d'où

$$q = p \frac{2\pi}{Na}$$

Il y a quantification du vecteur d'onde.

Les courbes de dispersion sont donc discontinues et constituées de points espacées de façon équidistante de $\frac{2\pi}{Na}$



III. Notion de « phonon »

1) Quantification des modes propres

De même qu'on écrivait comme suit le *Lagrangien* dans le cas d'un système à n atomes dans l'espace à 3 dimensions :

$$L = T - V = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3n} (\dot{Q}_i^2 - \lambda_i Q_i^2)$$

on écrit le *Hamiltonien* correspondant de la façon suivante :

$$H = T + V = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3n} (\dot{Q}_i^2 + \lambda_i Q_i^2)$$

où $\lambda_i = \omega^2$ représente les pulsations des modes de vibration. On admettra facilement que pour un cristal à N mailles, contenant chacune s atomes ($n = Ns$ atomes en tout dans le cristal), dans l'espace à 3 dimensions, on a $3s$ courbes de dispersion (branches). Le *Hamiltonien* peut alors s'écrire de la façon suivante (toujours en sommant sur tous les modes de vibration) :

$$H = T + V = \frac{1}{2} \sum_q^{N \text{ vecteurs d'onde } \vec{q}} \sum_{r=1}^{3s} (\dot{Q}_{rq}^* \dot{Q}_{rq} + \omega_{rq}^2 Q_{rq}^* Q_{rq})$$

où la première sommation concerne les N vecteurs d'onde de la 1^{ère} zone de Brillouin, et la deuxième somme porte sur les $3s$ branches des courbes de dispersion.

Ci-dessous sont représentées les courbes de dispersion des modes de vibration dans le silicium et le germanium cristallins

