



République algérienne démocratique et populaire
ministère de l'enseignement supérieur et de
La recherche scientifique
Université frères Mentouri Constantine
Faculté des sciences de la technologie
Département d'électronique



N° d'ordre :.....

Série :.....

Mémoire

Présenté pour obtenir le diplôme de magister en électronique

Option

Matériaux et systèmes Micro et Nanoélectroniques

Par

Mr. BOUARROUDJ Emir

Thème

Simulation COMSOL Multi physiques d'un Capteur de Gaz SAW

Soutenu le : 17/05/2015

Devant le jury :

Président	Mr. CHAABI Abdelhafid	<i>Prof.</i>	Université Constantine 1
Rapporteur	Mr. KERROUR Fouad	<i>Dr.</i>	Université Constantine 1
Examineur	Mr. TELIA Azzeddine	<i>Prof.</i>	Université Constantine 1
Examineur	Mr. HAOUAM Abdessalem	<i>Dr.</i>	Université Constantine 1

Remerciements

Mes remerciements, avant tout, à الله Tout-puissant de m'avoir donné le courage, la volonté et la patience durant toutes ces longues années d'études afin que je puisse arriver à ce stade.

*Je remercie sincèrement monsieur **KERROUR FOUAD** Maître de conférences au département d'électronique, Université de Constantine 1, qui a suivi avec excellence mes travaux. Pour ses fructueuses remarques, ses encouragements et sa passion pour la recherche. Qu'il trouve ici le témoignage de ma profonde gratitude.*

*Je remercie monsieur **CHAABI ABDELHAFID**, Professeur à l'université de Constantine 1 pour l'honneur qu'il me fait en acceptant de présider ce jury.*

*Je remercie sincèrement monsieur **TELIA AZEDDINE**, Professeur à l'université de Constantine 1, monsieur **HAOUAM ABDESSALEM**, Maître de conférences à l'université de Constantine 1 pour avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse.*

Je voudrais remercier très chaleureusement ma femme qui sans elle je ne serais pas arrivé à réaliser cette thèse.

J'adresse enfin ma reconnaissance, à tous ceux qui ont de près ou de loin, contribué à l'élaboration de cette thèse.

Dédicaces

Ma mère, qui a œuvré pour ma réussite, de par son amour, son soutien, tous les sacrifices consentis et ses précieux conseils, pour toute son assistance et sa présence dans ma vie

Mon père, qui peut être fier et trouver ici le résultat de longues années de sacrifices et de privations pour m'aider à avancer dans la vie

A ma très chère femme pour le courage que me donné

A mes très chers frères Réda, Walid, Mohamed lamine, abdarahmen.

Ma très chère sœur Fatima al Zahra

A toute les familles BOUARROUDJ et ERREDIR

Mes collègues et mes amis.

Bouarroudj Emir

SOMMAIRE

Sommaire.....	1
Liste des figures	4
Liste des tableaux	7
Introduction générale	8

CHAPITRE I :

LES CAPTEURS CHIMIQUES DE GAZ

I.1 INTRODUCTION	12
I.2 DESCRIPTION D'UN CAPTEUR CHIMIQUES DE GAZ	12
I.2.1 Elément sensible.....	13
I.2.2 Transducteur.....	13
I.3 CARACTERISTIQUE PRINCIPALE DES CAPTEURS DE GAZ	14
I.3.1 Mesurende	14
I.3.2 Sensibilité	14
I.3.3 Sélectivité	14
I.3.4 Stabilité	15
I.3.5 Réversibilité	15
I.3.6 Reproductibilité.....	15
I.3.7 Temps de réponse	15
I.4 MECANISMES D'INCORPORATION	16
I.4.1 Adsorption	16
I.4.2 Absorption.....	17
I.4.3 Désorption	17
I.5 CLASSIFICATION DES CAPTEURS DE GAZ	17
I.6 TRANSDUCTEUR PIEZOELECTRIQUES.....	18

I.6.1	Définition de piézoélectrique	18
I.6.2	Symétrie et piézoélectricité.....	18
I.6.3	Matériaux piézoélectriques	20
I.6.4	Equations piézoélectriques	20
I.6.5	Domaines d'application.....	23
I.7	EQUATIONS DE PROPAGATION DANS LES SOLIDES	23
I.7.1	Description des solides.....	23
I.7.2	Equations de propagation dans un milieu piézoélectrique.....	25
I.8	CONCLUSION	28

CHAPITRE II :

LES CAPTEURS À ONDES ACOUSTIQUES DE SURFACES

II.1	INTRODUCTION	30
II.2	PROPAGATION DES ONDES ACOUSTIQUES	30
II.2.1	Ondes acoustiques	30
II.2.2	Principe de génération d'ondes acoustiques	32
II.3	ONDES ACOUSTIQUES DE SURFACE SAW	34
II.3.1	Ondes de Rayleigh	34
II.3.2	Ondes de Bleustein-Gulyaev.....	35
II.3.3	Ondes STW (Surface Transverse Wave)	36
II.4	CAPTEURS À ONDES ACOUSTIQUES DE SURFACE SAW	36
II.4.1	Principe de fonctionnement des IDT.....	36
II.4.2	Principe de détection	38
II.4.3	Sensibilité du dispositif à ondes acoustiques	39
II.5	CONCLUSION	40

CHAPITRE III :

SIMULATION D'UN CAPTEUR CHIMIQUE DE GAZ

III.1 INTRODUCTION	42
III.1.1 Description du modèle.....	42
III.1.2 Propriété de matériau.....	44
III.1.3 Etude paramétrique (orientation des matériaux utilisés).....	45
III.2 SIMULATION COMSOL MULTI PHYSIQUES D'UN CAPTEUR SAW	47
III.2.1 Choix de la dimension.....	47
III.2.2 Choix du modèle	48
III.2.3 Saisie des données	48
III.2.4 Dessin de la géométrie	49
III.2.5 Propriétés physique des domaines.....	50
III.2.6 Maillage.....	52
III.2.7 Résolution & Post-traitement	53
III.3 RESULTATS ET DISCUSSION	54
III.4 CONCLUSION	59
Conclusion générale	61
Bibliographie	64
<i>Résumé</i>	

LISTE DES FIGURES

Fig. I.1 : Description d'un capteur chimique de gaz.....	12
Fig. I.2 : Principe de fonctionnement des capteurs chimiques	13
Fig. I.3 : Temps de réponse d'un capteur chimique	16
Fig. I.4 : Les différents mécanismes d'incorporation d'un gaz dans un solide	16
Fig. I.5 : Illustration des effets piézoélectriques	19
Fig. I.6 : Représentation schématique de l'apparition de la piézoélectricité	19
Fig. II.1 : Propagation d'ondes planes dans un solide	31
Fig. II.2 :Polarisation des ondes susceptibles de se propager suivant \vec{n}	31
Fig II.3 . Gauche : déplacement des particules au passage d'une onde de Rayleigh. Droite : déplacement des particules lors de la propagation d'une onde de Bleustein-Gulyaev	33
Fig II.4 . Gauche : déplacement des particules au passage d'une onde de Lamb (haut : mode symétrique, bas : mode antisymétrique). Droite : déplacement des particules au passage d'une onde SH-APM	33
Fig II.5 . Gauche : amplitude des composantes longitudinales et transverses verticales dans le cas de la propagation d'une onde de Stoneley. Droite : déplacement dans le cas de la propagation d'une onde de Love.....	33
Fig. II.6 . Onde de Rayleigh a) ondulation en surface (plan sagittal), b) polarisation de l'onde.....	35

Liste des figures

Fig II.7. Onde SSBW (Surface Skimming Bulk Wave).....	36
Fig II.8 Electrode interdigité déposée à la surface d'un substrat piézoélectrique.....	37
Fig II.9. Principe et caractéristiques d'un dispositif à ondes acoustiques.....	37
Fig. II.10. Principe de détection par capteur à ondes acoustiques.....	38
Fig. III.1: Principe de fonctionnement du capteur (effet de masse)	42
Fig. III.2. Géométrie de la structure 3D/ 2D	43
Fig. III .3. Choix de la dimension.....	47
Fig. III .4 : Fenêtre du Navigateur de modèles : choix du modèle	47
<i>Fig. III.5.</i> Saisie des paramètres - Constantes – expressions.....	48
Fig.III.6. Dessin de la géométrie	48
Fig. III.7. Matériau élastique linéaire	49
Fig. III.8. Mise en masse de la structure	50
Fig. III.9. Condition aux limites.....	50
Fig. III10. Maillage de la structure.....	51
Fig. III.11. <i>Variation de la déformation en fonction de fréquence de résonance (838.70 MHz).substrat -LiNbO₃ YZ-.....</i>	52
Fig. III.12. <i>Variation de la déformation en fonction de fréquence de résonance (840.50 MHz). Substrat-LiNbO₃ YZ-.....</i>	52
Fig. III.13.a. <i>Variation de déplacement total en fonction de la fréquence-LiTaO₃ 36 YX-.....</i>	53
Fig. III.13.b. <i>Variation du Potentiel électrique en fonction de la fréquence-LiTaO₃ 36 YX-.....</i>	54

Liste des figures

Fig. III.14.a. <i>Variation de déplacement total en fonction de la fréquence-LiNbO₃ 128° YX-</i>	54
Fig. III.14.b. <i>Variation du potentiel électrique en fonction de la fréquence-LiNbO₃ 128° YX-</i>	55
Fig. III.15.a. <i>Variation du déplacement total en fonction de la fréquence-Quartz ST-</i>	55
Fig. III.15.b. <i>Variation du Potentiel électrique en fonction de la fréquence-Quartz ST-</i>	56
Fig. III.16.a. <i>Variation de déplacement total en fonction de la fréquence - LiNbO₃ YZ 5°-</i>	56
Fig. III.16.b. <i>Variation du Potentiel électrique en fonction de la fréquence - LiNbO₃ YZ 5°-.....</i>	57

LISTE DES TABLEAUX

Tableau I .1. Principales familles de capteurs chimiques de gaz	18
Tableau I .2. Equations piézoélectriques	21
Tableau I.3. Grandeurs électriques, mécaniques et piézoélectriques	22
Tableau I.4. Domaines d'application en fonction de leurs fréquences	23
Tableau III.1. Valeurs moyennes des paramètres géométriques des capteurs étudiés.....	40
Tableau III.2. Diverses constantes des matériaux	44
Tableau III.3. Diverses valeurs des paramètres utilisés	46
Tableau. III.4. paramètre des matériaux.....	49
Tableau III .5 . Le décalage de fréquence par rapport à chargement de masse pour différents substrat.....	58
Tableau III .6 . La sensibilité à l'effet de masse pour différent substrat.....	59



Introduction
Générale

INTRODUCTION GÉNÉRALE

La demande de la détection d'espèces chimiques et de la mesure de leur concentration a considérablement augmenté. Cet intérêt est essentiellement dû aux considérations environnementales, de sécurité, de contrôle de procédé ou de diagnostic médical rapide [1]. Ce type de détection, est accompli par les capteurs chimiques de gaz.

Ces capteurs chimiques ou biochimiques, quant à eux, sont généralement des systèmes simples, constitués d'une couche sensible permettant la reconnaissance de l'espèce avec laquelle elle interagit et d'un système transducteur transformant l'interaction chimique en un signal électrique. [2,3]

L'intérêt croissant pour ces capteurs aussi bien dans le domaine de la recherche qu'en industrie provient de plusieurs raisons. Nous pouvons citer entre autres, des coûts de fabrication avantageux favorisés par le développement des technologies de la microélectronique ; ce qui permet de réduire la taille des composants et intégrant les capteurs, son alimentation, l'électronique de traitement et bien d'autres éléments ; on parle alors de nez électroniques intégrés[4, 5].

En conséquence, parmi les capteurs développés à ce jour, on a les capteurs SAW (Surface Acoustic Wave). Ces dispositifs de taille micrométrique associent au sein d'un même substrat, par des technologies de micro fabrication, des éléments mécaniques et électriques.

Le capteur SAW est constitué d'un transducteur interdigité (IDT) gravé sur un substrat piézoélectrique et recouvert d'une couche sensible Poly-Iso-Butylène (PIB). Cette couche sensible est choisie pour ses affinités particulières avec les espèces à détecter CH_2Cl_2 (dichlorométhane, DCM). L'absorption de ces molécules dans la couche sensible crée alors une onde acoustique (amplitude, fréquence).

Les matériaux piézoélectriques les plus utilisés comme substrat sont le quartz, le niobate de lithium et le tantalate de lithium, du fait de leur disponibilité en quantité et en qualité. Le type d'onde généré à la surface de ces substrats par ces dispositifs est connu depuis 1885 par les géophysiciens. En effet, à cette époque, Lord Rayleigh, au cours de ses

travaux sur les ondes sismiques, démontre l'existence d'une onde se propageant à la surface d'un solide isotrope, cette onde portera son nom [6].

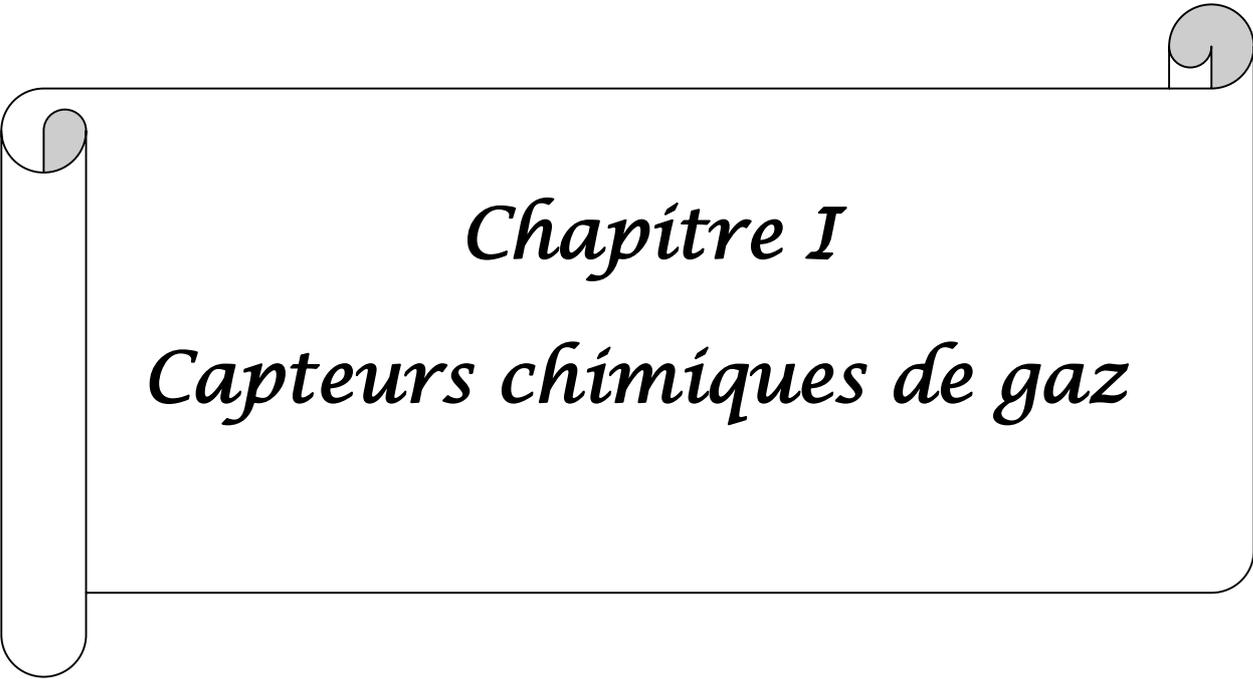
L'objectif de ce travail, est la simulation d'un capteur SAW sous environnement COMSOL multi physiques, et l'étude de l'influence des paramètres du substrat sur la sensibilité à l'effet de masse du capteur.

Ce manuscrit est constitué de trois chapitres et il est organisé comme suit :

Dans le premier chapitre, on effectue une étude des capteurs chimiques de gaz, ou on précise leur principe de fonctionnement. Ensuite, nous rappelons l'effet piézoélectrique et les différents modes de propagation d'une onde élastique dans un milieu piézoélectrique.

Le second chapitre, sera consacré à l'étude de capteur à onde acoustique de surface SAW et de son principe de fonctionnement. Nous avons aussi donné un petit aperçu sur le principe de génération de cette onde, et des divers modes existants. Enfin nous avons établi le modèle régissant la sensibilité à effet de masse du capteur.

Dans le troisième chapitre nous présentons, en premier temps, l'outil de simulation COMSOL multi physiques, qui est un logiciel de simulation par la méthode des éléments finis. En second temps, nous développons le modèle d'un capteur de gaz à ondes de surface SAW établi sous environnement COMSOL, pour déterminer la réponse du capteur et sa sensibilité l'effet de masse. Afin de déterminer les effets des paramètres d'influence sur la réponse du capteur et de sa sensibilité, nous avons effectué une étude paramétrique en fonction de différents substrats piézoélectriques tels que les (LiNbO_3 , quartz, LiTaO_3) et l'orientation de la coupe cristallographique sur la sensibilité du capteur à l'effet de masse. Et enfin, nous terminons par une conclusion.



Chapitre I
Capteurs chimiques de gaz

I.1 INTRODUCTION

Dans le domaine de la détection de gaz, les capteurs chimiques sont les plus répandus par rapport aux autres capteurs (Electrochimique, Optique ou Opto-chimique, Electro mécanique, Thermique). Cette particularité est due à leur faible encombrement ; leur faible consommation énergétique, leur faible coût, et leur temps de réponse relativement court.

Afin de faciliter la compréhension de leur principe de fonctionnement, nous entamons notre étude par une description succincte des capteurs chimiques de gaz.

I.2 DESCRIPTION D'UN CAPTEUR CHIMIQUE DE GAZ

Un capteur chimique Fig. I.1 est constitué essentiellement de deux parties de base reliées en série : une couche sensible, souvent appelée couche chimio-sensible, chargé de reconnaître sélectivement l'espèce chimique et une couche physique qui constitue le transducteur (substrat) [7].

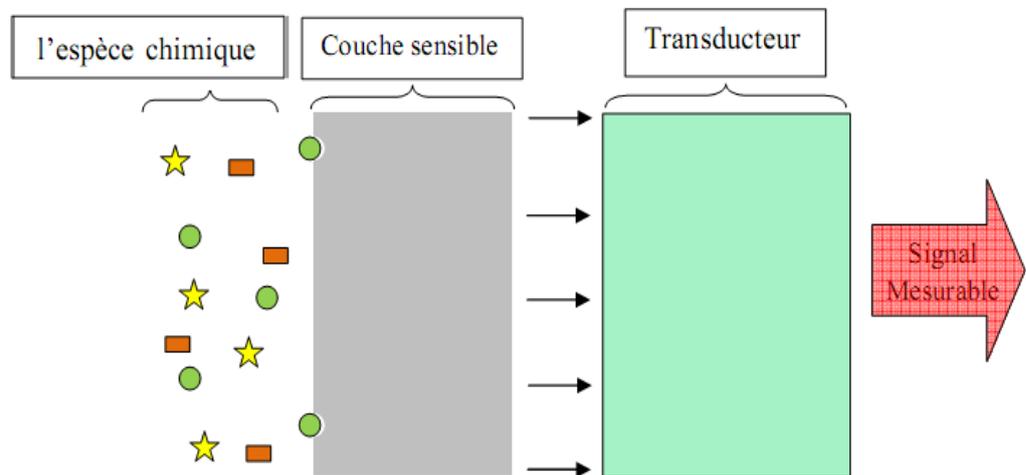


Fig. I.1 : Description d'un capteur chimique de gaz

Le principe de base d'un capteur chimique Fig. I.2 est basé sur la détection d'espèce chimique avec une couche sensible et de la transformer via transducteur en un signal électrique (grandeur mesurable).

