

Propagation d'ondes dans un milieu périodique et oscillateur paramétrique

par **Nicolas COMBE, Joseph MORILLO**

Centre d'Élaboration de Matériaux et d'Études Structurales,
CNRS UPR 8011 - 31055 Toulouse Cedex 4

combe@cemes.fr

morillo@cemes.fr

et **Jean-Roch HUNTZINGER**

Groupe d'Études des Semiconducteurs
UMR 5650 - Université Montpellier II

jean-roch.huntzinger@univ-montp2.fr

RÉSUMÉ

Nous montrons à partir de trois exemples comment une équation de propagation d'onde dans un milieu unidimensionnel périodique peut être mise sous la forme canonique d'une équation d'oscillateur paramétrique spatial. Les résonances de cet oscillateur correspondent alors aux bandes interdites de propagation bien connues dans les cristaux photoniques, les cristaux phononiques et aux bandes électroniques interdites dans les cristaux. Un calcul facile à mener permet de déterminer la position et la largeur de la première bande interdite.

L'étude de l'oscillateur paramétrique est bien connue des étudiants et des enseignants de niveau universitaire, les applications les plus communes étant la balançoire ou encore le botafumeiro à Saint-Jacques-de-Compostelle [1]. Les ouvrages d'enseignement s'appuient généralement sur les oscillations d'un pendule pesant dans un champ de gravité périodique [2-3] ; l'étude porte alors sur la variation temporelle de l'angle du pendule. Pourtant, la physique non linéaire et les résonances de l'oscillateur paramétrique se retrouvent dans bien d'autres domaines : particules élémentaires [4], mécanique des fluides [5], physique des plasmas [6]. Dans ces trois exemples (parmi les nombreux autres trouvés dans la littérature), seules des variations temporelles sont envisagées. Beaucoup moins de travaux montrent l'intérêt de considérer les équations des oscillateurs paramétriques dans le domaine spatial. Dans cet article, nous souhaitons faire passer les deux messages suivants :

- ♦ La propagation d'une onde (électromagnétique, sonore, fonction d'onde électronique) dans un milieu périodique peut être interprétée comme un oscillateur paramétrique spatial. Les bandes interdites correspondent alors aux résonances de cet oscillateur.
- ♦ Un calcul simple permet de déterminer la position et la largeur de la première bande interdite. Ce même calcul correspond pour les autres bandes à un développement en perturbation au premier ordre de l'excitation paramétrique.

Alors que le premier point apparaît parfois dans certains travaux, il reste à notre avis trop méconnu et notamment dans les ouvrages d'enseignement, le deuxième point est quant à lui encore moins discuté. Pourtant, ils permettent notamment d'expliquer la réflexion lumineuse des cristaux photoniques, la propagation des sons dans les cristaux phononiques ou encore les bandes interdites électroniques en physique du solide : autant d'exemples autorisant un parallèle entre la mécanique et différentes branches de la physique. Après avoir rappelé la définition et le comportement d'un oscillateur paramétrique temporel en s'appuyant sur le cas du pendule paramétrique, nous montrerons sur trois

exemples (cristaux photoniques, phononiques et électrons dans un cristal), comment l'équation de propagation dans un milieu périodique se réduit à l'équation génératrice d'un oscillateur paramétrique spatial. Nous résoudrons ensuite analytiquement cette dernière au voisinage de la première résonance. Dans un dernier temps, nous appliquerons notre analyse au cas d'un réseau phononique unidimensionnel pour lequel une résolution exacte est possible en utilisant la méthode de la matrice de transfert [7-8].

1. L'OSCILLATEUR PARAMÉTRIQUE TEMPOREL

Un oscillateur paramétrique (temporel) est un oscillateur dont un des paramètres descriptifs voit sa valeur varier périodiquement au cours du temps. Prenons le cas simple d'un pendule pesant excité par un mouvement périodique $z = f(t)$ de son point de suspension : la figure 1 schématise un tel dispositif.

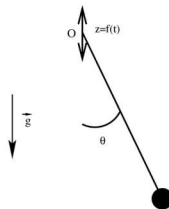


Figure 1 : Schéma du montage d'un oscillateur paramétrique temporel.