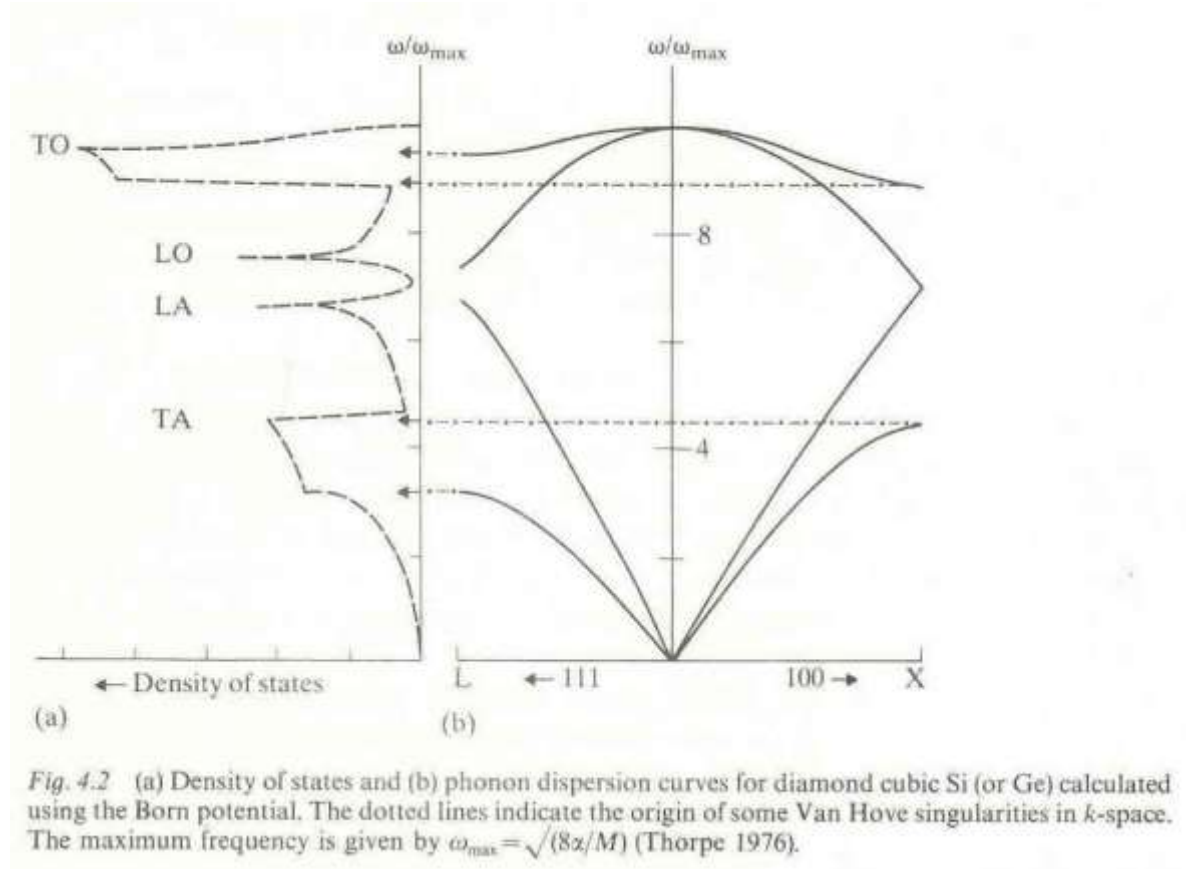


Fig. 4.2 (a) Density of states and (b) phonon dispersion curves for diamond cubic Si (or Ge) calculated using the Born potential. The dotted lines indicate the origin of some Van Hove singularities in k -space. The maximum frequency is given by $\omega_{\max} = \sqrt{(8z/M)}$ (Thorpe 1976).

(a) : densité d'états

(b) : Courbes de dispersion pour le silicium (ou le germanium) en structure cubique dite « diamant »

On montre en mécanique quantique que l'on peut introduire le moment conjugué de Lagrange $P_{rq} = \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_{rq}} = \dot{Q}_{rq}$ (correspondant à la quantité de mouvement), d'où :

$$H = T + V = \frac{1}{2} \sum_q^{N \text{ vecteurs d'onde } \vec{q}} \sum_{r=1}^{3s} (P_{rq} P_{rq} + \omega_{rq}^2 Q_{rq} Q_{rq})$$

On reconnaît ici que le *Hamiltonien* est écrit sous la forme d'une somme de *Hamiltoniens* d'oscillateurs harmoniques. Le système (le cristal) apparaît donc comme un ensemble de **3Ns oscillateurs harmoniques**, chacun étant caractérisé par l'énergie moyenne suivante :

$$\bar{E}_{rq} = \left(g + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_{rq}$$

où g dépend de la température T et représente le nombre d'oscillateurs élémentaires de pulsation ω_{rq}

Il nous reste à déterminer ce que g représente.

2) Occupation des niveaux d'énergie

On montre en physique statistique que g dépend de r et de q (donc de la courbe de dispersion sur laquelle se trouve le mode de vibration et du vecteur d'onde de celle-ci), et se met sous la forme suivante :

$$g_{rq}(T) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega_{rq}}{k_B T}} - 1}$$

g suit la statistique dite de « Bose-Einstein ».

L'énergie moyenne contenue dans le cristal et due aux modes de vibrations de pulsation ω_{rq} sera donc :

$$\bar{E}_{rq} = \left(g_{rq}(T) + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_{rq}$$

Ce sont les travaux de Igor Ievguenievitch Tamm (Prix Nobel de Physique 1958) qui ont ainsi fait apparaître en 1930 l'idée d'un quantum de vibration, caractérisée par l'énergie $\hbar \omega_{rq}$ et l'impulsion \vec{q} . En 1932 Yakov Ilitch Frenkel propose, par analogie avec le « *photon* », quantum de vibration électromagnétique, de baptiser « *phonon* » le quantum de vibration mécanique.

Chaque point des courbes de dispersion $\omega = f(q)$ correspond à un *phonon*. g_{rq} est le nombre de pseudo particules de vibration, de *phonons*, identiques.

Puisque le *phonon* suit la statistique dite de Bose-Einstein, c'est un *boson*. Cela signifie que le nombre de phonons dans le même état de vibration à un endroit donné de l'espace peut être mathématiquement infini, et à température T il est égal à $g_{rq}(T)$, donné ci-dessus.