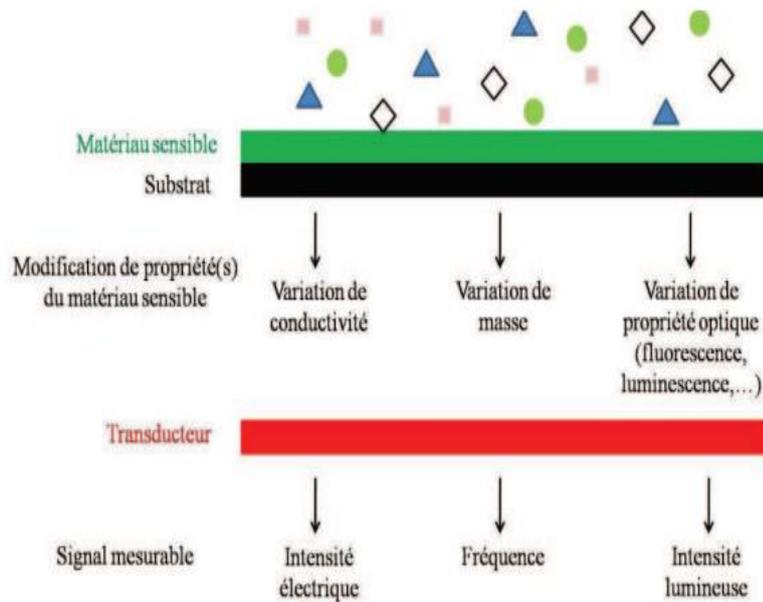


Fig. I.2 : Principe de fonctionnement des capteurs chimiques de gaz.

I.2.1 Élément sensible

Le principe de fonctionnement des capteurs chimiques est basé sur le choix de la couche sensible ou (l'élément sensible) dont dépend le signal émis qui est dû à l'interaction physique et/ou chimique entre un matériau sensible et l'espèce chimique. Ces matériaux sont choisis pour entrer en réaction spécifique avec une espèce chimique, ainsi, on assure une bonne sélection. La couche sensible est un matériau pour la détection d'espèces chimiques, qui peut-être de différentes natures (polymères ou oxyde métallique). La détection du gaz entraîne une modification des propriétés physiques et/ou électriques du matériau (variation de conductivité, masse, permittivité, indice optique...) [8].

I.2.2 Transducteur

Tous les capteurs chimiques contiennent un transducteur qui transforme la réponse de la réaction chimique ou biologique entre le gaz à détecter et l'élément sensible en un signal électrique mesurable [3]. Le choix du transducteur dépend également de l'application du capteur, le type de réaction, et de la substance libérée ou consommée. Le transducteur assure la transformation du signal émis par la couche sensible en contact de la substance cible.

I.3 CARACTERISTIQUES PRINCIPALES D'UN CAPTEUR DE GAZ

Le capteur de gaz est l'élément essentiel d'une chaîne de mesure dont le mesurande est la concentration de gaz. Comme pour tout instrument de métrologie, certaines grandeurs permettent d'évaluer la qualité d'un capteur, dans ce qui suit, nous allons citer les plus répandus : [1,3]

I.3.1 Mesurande

En métrologie, le terme mesurande désigne le paramètre dont la quantification est recherchée. Le mesurande d'un capteur chimique sera donc la concentration de l'espèce chimique recherchée dans le liquide ou le gaz, exprimée en pour-cent, pour mille, parties par million (ppm), parties par milliard (ppb avec b pour le terme anglais billion). Il pourra s'agir de concentration volumique, ou molaire selon les cas. Pour le gaz, le terme pression partielle est aussi utilisé. Il correspond au produit de la fraction molaire par la pression totale.

I.3.2 Sensibilité

La sensibilité est un paramètre qui exprime la variation de la réponse du capteur en fonction de la variation du mesurande (concentration de gaz). Un capteur de gaz est dit sensible si une petite variation de concentration entraîne une importante variation du signal de sortie. La définition générale de la sensibilité est donc :

$$S_i = \frac{\Delta R}{\Delta [C]_i} \quad (I. 1)$$

Avec

- S_i : la sensibilité au gaz i
- R : la réponse du capteur (la sortie du capteur)
- $[C]_i$: la concentration du gaz i

I.3.3 Sélectivité

La sélectivité est l'aptitude d'un capteur à répondre à seulement une espèce en présence de beaucoup d'autres. Le manque de sélectivité constitue la grande limitation actuelle des micros capteurs chimiques : en effet, la majorité des capteurs ne permettent qu'une sélectivité

partielle. Le capteur pourra détecter un gaz de façon préférentielle par rapport à un autre (ou une famille d'autres gaz) mais ce dernier présentera toujours une réponse plus ou moins importante.

I.3.4 Stabilité

La notion de stabilité est associée aux problèmes de dérives temporelles. Ces dérives sont détectées par une instabilité de la ligne de base et par la variation de la sensibilité du matériau. Ces dérives peuvent avoir plusieurs origines telles que les variations de condition ambiante, les changements d'état de la surface du capteur ou l'instabilité de cette surface, ou encore externes à la couche sensible telle que l'activation des potentiels appliqués et variation de la température de fonctionnement due aux variations de chauffage. On définit deux types de dérives : les dérives à court terme (fidélité) et les dérives à moyen / long terme. Ces derniers indiquent un vieillissement de la couche sensible.

I.3.5. Réversibilité

Elle définit la capacité du capteur à revenir à son état initial lorsqu'on supprime l'excitation gazeuse

I.3.6. Reproductibilité

La reproductibilité d'un capteur de gaz traduit sa capacité à produire la même réponse pour une même atmosphère gazeuse. Le système est reproductible s'il répond à un gaz de la même façon quels que soient le nombre de mesures et le temps entre les mesures. La reproductibilité comprend le temps de réponse et la sensibilité.

I.3.7 Temps de réponse

Il s'agit de quantifier le temps que met le capteur à réagir à un évènement (temps de réponse) et le temps mis pour revenir dans la configuration initiale une fois l'évènement disparu (temps de recouvrement). Au début de l'évènement (injection de gaz, changement de concentration, changement de température, ...), tout le système est perturbé. Le temps de réponse correspond au temps de stabilisation du capteur plus celui du système de mesures. Dans le cas d'un changement de température de la couche sensible, le système est rapidement stable (quelques dizaines de millisecondes), le temps de réponse sera le temps de stabilisation du capteur. Dans le cas d'un

changement de gaz, le temps de stabilisation du système sera en fonction du volume de mesure, du débit et de la configuration de l'enceinte (position des capteurs, diffuseur, ...). Le temps de réponse est pris entre 10% et 90% de la valeur stabilisée (Fig I.3). La réponse suit généralement une loi plus ou moins exponentielle avec le temps. Le temps de recouvrement est temps nécessaire pour atteindre 90% de désorption.

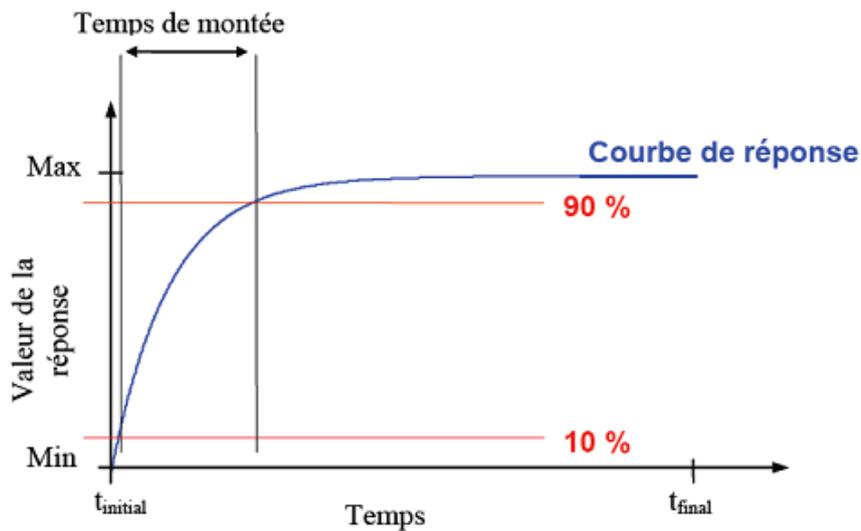


Fig. I.3 : Temps de réponse d'un capteur chimique

I.4 MECANISMES D'INCORPORATION D'UN GAZ DANS UN SOLIDE

Pour exprimer les principaux mécanismes d'incorporation d'un gaz dans un solide, nous allons définir les processus d'adsorption, d'absorption et de désorption. La Fig. I.4 représente les différents mécanismes d'incorporation d'un gaz ou d'une vapeur dans un solide.

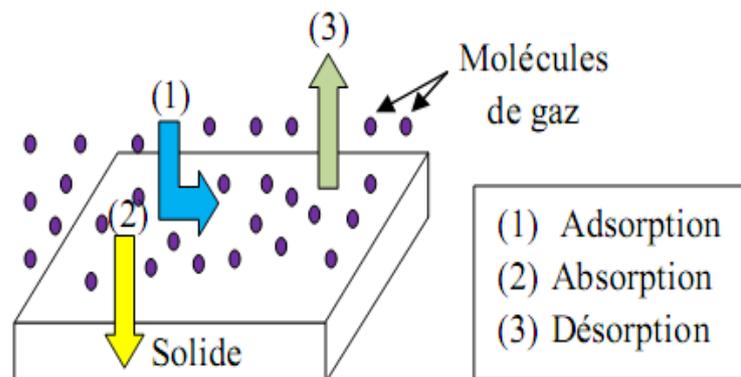


Fig. I.4. Les différents mécanismes d'incorporation d'un gaz dans un solide.

I.4.1 Désorption

Les molécules du gaz quittent la surface ou la couche dans laquelle elles avaient diffusées. Pour une molécule adsorbée, une faible énergie suffit à sa désorption. On dit que l'adsorption est parfaitement réversible, car la molécule peut très facilement briser sa liaison avec la surface. Dans le cas des vapeurs, un phénomène supplémentaire peut intervenir : la condensation.

I.4.2 Adsorption

Les molécules provenant d'une phase gazeuse ou d'une solution forment une couche condensée sur une surface liquide ou solide. Dans le cas particulier des interactions gaz-surface, lorsqu'un gaz entre en équilibre avec une surface solide ou liquide, la concentration des molécules du gaz est plus importante à la proximité de la surface que dans le reste du volume occupé par le gaz, indépendamment de la nature de la surface ou du gaz. Les molécules de gaz se fixent sur la surface, elles sont alors adsorbées [2].

I.4.3 Absorption

Les molécules du gaz pénètrent à l'intérieur de la structure absorbante par un phénomène de diffusion. Les molécules sont alors absorbées.

Les procédés d'absorption et d'adsorption sont fondamentalement différents :

- ✓ dans le cas d'un procédé d'absorption, lorsque la masse de l'absorbant est doublée, deux fois plus de gaz peut être absorbé ;
- ✓ par contre, dans le cas de l'adsorption, la quantité de gaz absorbé dépend de l'aire totale du solide considéré et non de son volume ni de sa masse.

Si l'on morcelle le solide, cela n'a pas d'influence sur la quantité de gaz absorbé, mais cela modifié énormément la quantité de gaz adsorbé.

I.5 CLASSIFICATION DES CAPTEURS DE GAZ.

Il existe une grande variété de capteurs de gaz généralement classifiés en familles liées au mode de transduction (optique, résistif, acoustique,...). Le tableau I-1 donne un résumé non-exhaustif des grandes familles de capteurs chimiques de gaz existants [3].

Tableau I.1 : Principales familles de capteurs chimiques de gaz [4, 1].

PRINCIPALES FAMILLES	PRINCIPES OU TECHNIQUES D'ANALYSE	EFFET DE LA RECONNAISSANCE
<i>Capteurs de gaz électrochimiques</i>	<ul style="list-style-type: none"> Potentiométrique (capteur d'hydrogène) 	Modification de la concentration
<i>Capteurs de gaz piézoélectriques</i>	<ul style="list-style-type: none"> résonance (capteur à ondes de surface SAW) gravimétrique (microbalance à quartz) 	Modification de masse
<i>Capteurs de gaz MOX</i>	<ul style="list-style-type: none"> résistif 	Modification de la conductivité
<i>Capteurs de gaz optiques.</i>	<ul style="list-style-type: none"> Interféromètre 	Modification optique
<i>Capteurs de gaz à effet de champ</i>	<ul style="list-style-type: none"> variation de la tension de seuil (gaz FET) 	Modification de potentiel

I.6 TRANSDUCTEUR PIEZOELECTRIQUES

I.6.1 Définition de piézoélectrique

L'observation qualitative du phénomène piézoélectrique a été faite par un minéralogiste français l'abbé R. HAÛY (1817). Cependant la découverte de la piézoélectricité est attribuée à Pierre et Marie CURIE (1880).

Piézo est un préfixe grec qui signifie serrer ou presser. Certains cristaux ont la propriété de se polariser sous l'influence d'une contrainte mécanique : c'est l'effet piézoélectrique direct schématisé sur la Fig I.5 [9].

L'effet piézoélectrique est réversible : ces mêmes cristaux se déforment lorsqu'ils sont soumis à un champ électrique. Ce phénomène s'observe uniquement dans des matériaux non-conducteurs. Le déplacement des charges se fait dans une direction privilégiée sous les efforts de traction ou de compression dans la structure cristalline de la céramique [10].

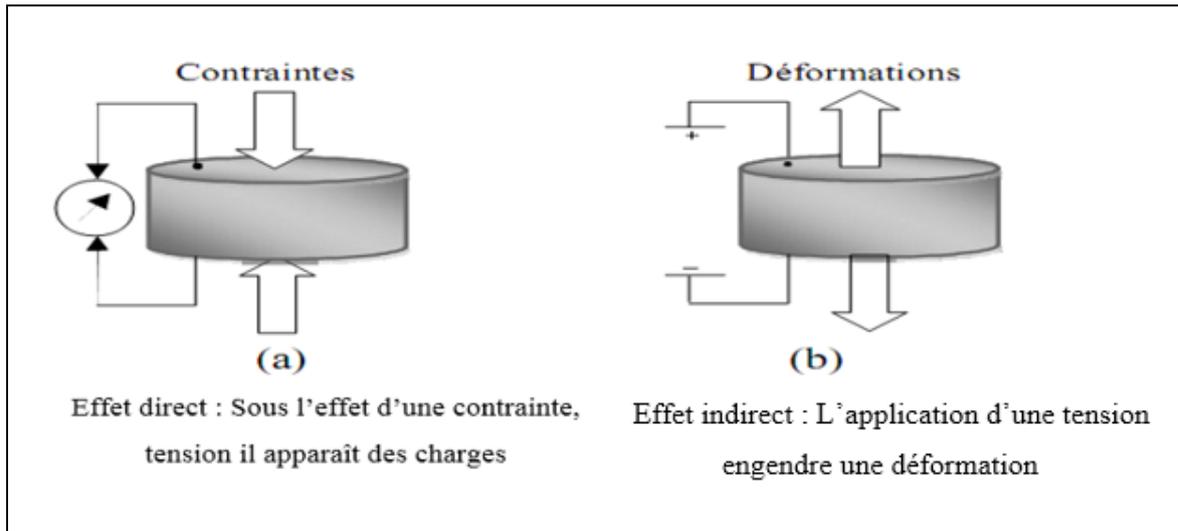


Fig. I .5. L'effet piézoélectrique pour un matériau piézoélectrique

I.6.2 Symétrie et piézoélectricité

À l'échelle cristalline, la piézoélectricité se manifeste par une polarisation de la maille. À l'échelle de la maille, elle résulte de la création de dipôles internes par séparation du centre de gravité des charges positives et de celui des charges négatives suite aux déformations sous l'action de contraintes. Les propriétés de symétrie des cristaux ont une importance fondamentale

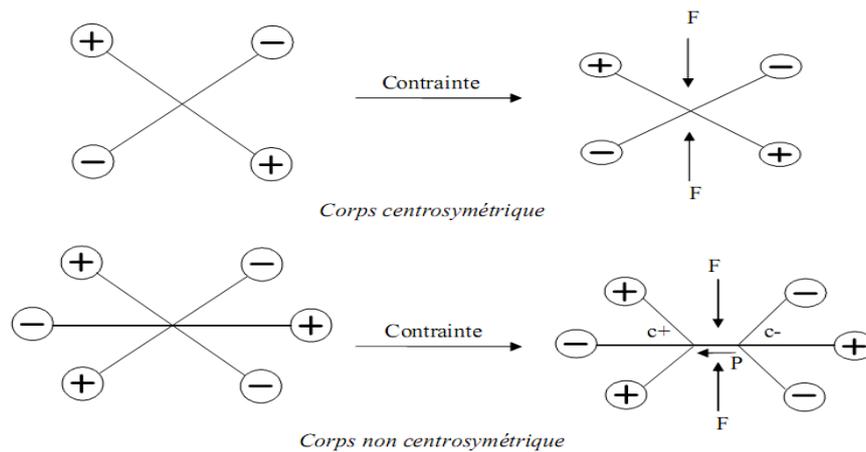


Fig. I.6. Représentation schématique de l'apparition de la piézoélectricité

Pour l'existence ou non de la piézoélectricité. Tout corps présentant un centre de symétrie ne peut pas être piézoélectrique alors que les cristaux ne possédant pas de centre de symétrie peuvent l'être (Fig I.6). [6].

I.6.3 Les matériaux piézoélectriques

Les matériaux piézoélectriques peuvent se regrouper en quatre classes principales, les céramiques, les cristaux, les polymères et les composites.

- ❖ Les céramiques : ce sont le plus souvent des solutions binaires ou ternaires possédant une structure pérovskite. Les premiers matériaux piézoélectriques de synthèse à base de Titanate de Barium sont apparus après 1945. Les Zircono-Titanate de Plomb (PZT) ont été élaborés dès 1954 et se sont répandus très rapidement, car leurs propriétés supplantent de loin celles de toutes les autres familles de composés.
- ❖ Les cristaux : nous citerons seulement le quartz et certains cristaux à base de Bismuth et de Lithium (comme le Niobate de Lithium et le Tantalite de Lithium) découverts respectivement par MATTHIAS et AURIVILLUS en 1949. Ces matériaux sont très stables, mais ont de faibles coefficients piézoélectriques. Il est actuellement possible de fabriquer de nombreux monocristaux de même composition que les céramiques citées précédemment, mais les techniques mises en jeu sont délicates et coûteuses.
- ❖ Les polymères : découverts par KAWAI en 1969, les films polymères semi-cristallins de type polyfluorure de vinyle PVF₂ présentent des propriétés piézoélectriques lorsqu'ils sont étirés sous un champ électrique. Les premières applications comme filtres à ondes de surface sont apparues au début des années 80.
- ❖ Les composites : ce sont des céramiques massives découpées et noyées dans des résines [9].