L'application du théorème du moment cinétique en O dans le référentiel (non galiléen) en translation d'origine O conduit à l'équation différentielle suivante pour l'angle θ du pendule :

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} + \frac{g}{l} \sin\theta + \frac{1}{l} \frac{d^2 f(t)}{dt^2} \sin\theta = 0 \quad (1)$$

où g est la pesanteur et l la longueur du pendule. La pulsation propre du pendule non excité est alors $\omega_0 = \sqrt{\frac{g}{l}}$. Supposons une excitation sinusoïdale $z = z_0 \cos(\omega_e t)$ et faisons l'approximation des petits angles $\sin\theta \approx \theta$ en vue d'une analyse de stabilité. $\nu_0 = \frac{\omega_0}{2\pi}$ désignera par la suite la fréquence propre et $\nu_e = \frac{\omega_e}{2\pi}$ la fréquence d'excitation. L'équation (1) se réduit alors facilement à une équation dite de Mathieu :

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} + \omega_0^2 [1 + a_1 \cos(\omega_e t)] \theta = 0 \quad (2)$$

où $a_1 = -\frac{z_0}{l} \frac{\omega_e^2}{\omega_0^2}$ est l'amplitude réduite de l'excitation. La résolution exacte de cette équation ne peut se faire analytiquement que sous la forme d'un développement en série de Fourier. On montre l'existence de solutions non périodiques pour certaines valeurs de $\frac{\nu_0}{\nu_e}$ et du facteur a_1 [9-10] : ces solutions correspondent à ce que nous appellerons par la suite les résonances de l'oscillateur paramétrique. La solution générale est alors le produit

d'une fonction périodique par une combinaison linéaire d'une exponentielle croissante et décroissante en fonction du temps. À moins d'un choix très précis des conditions initiales, l'amplitude de l'oscillateur va alors augmenter exponentiellement, d'où le terme de résonance. La figure 2 montre le diagramme de stabilité de l'équation (2) réduit aux quatre premières résonances en fonction des deux paramètres $\frac{\nu_0}{\nu_e}$ et a_1 . Les parties hachurées

représentent les domaines où la solution de l'équation (2) est non périodique (résonance). Ce diagramme a été réalisé en faisant appel à des outils mathématiques plus complexes que la simple résolution numérique de l'équation différentielle : il a été calculé numériquement en utilisant la résolvante de l'équation (2) et en s'appuyant sur les théorèmes de Floquet et de Liouville [9]. Les solutions non périodiques forment dans le plan $\left(\frac{\nu_0}{\nu_e}, a_1\right)$ des

bandes de résonance convergentes vers les points $\frac{\nu_0}{\nu_e} = \frac{n}{2}$ ($n \in \mathbb{N}$) lorsque a_1 tend vers 0,

soit des fréquences d'excitation $\nu_e = 2\nu_0, \nu_0, \frac{2}{3}\nu_0, \frac{1}{2}\nu_0$, etc. Le cas $n=1$, le plus connu, correspond à la première résonance paramétrique où la fréquence d'excitation ν_e est double de la fréquence propre ν_0 du système. On montre que dans le cas $a_1 \ll 1$, la largeur des résonances est une fonction décroissante de n , en accord avec l'observation de la figure 2 : la largeur de la n -ième bande est de l'ordre de a_1^n . Ainsi pour $a_1 \ll 1$, la résonance la plus large est obtenue pour $n=1$.

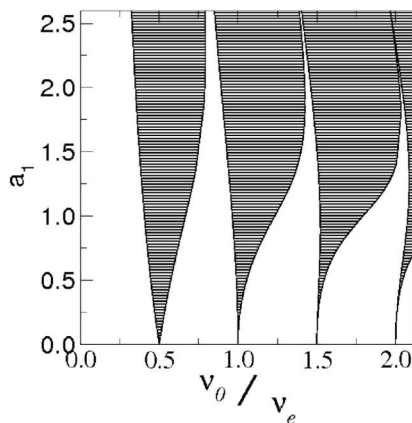


Figure 2 : Diagramme de stabilité de l'oscillateur paramétrique. Les zones hachurées représentent les domaines où les solutions de l'équation (2) sont non périodiques.

Nous venons de montrer qu'une variation périodique temporelle d'un paramètre de l'oscillateur autorisait des comportements non périodiques de ce dernier : les résonances. Nous allons maintenant examiner le cas analogue d'un oscillateur dans le domaine spatial et l'effet de la variation périodique dans l'espace d'un de ses paramètres.

2. ÉQUATION GÉNÉRATRICE DE L'OSCILLATEUR PARAMÉTRIQUE SPATIAL

Les oscillateurs dans le domaine spatial apparaissent facilement dès lors qu'on s'intéresse aux équations de propagation des ondes. À partir de trois exemples, nous allons montrer comment, la variation périodique spatiale d'un paramètre de l'équation permet de se ramener à l'équation génératrice d'un oscillateur paramétrique.