IV. Exemple de propriété dont les « phonons » permettent de rendre compte : la chaleur spécifique

On peut assimiler l'énergie de vibration d'un matériau à son énergie interne. On écrira donc :

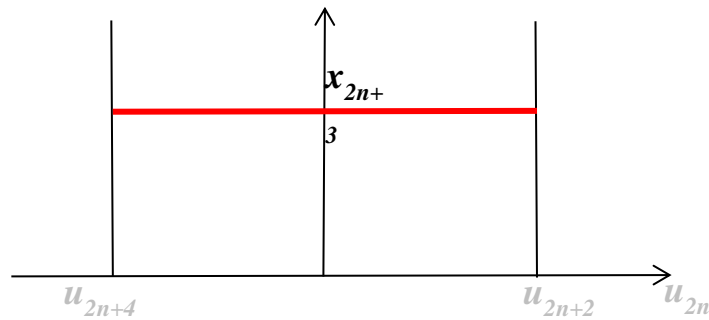
$$U = \sum_{r,q} \bar{E}_{rq} = \sum_{r,q} \left(g_{rq}(T) + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_{rq} = U_0 + \sum_{r,q} g_{rq}(T) \hbar \omega_{rq}$$

or, $C_v = \frac{\partial U}{\partial T}$

Dans le modèle simplifié, dit d'Einstein, chaque atome dans un cristal est considéré comme un oscillateur indépendant de ses voisins. Ce modèle abusif revient donc à supprimer toute propagation des phonons, et puisque tous les oscillateurs sont ainsi rendus identiques, il n'y a plus qu'une seule valeur de la pulsation : ω

Chaque atome vibre dans les 3 directions de l'espace, il y a donc $3N$ oscillateurs dans le cas d'un cristal à N atomes.

Cette hypothèse donne les courbes de dispersion suivantes :



On remarque que ce modèle n'est pas absurde pour les branches optiques des courbes de dispersion.

Avec
$$U = U_0 + \frac{3N \hbar \omega_0}{e^{\frac{\hbar \omega_0}{k_B T}} - 1}$$
 et $C_v = \frac{\partial U}{\partial T}$ il vient :

$$C_v = 3N \frac{(\hbar \omega_0)^2}{k_B T^2} \frac{e^{\frac{\hbar \omega_0}{k_B T}}}{\left(e^{\frac{\hbar \omega_0}{k_B T}} - 1 \right)^2}$$

• à $T \gg \hbar \omega / k_B$ on a :

$$C_v = 3N \frac{(\hbar \omega_0)^2}{k_B T^2} \frac{1 + \frac{\hbar \omega_0}{k_B T} + \dots}{\left(\frac{\hbar \omega_0}{k_B T} \right)^2}$$

soit : $C_v = 3Nk_B$

si le nombre d'atomes concernés est celui d'une mole, alors : $N = N_A$
nombre d'Avogadro, et

$$C_v = 3 N_A k_B = 3R \text{ constante des gaz parfaits}$$

On retrouve le résultat des gaz parfaits, ce qui n'est pas étonnant car l'hypothèse faite par le modèle d'Einstein correspond exactement à ce cas.

- à $T \ll \hbar\omega/k_B$ il vient : $C_v = 3N \frac{(\hbar\omega_0)^2}{k_B T^2} e^{-\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}}$

Ce résultat s'écarte notablement de la réalité, ce qui n'est pas étonnant car à basse température, ce sont les niveaux d'énergie les plus bas qui sont les plus peuplés, c'est-à-dire ceux des phonons acoustiques, que le modèle d'Einstein ignore.

Il existe d'autres modèles permettant de rendre compte de la chaleur spécifique des corps, notamment celui de Debye, mais que nous ne développerons pas ici car ils sont hors sujet par rapport au programme de ce cours.

Ce qu'il faut retenir de ces derniers éléments est que l'aptitude d'un matériau à stocker de la chaleur provient des modes vibrations dont celui-ci peut être le siège. C'est « *dans les phonons* » que le matériau stocke la chaleur.