I.6.4 Equations piézoélectriques

Le phénomène piézoélectrique se manifeste par la conversion de l'énergie électrique en énergie mécanique et réciproquement. Les huit équations d'état présentées dans le (Tableau I .2) relient des variables électriques (induction électrique **D** ou champ électrique **E**) à des variables mécaniques (déformation **S** ou contrainte **T**). Elles illustrent le phénomène de couplage entre l'énergie élastique et l'énergie électrique d'un matériau piézoélectrique. Trois types de coefficient interviennent :

- ❖ coefficients purement électriques,
- ❖ coefficients purement mécaniques,
- ❖ coefficients mixtes qui traduisent le couplage entre les grandeurs électriques et les grandeurs mécaniques [11,12].

Soient \mathbf{S} et \mathbf{T} , respectivement la déformation et la contrainte et soient \mathbf{D} et \mathbf{E} , respectivement l'induction électrique et le champ électrique. On peut alors dire que pour un matériau piézoélectrique on a : \mathbf{S} ou \mathbf{T} qui peut être fonction de \mathbf{D} ou \mathbf{E} .

Le phénomène de couplage peut être décrit de manière adiabatique s'il s'agit d'une vibration rapide ou isotherme pour une transformation statique ou lentement variable. Comme les matériaux piézoélectriques sont anisotropes [13], leurs propriétés sont représentées par des tenseurs, chaque symbole possède un indice, soit unique comme \mathbf{D}_i , soit double ϵ_{ij} ou encore triple.

Les grandeurs envisagées étant tensorielles, d'ordre 1 pour le champ et l'induction électrique ou d'ordre 2 pour la contrainte et la déformation, les facteurs les reliant sont donc aussi tensoriels, d'ordre 3 pour les constantes piézoélectriques ou d'ordre 2 pour la permittivité électrique [14].

Tableau I.2. Equations piézoélectriques

Variables indépendantes	Grandeurs électriques	Grandeurs mécaniques
E, T	$D = \epsilon^T \cdot E + d \cdot T$	$S = s^E \cdot T + d^t \cdot E$
D, T	$E = \beta^T \cdot D - g \cdot T$	$S = s^D \cdot T + g^t \cdot D$
E, S	$D = \epsilon^S \cdot E + e \cdot S$	$T = c^E \cdot S - e^t \cdot E$
D, S	$E = \beta^T \cdot D - h \cdot S$	$T = c^D \cdot S - h^t \cdot D$

$[]^t$ est la transposée de la matrice $[]$.

$()^x$ Indique que la grandeur est considérée à x constant ou nul.

Le Tableau I.3 précise les grandeurs électriques, mécaniques et piézoélectriques utilisées dans les équations d'états.

➤ Coefficient de couplage électromécanique

Les céramiques piézoélectriques sont également caractérisées par un coefficient de couplage électromécanique K .

$$K = \frac{\text{énergie transformée}}{\text{énergie fourni}}$$

Il correspond à la capacité d'une céramique à transformer l'énergie électrique en énergie mécanique et réciproquement

Tableau I.3 : Grandeurs électriques, mécaniques et piézoélectriques

Abréviations	Dénominations	Types de grandeur	Matrice
D	Déplacement électrique ou induction C/m^2	ELECTRIQUE	(3,1)
E	Champ électrique V/m		(3,1)
ϵ	Permittivité électrique F/m		(3,3)
β	Constante d'imperméabilité diélectrique m/F		(3,3)
S	Déformation relative	MECANIQUE	(6,1)
T	Contrainte N/m^2		(6,1)
s	Compliance ou susceptibilité élastique m^2/N		(6,6)
c	Raideur ou constante élastique N/m		(6,6)
d	Constante piézoélectrique qui traduit la proportionnalité entre la charge et la contrainte à champ nul ou constant C/N ou m/V	PIEZOELECTRIQUE	(3,6)
e	Constante piézoélectrique qui traduit la proportionnalité entre la charge et la déformation à champ nul ou constant C/m^2 ou $N/V.m$		(3,6)
g	Constante piézoélectrique qui traduit la proportionnalité entre la contrainte et le champ à induction constante ou nulle $V.m/N$ ou m^2/C		(3,6)
h	Constante piézoélectrique qui traduit la proportionnalité entre la déformation et le champ résultant à induction constante ou nulle m/V ou N/C		(3,6)

I.6.5 Domaines d'application

Les domaines d'application de la piézoélectricité sont nombreux. Ils dépendent de la fréquence d'utilisation (tableau I.4). Les applications concernent la transduction électroacoustique pour l'imagerie médicale et le contrôle non destructif dans la gamme de fréquence du MHz, mais aussi les capteurs, les actuateurs, les éléments moteurs, ou encore les filtres. La conception et la modélisation de transducteurs et de systèmes d'échographie ultrasonore nécessitent donc la connaissance de l'intégralité des tenseurs électromécanique de l'ensemble des matériaux constitutifs [11].

Tableau I.4 : Domaines d'application en fonction de leurs fréquences [15]

Fréquence	Application
10-50 kHz	Nettoyage, soudage, usinage, collage ...
10-100 kHz	Acoustique sous-marine, analyse des sous-sols...
1-20 MHz	Acoustique médicale, échographie
100 MHz – 10 GHz	Acousto-optique, Acousto-électrique
10- 100 GHz	Etude de la matière

I.7 EQUATIONS DE PROPAGATION DANS LES SOLIDES

I.7.1 Description des solides

a) déplacement et déformation

Sous l'action de forces extérieures, un solide subit une déformation si ses particules se déplacent relativement les unes par rapport aux autres.

➤ Déplacement

La position d'un point matériel d'un solide non déformé est définie, à partir d'une origine O, par le vecteur \bar{x} . Après déformation, le point choisi est repéré par le vecteur \bar{x}' tel que :

$$\bar{x}' = \bar{x} + \bar{u} \quad (I.2)$$

On appelle \bar{u} le vecteur déplacement. Le déplacement d'un point dans les trois directions de l'espace est une fonction continue des coordonnées X_k , ($k=1, 2, 3$).

➤ **Déformation**

Un solide quelconque soumis à des forces extérieures se déforme lorsque ses divers points matériels se déplacent relativement les uns par rapport aux autres, c'est-à-dire si le gradient des déplacements $\frac{\partial u_i}{\partial x_j}$ n'est pas nul.

On peut montrer que dans le cas d'un solide quelconque et pour de petites déformations, les composantes S_{ij} du tenseur des déformations [S] s'écrivent [12]:

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

[S] est un tenseur symétrique de rang deux : $S_{ij} = S_{ji}$.

b) Force et contraintes

Considérons un solide soumis à des actions extérieures. Dans le solide déformé apparaissent des tensions mécaniques appelées contraintes qui tendent à le ramener dans son état de repos, et assurent l'équilibre de la matière. Ces contraintes sont homogènes à une force par unité de surface.

Soit en repère orthonormé [15], ΔF_i la composante sur l'axe i de la force $\Delta \vec{F}$ exercée sur l'élément de surface ΔS_i perpendiculaire à l'axe j . La contrainte T_{ij} est définie par la limite du rapport $\frac{\Delta F_i}{\Delta S_j}$ quand ΔS_j tend vers zéro :

$$T_{ij} = \lim_{\Delta S_j \rightarrow 0} \left(\frac{\Delta F_i}{\Delta S_j} \right) (i, j = 1, 2, 3) \quad (I. 4)$$

Le tenseur des contraintes [T] est un tenseur de rang deux, constitué de neuf composantes T_{ij} ($i, j = 1, 2, 3$). Comme il s'agit d'un tenseur symétrique, c'est-à-dire que $T_{ij} = T_{ji}$, le nombre de composantes indépendantes est réduit à six [12] :

T_{11}, T_{22}, T_{33} : contraintes normales aux faces.

T_{12} , T_{13} , T_{23} : contraintes tangentielles. Pour déformer un solide, des actions extérieures sont nécessaires. Des tensions mécaniques apparaissent alors dans le solide, et tendent à le ramener dans son état de repos. Si le solide a un comportement élastique, il retrouve son état initial lorsque les actions extérieures sont supprimées. Ce comportement élastique se traduit par une relation entre les contraintes T_{ij} et les déformations S_{km} :

$$T_{ij} = c_{ijkl} S_{km} \quad (i, j, k, m = 1, 2, 3) \quad (I.5)$$

Les coefficients c_{ijkl} qui traduisent la relation linéaire la plus générale entre les tenseurs de rang 2 T_{ij} et S_{km} sont les composantes d'un tenseur de rang 4 : $[C]$ le tenseur des rigidités élastiques (N/m^2).

Les tenseurs $[T]$ et $[S]$ étant symétriques on a : $c_{ijkl} = c_{jikl}$ et $c_{ijkl} = c_{ijmk}$, avec $i, j, k, m = 1, 2, 3$. Il vient alors que :

$$T_{ij} = \frac{1}{2} c_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_m} + \frac{1}{2} c_{ijkl} \frac{\partial u_m}{\partial x_k} \quad (I.6)$$

Comme $c_{ijkl} = c_{ijmk}$, il vient enfin

$$T_{ij} = c_{ijkl} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \quad (i, j, k, m = 1, 2, 3) \quad (I.7)$$

I.7.2 Equations de propagation dans un milieu piézoélectrique

L'équation du mouvement résultant de la loi fondamentale de la dynamique $\vec{F} = m\vec{\gamma}$ est telle que :

$$\frac{\partial T_{ij}}{\partial X_j} = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} \quad (I.8)$$

T_{ij} : Tenseur des contraintes (N/m^2).

ρ : Densité du substrat (masse volumique) (kg/m)

u_i : Vecteur de déplacement (m).

Le tenseur de déformation mécanique est relié aux déplacements par la relation (I.3) La loi de Hooke s'écrit en fonction des déplacements [11, 16] :

A) *Pour un milieu non piézo-électrique :*

$$T_{ij} = c_{ijkm}S_{km} = \frac{1}{2}C_{ijkl} \left[\frac{\partial u_k}{\partial X_l} + \frac{\partial u_l}{\partial X_k} \right] \quad (I.9)$$

Et comme le tenseur $S_{kl}=S_{kl}$ (symétrique) donc

$$T_{ij} = c_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \quad (I.10)$$

Donc la relation (I. 5) devient:

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l} \quad (I.11)$$

B) *Pour un milieu piézo-électrique :*

Les expressions de la contrainte et de l'induction électrique sont définies comme suit :

$$T_{ij} = C_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} - e_{kij} E_k \quad (I.12)$$

C_{ijkl} , Tenseur d'élasticité (N/m²) (i,j, k,l= 1, 2, 3).

e_{kij} : Tenseur de constante piézoélectrique (C/m²).

E_k : Champ électrique (V/m).

$$D_j = e_{ikl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} + \varepsilon_{ik} E_k \quad (I.13)$$

D_j : L'induction électrique (C/m²).

ε_{ik} : Tenseur du constant diélectrique (F/m).

D'après la symétrie des tenseurs C_{ijkl} , e_{kij} et ε_{ik} . Les relations (I.12) et (I. 13) devient :

$$T = CS - e^t E \quad (I.14)$$

$$D = \varepsilon E + eS \quad (I.15)$$

e^t : transposé de e. C'est le même tenseur "e" de piézoélectricité qui intervient dans les deux équations (I.14) et (I. 15).

C) Conditions aux limites :

Les équations d'état piézoélectrique (I.14), (I.15) précédentes doivent satisfaire les conditions aux limites mécaniques et électriques aux interfaces entre le milieu solide finis et le milieu extérieur

✓ Conditions aux limites mécaniques :

Dans le cas de solides rigidement liés, il y a continuité des déplacements aux frontières. De même, en l'absence de force extérieure agissant sur la frontière, il y a continuité des contraintes aux interfaces. Dans le cas où le milieu extérieur est le vide, les contraintes en surface sont nulles.

✓ Conditions aux limites électriques :

En électrostatique, il y a continuité des composantes tangentielles du champ électrique et du potentiel électrique aux interfaces. La composante normale D_n de l'induction électrique est discontinue sur une surface chargée.

Par substitution de l'équation (I. 12) dans l'équation (I. 8), nous obtenons :

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = C_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial X_j \partial X_l} - e_{kij} \frac{\partial E_k}{\partial X_j} \quad (I. 16)$$

L'induction électrique obéit à la loi de Poisson : où ρ_e est la densité de charges électriques libres par unité de volume. ρ_e est nul pour un matériau isolant.

$$\text{div}(\vec{D}) = \rho_e \quad (I. 17)$$

Par substitution de l'équation (I. 13) dans l'équation (I. 17), nous obtenons :

$$e_{ikl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial X_j \partial X_l} + \varepsilon_{ik} \frac{\partial E_k}{\partial X_j} = 0 \quad (I. 18)$$

La propagation des ondes élastique en admettant que le champ électrique est statique (approximation quasi-statique), le champ \vec{E} dérive d'un potentiel scalaire ϕ [11,17].

$$\vec{E} = -\overrightarrow{\text{Grad}} \phi \quad (I. 19)$$

$$\Phi = u_4 \Rightarrow E_k = -\frac{\partial u_4}{\partial X_k} \quad k = 1,2,3 \quad (I.20)$$

u_4 : Potentiel électrique.

En intégrant l'équation (I.20) dans les équations (I.16) et (I.18), nous aurons :

$$\left\{ \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = C_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial X_j \partial X_l} + e_{kij} \frac{\partial^2 u_4}{\partial X_k \partial X_j} \right. \quad (I.21)$$

$$\left. e_{ikl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial X_j \partial X_l} - \varepsilon_{ik} \frac{\partial^2 u_4}{\partial X_k \partial X_j} = 0 \right. \quad (I.22)$$

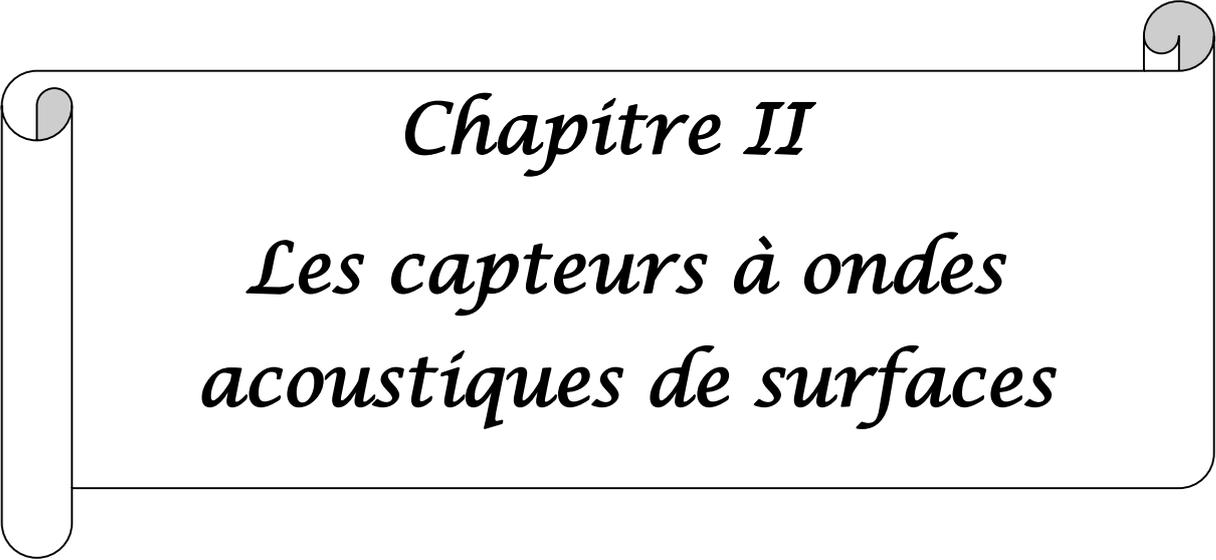
L'expression (I.21) est l'équation fondamentale de dynamique appliquée au cristal piézo-électrique. L'expression (I.22) est l'équation de couplage électro élastique. Ces deux expressions (I.21) et (I.22), sont les équations phénoménologiques tensorielles piézoélectriques, c'est à partir de ces deux équations qu'on pourra modéliser la propagation des ondes acoustiques dans un milieu anisotrope.

I.8 CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons rappelé les notions théoriques des capteurs chimiques de gaz, permettant ainsi de bien comprendre les mécanismes de diffusion d'un gaz dans un solide tel que : adsorption, absorption et la désorption.

Nous avons aussi développé des généralités sur le phénomène de piézoélectricité et les principaux matériaux piézoélectriques, ainsi que sa mise en équation.

Enfin, nous avons traité la propagation des ondes acoustiques de surface dans les matériaux piézo-électriques.



Chapitre II

*Les capteurs à ondes
acoustiques de surfaces*

II.1 INTRODUCTION

Les capteurs à ondes acoustiques de surfaces (SAW : Surface Acoustic Wave) sont composés d'un élément sensible à l'espèce à détecter et d'un transducteur qui traduit la présence d'espèces chimiques en une mesure de fréquence. Leur principe de fonctionnement est basé sur la propagation des ondes élastiques (ou acoustiques) en surface.

En effet, une onde acoustique de surface (SAW) est une onde que se propage le long de la surface d'un matériau solide. Son amplitude décroît rapidement, souvent de façon exponentielle, avec la profondeur de la matière. Il existe plusieurs modes de propagation des ondes acoustiques de surface tel que : Les ondes SH-APM, Les ondes de Lamb, Les ondes de Love, Les ondes de Stoneley [18,6].

L'objectif de ce chapitre est d'effectuer une étude sur les capteurs à onde acoustique de surface. Ou nous allons présenter le principe de génération de cette onde, et d'en déduire le principe de fonctionnement du capteur.

II.2 PROPAGATION DES ONDES ACOUSTIQUES

II.2.1 Ondes acoustiques

Le terme le plus répandu pour parler des ondes se propageant dans un solide piézoélectrique est "ondes acoustiques" (ou élastique), utilisé dans le sens où l'onde considérée est une onde de matière (qui ne peut pas se propager dans le vide). Les ondes élastiques se propageant dans les milieux matériels sont caractérisées par une direction de propagation (définie par le vecteur d'onde) et une polarisation (direction dans laquelle s'effectuent les déplacements de matière). Les propriétés physiques (anisotropie, symétrie cristalline, ...) et les dimensions du milieu de propagation peuvent permettre la propagation d'une grande variété d'ondes élastiques que nous allons décrire dans ce qui suit.