2.1. Cristaux photoniques

L'équation de propagation des ondes électromagnétiques dans un milieu non homogène de constante diélectrique $\varepsilon(\vec{r})$ s'écrit pour la partie champ électrique [11] :

$$\Delta \vec{E} - \overline{\text{grad}} \text{ div } \vec{E} - \frac{\varepsilon(\vec{r})}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = \vec{0} \quad (3)$$

où $\vec{E}$ est le vecteur champ électrique. Nous allons par la suite, nous limiter à la propagation d'une onde polarisée suivant $\vec{e}_x$, de pulsation ω , dans un milieu unidimensionnel infini d'axe z : $\vec{E}(z, t) = E(z)e^{-i\omega t}\vec{e}_x$. L'équation (3) devient alors :

$$\frac{d^2 E}{dz^2} + \frac{\varepsilon(z)\omega^2}{c^2} E = 0 \quad (4)$$

Dans le cas $\varepsilon(z)$ uniforme, cette équation s'écrit :

$$\frac{d^2 E}{dz^2} + k_0^2 E = 0 \quad (5)$$

avec la relation de dispersion entre le vecteur d'onde k_0 et la pulsation ω :

$k_0 = k_0(\omega) = \omega \frac{\sqrt{\varepsilon}}{c}$. Supposons maintenant que $\frac{\varepsilon(z)}{c^2}$ varie périodiquement dans l'espace :

c'est le cas des cristaux photoniques, dénommés miroirs de Bragg dans le cas unidimensionnel. Soit $\frac{\varepsilon(z)}{c^2} = b_0 + \sum_{m=1}^{\infty} b_m \cos\left(\frac{2\pi m z}{L}\right)$ son développement en série de Fourier¹ où L est sa période. L'équation (4) s'écrit alors :

$$\frac{d^2 E}{dz^2} + \omega^2 b_0 \left[1 + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{b_m}{b_0} \cos(G_m z) \right] E = 0 \quad (6)$$

$k_0(\omega) = \omega \sqrt{b_0}$ représente alors le vecteur d'onde propre du système c'est-à-dire le vecteur d'onde de la fonction $E(z)$ en l'absence d'excitation périodique ($b_m = 0$ pour $m \geq 1$) : $\frac{1}{\sqrt{b_0}}$

est la vitesse de phase moyenne d'une onde dans le cristal photonique. $G = \frac{2\pi}{L}$ est le

vecteur de base du réseau réciproque et $G_m = mG$. Posons $a_m = \frac{b_m}{b_0}$ l'amplitude réduite

de la m -ième harmonique de l'excitation. Nous obtenons alors l'équation génératrice d'un oscillateur paramétrique spatial.

¹ L'origine du repère spatial a été choisie pour ne conserver que les termes en cosinus.

$$\frac{d^2 E}{dz^2} + k_0^2(\omega) \left[1 + \sum_{m=1}^{\infty} a_m \cos(G_m z) \right] E = 0 \quad (7)$$

Cette équation est l'analogie spatial de l'équation (2) où $k_0 = \omega \sqrt{b_0}$ joue maintenant le rôle de ω_0 et G_m celui de ω_e . D'après les résultats du paragraphe 1, les solutions de cette équation peuvent être non périodiques² : créant ainsi des bandes de valeurs de ω pour lesquelles la propagation des ondes est interdite. Les cristaux photoniques ont effectivement la propriété d'être des miroirs parfaits dans certaines gammes de fréquence : ces gammes correspondent aux résonances de l'oscillateur paramétrique spatial décrit par l'équation (7).

2.2. Cristaux phononiques

Les cristaux phononiques sont aux ondes sonores ce que les cristaux photoniques sont aux ondes lumineuses. Ce sont donc des milieux matériels (solides ou fluides) dans lesquels la vitesse du son varie périodiquement dans l'espace. Le raisonnement tenu dans le paragraphe ci-dessus peut alors être repris. Considérons le cas simple de composites solides/solides [12] unidimensionnels : c'est le cas des super-réseaux [13]. Si $\vec{u}$ est le déplacement atomique et si les variations des coefficients élastiques sont négligeables (ce qui est le cas dans des super-réseaux standard GaAs/AlAs) les ondes sonores sont solutions de [14] :

$$\Delta \vec{u} - \frac{1}{v_s^2} \frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial t^2} = 0 \quad (8)$$

Où v_s est la vitesse du son dans le matériau. Ici aussi, si la vitesse du son est uniforme dans le matériau, la relation de dispersion s'écrit $k_0 = k_0(\omega) = \frac{1}{v_s} \omega$. Par contre, si $\frac{1}{v_s^2}$ est une fonction périodique de période L , elle est développable en série de Fourier $\frac{1}{v_s^2} = b_0 + \sum_{m=1}^{\infty} b_m \cos(G_m z)$. Considérant une onde de pulsation ω , $\vec{u}(z, t) = \vec{u}(z) e^{-i\omega t}$, $\vec{u}(z)$ vérifie :

$$\frac{d^2 \vec{u}}{dz^2} + k_0^2(\omega) \left[1 + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{b_m}{b_0} \cos(G_m z) \right] \vec{u} = 0 \quad (9),$$

équation identique à l'équation (7), mais où b_0 est la moyenne de l'inverse du carré des vitesses (toujours non nul).