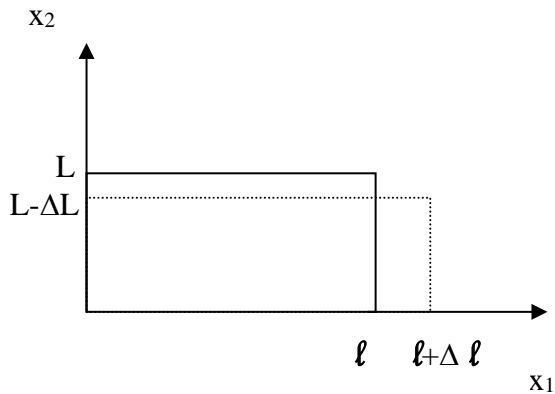
Le modèle harmonique (ou « élastique ») de description des milieux denses, avec sa notion de phonon, ou plus généralement de modes de vibrations, permet de rendre compte d'un grand nombre d'autres propriétés physiques (diffusion atomique, conductivité thermique, conductivité électrique, supraconductivité, etc...).

Elasticité statique : déformations élémentaires

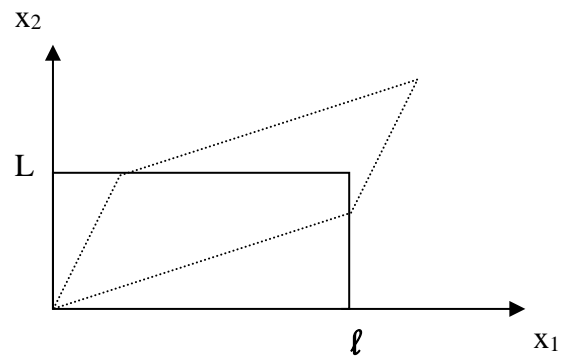
Exercice 1

Donner l'expression du tenseur des déformations $[S]$, du tenseur $[A]$ et du tenseur $[R]$ de rotation associé à $[A]$ dans les cas suivants :

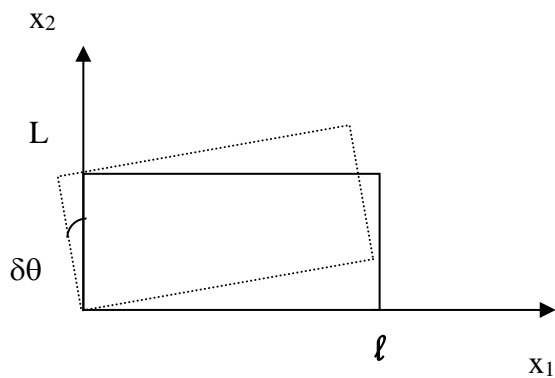
a) allongement pur



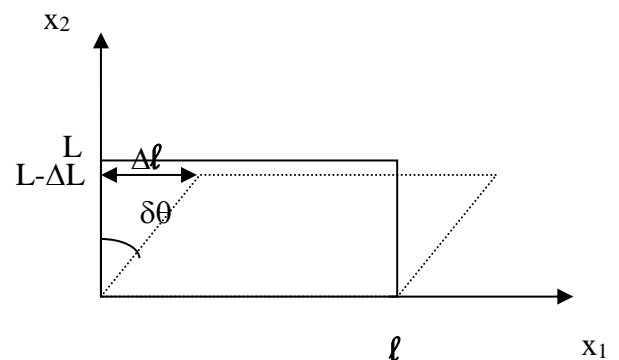
b) cisaillement pur



c) rotation pure



d)



Exercice 2

Une plaque rectangulaire de côtés L_1 , L_2 , respectivement suivant l'axe (Ox) et (Oy) d'un repère (O,x,y) , subit une déformation caractérisée par le tenseur des variations suivant:

$$[V] = \begin{bmatrix} 0 & k \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

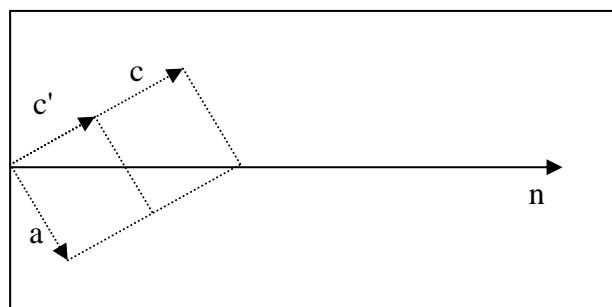
Représentez la plaque après déformation. Montrez que ce cisaillement simple correspond à un cisaillement pur associé à une rotation dont vous déterminerez l'angle θ en fonction de k . Déterminez la variation relative de surface au cours de la déformation, ainsi que l'allongement relatif, dans une direction quelconque de vecteur directeur $\vec{n} = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$.