L'étude de la propagation des ondes permet de montrer que tous les types d'ondes sont la combinaison de deux types fondamentaux cf. Fig.II.1: [12]

- ✓ les ondes longitudinales, résultant d'une oscillation dans la direction de propagation et qui peuvent se propager dans les fluides et dans les solides.
- ✓ les ondes transversales, qui résultent d'une oscillation perpendiculaire à la direction de propagation. Elles ne se propagent que dans les solides et dans les fluides très visqueux.

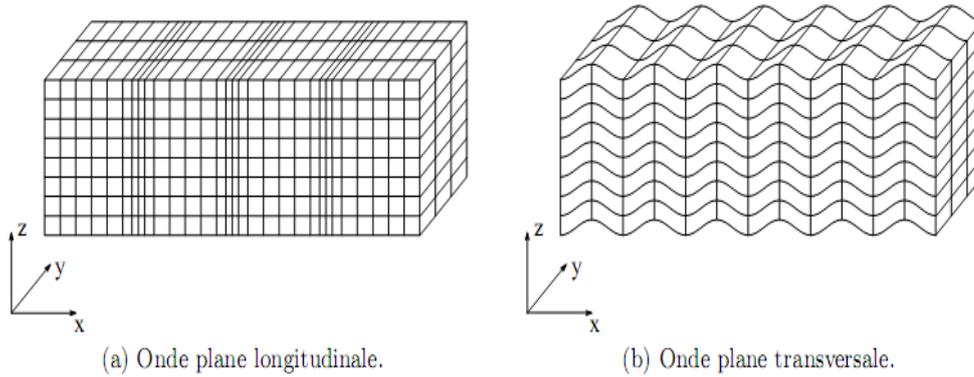


Fig. II.1: Propagation d'ondes planes dans un solide.

Pour une direction de propagation \vec{n} (colinéaire à la vitesse de phase) donnée, ces ondes sont caractérisées par les vecteurs déplacements \vec{u}^1 , \vec{u}^2 et \vec{u}^3 respectivement associés à l'onde longitudinale, transverse horizontale et transverse verticale. Ces vecteurs sont orthogonaux entre eux Fig. II.2.

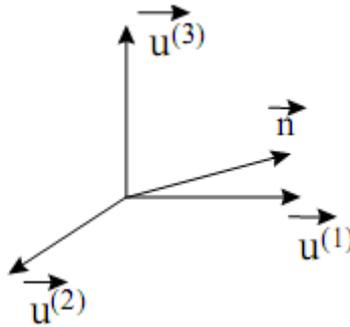


Fig. II.2 : Polarisation des ondes susceptibles de se propager suivant \vec{n} (milieu anisotrope)

Dans le cas général, la direction de propagation \vec{n} fait un angle aigu avec le vecteur déplacement \vec{u}^1 : on parle d'ondes quasi-longitudinales et d'ondes quasi-transverses. Pour les milieux isotropes, ainsi que pour certaines coupes cristallographiques de matériaux anisotropes, \vec{n} et \vec{u}^1 sont colinéaires : on parle d'ondes de polarisation pure. [12]

Pour décrire les différents types d'ondes, on peut différencier la propagation dans les solides illimités (dont les dimensions latérales sont grandes devant l'étendue du faisceau d'ondes élastiques) et celle dans les solides limités dans lesquels des conditions aux limites sont imposées. On fera alors la distinction entre :

- les ondes planes dans un milieu infini (ondes de volume)

- les ondes guidées :
 - ✓ par la surface libre (milieu semi-infini)
 - ✓ dans une plaque (solide limité dont les interfaces sont distantes d'une longueur de l'ordre de la longueur de l'onde guidée λ , ou de quelques 10λ)
 - ✓ dans un milieu inhomogène

II.2.2 Principe de génération d'ondes acoustiques

Le principe de génération d'ondes acoustiques est fondé sur les propriétés électroacoustiques de certains matériaux dits piézoélectriques tels que (le Quartz (SiO_2), le Niobate de Lithium (LiNbO_3), l'Oxyde de Zinc (ZnO), etc..). Les matériaux possédant cette propriété transforment l'énergie électrique en énergie mécanique et réciproquement, avec un coefficient de conversion qui dépend du facteur de couplage électro-acoustique (ou coefficient de couplage électromécanique) K^2 , très variable d'un matériau à l'autre.

Cette propriété permet de générer des ondes acoustiques dans le matériau par application d'un potentiel électrique alternatif [15]. Suivant le type d'onde généré, on peut classer les dispositifs à ondes acoustiques en quatre groupes :

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

Dans le premier groupe, c'est tout le volume du matériau qui se déforme, la polarisation peut être longitudinale ou transversale. Dans le second groupe, l'onde est guidée à la surface du matériau : la Fig II.3 (gauche) représente une onde de Rayleigh (polarisation longitudinale et transversale verticale déphasées de 90°), la Fig II.3 (droite) représente une onde de Bleustein-Gulwev (polarisation transverse horizontale).

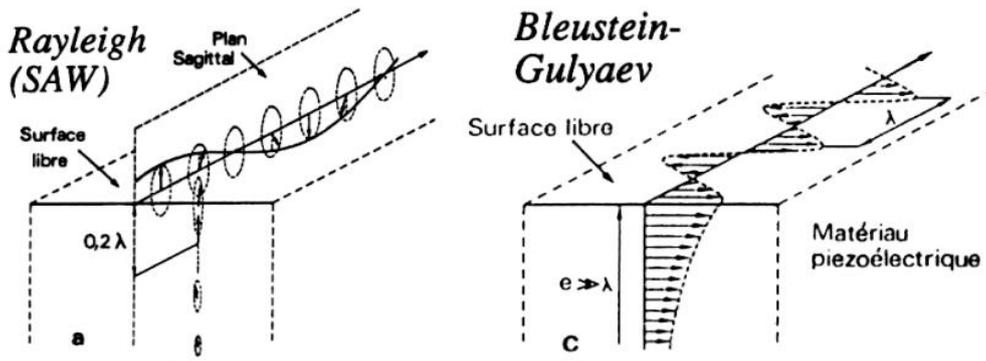


Fig II.3. Gauche : déplacement des particules au passage d'une onde de Rayleigh. Droite : déplacement des particules lors de la propagation d'une onde de Bleustein-Gulyaev [17,19].

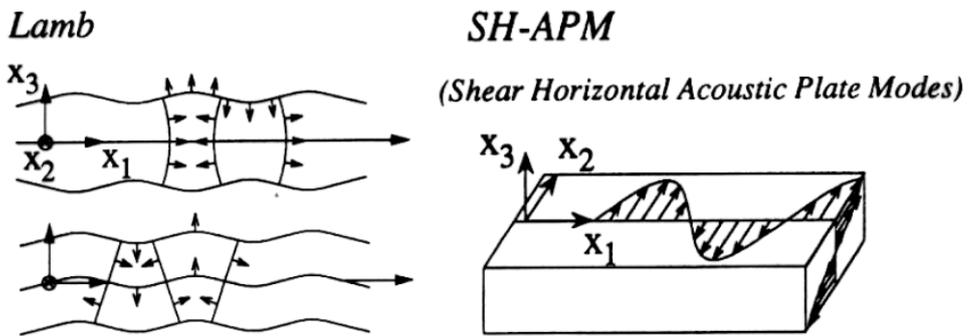


Fig II.4. Gauche : déplacement des particules au passage d'une onde de Lamb (haut : mode symétrique, bas : mode antisymétrique) [16].

Droite : déplacement des particules au passage d'une onde SH-APM (mode d'ordre 1) [20].

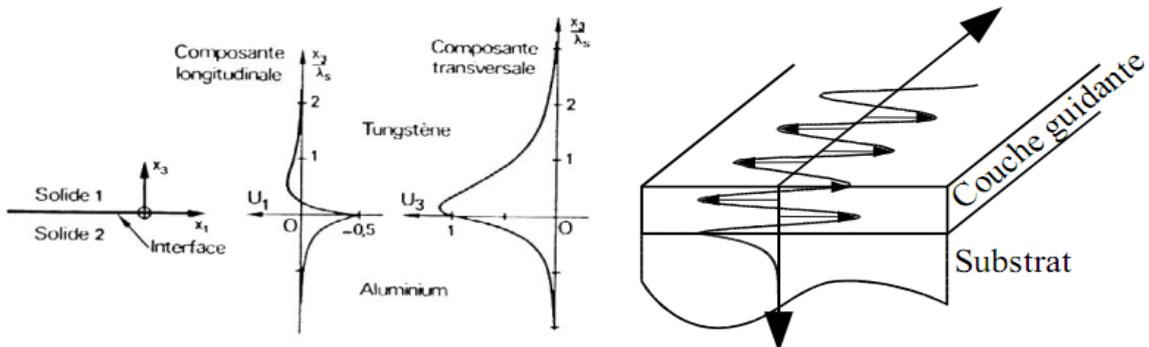


Fig II.5. Gauche : amplitude des composantes longitudinales et transverses verticales dans le cas de la propagation d'une onde de Stoneley.

Droite : déplacement dans le cas de la propagation d'une onde de Love [12].

Dans le troisième groupe l'onde se propage dans le volume du matériau, soit sous la forme de deux ondes de Rayleigh (une par face) pour une onde de Lamb (Fig II.4 à gauche) ou sous la forme d'une onde transverse horizontale subissant des réflexions aux faces du matériau (onde SH-APM Fig II.4 à droite).

Enfin, le quatrième groupe implique des structures dans lesquelles il y a au moins deux solides rigidement liés entre eux : l'onde de Stoneley qui est une onde de Rayleigh se propageant à l'interface entre deux solides (Fig II.5 à gauche) et l'onde de Love dans laquelle l'onde se propage essentiellement dans la couche guidante (Fig II.5 à droite). L'anisotropie des cristaux a pour effet de coupler mécaniquement certaines polarisations, on a alors des polarisations quasi-longitudinales et/ou quasi-transverses, dans lesquelles le déplacement n'est ni colinéaire ni orthogonal au vecteur d'onde. On nomme alors la polarisation d'après l'importance de chacune des projections du déplacement de la particule sur un repère lié au vecteur d'onde [21].

La propagation des différents modes des ondes élastiques dans les solides se fait sous des conditions bien déterminées qui dépendent de la nature du solide. [11].

II.3 ONDES ACOUSTIQUES DE SURFACE SAW

Les ondes acoustiques de surface SAW sont des ondes qui se propagent en parallèle de la surface d'un solide (le vecteur d'onde et le vecteur de flux d'énergie sont parallèle à la surface) avec une amplitude, en terme de longueur d'onde, qui décroît avec la profondeur du solide. Plusieurs modes de propagation des ondes acoustiques de surface existent. Ces modes se divisent principalement en trois parties : Ondes de Rayleigh, les ondes de Bleustein-Gulyaev (SH-SAW: shear Horizontal SAW), les ondes STW (Surface Transverse Wave).

Parmi ces trois types, les deux premiers sont à différencier du troisième. En effet, les ondes de Rayleigh et de Bleustein-Gulyaev se propagent librement le long de la surface, alors que les ondes STW sont guidées au moyen de sillons gravés ou de bandes métalliques déposées sur la surface [22,12].

II.3.1 Ondes de Rayleigh

Découvertes par Lord Rayleigh en 1885, se propagent dans un milieu semi-infini. La profondeur de pénétration de ce type d'onde dans le substrat, c'est-à-dire la distance à laquelle les déplacements acoustiques sont nuls, est de l'ordre de 2λ (sont guidées le long de la surface du

matériau et leur amplitude décroît fortement avec la distance à la surface). C'est pourquoi les ondes de Rayleigh sont aussi connues sous le nom d'ondes de surface SAW [23,12].

Dans un milieu isotrope la polarisation des ondes de Rayleigh est "elliptique" : les déplacements acoustiques, contenus dans le plan sagittal (plan contenant le vecteur d'onde et la normale à la surface), résultent de la superposition d'une composante longitudinale et d'une composante transversale déphasées de $\pi/2$ Fig. II.6. Dans un milieu anisotrope, les déplacements acoustiques se font dans un plan incliné par rapport au plan sagittal, la polarisation est dite "quasi-elliptique".

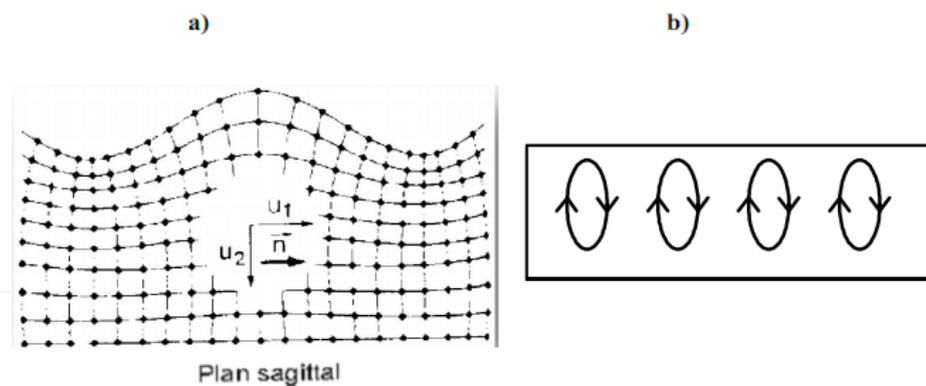


Fig. II.6. Onde de Rayleigh [12] ;

a) ondulation en surface (plan sagittal)

b) polarisation de l'onde

II.3.2 Ondes de Bleustein-Gulyaev

Un matériau fortement piézo-électrique possédant certaines symétries peut guider une onde de surface purement transverse horizontale appelée onde de Bleustein-Gulyaev. La pénétration en profondeur est plus importante que dans le cas d'une onde de Rayleigh, de l'ordre de 100λ . De plus, plus le matériau est piézo-électrique, plus l'onde de Bleustein-Gulyaev est confinée en surface (Fig II.3) [17]. Ces ondes sont également connues sous le nom de "SH-SAW" (Shear Horizontal – Surface Acoustic Wave), pour "onde acoustique transverse horizontale de surface".

II.3.3 Ondes STW (Surface Transverse Wave)

Les ondes STW sont à différencier des autres types d'ondes, dans la mesure où leur propagation nécessite un piégeage en surface. Il est parfois possible de générer une onde purement transverse horizontale, notamment dans un substrat de quartz de coupe simple rotation [15]. Cette onde, qui a tendance à se diriger vers le volume du matériau, est appelée onde SSBW (Surface Skimming Bulk Wave), pour "onde de volume rampant sous la surface" (Fig II.7). Il ne s'agit donc pas strictement d'une onde de surface, cependant, il est possible de la piéger en surface si le chemin de propagation comporte un motif périodique composé de sillons gravés dans le substrat ou de bandes métalliques déposées sur celui-ci. On obtient alors un guidage en surface de l'onde qui devient une onde STW.

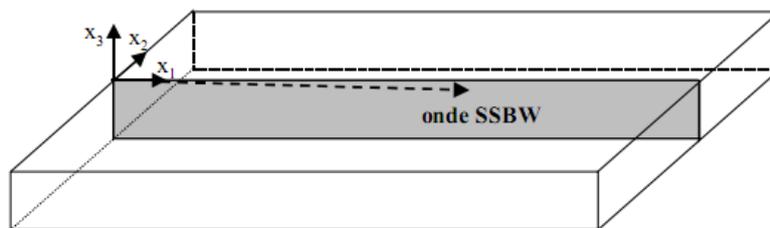


Fig II.7. Onde SSBW (Surface Skimming Bulk Wave)

II.4 CAPTEURS À ONDES ACOUSTIQUES DE SURFACE SAW

Les capteurs SAW peuvent être utilisés pour déterminer la présence de molécules spécifiques dans l'environnement. Ils sont fabriqués par la technique de photolithographie semblable à celle utilisée dans l'industrie des semi-conducteurs [24].

II.4.1 Principe de fonctionnement des (IDT)

La génération d'ondes acoustiques se fait au moyen de deux électrodes parallèles et coplanaires déposées à la surface du substrat piézoélectrique. Un effet cumulatif peut être obtenu à partir d'un ensemble interdigité constituant le transducteur (Fig II.8). En appliquant une tension alternative au niveau du transducteur d'entrée, on génère une alternance de compressions et d'expansions qui peuvent se propager le long du substrat.

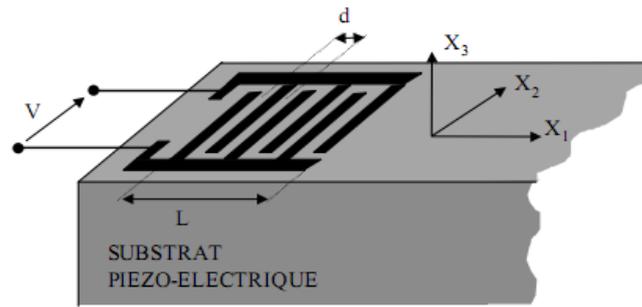


Fig II.8. Electrode interdigitée déposée à la surface d’un substrat piézoélectrique

Le système étant réversible, un ensemble identique sert de récepteur et permet de recueillir le signal sous forme électrique. Le signal reçu est retardé et atténué par rapport au signal émis, d'où l'appellation de ligne à retard. Il est possible d’augmenter le coefficient de qualité Q du système, en augmentant le nombre de doigts constituant chaque électrode, dans la limite de la faisabilité technologique. La distance entre les doigts est déterminée de façon à obtenir un phénomène cumulatif d’ondes constructives à une fréquence donnée. La figure II.9 donne les caractéristiques principales d'un dispositif à ondes acoustiques de surface. [15]