2.3. Électron dans un cristal

Dans un cristal et dans le cadre de l'approximation de l'électron indépendant, les états propres de l'énergie des électrons sont donnés par l'équation de Schrödinger indépendante du temps [15] :

$$-\Delta \psi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = \mathcal{E} \psi(\vec{r}) \quad (10)$$

² Comme nous le verrons ci-dessous, la présence de nombreuses harmoniques n'altère pas la présence des bandes de résonance.

où $V(\vec{r})$ est le potentiel moyen (théorie de champ moyen), de même périodicité L que le réseau cristallin, vu par l'électron. Énergies et potentiels sont exprimés en unité de $\frac{2m}{\hbar^2}$.

Pour simplifier, nous nous limitons au cas unidimensionnel suivant z . Comme dans les cas précédents, ici aussi en l'absence d'excitation périodique (électron libre $V(\vec{r}) = 0$), les états propres sont des ondes planes de vecteur d'onde k_0 vérifiant la relation de dispersion $k_0(\mathcal{E}) = \sqrt{\mathcal{E}}$. Dans le cas où le potentiel moyen $V(z)$ est périodique, son développement en série de Fourier peut s'écrire³ : $V(z) = -\sum_{m=1}^{\infty} b_m \cos(G_m z)$.

$$\frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + \mathcal{E} \left[1 + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{b_m}{\mathcal{E}} \cos(G_m z) \right] \psi(z) = 0 \quad (11)$$

Nous retrouvons à nouveau l'équation génératrice (Équation (7)) de l'oscillateur paramétrique spatial pour la fonction d'onde $\psi(z)$ [21]⁴. Les solutions non périodiques de cet oscillateur, c'est-à-dire les résonances paramétriques, correspondent aux bandes d'énergies interdites ou *gaps* dans les cristaux.

2.4. Analogies et différences entre oscillateur paramétrique temporel et la propagation des ondes dans le milieu périodique

Nous avons montré comment l'équation d'une onde se propageant dans un milieu périodique se réduit à celle d'un oscillateur paramétrique spatial. La similarité des équations nous a conduits à utiliser les résultats de l'oscillateur paramétrique temporel pour expliquer l'existence de solutions non périodiques dans le cas spatial. Néanmoins, si les équations sont similaires, des différences importantes méritent d'être mentionnées et permettent de mieux appréhender la différence entre oscillateurs paramétriques temporels et spatiaux. Prenons les exemples du pendule et des électrons.

Dans le cas d'un pendule paramétrique, la fréquence propre ν_0 du système reste fixe et la fréquence d'excitation ν_e varie : la fréquence propre du système est déterminée par la gravité et la longueur du pendule et nous ajustons la fréquence ν_e de l'excitation pour obtenir une amplification. De ce fait, de l'énergie peut être transférée au système via l'excitation : pour le pendule, c'est le travail de la force agissant sur l'origine (soit moteur soit résistant) qui augmente ou diminue l'énergie de système. La résonance correspond à une croissance et/ou décroissance exponentielle de l'amplitude des oscillations (la décroissance s'observe si un mauvais accord de phase existe entre notre mouvement et celui du pendule) et donc à un travail en moyenne moteur/résistant de cette force. Dans le cas d'un mouvement périodique, le travail de cette force est en moyenne nul sur une période du mouvement (attention, la période du mouvement n'est pas la période propre du pendule).

Dans le cas des électrons dans un cristal, le vecteur d'onde d'excitation *i.e.* le vecteur de base du réseau réciproque G est fixé. La résolution de l'équation (10) correspond à la recherche des états stationnaires du système d'énergie propre $\mathcal{E}$ donnée. Les résonan-

³ La référence des énergies potentielles est telle que la moyenne de $V(z)$ est nulle et l'origine du repère a été choisie judicieusement pour n'avoir que des termes en cosinus.