Exercice 3: exemple d'utilisation de l'outil tensoriel dans d'autres domaines de la physique.

On considère un cristal tétragonal de vecteurs de translation \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} , avec $c = 2a$. Dans le repère orthonormé $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}')$, le tenseur de résistivité $[\rho]$ est donné par :

$$[\rho] = \begin{bmatrix} 16 & 0 & 0 \\ 0 & 16 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}$$

Calculez la valeur de la résistivité dans la direction \vec{n} .



Déformation d'un solide-Elasticité statique

Un milieu solide, soumis à un champ de contraintes $[T_{ij}]$, est le siège de déformations tridimensionnelles caractérisées par :

$$u_1 = k.(-x_1 + x_2 - 2x_3)$$

$$u_2 = k.(-x_1 + x_2)$$

$$u_3 = k.(2x_1 - 2x_2 + x_3)$$

(u_1, u_2, u_3) représentent les coordonnées de déplacement d'un point du matériau dans le repère orthonormé $Ox_1x_2x_3$. La déformation est élastique et k est un coefficient constant égal à 10^{-4} .

1) Ecrire le tenseur $[V]$ des variations. En déduire le tenseur $[S]$ des déformations et $[\Omega]$ correspondant à une rotation d'ensemble du solide autour d'un axe que l'on déterminera.

Représenter qualitativement, dans le plan (Ox_1, Ox_2) la déformation d'une face du solide (de côtés dx_1 et dx_2).

2) Déterminer l'allongement relatif $\frac{\Delta\ell}{\ell}$ de l'échantillon dans une direction $|n\rangle$.

- Préciser les directions $|n\rangle$ pour lesquelles $\frac{\Delta\ell}{\ell} = 0$ (lignes neutres du matériau) dans les trois plans : (Ox_1, Ox_2) , (Ox_1, Ox_3) , (Ox_2, Ox_3) .

Lorsque $|n\rangle$ est dans le plan (Ox_1, Ox_2) et fait un angle θ avec Ox_1 , étudier et représenter graphiquement les variations de $\Delta\ell/\ell$ en fonction de θ (c'est-à-dire tracer les rosettes), pour cela on trace dans le plan (Ox_1, Ox_2) une courbe qui représente l'extrémité du vecteur de coordonnées polaires $(\frac{\Delta\ell}{\ell}, \theta)$.

3) Le matériau appartient au système cubique. Appliquer la méthode dite d'inspection directe pour réduire les 81 composantes du tenseur des constantes élastiques $[C_{ijkl}]$ que vous présenterez sous la forme du tableau $[C_{\alpha\beta}]$.

L'échantillon sur lequel on travaille est un parallélépipède rectangle caractérisé par des arêtes dx_1, dx_2, dx_3 respectivement selon Ox_1, Ox_2, Ox_3 . Représenter cet élément de volume et les contraintes qui s'exercent sur ses faces.

A.N. : le cristal étudié est un échantillon de $RbCaF_3$ de structure pérovskite caractérisé par :

$$C_{11} = 102 \text{ GPa}$$

$$C_{12} = 25 \text{ GPa}$$

$$C_{44} = 21.5 \text{ GPa}$$

Déterminer les valeurs des composantes du tenseur des contraintes. On trouve la structure pérovskite (voir ci-dessous où $A \equiv \text{Rb}$, $M \equiv \text{Ca}$, $X \equiv \text{F}$), par exemple, dans les matériaux supraconducteurs à haute température (Prix Nobel de Physique 1987 : K.A. Müller et J. Bednorz), ainsi que dans la couche du manteau terrestre inférieur (entre -700 km et -3000 km) où le composé CaTiO_3 est en forte proportion.