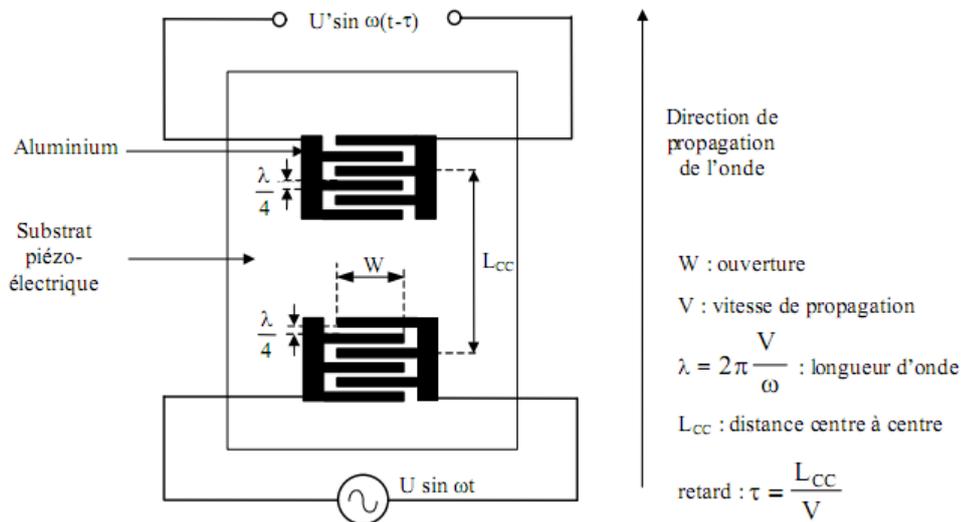


Fig II.9. Principe et caractéristiques d'un dispositif à ondes acoustiques

II.4.2 Principe de détection

Nous venons de voir comment on peut générer une onde acoustique dans un substrat piézoélectrique. Nous allons maintenant nous intéresser à la manière de détecter des espèces chimiques à partir de ce principe de base. Le type d'onde acoustique se propageant dans un cristal piézoélectrique dépend de paramètres tels que la coupe cristallographique du cristal, les caractéristiques du milieu et le mode considéré. Une variation de ces paramètres perturbe l'onde et en change ses caractéristiques, telles que la vitesse et l'amplitude de propagation. Parmi les paramètres d'influence, on peut citer les propriétés des matériaux (la masse volumique, l'élasticité, la viscosité ou l'épaisseur des couches), ainsi que des paramètres extérieurs tels que la température ou la pression. Dans le cadre de l'application des dispositifs à ondes acoustiques à la détection d'espèces chimiques, nous nous intéressons en premier lieu à la masse volumique. En effet, l'étude des dispositifs à ondes acoustiques montre que les caractéristiques de propagation de l'onde sont fortement liées à la masse volumique des matériaux intervenant dans la structure considérée (substrat, couche sensible). Sous certaines conditions cet effet appelé effet de masse est prépondérant par rapport aux effets induits par les autres paramètres. L'ajoute d'une couche mince (couche sensible) sur le chemin de propagation perturbe l'onde par effet de masse dû au dépôt, sa vitesse de phase est modifiée. Si la couche est choisie pour ses affinités avec une espèce chimique particulière, lorsque l'espèce est présente dans l'atmosphère du capteur, elle interagit avec la couche sensible principalement par sorption, induit une variation de sa masse, et modifie à nouveau l'onde acoustique. La mesure précise de ces perturbations nous permet de détecter des espèces chimiques spécifiques et de remonter à leur concentration Fig. II.10. [25,26]

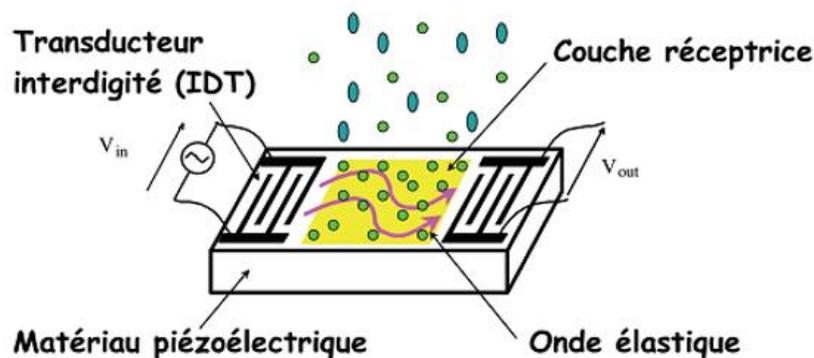


Fig. II.10. Principe de détection par capteur à ondes acoustiques

II.4.3 Sensibilité du dispositif à ondes acoustiques

Le dispositif à ondes acoustiques est avant tout sensible à l'effet de masse, ce qui lui procure un large spectre d'applications, contrairement à un dispositif à fibre optique, par exemple, qui nécessiterait la variation d'un paramètre bien spécifique, comme l'indice optique. Ainsi, toute immobilisation de matière se traduit par une variation de masse, éventuellement accompagnée de la variation d'autres paramètres. Parmi les mécanismes de transduction, l'effet de masse est mis en jeu, de façon souvent prépondérante, dans les dispositifs à ondes acoustiques [21]. Aussi, le paramètre usuel pour qualifier et comparer entre elles ces structures est la « sensibilité à l'effet de masse », encore appelée fréquemment sensibilité gravimétrique (le terme de sensibilité inertielle serait mieux adapté, s'agissant d'un effet de masse), l'expression de cette sensibilité est donnée par [27, 28,29].

$$S = \frac{\Delta f}{f_0} \frac{A_s}{\Delta m} \quad (II.1)$$

Où $\Delta f = f_{(\Delta m)} - f_0$.

f_0 et $f_{(\Delta m)}$ Sont respectivement les fréquences de résonance de l'onde acoustique, pour le dispositif avant et après modification de masse surfacique.

Dans le cas de la détection d'un capteur chimique, l'interaction couche sensible-espèce cible peut-être modélisée par l'effet de masse Δm [25]:

$$\frac{\Delta m}{A_s} = b \cdot \rho \quad (II.2)$$

Avec b qui est l'épaisseur de la couche sensible et ρ la masse volumique de gaz dans la couche sensible.

Donc la sensibilité à l'effet de masse est :

$$S = \frac{\Delta f}{f_0} \frac{1}{b \cdot \rho_{(DCM,PIB)}} \quad (II.3)$$

Où $\rho_{(DCM,PIB)}$ est la masse volumique partielle de DCM dans la couche sensible PIB qui est calculé par l'expression suivante :

$$\rho_{(DCM,PIB)} = K \cdot M \cdot C \quad (III.4)$$

Où $K = 10^{1.4821}$, est le coefficient de partage air / PIB pour DCM, M est la masse molaire de DCM [30].

C : concentration de gaz DCM dans l'air, qui est donné par :

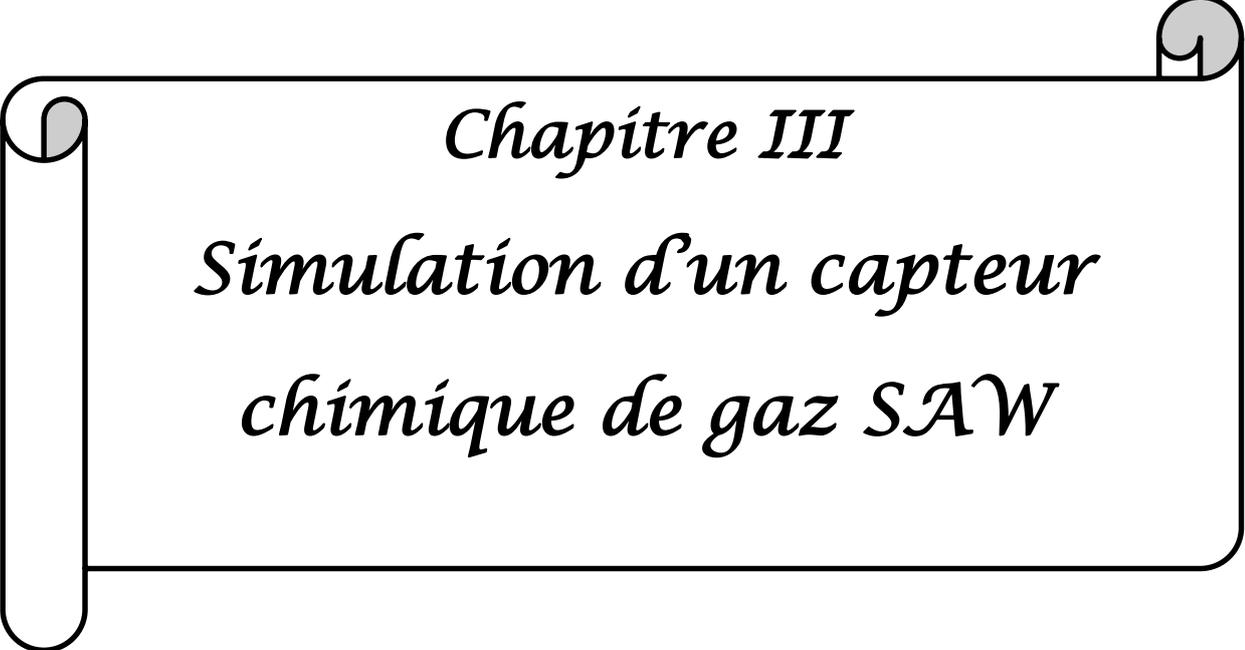
$$C = 100 \cdot 10^{-6} \cdot p / (R \cdot T) \quad (III.5)$$

Où p : la pression atmosphérique de l'air, R : constante de gaz, T : la température ambiante de l'air [31,32].

Cette relation nous permet donc de modéliser la propagation des ondes acoustique le long de la surface du dispositif SAW [18].

II.5 CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons présenté les concepts de base sur la propagation des ondes acoustiques notamment les ondes acoustiques de surfaces et la description des dispositifs à ondes acoustiques de surface SAW. Puis nous avons développé le principe de fonctionnement des transducteurs interdigités IDT et le principe de détection à l'effet de masse. Nous avons ainsi établi le modèle de la sensibilité à l'effet de masse qui nous permettra de déterminer l'effet des différents paramètres d'influence sur cette dernière.



Chapitre III

*Simulation d'un capteur
chimique de gaz SAW*

III.2 INTRODUCTION

Ce chapitre sera consacré à la présentation de la simulation d'un dispositif SAW, sous environnement COMSOL Multi physiques. Cette étude nous permet de déterminer la réponse du capteur, de sa sensibilité et d'en déduire les effets des paramètres d'influence sur les performances du capteur.

La structure d'un capteur à onde acoustique SAW est composée d'un transducteur interdigité (IDT) gravé sur un substrat piézoélectrique, recouvert d'une couche mince Poly-Iso Butylène (PIB) comme le montre la figure III.1. Cette couche sensible capable d'absorber les espèces à détecter, produit un effet de masse (augmentation de la masse volumique) et modifie la vitesse de phase de l'onde acoustique.

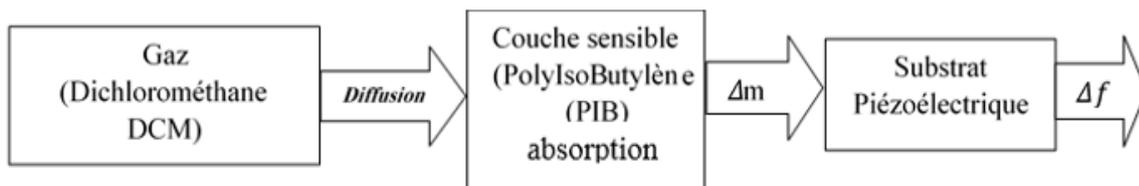


Fig. III.1. Principe de fonctionnement du capteur - effet de masse –

Après avoir établi l'équation de la dispersion des ondes acoustiques le long de la surface de la structure (SAW), nous allons maintenant aborder l'étude du mécanisme de détection des capteurs à ondes acoustiques.

III. 1.1 Description du modèle

Le comportement d'un capteur à onde acoustique de surface est régi par le couplage des équations électromécaniques (I.21, I.22). La résolution de ces équations, par la méthode des éléments finis, permet de déterminer la réponse fréquentielle du dispositif en fonction de la masse.

Nous réalisons cette étude à deux dimensions, c'est-à-dire, que l'analyse des phénomènes de propagation des ondes acoustiques de surface sera posée dans une section du dispositif supposée identique à elle-même le long de sa direction verticale.

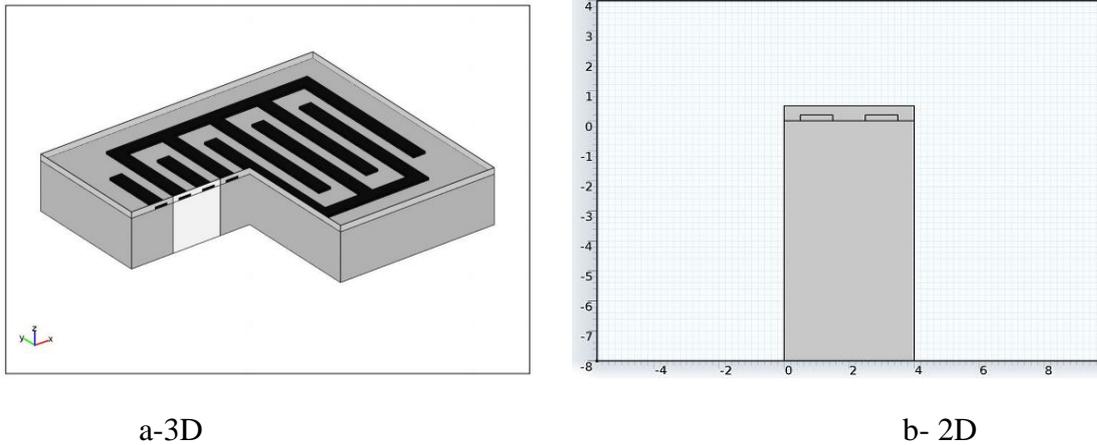


Fig. III.2. Géométrie de la structure 3D/2D.

Cette restriction permet une bonne approximation car la plupart des phénomènes peuvent être analysés correctement, dans cette hypothèse bidimensionnelle, comme le montre la figure III.2. Les dimensions de chaque couche de la structure 2D sont représentées dans le tableau III.1.

Tableau III.1 : Valeurs moyennes des dimensions du dispositif

<i>Matériau</i>	<i>Épaisseur</i>	<i>Largeur (μm)</i>
<i>PIB</i>	500nm	4
<i>Al (IDT)</i>	200nm	1
<i>LiNbO₃</i>	22 μm	1

III.1.2 Propriétés de matériau

Le substrat piézoélectrique constitue le matériau usuellement utilisé dans la réalisation des capteurs [4]. Parmi ces matériaux on peut citer, le quartz(SiO_2), le niobate de lithium (LiNbO_3), le tantalate de lithium (LiTaO_3), qui présentent les propriétés électromécanique suivantes :

- Matrice de rigidité élastique (c) :

$$c = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & -c_{14} & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ c_{14} & -c_{14} & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & c_{14} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{14} & (c_{11} - c_{12})/2 \end{bmatrix} \quad (\text{III. 1})$$

- Matrice piézoélectrique (e) :

$$e = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & -e_{22} \\ -e_{22} & e_{22} & 0 & e_{15} & 0 & 0 \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{III. 2})$$

- Matrice diélectrique (ϵ):

$$\epsilon = \begin{bmatrix} \epsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{33} \end{bmatrix} \quad (\text{III. 3})$$

Les valeurs des différents coefficients des matériaux sont résumées dans le tableau III.2 : [33,34]

Tableau III.2 : Diverses constantes des matériaux

Matériaux		LiNbO ₃	LiTaO ₃	Quartz
Coefficients				
Constantes élastiques 10 ¹¹ N/m ²	C ₁₁	2.03	2.33	0,867
	C ₁₂	0.573	0.47	0,070
	C ₁₃	0.752	0.80	0,119
	C ₁₄	0.085	0.11	0,179
	C ₃₃	2.424	2.75	1,07
	C ₄₄	0.595	0.94	0,579
Constantes des piézo- électriques (C/m ²)	e ₁₅	3.7	2.6	e ₁₁ =0,171 e ₁₄ =0,0406
	e ₂₂	2.5	1.6	
	e ₃₁	0.23	0.0	
	e ₃₃	1.33	1.9	
constantes des diélectriques (10 ⁻¹¹ F/m)	ϵ_{11}	85.2	51	3,92
	ϵ_{33}	28.7	45	4,1
Densité (kg/m ²)	ρ	4700	7450	2650

III.1.3 Etude paramétrique (orientation cristallographique)

La vitesse d'ondes dans un substrat piézoélectrique dépend de la direction de propagation considérée par rapport à l'orientation de la coupe cristallographique du matériau [27]. Pour mettre en évidence l'influence de l'orientation de la coupe cristallographique des matériaux, nous avons envisagé une étude paramétrique en fonction de l'élasticité, de la piézo-électricité et d'électrique des substrats (LiNbO₃ 128° YX, LiNbO₃ YZ 5°, LiTaO₃ 36° YX, quartz ST). Pour cela nous commençons notre étude par la définition de ces transformations géométriques, couramment appelées les angles d'Euler (θ , ψ , φ), où les deux premiers angles caractérisent la coupe du substrat et le troisième la direction de propagation [35,36].

Angles d'Euler :

- **La précession ψ** : première rotation autour de l'axe OZ. Donnée par :

$$[a]_z = \begin{bmatrix} \cos\psi & \sin\psi & 0 \\ -\sin\psi & \cos\psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (III.4)$$

- **La nutation θ** : seconde rotation autour de l'axe OY. Que l'on exprime par :

$$[a]_y = \begin{bmatrix} \cos\theta & 0 & \sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta \end{bmatrix} \quad (III.5)$$

- **La rotation propre φ** : dernière rotation autour de l'axe OX, exprimée par :

$$[a]_x = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\varphi & -\sin\varphi \\ 0 & \sin\varphi & \cos\varphi \end{bmatrix} \quad (III.6)$$

La transformation des coordonnées est donnée par le produit des 3 matrices $[a]_x [a]_y [a]_z$, tel que:

$$[a] = [a]_x [a]_y [a]_z.$$

$$[a] = \begin{bmatrix} \cos\varphi\cos\psi - \sin\varphi\cos\theta\sin\psi & -\sin\varphi\cos\psi - \cos\varphi\cos\theta\sin\psi & \sin\theta\sin\psi \\ \cos\varphi\sin\psi + \sin\varphi\cos\theta\cos\psi & -\sin\varphi\sin\psi + \cos\varphi\cos\theta\cos\psi & -\sin\theta\cos\psi \\ \sin\varphi\sin\theta & \cos\varphi\sin\theta & \cos\varphi \end{bmatrix} \quad (III.7)$$

Les nouvelles valeurs des matrices, d'élasticité, piézo-électricité et diélectrique sont respectivement $[C']$, $[e']$ et $[\varepsilon']$.

$$[\varepsilon'^T] = [a][\varepsilon^T][a]^T \quad (III.8)$$

$$[c'] = [M][c][M'] \quad (III.9)$$

$$[e'] = [a][e][M]^T \quad (III.10)$$

La matrice $[M]$ (matrice de Bond), est donnée par [40]:

$$[M] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & m^2 & n^2 & 2mn & 0 & 0 \\ 0 & n^2 & m^2 & -2mn & 0 & 0 \\ 0 & -mn & mn & m^2 - n^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & m & -n \\ 0 & 0 & 0 & 0 & n & m \end{bmatrix} \quad (III.11)$$

Avec $m = \cos \varphi$ et $n = \sin \varphi$.

Dans le tableau III.3, on regroupe les différentes valeurs des paramètres des substrats d'un capteur SAW utilisés dans la simulation COMSOL multi physiques.