⁴ Attention, dans le cas des électrons dans un cristal, l'amplitude réduite $a_m = \frac{b_m}{\mathcal{E}}$ dépend de l'énergie $\mathcal{E}$.

ces surviennent pour certaines valeurs de $\mathcal{E}$ pour lesquelles les solutions sont non périodiques. Au niveau énergétique, l'énergie de l'électron est fixée égale à $\mathcal{E}$ et ainsi, l'excitation, via le potentiel cristallin ne fournit ni n'absorbe d'énergie. Une résonance correspond soit à une décroissance exponentielle de l'amplitude de l'onde : une onde évanescente, soit à une croissance exponentielle. Le milieu périodique joue alors un rôle équivalent à une barrière de potentiel pour une particule quantique [16].

3. EFFET DES DIFFÉRENTES HARMONIQUES

Dans le paragraphe 1, nous avons analysé l'effet d'une perturbation sinusoïdale d'un paramètre de l'oscillateur. Dans le paragraphe 2, nous avons dans trois cas concrets, fait intervenir un développement en série de Fourier du paramètre. Nous allons analyser l'effet de la présence des différentes harmoniques sur l'oscillateur. Nous savons d'après le paragraphe 1, qu'un terme en $\cos(k_0 z)$ crée des résonances pour un vecteur d'onde propre

$\frac{n}{2}k_0$. L'équation (7) contient des termes en $\cos(G_m z)$, on s'attend donc à ce que chaque

harmonique $\cos(G_m z)$ crée des résonances pour $k_0(\omega \text{ ou } \mathcal{E}) = \frac{n}{2}G_m = \frac{nm}{2}G = \frac{l}{2}G$ ($l \in \mathbb{N}$).

La figure 3 montre schématiquement la position des bandes interdites dues à chaque harmonique. L'ouverture de ces bandes survient donc lorsque $k_0 = \frac{l}{2G}$ même en pré-

sence de plusieurs harmoniques. Elles résultent (sauf pour la première bande) de l'effet de plusieurs harmoniques, mais comme on va le voir, il est possible de prédire la position et la largeur de la première résonance en ne tenant compte que de la première harmonique. L'intérêt de cette analyse réside dans le fait que le calcul de la largeur de la résonance principale pour une harmonique est facile à mener sans faire appel à des calculs trop laborieux.

Pour les harmoniques suivantes, malheureusement, la réponse du système n'est pas linéaire : la solution de l'équation (7) contenant deux harmoniques n'est pas la somme des solutions pour chaque harmonique. Cependant, comme nous l'avons déjà vu, la largeur de la résonance l est surtout due à la première ($n=1$) résonance de l'harmonique $m=l$, proportionnelle à a_l . Les autres composantes m peuvent aussi contribuer si une de leurs résonances n correspond ($n=l/m$), mais leur largeur est proportionnelle à $a_m^n = a_m^{l/m}$. Par exemple, en reprenant la figure 3, la deuxième résonance pourra être approximée par la première résonance de la deuxième harmonique si $a_2 \gg a_1^2$.

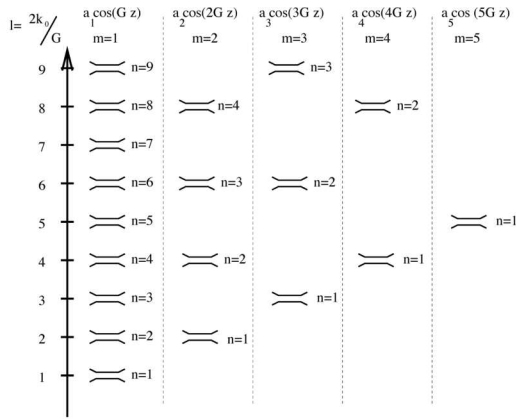


Figure 3 : Représentation schématique de l'ouverture des bandes interdites associées à chaque harmonique en fonction du paramètre $\frac{2k_0}{G}$.

3.1. Calcul analytique approché de la largeur de la première résonance

Nous envisageons ici la résolution approchée de l'équation (7) autour du vecteur d'onde $\frac{G}{2}$. Conformément à l'analyse ci-dessus, nous ne conservons que l'harmonique en $\cos(Gz)$:

$$\frac{d^2 u}{dz^2} + k_0^2 (1 + a_1 \cos(Gz)) u = 0 \quad (12),$$

où k_0 désigne $k_0(\omega)$ dans le cas des cristaux photoniques et phononiques et $k_0(\mathcal{E})$ pour les électrons dans les cristaux. On cherche des solutions de la forme de sinusoides de vecteur d'onde $\frac{G}{2}$ modulées par des fonctions lentement variables $A(z)$ et $B(z)$:

$$u(z) = A(z) \cos\left(\frac{G}{2} z\right) + B(z) \sin\left(\frac{G}{2} z\right) \quad (13)$$