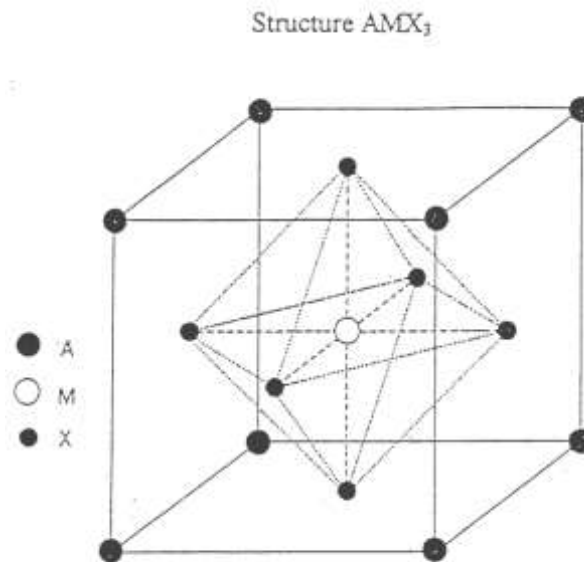


Figure 1 : Maille élémentaire de la structure pérovskite idéale.

ELASTICITE DYNAMIQUE

Problème 1 :

TlCdF₃ cristallise dans le système cubique et l'on a déterminé pour ce cristal :

$$C_{11} = 10 \cdot 10^{10} \text{ N.m}^{-2}, C_{12} = 3,9 \cdot 10^{10} \text{ N.m}^{-2}, C_{44} = 1,76 \cdot 10^{10} \text{ N.m}^{-2},$$

$$\rho = 7,31 \text{ g.cm}^{-3}.$$

Déterminer les vitesses et les polarisations des ondes planes $\vec{u} = \vec{u}_0 \exp i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})$ se propageant dans les directions de vecteurs unitaires suivants :

i) $\vec{n} = [1,0,0]$

$$[\Gamma]_{[1,0,0]} = \begin{bmatrix} C_{11} & 0 & 0 \\ 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix}$$

$$v_1 = \sqrt{\frac{C_{11}}{\rho}} = 3699 \text{ m.s}^{-1} \quad \vec{p}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow v_1 = v_L$$

$$v_2 = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}} = 1552 \text{ m.s}^{-1} \quad \vec{p}_2 \in \text{plan } Ox_2x_3 \rightarrow v_2 = v_T$$

ii) $\vec{n} = \left[\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0 \right]$

$$[\Gamma]_{[1,1,0]} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} C_{11} + C_{44} & C_{12} + C_{44} & 0 \\ C_{12} + C_{44} & C_{11} + C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 2C_{44} \end{bmatrix}$$

$$v_1 = \sqrt{\frac{C_{11} + C_{12} + 2C_{44}}{2\rho}} = 3452 \text{ m.s}^{-1} \quad \vec{p}_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow v_1 = v_L$$

$$v_2 = \sqrt{\frac{C_{11} - C_{12}}{2\rho}} = 2043 \text{ m.s}^{-1} \quad \vec{p}_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow v_2 = v_{T1}$$

$$v_3 = \sqrt{\frac{C_{44}}{\rho}} = 1552 \text{ m.s}^{-1} \quad \vec{p}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow v_3 = v_{T2}$$

iii) $\vec{n} = \left[\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}} \right]$

$$[\Gamma]_{[1,1,1]} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} C_{11} + 2C_{44} & C_{12} + C_{44} & C_{12} + C_{44} \\ C_{12} + C_{44} & C_{11} + 2C_{44} & C_{12} + C_{44} \\ C_{12} + C_{44} & C_{12} + C_{44} & C_{11} + 2C_{44} \end{bmatrix}$$

$$v_1 = \sqrt{\frac{C_{11}+2C_{12}+4C_{44}}{3\rho}} = 3366 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} \quad \vec{p}_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \rightarrow v_1 = v_L$$

$$v_2 = v_3 = \sqrt{\frac{C_{11}-C_{12}+C_{44}}{3\rho}} = 1893 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} \quad \vec{p}_2 \in \text{plan} \perp \vec{n} \rightarrow v_2 = v_T$$

Problème 2 :

MECANIQUE DES MILIEUX DENSES (Contrôle terminal session 1, 2017-2018)

Dans un matériau subissant des déformations élastiques, l'équation fondamentale de la dynamique s'écrit :

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} \quad (1)$$

où u_i représente la projection sur l'axe Ox_i du champ des déplacements $\vec{u}(u_1, u_2, u_3)$.