Tableau III.3. Diverses valeurs des paramètres utilisés

Matériaux	Coupe et direction de propagation	Vitesse des ondes [m/s]	Coefficient de couplage k^2 %
LiNbO ₃ [5,37, 38]	YZ	3488	4.82
	128° YX	3992	16
LiTaO ₃ [5]	36° YX	3300	1.5
Quartz [5, 13,39]	132.75° ST YX	3158	0.16

III.2 SIMULATION COMSOL MULTI PHYSIQUES D'UN CAPTEUR SAW

Les étapes essentielles de la simulation d'un capteur SAW sous environnement COMSOL sont :

III.2.1 choix de la dimension du modèle

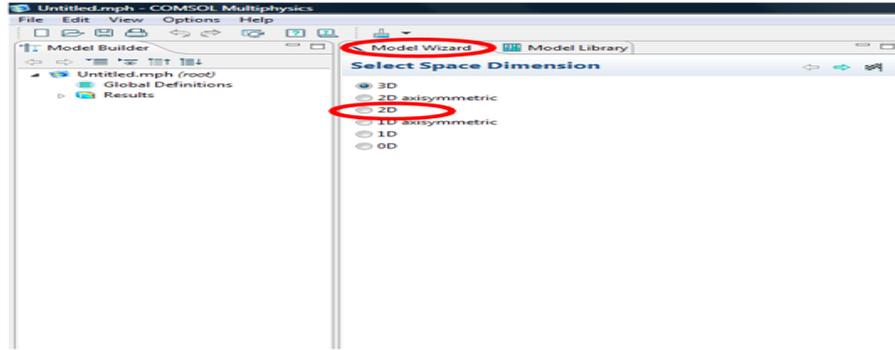


Fig. III .3. Choix de la dimension

Le choix de la dimension s'effectue à partir du menu de la Fig III.3, où on sélectionne la rubrique «model wizard »qui permet de prendre la dimension du modèle dans notre cas 2D.

III.2.2 Choix du modèle physique

Le choix du modèle s'effectue à partir du menu de la Fig III.4, où on sélectionne la rubrique «Dispositifs piézoélectriques» qui permet d'introduire les équations à dérivées partielles régissant le couplage électromécanique (I.21, I.22).

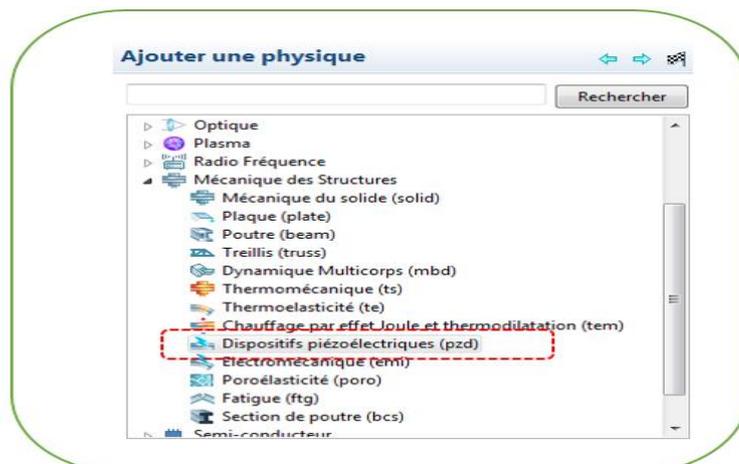


Fig. III .4. Fenêtre du Navigateur de modèles : choix du modèle

III.2.3. Saisie des données

Dans la rubrique « définitions globales », on introduit toutes les constantes et toutes les expressions nécessaires à la simulation du capteur, que nous résumons dans la figure. III.4.

Nom	Expression	Valeur	Description
p	101.325[kPa]	1.0133E5 Pa	Air pressure
T	25[degC]	298.15 K	Air temperature
R	8.3145[Pa*m^3/(K*mol)]	8.3145 J/(mol-K)	Gas constant
c_DCM_air	100e-6*p/(R*T)	0.0040874 mol/m ³	DCM concentration in air
M_DCM	84.93[g/mol]	0.084930 kg/mol	Molar mass of DCM
K	10^1.4821	30.346	PIB/air partition constant
rho_DCM_PIB	K*M_DCM*c_DCM_air	0.010534 kg/m ³	Mass concentration of DCM in PIB
rho_PIB	0.918[g/cm^3]	918.00 kg/m ³	Density of PIB
E_PIB	10[GPa]	1.0000E10 Pa	Young's modulus of PIB
nu_PIB	0.48	0.48000	Poisson's ratio of PIB
eps_PIB	2.2	2.2000	Relative permittivity of PIB

Fig. III.5. Saisie des paramètres - Constantes – expressions

III.2.4 Dessin de la géométrie

Dans cette étape, on représente la géométrie bidimensionnelle du modèle étudié comme le montre la figure III.6.

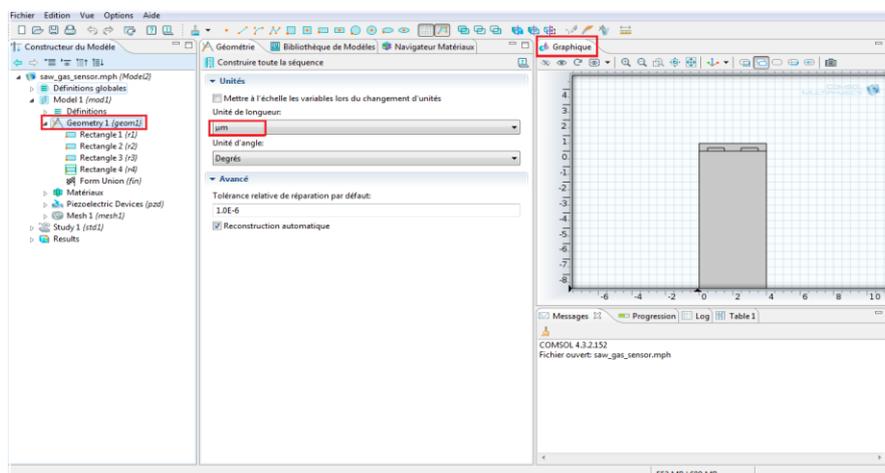


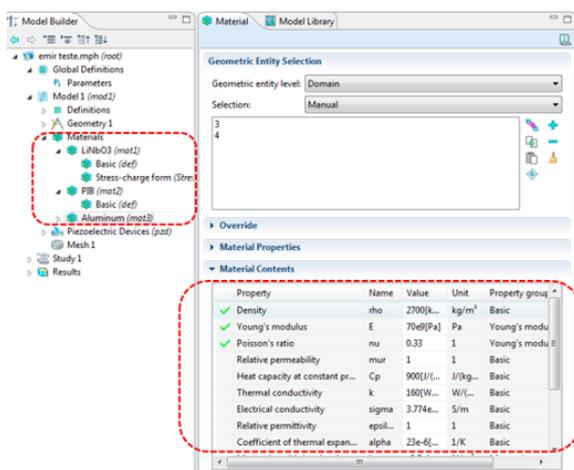
Fig. III.6. Dessin de la géométrie

III.2.5 Propriétés des matériaux

Dans la rubrique « matériel », on charge les propriétés électromécaniques des matériaux. Leurs valeurs sont résumées dans le tableau. III.4.

Tableau. III.4. propriétés des matériaux

Property	Name	Value
Elasticity matrix (Ordering: xx, yy, zz, yz, xz, xy)	cE	{2.424e11, 0.752e11, 2.03e11, 0.752e11, 0.573e11, 2.03e11, 0[Pa], 0[Pa], 0[Pa], 0.752e11, 0[Pa], 0.085e11, -0.085e11, 0[Pa], 0.595e11, 0[Pa], 0[Pa], 0[Pa], 0.085e11, 0[Pa], 0.595e11}
Coupling matrix (Ordering: xx, yy, zz, yz, xz, xy)	eES	{1.33, 0, 0, 0.23, 0, -2.5, 0.23, 0, 2.5, 0, -2.5, 0, 0, 3.7, 0, 3.7, 0}
Relative permittivity	epsilonR5	{28.7, 85.2, 85.2}
Density	rho	4647



III.2.6 Propriétés physique des domaines

➤ *Matériau élastique linéaire* : On introduit les équations mécaniques des structures en définissant le matériau comme matériau élastique linéaire, voir Fig. III.7.

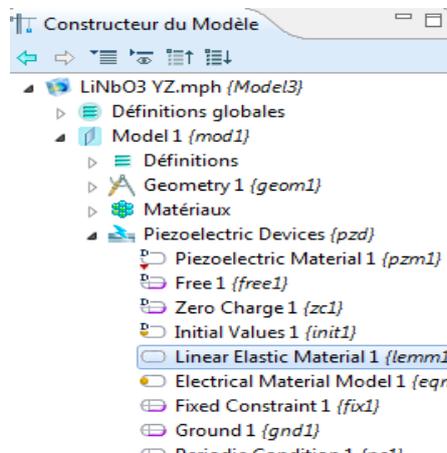


Fig. III.7. Matériau élastique linéaire

❖ *Propriété électrique (mise à la masse de la structure):*

La rubrique « Masse » permet de relier le potentiel de l'électrode fixe à la valeur 0, $V=0$.
Comme le montre la figure III.8.

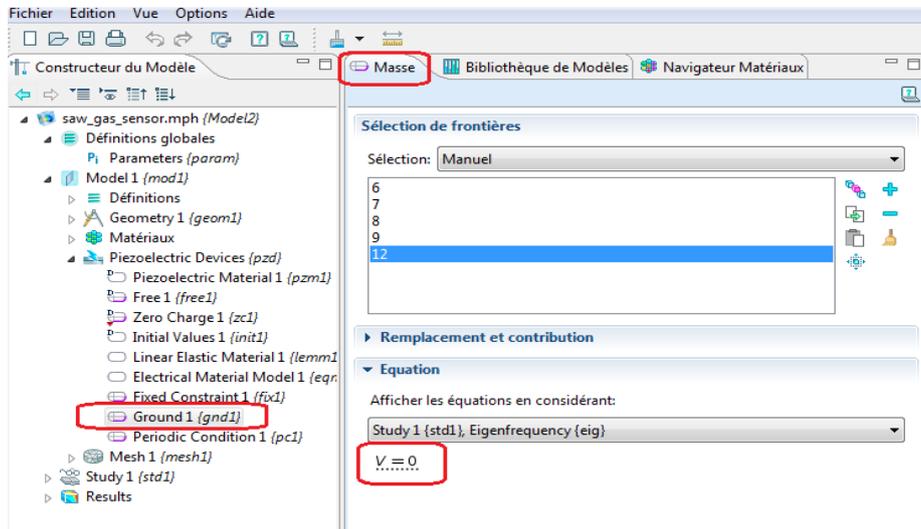


Fig. III.8. Mise à la masse de la structure

❖ *Conditions aux limites :*

Dans la rubrique «Devices Piézoélectrique», nous choisissons « périodique condition 1 » qui permet d'imposer les conditions de continuité sur les frontières sélectionnées (1, 3,16 et 17) Fig. III.9.

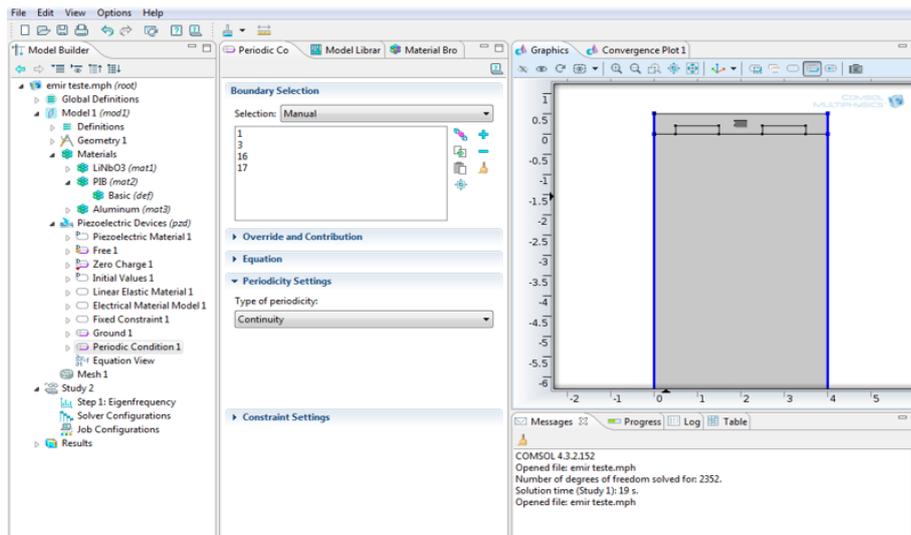


Fig. III.9. Conditions aux limites

III.2.7 Maillage

Le maillage est une étape importante dans la résolution des équations aux dérivées partielles (EDP). Il consiste à la discrétisation du problème, par la méthode des éléments finis. La figure III.10 représente la structure maillée.

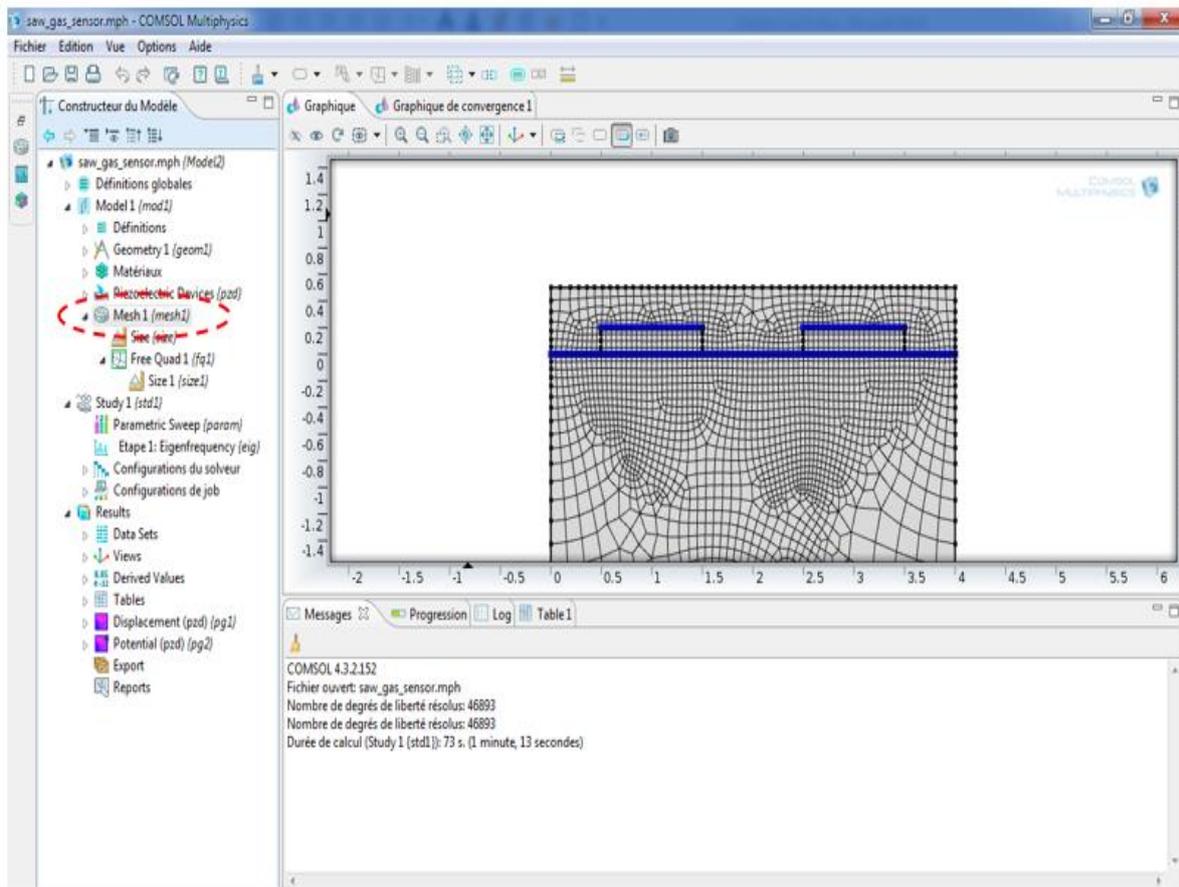


Fig. III.10. Maillage de la structure

III.2.8 Résolution du problème

À partir de la rubrique «Résoudre» nous procédons à la résolution du problème, la figure III.11 représente, le résultat de cette simulation. Cet affichage constitue la dernière étape de notre simulation qui est ou l'affichage des résultats de la simulation (Post-traitement)

Le résultat de cette simulation, est représenté par la courbe de variation de la déformation en fonction de la fréquence de résonance (838.70 MHz), dans le cas du substrat LiNbO_3 YZ. Cette figure, montre que cette déformation est localisée superficielle et elle est dû essentiellement à l'absorption des molécules de gaz, au niveau de la couche sensible (PIB).

Afin de validé notre modèle, nous procédons à la comparaison de notre résultat à celui établi dans la littérature figure (III.12) [40]. Cette comparaison montre bien que les résultats sont similaires, ce qui permet la validation de notre modèle.

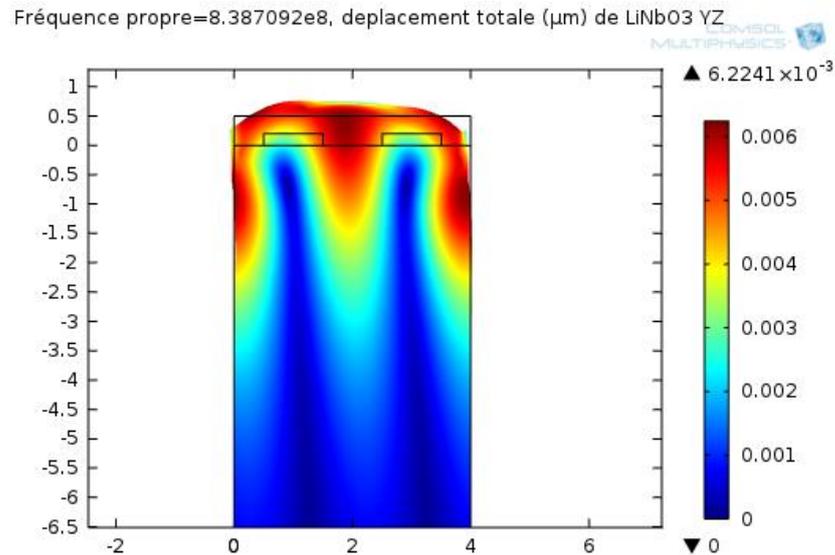


Fig. III.11. Variation de la déformation en fonction de fréquence de résonance (838.70 MHz).

- substrat LiNbO₃ YZ-

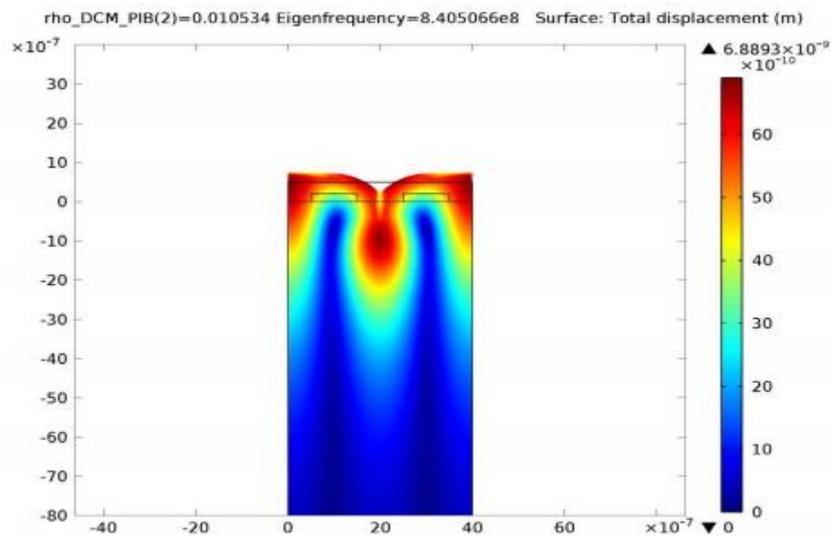


Fig. III.12. Variation de la déformation en fonction de fréquence de résonance (840.50 MHz).