En négligeant les dérivées secondes de A et B , et les harmoniques supérieures, l'identification des termes en $\cos\left(\frac{G}{2} z\right)$ et $\sin\left(\frac{G}{2} z\right)$ donne :

$$2 \frac{G}{2} \frac{dB}{dz} + \left[k_0^2 - \frac{G^2}{4} \right] A + \frac{k_0^2 a_1}{2} A = 0 \quad (14)$$

$$-2 \frac{G}{2} \frac{dA}{dz} + \left[k_0^2 - \frac{G^2}{4} \right] B - \frac{k_0^2 a_1}{2} B = 0 \quad (15)$$

d'où
$$\frac{d^2 A}{dz^2} + \delta k^2 A = 0 \quad (16)$$

avec
$$\left[\frac{\delta k}{G/2} \right]^2 = \frac{1}{4} \left([X^2 - 1]^2 - \left[X^2 \frac{a_1}{2} \right]^2 \right) \quad (17)$$

avec
$$X = \frac{k_0}{G/2}.$$

L'équation (16) est une équation différentielle du second ordre, à coefficients constants. La nature des solutions dépend du signe de δk^2 .

- ◆ Si $\delta k^2 < 0$, les solutions de l'équation (16) sont des fonctions hyperboliques et la solution générale u (Équation (13)) contient des termes non périodiques : il n'y a pas de propagation de l'onde dans le matériau. La bande de fréquence pour laquelle $\delta k^2 < 0$ détermine donc la bande interdite du système.

- ◆ Si $\delta k^2 > 0$: les solutions de l'équation (16) et donc la solution générale u (Équation (13)) sont propagatives. $A(z)$ et $B(z)$ variant sinusoidalement à la fréquence spatiale

δk , l'onde u est composée de deux fréquences spatiales : $\frac{G}{2} + \delta k$ et $\frac{G}{2} - \delta k$. k_0

étant relié à la pulsation ω des ondes (électromagnétiques ou sonores) ou à l'énergie $\mathcal{E}$ des électrons, l'équation (17) permet donc aussi de déterminer la relation entre la pulsation temporelle ω ou l'énergie des électrons $\mathcal{E}$ et le vecteur d'onde : c'est-à-dire la relation de dispersion $\omega = f(k)$ ou $\mathcal{E} = g(k)$ au voisinage de la bande interdite.

La bande interdite, correspondant à $\delta k^2 < 0$, se déduit facilement :

$$-\frac{a_1}{2} X^2 < (X^2 - 1) < \frac{a_1}{2} X^2 \quad (18)$$

$$\frac{G}{2\sqrt{1 + \frac{a_1}{2}}} < k_0 < \frac{G}{2\sqrt{1 - \frac{a_1}{2}}} \quad (19) \quad (20)$$

Dans le cas des cristaux photoniques ou phoniques $k_0(\omega) = \omega\sqrt{b_0}$:

$$\frac{G}{2\sqrt{b_0}\sqrt{1 + \frac{a_1}{2}}} < \omega < \frac{G}{2\sqrt{b_0}\sqrt{1 - \frac{a_1}{2}}} \quad (21) \quad (22)$$

Si $a_1 \ll 1$, un développement limité conduit à une largeur de la bande interdite $\Delta\omega = \frac{Ga_1}{2\sqrt{b_0}}$.

Elle est bien proportionnelle à a_1 , comme annoncé dans le paragraphe 1.

Dans le cas des électrons dans les cristaux, la résolution est légèrement modifiée de par la dépendance de a_1 en $\mathcal{E}$ (cf. Équation (11)), on obtient :

$$\left[\frac{\delta k}{G/2} \right]^2 = \frac{1}{4} \left([X - 1]^2 - \left[\frac{b_1/2}{G^2/4} \right]^2 \right) \quad (23)$$

avec
$$X = \frac{\mathcal{E}}{G^2/4}.$$

Ce qui conduit au gap :

$$\frac{G^2}{4} + \frac{b_1}{2} < \varepsilon < \frac{G^2}{4} - \frac{b_1}{2} \quad (24) \quad (25)$$

Cette dernière expression est identique à l'expression (9.27) de l'ouvrage de ASHCROFT et MERMIN [15]. En effet, en physique du solide, la résolution du modèle de l'électron libre dans un potentiel faiblement périodique est exactement l'analogie du calcul ci-dessus : au voisinage des réflexions de Bragg (correspondant aux différentes résonances évoquées ci-dessus) et en dehors de la bande interdite, les fonctions d'ondes électroniques sont des mélanges d'ondes planes (correspondant à nos ondes propagatives de vecteurs d'onde $\frac{G}{2} + \delta k$ et $\frac{G}{2} - \delta k$) et la largeur de la bande interdite, calculée par un développement en perturbation au premier ordre, varie linéairement avec l'amplitude de l'harmonique du potentiel.