On rappelle ci-dessous l'expression de l'équation de Christoffel (2), satisfaite par l'onde d'amplitude $({}^0u_1, {}^0u_2, {}^0u_3)$, se propageant dans la direction du vecteur unitaire

$\vec{n} = \frac{\vec{q}}{\|\vec{q}\|}$ de coordonnées n_i et où \vec{q} est le vecteur d'onde :

$$\boxed{\rho V^2 {}^0u_i = \Gamma_{il} {}^0u_l} \quad (2)$$

$$\text{Avec } \Gamma_{il} = C_{ijkl} n_j n_k \quad (3)$$

On rappelle que le tenseur Γ , dont les composantes Γ_{il} sont exprimées ci-dessus, peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\begin{bmatrix} \Gamma_1 \\ \Gamma_2 \\ \Gamma_3 \\ \Gamma_4 \\ \Gamma_5 \\ \Gamma_6 \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \Gamma_{11} \\ \Gamma_{22} \\ \Gamma_{33} \\ \Gamma_{23} \\ \Gamma_{13} \\ \Gamma_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{66} & C_{55} & 2C_{56} & 2C_{15} & 2C_{16} \\ C_{66} & C_{22} & C_{44} & 2C_{24} & 2C_{46} & 2C_{26} \\ C_{55} & C_{44} & C_{33} & 2C_{34} & 2C_{35} & 2C_{45} \\ C_{56} & C_{24} & C_{34} & C_{23}+C_{44} & C_{36}+C_{45} & C_{25}+C_{46} \\ C_{15} & C_{46} & C_{35} & C_{36}+C_{45} & C_{13}+C_{55} & C_{14}+C_{56} \\ C_{16} & C_{26} & C_{45} & C_{25}+C_{46} & C_{14}+C_{56} & C_{12}+C_{66} \end{bmatrix} \bullet \begin{bmatrix} n_1^2 \\ n_2^2 \\ n_3^2 \\ n_2 n_3 \\ n_1 n_3 \\ n_1 n_2 \end{bmatrix}$$

où la pseudo matrice 6x6 ci-dessus donne les valeurs de Γ_{ij} en fonction des constantes élastiques $C_{\alpha\beta}$ en notation contractée et des coordonnées n_i du

$$\text{vecteur } \vec{n} = \frac{\vec{q}}{\|\vec{q}\|}$$

Nous considérons un matériau qui cristallise dans le système tétragonal 4/mmm. Donner le tableau 6x6 des constantes élastiques qui le caractérisent.

Vous déterminerez les vitesses et polarisations des ondes acoustiques qui se propagent selon les directions suivantes, en prenant soin de montrer comment vous calculez la matrice de Christoffel 3x3 associée à chacune de ces directions de propagation :

a) parallèlement à l'axe Ox_1 (c'est-à-dire selon la direction cristallographique de vecteur unitaire $\vec{n} = [1,0,0]$)

b) parallèlement à l'axe Ox_3 (c'est-à-dire selon la direction cristallographique de vecteur unitaire $\vec{n} = [0,0,1]$)

c) parallèlement à la direction cristallographique de vecteur unitaire $\vec{n} = \frac{1}{\sqrt{2}} [1,1,0]$.

d) parallèlement à la direction cristallographique de vecteur unitaire $\vec{n} = \frac{1}{\sqrt{2}} [1,0,1]$.

remarque: pour caractériser totalement la polarisation de chaque onde il faudra :

i- déterminer les coordonnées des vecteurs unitaires parallèles aux déplacements atomiques (polarisation).

ii- en déduire si l'onde est longitudinale, quasi-longitudinale, transversale ou quasi-transversale.