- substrat LiNbO₃ YZ- [40]

III.3 RESULTATS ET DISCUSSIONS

Afin de déterminer l'influence du nature substrat sur la réponse des capteurs, nous allons simuler notre modèle pour différents types de substrat : tels que (LiNbO_3 128° YX, LiNbO_3 YZ, LiTaO_3 36° YX, quartz ST). Les variations du déplacement total et du potentiel électrique en fonction de la fréquence constituent les résultats de nous simulation que l'en représente sur les figures suivent :

➤ *Substrat de LiTaO_3 36 YX :*

✚ *Déplacement total*

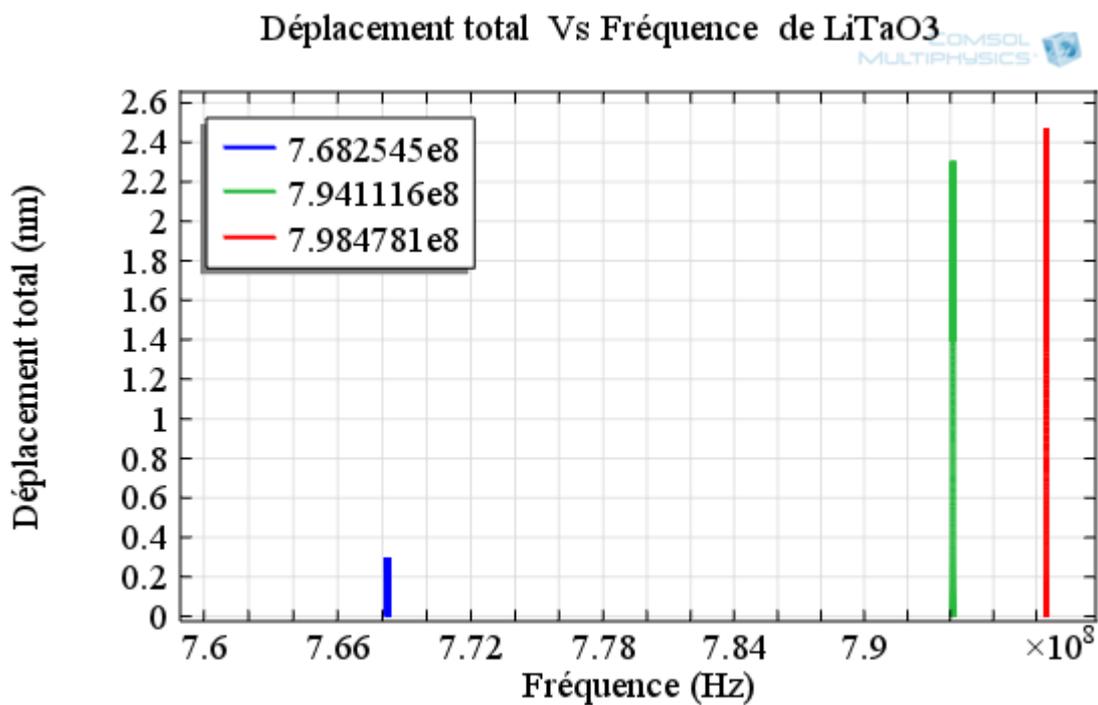


Fig. III.13.a. *Variation de déplacement total en fonction de la fréquence*

- LiTaO_3 36 YX-

✚ Potentiel électrique

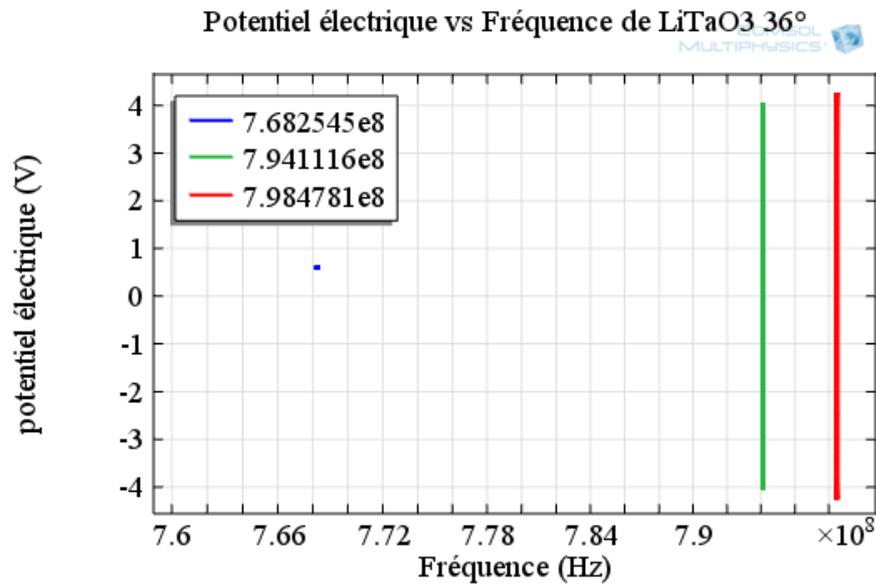


Fig. III.13.b. Variation du Potentiel électrique en fonction de la fréquence

- LiTaO₃ 36 YX-

➤ Substrat de LiNbO₃ 128° YX :

✚ Déplacement total

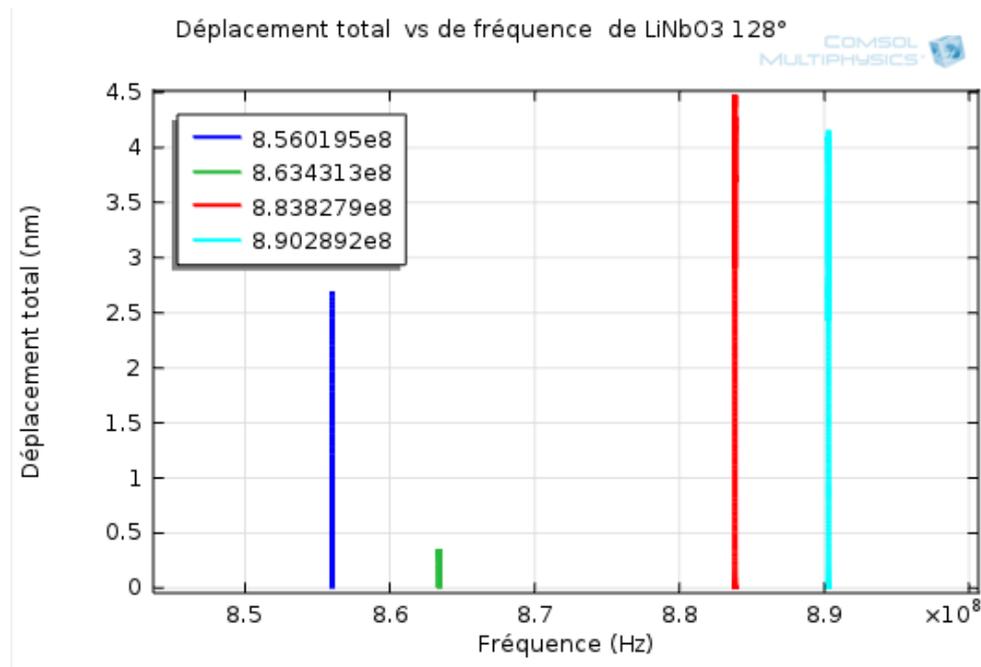


Fig. III.14.a. Variation de déplacement total en fonction de la fréquence

- LiNbO₃ 128° YX-

✚ Potentiel électrique

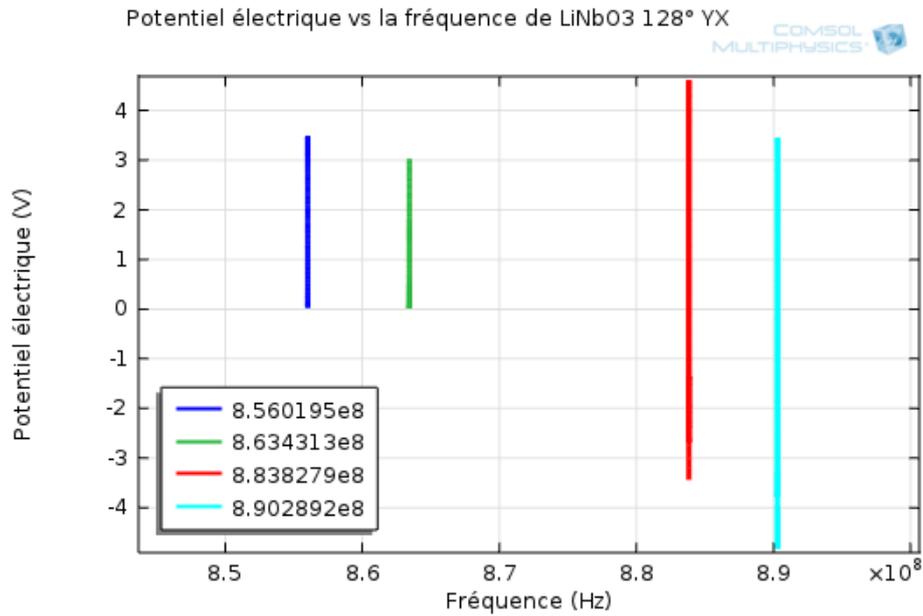


Fig. III.14.b. Variation du potentiel électrique en fonction de la fréquence.

- LiNbO₃ 128° YX-

➤ **Substrat de quartz ST:**

✚ Déplacement total

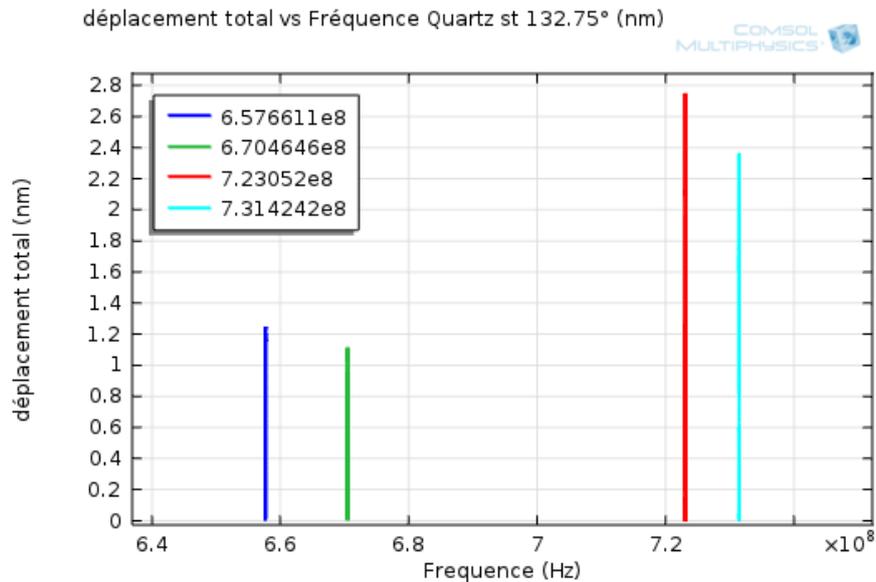


Fig. III.15.a. Variation du déplacement total en fonction de la fréquence.

- Quartz ST-

Potentiel électrique

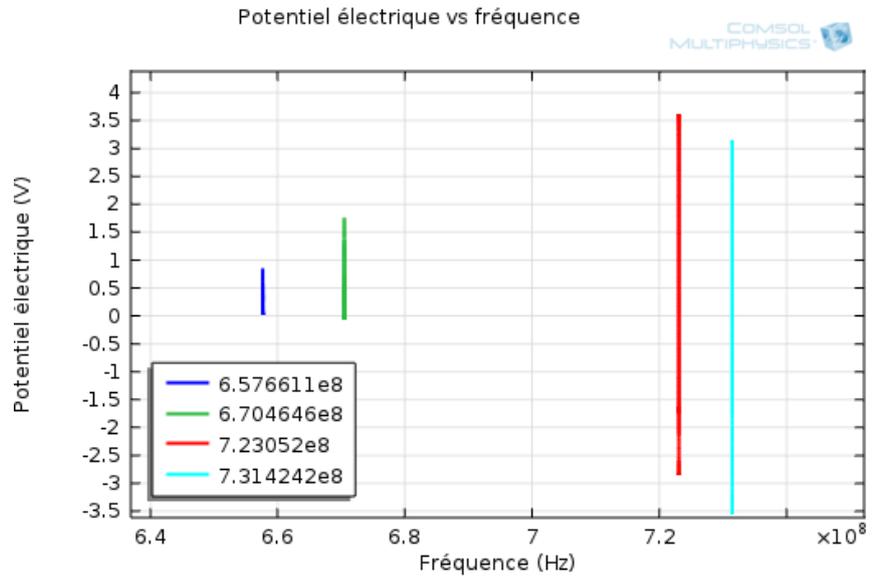


Fig. III.15.b. Variation du Potentiel électrique en fonction de la fréquence.

- Quartz ST-

➤ **Substrat de LiNbO₃ YZ 5° :**

Déplacement total

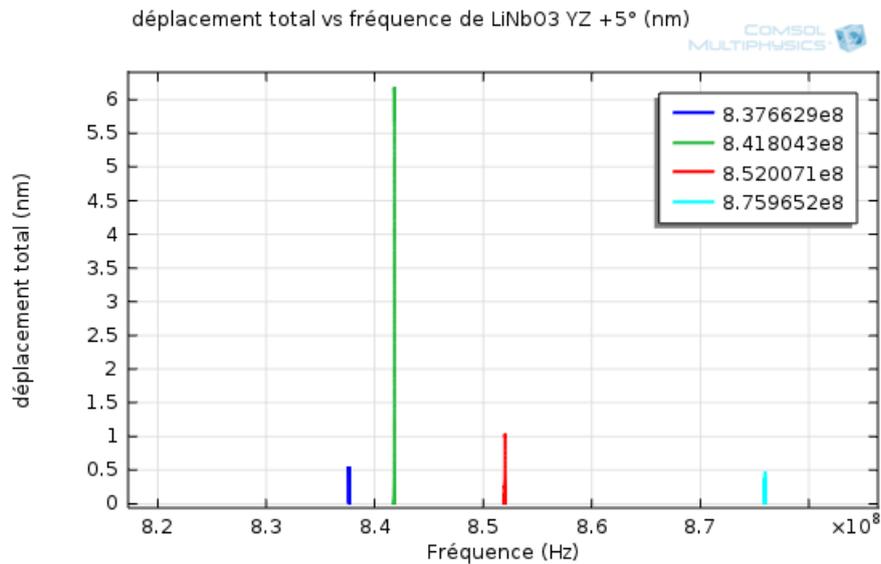


Fig. III.16.a. Variation de déplacement total en fonction de la fréquence

- LiNbO₃ YZ 5°-

⚡ Potentiel électrique

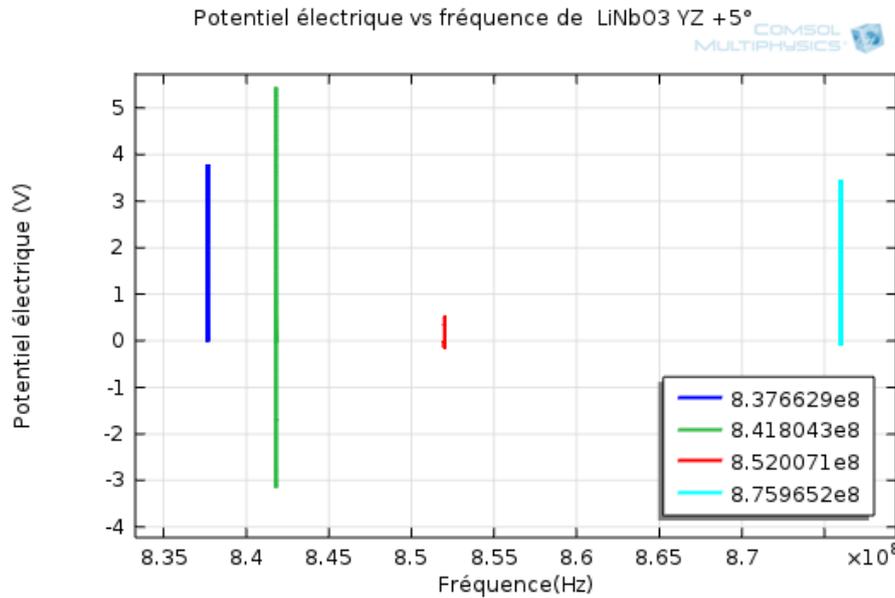


Fig. III.16.b. Variation du Potentiel électrique en fonction de la fréquence

- LiNbO₃ YZ 5° -

Les figures (III.13.a jusqu'à III.16.a), représentent les variations du déplacement total des substrats (LiTaO₃ 36 YX, LiNbO₃ 128° YX, Quart ST, LiNbO₃ YZ 5°) en fonction de la fréquence. À partir de ces figures on relève les valeurs maximales de déplacement total pour obtenir la fréquence de résonance qui sont regroupées dans le tableau III.6

Les figures (III.13.b jusqu'à III.16.b), représentent les variations du potentiel électrique des substrats (LiTaO₃ 36 YX, LiNbO₃ 128° YX, Quart ST, LiNbO₃ 5°YZ), en fonction de la fréquence. À partir de ces figures, on relève des valeurs maximales du potentiel électrique correspondent les valeurs de fréquence de résonance.

L'absorption du gaz DCM par la couche sensible engendre une légère augmentation de sa masse volumique. Cette augmentation entraîne, à son tour, un changement des fréquences. Afin de déterminer ces valeurs des fréquences, nous effectuons une analyse spectrale du déplacement et de la distribution du potentiel électrique de notre dispositif. Aux valeurs optimales de ces deux grandeurs correspond la valeur de la fréquence de résonance du capteur.

Tous les résultats de notre simulation sont regroupés dans le Tableau III.5, où on représente la fréquence de résonance, le déplacement total avant et après l'absorption de gaz DCM et le décalage de fréquence de résonance Δf .

Tableau III .5 . Le décalage de fréquence par rapport à chargement de masse pour différent substrat

substrat	Masse volumique $\rho_{(DCM,PIB)}$	Fréquence de résonance f (MHz)	Déplacement D (nm)	$ \Delta f = f - f_0$ (Hz)
LiNbO ₃ YZ	Avec la masse	838,70919372	6,224082	220,64
	Sans la masse	838,70941437	6,224058	
LiNbO ₃ 128° YX	Avec la masse	883,82793180	4,91712	296,97
	Sans la masse	883,82822878	4,91709	
Quartz ST	Avec la masse	731,42416132	2,361788	156,01
	Sans la masse	731,42431733	2,361783	
LiTaO ₃ 36° YX	Avec la masse	792,61967135	2,837159	148,46
	Sans la masse	792,61981982	2,837150	
LiNbO ₃ 5° YZ	Avec la masse	841,80434045	6,347150	223,17
	Sans la masse	841,80456362	6,347126	

f_0, f sont respectivement, les fréquences de résonance avant et après la modification de la masse volumique.