Nous allons maintenant comparer nos prédictions théoriques basées sur un calcul analytique approché à celles obtenues par une résolution numérique tenant compte de toutes les harmoniques. Seront calculés les bandes interdites ainsi que le diagramme de dispersion autour des vecteurs d'onde $\frac{G}{2}$ et G obtenus dans le calcul analytique, respectivement à partir de la première harmonique $\cos(Gz)$ et de la deuxième $\cos(2Gz)$.

4. APPLICATION AU CAS DU CRISTAL PHONONIQUE

Nous nous proposons dans cette partie de calculer de deux manières différentes le diagramme de dispersion d'un cristal phononique. Ce cristal est constitué d'une superposition de couches d'Arséniure de Gallium ($d_{GaAs} = 5,9$ nm) et d'Arséniure d'Aluminium ($d_{AlAs} = 2,35$ nm) [17]. L'étude concerne ici la propagation des ondes longitudinales. Ces composés ont comme vitesses du son [7] :

$$v_{s, GaAs} = 4726 \text{ ms}^{-1} \quad (26)$$

$$v_{s, AlAs} = 5630 \text{ ms}^{-1} \quad (27)$$

La méthode de la matrice de transfert [7-8] permet de calculer de manière exacte le diagramme de dispersion d'un super-réseau de ce type : elle s'applique principalement dans le cas où le paramètre de l'oscillateur est une fonction constante par morceaux de l'espace. Cependant, la théorie induit des calculs assez lourds [8]. On comparera ces solutions exactes à celles des équations de l'oscillateur paramétrique. Sur la figure 4, nous avons représenté le diagramme de dispersion calculé de manière exacte par la méthode de la matrice de transfert (noir) et celui en utilisant l'équation de l'oscillateur paramétrique (rouge et bleu) aux voisinages des deux premières résonances. Nous nous sommes restreints à l'étude des deux premières résonances dues aux deux premières harmoniques $\cos(Gz)$ (rouge) (vers 0,3 THz) et $\cos(2Gz)$ (bleu) (vers 0,6 THz) et nous nous sommes placés dans la première zone de Brillouin du super-réseau. C'est-à-dire que pour chaque fréquence, on détermine les fréquences spatiales (vecteurs d'ondes) qui composent l'onde, et qu'on les reporte sur le graphe modulo G , entre $-\frac{G}{2}$ et $\frac{G}{2}$.

La figure 4 montre un excellent accord entre les deux modèles pour ce qui est de la prédiction du premier gap autour de 0,3 THz : celui-ci correspond à la première résonance due au terme en $\cos(Gz)$. Le diagramme de dispersion est quant à lui en très bon accord

proche du gap puis diverge légèrement : en effet, le calcul analytique a été limité au premier ordre négligeant les termes en $\cos\left(\frac{3G}{2}z\right)$ à la fois dans l'équation (13) et dans le développement des équations (14) et (15).

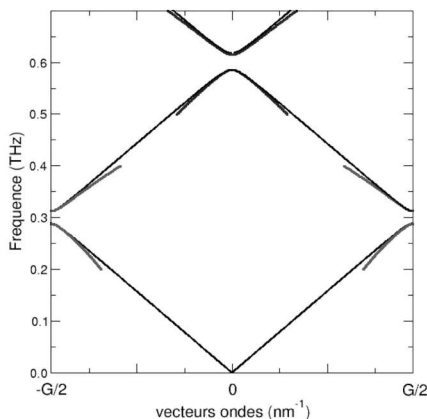


Figure 4 : Diagramme de dispersion dans la première zone de Brillouin d'un super-réseau GaAs/AlAs calculé à partir de la méthode de la matrice de transfert (pointillé noir) et à partir des équations de l'oscillateur paramétrique (rouge et bleu suivant le gap considéré).