3. Application numérique. Les caractéristiques du matériau sont les suivantes :

$$C_{11} = 62 \text{ GPa}$$

$$C_{12} = 7 \text{ GPa}$$

$$C_{13} = 15 \text{ GPa}$$

$$C_{33} = 90 \text{ GPa}$$

$$C_{44} = 40 \text{ GPa}$$

$$C_{66} = 30 \text{ GPa}$$

sa masse volumique : $\rho = 2,635 \text{ g.cm}^{-3}$

Etude des vibrations dans la matière :

Vibrations d'une chaîne linéaire à deux types d'atomes (traitement classique)

I. Vibrations longitudinales

On considère une file illimitée d'atomes équidistants de masses m_1 et m_2 ($m_1 > m_2$). La distance au repos entre deux atomes consécutifs est a . Entre deux atomes consécutifs de la chaîne s'exercent des forces de rappel de nature élastique figurées par des ressorts identiques de raideur k . On ne considère que les interactions entre atomes premiers voisins.

On désigne par u_{2n} , et u_{2n+1} les élongations respectives autour de leurs positions d'équilibre des atomes $2n$, de masse m_2 et $2n+1$ de masse m_1 .

6) Ecrire les équations du mouvement des atomes $(2n)$ et $(2n+1)$ lorsque la chaîne est soumise à un ébranlement longitudinal.

7) Chercher une solution sinusoïdale de ces équations sous la forme :

$$\begin{aligned}u_{2n} &= A_2 e^{j(\omega t - qx)} & \text{avec } x &= 2na \\u_{2n+1} &= A_1 e^{j(\omega t - qx)} & \text{avec } x &= (2n + 1)a\end{aligned}$$

lorsque \vec{q} est le vecteur d'onde dans la direction de propagation et x l'abscisse au repos de l'atome considéré.

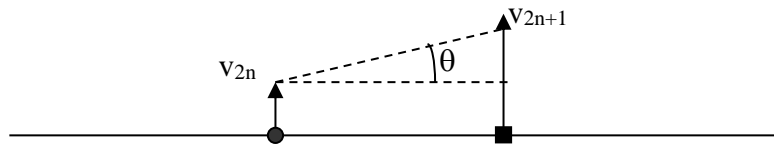
Montrer qu'il existe pour chaque valeur de q deux valeurs de la pulsation ω dont vous donnerez les expressions en fonction de q . Tracer les courbes de dispersion $\omega(q)$ correspondantes.

8) Montrer que sur la branche la plus basse (branche acoustique) ω est assimilable à une fonction linéaire de q pour les faibles valeurs du vecteur d'onde. En déduire la vitesse de propagation du son dans la chaîne.

9) Calculer le rapport des amplitudes A_1/A_2 pour les deux branches en centre et au bord de la 1^{ère} zone de Brillouin. Quelles conditions peut-on tirer pour le déplacement des atomes de chaque sous-réseau ? Envisager les cas limites suivants : $m_2 \rightarrow 0$; $m_1 \rightarrow \infty$; $m_1 \rightarrow m_2$.

II. Vibrations Transversales

Pour des déplacements transversaux, la force de rappel est proportionnelle à l'angle θ défini par : $F_{2n+1} = -C\theta$



On désigne par v_{2n} et v_{2n+1} les déplacements transversaux des atomes $(2n)$ et $(2n+1)$ autour de leurs positions d'équilibre, v_{2n} et $v_{2n+1} \ll a$

4. Ecrire les équations du mouvement de ces atomes. En déduire les courbes de dispersion des modes transverses.
5. Les atomes de la chaîne sont supposés avoir des charges $(+\zeta)$ pour l'atome de masse m_2 et $(-\zeta)$ pour l'atome de masses m_1 . Lorsqu'on soumet la chaîne à une onde électromagnétique définie par : $\vec{E} = \vec{E}_0 e^{j(\omega't - q'x)}$, $q' \ll \pi/a$, que deviennent les équations du mouvement ? Avec $\vec{E} //$ direction de v_{2n} .
6. On cherche des solutions de la forme :

$$\begin{aligned} v_{2n+1} &= B_1 e^{j(\omega t - qx)} \quad \text{avec } x = 2na \\ v_{2n} &= B_2 e^{j(\omega t - qx)} \end{aligned}$$

Quelles conditions doivent satisfaire ω , ω' , q et q' pour que les équations du mouvement soient solubles ? Ces conditions étant satisfaites, calculer B_1 et B_2 .