A partir de l'expression de la sensibilité (éq. II.3) nous déterminons les valeurs de la sensibilité des capteurs pour les différents matériaux étudiés, les résultats sont regroupés dans le tableau III.6.

Tableau III .6. Valeurs de la sensibilité à l'effet de masse pour divers substrats.

Substrat	Valeur de sensibilité S (m^2/kg)
LiNbO ₃ YZ	34.29
LiNbO ₃ 128° YX	43.81
Quartz ST	27.84
LiTaO ₃ 36°YX	24.42
LiNbO ₃ 5° YZ	34.56

Ces résultats de tableau III.5 et tableau III.6, montrent que la fréquence de résonance est inversement proportionnelle à la masse volumique de la couche sensible (PIB). D'autre part, le décalage de fréquence de résonance et la sensibilité à l'effet de masse est optimale pour l'orientation 128° YX de Niobate de Lithium par apport de différentes coupes cristallographie de LiNbO₃ et on observe que le matériau de Niobate de lithium est de maximal décalage de fréquence de résonance et meilleure sensibilité à l'effet de masse par rapport à l'autre substrat (Quartz et LiTaO₃).

En fin, le décalage de fréquence de résonance $\Delta f=296.97\text{Hz}$ du substrat de LiNbO₃, d'orientation 128 °dans le plan YX est de valeur optimale et sa sensibilité à l'effet de masse atteint une valeur maximale de 43,81 m^2/Kg .

Nous avons enregistré une augmentation de 26% de la valeur de la sensibilité à l'effet de masse par rapport au modèle établi dans la littérature [40].

III.4 CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons rappelé la procédure de simulation sous environnement COMSOL multi physiques. Et nous avons réalisé la simulation 2D d'un capteur SAW. Qui constitue une bonne approximation de la résolution du problème. Les résultats obtenus sont similaires à ceux établis dans la littérature, ce qui a permis la validation de notre modèle. Afin d'optimiser les performances de notre dispositif, nous avons effectué une étude paramétrique en fonction des différentes coupes cristallographie des matériaux. Cette dernière montre que le capteur SAW doté

d'un substrat de LiNbO_3 d'orientation 128° et de coupe YX présente une sensibilité optimale de $43.81 \text{ m}^2/\text{Kg}$, qui constitue une augmentation de 26 % par rapport au modèle établi dans la littérature.



*Conclusion
générale*

CONCLUSION GÉNÉRALE

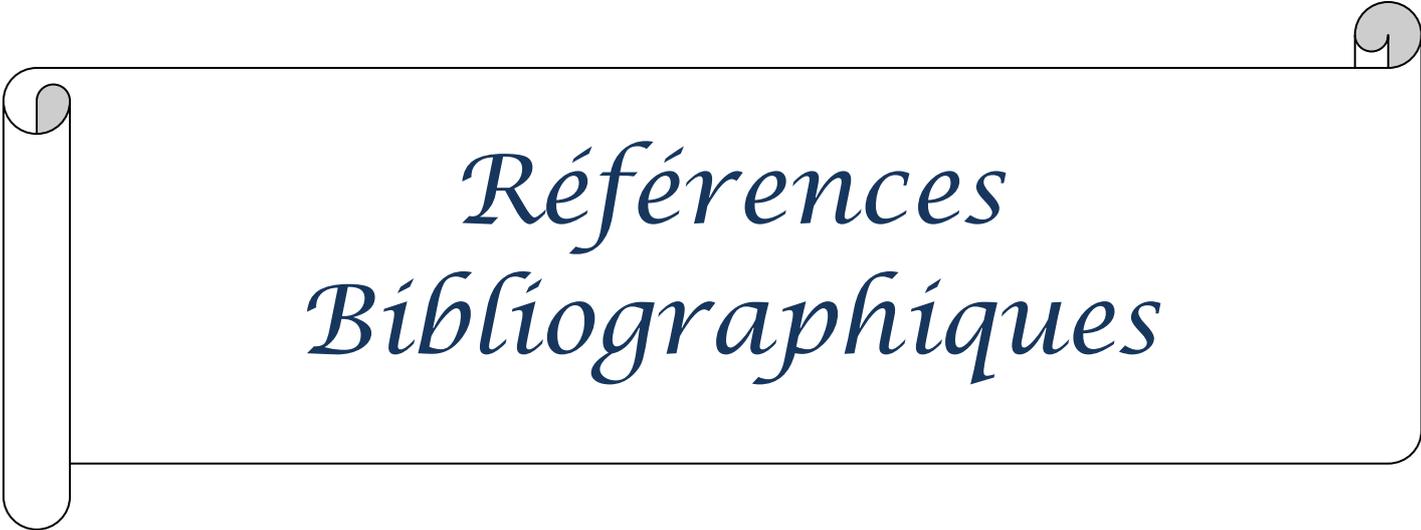
Dans ce manuscrit, nous avons réalisé la simulation du comportement électromécanique des capteurs chimiques en milieu gazeux, sous environnement COMSOL multi physiques. Nous avons entamé ce travail par un résumé succinct sur les capteurs de gaz à ondes acoustiques, notamment la sorption de molécule de gaz par une surface solide. Nous avons aussi donné les principaux fondements théoriques nécessaires à la compréhension de leur principe de fonctionnement ainsi que leurs principales caractéristiques. Notre contribution, s'est focalisée sur la détermination des effets des paramètres d'influence sur la réponse d'un capteur SAW et de sa sensibilité à l'effet de masse.

De manière à bien comprendre les capteurs chimiques de gaz, nous avons cité les notions principales qui utilisent dans les capteurs chimiques. Ce qui nous a permis de bien cerner les mécanismes de diffusion d'un gaz dans un solide tel que : adsorption, absorption et la désorption. Nous avons développé des généralités sur le phénomène de piézoélectricité, sa mise en équation, les principaux matériaux piézoélectriques et la propagation des ondes acoustiques de surface dans les matériaux piézo-électriques. Nous avons aussi présenté la description des dispositifs à ondes acoustiques de surface SAW. Puis nous avons développé le principe de fonctionnement des transducteurs interdigités IDT et le principe de détection à l'effet de masse. Nous avons ainsi établi le modèle de la sensibilité à l'effet de masse qui nous permettra de déterminer l'effet des différents paramètres d'influence sur cette dernière.

Après avoir rappelé la procédure de simulation sous environnement COMSOL multi physiques, nous avons réalisé la simulation 2D d'un capteur SAW. Qui constitue une bonne approximation de la résolution du problème. Les résultats obtenus sont similaires à ceux établis dans la littérature, ce qui a permis la validation de notre modèle. Puis nous avons effectué une étude comparative de la réponse du capteur SAW (Δf) des différents substrats (128° YX LiNbO₃, 36° YX LiTaO₃, quartz ST). Cette dernière montre que le capteur SAW doté d'un substrat de LiNbO₃ d'orientation 128° et de coupe YX présente une sensibilité optimale de 43.81 m²/Kg, qui constitue une augmentation de 26 % par rapport au modèle établi dans la littérature.

Conclusion générale

Les perspectives, qui peuvent compléter ce travail, c'est de s'intéresser au paramétrage des électrodes (IDT), des polymères constituant la couche sensible et la nature de gaz absorbé dans le but d'optimiser les performances du capteur SAW.

A decorative border resembling a scroll, with rounded corners and a slight shadow effect, framing the central text.

*Références
Bibliographiques*

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1]. **F. Ménil**, « Livre micro capteurs de gaz », Lavoisier, 2008.
- [2]. **N. GUERMAT**, « Elaboration des couches minces sensibles à la présence de vapeur d'eau par polymérisation plasma » Thèse doctorat de l'université Mentouri Constantine 2011.
- [3]. **N. YOBOUE, Pamela Marie Josèphe**, Thèse doctorat de l'université de Toulouse « Etude technologique pour l'amélioration des performances d'un capteur de gaz à oxyde métallique », 2010.
- [4]. **J. Philippe, Charles Kirsch**, « Etude et réalisation par lithographie électronique de dispositifs à ondes acoustiques de surface à structure multicouche : Des filtres pour la bande X aux capteurs de liquide », Docteur de l'Université Henri Poincaré, Nancy I 2007.
- [5]. **K. Han**, « Mass sensitivity evaluation and device design of a LOVE wave device for bond rupture biosensors using the Finite Element Method », IEEE Sensors Journal, 2014.
- [6]. **R. SALUT**, Thèse doctorat de l'université de Franche-Comté « étude des moyens de lithographie haute résolution pour la fabrication de résonateurs a ondes élastiques de surface : application aux sources embarquées », 2011.
- [7]. **P. MENINI**, « Du Capteur de Gaz à Oxydes Métalliques vers les Nez Electroniques sans Fil » Habilitation à diriger des recherches de l'Université Paul Sabatier de Toulouse, 2011.
- [8]. **L. FADEL**, Thèse doctorat de l'université de bordeaux i « contribution à l'utilisation de microcapteurs chimiques à base de micropoutres résonantes pour la détection d'espèces chimiques en milieu gazeux », 2004.
- [9]. **S. LE DREN**, Thèse doctorat de l'université de l'institut national des sciences appliquées de Lyon, « Elaboration de couches épaisses piézoélectriques déposées sur substrats pour des applications microtechniques », 2000.
- [10]. **R. M. White et F. W. Voltmer**, « Direct Piezoelectric Coupling to Surface Elastic Waves », Applied Physics Letters, vol. 7, no. 12, p. 314, 1965.

- [11]. **A. Kateb** Thèse magister d'Université de Batna Faculté de Technologie Département d'Electronique, « Analyse du signal micro-onde Acoustique Via la transformée en ondelettes », 2013.
- [12]. **D. Royer et E. Dieulesaint** : « Ondes élastiques dans les solides, Propagation libre et guidées » Tome 1, Masson, 1996.
- [13]. **O. Mareschal**, Thèse doctorat de Université Paris-Est Ecole Doctorale Mstic, « Étude d'un résonateur piézoélectrique à ondes acoustiques de volume en technologie film mince », 2011.
- [14]. **D.S. Ballantine, R.M. White, S.J. Martin et al.**, "Acoustic wave sensors – Theory, design and physico-chemical applications", Academic Press, 1997.
- [15]. **C. ZIMMERMANN**, Thèse doctorat de l'université de BORDEAUX I, « conception réalisation et études de microcapteurs a ondes de love pour applications en milieu gazeux cas de la détection de composes organophosphorés», 2002.
- [16]. **I. A. Victorov**. « Rayleigh and Lamb Wave », plenum Press, New York, 1967.
- [17]. **L. BLEUSTEIN**, « A new Wave in piézoélectrique mat »rials, Applied Physics Letters, vol.13, p.412-413, 1968.
- [18]. **C. Zimmermann**, D. Rebière, C. Déjous, J. Pistré and R. Planade, «Love-Waves to Improve Chemical Sensors Sensitivity: Theoretical and Experimental Comparison of Acoustic Modes», 2002 IEEE Intl. Freq. Cont. Symp. Proceedings, p. 281+286, 2002.
- [19]. **Y.V. GULYAEV** « Electroacoustic surface waves in solids », JEPT Letters, vol. 9, P 37-38, 1969.
- [20]. **C. DEJOUS**, « Capteurs acoustiques à modes de plaque transverses horizontaux. Application à la détection en milieux liquides et gazeux », thèse doctorat, université bordeaux 1, 1994.
- [21]. **P. MAZEIN**, Thèse doctorat de l'université de BORDEAUX I, « Étude de dispositifs à ondes de Love par modélisation numérique de la propagation d'ondes acoustiques. Application à l'optimisation de structures et à la caractérisation de matériaux en vue de la réalisation de capteurs chimiques», 2005.
- [22]. **B.A. Auld**, "Acoustic fields and waves in solids", 2 volumes, Krieger, 1990.
- [23]. **L. Rayleigh**: « On waves propagated along the plane surface of elastic solid », Proc. Lond. Math. Soc., 17, 1885).
- [24]. **M. Mohamed, El Gowini and Walied A. Moussa**, « A Reduced Three Dimensional Model for SAW Sensors Using Finite Element Analysis », Sensors, 9, 9945-9964, 2009.

- [25]. **C. DEJOURS**, « Contribution à l'Etude de Microcapteurs à Ondes acoustiques visant la Biodétection Rapide sur Site », Diplôme d'Habilitation à Diriger des Recherches de l'Université Bordeaux 1, 2005.
- [26]. **D. REBIÈRE**, Thèse de doctorat Université Bordeaux 1, « Capteurs à ondes acoustiques de surface. Application à la détection des gaz », 1992.
- [27]. **F. Anne AZAN**, Thèse doctorat de l'université de BORDEAUX I, « Etude de micro capteurs à ondes acoustiques dédiés à la détection fine de produits chimiques à l'échelle laboratoire et industrielle. Application à la détection de monomères résiduels et à la mesure de cinétique en réacteurs. », 2005.
- [28]. **H. WOHLTJEN**, « mechanism of operation and design considerations for surface acoustic wave device vapour sensors », *Sensors and Actuators*, 5, 307- 325, 1984.
- [29]. **T. Cyril**, « Analyse et Optimisation des performances d'un capteur de gaz à base de SnO₂ nano particulaire : Application à la détection de CO et CO₂ » Thèse doctorat de l'université de Toulouse, 2009.
- [30]. **T. Edward Zellels**, Stuart A. Batterman, Mingwei Han, and Samuel J. Patrash, « Optimal Coating Selection for the Analysis of Organic Vapor Mixtures with Polymer-Coated Surface Acoustic Wave Sensor Arrays», *Analytical Chemistry*, 67, 6, 1092-1106, 1995.
- [31]. **K. Ho. Clifford**, « Development of a Surface Acoustic Wave Sensor for In-Situ Monitoring of Volatile Organic Compounds », *Sensors*. 3, 236–247, 2003.
- [32]. **H. M Abraham** « Method for Estimating Polymer-Coated Acoustic Wave Vapor Sensor Responses », *Analytical Chemistry*, Vol. 67, No. 13, July 1, 1995 .
- [33]. **D. Royer et E. Dieulesaint** : « Ondes élastiques dans les solides, Propagation libre et guidées » Tome 1, Masson, 1973.
- [34]. **S. Ahmadi. F. Hassani, C. Korman, M. Rahaman and M. Zaghoul** « Characterization of Multi- and Single-layer Structure SAW Sensor », *Sensors, Proceedings of IEEE*, vol. 3, pp. 1129–1132, 2004.
- [35]. **B. A. Auld** « Acoustic fields and waves in solids », vol. 1, USA: John Wiley & Sons, pp. 191-265, 1973.
- [36]. **L. Walter Bond**. « The mathematics of the physical properties of crystals », the bell System Technical Journal, vol XXII, 1943.
- [37]. **A .H. Fahmy**, E.L. Adler, « Transformation of tensor constants of anisotropic materials due to rotations of the co-ordinate axes », *ROC. IEE*, Vol. 122, No. 5, 1975.

- [38]. **B. JERRY. MARION.** « Classical Dynamics of Particles and Systems », Academic Press, NEW YORK AND LONDON, 1965.
- [39]. **P. Cao, Jialin Zhu,** « A Finite Element Simulation of the Propagation Properties Shear Surface Acoustic Wave Devices», IEEE computer society, DOI 10.1109/ISCID.2012.182, 2012.
- [40]. **K. Srinivasa Rao,** « Design and analysis of saw gas sensor », Scholars Research Library European Journal of Applied Engineering and Scientific Research, 2012.

RÉSUMÉ

Dans ce travail, nous avons réalisé la simulation 2D d'un micro-capteur à ondes acoustique de surface SAW sous environnement COMSOL multi- physiqueTM. Un capteur SAW est constitué d'un transducteur interdigité (IDT) gravé sur un matériau piézoélectrique et recouvert par une couche sensible polyisobutylène (PIB). Cette couche sensible est choisie pour ses affinités particulières avec les espèces à détecter CH₂Cl₂ dichlorométhane (DCM). Notre contribution, s'est focalisée sur la détermination des effets des paramètres d'influence sur la réponse d'un capteur SAW et de sa sensibilité à l'effet de masse. Une étude comparative de la réponse du capteur SAW (Δf) pour différents substrats (128° YX LiNbO₃, 36° YX LiTaO₃, quartz ST) a été effectuée. Cette dernière montre que le capteur SAW doté d'un substrat de LiNbO₃ d'orientation 128° et de coupe YX présente une sensibilité optimale de 43.81 m²/Kg, qui constitue une augmentation de 26 % par rapport au modèle établi dans la littérature.

Mots clés : sensibilité à l'effet de masse, fréquence propre, SAW, COMSOL Multi physique,

ABSTRACT

In this work, we concerned a study and simulation of micro-sensor surface acoustic wave SAW using the Comsol multi- physique. A sensor SAW constructed of an interdigité transducer (IDT) engraved on a piezoelectric material and covered by a layer sensitive Polyisobutyléne (PIB). Our contribution has focused on determining the effects of influence parameters on the response of a SAW sensor and its sensitivity to mass effect. A comparative study of the response of the SAW sensor (Δf) for different substrates (128° YX LiNbO₃, 36° YX LiTaO₃, quartz ST) was performed. The latter shows that the SAW sensor with a LiNbO₃ substrate orientation and 128° YX cut has optimum sensitivity of $43.81 \text{ m}^2 / \text{kg}$, which is an increase of 26% compared to the model established in the literature.

Keywords: sensitivity, natural frequency, acoustic waves, COMSOL Multi physics, Mass Effect

ملخص

في هذا العمل، قمنا بدراسة ومحاكاة جهاز الاستشعار ذو موجة صوتية سطحية SAW باستخدام برنامج COMSOL. جهاز استشعار (SAW) شيدت من محول بين الأصابع (IDT) محفورة على مادة كهروضغطية ومغطى بطبقة حساسة وقد ركزت مساهمتنا على تحديد آثار المعلمات تأثير على استجابة جهاز استشعار SAW وحساسيتها للتأثير الشامل. تم إجراء دراسة مقارنة لاستجابة جهاز استشعار (Δf) SAW للركائز مختلفة $(128^\circ \text{ YX LiNbO}_3)$ ، $(36^\circ \text{ YX LiTaO}_3)$ ، الكوارتز ST. يظهر الأخيرة أن أجهزة الاستشعار SAW مع التوجه LiNbO_3 الركيزة و 128° YX قطع فيه حساسية المثلثي من : $43.81 \text{ م}^2/\text{كغ}$ وهو ما يمثل زيادة بنسبة 26٪ بالمقارنة مع النموذج الذي أنشئ في البحث.

الكلمات الرئيسية: الحساسية، والتردد الطبيعي، الموجات الصوتية، COMSOL، تأثير الكتلة