En ce qui concerne la deuxième résonance autour de 0,6 THz, notre prédiction (ne tenant compte que de la première résonance due à l'harmonique en $\cos(2Gz)$) reste acceptable : l'erreur sur la largeur de la bande interdite est d'environ 9 %. En se reportant à la figure 3, les deux harmoniques, en $\cos(Gz)$ et en $\cos(2Gz)$ sont responsables de la résonance à 0,6 THz. La largeur $\frac{Ga_1^2}{4\sqrt{b_0}}$ (pour le calcul de celle-ci voir LANDAU et LIFCHITZ [2])

de la deuxième résonance due à l'harmonique $\cos(Gz)$ est de l'ordre de 12 % de $\frac{a_2G}{2\sqrt{b_0}}$,

largeur de la première résonance due à l'harmonique $\cos(2Gz)$. Ce rapport s'explique par la décroissance de la série des a_n : $a_2 < a_1$. Ces 12 % sont bien du même ordre de grandeur que les 9 % d'erreur mesurée : une résolution exacte traitant les deux résonances de manière cohérente est nécessaire pour aller plus loin.

Notre prédiction des résonances ne considérant qu'une harmonique peut même devenir mauvaise pour certaines ouvertures de gap suivant les résonances considérées : nous mesurons 40 % d'erreur pour la prédiction du troisième gap pour un rapport a_1^3/a_3 de l'ordre de 0,13. Cette remarque démontre que ne considérer que la première résonance de la m -ième harmonique pour le calcul de la m -ième ouverture de gap avec $m > 1$ peut facilement aboutir à un résultat erroné : cela dépend essentiellement de la vitesse de décroissance de la série des a_m . Par contre, le résultat pour $m = 1$ est lui toujours valable au premier ordre en a_1 .

CONCLUSION

Les équations de l'oscillateur paramétrique ne s'appliquent pas uniquement au cas temporel comme il est coutume de le présenter, mais sont beaucoup plus générales et permettent de comprendre les bandes interdites lors de la propagation d'onde dans les milieux périodiques. Cette analogie entre milieu périodique et oscillateur paramétrique est trop rarement soulignée.

Les équations de l'oscillateur paramétrique ne sont pas solubles simplement et les différentes approximations conduisent souvent à des calculs mathématiques complexes. Cependant, dans le cas d'une excitation sinusoïdale de faible amplitude, le calcul de l'ouverture du premier gap, le plus prononcé est relativement facile à mener. Nous avons montré comment il peut être utilisé pour calculer la position et la largeur de la première bande interdite (et parfois celles des bandes supérieures) dans le cas d'une excitation périodique quelconque *via* un développement en série de Fourier.

BIBLIOGRAPHIE ET NETOGRAPHIE

- [1] <http://www.sciences.univ-nantes.fr/physique/perso/gtulloue/Meca/Oscillateurs/botafumeiro.html>
- [2] LANDAU L. et LIFCHITZ E. *Mechanic*. 3^e édition, Moscou : Mir, 1969.
- [3] PEREZ J.-P. *Cours de physique : fondements et applications - Tome 3 : Mécanique : fondements et applications*. 6^e édition, Dunod, 2001.
- [4] ZLATEV I., HUEY G. et STEINHARDT P. J. *Phys. Rev. D.*, 1998, 57, p. 2152.
- [5] AHLERS G., HOHENBERG P. C. et LÜCKE M. *Phys. Rev. A.*, 1985, 32, p. 3493.
- [6] RYOPOULOS S. *Phys. Rev. Lett.*, 1992, 68, p. 3303.
- [7] HE J., DJAFARI-ROUHANI B. et SAPRIEL J. *Phys. Rev. B.*, 1988, 37, 4086.
- [8] MAURAS D. « Résonance paramétrique : théorie, étude par ordinateur ». *Bull. Un. Phys.*, octobre 1992, vol. 86, n° 747 (1), p. 1277-1302.
- [9] VITERBO C. in *Cours École Polytechnique*, France, 2007.
- [10] COHEN-TANNOUDJI C. in *Cours collège de France*, 1985-1986.
- [11] DESIERES Y., THESIS Ph. D. Institut national des sciences appliquées de Lyon, France, 2001.
- [12] VASSEUR J. *Image de la physique*, 2003-2004, p. 90-98.
- [13] SCHULLER I. K. *Phys. Rev. Lett.*, 1980, 44, p. 1597.
- [14] LANDAU L. et LIFCHITZ E. *Elasticity Theory*. 2^e édition, Moscou : Mir, 1967.
- [15] ASHCROFT N. et MERMIN N. D. *Solid State Physics*. Holt, Rinehart and Winston, 1976.
- [16] COHEN-TANNOUDJI C., DIU B. et LALOË F. *Mécanique quantique*. Tome 1, 1997.
- [17] TRIGO M., ECKHAUSE T. A., REASON M., GOLDMAN R. S. et MERLIN R. *Phys. Rev. Lett.*, 2006, 97, p. 124301.